Modelagem e controle para preservar a eficiência dos herbicidas considerando a evolução da resistência em populações de plantas daninhas

Luiz Henrique Barchi Bertolucci

SERVIÇO DE PÓS-GRADUAÇÃO DO ICMC-USP

Data de Depósito:

Assinatura: ____

Luiz Henrique Barchi Bertolucci

Modelagem e controle para preservar a eficiência dos herbicidas considerando a evolução da resistência em populações de plantas daninhas

> Tese apresentada ao Instituto de Ciências Matemáticas e de Computação – ICMC-USP, como parte dos requisitos para obtenção do título de Doutor em Ciências – Ciências de Computação e Matemática Computacional. *VERSÃO REVISADA*

> Área de Concentração: Ciências de Computação e Matemática Computacional

Orientador: Prof. Dr. Eduardo Fontoura Costa

USP – São Carlos Setembro de 2016

Ficha catalográfica elaborada pela Biblioteca Prof. Achille Bassi e Seção Técnica de Informática, ICMC/USP, com os dados fornecidos pelo(a) autor(a)

 Bertolucci, Luiz Henrique Barchi
 B482m
 Bertolucci, Luiz Henrique Barchi
 Modelagem e controle para preservar a eficiência dos herbicidas considerando a evolução da resistência em populações de plantas daninhas / Luiz Henrique Barchi Bertolucci; orientador Eduardo Fontoura Costa. -- São Carlos, 2016. 110 p.
 Tese (Doutorado - Programa de Pós-Graduação em Ciências de Computação e Matemática Computacional) --Instituto de Ciências Matemáticas e de Computação, Universidade de São Paulo, 2016.
 1. plantas daninhas. 2. modelagem. 3. controle.
 4. filtro de Kalman estendido. I. Costa, Eduardo Fontoura, orient. II. Título. Luiz Henrique Barchi Bertolucci

Modeling and control for preserving herbicide efficiency considering the resistance evolution in weed populations

Doctoral dissertation submitted to the Instituto de Ciências Matemáticas e de Computação – ICMC-USP, in partial fulfillment of the requirements for the degree of the Doctorate Program in Computer Science and Computational Mathematics. *FINAL VERSION*

Concentration Area: Computer Science and Computational Mathematics

Advisor: Prof. Dr. Eduardo Fontoura Costa

USP – São Carlos September 2016

Aos meus pais

Agradeço muito a todas as pessoas e entidades que contribuíram de forma direta ou indireta para a realização deste trabalho. Primeiro, agradeço aos meus pais, irmãs e todos os familiares e amigos que me inspiraram e me ensinaram ao longo destes meus anos de vida. Agradeço ao meu orientador, Eduardo Fontoura Costa, parceiro na pesquisa por mais de 7 anos, que muito me ensinou nestes anos e me fez acreditar nesta tese mesmo enquanto os resultados eram pouco animadores. Agradeço também à professora e pesquisadora Vilma Alves de Oliveira (EESC/USP), e aos pesquisadores Décio Karam (EMBRAPA) e Fernando Lobo Pereira (FEUP), que participaram e colaboraram para a iniciação dos meus estudos em modelagem de plantas daninhas. Sou grato também aos professores e pesquisadores Patrícia Andrea Monquero (CCA/UFSCAR) e Pedro Christoffoleti (ESALQ/USP), que me receberam para conversas sobre o tema em momentos bastante significativos deste doutorado. Também agradeço muito aos membros da banca, Marina Andretta (ICMC/USP), Geraldo Nunes Silva (IBILCE/UNESP), Alim Pedro de Castro Gonçalves (FEEC/UNICAMP) e Pedro Christoffoleti, que muito colaboraram para a versão final desta tese e para a elaboração de novas ideias sobre o tema. Agradeço também aos amigos do LOt, e aos professores, colegas, técnicos e servidores do ICMC, que foram simplesmente essenciais para o meu desenvolvimento profissional durante a pós-graduação. Aproveito este espaço para agradecer aos amigos e amigas de todas as repúblicas em que morei ao longo de minha trajetória na universidade e aos novos amigos da CSA São Carlos. Todos vocês foram fundamentais para guiar as minhas escolhas até aqui. Por fim, agradeço muitíssimo à CAPES e à sociedade brasileira pelo investimento neste trabalho, concedido em forma de bolsa de estudos por quase 4 anos.

"Evoluir é mutar e resistir..."

RESUMO

BERTOLUCCI, L. H. B.. Modelagem e controle para preservar a eficiência dos herbicidas considerando a evolução da resistência em populações de plantas daninhas. 2016. 110 f. Tese (Doutorado em Ciências – Ciências de Computação e Matemática Computacional) – Instituto de Ciências Matemáticas e de Computação (ICMC/USP), São Carlos – SP.

O controle de plantas daninhas é uma importante preocupação para a agricultura tendo em vista as perdas de produtividade que estas causam ao competir com a cultura por água, luz e nutrientes. O uso de herbicida é a forma de manejo mais empregada em todo o mundo para o controle destas plantas. Entretanto, o uso frequente de um dado herbicida, além de causar diversos impactos ambientais, pode levar à diminuição da eficiência do próprio herbicida ao promover a seleção de plantas que são resistentes a este herbicida. Com o crescente número de novos casos de biótipos resistentes aos herbicidas, conter a evolução da resistência tornou-se uma necessidade para a agricultura convencional. Assim, grande esforço tem sido despendido para compreender este fenômeno e tentar contornar este problema. Neste sentido, os modelos computacionais se apresentam como importantes ferramentas para investigar os efeitos dos diversos fatores, em particular das estratégias de aplicação dos herbicidas, que influenciam na dinâmica da evolução da resistência. Com esta motivação, este trabalho tem como objetivo propor e estudar algumas estratégias de aplicação de herbicidas, ou ditos simplesmente controladores, que sejam implementáveis e que diminuam os impactos ambientais considerando a evolução da resistência. Para isto, assumimos que existe um herbicida, denominado neste trabalho por herbicida recomendado, que é o preferível dentre os disponíveis por produzir uma boa relação entre os benefícios produtivos e os malefícios aos ecossistemas. Para projetar os controladores, assumimos que é possível obter informações sobre a identificação visual da resistência em campo, feitas por um agente quando o número de indivíduos resistentes ultrapassa um certo limiar, assim como informações sobre a quantidade de plantas daninhas na área, feita possivelmente empregando técnicas de sensoriamento remoto. Então, para definir os controladores, empregamos diretamente a identificação visual da resistência e estimativas para o banco de sementes e para a fração dos genótipos do banco, geradas por um filtro de Kalman a partir de informações sobre a quantidade de plantas na área. Os controladores foram avaliados em relação à preservação da eficiência do herbicida recomendado, produtividade, impacto ambiental e propagação da resistência. Concluímos destes estudos que o controlador sugerido pode apresentar melhores resultados que os obtidos por controladores ditos convencionais, que se baseiam apenas na informação de identificação da resistência em campo.

Palavras-chave: Plantas daninhas, Modelagem, Controle, Filtro de Kalman estendido.

ABSTRACT

BERTOLUCCI, L. H. B.. Modelagem e controle para preservar a eficiência dos herbicidas considerando a evolução da resistência em populações de plantas daninhas. 2016. 110 f. Tese (Doutorado em Ciências – Ciências de Computação e Matemática Computacional) – Instituto de Ciências Matemáticas e de Computação (ICMC/USP), São Carlos – SP.

Weed control is a major concern in agriculture as it causes significant loss of productivity by competition for water, sunlight and nutrients. The use of herbicides is the most common practice in the world to control them. However, the frequent use of a particular herbicide, besides causing many environmental impacts, may lead to loss of efficiency by promoting herbicide resistance via selection of resistant individuals. Considering the increasing number of herbicide resistant biotic, restraining resistance evolution is becoming a necessity for the conventional agriculture. This motivates a great deal of research effort to understand the involved phenomena and eventually to circumvent the problem. To this end, computational models are of great aid to understand the impact of many different aspects involved in this problem, in particular, to understand how different herbicide strategies usage lead to different resistance evolution dynamics. In this thesis we propose and study some strategies for herbicide application, which we refer to as controllers. We seek for controllers that can be implemented in real word crops growing, while decreasing environmental impacts and restrain resistance evolution. We assume that there exists one herbicide of choice for a given crop, meaning that it is preferred in terms of environmental impact and efficiency. To define the controllers, we assume that it is possible to obtain visual information on resistance, meaning that we observe when the proportion of resistant individuals is above a threshold. Also, we assume noisy observation of the number of adult weed individuals, possibly made by remote sensing. So, the controller directly employs the visual identification information and an estimate for the number of resistant seeds in the seed bank, generated by the Kalman filter using information on the number of adult weed. This strategy was evaluated in terms of herbicide efficiency preservation, crop production, environmental impact and resistance proliferation. We conclude that the proposed control strategies performed better than other strategies, called conventional strategies that are based only on the visual identification information.

Key-words: Weed, Modeling, Control, Extended Kalman filter.

Variáveis do modelo

Listas e índices

- G Lista com os possíveis genótipos das sementes e plantas.
- \mathscr{L} Lista dos índices de cada parcela da área produtiva.
- *i*, *j* Genótipo de uma semente ou planta; ou elementos de matrizes.
- ℓ, m, o, p Índice de uma parcela específica da área produtiva.
 - *t*,*k* Ordinalidade do ciclo de vida das plantas daninhas.
 - *t*₀ Instante adotado para o início da dinâmicado ciclo de vida das plantas daninhas.

Dinâmica

- $\begin{aligned} \mathbf{X}_{i,\ell}(t) & \text{Quantidade de sementes com genótipo } i, \\ & \text{presentes na parcela } \ell, \text{ no início do ciclo} \\ & t. \end{aligned}$
- $\check{\mathbf{X}}_{i,\ell}$ Condição inicial do banco de sementes, ou seja, $\mathbf{X}_{i,\ell}(t_o) = \check{\mathbf{X}}_{i,\ell}$.
- $\mathbf{X}_{i,\ell}^{\delta}(t)$ Quantidade de sementes que germinaram durante o ciclo *t*.
- $\mathbf{X}_{i,\ell}^{\psi}(t)$ Quantidade de sementes dormentes que morreram durante o ciclo *t*.
- $\mathbf{Y}_{i,\ell}^{a}(t)$ Quantidade de plantas adultas com genótipo *i* no final do ciclo *t*.
- $\mathbf{y}_{\ell}^{a}(t)$ Total de plantas no final do ciclo *t*.
- $\mathbf{x}_{\ell}^{r}(t)$ Total de sementes geradas por reprodução na parcela ℓ , durante o ciclo t.
- $\bar{\mathbf{x}}_{\ell}^{r}(t)$ Valor médio empregado para o sorteio de $\mathbf{x}_{\ell}^{r}(t)$.

- $\mathbf{x}_{\ell}^{\kappa}(t)$ Total de sementes viáveis geradas na parcela ℓ , durante o ciclo t.
- $\begin{aligned} \mathbf{X}^{g}_{i,\ell}(t) & \text{Quantidade de sementes viáveis, com ge-} \\ & \text{nótipo } i, \text{ geradas por reprodução na par-} \\ & \text{cela } \ell, \text{ durante o ciclo } t. \end{aligned}$
- $\mathbf{X}_{i,m,\ell}^d(t)$ Quantidade de sementes com genótipo *i*, produzidas na parcela *m* e dispersadas para a parcela ℓ , durante o ciclo *t*.
 - $u_{\ell}(t)$ Define o tipo do herbicida (recomendado ou alternativo) aplicado na parcela ℓ e ciclo *t*.

Saídas

- $Z_{\ell}(t) \qquad \text{Informação sobre a quantidade de plantas} \\ \text{adultas na parcela } \ell, \text{ no final do ciclo } t.$
- $Z_{\ell}^{I}(t)$ Informação sobre a identificação visual da resistência na parcela ℓ , durante o ciclo *t*.
- $g_{\ell}^{z}(t)$ Ruído gaussiano incidente em $Z_{\ell}(t)$.

Indicadores

- $E_{\ell}(t)$ Eficiência estimada do herbicida recomendado para aplicação na parcela ℓ e ciclo *t*.
- $L_{\ell}(t)$ Perda de produtividade da parcela ℓ devido à presença de plantas daninhas adultas no ciclo *t*.

 $H_{\ell}(t)$ Produtividade da parcela ℓ no ciclo t.

- I(t) Impacto ambiental incremental causado pelos herbicidas até o ciclo t.
- K(t) Potencial de propagação da resistência durante o ciclo t.

Parâmetros do modelo

- *N* Quantidade de parcelas da área de cultivo.
- F_{ℓ} Área da parcela ℓ em metros quadrados.
- δ Probabilidade de germinação de uma semente qualquer.
- ψ Probabilidade de morte de uma semente dormente qualquer.
- κ Probabilidade de uma semente gerada por reprodução ser uma semente viável.
- γ Probabilidade de sobrevivência das plantas considerando apenas os fatores naturais.
- ρ^{R} Probabilidade de morte de uma planta resistente devido à ação do herbicida recomendado.
- ρ^{S} Probabilidade de morte de uma planta susceptível devido à ação do herbicida recomendado.
- ρ Probabilidade de morte de uma planta daninha qualquer devido à ação do herbicida alternativo.
- *c* Custo adaptativo das plantas resistentes.
- g, G Limitantes para o cálculo de $\bar{\mathbf{x}}_{\ell}^{r}(t)$.
- $P(\mathscr{D}_{m,\ell})$ Probabilidade de uma dada semente produzida na parcela *m* se dispersar para a parcela ℓ .
- $P(\mathscr{F}_{af})$ Probabilidade de uma dada semente ter sido gerada por auto fecundação.
- $P(\mathscr{F}_{fc})$ Probabilidade de uma dada semente ter sido gerada por fecundação cruzada.
- $P(\mathscr{F}_{fa})$ Probabilidade de uma dada semente ter sido gerada por fecundação artificial.
- $P(\mathcal{M})$ Probabilidade de uma dado gameta ter sofrido mutação durante a gametogênese.

- $P(\mathscr{E})$ Probabilidade de uma semente produzida ser exportada para uma área de cultivo externa.
 - φ Empregado para definir a variância do sorteio de $\mathbf{x}_{\ell}^{r}(t)$.
 - ϕ_{ℓ} Empregado na definição de $Z_{\ell}(t)$.

Variáveis do filtro de Kalman

- $\overline{\mathbf{X}}(t)$ Vetor de estados do modelo aproximado para a dinâmica do ciclo de vida das plantas daninhas.
- $\overline{Z}(t)$ Vetor de saída do modelo do filtro.
- $\overline{\mathbf{V}}(t)$ Vetor de ruídos de estado do modelo aproximado.
- $\overline{\mathbf{W}}(t)$ Vetor de ruídos de saída do filtro.
- $\widehat{\mathbf{X}}(t)$ Estimativa do vetor de estados gerada pelo filtro.
- $\widehat{\mathbf{P}}(t)$ Estimativa para a covariância do erro de $\widehat{\mathbf{X}}(t)$.
- $\widehat{F}(t), \widehat{L}(t)$ Jacobianos da função de transição de estados.
- $\widehat{H}(t), \widehat{M}(t)$ Jacobianos da função de saída.

 $\widehat{Q}(t)$ Estimativa para a covariância do ruído de estado.

- $\widehat{\mathbf{R}}(t)$ Covariância do ruído de saída.
- $\widehat{\mathbf{K}}(t)$ Matriz de ganho do filtro de Kalman.
- $\widehat{\mathbf{S}}(t)$ Estimativa para a covariância do erro de saída.

Variáveis dos controladores

 $\widetilde{f}_{\ell}(t) \qquad \text{Estimativa gerada a partir da observa$ $ção de <math>\mathbf{X}_{i,\ell}(t)$ para a frequência do alelo *A* no conjunto de plantas adultas. $\widehat{f}_{\ell}(t) \qquad \text{Estimativa gerada a partir de } \widehat{\mathbf{X}}(t)$ para a frequência do alelo *A* no conjunto de plantas adultas.

_SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	19
2	MODELO PARA A DINÂMICA DO BANCO DE SEMENTES	27
2.1	Equações do modelo	28
2.2	Experimentos	33
2.3	Resultados e discussão	35
3	CONTROLE COM OBSERVAÇÃO DO BANCO DE SEMENTES .	41
3.1	Indicadores	43
3.2	Experimentos	46
3.3	Resultados e discussão	49
4	FILTRO DE KALMAN PARA O BANCO DE SEMENTES	61
4.1	Experimentos	66
4.2	Resultados e discussão	66
5	CONTROLE COM ESTIMATIVAS DO FILTRO DE KALMAN	71
5.1	Experimentos	72
5.2	Resultados e discussão	72
6	TRABALHOS FUTUROS	85
6.1	Identificação visual da resitência como informação para o filtro	85
6.2	Controle com fecundação artificial	88
7	CONSIDERAÇÕES FINAIS	93
8	APÊNDICE	97
8.1	Controladores com rotação de herbicida	97
8.2	Histogramas da frequência do alelo A	97
8.3	Cálculo dos parâmetros do filtro de Kalman	99
REFERÊI	NCIAS	107

CAPÍTULO

INTRODUÇÃO

O termo *planta daninha* refere-se às plantas cuja presença em um determinado local causa prejuízos às atividades humanas. Quando em áreas agrícolas, estas plantas provocam perdas de produtividade uma vez que competem com a cultura por água, luz e nutrientes. Além disto, causam ainda outros malefícios ao homem, tais como, diminuição da qualidade da produção e redução do acesso à terra e à água, produzindo prejuízos estimados em mais de \$40 bilhões anuais em todo o mundo (WSSA, a). Assim, o controle populacional das plantas daninhas é uma das preocupações centrais da agricultura, sendo o uso de herbicidas a forma de manejo mais empregada para esta finalidade em todo o mundo (JASIENIUK; BRULEBABEL; MORRISON, 1996).

Entretanto, o uso massivo de um dado herbicida, além de causar sérios impactos ambientais, veja por exemplo (RELYEA, 2005), pode também levar à diminuição da eficiência do próprio herbicida ao promover a proliferação de plantas resistentes a este herbicida. Nos últimos 40 anos, tem se registrado em média 12 novos casos por ano de biótipos resistentes a diferentes herbicidas (WEEDSCIENCE,), enquanto a taxa de descobrimento de novos herbicidas com diferentes modos de ação ou princípios ativos tem decrescido consideravelmente (RASMUSSEN; CHEMIN; HAASTRUP, 1999) *apud* (ROUX; REBOUD, 2007). Diante deste cenário a contenção da resistência se tornou uma preocupação importante dentro do modelo de agricultura convencional, de modo que grande esforço tem se despendido para compreender este fenômeno e tentar contornar este problema.

A resistência de uma planta ao um dado herbicida pode ser definida como a habilidade desta planta, transmissível hereditariamente, de sobreviver e se reproduzir após sua exposição a uma dose de herbicida que é normalmente letal a um indivíduo do tipo selvagem (WSSA, b). A proliferação da resistência é consequência natural do processo evolutivo. Indivíduos que possuem um determinado fenótipo que os favorecem frente aos demais, têm mais chances de se reproduzir e transmitir esta característica aos seus descendentes, aumentando assim a pro-

porção de indivíduos com este fenótipo dentro da população. Um exemplo clássico que ilustra este fenômeno é o caso das mariposas de Manchester, na Inglaterra. Durante a revolução industrial, as mariposas cinzas passaram a ser favorecidas em relação às mariposas brancas devido à morte dos líquens das árvores pelo efeito da poluição do ar. Este fato, tornou as mariposas cinzas menos visíveis e, consequentemente, menos predada por pássaros. Logo, com o passar do tempo, estas mariposas, que eram em menor número antes da revolução industrial, passaram a predominar dentre as mariposas da região. No caso das plantas daninhas, quando uma população de plantas que contém um ou mais indivíduos resistentes é exposta a um dado herbicida, é bem provável que ocorra a morte de mais indivíduos susceptíveis do que resistentes, de modo que um ou alguns dos indivíduos resistentes sobrevivam e se reproduzam. Logo, com a aplicação sucessiva deste herbicida, o fenótipo resistente que inicialmente era observado em poucas plantas é selecionado e pode se proliferar rapidamente (WSSA, c).

A evolução da resistência em uma população de plantas daninhas depende basicamente de quatro grupos de fatores: da estratégia de aplicação dos herbicidas, ou seja, da quantidade de vezes e dos instantes em que os herbicidas são aplicados; da ecologia da planta e sua história evolutiva; de fatores genéticos tais como mutação e herança genética (ROUX; REBOUD, 2007); e dos mecanismos de dispersão das sementes. Diante da complexidade deste fenômeno, simulações de modelos computacionais tem sido empregadas com sucesso para compreender como a interação dos diferentes fatores influenciam na evolução da resistência (RENTON *et al.*, 2014). Em particular, estas técnicas permitem estudar como a estratégia de aplicação dos herbicidas pode favorecer ou inibir a proliferação de plantas resistentes, de modo que nas últimas décadas, diversos modelos têm sidos propostos para este fim (HOLST; RASMUSSEN; BASTIAANS, 2007; RENTON *et al.*, 2014).

Diante desse contexto, neste trabalho propomos um modelo matemático para a dinâmica populacional das plantas daninhas que considera a evolução da resistência. Além disto, propomos e avaliamos algumas estratégias de aplicação de herbicidas em relação aos seus benefícios produtivos mas também aos malefícios causados ao meio ambiente. Mais especificamente, o que se pretende é sugerir estratégias de aplicação de herbicida que priorizem os herbicidas que causam menos impactos ambientais. Sabemos que herbicidas com diferentes composições causam diferenciados impactos aos ecossistemas. No Brasil, cabe ao Ministério do Meio Ambiente em parceria com o IBAMA (Instituto Brasileiro do Meio Ambiente e dos Recursos Naturais Renováveis), realizar a avaliação ambiental dos herbicidas estabelecendo suas classificações quanto ao potencial de periculosidade ambiental (PPA). Esta classificação é definida por uma escala que varia de I a IV, sendo que herbicidas com PPA Classe I são considerados produtos ALTAMENTE PERIGOSOS ao meio ambiente; Classe II, MUITO PERIGOSOS; Classe III, PERIGOSOS; e Classe IV, POUCO PERIGOSOS. Para ilustrar, considere os seguintes nomes comuns de herbicidas e suas classificações de PPA: Glifosato - III; Nicosulfuron - III e Atrazina - II. Neste trabalho, assumimos que existe um dado herbicida, que denominamos por *herbicida recomendado*, que apresenta uma boa relação entre diminuição de perdas de produtividade e impacto ambiental - destacamos que este herbicida não deve ser compreendido como aquele que apresenta meramente uma boa relação entre custo e benefícios produtivos. Nosso objetivo é sugerir e estudar estratégias de aplicação de herbicidas que utilizem prioritariamente o herbicida recomendado mas que preservem sua eficiência, contendo a evolução da resistência a este herbicida. Para que a produtividade se mantenha mesmo quando há o surgimento de indivíduos resistentes ao herbicida recomendado, admitimos que é sempre possível empregar um *herbicida alternativo* em substituição ao herbicida recomendado. Este herbicida é considerado apenas auxiliar, e em princípio poderia ser escolhido dentre os demais disponíveis no mercado. Assumimos que a população de plantas nunca se torna consideravelmente resistente a todos os herbicidas alternativos concomitantemente, de modo que sempre existirá um herbicida alternativo que pode ser aplicado com eficiência.

Modelo da dinâmica populacional. O modelo matemático proposto é fundamentado na dinâmica do banco de sementes de uma população de plantas daninhas e considera a ecologia da planta, fatores genéticos e a influência do herbicida na evolução da resistência, assim como diversos modelos sugeridos na literatura (RENTON et al., 2014). No modelo, o banco de sementes é representado por um vetor de informações que contem a quantidade de sementes de cada genótipo em cada parcela da área produtiva, que denotamos por X. O modelo foi definido com base no ciclo de vida de uma população de plantas daninhas controladas com o uso de herbicidas pós emergentes, e considera as fases de germinação, emergência, aplicação do herbicida, florescimento, produção de sementes por reprodução, dispersão das sementes produzidas e mortalidade das sementes dormentes. Para construir este modelo, nos inspiramos no ciclo de vida de uma planta daninha denominada Bidens pilosa, conhecida popularmente por picão *preto* e bastante presente nas áreas agrícolas brasileiras, em particular, em áreas de produção de milho (MELO et al., 2007). O picão preto é uma planta daninha altamente competitiva com fácil adaptação aos solos cultiváveis combinando alta produção de sementes com mecanismo de dormência, de modo que esta é considerada uma planta de difícil controle (LEMOS et al., 2013).

Um ponto crítico para a modelagem da dinâmica do banco de sementes é obter estimativas para a condição inicial do banco de sementes, mais especificamente, para a frequência dos alelos do banco de sementes de uma população de plantas daninhas selvagens, ou seja, nunca exposta à pressão seletiva causada pelos herbicidas. A frequência dos alelos do banco de sementes é uma variável bastante importante para o estudo da evolução da resistência e pode ser obtida diretamente de X. Para ilustrar, considere que o banco de sementes contém os genótipos AA, Aa e aa e que as quantidades de sementes de cada um destes genótipos é dada por X_{AA} , X_{Aa} e X_{aa} , respectivamente. Assim, a frequência do alelo A neste banco de sementes é obtida por $(2X_{AA} + X_{Aa})/(2X_{AA} + 2X_{Aa} + 2X_{aa})$. A frequência dos alelos em um banco de sementes selvagem, que denominamos por *frequência selvagem dos ale-* *los* (FSA), é uma variável de natureza aleatória, uma vez que é dependente dos processos de mutação e seleção natural (SMITH, 1998, Chapter 4). Diversos estudos demonstram que a evolução da resistência é bastante sensível à esta variável (BAGAVATHIANNAN *et al.*, 2013; NEVE *et al.*, 2011; THORNBY; WALKER, 2009). Por outro lado, obter na prática estimativas para a FSA, seria algo extremamente difícil (RENTON *et al.*, 2014; NEVE *et al.*, 2011; NEVE *et al.*, 2003a; NEVE, 2008), uma vez que envolveria a coleta e análise de milhões de sementes (JASIENIUK; BRULEBABEL; MORRISON, 1996).

Diante das dificuldades apontadas, a maioria dos trabalhos desta área de estudos assume que a FSA possui um valor conhecido, vide por exemplo (THORNBY; WALKER, 2009; CAVAN; CUSSANS; MOSS, 2000; DIGGLE; NEVE; SMITH, 2003; NEVE *et al.*, 2003a; NEVE, 2008; RENTON *et al.*, 2011; MANALIL *et al.*, 2012). Em geral, os valores empregados para esta variável são determinados usando equações de genética de populações com variados graus de aproximações (JASIENIUK; BRULEBABEL; MORRISON, 1996), por exemplo, oriundas da teoria de balanço de mutação-seleção (SMITH, 1998, Chapter 4), que emprega simplesmente a relação entre a taxa de mutação e o valor adaptativo relativo entre os fenótipos resistentes e susceptíveis. Apesar da FSA ser reconhecidamente uma variável de natureza aleatória, poucos trabalhos assumem distribuições de probabilidades para esta variável, dos quais citamos (BAGAVATHIANNAN *et al.*, 2013; NEVE *et al.*, 2011; NEVE *et al.*, 2003b; NEVE *et al.*, 2011). Porém estes trabalhos não apresentam propostas para obter ou estimar estas distribuições. Por outro lado, no modelo proposto por este trabalho, os valores adotados para a FSA são aleatórios com amostras obtidas pela simulação do próprio modelo de dinâmica do banco de sementes. Com isto, é possível também estimar uma distribuição de probabilidade para a FSA.

O modelo proposto pode também ser considerado uma extensão dos modelos encontrados na literatura por, ao mesmo tempo, considerar uma área com múltiplas parcelas, ser baseado em indivíduos e considerar aleatoriedade em todas as fases do ciclo de vida das plantas. Considerar um modelo baseado em múltiplas parcelas é importante pois permite que menos hipóteses que simplificam a realidade do problema sejam necessárias para a definição do modelo. Em um modelo cuja área é composta por uma única parcela deve-se, em geral, adotar a hipótese de que cada planta tem uma probabilidade de cruzamento uniforme com todas as demais plantas da área, o que não é condizente com a realidade. Por outro lado, em um modelo com múltipla parcelas o cruzamento se dá, em geral, com probabilidade maior entre as plantas de mesma parcela. Além disto, os modelos com múltiplas parcelas são mais adequados para tratar do problema dentro do conceito de agricultura de precisão. Assim, é possível definir qual herbicida deve ser aplicado em cada parcela da área produtiva. Um modelo baseado em indivíduos trata as sementes como entidades individualizadas, em contraposição aos modelos cujas variáveis representam densidades de sementes. Nestes modelos, amplamente adotado na literatura (RENTON et al., 2014), é possível que a população de plantas gere uma ínfima fração de sementes resistentes que podem germinar e gerar frações de novas plantas resistentes, um evento que não condiz com a realidade do ciclo de vida das plantas. Por fim, a motivação para construir um modelo

que seja completamente aleatório é, principalmente, a de capturar a aparente aleatoriedade que observamos no problema real. Os modelos considerados na literatura, em geral, consideram todos os processos determinísticos ou parcialmente estocásticos, ou seja, a aleatoriedade é considerada em apenas algumas fases do ciclo de vida das plantas, mantendo as demais relações determinísticas. Na realidade, as variáveis descritas pelo modelo são influenciadas por muitos outros fatores cuja incorporação no modelo seria demasiadamente complexa. Por exemplo, a germinação de uma semente depende das condições de umidade, temperatura e iluminação à que tem sido submetida. No entanto, a omissão destes fatores no modelo geram incertezas que podem ser modeladas por variáveis aleatórias com distribuições adequadas. No modelo sugerido por este trabalho, empregamos distribuições binomiais (DEGROOT; SCHERVISH, 2002) na maioria dos estágios do ciclo de vida das plantas daninhas. A adoção de distribuições binomiais parece ser uma escolha natural para o modelo, principalmente considerando que este é baseado em indivíduos. Estas distribuições são sugeridas por (RENTON *et al.*, 2014) e foram também empregada em (RENTON *et al.*, 2011).

Estratégias de controle. Como mencionamos anteriormente, nosso propósito neste trabalho é sugerir e avaliar estratégias para definir qual herbicida deve ser aplicado em cada parcela da área produtiva e em cada ciclo. Estas estratégias, que também denominamos por estratégias de controle ou, simplesmente, controladores, foram definidas para conter a evolução da resistência tentando-se diminuir a quantidade de sementes resistente geradas por reprodução. Os controladores sugeridos foram avaliadas quanto à conservação da eficiência do herbicida recomendo ao longo do tempo, à perda de produtividade, aos impactos ambientais causados e ao potencial de propagação da resistência para áreas externas. Uma preocupação fundamental no desenvolvimento destes controladores é que estes possam ser implementáveis na prática. Desta forma, definimos os controladores com base em duas informações possíveis de serem obtidas na prática: a identificação visual da resistência em campo e estimativas para o banco de sementes, feitas a partir de observações da quantidade de plantas adultas presentes em cada parcela. Sabemos que a presença de plantas resistentes em uma determinada área pode ser identificada visualmente, geralmente, quando 30% das plantas mostram-se resistentes a um determinado herbicida (CHRISTOFFOLETI, 2008). Por outro lado, a quantidade de plantas adultas em cada parcela pode ser obtida usando-se de técnicas de sensoriamento remoto (THORP; TIAN, 2004) ou mesmo a partir de observações visuais em campo, realizadas por algum agente especializado.

Para obter as estimativas do banco de sementes, empregamos filtros fundamentados na informação da quantidade de plantas adultas presentes em cada parcela. Os filtros podem ser compreendidos como equações ou algoritmos construídos com objetivo de se estimar o valor ou distribuições de probabilidade de determinadas variáveis de um sistema em um dado instante de tempo. Para isto, utilizam-se de um conjunto de medições ou informações de outras variáveis, que denominamos variáveis de observação, realizadas sequencialmente no tempo, desde o instante inicial. A palavra filtro é empregada por analogia ao conceito de filtro físico (ANDERSON; MOORE, 1979), em que uma *substância impura* atravessa uma barreira e o que

se obtêm do outro lado é algo útil para algum propósito. No caso do conceito de filtro como empregado neste trabalho, a substância impura refere-se ao histórico de informações sobre a quantidade de plantas adultas em cada parcela, a barreira seria o próprio algoritmo do filtro, e como resposta temos a estimativa do banco de sementes, o que de fato nos será útil para a definição dos controladores. Os filtro são particularmente úteis em situações em que a medida direta das variáveis de interesse não podem ser realizadas, seja por restrições tecnológicas ou orçamentárias, ou simplesmente porque esta tarefa demandaria um tempo demasiadamente longo, de modo que a medida, quando obtida, não seria mais útil para tratar do problema prático. Os filtros têm sido empregados massivamente para solucionar diversos problemas práticos, tais como, rastreamento de veículos (RISTIC; ARULAMPALAM; GORDON, 2004), além de diversos problemas nas áreas de bioengenharia (RITTER *et al.*, 2015) análise de séries temporais (DURBIN; KOOPMAN, 2012), processamento de sinais e econometria (WELLS, 1995).

Dentro deste contexto, destacamos o filtro de Kalman (KALMAN, 1960), que fornece uma estimativa para o valor das variáveis de interesse juntamente com a covariância do erro de estimação a cada instante de tempo, sendo considerado um estimador ótimo para sistemas lineares com ruídos aditivos gaussianos, no sentido de que produz a menor covariância para o erro de estimativa (ANDERSON; MOORE, 1979). Entretanto, o modelo adotado para a dinâmica do banco de sementes é definido por funções não lineares. Assim, empregamos uma extensão do filtro de Kalman denominada filtro de Kalman estendido (FKE) (RISTIC: ARULAMPALAM; GORDON, 2004). O termo FKE é relacionado, de modo geral, a aproximações por expansão de série de Taylor de primeira ordem para as equações não lineares, ou seja, expansões lineares. A cada instante de tempo, aproximações lineares para as equações do sistema são obtidas e então aplica-se o algoritmo padrão do filtro de Kalman para sistemas lineares. É importante ressaltar que seria possível empregar outros tipos de estimadores ou filtros para o banco de sementes, por exemplo, o filtro de Kalman unscented, proposto por (JULIER; UHLMANN, 1997). No entanto, optamos pelo uso do FKE pois este é considerado um estimador clássico para sistemas não lineares com comportamento bastante estudado ao longo das décadas, de modo que se tornou uma opção padrão para este tipo de sistema (WAN; der MERWE, 2000). Além disto, o FKE emprega uma concepção simples, ou seja, aproximação linear do modelo conjugada com critérios de otimalidade, o que deixa considerável margem para explorar melhorias em sua definição. É importante ressaltar que não faz parte dos objetivos deste trabalho investigar e selecionar estimadores que produzem as melhores estimativas para o banco de sementes, mas sim se o uso de um controlador baseado em estimativas implementáveis e "suficientemente boas" pode apresentar resultados interessantes para o problema de controle de plantas daninhas.

Objetivos e estrutura da tese

O desenvolvimento deste trabalho tem como objetivo sugerir e estudar estratégias de controle implementáveis que diminuam os impactos ambientais causados pelo uso dos herbici-

das considerando a evolução da resistência. Para isto, as estratégias de controle devem priorizar o uso do herbicida recomendado, mas, ao mesmo tempo, preservar sua eficiência contendo a evolução da resistência a este herbicida. Para cumprir com este objetivo, no Capítulo 2, apresentamos e estudamos alguns aspectos de um modelo matemático sugerido para a dinâmica populacional de plantas daninhas que considera a evolução da resistência e que não requerer a definição da condição do banco de sementes em estado selvagem. Neste capítulo, também avaliamos a probabilidade de proliferação da resistência quando diferentes distribuições de probabilidade são adotadas para gerar a frequência selvagem dos alelos. No Capítulo 3, avaliamos se controladores com observação do banco de sementes, ou seja, que empregam o valor real do banco de sementes, podem ser mais vantajosos que controladores ditos convencionais, inspirados em estratégias aplicadas no mundo real. Apesar de ser um controlador teórico, no sentido de que não é possível de ser implementado na prática, este estudo serve para motivar propostas para se obter estimativas do banco de sementes, tal qual o uso do FKE apresentado no Capítulo 4. Estes controladores foram avaliados em relação à conservação da eficiência do herbicida recomendo, produtividade, impactos ambientais e potencial de propagação da resistência. No Capítulo 4, apresentamos o modelo do FKE adaptado para o modelo da dinâmica do banco de sementes e avaliamos o erro obtido por este filtro enquanto estimador do banco de sementes e outras variáveis relacionadas com o ciclo de vida das plantas daninhas. No Capítulo 5, apresentamos uma avaliação do controlador implementável sugerido neste trabalho, ou seja, fundamentado nas estimativas geradas pelo FKE. Para isto realizamos estudos semelhantes aos do Capítulo 3, ou seja, comparamos este controlador implementável com os controladores convencionais em relação à conservação da eficiência do herbicida recomendo, produtividade, impactos ambientais e potencial de propagação da resistência. No Capítulo 6, apresentamos duas propostas de trabalhos futuros, mas que já foram objetos de estudos preliminares. Uma delas é uma extensão do FKE que considera, além da informação sobre a quantidade de plantas adultas em cada parcela, a informação de identificação visual da resistência para gerar estimativas para o banco de sementes. A outra proposta é o estudo da evolução da resistência quando técnicas de fecundação artificial são empregadas em conjunto com a aplicação de herbicidas. Em resumo, a ideia é fecundar plantas daninhas, em particular plantas resistentes, com pólen de plantas daninhas selvagens, diminuindo assim a proporção de sementes resistentes geradas por reprodução. Por fim, no Capítulo 7, apresentamos as considerações finais deste trabalho.

Notação e operadores

Nesta seção, apresentamos as notações e operadores empregados neste trabalho. Adotamos letras maiúsculas para indicar que a variável tem relação com o genótipo e letras minúsculas para aquelas que são independentes da informação do genótipo. Os símbolos \mathbb{B} , $\mathbb{N} \in \mathbb{R}$ representam o conjunto de números binários, naturais e reais, respectivamente. Empregamos [.] para o arredondamento para baixo de um número real. Seja \mathcal{O} um evento qualquer em um dado espaço amostral, então definimos como $P(\mathcal{O})$ a probabilidade de ocorrência deste evento.

O acesso aos elementos de um vetor ou matriz é feito empregando-se índices subscritos, de modo que $V_{i,j}$ se refere ao elemento pertencente à linha *i* e coluna *j* de uma dada matriz $V \in \mathbb{R}^{N_1 \times N_2}$. Definimos também V^T como a matriz transposta de *V* e, para esta mesma matriz, a notação $V_j = [V_{1,j}V_{2,j}...V_{N_1,j}]^T$. Para facilitar a construção do modelo do filtro de Kalman estendido definimos o operador de vetorização $vec : \mathbb{R}^{N_1 \times N_2 \times N_3} \to \mathbb{R}^{N_1 N_2 N_3}$. Para ilustrar o uso deste operador, considere $X^{vec} = vec(X)$, em que $X \in \mathbb{R}^{N_1 \times N_2 \times N_3}$. Esta igualdade estabelece a seguinte relação, $X_{i\ell m}^{vec} = X_{i,\ell,m}$, em que $i\ell m = N_1 N_2 (m-1) + N_1 (\ell - 1) + i$. Definimos também o operador vec^M , como uma generalização de vec, que nos permite construir vetores a partir de múltiplas matrizes ou vetores, do seguinte modo

$$\operatorname{vec}^{M}(\mathbf{X}^{1},\mathbf{X}^{2},\ldots,\mathbf{X}^{n}) = \left[\operatorname{vec}\left(\mathbf{X}^{1}\right)^{T}\operatorname{vec}\left(\mathbf{X}^{2}\right)^{T}\ldots\operatorname{vec}\left(\mathbf{X}^{n}\right)^{T}\right]^{T}.$$
 (1.1)

Adotamos $\mathscr{B}(n, p)$ para uma distribuição binomial (DEGROOT; SCHERVISH, 2002) em que *n* é o números de experimentos e *p* a probabilidade de sucesso; $\mathscr{B}^M(n, P)$ é empregado para uma distribuição multinomial (DEGROOT; SCHERVISH, 2002), com *n* já definido e *P* um vetor de probabilidades. Adotamos ainda $\mathscr{N}(m, v)$ para uma distribuição normal univariada (DEGROOT; SCHERVISH, 2002) com média *m* e variância *v*; e $\mathbb{N}^M(M, V)$ para uma distribuição multivariada com média dada pelo vetor *M* e covariância dada pela matriz *V*. Dada uma variável aleatória qualquer *W*, denotamos por $\mathscr{E}{W}$ e $\mathscr{C}{W}$ o valor esperado e a covariância de *W*, respectivamente.

Definimos ainda os seguintes operadores,

$$\rho(X) = \frac{2X_1 + X_2}{2\sum_{k=1}^3 X_k}; \quad \eta(X) = \frac{X_1 + X_2}{\sum_{k=1}^3 X_k}; \quad \gamma_j(X) = \frac{X_j}{\sum_{k=1}^3 X_k}; \quad \phi(X) = X_1 + X_2 + X_3; \quad (1.2)$$

para $X \in \mathbb{R}^3$. Como veremos adiante, o operador $\rho(.)$ será bastante utilizado para obtermos a frequência do alelo *A* no banco de sementes ou em uma população de plantas, já o operador $\eta(.)$ nos fornece a frequência do fenótipo resistente, $\gamma_j(.)$ calcula a frequência do genótipo *j* e $\phi(.)$ pode ser usado para calcular o total de sementes no banco ou a quantidade total de plantas em uma parcela. Definimos também a função sinal, denotada por sgn(.) e definida por,

$$sgn(x) = \begin{cases} 1, & x \ge 0; \\ 0, & c.c., \end{cases}$$
 (1.3)

para $x \in \mathbb{R}$; e a função indicadora, denotada por $\mathbb{1}_{\{\cdot\}}$ e definida por,

$$\mathbb{1}_{\{\Omega\}} = \begin{cases} 1, & \text{se a condição } \Omega \text{ for verdadeira;} \\ 0, & \text{c.c..} \end{cases}$$
(1.4)

capítulo 2

MODELO PARA A DINÂMICA DO BANCO DE SEMENTES

Neste capítulo apresentamos e estudamos alguns aspectos do modelo matemático sugerido neste trabalho para a dinâmica do banco de sementes de uma população de plantas daninhas. Na Seção 2.1 apresentamos as equações deste modelo, construído com base no ciclo de vida de uma população de plantas daninhas, assim como diversos modelos sugeridos na literatura (RENTON *et al.*, 2014). O ciclo de vida considerado inclui as fases de germinação, emergência, aplicação do herbicida, florescimento, produção de sementes por reprodução, dispersão das sementes produzidas e mortalidade das sementes dormentes. Assumimos que esta população de plantas é controlada com o uso de dois tipos de herbicidas pós emergentes, denominados herbicida recomendado e herbicida alternativo. A Figura 1 apresenta as principais variáveis empregadas na definição do modelo. Consideramos que o tempo discreto *t* resulta da discretização em ciclos de vida das plantas daninhas de forma que t = k se refere *k*-ésimo ciclo de vida das plantas daninhas.

O modelo proposto considera aleatoriedade em todas as fases do ciclo de vida das plantas daninhas, trata semente e plantas como indivíduos e considera a área de cultivo dividida parcelas. Este modelo se distingue dos apresentados na literatura por não requerer a definição do banco de sementes quando em estado selvagem. Com isto, não precisamos assumir a priori uma distribuição para a frequência selvagem dos alelos (FSA), de modo que não seria também necessário adotar hipóteses simplificadoras, tais como a sugerida pela teoria de balanço mutação-seleção (SMITH, 1998, Chapter 4). A ideia é usar o próprio modelo para obter amostras da distribuição da FSA. Para isto, simulamos a dinâmica do ciclo de vida das plantas, sem considerar o efeito da pressão seletiva dos herbicidas, para um intervalo de tempo suficientemente longo. Na Seção 2.2 definimos alguns experimentos para ilustrar como isto pode ser alcançado.

Na Seção 2.3, apresentamos uma estimativa da distribuição para a frequência selvagem

do alelo *A*. Apresentamos também estimativas para a evolução desta distribuição quando passamos a aplicar o herbicida recomendado, ou seja, quando a pressão seletiva passa a ser considerada. Por fim, apresentamos como a probabilidade de proliferação da resistência é impactada considerando três distribuições diferentes, mas com o mesmo valor esperado, para a frequência selvagem do alelo *A*. Sabemos da literatura que a evolução da resistência é bastante sensível à FSA, porém esta sensibilidade é avaliada para valores determinísticos. Neste estudo queremos mostrar que a evolução da resistência é também bastante sensível à própria distribuição da FSA adotada.



Figura 1 – Fluxograma das variáveis empregadas para o ciclo de vida de uma população de plantas daninhas. O valor ou distribuição das variáveis na ponta das setas são funções das variáveis no início das setas. Os círculos verdes destacam o banco de sementes em dois ciclos consecutivos, t e t + 1.

2.1 Equações do modelo

Considere uma população de plantas daninhas presente em uma área que também contém uma certa cultura agrícola. Considere também que esta área é dividida em N parcelas com F_{ℓ} metros quadrados cada uma, em que $l \in \mathcal{L}$, sendo $\mathcal{L} = \{1, ..., N\}$. Assumimos que esta área é fechada, no sentido de que não há trocas de sementes, plantas ou pólen com áreas vizinhas. Assumimos também que o efeito da troca de pólen entre as plantas daninhas de diferentes parcelas é desprezível. Ressaltamos que esta hipótese é condizente com a ecologia da *Bidens* P, considerando que esta planta que produz aproximadamente 92% de suas sementes por autofecundação (SUN; GANDERS, 1990). Assim, assumimos que a troca de pólen existe mas que ocorre somente entre as plantas de mesma parcela. No entanto, destacamos que existe fluxo genético dentro da área, promovido pela dispersão das sementes produzidas em cada parcela. Seguindo os trabalhos de (DIGGLE; NEVE; SMITH, 2003; NEVE *et al.*, 2003a; NEVE *et al.*, 2003b), consideramos que a resistência ao herbicida recomendado está relacionada com um gene disposto em um único *locus* e que a herança genética segue as leis de Mendel. Assumimos também que a resistência é herdada por um alelo dominante, denotado pela letra maiúscula *A*, o que está de acordo com a maioria dos fenômenos de resistência estudados, como relembra (ROUX; PARIS; REBOUD, 2008). Assim, o conjunto dos possíveis genótipos das sementes e plantas desta população é dada por $\mathcal{G} = \{AA, Aa, aa\}$, sendo que os genótipos *AA* e *Aa* se referem ao fenótipo resistente ao herbicida recomendado, e o genótipo *aa* ao fenótipo susceptível.

Como apresentado pela Figura 1, o banco de sementes é representado pela variável $\mathbf{X}(t) \in \mathbb{N}^{3,N}$, de forma que o elemento $\mathbf{X}_{i,\ell}(t)$, representa a quantidade de sementes com genótipo $i \in \mathscr{G}$, na parcela $l \in \mathscr{L}$ e no instante t. A dinâmica do banco de sementes pode ser obtida via balanço de sementes, usando a seguinte equação recursiva

$$\begin{cases} \mathbf{X}_{i,\ell}(t+1) = \mathbf{X}_{i,\ell}(t) - \mathbf{X}_{i,\ell}^{\delta}(t) - \mathbf{X}_{i,\ell}^{\psi}(t) + \sum_{m \in \mathscr{L}} \mathbf{X}_{i,m,\ell}^{d}(t), \\ \mathbf{X}_{i,\ell}(t_0) = \mathbf{\breve{X}}_{i,\ell}, \end{cases}$$
(2.1)

em que $\check{\mathbf{X}} \in \mathbb{N}^{3,N}$ representa a condição inicial do banco de sementes, $\mathbf{X}^{\delta}(t) \in \mathbb{N}^{3,N}$ é tal que o elemento $\mathbf{X}_{i,\ell}^{\delta}(t)$ define a quantidade de sementes do genótipo *i* que germinaram na parcela ℓ e ciclo $t, \mathbf{X}^{\Psi}(t) \in \mathbb{N}^{3,N}$ representa a quantidade de sementes dormentes que morreram neste mesmo ciclo e $\mathbf{X}^{d}(t) \in \mathbb{N}^{3,N,N}$ representa a dispersão de sementes, sendo $\mathbf{X}_{i,m,\ell}^{d}(t)$ a quantidade de sementes geradas por reprodução na parcela *m* que se depositaram na parcela ℓ , devido a ação de algum mecanismo de dispersão qualquer, possivelmente combinando fatores naturais e antropogênicos. Na sequência apresentamos como são obtidas cada uma das variáveis que determinam $\mathbf{X}_{i,\ell}(t+1)$.

Para obter $\mathbf{X}^{\delta}(t)$, empregamos a seguinte distribuição de probabilidade

$$\mathbf{X}_{i,\ell}^{\boldsymbol{\delta}}(t) \sim \mathscr{B}\Big(\mathbf{X}_{i,\ell}(t), \boldsymbol{\delta}\Big), \tag{2.2}$$

em que $0 \le \delta \le 1$ é a probabilidade de germinação de uma semente qualquer no banco de sementes. Observe que assumimos que a probabilidade de germinação é uniforme no tempo e no espaço. No entanto, destacamos que incertezas e variações espaciais e temporais podem ser facilmente incorporadas na maioria dos parâmetros do modelo empregando-se, por exemplo, $\delta_{\ell}(t)$ na distribuição acima.

Para obter $\mathbf{X}_{i,\ell}^{\Psi}(t)$ dada a quantidade de sementes que germinaram em *t*, empregamos a seguinte distribuição,

$$\mathbf{X}_{i,\ell}^{\boldsymbol{\psi}}(t) \sim \mathscr{B}\Big(\mathbf{X}_{i,\ell}(t) - \mathbf{X}_{i,\ell}^{\boldsymbol{\delta}}(t), \boldsymbol{\psi}\Big),$$
(2.3)

em que $0 \le \psi \le 1$ é a probabilidade de morte de uma semente dormente qualquer.

Para obter $\mathbf{X}_{i,m,\ell}^d(t)$, seguiremos a sequência apresentada pela Figura 1. Assim, para o obter a quantidade de plantas adultas que se desenvolvem durante o ciclo *t*, denotada por $\mathbf{Y}^a(t) \in \mathbb{N}^{3,N}$, adotamos a distribuição seguinte,

$$\mathbf{Y}_{i,\ell}^{a}(t) \sim \mathscr{B}\Big(\mathbf{X}_{i,\ell}^{\delta}(t), \mathbf{v}_{i,\ell}\Big),\tag{2.4}$$

em que $v_{i,\ell}$ é a probabilidade das plantas que germinaram em *t* sobreviverem até a idade adulta. Esta variável é dependente de dois fatores: mortalidade natural das plantas e mortalidade devido a ação dos herbicidas. Assumimos que estes fatores atuam de forma independente, de forma que empregamos a seguinte expressão,

$$\mathbf{v}_{i,\ell} = \xi_i M_i(u_\ell(t)), \tag{2.5}$$

em que ξ_i é a probabilidade de sobrevivência natural das plantas e $M_i(u_\ell(t))$ é a probabilidade de sobrevivência das plantas considerando apenas o efeito dos herbicidas. O primeiro parâmetro é definido do seguinte modo,

$$\xi_i = \begin{cases} \gamma(1-c) & : i = 1, 2, \\ \gamma & : i = 3, \end{cases}$$

em que γ é a probabilidade de sobrevivência natural das plantas daninhas e *c* é um parâmetro relacionado com o denominado custo adaptativo. O custo adaptativo é considerado em diversos trabalhos, dos quais citamos (ROUX; REBOUD, 2007; ROUX; PARIS; REBOUD, 2008; NEVE, 2008). Isto é justificável pois, em muitos casos, as mudanças metabólicas associadas à resistência são também acompanhadas de prejuízos metabólicos (ROUX; PARIS; REBOUD, 2008), o que leva a uma diminuição em sua probabilidade de sucesso reprodutivo. O custo adaptativo é bastante importante para a caracterização da frequência selvagem do alelo *A*. Quanto menor o custo adaptativo, maior será a probabilidade de sucesso reprodutivo relativo do fenótipo resistente em relação ao susceptível e, consequentemente, maior será o valor esperado para a frequência selvagem do alelo *A*.

Definimos a probabilidade de sobrevivência do seguinte modo

$$M_i(u) = \begin{cases} (1 - \rho^R) & : i = 1 e 2, & e u = 1, \\ (1 - \rho^S) & : i = 3, & e u = 1, \\ (1 - \rho) & : i = 1, 2, e 3, & e u = 2, \end{cases}$$

em que ρ^R e ρ^S são as probabilidades de morte dos fenótipos resistentes e susceptíveis, respectivamente, devido à aplicação do herbicida recomendado; e ρ é a probabilidade de morte devido à aplicação do herbicida alternativo. Note que a aplicação do herbicida alternativo não causa pressão seletiva nos genótipos de \mathscr{G} , uma vez que $M_i(2)$ é, na verdade, independente de *i*.

A quantidade de sementes geradas por reprodução na parcela ℓ é dada pela variável \mathbf{x}_{ℓ}^{r} . Assumimos que esta variável tem uma distribuição dada por

$$\mathbf{x}_{\ell}^{r}(t) \sim \left\lfloor \mathscr{N}\left(\overline{\mathbf{x}}_{\ell}^{r}(t), \left(\boldsymbol{\varphi}\overline{\mathbf{x}}_{\ell}^{r}(t)\right)^{2}\right) \right\rfloor,$$
(2.6)

em que $\overline{\mathbf{x}}_{\ell}^{r}(t)$ é o valor esperado da quantidade de sementes produzidas dado a quantidade total de plantas adultas, e φ um parâmetro de ajuste do desvio padrão da distribuição. Para calcular $\overline{\mathbf{x}}_{\ell}^{r}(t)$ empregamos a seguinte expressão,

$$\overline{\mathbf{x}}_{\ell}^{r}(t) = \begin{cases} \frac{F_{\ell}g\mathbf{y}_{\ell}^{a}(t)}{F_{\ell}+g\mathbf{y}_{\ell}^{a}(t)/G} & :\mathbf{y}_{\ell}^{a}(t) > 0\\ 0 & :\mathbf{y}_{\ell}^{a}(t) = 0, \end{cases}$$
(2.7)

em que $\mathbf{y}_{\ell}^{a}(t) = \sum_{i=1}^{3} \mathbf{Y}_{i,\ell}^{a}(t)$ é a quantidade total de plantas adultas que se desenvolveram durante o ciclo *t*. Note que *g* e *G* podem ser interpretados como limitantes no sentido de que o valor esperado da produção de sementes por planta, $\overline{\mathbf{x}}_{\ell}^{r}/\mathbf{y}_{\ell}^{a}(t)$, converge para *g* quando $\mathbf{y}_{\ell}^{a}(t) \rightarrow 0$, e o valor esperado da produção de sementes por metro quadrado, $\frac{\overline{\mathbf{x}}_{\ell}}{F_{\ell}}$, converge para *G* quando $\mathbf{y}_{\ell}^{a}(t) \rightarrow \infty$. A equação (2.7) foi adaptada de (NEVE *et al.*, 2011; NEVE, 2008), e leva em consideração a competição intraespecífica por recursos, tais como, água, nutrientes e luz, de modo que $\overline{\mathbf{x}}_{\ell}^{r}/\mathbf{y}_{\ell}^{a}(t)$ diminui com o aumento da quantidade de plantas adultas. É importante destacar que nos trabalhos citados a equação é apresentada de modo ligeiramente distinto, sendo que sua saída é a quantidade de sementes produzidas por metro quadrado. Note que assumimos que a quantidade de plantas adultas dos ciclos anteriores é desprezível para obtermos a quantidade de sementes geradas em *t*. Esta hipótese é válida, por exemplo, quando o ciclo de produção da cultura é suficientemente curto para que haja apenas uma geração de plantas daninhas por ciclo de colheita.

Para obtermos a quantidade de sementes viáveis que será incorporada ao banco de sementes no ciclo *t*, denotado por $\mathbf{x}^{\kappa}(t) \in \mathbb{N}^{N}$, adotamos a seguinte distribuição,

$$\mathbf{x}_{\ell}^{\kappa}(t) \sim \mathscr{B}\Big(\mathbf{x}_{\ell}^{r}(t), \kappa\Big), \tag{2.8}$$

em que $0 \le \kappa \le 1$ é a probabilidade de que uma semente gerada por reprodução seja viável no final do ciclo *t*. Destacamos que considerar esta passagem é importante, pois boa parte das sementes são, por exemplo, mal formadas ou predadas durante o ciclo *t*.

O genótipo das sementes viáveis em cada parcela, é dado pelos elementos da matriz $\mathbf{X}^{g}(t) \in \mathbb{N}^{3,N}$, do seguinte modo

$$\mathbf{X}_{\ell}^{g}(t) \sim \mathscr{B}^{M}\Big(\mathbf{x}_{\ell}^{\kappa}(t), P\big(\mathscr{G}_{\ell}^{n}(t)\big)\Big),$$
(2.9)

sendo $\mathbf{X}_{\ell}^{g}(t) = [\mathbf{X}_{1,l}^{g}(t) \mathbf{X}_{2,l}^{g}(t) \mathbf{X}_{3,l}^{g}(t)]^{T} e P(\mathscr{G}_{\ell}^{n}(t)) = [P(\mathscr{G}_{1,l}^{n}(t)) P(\mathscr{G}_{2,l}^{n}(t)) P(\mathscr{G}_{3,l}^{n}(t))]^{T}$, em que $\mathscr{G}_{i,\ell}^{n}(t)$ se refere ao evento de que uma dada semente que tenha sido gerada na parcela l e ciclo t tenha genótipo i. A probabilidade deste evento depende, dentre outros fatores, dos valores de $\mathbf{Y}_{i,\ell}^{a}(t)$, para todo $i \in \mathscr{G}$, e será apresentada na Seção 2.1. Observamos que inserimos o sobrescrito n para destacar que o processo de reprodução considerado por este modelo leva em conta apenas os processos naturais de fecundação, ou seja, fecundação cruzada e auto fecundação, em distinção à reprodução por fecundação artificial, apresentada no Capítulo 6.

Finalmente, a dispersão das sementes entre as parcelas é dada por $\mathbf{X}^{d}(t) \in \mathbb{N}^{3,N,N}$, do seguinte modo

$$\mathbf{X}_{i,m}^{d}(t) \sim \mathscr{B}^{M}\left(\mathbf{X}_{i,m}^{g}(t), P(\mathscr{D}_{m})\right), \qquad (2.10)$$

sendo $\mathbf{X}_{i,m}^d(t) = [\mathbf{X}_{i,m,1}^d(t), \dots, \mathbf{X}_{i,m,N}^d(t)]^T$, para todo $m \in \mathscr{L}$, em que $\mathbf{X}_{i,m,\ell}^d(t)$ é a quantidade de sementes com genótipo *i*, produzidas na parcela *m* e depositadas na parcela ℓ , e $P(\mathscr{D}_m) = [P(\mathscr{D}_{m,1}), \dots, P(\mathscr{D}_{m,N})]^T$, em que $\mathscr{D}_{m,\ell}$ se refere ao evento de que uma dada semente produzida na parcela *m* se deposite na parcela ℓ . Assumimos neste trabalho que $P(\mathscr{D}_{m,l})$ é dado e invariante no tempo para todo $m, l \in \mathscr{L}$.

O cálculo de $P(\mathscr{G}_{i,\ell}^n(t))$

Para obtermos o genótipo das sementes viáveis, assumimos que a reprodução pode acontecer por auto fecundação ou fecundação cruzada. Assumimos também, que existe uma probabilidade de mutação dos alelos durante a gametogênese e que a transmissão genética segue as leis de Mendel. A variável $P(\mathcal{G}_{i,\ell}^n(t))$ pode ser interpretada como a probabilidade de que uma semente tomada ao acaso, gerada por uma planta adulta da parcela ℓ e período t, tenha genótipo i. Como assumimos que não há troca de pólen entre diferentes parcelas, temos que o cálculo desta probabilidade depende apenas da frequência dos genótipos das plantas adultas da parcela ℓ . Com isto, a sequência de equações independe de ℓ e t, de modo que optamos por suprimir o uso destas variáveis nesta subseção para aliviar a notação.

Considere então tomarmos ao acaso uma semente gerada por reprodução na parcela ℓ e intervalo *t*, para inspeção do seu genótipo. Dados os possíveis mecanismos de reprodução, podemos empregar o teorema da probabilidade total para escrevermos o seguinte,

$$P(\mathscr{G}_i^n) = P(\mathscr{F}_{af})P(\mathscr{G}_i^n|\mathscr{F}_{af}) + P(\mathscr{F}_{fc})P(\mathscr{G}_i^n|\mathscr{F}_{fc}), \qquad (2.11)$$

em que \mathscr{G}_i^n se refere ao evento de que a planta genitora em questão tenha o genótipo *i*, e \mathscr{F}_{af} e \mathscr{F}_{fc} se referem aos eventos de que a dada semente tenha sido gerada por auto fecundação ou fecundação cruzada, respectivamente. Como estes eventos são complementares, temos então que $P(\mathscr{F}_{af}) + P(\mathscr{F}_{fc}) = 1$. Assumimos que estas probabilidades são invariantes no tempo e dadas. Note que podemos usar novamente o teorema da probabilidade total para escrevermos o seguinte,

$$P(\mathscr{G}_i^n | \mathscr{F}_{af}) = \sum_{j \in \mathscr{G}} P(\mathscr{Y}_j | \mathscr{F}_{af}) P(\mathscr{G}_i^n | \mathscr{F}_{af}, \mathscr{Y}_j),$$
(2.12)

em que \mathscr{Y}_j se refere ao evento de que o genitor da semente em questão tenha genótipo j.

Observe que $P(\mathscr{Y}_j|\mathscr{F}_{af})$ pode ser obtida por $\gamma_j(\mathbf{Y}^a(t))$, sendo $\gamma(.)$ definido em (1.2), de modo que para o cálculo de $P(\mathscr{G}_i^n)$, resta-nos conhecer $P(\mathscr{G}_i^n|\mathscr{F}_{af},\mathscr{Y}_j)$ e $P(\mathscr{G}_i^n|\mathscr{F}_{fc})$. Para isto, assumimos que os gametas de uma dada parcela se combinam de forma aleatória para gerar as sementes. Assim, considere então tomarmos ao acaso um gameta gerado pelas plantas adultas da parcela *l* em *t*. Seja \mathscr{A} o evento de que este gameta seja do tipo *A*. Considerando que a genética da resistência segue as leis de Mendel, podemos escrever o seguinte,

$$P(\mathscr{G}_{1}^{n}|\mathscr{S}) = P(\mathscr{A}|\mathscr{S})^{2},$$

$$P(\mathscr{G}_{2}^{n}|\mathscr{S}) = 2P(\mathscr{A}|\mathscr{S})(1 - P(\mathscr{A}|\mathscr{S})),$$

$$P(\mathscr{G}_{3}^{n}|\mathscr{S}) = (1 - P(A|\mathscr{S}))^{2},$$

(2.13)

em que \mathscr{S} pode representar qualquer dos eventos, $\{\mathscr{F}_{af}, \mathscr{Y}_j\}$ ou \mathscr{F}_{fc} .

Como a mutação é independente de *S*, assumindo que seja também independe do uso dos herbicidas, como sugerido por (JASIENIUK; BRULEBABEL; MORRISON, 1996), e assumindo ainda que esta pode ocorrer apenas uma vez durante a gametogênese, podemos escrever

o seguinte

$$P(\mathscr{A}|\mathscr{S}) = P(\mathscr{A}^{-}|\mathscr{S})(1 - 2P(\mathscr{M})) + P(\mathscr{M}), \tag{2.14}$$

sendo \mathscr{A}^- o evento de observamos um alelo do tipo *A* no início da fase haploide da gametogênese e \mathscr{M} o evento de ocorrência de mutação durante a gametogênese. Neste trabalho, consideramos que $P(\mathscr{M})$ é dado e invariante no tempo. Logo, para obtermos $P(\mathscr{G}_i^n)$ resta-nos então determinar $P(\mathscr{A}^-|\mathscr{S})$ para todo \mathscr{S} . No caso da dos eventos de auto fecundação é válido que $P(\mathscr{A}^-|\mathscr{F}_{af},\mathscr{G}_1) = 1$, $P(\mathscr{A}^-|\mathscr{F}_{af},\mathscr{G}_2) = 0,5$ e $P(\mathscr{A}^-|\mathscr{F}_{af},\mathscr{G}_3) = 0$. Já para a fecundação cruzada é válido que $P(\mathscr{A}^-|\mathscr{F}_{fc}) = \rho(\mathbf{Y}^a)$, sendo $\rho(.)$ definido em (1.2).

2.2 Experimentos

Para estes experimentos consideramos uma área produtiva composta por uma única parcela, de modo que suprimimos a dependência de ℓ pelas variáveis do modelo. Para estimar a distribuição da FSA, bem como a evolução desta distribuição com a aplicação sucessiva do herbicida recomendado, empregamos simulação de Monte Carlo em duas fases. Na primeira, a dinâmica do banco de sementes não está sujeita à pressão seletiva induzida pelo herbicida, enquanto na segunda, a pressão seletiva é atuante com o início da aplicação do herbicida recomendado. Na primeira fase, simulamos o modelo para $-T_0 \le t \le 0$, e denotamos por { $\mathbf{X}^{0,\omega_n}(t), -T_0 \le t \le 0$ } a *n*-ésima realização de Monte Carlo. Definimos como condição inicial em $-T_0$ um banco de sementes sem sementes resistentes e com 2200 sementes por metro quadrado. Incluímos o sobrescrito 0 para destacar que não há efeito da pressão seletiva nestas realizações, uma vez que o herbicida alternativo é empregado nesta etapa, ou seja, adotamos $u^{\omega_n}(t) = 2$, para $-T_0 \le t \le -1$ e $1 \le n \le M$. Este herbicida é empregado nesta fase apenas para manter o banco de sementes controlado, de forma que podemos considerar, por exemplo, que sua aplicação neste período apenas emularia a competição das plantas daninhas com outras espécies. Para simular a segunda fase, adotamos $\mathbf{X}^{\text{LP},\omega_n}(0) = \mathbf{X}^{0,\omega_n}(0)$ e geramos *M* realizações empregando $u^{\omega_n}(t) = 1$, para $0 \le t \le T - 1$ e $1 \le n \le M$. Denotamos estas realizações por { $X^{LP,\omega_n}(t), 0 \le t \le T$ }, em que o sobrescrito LP é utilizado para lembrar que estas realizações foram obtidas do modelo com horizonte de tempo de longo prazo.

Para avaliar a sensibilidade da evolução da resistência em relação à distribuição de probabilidade da frequência selvagem do alelo *A*, empregamos simulação de Monte Carlo e geramos outros dois conjuntos de realizações. O primeiro emprega uma distribuição log normal, assim como (BAGAVATHIANNAN *et al.*, 2013; NEVE *et al.*, 2011; NEVE *et al.*, 2011), para gerar a frequência selvagem do alelo *A*. Para isto, primeiramente, geramos *M* amostras, denotadas por f^n , a partir de uma log-normal com média $\mu_0 = M^{-1} \sum_{n=1}^{M} \rho \left(\mathbf{X}^{\text{LP},\omega_n}(0) \right) \right)$ e desvio padrão $\sigma_0 = \left(M^{-1} \sum_{n=1}^{M} \left(\rho \left(\mathbf{X}^{\text{LP},\omega_n}(0) \right) - \mu_0 \right)^2 \right)^{0.5}$. Em seguida, geramos o conjunto $\left\{ \mathbf{X}^{\text{LN},\omega_n}(0) \right\}_{\{1 \le n \le M\}}$ de tal modo que $\rho \left(\mathbf{X}^{\text{LN},\omega_n}(0) \right) = f^n$ e $\phi \left(\mathbf{X}^{\text{LN},\omega_n}(0) \right) = \phi \left(\mathbf{X}^{\text{LP},\omega_n}(0) \right)$, para todo $1 \le n \le M$. Esta segunda condição foi utilizada para que o valor total de sementes em

t = 0 das amostras do modelo LN fosse o mesmo que as amostras do modelo LP. Então, empregando $u^{\omega_n}(t) = 1$, para $0 \le t \le T - 1$ e $1 \le n \le M$, obtivemos M realizações que denotamos por $\{\mathbf{X}^{LN,\omega_n}(t), 0 \le t \le T\}$. Empregamos o sobrescrito LN para destacar que estas realizações foram obtidas do modelo com distribuição log-normal para a frequência selvagem do alelo A. Para gerar o segundo conjunto de realizações, primeiramente obtivemos $\{\mathbf{X}^{\text{DET},\omega_n}(0)\}_{\{1\le n\le M\}}$ de tal modo que $\rho(\mathbf{X}^{\text{DET},\omega_n}(0)) = \mu_0 e \phi(\mathbf{X}_i^{\text{DET},\omega_n}(0)) = \phi(\mathbf{X}_i^{\text{LP},\omega_n}(0))$, para todo $1 \le n \le M$. Então, do mesmo modo, empregando $u^{\omega_n}(t) = 1$, para $0 \le t \le T - 1$ e $1 \le n \le M$, obtivemos Mrealizações denotadas por $\{\mathbf{X}^{DET,\omega_n}(t), 0 \le t \le T\}$. Analogamente, empregamos o sobrescrito DET para destacar que estas realizações foram obtidas do modelo com frequência selvagem do alelo A determinística.

Para obter os resultados destes experimentos, assim como de todos os experimentos deste trabalho, implementamos os algoritmos em ambiente Matlab ®, um software bastante reconhecido e utilizado para, dente outros, simulações, cálculo numérico e processamento de sinais. Para gerar as realizações, adotamos M = 10000. Para a fase sem pressão seletiva, empregamos $T_0 = 1000$ e para as simulações com pressão seletiva, adotamos um horizonte T = 100. Em todos as simulações consideramos uma área produtiva composta por uma única parcela de 18 ha. Os parâmetros de mortalidade devido ao efeito do herbicida recomendado e alternativo foram obtidos de experimentos em casa de vegetação conduzidos pela Embrapa Milho e Sorgo, de Sete Lagoas (MG). Neste experimentos, constatou-se que uma dose de 60 g ha^{-1} do herbicida Nicosulfuron causa 84,50% de fitotoxicidade na plantas de do picão preto susceptíveis e 22,75% nas plantas resistentes. Neste trabalho, associamos estes valores à probabilidade de morte de cada fenótipo. Assumimos que a probabilidade de morte do herbicida alternativo é igual à probabilidade do herbicida recomendado para o fenótipo susceptível. Assim, adotamos $\rho^S = \rho = 0.845$ e $\rho^R = 0,2275$. Seguindo os resultados obtidos por (SUN; GANDERS, 1990), assumimos que uma dada semente gerada por reprodução tem uma probabilidade de 92% de ter sido gerada por autofecundação e, consequentemente, 8% de ter sido gerada por fecundação cruzada. Com base na descrição do ciclo de vida do picão preto em (LORENZI, 1991) e seguindo sugestão de um especialista, definimos o parâmetro g de tal forma que $\overline{\mathbf{x}}_{\ell}^{r}(t)/\mathbf{y}_{\ell}^{a}(t) = 1500$ quando a densidade de plantas adultas é de $1m^{-2}$, e obtivemos g = 1532, 8; e adotamos G = 70000 para definir a máxima quantidade de sementes produzida por metro quadrado, ou seja, o valor máximo para $\overline{\mathbf{x}}_{\ell}^{r}(t)/F_{\ell}$. Para definirmos a probabilidade de mutação, utilizamos o trabalho (NEVE, 2008), no qual o autor adota um intervalo de 10^{-9} a 10^{-8} para esta probabilidade, de modo que empregamos $P(\mathcal{M}) = 1.5 \times 10^{-9}$. O parâmetro relacionado com o custo adaptativo, foi definido com o mesmo valor que o empregado em (ROUX; PARIS; REBOUD, 2008), assim, adotamos c = 0.03. Ressaltamos que este parâmetro é bastante variável e dependente da planta e herbicida, como apresenta (VILA-AIUB; NEVE; POWLES, 2009). Para os demais parâmetros empregados nas simulações, seguimos sugestão de um especialista. A Tabela 1 apresenta todos os parâmetros adotados nestes experimentos.
Parâmetros	Valor	Parâmetros	Valor
F	18×10^4	$P(\mathscr{M})$	$1,5 imes 10^{-9}$
δ	0, 10	$P(\mathscr{F}_{af})$	0,92
γ	0, 10	g	1532,8
Ψ	0, 14	G	70000
С	0,03	$ ho^S$	0,8450
κ	0, 10	$ ho^R$	0,2275
${oldsymbol arphi}$	0, 10	ρ	0,8450

Tabela 1 – Valores dos parâmetros empregados nas simulações.

2.3 Resultados e discussão

Na Figura 2 apresentamos o valor médio (μ_t) e o o valor médio mais o desvio padrão $(\mu_t + \sigma_t)$ para a frequência de alelo *A* (gráfico à esquerda) e para o total de sementes no banco (gráfico à direita), obtidos para as trajetórias $\mathbf{X}_i^{0,\omega_n}(t)$. Apresentamos também a frequência do alelo *A* estimada pela Teoria de Mutação-Seleção, dada por $P(\mathcal{M})/c$ (SMITH, 1998, Chapter 4), cujo valor é de 5×10^{-8} . Note que, μ_t fica bastante próximo de $P(\mathcal{M})/c$ a partir de t = 400, mostrando concordância entre a estimativa do valor esperado obtido pela simulação de longo prazo e o valor esperado pela Teoria de Mutação-Seleção. Estes resultados sugerem que o modelo da dinâmica de plantas daninhas é estável na ausência de pressão seletiva, uma vez que dinâmicas instáveis geralmente levam a uma divergência da média e do desvio padrão. Esta característica do modelo favorece a obtenção de amostras em t = 0 independentes da condição inicial em $t = -T_0$ quando T_0 é suficientemente grande.



Figura 2 – Frequência do alelo A e total de sementes no banco obtidos para a fase sem pressão seletiva do herbicida recomendado. As curvas contínuas apresentam a média das realizações, enquanto as curvas tracejadas apresentam o valor da média mais o desvio padrão. A curva em rosa apresenta o valor obtido pela Teoria de Mutação-Seleção.

A Figura 3 apresenta à esquerda o histograma da frequência de alelo *A* observada para o conjunto de amostras $\left\{\mathbf{X}_{i}^{0,\omega_{n}}(0)\right\}_{\{1 \le n \le M\}}$. Este histograma nos oferece uma estimativa da distribuição da frequência do alelo *A* em condições selvagens. O triângulo azul indica a média

da distribuição $(3,956 \times 10^{-8})$, e o triangulo branco indica o valor da média mais o desvio padrão $(3,956 \times 10^{-8} + 4,568 \times 10^{-7})$. O número de ocorrência da frequência nula é apresentado separadamente, do lado esquerdo do gráfico. Note que este valor é bastante superior aos demais, o que acreditamos ser condizente com o pequeno tamanho da área definida para este estudo. Para efeito de comparação, apresentamos também do lado direito da figura um gráfico relativo ao histograma teórico da frequência de alelo *A* obtido por uma distribuição log-normal, com mesma média e desvio padrão que o gráfico da esquerda. Adotamos também o mesmo limitante superior obtido para definir o número de ocorrência da frequências nulas, ou seja, definimos $P(\mu_0 = 0) = P(\mu_0 < 1,06 \times 10^{-9})$ para a a distribuição log-normal. Desta figura, podemos notar que as distribuições são bastante distintas. O número de ocorrências da distribuição lognormal para as frequências mais elevadas é visivelmente superior à distribuição gerada pela simulação de longo prazo. Por outro lado, e de particular importância, o número de ocorrência da frequência nula obtido para o modelo de longo prazo (4079) é bastante superior ao obtido pela log-normal (2985), aproximadamente 37%.



Figura 3 – Histograma da frequência do alelo A em t = 0 obtida por simulação de Monte Carlo (à esquerda) e pela distribuição log-normal (à direita); os triângulos com a mesma cor das barras indicam a média e os triângulos brancos a média mais o desvio padrão.

A Figura 4 apresenta as distribuições da frequência do alelo *A* estimadas a partir dos conjuntos $\{\mathbf{X}_{i}^{LP,\omega_{n}}(t)\}_{\{1 \le n \le M\}}$ em $t = \{1, 5, 10, 25, 50, 100\}$. Estes gráficos ilustram como o modelo prevê a evolução da distribuição da frequência de alelo *A* a partir de sucessivas aplicações do herbicida recomendado. É interessante observar que, a partir de $t \ge 5$ os histogramas apresentam uma região com baixa ocorrência em torno do intervalo $[10^{-8} \ 10^{-7}]$. Notamos também que à esquerda desta região, em torno de $[10^{-9} \ 10^{-8}]$, existe uma região com relativamente muitas ocorrências. Acreditamos que estas ocorrências são mantidas quase que exclusivamente pelo fenômeno da mutação (a \rightarrow A), e não por sementes resistentes geradas por reprodução. Observe ainda que a barra correspondente à região com frequência nula permanece elevada mesmo após 100 ciclos de aplicações do herbicida recomendado. Na Seção 8.2, apresentamos os histogramas referentes aos modelos LN e DET também para os instantes $t = \{1, 5, 10, 25, 50, 100\}$.



Figura 4 – Histogramas da frequência do alelo A no banco de sementes obtidos pelo modelo LP nos ciclos t = 1, 5, 10, 25, 50, 100. Os triângulos azuis indicam a média da frequência de alelo A enquanto o triângulo branco indica a média mais o desvio padrão.

A Figura 5 apresenta as trajetórias $1 \le n \le 100$ obtidas para a frequência do alelo A (gráficos à esquerda) e para o total de sementes no banco (gráficos à direita). Com relação às trajetórias da frequência do alelo A observamos que estas apresentam uma fase inicial em que permanecem próximas de zero, ou seja, próximas à frequência de alelo em ambientes selvagens, e uma segunda fase, em que rapidamente ascendem se distanciando de zero. Podemos notar que as trajetórias obtidas pelo modelo LP emergem em instantes aparentemente mais distribuídos ao longo do horizonte se comparado com os instantes de emergência dos modelos LN e DET, com destaque para este último, que apresenta uma alta quantidade de trajetórias emergindo no primeiro terço do horizonte. Note que com a aplicação sucessiva e ininterrupta do herbicida recomendado estas trajetórias tendem para um valor muito próximo de 1. As curvas referentes ao total de sementes no banco apresentam um comportamento semelhante ao descrito para a frequência de alelos. Por estas curvas podemos notar de forma mais nítida o comportamento estocástico do modelo, dado o comportamento aparentemente ruidosos das trajetórias. Note que o total de sementes também apresenta um limitante superior, com valor próximo de 25 mil sementes por metro quadrado. Isto é efeito da competição intraespecífica que sugere a existência de um limitante, induzido pelo parâmetro G, para a produção de sementes mesmo para uma densidade de plantas crescente.

A Figura 6 apresenta, para os ciclos $t = \{10, 15, 20, ..., 100\}$, o número de ocorrências acumuladas das trajetórias cuja germinação de sementes resistentes ultrapassou 30% do total de sementes germinadas. Este indicador está relacionado com a identificação visual da resistência em campo que será apresentada no Capítulo 3. A nítida diferença entre os números de ocorrência evidenciado por esta figura, principalmente considerando os ciclos do início do horizonte, nos mostra como a evolução da resistência prevista pelo modelo é bastante sensível ao formato da distribuição de probabilidade adotada para gerar amostras da frequência selvagem de alelo, mesmo que estas tenham iguais médias ou ainda iguais desvio padrão. Para ilustrar esta diferença, considere o número de ocorrências (um valor aproximadamente 188% maior que o LP) e o modelo DET, 3752 (um valor aproximadamente 622% maior que LP).



Figura 5 – Frequência do alelo A no banco (gráficos à esquerda) e total de sementes no banco (gráficos á direita) para 100 realizações.



Figura 6 – Ocorrências acumuladas das trajetórias em que a germinação de sementes resistentes ultrapassou 30% do total de sementes germinadas.

CAPÍTULO 3

CONTROLE COM OBSERVAÇÃO DO BANCO DE SEMENTES

Podemos definir um controlador como sendo um algoritmo ou uma função matemática que, partindo de informações disponíveis, define o valor das variáveis de decisão, também chamadas variáveis de controle. Neste trabalho, as variáveis de controle são definidas por $u_{\ell}(t) \in \{1,2\}$, para $\ell \in \mathcal{L}, t = 0, ..., T$, em que T é o horizonte de tempo do problema. O valor destas variáveis estabelece qual herbicida deve ser aplicado em cada parcela e em cada ciclo. Assim, se $u_{\ell}(t) = 1$, então o herbicida recomendado deve ser aplicado na parcela ℓ e ciclo t, por outro lado, se $u_{\ell}(t) = 2$, então é o herbicida alternativo que deve ser aplicado. Para definir os valores de $u_{\ell}(t)$, o controlador estudado neste capítulo emprega como informação os próprios valores do banco de sementes a cada ciclo. Este controlador é também denominado *controlador com observação do banco de sementes* e pode ser definido por,

$$u_{\ell}^{\text{obs}}(t) = f(\mathbf{X}(t)), \qquad (3.1)$$

em que $f : \mathbb{R}^{3N} \to \mathbb{N}^N$.

Neste capítulo estamos interessados em avaliar se o uso do controlador com observação do banco de sementes pode ser mais vantajoso que o uso de controladores convencionais, quanto à conservação da eficiência do herbicida recomendo, à produtividade, à diminuição dos impactos ambientais e à diminuição do potencial de propagação da resistência. Ressaltamos que este controlador é considerado teórico, no sentido de que não é possível de ser implementado na prática. Esta afirmação é válida pois, como discutimos anteriormente, não é possível obter o estado real do banco de sementes considerando a tecnologia atual. No entanto, cabe destacar que o estudo deste controlador é importante uma vez que a obtenção de bons resultados poderia motivar propostas para se obter estimativas para o estado do banco de sementes, tais como as obtidas pelo filtro de Kalman, apresentado no Capítulo 4. Além disto, por se tratar de uma situação teórica ou ideal, os resultados obtidos por este estudo podem ser interpretados como limitantes para os resultados obtidos por controladores fundamentos em estimativas do banco de sementes, como o controlador apresentado no Capítulo 5.

O controlador com observação do banco de sementes foi projetado para manter a frequência do alelo A no conjunto de plantas adultas abaixo de um dado limiar. Adotamos esta estratégia pois limitando a frequência do alelo A neste conjunto de plantas, estamos indiretamente limitando a frequência deste alelo nas sementes geradas por reprodução e, consequentemente, retardando ou anulando a proliferação da resistência. Para isto, a cada ciclo t, o controlador estima a frequência do alelo A, denotada por $\tilde{f}_{\ell}(t)$, que seria observada no conjunto de plantas adultas caso o herbicida recomendado fosse aplicado. Definimos esta estimativa como o valor esperado para a quantidade de alelo A na população de plantas adultas dividido pelo valor esperado para o total de alelos nesta população, dado o estado do banco de sementes em t. Se esta estimativa ficar acima do limiar estabelecido, então o controlador decide pelo uso do herbicida alternativo em t. Assim, as ações de controle foram definidas do seguinte modo,

$$u_{\ell}^{\text{obs};\beta}(t) = \begin{cases} 1 & , \text{ se } \tilde{f}_{\ell}(t) < \beta/100, \\ 2 & , \text{ c.c.}, \end{cases}$$
(3.2)

sendo β o referido limiar e

$$\widetilde{f}_{\ell}(t) = \frac{(1-c)(1-\rho^{R})\left(2\mathbf{X}_{1,\ell}(t) + \mathbf{X}_{2,\ell}(t)\right)}{2(1-c)(1-\rho^{R})\left(\mathbf{X}_{1,\ell}(t) + \mathbf{X}_{2,\ell}(t)\right) + 2(1-\rho^{S})\mathbf{X}_{3,\ell}(t)}.$$
(3.3)

Para avaliar o controlador com observação do banco de sementes, comparamos os seus resultados com os obtidos por controladores inspirados em estratégias aplicadas no mundo real, denominados convencionais. Estes controladores são ditos implementáveis pois usam como informação uma variável que pode ser obtida na prática, a identificação visual da resistência em campo. Sabemos que a presença de plantas resistentes em uma determinada área pode ser identificada, geralmente, quando 30% das plantas mostram-se resistentes (CHRISTOFFOLETI, 2008). Assim, neste trabalho, assumimos que a resistência pode ser identificada quando ao menos 30% das plantas que germinam em uma dada parcela da área de cultivo são resistentes. Formalmente, definimos a variável binária $Z^{I}(t) \in \mathbb{B}^{N}$, do seguinte modo,

$$Z_{\ell}^{I}(t) = \operatorname{sgn}\left\{\eta(\mathbf{X}_{\ell}^{\delta}(t)) - 0, 3\right\},\tag{3.4}$$

sendo *sgn* a representação da função sinal, definida em (1.3). Logo, quando $Z_{\ell}^{I}(t) = 1$, temos que a resistência foi identificada na parcela ℓ e ciclo *t*, de modo que sabemos que mais de 30% das sementes que germinaram nesta parcela e ciclo são resistentes. Os controladores convencionais foram definidos do seguinte modo,

$$u_{\ell}^{\text{con}}(t) = f\left(t, \{\mathbf{Z}^{I}(k)\}_{k=0}^{t-1}\right).$$

em que $f : \mathbb{N} \times \mathbb{N}^{Nt} \to \mathbb{N}^{N}$.

Neste trabalho, definimos dois tipos de controladores convencionais, o denominado *guloso* e o *conservador*. Estes controladores adotam *a priori* um esquema de rotação de herbicidas. O herbicida recomendado é utilizado por *C* ciclos, então, no ciclo seguinte, o herbicida alternativo é empregado e esta alternância de herbicidas se repete enquanto a resistência não tiver sido identificada. Estes controladores se distinguem pelo modo como reagem à identificação da resistência em campo. O controlador guloso, define pelo uso do herbicida alternativo apenas na(s) parcela(s) em que a resistência foi identificada, mantendo nas demais o esquema de aplicação definido *a priori*. Este controlador é assim denominado, pois busca manter o uso do herbicida apenas na(s) parcela(s) em que a resistência foi identificação da resistência na área, ao sugerir a troca de herbicida apenas na(s) parcela(s) em que a resistência foi identificada. Assim, o controlador guloso foi definido do seguinte modo,

$$u_{\ell}^{\text{gul},C}(t) = \begin{cases} 1 & , \quad \text{se } J_{\ell}^{I}(t-1) = 0 \text{ e } \frac{t+1}{C+1} \notin \mathbb{N}, \\ 2 & , \quad \text{c.c.}, \end{cases}$$
(3.5)

em que *C* é a quantidade de ciclos seguidos em que o herbicida recomendado é aplicado antes da troca pelo herbicida alternativo, e $J_{\ell}^{I}(t) \in \mathbb{N}$ é uma função que indica o último instante de tempo em que a resistência foi identificada em uma dada parcela *l*, desde o inicio das aplicações do herbicida recomendado até o ciclo *t*, definida por

$$J_{\ell}^{I}(t) = \begin{cases} 0 & , \text{ se } Z_{\ell}^{I}(k) = 0, \forall 0 \le k \le t, \\ \max_{0 \le k \le t} \left\{ k : Z_{\ell}^{I}(k) = 1 \right\} & , \text{ c.c..} \end{cases}$$

Já o controlador conservador define pelo uso do herbicida alternativo em todas as parcelas da área quando a resistência é identificada em qualquer das parcelas. Este controlador é assim denominado pois adota uma ação bastante conservadora para evitar que a resistência evolua a ponto de ser identificada também nas demais parcelas da área produtiva. O controlador conservador foi definido do seguinte modo,

$$u_{\ell}^{\text{csv},C}(t) = \begin{cases} 1 & , \text{ se } J^{I}(t-1) = 0 \text{ e } \frac{t+1}{C+1} \notin \mathbb{N}, \\ 2 & , \text{ c.c.}, \end{cases}$$
(3.6)

sendo $J^{I}(t) \in \mathbb{N}$ uma função que indica o último ciclo em que a resistência foi observada em qualquer das parcelas da área de cultivo, definida por,

$$J^{I}(t) = \max_{\ell \in \mathscr{L}} J^{I}_{\ell}(t).$$
(3.7)

3.1 Indicadores

As estratégias de controle foram avaliadas por indicadores relacionados com a evolução da eficiência do herbicida recomendado, perda de produtividade, impacto ambiental e potencial de propagação da resistência. Os três primeiros são relativos aos efeitos das estratégias de controle em variáveis da própria área de estudo, enquanto o último foi definido para estimar o

impacto da implementação dos controladores na propagação da resistência em áreas externas. Este último indicador foi considerado pois acreditamos que a conservação do uso e eficiência do herbicida recomendado deve também ser estudada de forma mais ampla, avaliando também como as estratégias de manejo em uma dada área de cultivo pode impactar o banco de sementes em uma área externa. Assim, apesar do modelo do ciclo de vida empregado neste trabalho assumir como fechada a área de cultivo, é possível estimar a probabilidade das sementes resistentes serem exportadas e se reproduzirem nas áreas de destino, fato este que comprometeria a eficiência do herbicida recomendado em outras áreas.

Eficiência do herbicida recomendado

A eficiência de um dado herbicida é uma estimativa para a fração de morte que seria induzida por este herbicida caso fosse aplicado para o controle de plantas daninhas. Assim, definimos a eficiência do herbicida recomendado, denotada por $E_{\ell}(t)$, como o valor esperado para a quantidade de mortes de plantas, caso o herbicida seja aplicado, dividido pelo valor esperado para a quantidade de plantas adultas, caso nenhum herbicida seja aplicado, dado o estado de germinação em t. Assim, considerando o ciclo de vida das plantas daninhas apresentado no Capítulo 2, temos que

$$E_{\ell}(t) = 1 - \frac{(1-c)(1-\rho^{R})(\mathbf{X}_{1,\ell}^{\delta}(t) + \mathbf{X}_{2,\ell}^{\delta}(t)) + (1-\rho^{S})\mathbf{X}_{3,\ell}^{\delta}(t)}{(1-c)(\mathbf{X}_{1,\ell}^{\delta}(t) + \mathbf{X}_{2,\ell}^{\delta}(t)) + \mathbf{X}_{3,\ell}^{\delta}(t)},$$
(3.8)

em que os parâmetros c, ρ^R e ρ^S são definidos na Seção 2.1. Note que $\rho^R \leq E_\ell(t) \leq \rho^S$, pois, para uma frequência de alelo A crescente no conjunto de sementes que germinam, temos que $E_\ell(t) \rightarrow \rho^R$, e para uma frequência nula, temos que $E_\ell(t) = \rho^S$.

Produtividade

Para estimar a produtividade da área de cultivo, definimos primeiramente uma função que estabelece a fração da produção que é perdida devido à presença das plantas daninhas na parcela ℓ , denotada por $L_{\ell}(t)$, em relação à produção que seria obtida quando não há plantas daninhas nesta parcela. Para isto, empregamos uma função hiperbólica retangular sugerida por (COUSENS, 1985), e definida por

$$L_{\ell}(t) = \frac{b\mathbf{y}_{\ell}^{a}(t)}{F_{\ell} + \frac{b}{a}\mathbf{y}_{\ell}^{a}(t)},$$
(3.9)

em que $\mathbf{y}_{\ell}^{a}(t)$ é a quantidade de plantas adultas na parcela ℓ , dada por $\mathbf{y}_{\ell}^{a}(t) = \sum_{i=1}^{3} \mathbf{Y}_{i,\ell}^{a}(t)$, *b* é a fração de perda por densidade de plantas adultas quando a quantidade de plantas daninhas tende a zero e *a* é a fração de perda máxima, obtida quando a quantidade de plantas daninhas adultas tende ao infinito. Logo, para obtermos a produtividade de uma parcela no ciclo *t*, denotada por $H_{\ell}(t)$, basta calcularmos

$$H_{\ell}(t) = H^0 \Big(1 - L_{\ell}(t) \Big), \tag{3.10}$$

sendo H^0 a produtividade de uma parcela sem a presença de plantas daninhas.

Impacto ambiental incremental

Uma avaliação satisfatória do impacto ambiental causado pelo uso de herbicidas deve ser alcançada a partir de uma análise extensa, envolvendo diversos indicadores de impacto. No Brasil, para que um herbicida possa ser comercializado, exige-se um estudo contendo no mínimo 56 relatórios considerando, dentre outras, análises do transporte do princípio ativo, de sua persistência nas águas e no solo e do seu efeito tóxico em organismos não alvo, tais como, peixes, abelhas, aves, algas, micro organismos, micro crustáceos e mamíferos (IBAMA,). Neste trabalho, entretanto, assumimos que os impactos causados pelos herbicidas recomendado e alternativo podem ser quantificados e associados a um único índice. Assumimos também que este índice seja uma função de t e da soma de doses aplicadas no perídio desde t = 0. Logo, os impactos ambientais causados pelos herbicidas recomendado e alternativo são definidos, respectivamente, pelas funções $I_1(t, \sum_{k=0}^t d_1(k)) : \mathbb{N}^2 \to \mathbb{R}$ e $I_2(t, \sum_{k=0}^t d_2(k)) : \mathbb{N}^2 \to \mathbb{R}$, em que $d_1(t) e d_2(t)$ são definidos como a quantidade de doses aplicadas no ciclo t dos herbicidas recomendado e alternativo, respectivamente. Definimos como dose, a quantidade do principio ativo de cada herbicida recomendada para ser aplicada em uma parcela.

Neste trabalho assumimos que a aplicação de uma certa quantidade de dose do herbicida recomendado causa significantemente menos impactos que a aplicação da mesma quantidade de dose do herbicida alternativo. Consideramos que esta hipótese seja válida para qualquer quantidade de doses e em qualquer instante de tempo. Logo, temos que $I_1(t, \sum_{k=0}^t d(k)) < I_2(t, \sum_{k=0}^t d(k))$ para quaisquer $t \in \{d(k)\}_{k=0}^t$. A partir destas hipóteses, definimos o impacto ambiental incremental, como sendo a diferença entre o impacto causado por uma dada sequência de aplicação de herbicidas e o impacto causado pela aplicação apenas do herbicida recomendado. Lembrando que sempre há a aplicação de um dos herbicidas em cada ciclo e parcela, temos que a dose máxima de herbicidas aplicada até o instante $t \notin N(t+1)$. Com isto, o impacto ambiental incremental pode ser definido do seguinte modo,

$$I(t) = I_1\left(t, N(t+1) - \sum_{k=0}^t d_2(k)\right) + I_2\left(t, \sum_{k=0}^t d_2(k)\right) - I_1\left(t, N(t+1)\right).$$
(3.11)

Assumindo que a função $I_1(.)$ seja linear no segundo argumento, podemos escrever ainda,

$$I(t) = I_2\left(t, \sum_{k=0}^t d_2(k)\right) - I_1\left(t, \sum_{k=0}^t d_2(k)\right).$$
(3.12)

Entretanto, para tornar este indicador tangível, assumimos que as funções de impacto ambiental são dadas, simplesmente, pela somatória das quantidades de doses aplicadas de cada herbicida e que o herbicida recomendado causa impactos ambientais desprezíveis. Com isto, adotamos como impacto ambiental incremental, a somatória das doses do herbicida alternativo emprega-

das até o ciclo t, ou seja,

$$I(t) = \sum_{k=0}^{t} \sum_{\ell \in \mathscr{L}} \mathbb{1}_{\{u_{\ell}(k)=2\}},$$
(3.13)

sendo $\mathbb{1}_{\{.\}}$ a função indicadora definida em (1.4).

Potencial de propagação da resistência

Definimos como potencial de propagação da resistência o valor esperado da quantidade de alelo *A* que são exportados e obtêm sucesso reprodutivo ao longo de um certo horizonte de tempo. Assumimos que as sementes podem ser exportadas apenas quando não estão incorporadas ao solo, ou seja, enquanto não fazem parte do banco de sementes. Considerando o modelo apresentado no Capítulo 2, observamos que este período se estende do momento em que as sementes são geradas em um dado ciclo até o final deste mesmo ciclo, quando então são incorporadas ao banco de sementes e perdem a mobilidade. Assim, para ilustrar, em um dado ciclo *t* temos um total de $\sum_{\ell \in \mathscr{L}} \left(\mathbf{X}_{1,\ell}^g(t) + \mathbf{X}_{2,\ell}^g(t) \right)$ sementes resistentes com possibilidades de serem exportadas.

Para facilitar o cálculo do potencial mas sem prejudicar a significância deste indicador, assumimos que há apenas 4 eventos possíveis para uma dada semente com possibilidade de propagação: não ser exportada; ser exportada, não germinar e morrer; ser exportada, germinar e morrer antes de amadurecer; ou ser exportada, germinar, amadurecer e se reproduzir. Com isto, e assumindo que o processo de exportação seguido de sucesso reprodutivo segue um processo de Bernoulli, temos então que a quantidade de sementes resistentes que são exportadas e se reproduzem no ciclo *t*, denotada por $\kappa(t)$, pode ser obtida por,

$$\kappa(t) \sim \mathscr{B}\left(\sum_{i \in \{1,2\}} \left(\sum_{\ell \in \mathscr{L}} \mathbf{X}_{i,\ell}^g(t)\right), P(\mathscr{E})\delta\gamma(1-c)(1-\rho^e)\right),$$

em que $P(\mathscr{E})$ é a probabilidade de exportação de uma semente, ρ^e é a probabilidade de morte das plantas resistentes induzida pelo herbicida empregado no local de destino da semente, e δ , $\gamma \in c$ são como definidos na Seção 2.1. Logo, o potencial de propagação da resistência ao longo do horizonte [0,t], denotado por K(t), é dado por,

$$K(t) = P(\mathscr{E})\delta\gamma(1-c)(1-\rho^e)\sum_{k=0}^t \sum_{\ell\in\mathscr{L}} \left(2\mathbf{X}^g_{1,\ell}(k) + \mathbf{X}^g_{2,\ell}(k)\right).$$
(3.14)

3.2 Experimentos

Para avaliar os controladores, empregamos simulação de Monte Carlo em experimentos divididos em duas etapas, de modo semelhante ao descrito na Seção 2.2. Denotamos por $\{\mathbf{X}^{0,\omega_n}(t), -T_0 \leq t \leq 0\}$ a *n*-ésima realização de Monte Carlo obtida pelos experimentos da primeira etapa. Para obter cada realização, definimos como condição inicial em $-T_0$ um banco de sementes sem sementes resistentes e com 2200 sementes por metro quadrado e adotamos $u_{\ell}^{\omega_n}(t) = 2$, para todo $\ell \in \mathcal{L}$, $-T_0 \leq t \leq -1$ e $1 \leq n \leq M$. Lembrando que incluímos o sobrescrito 0 para destacar que não há efeito da pressão seletiva nestas realizações. Para simular os controladores, adotamos $\mathbf{X}^{u,\omega_n}(0) = \mathbf{X}^{\omega_n}(0)$, para todo $1 \leq n \leq M$, e geramos, para cada controlador, as realizações $\{\mathbf{X}^{u,\omega_n}(t), 0 \leq t \leq T\}$. Avaliamos os seguintes controladores: $u^{\text{obs};05}$, $u^{\text{obs};25}$, $u^{\text{obs};25}$, $u^{\text{obs};35}$, $u^{\text{csv},\infty}$ e $u^{\text{gul},\infty}$. Destacamos que outros controladores também foram estudados, por exemplo, $u^{\text{csv},1}$, $u^{\text{csv},5}$, $u^{\text{csv},50}$. No entanto, optamos por não inclui-los na discussão dos resultados uma vez que estes esquemas de rotação de herbicida quando *C* é relativamente baixo, produzem um maior impacto ambiental incremental em relação à $u^{\text{csv},\infty}$ sem melhoras significativas no indicador de produtividade, o que dificulta a sustentação destes controladores em relação aos demais sob a perspectiva de conservação ambiental adotada por este trabalho. Para referenciar este comentário, apresentamos no Apêndice 8.1 os resultados obtidos para o indicador de impacto ambiental para estes controladores.

Para os experimentos deste capítulo, adotamos M = 1000 realizações. Para a fase sem pressão seletiva, empregamos $T_0 = 1000$ e para as simulações com pressão seletiva, adotamos um horizonte T = 100. Para obter o potencial de propagação da resistência, empregamos $P(\mathscr{E}) = 10^{-5}$. Adotamos também os mesmos parâmetros apresentados pela Tabela 1. Porém, destacamos que nestes experimentos empregamos c = 0, 1 para que o custo adaptativo impactasse mais a evolução do banco de sementes, aumentando a taxa de queda da frequência do alelo A enquanto o herbicida auxiliar é aplicado. Com isto, permitimos que o herbicida recomendado pudesse ser escolhido com mais frequência pelos controladores com observação mesmo após estes optarem pelo uso do herbicida auxiliar. Entretanto, acreditamos que o valor adotado é condizente com a realidade. Para ilustrar, mencionamos dois trabalhos citados no artigo de revisão (VILA-AIUB; NEVE; POWLES, 2009). No primeiro, os autores registram que em um período de 2 anos uma população de Alopecurus myosuroides resistentes a um determinado herbicida produziu 36% menos biomassa que uma população de indivíduos susceptíveis (MENCHARI et al., 2008). No segundo os autores observaram um decréscimo de 26 a 34% no número de frutas por plantas dos biótipos resistentes em relação aos susceptíveis de Arabidopsis thaliana (BERGELSON et al., 1996).

Para estimar a perda de produtividade, empregamos os parâmetros definidos para a perda de produção de soja causada pela presença do picão-preto, obtidos por (RIZZARDI *et al.*, 2003). Neste trabalho os autores obtiveram $b = 1,58 \times 10^{-2}$, $a = 4,83 \times 10^{-1}$ e $H^0 = 6580$ kg. A Figura 7 ilustra o comportamento da função $L_{\ell}(t)$ para estes parâmetros.



Figura 7 - Perda de produção em função da densidade de plantas daninhas adultas para uma parcela com 2 ha.

Nestes experimentos, consideramos uma área produtiva com 18 *ha* dividida em 9 parcelas ¹ quadradas de tamanhos iguais, de modo que $F_{\ell} = 2 \times 10^4 m^2$, para todo $\ell \in \mathcal{L}$, ou seja, cada parcela tem aproximadamente 140 *m* de largura. A disposição destas parcelas é análoga a um tabuleiro de xadrez. Assim, associamos os rótulos $i \in \{1, 2, 3\}$ e $j \in \{1, 2, 3\}$ como indicadores do número da linha e coluna de cada parcela neste tabuleiro. Os rótulos das linhas crescem de cima para baixo, enquanto os rótulos das colunas, da esquerda para a direita. Desta forma, dado os rótulos de linha e coluna da parcela, podemos obter o valor de ℓ calculando $\ell = 3(j-1) + i$.

Para definir as probabilidades de dispersão das sementes entre as parcelas empregamos uma distribuição normal bivariada com variáveis independentes que representam coordenadas cartesianas. Logo, a probabilidade de dispersão de uma semente gerada na parcela ℓ se depositar na parcela *m*, denotada por $P(\mathcal{D}_{\ell,m})$, foi obtida por,

$$P(\mathscr{D}_{\ell,m}) = \int_{x_m^{\inf}}^{x_m^{\sup}} \int_{y_m^{\inf}}^{y_m^{\sup}} \frac{1}{2\pi\sigma_x\sigma_y} e^{\left(-\frac{1}{2}\left(\frac{x-x_\ell^2}{\sigma_x^2} + \frac{y-y_\ell^2}{\sigma_y^2}\right)\right)} dy \, dx, \tag{3.15}$$

sendo que a média da distribuição é dada pela coordenada do ponto central da parcela ℓ , obtida por $x_{\ell}^c = \frac{x_{\ell}^{\sup} - x_{\ell}^{\inf}}{2}$ e $y_{\ell}^c = \frac{y_{\ell}^{u} - y_{\ell}^{\inf}}{2}$, e os limitantes de integração são as coordenadas dos vértices da parcela *m*, dados por $x_m^{\inf} = (j_m - 1)\sqrt{F_m}$, $x_m^{\sup} = j_m\sqrt{F_m}$, $y_m^{\inf} = \sqrt{F} - i_m\sqrt{F_m}$ e $y_m^{\sup} = \sqrt{F} - (i_m - 1)\sqrt{F_m}$, em que *F* é definido como a área total, ou seja, $F = \sum_{\ell \in \mathscr{L}} F_{\ell}$. Os rótulos de coluna e linha da parcela *m* podem ser obtidos, respectivamente, por $j_m = \lfloor m/3 \rfloor + 1$ e $i_m = m - 3(j_m - 1)$.

Para definir as probabilidades de dispersão adotamos $\sigma_x = \sigma_y = 300$ metros e normalizamos os valores obtidos para obter $\sum_{m \in \mathscr{L}} P(\mathscr{D}_{\ell,m}) = 1$, de modo que as sementes geradas sejam todas dispersadas no interior da área, em concordância com a hipótese de que a área é fechada. As matrizes D^{ℓ} abaixo apresentam as probabilidades de dispersão obtidas relativas às

¹ O relativamente baixo número de parcelas que adotamos para os estudos do Capítulo 3, 4 e 5, se deve à dificuldade que verificamos para implementar o filtro de Kalman estendido para um número maior de parcelas. Os detalhes desta dificuldade são apresentados no Capítulo 4. Ressaltamos porém, que esta dificuldade pode ser contornada, por exemplo, com o uso de técnicas de computação paralela.

às parcelas $\ell \in \{1, 2, 5\}$, em porcentagem. Os elementos destas matrizes estão associados às probabilidades de dispersão do seguinte modo, dados ℓ e *m*, então $D_{i_m,j_m}^{\ell} = P(\mathcal{D}_{\ell,m})$. Para ilustrar, observamos que há uma probabilidade de aproximadamente 64,5% de que uma semente gerada pela parcela $\ell = 5$ seja incorporada ao banco desta mesma parcela, e quase 1% e 8%, respectivamente, de que seja dispersada para uma parcela disposta diagonalmente ($m \in \{1,3,7,9\}$) ou lateralmente ($m \in \{2,4,6,8\}$). Note que, dada a simetria do problema, as probabilidades de dispersão das demais parcelas podem obtidas pelas matrizes apresentadas. Assim, os parâmetros de $l \in \{3,7,9\}$, podem ser obtidos a partir de D^1 , e os parâmetros de $l \in \{4,6,8\}$, podem ser obtidos a partir de D^2 .

$$\mathbf{D}^{1} = \begin{bmatrix} 79,38 & 9,71 & 0\\ 9,71 & 1,19 & 0\\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}; \quad \mathbf{D}^{2} = \begin{bmatrix} 8,76 & 1,07 & 0\\ 71,58 & 8,76 & 0\\ 8,76 & 1,07 & 0 \end{bmatrix}; \quad \mathbf{D}^{5} = \begin{bmatrix} 0,97 & 7,90 & 0,97\\ 7,90 & 64,54 & 7,90\\ 0,97 & 7,90 & 0,97 \end{bmatrix}.$$

3.3 Resultados e discussão

As realizações de cada controlador convencional demandaram aproximadamente 10,5 minutos para serem geradas. Já as realizações dos controladores com observação do banco demandaram aproximadamente 7,5 minutos para cada controlador. Na sequência, apresentamos resultados relacionados com a *dinâmica do ciclo de vida* das plantas daninhas e com os *indicadores* que definimos para avaliar os controladores. Primeiro, apresentamos figuras referentes à evolução da densidade do total de sementes no banco, frequência do alelo A no banco de sementes, densidade de plantas adultas e frequência do alelo A no conjunto de plantas adultas. Estas figuras apresentam as trajetórias da parcela central da área de estudos ($\ell = 5$) associadas às realizações $1 \le n \le 30$ das simulações de Monte Carlo. Após, apresentamos algumas figuras e tabelas para avaliar a eficiência do herbicida ao longo do tempo, a perda de produtividade, o impacto ambiental incremental e potencial de propagação da resistência.

Dinâmica do ciclo de vida

A Figura 8 apresenta a densidade do total de sementes no banco ao longo dos ciclos. Podemos notar que para as estratégias de controle conservadora e gulosa, algumas trajetórias apresentam rápida ascensão, ultrapassando 3000 sementes por metro quadrado. Este aumento do número de sementes está associado ao aumento do número de indivíduos resistentes e consequente diminuição da eficiência do herbicida recomendado. Os picos destas trajetórias revelam o momento em que a resistência é identificada em campo e, consequentemente, o instante em que o controlador define pelo uso do herbicida alternativo. A partir de então, a quantidade de sementes tende a diminuir e retornar ao seu estado original. Por outro lado, note que as estratégias de controle com observação do banco de sementes mantêm a densidade do banco oscilando próximo à média das condições iniciais, não permitindo um aumento semelhante ao observado pelos controladores convencionais.

A Figura 9 apresenta as trajetórias para a frequência do alelo *A* no banco de sementes. Podemos notar que os controladores convencionais permitem um aumento da frequência do alelo *A* consideravelmente maior que as demais estratégias. Note que o controlador conservador apresenta uma frequência menor de trajetórias que ultrapassam o valor de 0,4 que o controlador guloso. Isto ocorre pois o controlador conservador emprega uma estratégia mais drásticas que o controlador guloso, de modo que quando a resistência é identificada nas parcelas da borda, o herbicida alternativo passa a ser aplicado em toda a área, inibindo assim o aumento da resistência também na parcela $\ell = 5$. Com relação aos controladores com observação do banco de sementes, note que, como esperado, quanto menor o limiar β adotado, menor são os valores dos picos da frequência do alelo *A* do banco de sementes. A partir destas trajetórias é possível observar também a ação destes controladores. Do início da trajetória até o primeiro pico, os controladores definem pelo uso do herbicida recomendado. Após, enquanto as curvas estão descendendo, o herbicida alternativo está sendo aplicado, e quando as curvas passam a ascender novamente, significa que o herbicida recomendado voltou a ser aplicado.

A Figura 10 apresenta as trajetórias para a densidade de plantas adultas. Note que os controladores conservadores permitem um aumento súbito do número de plantas, enquanto os controladores com observação do banco de sementes restringem significantemente estes aumentos. Em particular para $u_{\ell}^{\text{obs};05}$, nem é possível notar visualmente estes aumentos. Como apresentamos na Seção 3.1, esta variável está intimamente relacionada com a perda de produtividade, de modo que podemos esperar maiores perdas pelos controladores convencionais seguidos dos controladores com observação do banco de sementes e limiares maiores.

A Figura 11 apresenta frequência do alelo *A* no conjunto de plantas adultas. A estimativa desta variável está intimamente relacionada com o limiar β definido para os controladores com observação do banco de sementes, em (3.2). As linhas tracejadas dos gráficos apresentam o valor de $\beta/100$ adotado para cada controlador. Note que, dada a estocasticidade da dinâmica, algumas curvas ultrapassam os limiares estabelecidos para cada controlador. Porém, é possível notar nitidamente o efeito do limiar para a contenção da emergência destas variáveis.







Figura 9 – Frequência do alelo A no banco de sementes para as realizações $1 \le n \le 30$.







Figura 11 – Frequência do alelo A no conjunto de plantas adultas para as realizações $1 \le n \le 30$. As curvas tracejadas se referem aos limiares $\beta/100$ adotados pelos controladores.

Indicadores

A Figura 12 apresenta o valor médio da quantidade de doses do herbicida recomendado empregada em toda a área produtiva ao longo do tempo, obtida por $M^{-1} \sum_{n=1}^{M} \sum_{\ell \in \mathscr{L}} \mathbb{1}_{\{u_{\ell}^{\omega_n}(t)=1\}}$. Cabe observar que a quantidade máxima de doses por ciclo é de 9 unidades uma vez que a área de estudo é dividida em 9 parcelas. Podemos notar que em torno do vigésimo ciclo a média de doses empregadas do herbicida recomendado começa a diminuir, pois é o momento em torno do qual os controladores começam a sugerir a troca de herbicida em algumas realizações, principalmente os controladores com observação do banco de sementes e limiares menores. Note que pouco antes do ciclo t = 50 as curvas referentes às estratégias $CSV \propto e GUL \propto já$ se apresentam nitidamente abaixo da demais.



Figura 12 – Valor médio da quantidade de doses do herbicida recomendado empregada em toda a área produtiva ao longo do tempo.

A Tabela 2 apresenta a média e o desvio padrão da quantidade de doses do herbicida recomendado empregada em todo o horizonte, ou seja, obtidas para as seguintes amostras, $\left\{\sum_{t=0}^{T} \sum_{\ell \in \mathscr{L}} \mathbb{1}_{\left\{u_{\ell}^{\textit{on}}(t)=1\right\}}\right\}_{\{1 \leq n \leq M\}}$. Note que os controladores com observação do banco de sementes empregam uma quantidade média de doses ligeiramente superior aos demais. Isto ocorre pois, apesar dos controladores com observação do banco de sementes, de modo geral, anteciparem a troca de herbicida, podem voltar a aplicar o herbicida recomendado, como observamos na apresentação da Figura 9. Este controladores apresentaram também um desvio padrão bastante inferior aos demais, com destaque para o controlador **OBS 25** que obteve a maior média e o menor desvio padrão dentre todos.

A Figura 13 apresenta o valor médio da eficiência do herbicida recomendado ao longo do tempo, obtido por $M^{-1}\sum_{n=1}^{M} N^{-1}\sum_{\ell \in \mathscr{L}} E_{\ell}^{\omega_n}(t)$. Podemos observar que os controladores com observação do banco de sementes, apesar de empregarem ligeiramente mais o herbicida recomendado, provocam menor diminuição na eficiência do herbicida recomendado ao longo do tempo em comparação com os controladores convencionais.

A Tabela 3 apresenta a média e o desvio padrão da eficiência do herbicida recomendado no final do horizonte, ou seja, obtidos para as amostras $\{N^{-1}\sum_{\ell \in \mathscr{L}} E_{\ell}^{\omega_n}(T)\}_{\{1 \le n \le M\}}$. Podemos

Tabela 2 – Valor médio e desvio padrão da quantidade de doses empregada do herbicida recomendado acumulada ao longo do período [0,T]. A terceira e quarta linha apresentam os valores relativos aos obtidos pela estratégia **CSV**, ∞ .

	CSV ∞	$\text{GUL} \sim$	OBS 05	OBS 15	OBS 25	OBS 35
Média	759,2	761,5	772,7	781,4	793	789,4
Desvio	221,9	209,4	201,7	198,4	182,9	188,3
Média (%)	0	0,2919	1,77	2,916	4,453	3,971
Desvio (%)	0	-5,62	-9,125	-10,59	-17,6	-15,15

notar que os controladores com observação do banco de sementes apresentaram uma média de eficiência significantemente maior que os controladores convencionais. Além disto, apresentam um desvio padrão bastante inferior para esta variável, com destaque para o controlador **OBS 05** que obteve um desvio padrão aproximadamente 91% menor que que o controlador **CSV** ∞ .



Figura 13 - Valor médio da eficiência do herbicida recomendado ao longo do tempo.

Tabela 3 – Valor médio e desvio padrão da eficiência do herbicida recomendado no final do horizonte. A terceira e quarta linha apresentam os valores relativos aos obtidos pela estratégia CSV ∞.

	CSV ∞	$\text{GUL} \sim$	OBS 05	OBS 15	OBS 25	OBS 35
Média	0,799	0,7758	0,84	0,8325	0,822	0,8115
Desvio	0,06604	0,09522	0,006126	0,01675	0,0307	0,04598
Média (%)	0	-2,9	5,134	4,193	2,882	1,567
Desvio (%)	0	44,17	-90,72	-74,64	-53,51	-30,38

A Figura 14 apresenta a evolução da perda média de produtividade ao longo dos ciclos, obtida por $M^{-1}\sum_{n=1}^{M}\sum_{\ell \in \mathscr{L}} H^0 L_{\ell}^{\omega_n}(t)$. Podemos notar que o controlador guloso apresentou a maior perda média a cada ciclo, seguido do controlador conservador e dos controladores com observação do banco de sementes e limiares maiores. A Figura 15 também apresenta informações sobre as realizações da perda de produtividade. Os gráficos são apresentados na forma de *boxplot*, um tipo de gráfico bastante utilizado para avaliar visualmente a distribuição de um conjunto de amostras. Em cada uma das caixas apresentadas, o traço interior indica a mediana das amostras, enquanto que os limites inferiores e superiores das caixas nos revelam o 25-ésimo e



Figura 14 - Valor médio da perda de produção ao longo do tempo.



Figura 15 – *Boxplot* da perda de produtividade por ciclo (gráfico à esquerda) e da perda de produtividade acumulada ao longo do período [0, T] (gráfico à direita).

75-ésimo percentis, que denotamos por p_{25} e p_{75} , respectivamente. As linhas tracejadas acima e abaixo da caixa são também conhecidas como bigodes, suas extremidades marcam os valores extremos das amostras desprezando os *outliers*. Os *outliers*, apresentados pelas cruzes em vermelho, são definidos como as amostras maiores que $p_{75} + 1,5(p_{75} - p_{25})$ ou menores que $p_{25} - 1,5(p_{75} - p_{25})$. O gráfico à esquerda da Figura 15 apresenta o *boxplot* das amostras da perda total para cada ciclo em cada realização, definidas por $\{\sum_{\ell \in \mathscr{L}} H^0 L_{\ell}^{\omega_n}(t)\}_{\{0 \le t \le T; \ 1 \le n \le M\}}$. Neste gráfico fica pouco notável a diferença entre entre a mediana e os percentis obtidos para cada estratégia de controle. No entanto podemos observar que os controladores com observação do banco de sementes contêm significantemente mais as perdas extremas, reveladas pelos *outliers* superiores, em comparação com os controladores convencionais. O gráfico à direita da Figura 15 apresenta o *boxplot* das amostras da perda acumulada ao longo do horizonte, definidas por $\{\sum_{t=0}^{T} \sum_{\ell \in \mathscr{L}} H^0 L_{\ell}^{\omega_n}(t)\}_{\{1 \le n \le M\}}$. Neste gráfico podemos observar que as medianas e as variações das perdas dos controladores com observação do banco de sementes são menores que as dos demais controladores.

A Tabela 4 apresenta o valor médio e o desvio padrão da perda total acumulada no final

do horizonte, obtidos para as amostras $\{\sum_{t=0}^{T} \sum_{\ell \in \mathscr{L}} H^0 L_{\ell}^{\omega_n}(t)\}_{\{1 \le n \le M\}}$. Estes valores estão em acordo com as observações feitas para a Figura 15. A média das perdas dos controladores com observação do banco de sementes são menores que as dos demais controladores. Além disto, possuem variância menores que os demais controladores. Cabe destacar que o controlador **GUL** ∞ obteve os piores resultados tanto em relação à média quanto em relação ao desvio padrão considerando todos os controladores.

Tabela 4 – Valor médio e desvio padrão da perda total acumulada ao longo do período [0,T]. A terceira e quarta linha apresentam os valores relativos aos obtidos pela estratégia **CSV** ∞ .

	$\mathbf{CSV} \propto$	$\text{GUL} \sim$	OBS 05	OBS 15	OBS 25	OBS 35
Média (ton)	221,9	227,7	213,8	214,8	216,7	218,2
Desvio (ton)	14,61	21,43	8,257	8,921	9,52	11,76
Média (%)	0	2,584	-3,645	-3,227	-2,366	-1,691
Desvio (%)	0	46,65	-43,49	-38,94	-34,84	-19,54

A Figura 16 apresenta o valor médio do impacto ambiental incremental ao longo do tempo, obtido por $M^{-1} \sum_{n=1}^{M} I^{\omega_n}(t)$. Apesar das curvas aparecerem próximas umas das outras, notamos que até o ciclo t = 55, aproximadamente, o controlador **OBS 05** é o que causa mais impacto dentre todos. A partir de então, podemos observar que os controladores convencionais se destacam como os maiores causadores de impacto, sendo que o controlador **CSV** ∞ apresentou um impacto ligeiramente maior que **GUL** ∞ . Observamos também que a partir de t = 55 o controlador **OBS 05** causa mais impacto ao longo do tempo que os demais controladores com observação, seguido de **OBS 15** e **OBS 35**, de modo que o controlador **OBS 25** é o que causa o menor impacto ambiental neste período.



Figura 16 - Valor médio do impacto ambiental incremental ao longo do tempo.

A Tabela 5 apresenta o valor médio e o desvio padrão do impacto ambiental incremental no final do horizonte, obtidos pelas amostras, $\{I^{\omega_n}(T)\}_{\{1 \le n \le M\}}$. Podemos notar que os controladores com observação do banco de sementes apresentaram menores média e desvios que os demais. Destacamos o controlador **OBS 25** que apresentou o menor valor médio e desvio padrão dentre todos.

Tabela 5 – Valor médio e desvio padrão do impacto ambiental incremental em t = T. A terceira e quarta linha apresentam os valores relativos aos obtidos pela estratégia **CSV** ∞ .

	CSV ∞	$\text{GUL} \sim$	OBS 05	OBS 15	OBS 25	OBS 35
Média	140,8	138,5	127,3	118,6	107	110,6
Desvio	221,9	209,4	201,7	198,4	182,9	188,3
Média (%)	0	-1,574	-9,547	-15,73	-24,02	-21,42
Desvio (%)	0	-5,62	-9,125	-10,59	-17,6	-15,15

A Tabela 6 apresenta um indicador bastante interessante para avaliarmos conjuntamente os benefícios produtivos gerados pela estratégia de controle e os malefícios causados em função dos impactos ambientais. Este índice é dado pela relação entre produção total média e impacto ambiental incremental médio, obtido por $(M^{-1}\sum_{n=1}^{M}\sum_{t=0}^{T}\sum_{\ell\in\mathscr{L}}H_{\ell}^{\omega_n}(t))/(M^{-1}\sum_{n=1}^{M}I^{\omega_n}(T))$. Podemos notar que os controladores com observação do banco de sementes apresentaram melhores resultados que os demais, com destaque para o controlador **OBS 25** que apresentou um valor 31.73% superior ao obtido por **CSV** ∞ . Notamos também que apesar do controlador **GUL** ∞ apresentar maiores perdas de produtividade que o controlador **CSV** ∞ , apresenta melhor relação de produtividade por impacto ambiental gerado.

Tabela 6 – Produtividade média acumulada ao longo do período [0,T] em relação ao impacto ambiental médio em t = T. A segunda linha apresenta os valores relativos aos obtidos pela estratégia **CSV** ∞ .

	CSV ∞	$\text{GUL} \sim$	OBS 05	OBS 15	OBS 25	OBS 35
Média (ton/doses)	40,5	41,1	44,83	48,11	53,35	51,57
Média (%)	0	1,497	10,71	18,81	31,73	27,34

Apresentamos na Figura 17 gráficos relativos à quantidade de alelo *A* gerado pelo uso dos controladores. O gráfico à esquerda apresenta o valor médio para a densidade de alelo *A* gerado ao longo do tempo, dado por, $M^{-1} \sum_{n=1}^{M} \left(\sum_{\ell \in \mathscr{L}} \left(2 \mathbf{X}_{1,\ell}^{g,\omega_n}(t) + \mathbf{X}_{2,\ell}^{g,\omega_n}(t) \right) / \sum_{\ell \in \mathscr{L}} F_{\ell} \right)$. Já o gráfico à direita apresenta um *boxplot* da densidade de alelo *A* acumulada ao longo do tempo, obtido a partir das amostras, $\left\{ \sum_{t=0}^{T} \left(\sum_{\ell \in \mathscr{L}} \left(2 \mathbf{X}_{1,\ell}^{g,\omega_n}(t) + \mathbf{X}_{2,\ell}^{g,\omega_n}(t) \right) / \sum_{\ell \in \mathscr{L}} F_{\ell} \right) \right\}_{\{1 \le n \le M\}}$. Estes gráficos nos indicam que os controladores com observação do banco de sementes conseguem conter a geração do alelo *A* de modo mais efetivo que os demais controladores. Observando o gráfico à esquerda, observamos que a densidade média dos alelos gerados por estes controladores res é bastante inferior aos demais, enquanto o *boxplot* nos indica que a variação da densidade acumulada é também bastante inferior. Com destaque para o controlador **GUL** ∞ que apresentou o pior resultado dentre todos.

A Tabela 7 nos apresenta o valor médio do potencial de propagação da resistência, obtido por, $M^{-1}\sum_{n=1}^{M} K^{\omega_n}(T)$. A primeira linha apresenta o valor deste potencial para $\rho^e = \rho^R$, caso em que as áreas de destino das sementes estejam aplicando o herbicida recomendado. Já a segunda linha, apresenta o potencial para $\rho^e = \rho$, quando a área de destino aplica o herbicida alternativo. Podemos notar que as estratégias de controle com observação do banco de sementes apresentam um potencial de propagação muito menor que o observado pelos demais controladores, com destaque para o controlador **OBS 05**, que apresentou o menor índice dentre todos. Destacamos também os resultados obtidos pelo controlador **GUL** ∞ que obteve um potencial 62% maior que o obtido pelo controlador **CSV** ∞ . Um outro ponto de destaque é expressiva dependência do potencial de propagação em relação ao herbicida empregado na área de destino. Quando o herbicida alternativo está sendo aplicado, temos uma probabilidade 77,64% menor do alelo *A* se propagar que quando o herbicida recomendado está sendo aplicado.



Figura 17 – Densidade de alelo A produzido por reprodução ao longo do tempo (gráfico à esquerda) e acumulado ao longo do horizonte [0, T] (gráfico à direita).

Em resumo, considerando apenas os valores médios apresentados nas tabelas, observamos que o controlador GUL ∞ apresentou os piores resultados em relação aos indicadores de eficiência, perdas de produtividade e potencial de propagação da resistência. O controlador CSV ∞ apresentou os piores resultado em relação aos indicadores de impacto ambiental no final do horizonte e produtividade por impacto no final do horizonte. Já o controlador OBS 05 apresentou os melhores resultados em relação aos indicadores de eficiência do herbicida, perdas de produtividade e potencial de propagação da resistência, e controlador OBS 25 apresentou os melhores resultados em relação aos indicadores teóricos com observação do banco de sementes podem produzir melhores resultados que os controladores convencionais.

Tabela 7 – Potencial de propagação da resistência em t = T. As duas primeiras linhas apresentam, respectivamente, os valores quando a área de destino emprega o herbicida recomendado e o herbicida alternativo. A terceira linha apresenta os valores relativos aos obtidos pela estratégia **CSV** ∞ .

	CSV ∞	$\text{GUL} \sim$	OBS 05	OBS 15	OBS 25	OBS 35
Propagação / $u^e = 1$	50	81,08	3,298	9,581	16,66	26,98
Propagação / $u^e = 2$	11,18	18,13	0,7374	2,142	3,724	6,032
Propagação (%)	0	62,17	-93,4	-80,84	-66,69	-46,03

CAPÍTULO 4

FILTRO DE KALMAN PARA O BANCO DE SEMENTES

Uma das preocupações no desenvolvimento deste trabalho foi sugerir controladores que possam ser implementados na prática, o que não é verificado para os controladores com observação do banco de sementes, avaliados no Capítulo 3. Para torna-los implementáveis, é necessário substituir o uso da observação do banco de sementes por estimativas do banco de sementes que sejam, por sua vez, fundamentadas em informações possíveis de serem obtidas na prática. Neste capítulo, avaliamos o uso do filtro de Kalman estendido como estimador do banco de sementes. O filtro emprega como informação a quantidade de plantas daninhas adultas em cada parcela, uma informação possível de ser obtida, seja pelo uso de técnicas de sensoriamento remoto (THORP; TIAN, 2004) ou por levantamentos de campo feitos por um especialista.

O filtro de Kalman estendido (FKE) é uma adaptação para sistemas dinâmicos não lineares do filtro de Kalman clássico (KALMAN, 1960), definido para sistemas lineares. O termo FKE é relacionado, de modo geral, a aproximações por expansão de série de Taylor de primeira ordem, ou seja, expansões lineares. Assim, a cada instante de tempo, aproximações lineares para as equações do sistema são obtidas e o algoritmo padrão do filtro de Kalman clássico é empregado. O algoritmo do FKE para sistemas discretos no tempo é bastante conhecido e pode ser obtido, por exemplo, de (RISTIC; ARULAMPALAM; GORDON, 2004). Para apresenta-lo, considere primeiramente um sistema dinâmico não linear e discreto no tempo, definido pelo seguinte conjunto de equações, para todo $t \ge t_0$,

$$\begin{aligned} \mathbf{X}(t+1) &= f\Big(\mathbf{X}(t), u(t), \mathbf{V}(t)\Big), \\ \mathbf{Z}(t) &= h\Big(\mathbf{X}(t), u(t), \mathbf{W}(t)\Big), \end{aligned}$$

em que $X(t_0) = \check{X} \in \mathbb{R}^{N_X}$ é a condição inicial do sistema, $X(t) \in \mathbb{R}^{N_X}$ é o vetor de estado, $Z(t) \in \mathbb{R}^{N_Z}$ é o vetor de saída do sistema, também interpretado como a variável de informação utilizada pelo filtro, $u(t) \in \mathbb{R}^{N_u}$ é o vetor de controle, $V(t) \in \mathbb{R}^{N_V}$ é o vetor de ruído do estado, definido como gaussiano com média zero e covariância dada por $Q(t) \in \mathbb{R}^{N_V,N_V}$, e $W(t) \in \mathbb{R}^{N_W}$ é o vetor de ruído da saída, definido como gaussiano com média zero e covariância dada por $R(t) \in \mathbb{R}^{N_W,N_W}$. As funções $f : \mathbb{R}^{N_X} \times \mathbb{R}^{N_u} \times \mathbb{R}^{N_V} \to \mathbb{R}^{N_X}$, denominada função de transição, e $h : \mathbb{R}^{N_X} \times \mathbb{R}^{N_u} \times \mathbb{R}^{N_w} \to \mathbb{R}^{N_Z}$, denominada função de observação, são funções não-lineares e diferenciáveis em relação às variáveis X(t), V(t) e W(t). Como veremos adiante, para o problema em questão, a variável de estado será associada ao banco de sementes, e a variável de saída será associada com a quantidade de plantas daninhas adultas em cada parcela.

Com o uso do FKE, é possível obter estimativas para a variável de estado do sistema, denotada por $\widehat{X}(t)$, e também estimativas para a covariância do erro de estimação da variável de estado, denotada por $\widehat{P}(t)$, que também podem ser interpretadas como uma estimativa da "confiabilidade" de $\widehat{X}(t)$. Estas estimativas são obtidas em duas etapas. Na primeira, denominada etapa de *previsão*, as estimativas são calculadas considerando apenas as informações disponíveis nos ciclos de 0 a t-1. Já na segunda etapa, denominada etapa de *atualização*, as estimativas são atualizadas considerando também as observações disponíveis em t. Mais precisamente, o filtro calcula $\widehat{X}(t|\mathscr{Z}^{t-1}) \in \mathbb{R}^{N_X}$ e $\widehat{P}(t|\mathscr{Z}^{t-1}) \in \mathbb{R}^{N_X,N_X}$, na fase de previsão, e $\widehat{X}(t|\mathscr{Z}^t) \in \mathbb{R}^{N_X}$ e $\widehat{P}(t|\mathscr{Z}^t) \in \mathbb{R}^{N_X,N_X}$ na fase de atualização, sendo, $\mathscr{Z}^t = \left\{Z(t_0), Z(t_0+1), \dots, Z(t)\right\}$, para $t \ge t_0$.

O algoritmo do FKE parte das estimativas $\widehat{X}(t_0|\mathscr{Z}^{t_0-1}) \in \widehat{P}(t_0|\mathscr{Z}^{t_0-1})$, assumidas como dadas, e as atualiza empregando a informação $Z(t_0)$, obtendo $\widehat{X}(t_0|\mathscr{Z}^{t_0}) \in \widehat{P}(t_0|\mathscr{Z}^{t_0})$, a partir destas, produz as previsões $\widehat{X}(t_0+1|\mathscr{Z}^{t_0}) \in \widehat{P}(t_0+1|\mathscr{Z}^{t_0})$, e as atualiza empregando a informação $Z(t_0+1)$, para obter $\widehat{X}(t_0+1|\mathscr{Z}^{t_0+1}) \in \widehat{P}(t_0+1|\mathscr{Z}^{t_0+1})$. Então o algoritmo repete as etapas de previsão e atualização a cada ciclo. Para obter as estimativas de *previsão*, emprega-se as equações seguintes,

$$\widehat{X}(t|\mathscr{Z}^{t-1}) = f\Big(\widehat{X}(t-1|\mathscr{Z}^{t-1}), u(t-1), 0\Big),$$
(4.1)

$$\widehat{\mathbf{P}}(t|\mathscr{Z}^{t-1}) = \widehat{\mathbf{F}}(t-1)\widehat{\mathbf{P}}(t-1|\mathscr{Z}^{t-1})\widehat{\mathbf{F}}(t-1)^T + \widehat{\mathbf{L}}(t-1)\widehat{\mathbf{Q}}(t-1)\widehat{\mathbf{L}}(t-1)^T, \quad (4.2)$$

em que 0 é um vetor nulo de dimensões apropriadas, e $\widehat{F}(t-1) \in \mathbb{R}^{N_X,N_X}$ e $\widehat{L}(t-1) \in \mathbb{R}^{N_X,N_V}$ são funções Jacobianas de *f*, definidas por,

$$\widehat{\mathbf{F}}(t-1) = \left[\frac{\partial f}{\partial \mathbf{X}_1} \dots \frac{\partial f}{\partial \mathbf{X}_{N_X}} \right] \Big|_{\mathbf{X} = \widehat{\mathbf{X}}(t-1|\mathscr{Z}^{t-1}); u = u(t-1); \mathbf{V} = 0},$$
(4.3)

$$\widehat{\mathbf{L}}(t-1) = \left[\frac{\partial f}{\partial \mathbf{V}_1} \dots \frac{\partial f}{\partial \mathbf{V}_{N_V}} \right] \Big|_{\mathbf{X} = \widehat{\mathbf{X}}(t-1|\mathscr{Z}^{t-1}); u = u(t-1); \mathbf{V} = 0}.$$
(4.4)

Já as estimativas obtidas na etapa de atualização são obtidas por

$$\widehat{\mathbf{X}}(t|\mathscr{Z}^{t}) = \widehat{\mathbf{X}}(t|\mathscr{Z}^{t-1}) + \widehat{\mathbf{K}}(t) \Big(\mathbf{Z}(t) - h\Big(\widehat{\mathbf{X}}(t|\mathscr{Z}^{t-1}), u(t), 0\Big) \Big),$$
(4.5)

$$\widehat{\mathbf{P}}(t|\mathscr{Z}^{t}) = \widehat{\mathbf{P}}(t|\mathscr{Z}^{t-1}) - \widehat{\mathbf{K}}(t)\widehat{\mathbf{S}}(t)\widehat{\mathbf{K}}(t)^{T}, \qquad (4.6)$$

em que $\widehat{K}(t) \in \mathbb{R}^{N_X,N_Z}$ é a matriz de ganho do filtro e $S(t) \in \mathbb{R}^{N_Z,N_Z}$ é a matriz de covariância estimada pelo filtro para a variável de saída, obtidas por,

$$\widehat{\mathbf{S}}(t) = \widehat{\mathbf{H}}(t)\widehat{\mathbf{P}}(t|\mathscr{Z}^{t-1})\widehat{\mathbf{H}}(t)^T + \widehat{\mathbf{M}}(t)\mathbf{R}(t)\widehat{\mathbf{M}}(t)^T, \qquad (4.7)$$

$$\widehat{\mathbf{K}}(t) = \widehat{\mathbf{P}}(t|\mathscr{Z}^{t-1})\widehat{\mathbf{H}}(t)^T \widehat{\mathbf{S}}(t)^{-1}, \qquad (4.8)$$

sendo $\widehat{\mathbf{H}}(t) \in \mathbb{R}^{N_Z, N_X}$ e $\widehat{\mathbf{M}}(t) \in \mathbb{R}^{N_Z, N_W}$ funções Jacobianas de *h*, definidas por,

$$\widehat{\mathbf{H}}(t) = \left[\frac{\partial h}{\partial \mathbf{X}_1} \dots \frac{\partial h}{\partial \mathbf{X}_{N_X}} \right] \Big|_{\mathbf{X} = \widehat{\mathbf{X}}(t \mid \mathscr{Z}^{t-1}); u = u(t); \mathbf{W} = 0},$$
(4.9)

$$\widehat{\mathbf{M}}(t) = \left[\frac{\partial h}{\partial \mathbf{W}_1} \dots \frac{\partial h}{\partial \mathbf{W}_{N_W}} \right] \Big|_{\mathbf{X} = \widehat{\mathbf{X}}(t \mid \mathscr{Z}^{t-1}); u = u(t); \mathbf{W} = 0}$$
(4.10)

FKE para a dinâmica do banco de sementes

Para obter o modelo do filtro associado à dinâmica do banco de sementes, precisamos primeiramente definir as variáveis de estado e de saída, como também as funções de transição e de observação. Para definir a função de observação, consideramos uma função da quantidade de plantas daninhas adultas presentes em cada parcela, do seguinte modo,

$$Z_{\ell}(t) = \mathbf{y}_{\ell}^{a}(t) \left(1 + \phi_{\ell} g_{\ell}^{z}(t) \right)$$
(4.11)

sendo $g_{\ell}^{z}(t) \sim \mathcal{N}(0,1)$ o ruído da observação e ϕ_{ℓ} um parâmetro de ajuste do impacto do ruído na observação. Cabe destacar, que optamos por incluir ruído na função de observação pois admitimos que na prática a obtenção da informação sobre quantidade de plantas adultas está sujeita a erros de medida.

O algoritmo padrão do FKE demanda que as funções f e h sejam diferenciáveis e que os ruídos sejam gaussianos. Note que a função de observação definida em (4.11) está de acordo com estes requisitos. No entanto, o modelo original apresentado no Capítulo 2 não define uma função de transição diferenciável e tampouco a aleatoriedade está associada a ruídos gaussianos. Diante disto, para definir a função f, consideramos um modelo auxiliar para a dinâmica do banco de sementes, que denominamos *modelo aproximado*. Este modelo foi construído diretamente do modelo original substituindo-se as distribuições binomiais e multinomiais por distribuições normais univariadas e multivariadas, respectivamente, com mesma média e covariância. Para ilustrar, considere a equação da quantidade de sementes que germinaram no ciclo t, dada por (2.2). Considere também uma variável aleatória auxiliar, $X^{aux} \in \mathbb{R}^{3,N}$, dada por $X_{i,\ell}^{aux}(t) \sim \mathscr{B}(X_{i,\ell}(t), \delta)$, em que $X_{i,\ell}(t)$ é a quantidade de sementes do tipo i, presentes na parcela ℓ , no início do ciclo t. Então, para o modelo aproximado, a quantidade de sementes que germinarem t, é dada por $X_{i,\ell}^{\delta}(t) \sim \mathscr{N}\left(\mathscr{E}\{X_{i,\ell}^{aux}(t)\}, \mathscr{E}\{X_{i,\ell}^{aux}(t)\}\right)$. Mas observe que podemos escrever ainda, $X_{i,\ell}^{\delta}(t) = \delta X_{i,\ell}(t) + \sqrt{X_{i,\ell}(t)\delta(1-\delta)}G_{i,\ell}^{\delta}(t)$, em que $G_{i,\ell}^{\delta}(t) \sim \mathscr{N}(0,1)$.

Considerando esta construção, definimos o modelo aproximado do seguinte modo. Empregando novamente o balanço de sementes escrevemos, para todo $t \ge t_0$,

$$\begin{cases} X_{i,\ell}(t+1) = X_{i,\ell}(t) - X_{i,\ell}^{\delta}(t) - X_{i,\ell}^{\Psi}(t), + \sum_{m \in \mathscr{L}} X_{i,m,\ell}^{d}(t) \\ X_{i,\ell}(t_0) = \breve{X}_{i,\ell} . \end{cases}$$
(4.12)

em que $\breve{X} \in \mathbb{R}^{3,N}$ é a condição inicial do banco de sementes, $X^{\delta}(t) \in \mathbb{R}^{3,N}$ representa a quantidade de sementes que germinaram no ciclo $t, X^{\Psi}(t) \in \mathbb{R}^{3,N}$ a quantidade de sementes dormentes que se tornaram inviáveis neste mesmo ciclo e $X^d(t) \in \mathbb{R}^{3,N,N}$ representa a dispersão de sementes, sendo $X^d_{i,m,\ell}(t)$ a quantidade de sementes com genótipo *i* geradas por reprodução na parcela *m* que se depositaram na parcela ℓ no ciclo *t*. As demais equações são apresentadas na sequência,

$$X_{i,\ell}^{\delta}(t) = \delta X_{i,\ell}(t) + \sqrt{X_{i,\ell}(t)\delta(1-\delta)}G_{i,\ell}^{\delta}(t), \qquad (4.13)$$

$$X_{i,\ell}^{\psi}(t) = \psi\left(X_{i,\ell}(t) - X_{i,\ell}^{\delta}(t)\right)$$
(4.14)

$$+\sqrt{\left(X_{i,\ell}(t) - X_{i,\ell}^{\delta}(t)\right)\psi(1-\psi)G_{i,\ell}^{\psi}(t)},$$

$$Y_{i,\ell}^{a}(t) = v_{i,\ell}X_{i,\ell}^{\delta}(t) + \sqrt{X_{i,\ell}^{\delta}(t)v_{i,\ell}(1-v_{i,\ell})}G_{i,\ell}^{a}(t), \qquad (4.15)$$

$$x_{\ell}^{r}(t) = \overline{x}_{\ell}^{r}(t) + \varphi \overline{x}_{\ell}^{r}(t) g_{\ell}^{r}(t), \qquad (4.16)$$

$$\overline{x}_{\ell}^{r}(t) = \begin{cases} \frac{F_{\ell}gy_{\ell}^{*}(t)}{F_{\ell}+gy_{\ell}^{a}(t)/G} & :y_{\ell}^{a}(t) > 0\\ 0 & :y_{\ell}^{a}(t) = 0, \end{cases}$$
(4.17)

$$x_{\ell}^{\kappa}(t) = \kappa x^{r}(t) + \sqrt{x_{\ell}^{r}(t)\kappa(1-\kappa)}g_{\ell}^{\kappa}(t), \qquad (4.18)$$

$$X_{\ell}^{g}(t) = x_{\ell}^{\kappa}(t)P(\mathscr{G}_{\ell}^{n}(t)) + G_{\ell}^{g}(t), \qquad (4.19)$$

$$X_{i,m}^{d}(t) = X_{i,m}^{g} P(\mathscr{D}_{m}) + G_{i,m}^{d}(t),$$
 (4.20)

em que $G_{i,\ell}^{\delta}(t) \sim \mathcal{N}(0,1); G_{i,\ell}^{\Psi}(t) \sim \mathcal{N}(0,1); G_{i,\ell}^{a}(t) \sim \mathcal{N}(0,1); g_{\ell}^{r}(t) \sim \mathcal{N}(0,1); g_{\ell}^{\kappa}(t) \sim \mathcal{N}(0,1); g_{\ell}^{\kappa}(t) \sim \mathcal{N}^{M}(0,\Pi_{\ell}^{g}(t)); G_{i,m}^{d}(t) \sim \mathcal{N}^{M}(0,\Pi_{m}^{d}(t))$, sendo as demais variáveis definidas de modo análogo as variáveis do modelo original, porém, definidas no domínio dos números reais. Note que, para facilitar a distinção entre os modelos, empregamos variáveis destacadas em negrito para apresentar o modelo original e variáveis sem destaque para o modelo aproximado. Note também que, com exceção de $G_{\ell}^{g}(t) \in G_{i,m}^{d}(t)$, empregamos para as variáveis de ruído distribuições normais no formato padrão, ou seja, com média zero e covariância unitária. Estas exceções se justificam pois tentar deixa-las com covariância unitária demandaria o cálculo da raiz quadrada das matrizes $\Pi_{\ell}^{g}(t) \in \Pi_{m}^{d}(t)$ a cada t, o que contribuiria para aumentar a demanda computacional dos filtros, aumentar as chances de problemas numéricos, e ainda traz a questão da multiplicidade das raízes. Os elementos de $\Pi_{\ell}^{g}(t) \in \Pi_{m}^{d}(t)$ podem ser obtidos calculando-se a covariância de variáveis que seguem as distribuições $\mathscr{B}^{M}\left(x_{\ell}^{\kappa}(t), P\left(\mathscr{G}_{\ell}^{n}(t)\right)\right)$

f, e as matrizes $\widehat{F}(t)$, $\widehat{L}(t)$ e $\widehat{Q}(t)$. Destacamos que a variável de informação Z(t), empregada no cálculo de (4.5), é obtida a partir das realizações do modelo original, ou seja, empregando-se $\mathbf{y}_{\ell}^{a,\omega_n}(t)$ em (4.11).

Logo, lembrando que *N* é a quantidade de parcelas da área produtiva, o sistema dinâmico auxiliar empregado para definir o modelo do filtro pode ser representado, para $t \ge t_0$, pelas seguintes equações,

$$\overline{\mathbf{X}}(t+1) = f\left(\overline{\mathbf{X}}(t), u(t), \overline{\mathbf{V}}(t)\right)$$
(4.21)

$$\overline{Z}(t) = h\Big(\overline{X}(t), u(t), \overline{W}(t)\Big), \qquad (4.22)$$

em que $\overline{\mathbf{X}}(t_0) = \breve{\mathbf{X}} \in \mathbb{R}^{3N}$ é a condição inicial do banco de sementes, e as funções de transição e observação são definidas, respectivamente, por $f : \mathbb{R}^{3N} \times \mathbb{R}^N \times \mathbb{R}^{14N+3N^2} \to \mathbb{R}^{3N}$, $h : \mathbb{R}^{3N} \times \mathbb{R}^N \times \mathbb{R}^{7N} \to \mathbb{R}^N$. As variáveis $\overline{\mathbf{X}}(t) \in \mathbb{R}^{3N}$, $\overline{\mathbf{Z}}(t) \in \mathbb{R}^N$, $\overline{\mathbf{V}}(t) \in \mathbb{R}^{14N+3N^2}$ e $\overline{\mathbf{W}}(t) \in \mathbb{R}^{7N}$, são definidas com o uso dos operadores de vetorização, apresentados na Seção 1, do seguinte modo

$$\overline{\mathbf{X}}(t) = \operatorname{vec}(\mathbf{X}(t)), \tag{4.23}$$

$$\overline{Z}(t) = vec(Z(t)), \qquad (4.24)$$

$$\overline{\mathbf{V}}(t) = \operatorname{vec}^{M}\left(G^{\delta}(t), G^{\Psi}(t), G^{a}(t), g^{r}(t), g^{\kappa}(t), G^{g}(t), G^{d}(t)\right),$$
(4.25)

$$\overline{\mathbf{W}}(t) = vec^{M}\left(G^{\delta}(t), G^{a}(t), g^{z}(t)\right).$$
(4.26)

Implementação

Para implementar o FKE, precisamos basicamente obter as matrizes $\widehat{F}(t)$, $\widehat{L}(t)$, $\widehat{Q}(t)$, $\widehat{H}(t)$, $\widehat{M}(t)$ e R(t) associadas ao sistema (4.21) e (4.22). Assim, da definição de $\overline{W}(t)$, observamos que R(t) é uma matriz identidade de dimensão 7N para todo $t \ge t_0$. Já da definição de $\overline{V}(t)$, temos que $\widehat{Q}(t)$ é uma matriz bloco diagonal formada por uma matriz identidade de dimensão 11N e pelas matrizes $\Pi^g(t) \in \mathbb{R}^{3N,3N}$ e $\Pi^d(t) \in \mathbb{R}^{3N^2,3N^2}$, para todo $t \ge t_0$. O cálculo das matrizes $\widehat{F}(t)$, $\widehat{L}(t)$, $\widehat{H}(t)$ e $\widehat{M}(t)$ foram obtidas a partir de (4.3), (4.4), (4.9) e (4.10), e estão apresentados no apêndice, na Seção 8.3.

É importante ressaltar que fizemos duas alterações importantes no algoritmo do filtro. O FKE, por ser fundamentado em um sistema dinâmico irrestrito, pode gerar $\widehat{X}(t|\mathscr{Z}^t)$ com elementos negativos. Assim, adotamos $\widehat{X}_j(t|\mathscr{Z}^t) = 0$ sempre que $\widehat{X}_j(t|\mathscr{Z}^t) < 0$, para todo $j \in \{1, 2, ..., 3N\}$. Além disto, ao implementarmos o algoritmo padrão do FKE, observamos que as realizações das estimativas divergiam consideravelmente para t > 40. Este possível comportamento do FKE é bastante conhecido na literatura, como podemos observar de (WAN; der MERWE, 2000). Notamos que este fato era verificado pela qualidade ruim das estimativas de $\widehat{P}(t+1|\mathscr{Z}^t)$, obtidas pelo uso de (4.2), quando $\widehat{X}(t|\mathscr{Z}^t)$ continha elementos nulos. Para contornar este problema, empregamos simulação de Monte Carlo para estimar $\widehat{P}(t+1|\mathscr{Z}^t)$ sempre que $\widehat{X}_j(t|\mathscr{Z}^t) = 0$, para algum $j \in \{1, 2, ..., 3N\}$. Assim, quando esta condição é verificada, o algoritmo implementado gera 500 amostras para o ruído do estado, denotadas por $\left\{\overline{\nabla}^{\omega_n}(t)\right\}_{\{1 \le n \le 500\}}$, e calcula os vetores $\widetilde{X}^{\omega_n} = f\left(\widehat{X}(t|\mathscr{Z}^t), u(t), \overline{\nabla}^{\omega_n}(t)\right)$. Então $\widehat{P}(t+1|\mathscr{Z}^t)$ é dada pela covariância das amostras $\left\{\widetilde{X}^{\omega_n}\right\}_{\{1 \le n \le 500\}}$.

4.1 Experimentos

Para avaliar as estimativas do filtro de Kalman estendido para a dinâmica do banco de sementes, empregamos as trajetórias geradas pelo controlador $u_{\ell}^{\text{csv},\infty}$, para $0 \le t \le T$, obtidas pelos experimentos descritos na Seção 3.2. Assim, consideramos uma área produtiva com 18 *ha*, dividida em 9 parcelas quadradas de tamanhos iguais. Para definir $\widehat{X}(0|\mathscr{Z}^{-1})$ e $\widehat{P}(0|\mathscr{Z}^{-1})$, adotamos, respectivamente, a média e a covariância das amostras $\left\{ vec(\mathbf{X}^{u,\omega_n}(0)) \right\}_{\{1 \le n \le M\}}$, com M = 1000, sendo $\mathbf{X}^{u,\omega_n}(0)$ definido na Seção 3.2. Para obter os elementos das matrizes $\widehat{F}(t), \widehat{L}(t), \widehat{H}(t)$ e $\widehat{M}(t)$, adotamos $\phi_{\ell} = 0,05$, para todo $\ell \in \mathscr{L}$, e também os mesmos parâmetros empregados nos experimentos da Seção 3.2.

4.2 Resultados e discussão

O algoritmo do FKE demandou 1695 minutos, ou aproximadamente 28 horas, para gerar as estimativas para as 1000 realizações do controle **CSV** ∞ . Esta alta demanda computacional foi verificada devido ao uso de simulação de Monte Carlo para obter $\widehat{P}(t+1|\mathscr{Z}^t)$. Esta solução corrigiu as divergências das estimativas do filtro mas causou um aumentou de aproximadamente 30 vezes no tempo computacional demandado pelo FKE. Este fato, restringiu drasticamente a quantidade de parcelas que pudemos empregar neste estudo e, consequentemente, para os controladores definidos no Capítulo 5, o que explica a relativa baixa quantidade de parcelas empregadas nos estudos deste trabalho (N = 9).

Para facilitar a apresentação dos demais resultados, abusamos da notação das variáveis de estimativa do filtro, definidas como vetores, de modo que $\widehat{X}_{i,\ell}^{\omega_n}$ representa a estimativa do filtro correspondente à quantidade de sementes do tipo *i* na parcela ℓ , ou seja, $\widehat{X}_{i,\ell}^{\omega_n} = \widehat{X}_{i\ell}^{\omega_n}$, em que $i\ell = 3(\ell-1)+i$, e também $\ell = \lfloor i\ell/3 \rfloor + 1$ e $i = i\ell - 3(\ell-1)$. Com o mesmo objetivo, adotamos ainda $\mathbf{X}_{\ell}^{\omega_n}(t) = \begin{bmatrix} \mathbf{X}_{1,\ell}^{\omega_n}(t) & \mathbf{X}_{2,\ell}^{\omega_n}(t) \end{bmatrix}^T e \widehat{X}_{\ell}^{\omega_n}(t|\mathscr{Z}^t) = \begin{bmatrix} \widehat{X}_{1,\ell}^{\omega_n}(t|\mathscr{Z}^t) & \widehat{X}_{3,\ell}^{\omega_n}(t|\mathscr{Z}^t) \end{bmatrix}^T$.

A Figura 18 apresenta gráficos referentes ao vetor de informação empregado pelo FKE para a parcela $\ell = 5$. O gráfico à esquerda mostra o erro absoluto do sinal de informação dividido pela área da parcela, obtido por $(Z_5^{\omega_n}(t) - \mathbf{y}_5^{a,\omega_n}(t))/F_5$, para $1 \le n \le 3$. O gráfico da direita mostra o erro relativo do sinal, denotado por e^{Z,ω_n} e calculado por $e^{Z,\omega_n}(t) = (Z_5^{\omega_n}(t) - \mathbf{y}_5^{a,\omega_n}(t))/\mathbf{y}_5^{a,\omega_n}(t)$ para as mesmas realizações. Dada a definição da função $Z_\ell(t)$ em (4.11) e o valor adotado para ϕ_ℓ , devemos esperar que aproximadamente 68% das amostras $\{e^{Z,\omega_n}(t)\}_{\{0\le t\le T; 1\le n\le M\}}$ fiquem



Figura 18 – Erro absoluto (gráfico à esquerda) e erro relativo (gráfico à direita) do sinal de informação utilizado pelo filtro de Kalman estendido para a parcela $\ell = 5$.

dentro do intervalo $\begin{bmatrix} -0,05 & 0,05 \end{bmatrix}$ e que aproximadamente 95% destas amostras fiquem dentro do intervalo $\begin{bmatrix} -0,1 & 0,1 \end{bmatrix}$.

A Figura 19 apresenta gráficos referentes ao erro de estimativa para o total de sementes no banco da parcela $\ell = 5$. O gráfico à esquerda mostra o erro absoluto da estimativa atualizada do filtro dividido pela área da parcela, ou seja, $\left(\phi\left(\widehat{X}_{5}^{\omega_{n}}(t|\mathscr{Z}^{t})\right) - \phi\left(\mathbf{X}_{5}^{\omega_{n}}(t)\right)\right)/F_{5}$, sendo $\phi(.)$ o operador definido em 1.2. Já o gráfico à direita mostra o erro relativo desta estimativa, definido por $\left(\phi\left(\widehat{X}_{5}^{\omega_{n}}(t|\mathscr{Z}^{t})\right) - \phi\left(\mathbf{X}_{5}^{\omega_{n}}(t)\right)\right)/\phi\left(\mathbf{X}_{5}^{\omega_{n}}(t)\right)$. Observando atentamente as Figuras 18 e 19 notamos que há uma correlação entre os erros de informação e os erros de estimativa do total de sementes no banco. Note que quando há uma sequência de erros de informação sobrestimando ou subestimando a quantidade de plantas adultas, notamos também erros no mesmo sentido para o total de sementes no banco.



Figura 19 – Erro absoluto (gráfico à esquerda) e erro relativo (gráfico à direita) do total de sementes estimado na etapa de atualização do filtro de Kalman estendido para o banco da parcela ℓ.

A Figura 20 também apresenta gráficos referentes ao erro de estimativa para o total de sementes no banco da parcela $\ell = 5$. O gráfico à esquerda mostra a média do erro relativo das estimativas de previsão (linhas tracejadas) e atualização do filtro (linhas contínuas). Os erros das estimativas atualizadas foram obtidos por $e^{a,\omega_n}(t|t) = M^{-1}\sum_{n=1}^{M} \left(\phi\left(\widehat{X}_5^{\omega_n}(t|\mathscr{L}^t)\right) - \phi\left(\mathbf{X}_5^{\omega_n}(t)\right)\right)/\phi\left(\mathbf{X}_5^{\omega_n}(t)\right)$, e de forma análoga para as estimativas de previsão. Já o gráfico à

direita mostra a média do módulo do erro relativo das estimativas, definido por $e^{m,\omega_n}(t|t) = M^{-1}\sum_{n=1}^{M} \left| \phi\left(\widehat{X}_5^{\omega_n}(t|\mathscr{L}^t)\right) - \phi\left(\mathbf{X}_5^{\omega_n}(t)\right) \right| / \phi\left(\mathbf{X}_5^{\omega_n}(t)\right)$, para as estimativas atualizadas, e de forma análoga para as estimativas de previsão. Podemos observar pelo gráfico à esquerda que o erro absoluto da estimativa de previsão parte de zero uma vez que que adotamos como $\widehat{X}(0|\mathscr{L}^{-1})$ a própria média das condições iniciais das realizações do banco de sementes. Note que os erros absolutos permanecem próximos de zero até o ciclo t = 20, momento em que a resistência começa a emergir em algumas realizações, levando os estimadores a subestimar o banco de sementes nestas realizações. No gráfico à direita podemos notar que apesar de sujeita a ruídos, as informações Z(t) são de fato importantes para o filtro corrigir as estimativas do banco de sementes, em particular para t = 0. Por estes resultados, podemos observar que o filtro produz boas estimativas para o total de sementes no banco, uma vez que $e^{m,\omega_n}(t|t)$ e $e^{m,\omega_n}(t|t-1)$ ficam próximos de 2%.



Figura 20 – Média do erro absoluto (gráfico à esquerda) e média do módulo do erro (gráfico à direita) para as estimativas atualizadas (curvas contínuas) e estimativas de previsão (curvas tracejadas) do FKE para a parcela $\ell = 5$.

A Figura 21 apresenta, no gráfico à esquerda, realizações do erro absoluto de estimativa da frequência do alelo *A* no banco da parcela $\ell = 5$, obtidos por $\rho\left(\widehat{X}_5^{\omega_n}(t|\mathscr{Z}^t)\right) - \rho\left(\mathbf{X}_5^{\omega_n}(t)\right)$, para $1 \le n \le 40$. No gráfico à direita, apresentamos as correspondentes trajetórias da frequência de alelo *A* ($\rho\left(\mathbf{X}_5^{\omega_n}(t)\right)$, curvas contínuas) e sua estimativa ($\rho\left(\widehat{X}_5^{\omega_n}(t|\mathscr{Z}^t)\right)$, curvas tracejadas). As curvas com as mesmas cores nos gráficos da esquerda e direita correspondem às mesmas realizações. Pelo gráfico do erro, podemos observar que em geral o filtro tende a sobrestimar a frequência do alelo *A* no banco, dado o maior número de curvas acima do eixo das abscissas. No entanto, podemos observar que o módulo do erro é maior quando o filtro subestima a frequência do alelo. Notamos que estes casos estão ligados à emergência da abscissa no gráfico à esquerda com as correspondentes realizações de erro se aproximam da abscissa, evidenciando que o módulo do erro absoluto diminui.



Figura 21 – O gráfico à esquerda apresenta o erro absoluto de estimativa da frequência do alelo A no banco de sementes da parcela $\ell = 5$. O gráfico à direita apresenta as correspondentes realizações da frequência do alelo A no banco (curvas contínuas) e das estimativas atualizadas feitas pelo FKE (curvas tracejadas).

A Figura 22 apresenta gráficos relacionados com a estimativa da frequência do alelo *A* no conjunto de plantas adultas, fundamentais para a definição dos controladores estudados no Capítulo 5 (vide definição 5.2). Estas estimativas são obtidas com equação análoga à 3.3, porém, substituindo-se as variáveis do banco de sementes pelas estimativas de previsão geradas pelo filtro, do seguinte modo,

$$\widehat{f}_{\ell}^{\omega_{n}}(t) = \frac{(1-c)(1-\rho^{R})\left(2\widehat{X}_{1,\ell}^{\omega_{n}}(t|\mathscr{Z}^{t-1}) + \widehat{X}_{2,\ell}^{\omega_{n}}(t|\mathscr{Z}^{t-1})\right)}{2(1-c)(1-\rho^{R})\left(\widehat{X}_{1,\ell}^{\omega_{n}}(t|\mathscr{Z}^{t-1}) + \widehat{X}_{2,\ell}^{\omega_{n}}(t|\mathscr{Z}^{t-1})\right) + 2(1-\rho^{S})\widehat{X}_{3,\ell}^{\omega_{n}}(t|\mathscr{Z}^{t-1})}.$$
(4.27)

No gráfico à esquerda apresentamos realizações do erro absoluto de estimativa da frequência do alelo A nas plantas adultas da parcela $\ell = 5$, obtidos por $\hat{f}_5^{\omega_n}(t) - \rho \left(\mathbf{Y}_5^{a,\omega_n}(t)\right)$, para $1 \le n \le 40$. No gráfico à direita apresentamos as correspondentes realizações da frequência de alelo A ($\rho \left(\mathbf{Y}_5^{a,\omega_n}(t)\right)$, curvas contínuas) e de sua estimativa ($\hat{f}_5^{\omega_n}(t)$, curvas tracejadas). Do mesmo modo que a figura anterior, as curvas com as mesmas cores nos gráficos da esquerda e direita correspondem às mesmas realizações. Relacionando estes resultados com a definição do controlador fundamentado nestas estimativas, apresentados no Capítulo 5, temos que a sobrestimação desta variável pode levar o controlador a optar pela troca de herbicida desnecessariamente quando o limiar $\beta/100$ adotado for, por exemplo, menor que 10. Por outro lado, a subestimação desta variável pode fazer com que o controlador defina pelo herbicida recomendado mesmo quando a há identificação da resistência em campo, o que prejudicaria o desempenho do controlador. Diante destas observações, concluímos que o controlador deve apresentar melhores resultados se o limiar não for muito baixo e se a informação de identificação da resistência em campo também for considerada em sua definição.



Figura 22 – O gráfico à esquerda apresenta o erro absoluto de estimativa da frequência do alelo A no conjunto de plantas adultas da parcela $\ell = 5$. O gráfico à direita apresenta as correspondentes realizações da frequência do alelo A (curvas contínuas) e das estimativas baseadas no FKE (curvas tracejadas).
capítulo

CONTROLE COM ESTIMATIVAS DO FILTRO DE KALMAN

Neste capítulo avaliamos o uso de controladores que empregam as estimativas geradas pelo filtro de Kalman estendido e a identificação visual da resistência como informações para definir qual herbicida deve ser aplicado em cada parcela. Este controlador, denominado *controlador com estimativas*, pode ser classificado como implementável pois emprega em sua definição apenas informações possíveis de serem obtidas na prática. Destacamos que a informação de identificação da resistência foi empregada na definição deste controlador para evitar que este defina pelo uso do herbicida recomendado quando a resistência é identificada em campo, o que seria uma estratégia não condizente com a prática (vide comentário sobre a Figura 22). Assim, o controlador com estimativas foi definido do seguinte modo,

$$u_{\ell}^{\text{est}}(t) = f\left(\widehat{\mathbf{X}}(t|\mathscr{Z}^{t-1}), \left\{\mathbf{Z}^{I}(k)\right\}_{k=0}^{t-1}\right),$$
(5.1)

em que $f: \mathbb{N}^{3N} \times \mathbb{N}^{Nt} \to \mathbb{N}^{N}$.

Analogamente aos controladores com observação completa, o controlador com estimativas foi projetado para também manter a fração do alelo *A* no conjunto de plantas adultas abaixo de um dado limiar. Assim, a cada ciclo *t*, o controlador estima a fração do alelo *A* que seria observada no conjunto de plantas adultas caso o herbicida recomendado fosse aplicado, denotada por $\hat{f}_{\ell}(t)$, e, se esta estimativa ficar acima do limiar estabelecido, o controlador decide pelo uso do herbicida alternativo em *t*. Além disto, o controlador também deve decidir pelo herbicida alternativo se a resistência já tiver sido identificada em qualquer das parcelas e em algum momento. Esta estratégia de controle pode ser definida do seguinte modo,

$$u_{\ell}^{\text{est};\beta}(t) = \begin{cases} 1 & , \quad \text{se } \widehat{f}_{\ell}(t) < \beta/100 \text{ e } J^{I}(t-1) = 0, \\ 2 & , \quad \text{c.c.}, \end{cases}$$
(5.2)

sendo β o limiar estabelecido, $J^{I}(t)$ como definido em (3.7) e $\hat{f}_{\ell}(t)$ como definido em (4.27).

5.1 Experimentos

Os experimentos realizados neste capítulo foram definidos de modo semelhante aos experimentos do Capítulo 3, ou seja, considerando exatamente os mesmo parâmetros e condições iniciais para os controladores. Os indicadores avaliados também são os mesmos: eficiência do herbicida recomendo, produtividade, impacto ambiental incremental e potencial de propagação da resistência. Empregamos também os mesmos valores de β para os controladores. Assim, neste capítulo, avaliamos as seguintes estratégias de controle, $u_{\ell}^{est;05}$, $u_{\ell}^{est;15}$, $u_{\ell}^{est;25}$, $u_{\ell}^{est;35}$ em comparação com $u_{\ell}^{csv,\infty} u_{\ell}^{gul,\infty}$.

5.2 Resultados e discussão

Nesta seção apresentamos resultados relacionados com a *dinâmica do ciclo de vida* das plantas daninhas e com os *indicadores* que definimos para avaliar os controladores. Primeiro, apresentamos figuras referentes ao número de ocorrência acumulada da identificação da resistência, além das figuras análogas às apresentadas no Capítulo 3, referentes à evolução da densidade do total de sementes no banco, frequência do alelo A no banco de sementes, densidade de plantas adultas e frequência do alelo A no conjunto de plantas adultas. Estas figuras apresentam as trajetórias obtidas para a parcela central da área de estudos ($\ell = 5$) associadas às realizações $1 \le n \le 30$ das simulações de Monte Carlo. Na sequência, apresentamos também figuras e tabelas, análogas às apresentadas no Capítulo 3, para avaliar a eficiência do herbicida recomendado ao longo do tempo, a perda de produtividade, o impacto ambiental incremental e potencial de propagação da resistência.

Dinâmica do ciclo de vida

A Figura 23 apresenta o número de ocorrências acumuladas da identificação da resistência em qualquer parcela, obtido por $\sum_{n=1}^{M} \sum_{\ell \in \mathscr{L}} \mathbb{1}_{\{J_{\ell}^{I,\omega_{n}}(t)>0\}}$, para os ciclos $t = \{1, 6, 11, \dots, 96\}$. Por este gráfico observamos que o controlador **GUL** ∞ permite um maior número de identificação da resistência, seguindo de **CSV** ∞ , **EST** 35, **EST** 25, **EST** 15, e **EST** 05, sendo que para este último não houve identificação da resistência. Note que os controladores devem atuar pouco em função da informação $J^{I}(t-1)$, em particular os controladores **EST** 15 e **EST** 05, o que sugere que a estimativa $\hat{X}(t|\mathscr{Z}^{t-1})$ é a principal informação usada por estes controladores.

A Figura 24 apresenta a densidade do total de sementes no banco ao longo dos ciclos. Desta figura podemos observar que quanto maior o limiar adotado para o controlador com estimativas mais visualizamos trajetórias que fogem à média das realizações. Esta observação fica mais evidente para **EST 25** e **EST 35**.

A Figura 25 apresenta as trajetórias para a frequência do alelo A no banco de sementes. Podemos notar que, como esperado, quanto menor o limiar β adotado para os controladores com estimativa, menores são os valores observados para os picos das trajetórias da frequência do alelo *A*. Esta observação fica menos evidente para **EST 25** e **EST 35**. Isto ocorre devido ao uso da informação de identificação da resistência que limita os valores da frequência do alelo *A* no banco.

A Figura 26 apresenta as trajetórias para a densidade de plantas adultas. Como esperado podemos observar que quanto maior o limiar adotado para o controlador com estimativas maiores são os valores dos picos destas realizações.

A Figura 27 apresenta frequência do alelo A no conjunto de plantas adultas. Lembramos que a estimativa desta variável esta relacionada com o limiar β definido para os controladores. As linhas tracejadas dos gráficos apresentam o valor de $\beta/100$ adotado para cada controlador. Podemos observar que as trajetórias destas variáveis obtidas para o controlador com estimativa ultrapassam os limiares com maior frequência e intensidade que as trajetórias obtidas para os controladores com observação do banco de sementes, apresentadas pela Figura 11. Destacamos as trajetórias do controlador **EST 05** que apresenta valores para a frequência do alelo A relativamente bastante superiores ao limiar adotado.



Figura 23 - Ocorrências acumuladas da identificação da resistência.







Figura 25 – Frequência do alelo A no banco de sementes para as realizações $1 \le n \le 30$.







Figura 27 – Frequência do alelo A no conjunto de plantas adultas para as realizações $1 \le n \le 30$. As curvas tracejadas se referem aos limiares $\beta/100$ adotados pelos controladores.

Indicadores

A Figura 28 apresenta o valor médio da quantidade de doses do herbicida recomendado empregada em toda a área produtiva ao longo do tempo, obtida por $M^{-1} \sum_{n=1}^{M} \sum_{\ell \in \mathscr{L}} \mathbb{1}_{\{u_{\ell}^{\Theta_n}(t)=1\}}$. Podemos observar que os controladores **EST 15**, **EST 25** e **EST 35**, empregam mais o herbicida recomendado que os controladores convencionais, o que fica mais nítido após o ciclo 40. Por outro lado, o controlador **EST 05** apresenta a menor média de uso deste herbicida dentre todos. Isto pode ser compreendido relacionando o baixo limiar adotado por este controlador com os erros de estimativas gerados pelo filtro de Kalman estendido para a frequência do alelo *A* no conjunto de plantas, apresentado pela Figura 22. Como o filtro sobrestima esta variável com erros que frequentemente ultrapassam o limiar adotado para o **EST 05**, temos que o herbicida alternativo é empregado com bastante frequência por este controlador. Como veremos, este fato se reflete também nos demais indicadores obtidos para este controlador.



Figura 28 – Valor médio da quantidade de doses do herbicida recomendado empregada em toda a área produtiva ao longo do tempo.

A Tabela 8 apresenta a média e o desvio padrão da quantidade de doses do herbicida recomendado empregada em todo o horizonte, ou seja, obtidas para as seguintes amostras, $\left\{\sum_{t=0}^{T} \sum_{\ell \in \mathscr{L}} \mathbb{1}_{\left\{u_{\ell}^{\varpi_{n}}(t)=1\right\}}\right\}_{\{1 \leq n \leq M\}}$. Note que, com exceção do **EST 05**, os controladores com estimativas do banco de sementes empregam uma quantidade média de doses ligeiramente superior aos demais. Este controladores apresentaram também um desvio padrão bastante inferior aos demais.

Tabela 8 – Valor médio e desvio padrão da quantidade de doses empregada do herbicida recomendado acumulada ao longo do período [0, T]. A terceira e quarta linha apresentam os valores relativos aos obtidos pela estratégia **CSV**, ∞ .

	CSV ∞	$\text{GUL} \infty$	EST 05	EST 15	EST 25	EST 35
Média	759,2	761,5	579,6	785,9	782,7	777
Desvio	221,9	209,4	165,8	194	197,7	203,8
Média (%)	0	0,2919	-23,66	3,508	3,096	2,339
Desvio (%)	0	-5,62	-25,26	-12,58	-10,9	-8,175

A Figura 29 apresenta o valor médio da eficiência do herbicida recomendado ao longo do tempo, obtido por $M^{-1}\sum_{n=1}^{M} N^{-1}\sum_{\ell \in \mathscr{L}} E_{\ell}^{\omega_n}(t)$. Podemos observar que os controladores com estimativas provocam menor diminuição na eficiência do herbicida recomendado ao longo do tempo apesar de empregarem ligeiramente mais o herbicida recomendado, com exceção do **EST** 05.



Figura 29 - Valor médio da eficiência do herbicida recomendado ao longo do tempo.

A Tabela 9 apresenta a média e o desvio padrão da eficiência do herbicida recomendado no final do horizonte, ou seja, obtidos para as amostras $\{N^{-1}\sum_{\ell \in \mathscr{L}} E_{\ell}^{\omega_n}(T)\}_{\{1 \le n \le M\}}$. Podemos notar que os controladores com estimativa do banco de sementes apresentaram uma média de eficiência ligeiramente maior que os controladores convencionais. Além disto, apresentam um desvio padrão bastante inferior para esta variável.

Tabela 9 – Valor médio e desvio padrão da eficiência do herbicida recomendado no final do horizonte. A terceira e quarta linha apresentam os valores relativos aos obtidos pela estratégia CSV ∞.

	CSV ∞	$\text{GUL} \sim$	EST 05	EST 15	EST 25	EST 35
Média	0,799	0,7758	0,8375	0,8147	0,8026	0,8009
Desvio	0,06604	0,09522	0,01479	0,04363	0,05916	0,06096
Média (%)	0	-2,9	4,82	1,972	0,4519	0,2393
Desvio (%)	0	44,17	-77,6	-33,94	-10,42	-7,69

A Figura 30 apresenta a evolução da perda média de produtividade ao longo dos ciclos, obtida por $M^{-1}\sum_{n=1}^{M}\sum_{\ell\in\mathscr{L}}H^{0}L_{\ell}^{\omega_{n}}(t)$. Podemos notar que os controladores com estimativas produzem um valor médio para a perda menores que os controladores convencionais. Note que a partir do ciclo 70 as perdas do **EST 25** e **EST 35** se equiparam às perdas do **CSV** ∞ . A Figura 31 também apresenta informações sobre as realizações da perda de produtividade. O gráfico à esquerda apresenta o *boxplot* das amostras da perda total para cada ciclo em cada realização, definidas por $\{\sum_{\ell\in\mathscr{L}}H^{0}L_{\ell}^{\omega_{n}}(t)\}_{\{0\leq t\leq T; 1\leq n\leq M\}}$. Por este gráfico podemos observar que os controladores com estimativa do banco de sementes contêm significantemente mais as perdas extremas, reveladas pelos *outliers* superiores, que os controladores convencionais. O gráfico à direita da Figura 31 apresenta o *boxplot* das amostras da perda acumulada ao longo

do horizonte, definidas por $\left\{\sum_{t=0}^{T} \sum_{\ell \in \mathscr{L}} H^0 L_{\ell}^{\omega_n}(t)\right\}_{\{1 \le n \le M\}}$. Neste gráfico podemos observar variações das perdas acumuladas dos controladores com estimativa do banco de sementes são menores que as dos demais controladores.



Figura 30 - Valor médio da perda de produção ao longo do tempo.



Figura 31 – *Boxplot* da perda de produtividade por ciclo (gráfico à esquerda) e da perda de produtividade acumulada ao longo do período [0, T] (gráfico à direita).

A Tabela 10 apresenta o valor médio e o desvio padrão da perda total acumulada no final do horizonte, ou seja, para as amostras $\left\{\sum_{t=0}^{T} \sum_{\ell \in \mathscr{L}} H^0 L_{\ell}^{\omega_n}(t)\right\}_{\{1 \le n \le M\}}$. Podemos notar que a média das perdas dos controladores com estimativa do banco de sementes são ligeiramente menores que as dos controladores convencionais. Além disto, possuem variância menores que as destes controladores, o que está de acordo com as observações feitas para a Figura 31.

Tabela 10 – Valor médio e desvio padrão da perda total acumulada ao longo do período [0, T]. A terceira e quarta linha apresentam os valores relativos aos obtidos pela estratégia **CSV** ∞ .

	CSV ∞	$\text{GUL} \sim$	EST 05	EST 15	EST 25	EST 35
Média (ton)	221,9	227,7	214,5	217,6	219,7	220,6
Desvio (ton)	14,61	21,43	8,422	11,06	13,03	13,56
Média (%)	0	2,584	-3,326	-1,93	-0,9791	-0,6107
Desvio (%)	0	46,65	-42,36	-24,29	-10,8	-7,16

A Figura 32 apresenta o valor médio do impacto ambiental incremental ao longo do tempo, dado por $M^{-1}\sum_{n=1}^{M} I^{\omega_n}(t)$. Notamos, como esperado, que o controlador **EST 05** é o que causa o maior impacto ambiental incremental ao longo do tempo. Apesar das curvas aparecerem próximas umas das outras, é possível notar que os controladores **EST 15**, **EST 25** e **EST 35** causam menos impacto que os controladores convencionais.



Figura 32 - Valor médio do impacto ambiental incremental ao longo do tempo.

A Tabela 11 apresenta o valor médio e o desvio padrão do impacto ambiental incremental no final do horizonte, obtidos pelas amostras, $\{I^{\omega_n}(T)\}_{\{1 \le n \le M\}}$. Podemos notar que, com exceção de **EST 05**, os controladores com estimativa do banco de sementes apresentaram menores médias e desvios que os controladores convencionais. Destacamos o controlador **EST 15** que apresentou o menor valor médio e desvio padrão dentre todos.

Tabela 11 – Valor médio e desvio padrão do impacto ambiental incremental em t = T. A terceira e quarta linha apresentam os valores relativos aos obtidos pela estratégia **CSV** ∞ .

	CSV ∞	$\text{GUL} \sim$	EST 05	EST 15	EST 25	EST 35
Média	140,8	138,5	320,4	114,1	117,3	123
Desvio	221,9	209,4	165,8	194	197,7	203,8
Média (%)	0	-1,574	127,6	-18,92	-16,7	-12,62
Desvio (%)	0	-5,62	-25,26	-12,58	-10,9	-8,175

A Tabela 12 apresenta a produção total média e em relação ao impacto ambiental incremental médio, ou seja, $\left(M^{-1}\sum_{n=1}^{M}\sum_{t=0}^{T}\sum_{\ell\in\mathscr{L}}H_{\ell}^{\omega_{n}}(t)\right)/\left(M^{-1}\sum_{n=1}^{M}I^{\omega_{n}}(T)\right)$. Podemos notar que, com exceção de **EST 05**, os controladores com estimativas do banco de sementes apresentaram melhores resultados que os demais, com destaque para o controlador **EST 15** que apresentou um valor 23,43% superior ao obtido por **CSV** ∞ .

Tabela 12 – Produtividade média acumulada ao longo do período [0,T] em relação ao impacto ambiental médio em t = T. A segunda linha apresenta os valores relativos aos obtidos pela estratégia **CSV** ∞ .

	CSV ∞	$\text{GUL} \infty$	EST 05	EST 15	EST 25	EST 35
Média (ton/doses)	40,5	41,1	17,81	49,98	48,63	46,35
Média (%)	0	1,497	-56,01	23,43	20,09	14,47

A Figura 33 apresenta gráficos relativos à quantidade de alelo *A* gerado por reprodução. O gráfico à esquerda apresenta o valor médio para a densidade de alelo *A* gerado por reprodução observado ao longo do tempo, dado por, $M^{-1} \sum_{n=1}^{M} \left(\sum_{\ell \in \mathscr{L}} \left(2 \mathbf{X}_{1,\ell}^{g}(t) + \mathbf{X}_{2,\ell}^{g}(t) \right) / \sum_{\ell \in \mathscr{L}} F_{\ell} \right)$. Já o gráfico à direita apresenta um *boxplot* da densidade de alelo *A* acumulada ao longo do tempo, obtido a partir das amostras, $\left\{ \sum_{t=0}^{T} \left(\sum_{\ell \in \mathscr{L}} \left(2 \mathbf{X}_{1,\ell}^{g}(t) + \mathbf{X}_{2,\ell}^{g}(t) \right) / \sum_{\ell \in \mathscr{L}} F_{\ell} \right) \right\}_{\{1 \le n \le M\}}$. Pelo gráfico à esquerda, observamos que a densidade média dos alelos gerados pelos controladores com estimativa do banco de sementes é inferior á média dos controladores convencionais. Já o *boxplot* nos indica que a variação da densidade acumulada é também inferior.



Figura 33 – Densidade de alelo A produzido por reprodução ao longo do tempo (gráfico à esquerda) e acumulado ao longo do horizonte [0, T] (gráfico à direita).

A Tabela 13 nos apresenta o valor médio do potencial de propagação da resistência, dado por, $M^{-1} \sum_{n=1}^{M} K^{\omega_n}(T)$. A primeira linha apresenta o valor deste potencial para $\rho^e = \rho^R$, caso em que as áreas de destino das sementes estejam aplicando o herbicida recomendado. Já a segunda linha, apresenta o potencial para $\rho^e = \rho$, quando a área de destino aplica o herbicida alternativo. Podemos notar que as estratégias de controle com estimativa do banco de sementes apresentam um potencial de propagação muito menor que o observado pelos demais controladores.

Pelos resultados apresentados, observamos que o desempenho do controlador **EST 05** foi bastante influenciado pelos erros de estimativa do filtro de Kalman estendido, o que fez com

este controlador optasse pelo uso excessivo do herbicida alternativo. Com isto, este controlador apresentou os melhores resultados em relação à propagação da resistência mas os piores para o impacto ambiental incremental e para a relação entre produção e impacto ambiental. Considerando os valores apresentados pelas tabelas desta seção, destacamos também os resultados do **EST 15**, que apresentou os melhores resultados em termos de média e desvio padrão para todos os indicadores quando comparado com os controladores **EST 25**, **EST 35**, **CSV** ∞ e **GUL** ∞ . Por estes resultados, concluímos que controladores baseados em estimativas do banco de sementes podem apresentar melhor desempenho que os controladores convencionais definidos neste trabalho.

Tabela 13 – Potencial de propagação da resistência em t = T. As duas primeiras linhas apresentam, respectivamente, os valores quando a área de destino emprega o herbicida recomendado e o herbicida alternativo. A terceira linha apresenta os valores relativos aos obtidos pela estratégia **CSV** ∞ .

	$\mathbf{CSV} \propto$	$\text{GUL} \sim$	EST 05	EST 15	EST 25	EST 35
Propagação / $u^e(t) = 1$	50	81,08	6,146	22,9	35,44	39,33
Propagação / $u^e(t) = 2$	11,18	18,13	1,374	5,119	7,922	8,792
Propagação (%)	0	62,17	-87,71	-54,2	-29,12	-21,34

Admitindo neste ponto que cada parcela poderia representar áreas de cultivo distintas, mas que trocam sementes entre si, o controlador **GUL** ∞ representaria então uma estratégia não coordenada para o controle de plantas daninhas, característica bastante observada nas estratégias empregadas no mundo real, em que cada área produtiva estabelece a sua estratégia independentemente das demais. Já o controlador **EST** β estaria representando uma estratégia coordenada, uma vez que a definição do herbicida a ser empregado em cada área produtiva seria definida considerando o estado do banco de sementes de todas as áreas concomitantemente. Dentro desta perspectiva, e considerando os resultados recém apresentados, podemos observar que uma estratégia coordenada pode ser de fato mais eficaz que uma estratégia não coordenada para preservar a eficiência do herbicidas. Diante destas observações, é justificável que o planejamento da aplicação de herbicidas em áreas agrícolas seja definido de maneira centralizada/coordenada por uma única entidade, possivelmente não governamental, em cada região agrícola do país. A esta mesma entidade, caberia também monitorar e avaliar o efeito do planejamento e uso dos herbicidas nas comunidades e ecossistemas locais.

CAPÍTULO

TRABALHOS FUTUROS

6.1 Identificação visual da resitência como informação para o filtro

Nesta seção apresentamos um estudo preliminar cujo objetivo é generalizar o algoritmo do FKE, incorporando a identificação visual da resistência, definida em (3.4), como informação para o filtro. Do mesmo modo que o FKE, este filtro, que denominamos aqui por filtro de Kalman generalizado (FKG), foi proposto para estimar o banco de sementes, sempre através de uma estimativa para o banco, denotada por $\hat{X}(t)$, e uma covariância para o erro desta estimativa, denotada por $\hat{P}(t)$. Destacamos que mesmo quando o FKG tem condições de estimar uma distribuição mais complexa para o banco de sementes, desprezamos este fato e consideramos apenas o valor médio destas distribuição, que atribuímos à $\hat{X}(t)$, e sua covariância, que atribuímos à $\hat{P}(t)$. Isto se justifica para manter a compatibilidade com o FKE, que considera apenas estas duas informações em seu algoritmo

O algoritmo do FKG pode ser dividido em uma fase de previsão e outra de atualização, do mesmo modo que o FKE. Porém, a fase de atualização do FKG é dividida em duas etapas. Assim, na fase de previsão, o FKG estima $\widehat{X}(t|\mathscr{Z}^{t-1,+}) \in \widehat{P}(t|\mathscr{Z}^{t-1,+})$, sendo o conjunto de informação definido por $\mathscr{Z}^{t,+} = \{Z(0), Z^{I}(0), Z(1), Z^{I}(1), \dots, Z(t), Z^{I}(t)\}$. Já na fase de atualização, obtém $\widehat{X}(t|\mathscr{Z}^{t,-}) \in \widehat{P}(t|\mathscr{Z}^{t,-})$, na primeira etapa, e $\widehat{X}(t|\mathscr{Z}^{t,+}) \in \widehat{P}(t|\mathscr{Z}^{t,+})$, na segunda, sendo $\mathscr{Z}^{t,-} = \{Z(0), Z^{I}(0), Z(1), Z^{I}(1), \dots, Z(t)\}$. Note que a diferença entre os conjuntos $\mathscr{Z}^{t,-} \in \mathscr{Z}^{t,+}$ é a inclusão de $Z^{I}(t)$ em $\mathscr{Z}^{t,+}$.

A fase de previsão do FKG é definida a partir das mesmas equações do FKE, ou seja, empregando (4.1)-(4.4), substituindo-se $\widehat{X}(t-1|\mathscr{Z}^{t-1})$ por $\widehat{X}(t-1|\mathscr{Z}^{t-1,+})$ e $\widehat{P}(t-1|\mathscr{Z}^{t-1})$ por $\widehat{P}(t-1|\mathscr{Z}^{t-1,+})$. Do mesmo modo, a primeira etapa da fase de atualização também emprega as mesmas equações do FKE, ou seja, (4.5)-(4.10), substituindo-se $\widehat{X}(t|\mathscr{Z}^{t-1})$ por $\widehat{X}(t|\mathscr{Z}^{t-1,+})$ e $\widehat{P}(t|\mathscr{Z}^{t-1,+})$. Já na segunda fase de atualização do FKG, dada a dificuldade

de se obter $\widehat{X}(t|\mathscr{Z}^{t,+})$ e $\widehat{P}(t|\mathscr{Z}^{t,+})$, uma vez que $Z^{I}(t)$ é uma função não linear e não diferenciável em todo o seu domínio, empregamos simulação de Monte Carlo e o teorema de Bayes. Para simplificar a apresentação dos cálculos envolvidos nesta fase, exibimos na sequência as equações considerando apenas uma parcela na área produtiva, mas destacamos estas podem ser facilmente generalizadas para o caso de múltiplas parcelas. Assim, para obter $\widehat{X}(t|\mathscr{Z}^{t,+})$ e $\widehat{P}(t|\mathscr{Z}^{t,+})$ primeiramente, geramos um conjunto de *J* amostras de $X(t) \in \mathbb{R}^3$ sorteando $X^{\omega_j} \sim \mathcal{N}\left(\widehat{X}(t|\mathscr{Z}^{t,-}), \widehat{P}(t|\mathscr{Z}^{t,-})\right)$, para $1 \leq j \leq J$. Em seguida, calculamos $\widetilde{P}\left(X(t) = X^{\omega_j}|Z^{I}(t)\right)$, com o uso do teorema de Bayes do seguinte modo,

$$\widetilde{P}\left(X(t) = X^{\omega_j} \big| Z^I(t)\right) = \frac{\widetilde{P}\left(X(t) = X^{\omega_j}\right) P\left(Z^I(t) \big| X(t) = X^{\omega_j}\right)}{\sum_{n=1}^M P\left(X(t) = X^{\omega_j}\right) P\left(Z^I(t) \big| X(t) = X^{\omega_j}\right)},\tag{6.1}$$

sendo $\widetilde{P}(W = \overline{W}) = P(W = \overline{W} | \mathscr{Z}^{t,-})$, em que W é uma variável aleatória qualquer e \overline{W} um elemento de seu espaço amostral. Logo, assumindo que $\widetilde{P}(X(t) = X^{\omega_j}) = \frac{1}{M}$, para calcularmos (6.1), resta-nos obter $\widetilde{P}(Z^I(t)|X(t) = X^{\omega_j})$. Note que para a caracterização completa desta distribuição basta-nos calcular os casos $Z^I(t) = 0$ e $Z^I(t) = 1$. Como ambos os casos podem ser obtidos de modo análogo, apresentamos apenas o caso $\widetilde{P}(Z^I(t) = 0 | X(t) = X^{\omega_j})$. Para isto, note que é válida a seguinte igualdade,

$$\widetilde{P}\left(Z^{I}(t)=0\big|X(t)=X^{\omega_{j}}\right)=\widetilde{P}\left(\eta\left(X^{\delta}(t)\right)<0,3\big|X(t)=X^{\omega_{j}}\right),\tag{6.2}$$

em que $\eta(.)$ é definido em (1.2). No entanto o cálculo analítico desta última probabilidade ainda é uma tarefa difícil, uma vez que $\eta(X^{\delta}(t))$ é uma função não linear da variável aleatória $G^{\delta}(t) \in \mathbb{R}^3$, como podemos observar de (4.13). Para contornar esta dificuldade poderíamos, por exemplo, calcular esta probabilidade via integração numérica a partir da discretização do espaço amostral de $G^{\delta}(t)$ ou ainda empregar nova simulação de Monte Carlo sorteando valores para $G^{\delta}(t)$. Entretanto, estas alternativas contribuiriam para aumentar muito o custo computacional do FKG. Diante disto, optamos por empregar uma aproximação linear de $\eta(X^{\delta}(t))$ em torno dos pontos $X(t) = X^{\omega_j}$ e $G^{\delta}(t) = 0$, denotada por $\tilde{\eta}(.)$, do seguinte modo,

$$\widetilde{\eta}_{\delta}(G^{\delta}) = \eta_{\delta}(X^{\omega_{j}}, 0) + \left[\frac{\partial \eta_{\delta}}{\partial G_{1}^{\delta}} \frac{\partial \eta_{\delta}}{\partial G_{2}^{\delta}} \frac{\partial \eta_{\delta}}{\partial G_{3}^{\delta}} \right] \Big|_{X(t) = X^{\omega_{j}}; G^{\delta}(t) = 0} G^{\delta}.$$
(6.3)

sendo $\eta_{\delta}(X(t), G^{\delta}(t)) = \eta(X^{\delta}(t))$ dados X(t) e $G^{\delta}(t)$. A partir desta aproximação, assumimos

$$\widetilde{P}\Big(\eta\big(X^{\delta}(t)\big) < 0, 3\big|X(t) = X^{\omega_j}\Big) \approx \widetilde{P}\Big(\widetilde{\eta}_{\delta}\big(G^{\delta}(t)\big) < 0, 3\big|X(t) = X^{\omega_j}\Big).$$
(6.4)

Note que a probabilidade à direita de (6.4) pode ser calculada facilmente a partir da função de distribuição acumulada de uma normal com média $\eta_{\delta}(X^{\omega_j}, 0)$ e variância dada por $\left\| \left[\frac{\partial \eta_{\delta}}{\partial G_1^{\delta}} \ \frac{\partial \eta_{\delta}}{\partial G_2^{\delta}} \ \frac{\partial \eta_{\delta}}{\partial G_3^{\delta}} \right] \right\|_{X(t) = X^{\omega_j}; G^{\delta}(t) = 0} \right\|_2^2.$ Finalmente, definimos

$$\widehat{X}(t|\mathscr{Z}^{t,+}) = \sum_{n=1}^{M} \widetilde{P}\Big(X(t) = X^{\omega_j} | \mathbf{Z}^{I}(t) \Big) X^{\omega_j},$$

e

$$\widehat{\mathbf{P}}(t|\mathscr{Z}^{t,+}) = \sum_{n=1}^{M} \widetilde{P}\left(X(t) = X^{\omega_j} | \mathbf{Z}^I(t)\right) \left(X^{\omega_j} - \widehat{\mathbf{X}}(t|\mathscr{Z}^{t,+})\right) \left(X^{\omega_j} - \widehat{\mathbf{X}}(t|\mathscr{Z}^{t,+})\right)^T$$

Resultados preliminares

Para avaliar as estimativas do FKG para a dinâmica do banco de sementes, fizemos experimentos iguais aos definido para o FKE na Seção 4.1, ou seja, empregamos as trajetórias geradas pelo controlador $u_{\ell}^{\text{csv},\infty}$, para $0 \le t \le T$, obtidas nos experimentos descritos na Seção 3.2. O algoritmo do FKG demandou 1890 minutos, ou aproximadamente 31,5 horas, para gerar as estimativas para as 1000 realizações do controle **CSV** ∞ , ou seja, um tempo 11,5% superior ao observado para o FKE.

Na Figura 34 apresentamos realizações do erro absoluto de estimativa da frequência do alelo *A* no banco. O gráfico à esquerda se refere aos resultados obtido pelo FKE, denotados por $e_{\ell}^{fke,\omega_n} = \rho\left(\widehat{X}_{\ell}^{fke,\omega_n}(t|\mathscr{Z}^{t,+})\right) - \rho\left(\mathbf{X}_{\ell}^{\omega_n}(t)\right)$, para $\ell = 5$ e $1 \le n \le 40$, enquanto no gráfico à direita apresentamos as realizações referentes ao FKG para a mesma parcela e realizações. As curvas com as mesmas cores nos gráficos da esquerda e direita correspondem às mesmas realizações. O FKG produziu uma média do módulo do erro, ou seja, $M^{-1}\sum_{n=1}^{M} N^{-1}\sum_{\ell \in \mathscr{L}} |e_{\ell}^{fkg,\omega_n}|$, aproximadamente 27% menor que a média do FKE. Dos gráfico da Figura 34 podemos notar que as curvas abaixo do eixo das abscissas para o FKG, em geral, se aproximam mais rápido deste eixo que as correspondentes realizações do FKE.



Figura 34 – Erro absoluto de estimativa da frequência do alelo A no banco de sementes da parcela $\ell = 5$. O gráfico à esquerda corresponde aos resultados obtidos pelo FKE e o gráfico à direita correspondente aos resultados do FKG.

Na Figura 35 apresentamos gráficos análogos aos da figura anterior, porém para o erro estimação da frequência do alelo *A* no conjunto de plantas adultas, variável relacionada com

o limiar adotado pelos controladores estudados no Capítulo 5 (vide definição 5.2). O gráfico à esquerda se refere aos resultados obtido pelo FKE, denotados por $\bar{e}_{\ell}^{fke,\omega_n} = F_{\ell}^{\omega_n,fke}(t) - \rho\left(\mathbf{Y}_{\ell}^{a,\omega_n}(t)\right)$, para $\ell = 5$ e $1 \le n \le 40$, enquanto no gráfico à direita apresentamos as realizações referentes ao FKG para a mesma parcela e realizações. Destacamos que o FKG produziu uma media do módulo do erro, ou seja, $M^{-1} \sum_{n=1}^{M} N^{-1} \sum_{\ell \in \mathscr{L}} |\bar{e}_{\ell}^{fkg,\omega_n}|$, aproximadamente 8% menor que a média do FKE.



Figura 35 – Erro absoluto de estimativa da frequência do alelo A no conjunto de plantas adultas da parcela le 5.
 O gráfico à esquerda corresponde aos resultados obtidos pelo FKE e o gráfico à direita correspondente aos resultados do FKG.

Por fim, destacamos que este é apenas um estudo preliminar de modo que há ainda possibilidades de melhorar a definição e construção do algoritmo implementado. Para ilustrar, mencionamos que em alguns ciclos de algumas realizações o FKG não conseguiu incorporar a informação $Z^{I}(t)$ pois obtinha $P(Z^{I}(t)|X(t) = X^{\omega_{j}}) = 0$ para todo $1 \le j \le J$, mesmo considerando um algoritmo adaptativo que adota um J crescente nestas situações. Entretanto, os resultados obtidos sugerem que a informação $Z^{I}(t)$ pode melhorar significativamente as estimativas das frequência do alelo A. Com isto, é possível que controladores baseados nas estimativas do FKG possam gerar melhores resultados que os controladores fundamentados nas estimativas do FKE apresentados no Capítulo 5.

6.2 Controle com fecundação artificial

Nesta seção apresentamos um estudo preliminar para avaliar o uso da fecundação artificial em conjunto com os controladores convencionais apresentados no Capítulo 3. A fecundação artificial é uma estratégia que em teoria pode retardar a evolução da resistência ou ainda diminuir mais rapidamente a frequência do alelo *A* no banco de sementes após a identificação visual da resistência em campo. Esta estratégia sugere a polinização das plantas daninhas com polens de plantas susceptíveis ao herbicida recomendado. Para avaliar esta proposta, adaptamos o modelo original da dinâmica do banco de sementes para considerar, além das possibilidades de fecundação cruzada e autofecundação, a fecundação artificial. Assumimos neste modelo que a quantidade total de sementes geradas por reprodução é independente dos mecanismos de fecundação. Assim, por este modelo, consideramos que a fecundação artificial simplesmente compete com os outros mecanismos de fecundação para determinar o genótipo das sementes. Desta forma, admitimos como válido o seguinte,

$$P(\mathscr{G}_i) = P(\mathscr{F}_{af})P(\mathscr{G}_i|\mathscr{F}_{af}) + P(\mathscr{F}_{fc})P(\mathscr{G}_i|\mathscr{F}_{fc}) + P(\mathscr{F}_{fa})P(\mathscr{G}_i|\mathscr{F}_{fa}), \quad (6.5)$$

em que \mathscr{G}_i se refere ao evento de que uma semente gerada intervalo *t*, tomada ao acaso, tenha o genótipo *i*, e \mathscr{F}_{af} , \mathscr{F}_{fc} e \mathscr{F}_{fa} se referem aos eventos de que a dada semente tenha sido gerada por auto fecundação, fecundação cruzada ou fecundação artificial, respectivamente. Assumindo que estes eventos são complementares, temos então que $P(\mathscr{F}_{af}) + P(\mathscr{F}_{fc}) + P(\mathscr{F}_{fa}) = 1$. Por hipótese, temos que $P(\mathscr{F}_{af})$ e $P(\mathscr{F}_{fc})$ são invariantes no tempo e dadas, e $P(\mathscr{F}_{fa})$ é definida pelo controlador.

Considerando o desenvolvimento apresentado em 2.1, para o cálculo de $P(\mathscr{G}_i)$ restanos conhecer $P(\mathscr{G}_i | \mathscr{F}_{fa})$. Para isto, empregando as mesmas hipóteses adotadas anteriormente e definindo \mathscr{A} como o evento de que um gameta tomado ao acaso e gerado pelas plantas adultas em *t* seja do tipo *A*, "fem" como o evento de que este gameta seja feminino e "masc" como o evento de que este gameta seja masculino, escrevemos o seguinte,

$$P(\mathscr{G}_{1}|\mathscr{F}_{fa}) = P(\mathscr{A}|\mathscr{F}_{fa}, \operatorname{fem})P(\mathscr{A}|\mathscr{F}_{fa}, \operatorname{masc}),$$

$$P(\mathscr{G}_{2}|\mathscr{F}_{fa}) = P(\mathscr{A}|\mathscr{F}_{fa}, \operatorname{fem})\left(1 - P(\mathscr{A}|\mathscr{F}_{fa}, \operatorname{masc})\right)$$

$$+\left(1 - P(\mathscr{A}|\mathscr{F}_{fa}, \operatorname{fem})\right)P(\mathscr{A}|\mathscr{F}_{fa}, \operatorname{masc})$$

$$P(\mathscr{G}_{3}|\mathscr{F}_{fa}) = \left(1 - P(A|\mathscr{F}_{fa}, \operatorname{fem})\right)\left(1 - P(\mathscr{A}|\mathscr{F}_{fa}, \operatorname{masc})\right).$$

No caso da fecundação artificial, os gametas masculinos (pólen) são introduzidos artificialmente enquanto os gametas femininos são produzidos pela própria população de plantas. Assim, temos que $P(\mathscr{A}^{-}|\mathscr{F}_{fa}, \text{fem}) = \rho(\mathbf{Y}^{a})$, sendo \mathscr{A}^{-} o evento de observamos um alelo do tipo *A* no início da fase haploide da gametogênese (vide (2.14)), e $P(\mathscr{A}|\mathscr{F}_{fa}, \text{masc})$ dado pela frequência do alelo *A* nos polens que serão introduzidos.

Resultados preliminares

Nestes estudos avaliamos dois tipos de controladores. O primeiro deles, que denotamos por FA IR α , emprega $P(\mathscr{F}_{fa}) = 0$ e o herbicida recomendado enquanto a resistência não for identificação em campo. Caso seja identificada um certo $t = t_I$, o controlador define pela troca de herbicida, do mesmo modo que CSV ∞ , porém adota também $P(\mathscr{F}_{fa}) = \alpha/100$ para $t \ge t_I$. Já o segundo controlador, denotado por FA α , emprega a mesma estratégia de CSV ∞ , porém adota $P(\mathscr{F}_{fa}) = \alpha/100$ para todo $t \ge 0$.

Para avaliar estes controladores consideramos uma área produtiva composta por uma única parcela de 18 *ha* e um horizonte de tempo T = 100. Consideramos também um cenário simplificado, em que a frequência do alelo *A* nos pólen introduzidos artificialmente é nula,

ou seja, assumimos $P(\mathscr{A}|\mathscr{F}_{fa}, \text{masc}) = 0$ para determinar $P(\mathscr{G}_i|\mathscr{F}_{fa})$. Para estes experimentos adotamos M = 1000 e as amostras $\{\mathbf{X}^{0,\omega_n}(0)\}_{\{1 \le n \le 1000\}}$, para as codições iniciais do banco de sementes, obtidas pelos experimentos descritos na Seção 2.2.

A Tabela 7 nos apresenta o valor médio do potencial de propagação da resistência, ou seja, $M^{-1} \sum_{n=1}^{M} K^{\omega_n}(T)$, para os controladores do tipo **FA IR** α . Observamos que o uso da fecundação artificial após a identificação da resistência é capaz de reduzir a quantidade do alelos *A* gerado por reprodução e consequentemente, reduzir também o potencial de propagação da resistência, como nos mostra a tabela. Como esperado, quanto maior o valor de α menor o valor obtido para estes indicadores. Note que para $\alpha = 40$ já seria possível reduzir em quase 50% o potencial de propagação em comparação com **CSV** ∞ .

Tabela 14 – Potencial de propagação da resistência em t = T. As duas primeiras linhas apresentam, respectivamente, os valores quando a área de destino emprega o herbicida recomendado e o herbicida alternativo. A terceira linha apresenta os valores relativos aos obtidos pela estratégia **CSV** ∞ .

	CSV ∞	FA IR 20	FA IR 40	FA IR 60	FA IR 80	FA IR 100
Propagação / $u^e = 1$	114,3	89	61,79	45,77	37,44	30,85
Propagação / $u^e = 2$	23,71	18,46	12,82	9,493	7,765	6,399
Propagação (%)	0	-22,13	-45,94	-59,96	-67,25	-73,01

A Tabela 6 apresenta a relação entre produção total média e impacto ambiental incremental médio no final do horizonte, ou seja, $\left(M^{-1}\sum_{n=1}^{M}\sum_{t=0}^{T}\sum_{\ell\in\mathscr{L}}H_{\ell}^{\omega_{n}}(t)\right)/\left(M^{-1}\sum_{n=1}^{M}I^{\omega_{n}}(T)\right)$, para os controladores **FA** α . Podemos observar que este indicador pode ser bastante melhorado com o uso da fecundação artificial. Isto ocorre pois a probabilidade de proliferação da resistência diminui e, consequentemente, a necessidade do uso do herbicida alternativo. Este fato diminui o impacto ambiental causado pelo controlador e por consequência melhora a relação entre produção e impacto ambiental.

Tabela 15 – Produtividade média acumulada ao longo do período [0,T] em relação ao impacto ambiental médio em t = T. A segunda linha apresenta os valores relativos aos obtidos pela estratégia **CSV** ∞ .

	CSV ∞	FA 20	FA 40	FA 60	FA 80	FA 100
Média (ton/doses)	350,7	392,1	451,9	622,2	813,4	1453
Média (%)	0	11,8	28,88	77,43	131,9	314,5

Tabela 16 nos apresenta o valor médio do potêncial de propagação da resistência. Podemos observar que este potencial de propagação pode ser ainda mais reduzido quando a fecundação artificial é empregada desde o início do horizonte, como podemos observar da comparação entre as tabelas 14 e 16. Para ilustrar, note que **FA 20** produz um potencial de propagação médio quase 30 % menor que o produzido por **FA IR 20**.

Tabela 16 – Potencial de propagação da resistência em t = T. As duas primeiras linhas apresentam, respectivamente, os valores quando a área de destino emprega o herbicida recomendado e o herbicida alternativo. A terceira linha apresenta os valores relativos aos obtidos pela estratégia **CSV** ∞ .

	CSV ∞	FA 20	FA 40	FA 60	FA 80	FA 100
Propagação / $u^e = 1$	114,3	63,62	33,4	19,05	14,51	12,33
Propagação / $u^e = 2$	23,71	13,2	6,928	3,95	3,009	2,558
Propagação (%)	0	-44,34	-70,78	-83,34	-87,31	-89,21

Ressaltamos novamente que estes resultados são frutos de um estudo preliminar que considera um modelo bastante simplificado, em que a quantidade de sementes geradas é independente do mecanismo de fecundação. Por outro lado, acreditamos que estes resultados podem motivar pesquisas teóricas e aplicadas de novas formas de manejo para o problema de controle de plantas daninhas.

CAPÍTULO

CONSIDERAÇÕES FINAIS

Este trabalho teve como propósito desenvolver estratégias de controle implementáveis e que diminuam os impactos ambientais causados pelo uso dos herbicidas, considerando a evolução da resistência nas populações de plantas daninhas. Para isto, assumimos que existe um herbicida, denominado herbicida recomendado, que é o preferível dentre os disponíveis por produzir uma boa relação entre os benefícios produtivos e os malefícios aos ecossistemas. Logo, para diminuir os impactos ambientais, as estratégias de controle devem priorizar o uso deste herbicida, mas ao mesmo tempo preservar sua eficiência no tempo, ou seja, conter a evolução da resistência a este herbicida.

Para cumprir com o propósito deste trabalho, primeiramente sugerimos e estudamos um modelo para a dinâmica do banco de sementes baseado em indivíduos, totalmente estocástico e que considera múltiplas parcelas em uma área de cultivo, que acreditamos serem características bastante condizentes com o ciclo de vida real de uma população de plantas daninhas. Destacamos que o modelo sugerido não requer a definição de valores para o banco em condições selvagens, uma variável de importância crítica para o estudo da evolução da resistência. Em um estudo particular, apresentado no Capítulo 2, assumimos uma área não dividia em parcelas e observamos que o valor esperado para a frequência selvagem do alelo *A* gerado pelo modelo condiz com a teoria de balanço de mutação-seleção, fato que que traz credibilidade à proposta.

A partir do modelo para o banco de sementes, propomos e avaliamos controladores fundamentados na identificação da resistência em campo e em estimativas para o banco de sementes geradas pelo filtro de Kalman estendido (FKE), informações estas possíveis de serem obtidas na prática. Estes controladores, denominados controladores com estimativas, foram projetados para priorizar o herbicida recomendado e ao mesmo tempo conter a frequência do alelo *A* no conjunto de plantas adultas. Destacamos ainda que estes controladores estão de acordo com as propostas de agricultura de precisão, pois define pelo herbicida a ser aplicado em cada parcela de uma área produtiva, e são também condizentes com a dinâmica da resistência, uma vez que esta evolui tanto no tempo quanto no espaço.

Acreditamos que este trabalho contribui também para desenvolver outras perspectivas para a formalização do problema de controle de plantas daninhas, uma vez que não tratamos o problema simplesmente do ponto de vista econômico, ou seja, assumindo o lucro da área produtiva como o principal indicador. Em vez de adotar este viés econômico, tentamos explorar a relação entre benefícios produtivos e malefícios aos ecossistemas causado pelo uso dos herbicidas. Ainda, apesar do modelo ter sido definido para uma única área produtiva, colocamos também em questão a preservação do herbicida recomendado de uma forma mais ampla, considerando também as dispersões de sementes resistentes entre as áreas produtivas. Pudemos observar, a partir de uma abstração do modelo proposto, que estratégias coordenas, tais como os controladores com estimativas, são melhores que estratégias não coordenadas em termos de preservação da eficiência do herbicida recomendado e diminuição de impactos ambientais para um cenário com múltiplas áreas produtivas.

Conclusões

A partir dos estudos apresentados no Capítulo 2, concluímos que o modelo sugerido é capaz de gerar estimativas para a frequência selvagem do alelo *A* a partir do próprio modelo do ciclo de vida das plantas daninhas. Ainda, concluímos que a evolução da resistência é bastante sensível não só ao valor esperado da distribuição de probabilidades adotada para gerar as estimativas da frequência selvagem de alelos, mas também à própria distribuição.

Dos estudos conduzidos no Capítulo 3, concluímos que os controladores com observação são melhores em relação à preservação da eficiência do herbicida recomendado, produtividade, impacto ambiental e propagação da resistência, que os controladores convencionais, projetados unicamente em função da informação de identificação da resistência.

A partir das simulações apresentadas no Capítulo 4, com foco na qualidade da estimativa (isolada do controle), concluímos que o filtro, a partir de informações ruidosas sobre a quantidade de plantas adultas em cada parcela, é capaz de gerar boas estimativas para o total de sementes no banco e para a frequência do alelo *A* no banco, e razoáveis estimativas para a frequência do alelo *A* no conjunto de plantas adultas.

Dos estudos do Capítulo 5, concluímos que controladores fundamentados nas estimativas do banco de sementes, produzidas pelo FKE, são melhores que os controladores convencionais na medida em que empregaram mais o herbicida recomendado e ao mesmo tempo são mais eficientes em conter a resistência a este herbicida. Com isto, apresentam melhores resultados em termos de preservação da eficiência do herbicida recomendado, produtividade, impacto ambiental e propagação da resistência que os controladores convencionais.

Trabalhos futuros

No Capítulo 6 sugerimos um algoritmo para generalizar o FKE, que denominamos filtro de Kalman generalizado (FKG). Este filtro emprega também como informação a variável de identificação da resistência em campo. Observamos que este filtro produziu melhores resultados que o FKE em termos de estimação da frequência do alelo *A* no conjunto de plantas adultas, uma variável chave para o controlador com estimativas. Com isto, acreditamos que um controlador fundamentado nas estimativas do FKG pode produzir, um comportamento melhor que o controlador estudado neste trabalho. Assim, acreditamos que investigações no sentido de desenvolver o FKG podem também contribuir para a pesquisa em controle de plantas daninhas.

No Capítulo 6, também apresentamos uma proposta teórica para a contenção da evolução da resistência que vai além da definição dos herbicidas a serem empregados, e considera também a fecundação artificial como estratégia de controle. Observamos a partir de um cenário bastantes simplificado, que esta estratégia pode ser capaz de retardar ou inibir o processo de evolução da resistência. Diante disto, acreditamos que esta linha de pesquisa fomente novas ideias para a pesquisa e o manejo de plantas daninhas.

Destacamos ainda outros pontos importantes para serem considerados em pesquisas futuras. Basicamente, estes pontos tentam promover uma maior aproximação dos modelos e controladores sugeridos neste trabalho às particularidades do problema real. O primeiro ponto que destacamos é estudar controladores e modelos para a dinâmica do banco de sementes com múltiplas áreas de cultivo. Acreditamos que isto pode contribuir estudos mais profundos sobre estratégias de controles centralizadas/coordenadas.

Um outro estudo interessante é considerar um número maior de parcelas e, ao mesmo tempo, diminuir o tamanho da área de cada parcela. Acreditamos que isto faria com que o modelo fosse mais compatível com a dinâmica do ciclo de vida das plantas, o que possibilitaria, por exemplo, a adoção de uma matriz de probabilidade de dispersão de sementes mais adequada às particularidades da dinâmica de dispersão. Ainda, acreditamos que parcelas de tamanho menor fariam com que o modelo empregado para a identificação da resistência também se tornasse mais condizente com a realidade, pois a resistência é em geral identificada quando pequenos grupos de plantas resistem à aplicação do herbicida. Em relação ao aspecto de implementação, notamos que um maior número de parcelas aumentaria muito o esforço computacional do FKE, de maneira que seria muito relevante investigar estimadores com menor custo computacional ou formas significativamente mais rápidas de implementação, como por exemplo, o uso de técnicas de computação paralela.

Um outro ponto de investigação que consideramos interessante, e que já foi objeto de estudos preliminares, é usar o próprio filtro para obter estimativas das probabilidades de dispersão das sementes. Considerando o modelo de dispersão adotado por este trabalho, apresentado por (3.15), o filtro deve estimar os parâmetros σ_x , σ_y , x_{ℓ}^c e y_{ℓ}^c , de modo que a quantidade de variáveis estimadas pelo filtro aumentaria em 4N.

Finalmente, destacamos que neste trabalho consideramos os parâmetros do modelo como dados e conhecidos pelo filtro, o que nunca é totalmente verdadeiro em problemas reais. Para avançar nesta questão, uma possibilidade seria admitir parâmetros estocásticos para o modelo da dinâmica do banco de sementes. Dentro deste ponto, caberia também estudos de robustez das estratégias de controle em relação às incertezas dos parâmetros.

CAPÍTULO

APÊNDICE

8.1 Controladores com rotação de herbicida

A Tabela 17 apresenta, para os controladores com rotação de herbicidas, o valor médio e o desvio padrão do impacto ambiental incremental no final do horizonte, obtidos das amostras, $\{I^{\omega_n}(T)\}_{\{1 \le n \le M\}}$. Observe que todos os controladores com *C* finito geram mais impactos ambientais que os controladores com $C = \infty$.

Tabela 17 – Valor médio e desvio padrão do impacto ambiental incremental em t = T. A terceira e quarta linha apresentam os valores relativos aos obtidos pela estratégia **CSV** ∞ .

	CSV ∞	$\mathrm{GUL} \propto$	CSV 01	CSV 05	CSV 20	CSV 50
Média	140,8	138,5	466,8	233,5	165,8	142,7
Desvio	221,9	209,4	50,24	159,8	208,1	215,7
Média (%)	0	-1,574	231,6	65,88	17,77	1,375
Desvio (%)	0	-5,62	-77,36	-28	-6,243	-2,798

8.2 Histogramas da frequência do alelo A

As Figuras 36 e 37, respectivamente, ilustram como os modelos LN e DET, definidos na Seção 2.2, preveem a evolução da frequência de alelo *A* a partir de sucessivas aplicações do herbicida recomendado.



Figura 36 – Histogramas da frequência do alelo A no banco de sementes obtidos pelo modelo LN nos ciclos t = 1,5,10,25,50,100. Os triângulos azuis indicam a média da frequência do alelo A enquanto o triângulo branco indica a média mais o desvio padrão.



Figura 37 – Histogramas da frequência do alelo A no banco de sementes obtidos pelo modelo DET nos ciclos t = 1,5,10,25,50,100. Os triângulos azuis indicam a média da frequência do alelo A enquanto o triângulo branco indica a média mais o desvio padrão.

8.3 Cálculo dos parâmetros do filtro de Kalman

Para facilitar a apresentação do cáculo dos elementos das matrizes $\widehat{F}(t)$, $\widehat{L}(t)$, $\widehat{H}(t)$ e $\widehat{M}(t)$, optamos por manter as equações das derivadas em função das variáveis $\widehat{X}(t|t-1)$ e $\widehat{X}(t|t)$ em que $\widehat{X}(t|t-1) = \widehat{X}(t|\mathscr{Z}^{t-1})$ e $\widehat{X}(t|t) = \widehat{X}(t|\mathscr{Z}^{t})$. Também nos utilizamos das formas

vetorizadas das variáveis de ruidos, que serão representadas por uma linha acima da notação da variável, para ilustrar, considere $\overline{G}^{\delta}(t) = vec(G^{\delta}(t))$. Ainda, para facilitar notação, definimos os elementos $S^{v}(t) = [X(t), u(t), \overline{V}(t)], S^{w}(t) = [X(t), u(t), \overline{W}(t)], \widehat{S}(t|t) = [\widehat{X}(t|t), u(t), 0]$ e $\widehat{S}(t|t-1) = [\widehat{X}(t|t-1), u(t), 0]$, e também a quantidade de plantas adultas estimada pelo filtro, $\widehat{Y}^{a}(t|t) \in \mathbb{R}^{3N}$, definida por $\widehat{Y}^{a}_{im}(t|t) = \delta v_{i,m} \widehat{X}_{im}(t|t)$, para todo $i \in \mathscr{G}$ e $m \in \mathscr{L}$, sendo im = 3(m-1) + i. Por fim, é importante destacar que apresentamos as equações do Filtro de Kalman estendido considerando também a possibilidade da fecundação artificial. Por isto, empregamos $P(\mathscr{G}_{i})$, definido por (6.5), em substituição a $P(\mathscr{G}^{n}_{i})$, definido em (2.11).

O cálculo de $\widehat{F}(t)$

Para o cálculo de $\widehat{F}(t)$, definida em (4.3), escrevemos, para todo $i, j \in \mathcal{G}$ e $l, o \in \{1, ..., N\}$, o seguinte

$$\widehat{\mathbf{F}}_{i\ell,jo}(t) = \frac{\partial \overline{\mathbf{X}}_{i\ell}(t+1)}{\partial \overline{\mathbf{X}}_{jo}(t)} \bigg|_{S^{\nu}(t) = \widehat{S}(t|t)}$$
(8.1)

sendo $i\ell = 3(l-1) + i$ e jo = 3(o-1) + j. Note por (4.12) que é válida a equação

$$\frac{\partial \overline{\mathbf{X}}_{i\ell}(t+1)}{\partial \overline{\mathbf{X}}_{jo}(t)} = \frac{\partial \overline{\mathbf{X}}_{i\ell}(t)}{\partial \overline{\mathbf{X}}_{jo}(t)} - \frac{\partial \overline{\mathbf{X}}_{i\ell}^{o}(t)}{\partial \overline{\mathbf{X}}_{jo}(t)} - \frac{\partial \overline{\mathbf{X}}_{i\ell}^{\psi}(t)}{\partial \overline{\mathbf{X}}_{jo}(t)} + \sum_{m \in \mathscr{L}} \frac{\partial \overline{\mathbf{X}}_{im\ell}^{d}(t)}{\partial \overline{\mathbf{X}}_{jo}(t)},$$
(8.2)

em que iml = 3N(l-1) + 3(m-1) + i. Com isto, os elementos de $\widehat{F}(t)$ podem ser obtidos observando o seguinte

$$\frac{\partial \overline{\mathbf{X}}_{i\ell}(t)}{\partial \overline{\mathbf{X}}_{jo}(t)} \bigg|_{S^{\nu}(t) = \widehat{S}(t|t)} = \begin{cases} 1, & i = j \quad e \quad \ell = o; \\ 0, & c.c.; \end{cases}$$
(8.3)

$$\frac{\partial \overline{X}_{i\ell}^{\delta}(t)}{\partial \overline{X}_{jo}(t)} \bigg|_{S^{\nu}(t) = \widehat{S}(t|t)} = \begin{cases} \delta, & i = j \quad e \quad \ell = o; \\ 0, & c.c.; \end{cases}$$
(8.4)

$$\frac{\partial \overline{X}_{i\ell}^{\psi}(t)}{\partial \overline{X}_{jo}(t)} \bigg|_{S^{\nu}(t) = \widehat{S}(t|t)} = \begin{cases} \psi(1-\delta), & i=j \quad e \quad \ell=o; \\ 0, & c.c. \end{cases}$$
(8.5)

Para o cálculo da derivada de $\overline{X}_{in\ell}^d(t)$ em relação $\overline{X}_{jo}(t)$, observe que podemos escrever

$$\frac{\partial X_{im\ell}^{d}}{\partial \overline{X}_{jo}} = \frac{\partial X_{im}^{g}}{\partial \overline{X}_{jo}} P(\mathscr{D}_{m,l})$$

$$= \kappa \left[\frac{\partial \overline{x}_{m}^{r}}{\partial \overline{X}_{jo}} P(\mathscr{G}_{i,m}) + \overline{x}_{m}^{r} \frac{\partial P(\mathscr{G}_{i,m})}{\partial \overline{X}_{jo}} \right] P(\mathscr{D}_{m,l})$$

$$= \kappa \left[\frac{\partial \overline{x}_{m}^{r}}{\partial y_{o}^{a}} \frac{\partial y_{o}^{a}}{\partial \overline{X}_{jo}} P(\mathscr{G}_{i,m}) + \overline{x}_{m}^{r} \frac{\partial P(\mathscr{G}_{i,m})}{\partial \overline{Y}_{jo}^{a}} \frac{\partial \overline{Y}_{jo}^{a}}{\partial \overline{X}_{jo}} \right] P(\mathscr{D}_{m,l})$$
(8.6)

em que im = 3(m-1) + i, e $P(\mathscr{G}_{i,m})$ é obtido como sugerido na Seção 2.1 porém, empregando $\widehat{Y}^a_{im}(t|t)$ para a quantidade de plantas adultas de cada genótipo. Para o cálculo de (8.6) aplicada

em $\overline{\mathbf{X}}(t) = \widehat{\mathbf{X}}(t|t), u = u(t)$ e $\overline{\mathbf{V}}(t) = 0$, é válido o seguinte

Logo, precisamos ainda obter $\frac{\partial P(\mathcal{G}_{i,m})}{\partial \overline{Y}_{jo}}$ aplicada no ponto de interesse. Para isto, temos que

$$\frac{\partial P(\mathscr{G}_{i,m})}{\partial \overline{Y}_{jo}^{a}} = P(F_{af}) \frac{\partial P(\mathscr{G}_{i,m}|\mathscr{F}_{af})}{\partial \overline{Y}_{jo}^{a}} + P(F_{fc}) \frac{\partial P(\mathscr{G}_{i,m}|\mathscr{F}_{fc})}{\partial \overline{Y}_{jo}^{a}} + P(F_{fa}) \frac{\partial P(\mathscr{G}_{i,m}|\mathscr{F}_{fa})}{\partial \overline{Y}_{jo}^{a}}.$$
 (8.8)

Para o cálculo da primeira derivada à direita de (8.8), lembrando da relação apresentada em (2.12) e observando que $\frac{\partial P(\mathcal{G}_i | \mathscr{F}_{af}, \mathscr{G}_{km})}{\partial \overline{Y}_{jo}} = 0$ para todo $k \in \mathscr{G}$, sendo km = 3(m-1) + k, temos então

$$\frac{\partial P(\mathscr{G}_{i,m}|\mathscr{F}_{af})}{\partial \overline{\mathbf{Y}}_{jo}^{a}} = \sum_{k \in \mathscr{G}} \frac{\partial P(\mathscr{G}_{km}|\mathscr{F}_{af})}{\partial \overline{\mathbf{Y}}_{jo}^{a}} P(\mathscr{G}_{i,m}|\mathscr{F}_{af},\mathscr{G}_{km}),$$

sendo,

$$\frac{\partial P(\mathscr{Y}_{km}|\mathscr{F}_{af})}{\partial \overline{Y}_{jo}^{a}}\bigg|_{S^{\nu}(t)=\widehat{S}(t|t)} = \begin{cases} \left.\frac{\sum_{h\in\mathscr{G}}(\widehat{Y}_{ho}^{a})-\widehat{Y}_{ko}^{a}}{\left[\sum_{h\in\mathscr{G}}(\widehat{Y}_{ho}^{a})\right]^{2}}, \quad k=j, \quad m=o;\\ \frac{-\widehat{Y}_{ko}^{a}}{\left[\sum_{h\in\mathscr{G}}(\widehat{Y}_{ho}^{a})\right]^{2}}, \quad k\neq j, \quad m=o;\\ 0 \qquad c.c. \end{cases}$$

sendo km = 3(m-1) + k, ho = 3(o-1) + h e ko = 3(o-1) + k.

Para o cálculo da segunda derivada de (8.8), temos

$$\frac{\partial P(\mathscr{G}_{i,m}|\mathscr{F}_{fc})}{\partial \overline{Y}_{jo}^{a}}\bigg|_{S^{v}(t)=\widehat{S}(t|t)} = \begin{cases} 2\frac{\partial P(\mathscr{A}_{m}|\mathscr{F}_{fc})}{\partial \overline{Y}_{jo}^{a}}, & i=1, \quad m=o;\\ 2\frac{\partial P(\mathscr{A}_{m}|\mathscr{F}_{fc})}{\partial \overline{Y}_{jo}^{a}} - 4\frac{\partial P(\mathscr{A}_{m}|\mathscr{F}_{fc})}{\partial \overline{Y}_{jo}^{a}}P(\mathscr{A}_{m}|\mathscr{F}_{fc}), & i=2, \quad m=o;\\ 2P(\mathscr{A}_{m}|\mathscr{F}_{fc})\frac{\partial P(\mathscr{A}_{m}|\mathscr{F}_{fc})}{\partial \overline{Y}_{jo}^{a}} - 2\frac{\partial P(\mathscr{A}_{m}|\mathscr{F}_{fc})}{\partial \overline{Y}_{jo}^{a}}, & i=3, \quad m=o;\\ 0, & c.c., \end{cases}$$

sendo $P(\mathscr{A}_m|\mathscr{F}_{fc})$ obtido como sugerido na Seção 2.1 porém, empregando-se o valor estimado pelo filtro para a quantidade de plantas adultas de cada genótipo, ou seja, $Y^a_{im}(t|t)$. Note que omitimos a aplicação das derivadas do lado direito da chave em $S^v(t) = \widehat{S}(t|t)$, para facilitar visualização. Os valores destas derivadas são dados por

$$\begin{split} \frac{\partial P(\mathscr{A}_{m}|\mathscr{F}_{fc})}{\partial \overline{\mathbf{Y}}_{jo}^{a}} \bigg|_{S^{\mathbf{v}}(t)=\widehat{S}(t|t)} &= \left(\frac{2\widehat{Y}_{2,o}^{a}+4\widehat{Y}_{3,o}^{a}}{\left[\sum_{h\in\mathscr{G}}(\widehat{Y}_{h,o}^{a})\right]^{2}}\right) \left(1-2P(\mathscr{M})\right), \quad j=1, \quad m=o;\\ \frac{\partial P(\mathscr{A}_{m}|\mathscr{F}_{fc})}{\partial \overline{\mathbf{Y}}_{jo}^{a}} \bigg|_{S^{\mathbf{v}}(t)=\widehat{S}(t|t)} &= \left(\frac{-2\widehat{Y}_{1,o}^{a}+2\widehat{Y}_{3,o}^{a}}{\left[\sum_{h\in\mathscr{G}}(\widehat{Y}_{ho}^{a})\right]^{2}}\right) \left(1-2P(\mathscr{M})\right), \quad j=2, \quad m=o;\\ \frac{\partial P(\mathscr{A}_{m}|\mathscr{F}_{fc})}{\partial \overline{\mathbf{Y}}_{jo}^{a}} \bigg|_{S^{\mathbf{v}}(t)=\widehat{S}(t|t)} &= \left(\frac{-4\widehat{Y}_{1,o}^{a}-2\widehat{Y}_{2,o}^{a}}{\left[\sum_{h\in\mathscr{G}}(\widehat{Y}_{ho}^{a})\right]^{2}}\right) \left(1-2P(\mathscr{M})\right), \quad j=3, \quad m=o; \end{split}$$

Já o cálculo da terceira derivada de (8.8) é dado por

$$\begin{aligned} \frac{\partial P(\mathscr{G}_{j,m}|\mathscr{F}_{fa})}{\partial \overline{Y}_{jo}^{a}} &= \frac{\partial P(\mathscr{A}_{m})}{\partial \overline{Y}_{jo}^{a}} P\left(\mathscr{A}_{m}|\mathscr{F}_{fa}, \mathrm{masc}\right), \quad j = 1, \quad m = o; \\ \frac{\partial P(\mathscr{G}_{j,m}|\mathscr{F}_{fa})}{\partial \overline{Y}_{jo}^{a}} &= \frac{\partial P(\mathscr{A}_{m})}{\partial \overline{Y}_{jo}^{a}} \left(1 - 2P(\mathscr{A}_{m}|\mathscr{F}_{fa}, \mathrm{masc})\right), \quad j = 2, \quad m = o; \\ \frac{\partial P(\mathscr{G}_{j,m}|\mathscr{F}_{fa})}{\partial \overline{Y}_{jo}^{a}} &= -\frac{\partial P(\mathscr{A}_{m})}{\partial \overline{Y}_{jo}^{a}} \left(1 - P(\mathscr{A}_{m}|\mathscr{F}_{fa}, \mathrm{masc})\right), \quad j = 3, \quad m = o. \end{aligned}$$

Com isto, conseguimos obter todos os elementos para o cálculo de $\widehat{F}(t)$.

O cálculo de $\widehat{L}(t)$

Da definição da matriz $\widehat{L}(t)$, em (4.4), podemos escrever, para todo $i \in \mathscr{G}$, $\ell \in \mathscr{L}$ e $v \in \{1, \dots, 14N + 3N^2\}$, o seguinte

$$\widehat{\mathcal{L}}_{i\ell,\nu}(t) = \frac{\partial \overline{\mathcal{X}}_{i\ell}(t+1)}{\partial \overline{\mathcal{V}}_{\nu}(t)} \bigg|_{S^{\nu}(t) = \widehat{S}(t|t)}.$$
(8.9)

sendo $i\ell = 3(l-1) + i$. Logo, observando a definição de $\overline{V}(t)$ em (4.25), note que podemos obter $\widehat{L}_{i\ell,\nu}(t)$, a partir dos seguintes equações,

$$\widehat{\mathcal{L}}_{i\ell,jo}(t) = \frac{\partial \overline{\mathcal{X}}_{i\ell}(t+1)}{\partial \overline{G}_{jo}^{\delta}(t)} \bigg|_{S^{\nu}(t) = \widehat{S}(t|t)}$$
(8.10)

$$\widehat{\mathcal{L}}_{i\ell,jo+3N}(t) = \left. \frac{\partial \overline{\mathcal{X}}_{i\ell}(t+1)}{\partial \overline{G}_{jo}^{\psi}(t)} \right|_{S^{\nu}(t) = \widehat{S}(t|t)}$$
(8.11)

$$\widehat{\mathcal{L}}_{i\ell,jo+6N}(t) = \left. \frac{\partial \overline{\mathcal{X}}_{i\ell}(t+1)}{\partial \overline{G}_{jo}^{a}(t)} \right|_{S^{v}(t) = \widehat{S}(t|t)}$$
(8.12)

$$\widehat{\mathcal{L}}_{i\ell,o+9N}(t) = \left. \frac{\partial \overline{\mathcal{X}}_{i\ell}(t+1)}{\partial \overline{g}_o^r(t)} \right|_{S^v(t) = \widehat{S}(t|t)}$$
(8.13)

$$\widehat{\mathcal{L}}_{i\ell,o+10N}(t) = \frac{\partial \overline{\mathcal{X}}_{i\ell}(t+1)}{\partial \overline{g}_o^{\kappa}(t)} \bigg|_{S^{\nu}(t) = \widehat{S}(t|t)}$$
(8.14)

$$\widehat{\mathcal{L}}_{i\ell,jo+11N}(t) = \frac{\partial \overline{\mathcal{X}}_{i\ell}(t+1)}{\partial \overline{G}_{jo}^g(t)} \bigg|_{S^{v}(t) = \widehat{S}(t|t)}$$
(8.15)

$$\widehat{\mathcal{L}}_{i\ell,jop+14N}(t) = \frac{\partial \overline{\mathbf{X}}_{i\ell}(t+1)}{\partial \overline{\mathbf{G}}_{jop}^d(t)} \Big|_{S^{\nu}(t) = \widehat{S}(t|t)}$$
(8.16)

sendo jo = 3(o-1) + j e jop = 3N(p-1) + 3(o-1) + j. O cálculo de (8.10)-(8.16) pode ser obtido a partir de equação análoga a (8.2), porém, considerando as derivadas de $X_{i\ell}(t)$, $X_{i\ell}^{\delta}(t)$, $X_{i\ell}^{\Psi}(t)$ e $X_{im\ell}^{d}$ em relação às variáveis de interesse.

Para obtermos (8.10), temos para todo $i, j \in \mathscr{G}$ e $\ell, o \in \mathscr{L}$, que

$$\begin{split} \frac{\partial \overline{X}_{i\ell}(t)}{\partial \overline{G}_{jo}^{\delta}(t)} \bigg|_{S^{\mathrm{v}}(t) = \widehat{S}(t|t)} &= 0 \\ \frac{\partial \overline{X}_{i\ell}^{\delta}(t)}{\partial \overline{G}_{jo}^{\delta}(t)} \bigg|_{S^{\mathrm{v}}(t) = \widehat{S}(t|t)} &= \begin{cases} \sqrt{\widehat{X}_{jo}(t|t)\delta(1-\delta)}, & i=j \ \mathrm{e} \ \ell = o; \\ 0, & c.c.; \end{cases} \\ \frac{\partial \overline{X}_{i\ell}^{\Psi}(t)}{\partial \overline{G}_{jo}^{\delta}(t)} \bigg|_{S^{\mathrm{v}}(t) = \widehat{S}(t|t)} &= \begin{cases} -\psi \sqrt{\widehat{X}_{jo}(t|t)\delta(1-\delta)}, & i=j \ \mathrm{e} \ \ell = o; \\ 0, & c.c.; \end{cases} \end{split}$$

Já para o cálculo da derivada de $X_{im\ell}^d$, a partir de um desenvolvimento similar a (8.6), obtemos o seguinte

$$\frac{\partial \overline{X}_{im\ell}^d}{\partial \overline{G}_{jo}^{\delta}} = \kappa \left[\frac{\partial \overline{x}_m^r}{\partial y_m^a} \frac{\partial y_m^a}{\partial \overline{G}_{jo}^{\delta}} P(\mathscr{G}_{i,m}) + \overline{x}_m^r \frac{\partial P(\mathscr{G}_{i,m})}{\partial \overline{Y}_{im}^a} \frac{\partial \overline{Y}_{im}^a}{\partial \overline{G}_{jo}^{\delta}} \right] P(\mathscr{D}_{m,l}).$$

A derivada $\frac{\partial \overline{x}_m^r}{\partial y_m^a}$ é dada em (8.7) e a derivada $\frac{\partial P(\mathcal{G}_{i,m})}{\partial \overline{Y}_{im}^a}$ é obtida a partir de (8.8). As demais são apresentadas na sequência.

$$\frac{\partial y_m^a}{\partial \overline{G}_{j,o}^{\delta}} \bigg|_{S^{v}(t) = \widehat{S}(t|t)} = \begin{cases} v_{j,o} \sqrt{\overline{X}_{jo}(t)\delta(1-\delta)}, & m = o; \\ 0, & c.c.; \end{cases}$$
(8.17)

$$\frac{\partial \overline{Y}^{a}_{im}}{\partial \overline{G}^{\delta}_{jo}}\Big|_{S^{v}(t)=\widehat{S}(t|t)} = \begin{cases} v_{j,o}\sqrt{\overline{X}_{jo}(t)\delta(1-\delta)}, & i=j, \qquad m=o;\\ 0, & c.c.; \end{cases}$$
(8.18)

Para obtermos (8.11), temos para todo $i,j\in \mathcal{G}$
e $\ell,m,o\in \mathcal{L},$ que

$$\frac{\partial \overline{X}_{i\ell}(t)}{\partial \overline{G}_{jo}^{\Psi}(t)} \bigg|_{S^{\nu}(t) = \widehat{S}(t|t)} = \frac{\partial \overline{X}_{i\ell}^{\delta}(t)}{\partial \overline{G}_{jo}^{\Psi}(t)} \bigg|_{S^{\nu}(t) = \widehat{S}(t|t)} = \frac{\partial \overline{X}_{im\ell}^{d}(t)}{\partial \overline{G}_{jo}^{\Psi}(t)} \bigg|_{S^{\nu}(t) = \widehat{S}(t|t)} = 0$$

e ainda que

$$\frac{\partial \overline{X}_{i\ell}^{\psi}(t)}{\partial \overline{G}_{jo}^{\psi}} \bigg|_{S^{\psi}(t) = \widehat{S}(t|t)} = \begin{cases} \sqrt{\widehat{X}_{jo}(t|t)(1-\delta)\psi(1-\psi)}, & i = j, \quad \ell = o; \\ 0, & c.c.; \end{cases}$$
(8.19)

Para obtermos (8.12), temos para todo $i, j \in \mathcal{G}$ e $\ell, m, o \in \mathcal{L}$, que

$$\frac{\partial \overline{X}_{i\ell}(t)}{\partial \overline{G}_{jo}^{a}(t)}\bigg|_{S^{\nu}(t)=\widehat{S}(t|t)} = \frac{\partial \overline{X}_{i\ell}^{\delta}(t)}{\partial \overline{G}_{jo}^{a}(t)}\bigg|_{S^{\nu}(t)=\widehat{S}(t|t)} = \frac{\partial \overline{X}_{i\ell}^{\psi}(t)}{\partial \overline{G}_{jo}^{a}(t)}\bigg|_{S^{\nu}(t)=\widehat{S}(t|t)} = 0;$$

e ainda, a partir de um desenvolvimento similar a (8.6), obtemos o seguinte

$$\frac{\partial \overline{X}^{d}_{im\ell}}{\partial \overline{G}^{a}_{jo}} = \kappa \sum_{m} \left[\frac{\partial \overline{x}^{r}_{m}}{\partial y^{a}_{m}} \frac{\partial y^{a}_{m}}{\partial \overline{G}^{a}_{j,o}} P(\mathscr{G}_{i,m}) + \overline{x}^{r}_{m} \frac{\partial P(\mathscr{G}_{i,m})}{\partial \overline{Y}^{a}_{im}} \frac{\partial \overline{Y}^{a}_{im}}{\partial \overline{G}^{a}_{jo}} \right] P(\mathscr{D}_{m,l}).$$

A derivada $\frac{\partial \overline{x}_m^r}{\partial y_m^a}$ é dada em (8.7) e a derivada $\frac{\partial P(\mathcal{G}_{i,m})}{\partial \overline{Y}_{im}^a}$ é obtida a partir de (8.8). As demais são apresentadas na sequência.

$$\frac{\partial y_m^a}{\partial \overline{G}_{jo}^a} \bigg|_{S^{\nu}(t) = \widehat{S}(t|t)} = \begin{cases} \sqrt{\delta \widehat{X}_{jo}(t|t) \nu_{j,o}(1-\nu_{j,o})}, & m = o; \\ 0, & c.c.; \end{cases}$$
(8.20)

$$\frac{\partial \overline{Y}^{a}_{im}}{\partial \overline{G}^{a}_{jo}}\Big|_{S^{v}(t)=\widehat{S}(t|t)} = \begin{cases} \sqrt{\delta \widehat{X}_{jo}(t|t) v_{j,o}(1-v_{j,o})}, & i=j, \quad m=o; \\ 0, & c.c.; \end{cases}$$
(8.21)

Para obtermos (8.13), temos para todo $i \in \mathcal{G}$ e $\ell, m, o \in \mathcal{L}$, que

$$\frac{\partial \overline{X}_{i\ell}(t)}{\partial g_o^r(t)}\bigg|_{S^v(t)=\widehat{S}(t|t)} = \frac{\partial \overline{X}_{i\ell}^{\delta}(t)}{\partial g_o^r(t)}\bigg|_{S^v(t)=\widehat{S}(t|t)} = \frac{\partial \overline{X}_{i\ell}^{\psi}(t)}{\partial g_o^r(t)}\bigg|_{S^v(t)=\widehat{S}(t|t)} = 0;$$

e também que

$$\frac{\partial \overline{X}_{im\ell}^d}{\partial g_o^r} = \kappa \frac{\partial x_m^r}{\partial g_o^r} P(\mathscr{G}_{i,m}) P(\mathscr{D}_{m,l})$$
(8.22)

sendo

$$\frac{\partial x_m^r}{\partial g_o^r} \bigg|_{S^{\nu}(t) = \widehat{S}(t|t)} = \begin{cases} \varphi \frac{F_o \widehat{y}_o^a(t|t)}{F_o + g \widehat{y}_o^a(t|t)/G}, & m = o, \quad \widehat{y}_o^a(t|t) > 0; \\ 0, & c.c.; \end{cases}$$
(8.23)

em que $\widehat{y}_o^a(t|t) = \sum_k \widehat{Y}_{k,o}^a(t|t)$.

Para obtermos (8.14), temos para todo $i \in \mathscr{G}$ e $\ell, m, o \in \mathscr{L}$, que

$$\frac{\partial \overline{X}_{i\ell}(t)}{\partial g_o^{\kappa}(t)}\bigg|_{S^{\nu}(t)=\widehat{S}(t|t)} = \frac{\partial \overline{X}_{i\ell}^{\delta}(t)}{\partial g_o^{\kappa}(t)}\bigg|_{S^{\nu}(t)=\widehat{S}(t|t)} = \frac{\partial \overline{X}_{i\ell}^{\psi}(t)}{\partial g_o^{\kappa}(t)}\bigg|_{S^{\nu}(t)=\widehat{S}(t|t)} = 0;$$

e também que

$$\frac{\partial \overline{X}_{im\ell}^d}{\partial g_o^{\kappa}} = \frac{\partial x_m^{\kappa}}{\partial g_o^{\kappa}} P(\mathscr{G}_{i,m}) P(\mathscr{D}_{m,l}), \qquad (8.24)$$

sendo

$$\frac{\partial x_m^{\kappa}}{\partial g_o^{\kappa}}\Big|_{S^{\nu}(t)=\widehat{S}(t|t)} = \begin{cases} \sqrt{\frac{F_o g \widehat{y}_o^a(t|t)}{F_o + g \widehat{y}_o^a(t|t)/G} \kappa(1-\kappa)}, & m = o, \quad \widehat{y}_o^a(t|t) > 0; \\ 0, & c.c. \end{cases}$$
(8.25)

Para obtermos (8.15), temos para todo $i, j \in \mathcal{G}$ e $\ell, m, o \in \mathcal{L}$, que

$$\frac{\partial \overline{X}_{i\ell}(t)}{\partial \overline{G}_{jo}^{g}(t)}\bigg|_{S^{v}(t)=\widehat{S}(t|t)} = \frac{\partial \overline{X}_{i\ell}^{\delta}(t)}{\partial \overline{G}_{jo}^{g}(t)}\bigg|_{S^{v}(t)=\widehat{S}(t|t)} = \frac{\partial \overline{X}_{i\ell}^{\psi}(t)}{\partial \overline{G}_{jo}^{g}(t)}\bigg|_{S^{v}(t)=\widehat{S}(t|t)} = 0;$$

e também que

$$\frac{\partial \overline{X}_{im\ell}^d}{\partial \overline{G}_{jo}^g} = \frac{\partial \overline{X}_{im}^g}{\partial \overline{G}_{jo}^g} P(\mathscr{D}_{m,l}), \tag{8.26}$$

sendo

$$\frac{\partial \overline{X}_{im}^g}{\partial \overline{G}_{jo}^g} \bigg|_{S^v(t) = \widehat{S}(t|t)} = \begin{cases} P(\mathscr{G}_{j,o}), & i = j \quad m = o; \\ 0, & c.c.; \end{cases}$$
(8.27)

Finalmente, para obtermos (8.16), temos para todo $i, j \in \mathcal{G}$ e $\ell, m, o, p \in \mathcal{L}$, que

$$\frac{\partial \overline{X}_{i\ell}(t)}{\partial \overline{G}_{jop}^{d}(t)}\bigg|_{S^{\nu}(t)=\widehat{S}(t|t)} = \frac{\partial \overline{X}_{i\ell}^{\delta}(t)}{\partial \overline{G}_{jop}^{d}(t)}\bigg|_{S^{\nu}(t)=\widehat{S}(t|t)} = \frac{\partial \overline{X}_{i\ell}^{\Psi}(t)}{\partial \overline{G}_{jop}^{d}(t)}\bigg|_{S^{\nu}(t)=\widehat{S}(t|t)} = 0;$$

e também que

$$\frac{\partial \overline{X}_{im\ell}^d}{\partial \overline{G}_{jop}^d} \bigg|_{S^{\nu}(t) = \widehat{S}(t|t)} = \begin{cases} 1, & i = j, \quad m = o, \quad \ell = p; \\ 0, & c.c. \end{cases}$$
(8.28)

Com isto, conseguimos obter todos os elementos para o cálculo de $\widehat{L}(t)$.

O cálculo de $\widehat{H}(t)$

Lembrando a definição de $\widehat{H}(t)$ apresentada em (4.9), podemos escrever, para todo $j \in \mathscr{G}$ e $l, o \in \mathscr{L}$ o seguinte

$$\widehat{\mathbf{H}}_{\ell,jo}(t) = \frac{\partial \mathbf{Z}_{\ell}(t)}{\partial \overline{\mathbf{X}}_{jo}(t)} \bigg|_{S^{w}(t) = \widehat{S}(t|t-1)} = \begin{cases} 0, & o \neq l, \\ \delta \mathbf{v}_{j,o}, & o = l, \end{cases}$$
(8.29)

em que jo = (o-1)N + j.

O cálculo de $\widehat{\mathbf{M}}(t)$

Observando a definição da matriz $\widehat{M}(t)$, em (4.10), podemos escrever, para todo $l \in \mathscr{L}$ e $w \in \{1, ..., 7N\}$,

$$\widehat{\mathbf{M}}_{\ell,w}(t) = \frac{\partial Z_{\ell}(t)}{\partial \overline{\mathbf{W}}_{w}(t)} \bigg|_{S^{w}(t) = \widehat{S}(t|t-1)}.$$
(8.30)

Com isto, para o cálculo desta matriz é preciso obter a derivada de Z(t) em relação aos vetores $\overline{G}^{\delta}(t), \overline{G}^{a}(t) \in \overline{y}^{s}(t)$, para todo $j \in \mathscr{G}$ e $l, o \in \mathscr{L}$,

$$\begin{split} \widehat{\mathbf{M}}_{\ell,jo}(t) &= \frac{\partial \mathbf{Z}_{\ell}(t)}{\partial \overline{G}_{jo}^{\delta}(t)} \bigg|_{S^{w}(t) = \widehat{S}(t|t-1)} &= \begin{cases} \mathbf{v}_{j,o} \sqrt{\widehat{\mathbf{X}}_{jo}(t|t-1)\delta\left(1-\delta\right)}, & o = l\\ 0, & o \neq l, \end{cases} \\ \widehat{\mathbf{M}}_{\ell,jo+3N}(t) &= \frac{\partial \mathbf{Z}_{\ell}(t)}{\partial \overline{G}_{jo}^{d}(t)} \bigg|_{S^{w}(t) = \widehat{S}(t|t-1)} &= \begin{cases} \sqrt{\delta \widehat{\mathbf{X}}_{jo}(t|t-1)\mathbf{v}_{j,o}\left(1-\mathbf{v}_{j,o}\right)}, & o = l, \\ 0, & o \neq l. \end{cases} \\ \widehat{\mathbf{M}}_{\ell,o+6N}(t) &= \frac{\partial \mathbf{Z}_{\ell}(t)}{\partial \overline{\mathcal{T}}_{o}^{w}(t)} \bigg|_{S^{w}(t) = \widehat{S}(t|t-1)} &= \begin{cases} \phi_{o}\delta \sum_{k \in \mathscr{G}} \mathbf{v}_{k,o} \widehat{\mathbf{X}}_{ko}(t|t-1), & o = l, \\ 0, & o \neq l. \end{cases} \end{split}$$

em que jo = 3(o-1) + j e ko = 3(o-1) + k.
ANDERSON, B. D. O.; MOORE, J. B. **Optimal Filtering**. First. London: Prentice-Hall, 1979. Citado 2 vezes nas páginas 23 e 24.

BAGAVATHIANNAN, M. V.; NORSWORTHY, J. K.; SMITH, K. L.; NEVE, P. Modeling the Evolution of Glyphosate Resistance in Barnyardgrass (Echinochloa crus-galli) in Cotton-Based Production Systems of the Midsouthern United States. **Weed Technology**, 27, n. 3, p. 475–487, JUL-SEP 2013. Citado 2 vezes nas páginas 22 e 33.

BERGELSON, J.; PURRINGTON, C. B.; PALM, C. J.; LOPEZ-GUTIERREZ, J. C. Costs of resistance: A test using transgenic arabidopsis thaliana. **Proceedings: Biological Sciences**, v. 263, n. 1377, p. 1659–1663, 1996. Citado na página 47.

CAVAN, G.; CUSSANS, J.; MOSS, S. R. Modelling different cultivation and herbicide strategies for their effect on herbicide resistance in alopecurus myosuroides. **Weed Research**, v. 40, n. 6, p. 561–568, 2000. Citado na página 22.

CHRISTOFFOLETI, P. J. Aspectos de Resistência de Plantas Daninhas a Herbicidas. 3. ed. ed. [S.l.]: Associação Brasileira de Ação à Resistência de Plantas aos Herbicidas (HRAC-BR), 2008. Citado 2 vezes nas páginas 23 e 42.

COUSENS, R. A simple model relating yield loss to weed density. **Annals of Applied Biology**, v. 107, n. 2, p. 239–252, 1985. Citado na página 44.

DEGROOT, M.; SCHERVISH, M. **Probability and Statistics**. [S.1.]: Addison-Wesley, 2002. (Addison-Wesley series in statistics). Citado 2 vezes nas páginas 23 e 26.

DIGGLE, A. J.; NEVE, P. B.; SMITH, F. P. Herbicides used in combination can reduce the probability of herbicide resistance in finite weed populations. **Weed Research**, v. 43, n. 5, p. 371–382, 2003. Citado 3 vezes nas páginas 22, 28 e 29.

DURBIN, J.; KOOPMAN, S. J. **Time Series Analysis by State Space Methods**. [S.l.]: Oxford University Press, 2012. Citado na página 24.

HOLST, N.; RASMUSSEN, I. A.; BASTIAANS, L. Field weed population dynamics: a review of model approaches and applications. **Weed Research**, v. 47, n. 1, p. 1–14, 2007. Citado na página 20.

IBAMA. Acessado em 12/04/2016. Disponível em: http://www.ibama.gov.br/ qualidade-ambiental/avaliacao-do-potencial-de-periculosidade-ambiental-ppa>. Citado na página 45.

JASIENIUK, M.; BRULEBABEL, A.; MORRISON, I. The evolution and genetics of herbicide resistance in weeds. **Weed Science**, 44, n. 1, p. 176–193, JAN-MAR 1996. Citado 3 vezes nas páginas 19, 22 e 32.

JULIER, S. J.; UHLMANN, J. K. A new extension of the kalman filter to nonlinear systems. In: KADAR, I. (Ed.). **SIGNAL PROCESSING, SENSOR FUSION, AND TARGET RE-COGNITION VI.** [S.1.], 1997. (PROCEEDINGS OF THE SOCIETY OF PHOTO-OPTICAL INSTRUMENTATION ENGINEERS (SPIE), v. 3068), p. 182–193. Citado na página 24.

KALMAN, R. E. A new approach to linear filtering and prediction problems. **ASME Journal of Basic Engineering**, 1960. Citado 2 vezes nas páginas 24 e 61.

LEMOS, J.; GALVÃO, J.; SILVA, A.; FONTANETTI, A.; CECON, P.; LEMOS, L. Management of Bidens pilosa and Commelina benghalensis in organic corn cultivation under no-tillage . **Planta Daninha**, v. 31, p. 351 – 357, 06 2013. Citado na página 21.

LORENZI, H. **Plantas daninhas do Brasil : terrestres, aquáticas, parasitas, tóxicas e medicinais.** [S.1.]: Editora Plantarum, 1991. Citado na página 34.

MANALIL, S.; RENTON, M.; DIGGLE, A.; BUSI, R.; POWLES, S. B. Simulation modelling identifies polygenic basis of herbicide resistance in a weed population and predicts rapid evolution of herbicide resistance at low herbicide rates. **Crop Protection**, v. 40, n. 0, p. 114 – 120, 2012. Citado na página 22.

MELO, A. V. D.; GALVÃO, J.; FERREIRA, L.; MIRANDA, G.; SANTOS, L. T.; SANTOS, I.; SOUZA, L. Dinâmica populacional de plantas daninhas em cultivo de milho-verde nos sistemas orgânico e tradicional. **Planta Daninha**, v. 25, p. 521 – 527, 09 2007. Citado na página 21.

MENCHARI, Y.; CHAUVEL, B.; DARMENCY, H.; DéLYE, C. Fitness costs associated with three mutant acetylcoenzyme a carboxylase alleles endowing herbicide resistance in black-grass alopecurus myosuroides. **Journal of Applied Ecology**, v. 45, n. 3, p. 939–947, 2008. Citado na página 47.

NEVE, P. Simulation modelling to understand the evolution and management of glyphosate resistance in weeds. **Pest Management Science**, v. 64, n. 4, p. 392–401, 2008. Citado 2 vezes nas páginas 22 e 31.

_____. Simulation modelling to understand the evolution and management of glyphosate resistant in weeds. **Pest Management Science**, 64, n. 4, p. 392–401, APR 2008. Citado 2 vezes nas páginas 30 e 34.

NEVE, P.; DIGGLE, A. J.; SMITH, F. P.; POWLES, S. B. Simulating evolution of glyphosate resistance in Lolium rigidum I: population biology of a rare resistance trait. **Weed Research**, 43, n. 6, p. 404–417, DEC 2003. Citado 3 vezes nas páginas 22, 28 e 29.

_____. Simulating evolution of glyphosate resistance in Lolium rigidum II: past, present and future glyphosate use in Australian cropping. **Weed Research**, 43, n. 6, p. 418–427, DEC 2003. Citado 3 vezes nas páginas 22, 28 e 29.

NEVE, P.; NORSWORTHY, J. K.; SMITH, K. L.; ZELAYA, I. A. Modeling Glyphosate Resistance Management Strategies for Palmer Amaranth (Amaranthus palmeri) in Cotton. **Weed Technology**, 25, n. 3, p. 335–343, JUL-SEP 2011. Citado 2 vezes nas páginas 22 e 33.

_____. Modelling evolution and management of glyphosate resistance in amaranthus palmeri. **Weed Research**, v. 51, n. 2, p. 99–112, 2011. Citado 3 vezes nas páginas 22, 31 e 33.

RASMUSSEN, K.; CHEMIN, P.; HAASTRUP, P. Regulatory requirements for biocides on the market in the european union according to directive 98/8/ec1. Journal of Hazardous Materials, v. 67, n. 3, p. 237 – 251, 1999. Citado na página 19.

RELYEA, R. A. The impact of insecticides and herbicides on the biodiversity and productivity of aquatic communities. **Ecological Applications**, v. 15, n. 2, p. 618–627, 2005. Citado na página 19.

RENTON, M.; BUSI, R.; NEVE, P.; THORNBY, D.; VILA-AIUB, M. Herbicide resistance modelling: past, present and future. **Pest Management Science**, v. 70, n. 9, p. 1394–1404, 2014. Citado 5 vezes nas páginas 20, 21, 22, 23 e 27.

RENTON, M.; DIGGLE, A.; MANALIL, S.; POWLES, S. Does cutting herbicide rates threaten the sustainability of weed management in cropping systems? **Journal of Theoretical Biology**, v. 283, n. 1, p. 14 – 27, 2011. Citado 2 vezes nas páginas 22 e 23.

RISTIC, B.; ARULAMPALAM, S.; GORDON, N. **Beyond the Kalman filter: Particle filters** for tracking applications. [S.1.]: Artech house, 2004. Citado 2 vezes nas páginas 24 e 61.

RITTER, C.; SCHULZE, W. H. W.; POTYAGAYLO, D.; DÖSSEL, O. An ideally parameterized unscented kalman filter for the inverse problem of electrocardiography. **Current Directions in Biomedical Engineering**, 2015. Citado na página 24.

RIZZARDI, M. A.; FLECK, N. G.; MUNDSTOCK, C. M.; BIANCHI, M. A. Perdas de rendimento de grãos de soja causadas por interferênciacia de picão-preto e guanxuma. 2003. Citado na página 47.

ROUX, F.; PARIS, M.; REBOUD, X. Delaying weed adaptation to herbicide by environmental heterogeneity: a simulation approach. **Pest Management Science**, 64, n. 1, p. 16–29, JAN 2008. Citado 3 vezes nas páginas 29, 30 e 34.

ROUX, F.; REBOUD, X. Herbicide resistance dynamics in a spatially heterogeneous environment. **Crop Protection**, v. 26, n. 3, p. 335 - 341, 2007. Weed Science in Time of Transition. Citado 3 vezes nas páginas 19, 20 e 30.

SMITH, J. M. **Evolutionary Genetics**. [S.l.]: Oxford University Press, 1998. Citado 3 vezes nas páginas 22, 27 e 35.

SUN, M.; GANDERS, F. R. Outcrossing Rates and Allozyme Variation in Rayed And Rayless Morphs of Bidens-pilosa. **Heredity**, 64, n. 1, p. 139–143, FEB 1990. Citado 2 vezes nas páginas 28 e 34.

THORNBY, D. F.; WALKER, S. R. Simulating the evolution of glyphosate resistance in grains farming in northern Australia. **Annals of Botany**, 104, n. 4, p. 747–756, SEP 2009. Citado na página 22.

THORP, K.; TIAN, L. A review on remote sensing of weeds in agriculture. **Precision Agriculture**, v. 5, n. 5, p. 477–508, 2004. Citado 2 vezes nas páginas 23 e 61.

VILA-AIUB, M. M.; NEVE, P.; POWLES, S. B. Fitness costs associated with evolved herbicide resistance alleles in plants. **New Phytologist**, v. 184, n. 4, p. 751–767, 2009. Citado 2 vezes nas páginas 34 e 47.

WAN, E. A.; der MERWE, R. V. The unscented kalman filter for nonlinear estimation. In: Adaptive Systems for Signal Processing, Communications, and Control Symposium 2000. AS-SPCC. The IEEE 2000. [S.l.: s.n.], 2000. p. 153–158. Citado 2 vezes nas páginas 24 e 65.

WEEDSCIENCE. International survey of herbicide resistant weeds. Acessado em 02/04/2016. Disponível em: http://weedscience.org/. Citado na página 19.

WELLS, C. The Kalman Filter in Finance. [S.1.]: Springer, 1995. Citado na página 24.

WSSA. **WSSA POSITION STATEMENT ON BIOLOGICAL CONTROL OF WEEDS**. Acessado em 02/04/2016. Disponível em: http://wssa.net/wssa/weed/biological-control/. Ci-tado na página 19.

_____. Acessado em 02/04/2016. Disponível em: http://wssa.net/wssa/weed/resistance/ herbicide-resistance-and-herbicide-tolerance-definitions/>. Citado na página 19.

_____. Acessado em 02/04/2016. Disponível em: http://wssa.net/wssa/weed/resistance/>. Citado na página 20.