Universidade Federal de São Carlos Centro de Ciências Exatas e de tecnologia Departamento de Estatística

ANÁLISE ESTATÍSTICA DE DADOS ULTRASSÔNICOS PARA A SELEÇÃO DE CARACTERÍSTICAS DA ALVENARIA QUE COMPROMETEM SUA ESTABILIDADE

Renan Vinicius Rodrigues

Trabalho de Conclusão de Curso

Universidade Federal de São Carlos Centro de Ciências Exatas e de Tecnologia Departamento de Estatística

ANÁLISE ESTATÍSTICA DE DADOS ULTRASSÔNICOS PARA A SELEÇÃO DE CARACTERÍSTICAS DA ALVENARIA QUE COMPROMETEM SUA ESTABILIDADE

Renan Vinicius Rodrigues Orientadora: Prof^a.Dr^a. Daiane Aparecida Zuanetti Coorientadora: Prof^a.Dr^a. Rosineide Fernando da Paz

> Trabalho de Conclusão de Curso a ser apresentado como parte dos requisitos para obtenção do título de Bacharel em Estatística.

São Carlos 14 de Janeiro de 2021

Renan Vinicius Rodrigues

ANÁLISE ESTATÍSTICA DE DADOS ULTRASSÔNICOS PARA A SELEÇÃO DE CARACTERÍSTICAS DA ALVENARIA QUE COMPROMETEM SUA ESTABILIDADE

Este exemplar corresponde à redação final do trabalho de conclusão de curso devidamente corrigido e defendido por "Renan Vinicius Rodrigues" e aprovado pela banca examinadora.

São Carlos, 14 de Janeiro de 2021

Banca Examinadora

- Prof^a. Dr^a. Daiane Aparecida Zuanetti
- Prof^o. Dr^o. Marcio Alves Diniz
- Prof^o. Dr^o. Ricardo Felipe Ferreira

Dedicatória

"Dedico esse Trabalho para minha mãe Beatriz (
 $in\ memorian)$ que sempre será minha inspiração".

Agradecimentos

"Primeiramente agradeço à minha família Diva, Sebastião, Zilda, Reinaldo, Gerson, Heloisa, Sofia, Maria, Marco, Ruãn, Leonardo e Ligia por todo apoio, não só enquanto estava fazendo meu TCC, mas ao longo de toda minha vida.

Agradeço tambem à Prof^a Dr^a Daiane Zuanetti, que não foi apenas minha orientadora, mas também uma amiga e até mesmo uma psicóloga. Agradeço até por seus puxões de orelha que sem dúvidas me ajudaram a melhorar.

À Prof^a.Dr^a. Rosineide Fernando da Paz e aos professores da banca Marcio Diniz e Ricardo Ferreira, pelas dicas, sugestões e pelo tempo dedicado para me auxiliar na construção de meu trabalho.

Aos integrantes do PET estatística, da Comissão organizadora da Semana da Estatística e aos membros do Conselho do curso de estatística pelas risadas, trabalho em equipe e principalmente pela ajuda no meu crescimento pessoal.

A Beatriz Fabricio por todas as palavras que ajudaram a me acalmar nos momentos mais estressantes, pelas risadas e pela amizade.

À Prof^a Dr^a Estela Maris por ser uma professora que acreditou em mim desde o meu primeiro semestre na graduação e fez com certeza a diferença na minha vida.

Por fim, mas não menos importante, agradeço ao Claudio Leão, Maria Luiza, Luri Ikeda, Edvaldo Coelho, Lais Sebastiany, Mariana Ioca, Rafaela Marques, Victor Girardi, Thais Maira, Tatiana Nicéas, Thiago Reis, Erilaine Costa, Ana Beatriz, Nicoli Yamamoto, Amanda Striolli, Gretta Rossi, Natalia Cavalaro, Marcela Musetti, Ching Yu, Gabriela Massoni, Clézio Lopez, Angelo Ghigiarelli, Mateus Broder, Giovanna Nesterick, Lucas Yuri, Tom Massoni, Kevin Silva, Jeferson Oliveira, Vanessa Graziela, Walter Gabriel, Rosane dos Santos, Saulo Leandro e a todos amigos que fiz durante a graduação, mas que não mencionei aqui, por todos momentos que vivemos e por todo apoio."

Resumo

A estabilidade das construções é uma preocupação que ganha cada vez mais foco no mundo atual, já que saber se a alvenaria de uma determinada construção está comprometida diminui as chances que a mesma cause perdas econômicas e/ou deixe em risco a saúde e segurança das pessoas que a frequentam. Para que as modificações nas estruturas sejam mínimas na hora de analisar a estabilidade de uma construção, ensaios não destrutivos utilizando ondas ultrassônicas surgem como uma ferramenta útil para verificar a condição de uma alvenaria e, se aplicados em construções com diferentes características, permitem estudar como essas características modificam a velocidade de propagação dessa onda em seu interior e como elas interferem na estabilidade da construção.

Nesse trabalho, portanto, analisamos e identificamos quais aspectos (tijolos, argamassa ou interface das duas; presença ou não de vazios nas paredes e a altura da medição em relação ao solo) mais impactam na velocidade das ondas ultrassônicas no interior das paredes e, consequentemente, verificamos como o comportamento da onda reflete a estabilidade da construção.

Palavras-chave: Modelos mistos, processos Gaussianos, estabilidade de construções, processos não destrutivos.

Sumário

1	Intr	rodução	1										
2	Mo	delos mistos	3										
	2.1	.1 Variância e covariância											
	2.2	Estimação por métodos frequentistas											
	2.3	Estimação por métodos Bayesianos											
		2.3.1 Comparação entre métodos frequentistas e Bayesianos	9										
		2.3.2 Distribuições a priori	10										
		2.3.3 Distribuições a posteriori	12										
		2.3.4 Estimação pontual	13										
		2.3.5 Estimação intervalar	14										
3	Pro	cessos Gaussianos	17										
	3.1	t Distribuição normal multivariada											
	3.2	Processo Gaussiano	18										
	3.3	Modelo Gaussiano	19										
	3.4	A função média											
	3.5	A função de covariância	22										
	3.6	Estimação	24										
		3.6.1 Distribuições a priori	24										
		3.6.2 Distribuições a posteriori	25										
4	Banco de dados 27												
	4.1	Análise descritiva	29										
5	Resultados 35												
	5.1	Modelos mistos	35										

	5.2	Estimação	37
	5.3	Processos Gaussianos	42
	5.4	Estimação	43
	5.5	Comparação entre modelo mistos e processos Gaussianos	46
		5.5.1 Análise preditiva	46
6	Con	clusão e estudos futuros	59
A	Cálo	culo das distribuições condicionais completas a posteriori	61
	A.1	Modelo misto	61
	A.2	Processos Gaussianos	63
в	Cód	ligos	65
	B.1	Código stan do modelo misto	65
	B.2	Código stan para o modelo com PG	66
	B.3	Construção das matrizes de planejamento e de variância e covariância	67
	B.4	Estimação dos modelos	70
С	Grá	ficos de traço e de autocorrelação	73

Lista de Tabelas

5.1	Tabela resumo dos valores gerados da <i>posteriori</i> para σ^2	38
5.2	Tabela resumo dos valores gerados da <i>posteriori</i> para β	38
5.3	Tabela resumo dos valores gerados da posteriori para G	39
5.4	Tabela resumo dos valores gerados da <i>posteriori</i> para σ^2	43
5.5	Tabela resumo dos valores gerados da <i>posteriori</i> para β	43

Lista de Figuras

2.1	Função densidade da distribuição $Uniforme(0,1)$	10
2.2	Função de densidade da distribuição $Beta(100, 300)$	11
2.3	Posteriori da priori Uniforme e posteriori da priori Beta	12
3.1	Gráfico do tempo de propagação de uma onda ultrassônica pela distância	
	percorrida	19
3.2	Reta de regressão para o tempo de propagação de uma onda ultrassônica	
	em relação à distância percorrida	20
4.1	Paredes $P1$ e $P2$ de alvenaria maciça	27
4.2	Parede dividida em quadrantes	28
4.3	Perfis de propagação da onda para o primeiro quadrante	29
4.4	Perfis de propagação da onda para o segundo quadrante	30
4.5	Perfis de propagação da onda para o terceiro quadrante	30
4.6	Perfis de propagação da onda para o quarto quadrante	31
4.7	Perfis de propagação da onda para o quinto quadrante	31
4.8	Perfis de propagação da onda para o sexto quadrante	32
4.9	Perfis de propagação da onda para o sétimo quadrante	32
4.10	Perfis de propagação da onda para o oitavo quadrante.	33
4.11	Perfis de propagação da onda para o nono quadrante	33
4.12	Perfis de propagação da onda para o décimo quadrante	33
4.13	Perfis de propagação da onda para o décimo primeiro quadrante	34
4.14	Perfis de propagação da onda para o décimo segundo quadrante	34
4.15	Perfis de propagação da onda no tijolo, argamassa e interface dos dois. $\ .$.	34
5.1	Histograma dos valores estimados de b_{i1}	40
5.2	Histograma dos valores estimados de b_{i2}	40

5.3	Histograma dos valores estimados de b_{i3}	41
5.4	Histograma dos valores estimados de b_{i4}	41
5.5	Boxplots comparativos para os b s estimados	42
5.6	Histograma dos $\eta(d_i)$ estimados	44
5.7	Boxplot dos $\eta(d_i)$ estimados	45
5.8	Comparação das curvas preditas e observadas do quadrante 1	47
5.9	Comparação das curvas preditas e observadas do quadrante 2	48
5.10	Comparação das curvas preditas e observadas do quadrante 3	49
5.11	Comparação das curvas preditas e observadas do quadrante 4	50
5.12	Comparação das curvas preditas e observadas do quadrante 5	50
5.13	Comparação das curvas preditas e observadas do quadrante 6	51
5.14	Comparação das curvas preditas e observadas do quadrante 7	51
5.15	Comparação das curvas preditas e observadas do quadrante 8	52
5.16	Comparação das curvas preditas e observadas do quadrante 9	52
5.17	Comparação das curvas preditas e observadas do quadrante 10	53
5.18	Comparação das curvas preditas e observadas do quadrante 11	53
5.19	Comparação das curvas preditas e observadas do quadrante 12	54
5.20	Gráfico dos resíduos do modelo misto para cada observação.	54
5.21	Histograma para os resíduos do modelo misto.	55
5.22	Boxplot para os resíduos do modelo misto.	55
5.23	Gráfico dos resíduos do modelo com PG de cada observação	56
5.24	Histograma para os resíduos do modelo com PG	56
5.25	Boxplot para os resíduos do modelo com PG	57
C.1	Gráfico de traço para o parâmetro σ^2 do modelo misto	74
C.2	Gráfico de traço para o parâmetro β_1 do modelo misto	74
C.3	Gráfico de traço para o parâmetro β_3 do modelo misto	75
C.4	Gráfico de traço para o parâmetro β_5 do modelo misto	75
C.5	Gráfico de traço para o parâmetro b_{11}	76
C.6	Gráfico de traço para o parâmetro σ^2 do modelo com <i>PG</i>	76
C.7	Gráfico de traço para o parâmetro β_1 do modelo com PG	77
C.8	Gráfico de traço para o parâmetro β_3 do modelo com <i>PG</i>	77
C.9	Gráfico de traço para o parâmetro β_5 do modelo com PG	78

C.10 Gráfico de traço para o parâmetro $\eta(d_1)$.	78
C.11 Gráfico de traço para o parâmetro $\eta(d_{1382})$	79
C.12 Gráfico de autocorrelação para o parâmetro β_1 do modelo misto	79
C.13 Gráfico de autocorrelação para o parâmetro β_3 do modelo misto	80
C.14 Gráfico de autocorrelação para o parâmetro β_5 do modelo misto	80
C.15 Gráfico de autocorrelação para o parâmetro b_{11}	81
C.16 Gráfico de autocorrelação para o parâmetro σ^2 do modelo com PG	81
C.17 Gráfico de autocorrelação para o parâmetro β_1 do modelo com PG	82
C.18 Gráfico de autocorrelação para o parâmetro β_5 do modelo com PG	82
C.19 Gráfico de autocorrelação para o parâmetro $\eta(d_1)$	83
C.20 Gráfico de autocorrelação para o parâmetro $\eta(d_{1382})$	83

Capítulo 1

Introdução

O ser humano, com o passar do tempo, vem constantemente aprimorando as técnicas e os materiais utilizados na área da construção civil e concomitantemente vem aumentando a preocupação com o desgaste causado pelas variáveis atmosféricas como temperatura e umidade do ar, radiação solar, precipitação, vento, abalos sísmicos, salinidade (em regiões litorâneas), entre outras variáveis em construções que já foram finalizadas. Detalhes podem ser vistos em De Souza *et al.* (2016). Em paralelo, aumentou-se também a necessidade de entender quais características de uma determinada edificação mais influenciam nesse desgaste.

Para estudar o desgaste ocorrido ao longo do tempo pelas mais diversas causas, muitas vezes ensaios destrutivos, ou seja, processos que alteram de forma permanente as propriedades mecânicas, químicas ou dimensionais da estrutura de uma construção, não são viáveis. Em construções históricas, principalmente, sua forma original necessita ser respeitada ao máximo dado que a mesma possui grande valor cultural para o espaço e para a sociedade (Mesquita *et al.*, 2016). Assim, ensaios não destrutivos se tornam uma importante ferramenta para analisar a qualidade de uma edificação. Uma forma de realizar esse tipo de ensaio é através de ondas ultrassônicas que podem fornecer informações necessárias para detectar danos no interior de paredes e, assim, prever sua situação. Um método cada vez mais utilizado é a medição da velocidade de propagação dessas ondas no interior dessas paredes como podemos observar em Ramirez (2015). No entanto, poucos trabalhos fazem uso de ferramentas adequadas da estatística para analisar esse tipo de dados (Rodrigues, 2020).

Diante do exposto, o objetivo deste trabalho é estudar e entender como as ondas ultrassônicas superficiais (conhecidas como Rayleigh) se comportam no interior de alvenarias maciças, observando-se as variações gerais do tempo de propagação dessas ondas ultrassônicas na parede em diferentes condições (material através do qual a onda é propagada: tijolo, argamassa ou interface do tijolo com argamassa; presença ou não de vazios nas paredes; altura em que a medição é realizada em relação ao solo; entre outras condições). Essa análise é realizada com o auxílio de métodos estatísticos mais sofisticados e, possivelmente, mais adequados dos que são comumente utilizados (como regressão linear simples, dispersão dos dados e correlação de Pearson) e, assim, entender como as condições da parede refletem no comportamento da onda. Essas informações podem ser utilizadas por engenheiros civis para ajudá-los a decidir sobre a necessidade ou não de ser realizada alguma intervenção para reabilitação da edificação analisada.

Como comparamos duas metodologias diferentes para um mesmo conjunto de dados, utilizamos algumas métricas para comparar a capacidade preditiva de ambos os modelos. As métricas utilizadas são: análise de resíduos e o Erro Quadrático Médio (EQM).

Nesse trabalho, analisamos as curvas de tempo de propagação das ondas através de paredes de alvenaria usando modelos mistos (Singer e Andrade, 1986; Rodrigues, 2009; Camarinha Filho, 2002) e processos Gaussianos (Ebden, 2008; Rocha *et al.*, 2015; Banerjee *et al.*, 2008; Lopes, 2014) que são metodologias tradicionais na análise de dados longitudinais ou de medidas repetidas e que consideram e modelam a associação existente entre medidas realizadas a partir da mesma onda.

O relatório está organizado da seguinte maneira: o Capítulo 2 e o Capítulo 3 descrevem e discutem métodos de estimação dos modelos mistos e processos Gaussianos, respectivamente. O Capítulo 4 mostra como o banco de dados utilizado está estruturado e apresenta a análise descritiva. O Capítulo 5 apresenta os resultados obtidos e a comparação dos métodos utilizados. O Capítulo 6 contém a conclusão e quais estudos futuros poderão ser feitos. Por fim os detalhes de como encontramos as distribuições condicionais completas *a posteriori* dos parâmetros, os códigos para estimação e análise dos modelos, os gráficos de traço e os gráficos de autocorrelação de alguns parâmetros estimados estão dispostos no Apêndice.

Capítulo 2

Modelos mistos

O modelo misto é um modelo de regressão que possui tanto efeitos fixos como aleatórios, ou seja, existem efeitos que não possuem uma distribuição de probabilidade associada a eles e outros que possuem uma distribuição associada. Os efeitos fixos são vistos como parâmetros desconhecidos, mas comum a todas observações da amostra, enquanto que os efeitos aleatórios (com uma distribuição associada) são vistos como uma variável aleatória, cujo valor pode ser diferente para cada unidade amostral. Essa propriedade de conter os dois tipos de efeitos, torna esse modelo útil para trabalhar com dados longitudinais ou de medidas repetidas que apresentam correlação entre as medidas em uma mesma unidade amostral (Singer e Andrade, 1986).

O modelo misto linear, em geral, possui a seguinte forma:

$$\mathbf{Y}_i = \mathbf{X}_i \boldsymbol{\beta} + \mathbf{Z}_i \mathbf{b}_i + \boldsymbol{\epsilon}_i$$
, para $i = 1, 2, ..., n_i$

sendo $\mathbf{b}_i \sim Normal(\mathbf{0}, \mathbf{G}) \in \boldsymbol{\epsilon}_i \sim Normal(\mathbf{0}, \mathbf{R}_i)$. Se assumirmos $\mathbf{b}_i \in \boldsymbol{\epsilon}_i$ independentes, temos $E(\mathbf{Y}_i) = \mathbf{X}_i \boldsymbol{\beta} \in Var(\mathbf{Y}_i) = \mathbf{V}_i = \mathbf{Z}_i \mathbf{G} \mathbf{Z}_i^T + \mathbf{R}_i$, em que:

 \mathbf{Y}_i é o vetor aleatório com as variáveis respostas da *i*-ésima unidade experimental;

 β é o vetor paramétrico com os efeitos fixos do modelo com dimensão $(t \times 1)$;

 \mathbf{X}_i é a matriz de planejamento não aleatória de $\boldsymbol{\beta}$ com dimensão $(p_i \times t)$;

 \mathbf{b}_i é o vetor dos efeitos aleatórios associados à *i*-ésima unidade experimental do modelo com dimensão ($q \times 1$);

 \mathbf{Z}_i é a matriz de planejamento não aleatória de \mathbf{b}_i com dimensão $(p_i \times q)$;

 ϵ_i é o vetor dos erros aleatórios associado à *i*-ésima unidade experimental com dimensão $(p_i \times 1);$

G é a matriz de variância e covariância dos efeitos aleatórios com dimensão $(q \times q)$;

 \mathbf{R}_i é a matriz de variância e covariância do *i*-ésimo erro aleatório com dimensão $(p_i \times p_i)$; e

0 é um vetor de zeros com dimensão $(q \times 1)$.

Uma etapa importante para construir um modelo misto é escolher quais serão os efeitos fixos e quais serão os aleatórios. Contudo essa escolha não é trivial e nem única e depende do contexto dos dados, do objetivo do pesquisador e do tipo de estudo realizado (Rocha, 2017).

Devido a isso, na literatura não é encontrada facilmente uma definição de como decidir entre os efeitos, já que uma definição simples que solucione o problema para qualquer modelo não existe e, para conseguirmos saber da melhor forma possível como tratar os efeitos, primeiramente devemos estudar o impacto causado ao considerarmos-os como sendo fixos ou aleatórios.

Os efeitos fixos, como já falados, são tratados como parâmetros desconhecidos e comuns a toda observação. Logo, para as covariáveis que consideramos não afetar a variável resposta (\mathbf{Y}_i) em cada observação de maneira diferente, a melhor forma de tratar seus efeitos é considerá-los como fixos. Já o efeito aleatório pode ser diferente para cada unidade amostral e, devido a isso, estes geralmente são os efeitos das covariáveis que possuem impacto diferente em cada observação.

2.1 Variância e covariância

Um elemento importante a ser pensado ao modelar dados longitudinais ou medidas repetidas é a estrutura de covariância a ser adotada entre as observações. Diggle (1988) e Diggle *et al.* (2002) dizem que \mathbf{V}_i deve ser flexível o suficiente para incluir a variação dos erros, a variação dos efeitos aleatórios e as correlações das observações. Essas variações são dadas pelas matrizes \mathbf{R}_i , $\mathbf{G} \in \mathbf{Z}_i$, respectivamente.

Existem muitas estruturas de matrizes de covariâncias na literatura, algumas mais conhecidas estão descritas abaixo, considerando dimensão $p_i=4$:

$$\mathbf{V}_{i} = \begin{bmatrix} \sigma^{2} + \tau & \tau & \tau & \tau \\ \tau & \sigma^{2} + \tau & \tau & \tau \\ \tau & \tau & \sigma^{2} + \tau & \tau \\ \tau & \tau & \tau & \sigma^{2} + \tau \end{bmatrix},$$

sendo que $\tau \in \mathbb{R}$ e $\sigma^2 + \tau$ representam variâncias e, devido a isso, $\sigma^2 + \tau > 0$ e $\sigma^2 > 0$;

• Estrutura AR(1)

$$\mathbf{V}_{i} = \sigma^{2} \begin{bmatrix} 1 & \rho & \rho^{2} & \rho^{3} \\ \rho & 1 & \rho & \rho^{2} \\ \rho^{2} & \rho & 1 & \rho \\ \rho^{3} & \rho^{2} & \rho & 1 \end{bmatrix},$$

em que $\sigma^2 > 0$ e $\rho \in [-1; 1];$

• Estrutura ARMA(1,1)

$$\mathbf{V}_{i} = \sigma^{2} \begin{bmatrix} 1 & \gamma & \gamma \rho & \gamma \rho^{2} \\ \gamma & 1 & \gamma & \gamma \rho \\ \gamma \rho & \gamma & 1 & \gamma \\ \gamma \rho^{2} & \gamma \rho & \gamma & 1 \end{bmatrix},$$

em que $\sigma^2 > 0, \, \gamma \in [-1; 1]$ e $\rho \in [-1; 1];$

• Estrutura Toeplitz

$$\mathbf{V}_{i} = \begin{bmatrix} \sigma^{2} & \sigma_{1} & \sigma_{2} & \sigma_{3} \\ \sigma_{1} & \sigma^{2} & \sigma_{1} & \sigma_{2} \\ \sigma_{2} & \sigma_{1} & \sigma^{2} & \sigma_{1} \\ \sigma_{3} & \sigma_{2} & \sigma_{1} & \sigma^{2} \end{bmatrix},$$

sendo que $\sigma^2 > 0$ e $\sigma_i \in \mathbb{R}$ para i = 1, 2, 3;

• Estrutura de Markov

$$\mathbf{V}_{i} = \sigma^{2} \begin{bmatrix} 1 & \rho^{d_{12}} & \rho^{d_{13}} & \rho^{d_{14}} \\ \rho^{d_{21}} & 1 & \rho^{d_{23}} & \rho^{d_{24}} \\ \rho^{d_{31}} & \rho^{d_{32}} & 1 & \rho^{d_{34}} \\ \rho^{d_{41}} & \rho^{d_{42}} & \rho^{d_{43}} & 1 \end{bmatrix},$$

em que $\rho \in [-1;1]$ e $d_{ij} \geq 0$ para i=1,2,3,4 e j=1,2,3,4; e

• Não estruturada

$$\mathbf{V}_{i} = \begin{bmatrix} \sigma_{11}^{2} & \sigma_{12} & \sigma_{13} & \sigma_{14} \\ \sigma_{12} & \sigma_{22}^{2} & \sigma_{23} & \sigma_{24} \\ \sigma_{13} & \sigma_{23} & \sigma_{33}^{2} & \sigma_{34} \\ \sigma_{14} & \sigma_{24} & \sigma_{34} & \sigma_{44}^{2} \end{bmatrix},$$

em que $\sigma_{ii}^2 > 0$ e $\sigma_{ij} \in \mathbb{R}$ para i = 1, 2, 3, 4 e j = 1, 2, 3, 4.

Notamos que as matrizes apresentadas possuem diferentes graus de flexibilidade e número de parâmetros, sendo uma matriz flexível a matriz que consegue captar estruturas de covariâncias complexas e, assim, quanto maior o grau de complexidade que a matriz consegue captar, maior é seu grau de flexibilidade. A estrutura uniforme e AR(1) são as mais simples com apenas dois parâmetros, mas também são as menos flexíveis. As demais apresentam mais flexibilidade, porém contêm uma maior quantidade de parâmetros a serem estimados, sendo a não estruturada a mais flexível. Contudo, ela apresenta o maior número de parâmetros associados e esse número aumenta à medida que expandimos a dimensão de p_i .

É usual assumir para o modelo apresentado nesse trabalho que $\mathbf{R}_i = \sigma^2 I$ (Nogueira et al., 2003), sendo I uma matriz identidade com a mesma dimensão de \mathbf{R}_i . Um modelo misto com essa estrutura para a matriz de variância e covariância dos erros é chamado de modelo de independência condicional homocedástico e que considera que todas as p_i observações associadas à *i*-ésima unidade amostral são independentes dado \mathbf{b}_i . Podemos reparar que se um modelo possuir esse tipo de matriz para \mathbf{R}_i e a matriz \mathbf{G} for nula, ele será uma regressão linear usual (homocedástico e com as observações independentes). Porém, como as observações são correlacionadas, teremos uma matriz de correlação para os efeitos aleatórios, que normalmente é assumida como sendo uma matriz não estruturada ou diagonal (Azevedo, 2015).

Para esse trabalho consideraremos um modelo de independência condicional homocedástico e \mathbf{G} será não estruturada, que como foi visto é um modo usual de considerar essas matrizes. Logo, a matriz \mathbf{V}_i será do tipo

$$\mathbf{V}_i = \mathbf{Z}_i \mathbf{G} \mathbf{Z}_i^T + \mathbf{R}_i$$

	Γ _2	_	_		_ 7		σ^2	0	0		0	
	σ_{11}	σ_{12}	σ_{13}	•••	σ_{1q}	\mathbf{Z}_{i}^{T} +	0	σ^2	0	•••	0	
$= \mathbf{Z}_i$	$ \begin{bmatrix} 0_{12} \\ \vdots \end{bmatrix} $	0 ₂₂ :	0 ₂₃ :	•	O_{2q}		0	0	σ^2		0	.
	σ.1	σ	σ		σ^2		:	:	:	·		
	$L^{\circ q_1}$	0 q2	0 q3		$\circ qq$		0	0	0	• • •	σ^2	

A estimação dos modelos mistos pode ser feita tanto por métodos frenquentistas quanto por métodos Bayesianos. A seguir teremos uma breve introdução da estimação por esses dois métodos.

Como nesse trabalho vamos usar o método Bayesiano, teremos mais facilidade de estimar uma matriz não estruturada que possui um número maior de parâmetros. É possível estimar uma matriz não estruturada por métodos frequentistas, porém em alguns casos, com um custo computacional maior. No método Bayesiano, por sua vez, se a distribuição *a priori* dessa matriz utilizada for adequada, temos uma distribuição *a posteriori* que permite a simulação de toda matriz de uma única vez.

Uma ilustração desse modelo é dada no Capítulo 5 com base nos dados reais analisados nesse trabalho.

2.2 Estimação por métodos frequentistas

A estimação por métodos frequentistas considera que os parâmetros desconhecidos têm um valor fixo, porém desconhecido. Tanto a estimação desses parâmetros quanto de seus intervalos de confiança são baseadas em hipotéticas repetições do experimento infinitas vezes ou em resultados assintóticos que necessitam de uma grande amostra. Na teoria, os intervalos de confianças são aleatórios e consideramos que uma determinada proporção das amostras (repetições) contêm o verdadeiro valor do parâmetro (Rocha, 2017).

Existem várias formas de estimarmos os efeitos fixos ($\hat{\boldsymbol{\beta}}$) e predizermos os efeitos aleatórios ($\hat{\mathbf{b}}$) pelo método clássico. Uma maneira é vista em de Resende (2000) que resultará na solução das seguintes equações dos modelos mistos

$$\begin{bmatrix} \mathbf{X}^T \mathbf{R}^{\frac{1}{2}} \mathbf{Y} \\ \mathbf{Z}^T \mathbf{R}^{\frac{1}{2}} \mathbf{Y} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{X}^T \mathbf{R}^{-1} \mathbf{X} & \mathbf{X}^T \mathbf{R}^{-1} \mathbf{Z} \\ \mathbf{Z}^T \mathbf{R}^{-1} \mathbf{X} & \mathbf{Z}^T \mathbf{R}^{-1} \mathbf{Z} + \mathbf{G}^{-1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \hat{\boldsymbol{\beta}} \\ \hat{\mathbf{b}} \end{bmatrix}$$

sendo $\mathbf{Y} = (\mathbf{Y}_1^T, \mathbf{Y}_2^T, ..., \mathbf{Y}_n^T)^T$ um vetor de dimensão $(N \times 1)$ da variável resposta, onde $N = \sum_{i=1}^n p_i, \mathbf{X} = (\mathbf{X}_1, \mathbf{X}_2, ..., \mathbf{X}_n)^T$ a matriz de planejamento dos efeitos fixos de dimensão $(N \times t), \mathbf{Z}$ a matriz de planejamento dos efeitos aleatórios, bloco diagonal, de dimensão $(N \times nq)$ e com n blocos $(p_i \times q)\mathbf{Z}_i, \mathbf{b} = (\mathbf{b}_1^T, \mathbf{b}_2^T, ..., \mathbf{b}_n^T)^T$ um vetor de dimensão $(nq \times 1)$ contendo os efeitos aleatórios de todas as unidades amostrais e $\mathbf{R}^{\frac{1}{2}}\mathbf{R}^{\frac{1}{2}} = \mathbf{R}$, sendo \mathbf{R} a matriz de variância e covariância dos erros com dimensão $(N \times N)$. O vetor $\boldsymbol{\epsilon}^T = (\boldsymbol{\epsilon}_1^T, \boldsymbol{\epsilon}_2^T, ..., \boldsymbol{\epsilon}_n^T)$ não está presente quando são estimados os efeitos, contudo ele é importante para o modelo, pois este é o vetor dos erros aleatórios de dimensão $(N \times 1)$.

Resolvendo esse sistema chegamos nos seguinte estimadores para os efeitos fixos e aleatórios, respectivamente,

$$\hat{\boldsymbol{\beta}} = (\mathbf{X}^T \mathbf{V}^{-1} \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T \mathbf{V}^{-1} \mathbf{Y} \text{ e}$$
$$\hat{\mathbf{b}} = \mathbf{G} \mathbf{Z}^T \mathbf{V}^{-1} (\mathbf{Y} - \mathbf{X} \hat{\boldsymbol{\beta}}).$$

Mais detalhes sobre a estimação frequentista dos modelos mistos podem ser vistos em de Resende (2000).

2.3 Estimação por métodos Bayesianos

A base para a estimação com métodos Bayesianos é o teorema de Bayes, que pode ser definido em termos de funções de distribuição de probabilidade da seguinte forma:

$$f(\boldsymbol{\theta}|\mathbf{y}) = \frac{\pi(\boldsymbol{\theta})f(\mathbf{y}|\boldsymbol{\theta})}{\int_{R}\pi(\boldsymbol{\theta})f(\mathbf{y}|\boldsymbol{\theta})\,d\boldsymbol{\theta}},$$

sendo:

 $\boldsymbol{\theta}$ o vetor de parâmetros;

y o vetor de dados observados;

 $\pi(\boldsymbol{\theta})$ a função de distribuição de probabilidade *a priori* dos parâmetros;

 $\pi(\boldsymbol{\theta}|\mathbf{y})$ a função de distribuição de probabilidade de $\boldsymbol{\theta}$ dado \mathbf{y} (também chamada de distribuição *a posteriori*);

 $f(\mathbf{y}|\boldsymbol{\theta})$ a função de distribuição de probabilidade dos dados observados dado os parâmetros $\boldsymbol{\theta}$ (função de verossimilhança);

 $\pi(\boldsymbol{\theta})f(\mathbf{y}|\boldsymbol{\theta})$ a função densidade conjunta dos dados observados e dos parâmetros; $\int_R \pi(\boldsymbol{\theta})f(\mathbf{y}|\boldsymbol{\theta}) d\boldsymbol{\theta} = f(\mathbf{y}) = E_{\boldsymbol{\theta}}[f(\mathbf{y}|\boldsymbol{\theta})]$ a função preditiva dos dados observados; R o suporte da distribuição de $\boldsymbol{\theta}$; e

 $E_{\boldsymbol{\theta}}$ a esperança com respeito à distribuição *a priori* de $\boldsymbol{\theta}$.

Como $f(\mathbf{y})$ é constante para qualquer valor de $\boldsymbol{\theta}$, uma maneira muito usual de representar a formulação de Bayes é (de Resende *et al.*, 2001)

$$f(\boldsymbol{\theta}|\mathbf{y}) \propto \pi(\boldsymbol{\theta}) f(\mathbf{y}|\boldsymbol{\theta}),$$

sendo o sinal \propto a indicação de proporcionalidade. Toda a estimação dos parâmetros, na inferência Bayesiana, pode ser feita usando essa distribuição *a posteriori*.

2.3.1 Comparação entre métodos frequentistas e Bayesianos

O teorema de Bayes nos fornece a distribuição *a posteriori* dos parâmetros levando em consideração os dados. Essa *posteriori* mostra a distribuição dos parâmetros que pode fornecer estimações pontuais e intervalares sem necessitar da hipótese de infinitas repetições do experimento ou resultados assintóticos. Logo, é possível obter bons resultados com métodos Bayesianos até mesmo com uma amostra pequena, pois sempre teremos uma distribuição *a posteriori* que nos permite fazer inferências (de Resende, 2000).

Assim, apesar dos modelos Bayesianos serem considerados por alguns autores um desdobramento dos modelos frequentistas, existe uma diferença entre os dois enfoques: no modelo frequentista o parâmetro possui valor fixo, já no modelo Bayesiano o parâmetro é considerado uma variável aleatória, não observável (de Resende, 2000), pois para os Bayesianos tudo o que é desconhecido é incerto e, assim, deve-se mensurar essa incerteza utilizando probabilidade (Murteira, 1988; 1990). Devido a isso, os modelos Bayesianos combinam informação já existente sobre o problema com a informação dos dados através da distribuição de probabilidade *a posteriori*. Isso possibilita a incorporação de conhecimentos de especialistas na estimação do modelo, que muitas vezes são úteis na solução de problemas práticos.

2.3.2 Distribuições a priori

A distribuição *a priori* escolhida influencia na distribuição *a posteriori* dos parâmetros, pois a *priori* denota o grau de conhecimento que temos sobre $\boldsymbol{\theta}$ antes de observarmos os dados, ou seja, podemos ter uma *priori* que indica que temos muito conhecimento sobre os parâmetros ou uma *priori* que indica que não sabemos muito sobre seus valores.

Para ilustrar melhor o que isso significa, vamos supor que temos uma sala com 100 alunos que realizarão uma eleição para representante de classe com dois candidatos, o candidato A e o candidato B. Em uma pesquisa eleitoral temos um parâmetro θ que indica a proporção de eleitores que irão votar no candidato A. Logo, deveremos escolher uma distribuição *a priori* com domínio entre 0 e 1 para θ . Uma *priori* para esse parâmetro seria assumir que $\theta \sim Uniforme(0, 1)$ e, nesse caso, o parâmetro tem a função de densidade como na Figura 2.1.



Figura 2.1: Função densidade da distribuição Uniforme(0, 1).

Aqui é dada uma informação e ela é vaga, pois temos a mesma probabilidade dessa proporção estar dentro de qualquer intervalo de mesmo tamanho dentro do domínio da distribuição do parâmetro. Geralmente, essa distribuição é assumida quando não temos muito conhecimento *a priori* sobre o parâmetro.

Se assumimos que $\theta \sim Beta(100, 300)$, o parâmetro tem a densidade como na Figura 2.2. Ela reflete a informação de que a verdadeira proporção de pessoas que votam no

candidato A é próxima de 0, 25. Se a proporção for realmente próxima a esse valor, temos uma *posteriori* mais precisa do que a *posteriori* com a distribuição *Uniforme*. Entretanto, se o valor da verdadeira proporção for muito diferente de 0,25, a *priori* com a distribuição *Beta* pode distorcer as conclusões.



Figura 2.2: Função de densidade da distribuição Beta(100, 300).

Um exemplo onde podemos verificar que uma *priori* não vaga errada traz inferências erradas sobre θ é no exemplo dado sobre a eleição para representante de classe. Se a verdadeira proporção fosse 0, 5 e entrevistássemos 30 alunos e 14 falassem que votariam no candidato A, assumindo que $\mathbf{y}|\theta \sim Binomial(30, \theta)$, teríamos as *posteriores* para *priori* vaga e não vaga como na Figura 2.3.

Na Figura 2.3 vemos que a *priori* vaga (com distribuição *Uniforme*) parece oferecer uma *posteriori* mais correta do parâmetro, pois tem uma densidade maior em valores próximos da verdadeira proporção, do que a *posteriori* gerada pela *priori* não vaga (com distribuição *Beta*) que continua com densidade bem maior em valores próximos de 0,25 e indica que aproximadamente 25% dos alunos votam no candidato A.

Devido a isso, é necessário ter cuidado na hora de escolher uma *priori* para não ter conclusões incorretas.

Um conceito Bayesiano interessante é o de famílias conjugadas, que é o nome que é dado para os modelos nos quais a *priori* e a *posteriori* pertencem a uma mesma família de distribuições. Um caso onde isso ocorre é quando a média (μ) e **Y**| μ possuem distribuição Normal, com σ conhecido, que sempre gera uma *posteriori* também com distribuição normal. Esse conceito é importante porque ter famílias conjugadas é conveniente computacionalmente (Esteves *et al.*, 2020), pois tem-se uma forma fechada para a densidade da distribuição *a posteriori*.



Figura 2.3: Posteriori da priori Uniforme e posteriori da priori Beta.

Para o modelo apresentado nesse trabalho são utilizadas as seguintes distribuições *a priori* para cada parâmetro do modelo:

- $\phi = \frac{1}{\sigma^2} \sim Gama(\lambda_1, \lambda_2);$
- $\mathbf{G} \sim IW_q(v, \mathbf{W})$ e
- $\pi(\boldsymbol{\beta}) \propto c$, sendo c
 uma constante positiva conhecida,

em que λ_1 , λ_2 , $v \in \mathbf{W}$ são hiperparâmetros conhecidos, $\lambda_1 \in \lambda_2$ são maiores que zero, $\mathbf{G} \in \mathbf{W}$ são matrizes positivas definidas, ambas de dimensão $q \times q$, v é maior que q-1, $\boldsymbol{\beta} \in \mathbb{R}^d$, IW representa a distribuição Inversa Wishart e a distribuição Gama é parametrizada de forma que $E[\phi] = \frac{\lambda_1}{\lambda_2}$.

Utilizamos estas *prioris* pois elas possuem o suporte no espaço paramétrico de cada parâmetro e garantem uma maior eficiência computacional devido ao fato de apresentarem famílias conjugadas ou gerarem *posterioris* com distribuições conhecidas.

2.3.3 Distribuições a posteriori

Considerando $\mathbf{Y}_i | \boldsymbol{\beta}, \mathbf{b}_i, \phi \sim N(\mathbf{X}_i \boldsymbol{\beta} + \mathbf{Z}_i \mathbf{b}_i, \phi^{-1} I)$, em que I é uma matriz identidade com mesma dimensão de \mathbf{R} . Temos

$$f(\mathbf{y}|\boldsymbol{\beta}, \mathbf{b}, \phi) \propto \phi^{\frac{N}{2}} e^{-\frac{\phi}{2}(\mathbf{y} - \mathbf{X}\boldsymbol{\beta} - \mathbf{Z}\mathbf{b})^T(\mathbf{y} - \mathbf{X}\boldsymbol{\beta} - \mathbf{Z}\mathbf{b})}.$$

Logo, obtemos as seguintes distribuições condicionais completas a posteriori :

• $\phi|\mathbf{y}, \boldsymbol{\beta}, \mathbf{b} \sim Gama(\frac{N}{2} + \lambda_1, \frac{(\mathbf{y} - \mathbf{X}\boldsymbol{\beta} - \mathbf{Z}\mathbf{b})^T(\mathbf{y} - \mathbf{X}\boldsymbol{\beta} - \mathbf{Z}\mathbf{b})}{2} - \lambda_2);$

- $\boldsymbol{\beta}|\mathbf{y}, \mathbf{b}, \phi \sim N_t((\mathbf{X}^T\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}^T(\mathbf{y} \mathbf{Z}\mathbf{b}), (\phi\mathbf{X}^T\mathbf{X})^{-1});$
- $\mathbf{b}_i | \mathbf{y}_i, \boldsymbol{\beta}, \mathbf{G}, \boldsymbol{\phi} \sim \mathbf{N}_q((\mathbf{Z}_i^T \mathbf{Z}_i + (\boldsymbol{\phi}\mathbf{G})^{-1})^{-1} \mathbf{Z}_i^T (\mathbf{y}_i \mathbf{X}_i \boldsymbol{\beta}), (\boldsymbol{\phi}\mathbf{Z}_i^T \mathbf{Z}_i + \mathbf{G}^{-1})^{-1}), \text{ para } i = 1, ..., n; e$
- $\mathbf{G}|\mathbf{y}, \boldsymbol{\beta}, \mathbf{b}, \boldsymbol{\phi} \sim IW_q(v+n, (\sum_{i=1}^n \mathbf{b}_i \mathbf{b}_i^T) + \mathbf{W}),$

em que N_t e N_q indicam a distribuição normal multivariada com dimensão t e q, respectivamente. Detalhes para encontrarmos essas distribuições *a posteriori* estão no Apêndice A.

2.3.4 Estimação pontual

Para escolher um bom estimador para $\boldsymbol{\theta}$ via métodos Bayesianos precisamos primeiramente entender alguns componentes que serão utilizados para obter esse estimador (que representaremos por $\hat{\boldsymbol{\theta}}$).

Denotamos por Θ o conjunto de possíveis ocorrências que são relevantes para a tomada de uma decisão e, para encontrar $\hat{\theta}$, esse conjunto será o próprio espaço paramétrico do parâmetro estudado. Outro componente, denotado por \mathcal{A} , é o conjunto de ações ou alternativas que temos disponíveis, nesse caso consideraremos $\mathcal{A} = \Theta \subset \mathbb{R}^r$ sendo r o número de parâmetros que desejamos estimar. E por fim deveremos decidir uma função de utilidade $U(a, \theta)$ para utilizar na estimação, sendo que esta tem o seguinte formato $U(a, \theta) = -w(\theta)d(a, \theta)$, onde $w(\theta)$ é uma função não-negativa que indica o quão importante é acertar o valor de θ , $d(a, \theta)$ é a distância entre $a \in \theta$ e a é um elemento pertencente a \mathcal{A} .

A importância de escolher qual utilidade será utilizada é devido ao fato de que é ela que define qual será o melhor estimador. Vamos mostrar aqui duas das utilidades mais conhecidas e qual o melhor estimador para elas. É possível encontrar exemplos e demonstrações de como é encontrada a melhor estimação em Esteves *et al.* (2020). As duas utilidades mais utilizadas são:

• Distância quadrática

Se temos $U(\hat{\boldsymbol{\theta}}, \boldsymbol{\theta}) = -(\hat{\boldsymbol{\theta}} - \boldsymbol{\theta})^T A(\hat{\boldsymbol{\theta}} - \boldsymbol{\theta})$ para um estimador $\hat{\boldsymbol{\theta}}$ arbitrário, em que Aé uma matriz $(r \times r)$ positiva definida, o melhor estimador para $\boldsymbol{\theta}$, se existir um $\hat{\boldsymbol{\theta}}$ tal que $E[U(\hat{\boldsymbol{\theta}}, \boldsymbol{\theta})] < \infty$, é a esperança da *posteriori* $(E[\boldsymbol{\theta}|\mathbf{y}])$.

• Desvio absoluto

Se temos $U(\hat{\boldsymbol{\theta}}, \boldsymbol{\theta}) = -||\hat{\boldsymbol{\theta}} - \boldsymbol{\theta}||$ para um estimador $\hat{\boldsymbol{\theta}}$ arbitrário, o melhor estimador para $\boldsymbol{\theta}$, se existir um $\hat{\boldsymbol{\theta}}$ tal que $E[U(\hat{\boldsymbol{\theta}}, \boldsymbol{\theta})] < \infty$, é a mediana da *posteriori* $(Med[\boldsymbol{\theta}|\mathbf{y}]).$

Nesse trabalho, utilizamos os dois tipos de utilidades e, consequentemente, temos dois estimadores para cada parâmetro com exceção dos efeitos aleatórios e valores dos processos Gaussianos, quando só utilizamos a distância quadrática.

2.3.5 Estimação intervalar

O intervalo de credibilidade é uma ferramenta útil para trazer informações sobre o parâmetro, pois conterá seu verdadeiro valor com determinada probabilidade. Assim como nas estimações pontuais, a forma de encontrá-lo varia de acordo com a utilidade escolhida, mas nesse caso não temos mais apenas um valor a para encontrar e sim dois valores que representam respectivamente os limites do intervalo. Um intervalo é, portanto, representado por [a, b] com $a \in \mathbb{R}$ e $b \in \mathbb{R}$, sendo $\mathcal{A} = \{(a, b) \in \mathbb{R}^2 : a < b\}$ no caso de θ uniparamétrico.

Uma utilidade para esse caso seria a do tipo $U((a, b), \theta) = \mathbb{I}(\theta \in [a, b]) - k(b-a)$, em que -k(b-a) indica que queremos o menor intervalo possível (k > 0), e para essa utilidade a melhor escolha de (a, b) satisfaz a seguinte expressão $f_{\theta|\mathbf{y}}(a) = f_{\theta|\mathbf{y}}(b) = k$. Podem existir vários pontos que satisfaçam essa propriedade, mas caso $f_{\theta|\mathbf{y}}(.)$ seja unimodal, teremos apenas dois valores $(a, b) \in \mathbb{R}^2$ tais que satisfazem a propriedade e [a, b] será dado por $\{\theta : f_{\theta|\mathbf{y}}(\theta) \ge k\}.$

Outra utilidade que pode ser utilizada é do tipo $U((a, b), \theta) = -k_1(b-a) - \frac{k_2}{b-a}(\theta - \frac{a+b}{2})^2$, em que $-k_1(b-a)$ indica que queremos um intervalo pequeno e $-\frac{k_2}{b-a}(\theta - \frac{a+b}{2})^2$ que queremos que o centro do intervalo seja próximo do valor de θ . Para essa utilidade temos que a melhor escolha para [a, b] é dada por

$$\left[E[\theta|\mathbf{y}] - 2^{-1}\sqrt{\frac{k_1}{k_2}Var[\theta|\mathbf{y}]}, E[\theta|\mathbf{y}] + 2^{-1}\sqrt{\frac{k_1}{k_2}Var[\theta|\mathbf{y}]}\right].$$

Podemos construir um intervalo com credibilidade $1 - \alpha$ ($\alpha \in [0, 1]$) se encontrarmos o intervalo de credibilidade de forma que $\mathbf{P}(\theta \in [a, b] | \mathbf{y}) = 1 - \alpha$.

Nesse trabalho teremos intervalos de credibilidade de 95% para todos os parâmetros com exceção novamente dos efeitos aleatórios e valores do processo Gaussiano (PG). Os

intervalos são calculados com os quantis de 2, 5% (limite inferior) e 97, 5% (limite superior) das posterioris geradas dos parâmetros.

As demonstrações da obtenção dos intervalos citados acima, outras utilidades e também uma breve introdução sobre regiões de credibilidade que calculamos em casos que os intervalos não são adequados podem ser encontradas em Esteves *et al.* (2020).
Capítulo 3

Processos Gaussianos

Para entender melhor um processo Gaussiano (PG) é necessário entender mais sobre a distribuição normal multivariada e suas propriedades, já que algumas propriedades de um PG são dependentes de sua distribuição.

3.1 Distribuição normal multivariada

Se um vetor $\mathbf{Y} = (Y_1, Y_2, ..., Y_n)$ segue uma distribuição normal multivariada, ele tem a seguinte função de distribuição de probabilidade

$$f(\mathbf{y}|\boldsymbol{\mu},\boldsymbol{\Sigma}) = (2\pi)^{-\frac{n}{2}} |\boldsymbol{\Sigma}|^{\frac{1}{2}} e^{-\frac{1}{2}(\mathbf{y}-\boldsymbol{\mu})^T \boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\mathbf{y}-\boldsymbol{\mu})},$$

sendo $E[\mathbf{Y}] = \boldsymbol{\mu} \in Cov[Y_i, Y_j] = \boldsymbol{\Sigma}_{ij}$, em que $\boldsymbol{\mu} \in \mathbb{R}^n \in \boldsymbol{\Sigma}$ (possui os elementos da diagonal principal positivos e o restante dos elementos pertencentes ao conjunto dos reais) são o vetor de médias e a matriz de covariância de \mathbf{Y} , respectivamente.

Existe uma propriedade da normal multivariada que permite que um PG seja atualizado pelas informações dos dados, pois ela fornece a função de distribuição de probabilidade condicional de uma partição de um vetor em relação a outra partição de maneira simples. Para entender melhor essa ideia, seja $[\mathbf{Y}_1, \mathbf{Y}_2]$ uma partição de \mathbf{Y} , em que a dimensão, o vetor média e a matriz de covariância de \mathbf{Y}_i , para $i = \{1, 2\}$, são n_i , $\boldsymbol{\mu}_i \in \boldsymbol{\Sigma}_{ii}$ respectivamente. Então, podemos escrever que

$$\begin{bmatrix} \mathbf{Y}_1 \\ \mathbf{Y}_2 \end{bmatrix} \sim N_{n_1+n_2} \left(\begin{bmatrix} \boldsymbol{\mu}_1 \\ \boldsymbol{\mu}_2 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} \boldsymbol{\Sigma}_{11} & \boldsymbol{\Sigma}_{12} \\ \boldsymbol{\Sigma}_{21} & \boldsymbol{\Sigma}_{22} \end{bmatrix} \right)$$

em que $\Sigma_{12} = \Sigma_{21}^T$ representa a matriz de covariância entre $\mathbf{Y}_1 \in \mathbf{Y}_2$.

A propriedade citada nos permite sempre escrever $\mathbf{Y}_1|\mathbf{y}_2$ como:

$$\mathbf{Y}_1 | \mathbf{y}_2 \sim N(\boldsymbol{\mu}_{1|2}, \boldsymbol{\Sigma}_{1|2}),$$

em que:

- $\mu_{1|2} = \mu_1 + \Sigma_{12} \Sigma_{22}^{-1} (\mathbf{y}_2 \mu_2); e$
- $\Sigma_{1|2} = \Sigma_{11} \Sigma_{12}\Sigma_{22}^{-1}\Sigma_{21}$.

3.2 Processo Gaussiano

Um processo Gaussiano (PG) é um processo estocástico (uma coleção de variáveis aleatórias indexadas no tempo ou espaço), tal que toda coleção finita dessas variáveis tem uma distribuição normal multivariada. Em outras palavras, $\eta(.) \sim PG(m(.), K(.,.))$ se para qualquer subconjunto finito dos dados de $\mathbf{D} = (\mathbf{d}_1, \mathbf{d}_2, \mathbf{d}_3, ..., \mathbf{d}_n)$, tenhamos um vetor aleatório \mathbf{Y} ($n \in \mathbb{N}^*$ e $n < \infty$), tal que

$$\mathbf{Y} = (\eta(\mathbf{d}_1), \eta(\mathbf{d}_2), \dots, \eta(\mathbf{d}_n)) \sim N_n(m(\mathbf{D}), K(\mathbf{D}, \mathbf{D})),$$

em que $m(\mathbf{D}) = E(\eta_{\mathbf{D}})$ é a função média e $K(\mathbf{D}, \mathbf{D}) = Cov(\eta_{\mathbf{D}}, \eta_{\mathbf{D}}) = E(\eta_{\mathbf{D}}, \eta_{\mathbf{D}}) - m(\mathbf{D})m(\mathbf{D})$ é a função de covariância. Mais informações a respeito da definição de um PG podem ser encontradas em Lopes (2014).

Pela propriedade da distribuição condicional de variáveis normais, se $\eta(.)$ é um PG e temos os respectivos valores observados $\mathbf{D} = (\mathbf{d}_1, \mathbf{d}_2, ..., \mathbf{d}_n) \in \mathbf{y} = (y_1, y_2, ..., y_n)$, definimos que

$$\eta(\mathbf{d})|\mathbf{y}, \mathbf{D} \sim PG(m^*(\mathbf{d}), K^*(\mathbf{d}, \mathbf{d})),$$

em que

- $m^*(\mathbf{d}) = m(\mathbf{d}) + K(\mathbf{d}, \mathbf{D})K(\mathbf{D}, \mathbf{D})^{-1}(\mathbf{y} m(\mathbf{D}))$ e
- $K^*(\mathbf{d}, \mathbf{d}) = K(\mathbf{d}, \mathbf{d}) K(\mathbf{d}, \mathbf{D})K(\mathbf{D}, \mathbf{D})^{-1}K(\mathbf{D}, \mathbf{d}).$

3.3 Modelo Gaussiano

Quando modelamos dados com uma regressão linear usual, algumas suposições são previamente estabelecidas, entre elas temos: os erros são independentes e identicamente distribuídos com função de probabilidade normal com média zero e variância σ^2 (erros homocedásticos). Logo, para fazer sentido o uso dessa metodologia, as observações não podem ser dependentes. A forma com que os dados estão dispersos também precisa ser considerada, pois o modelo de regressão linear usual assume relação linear entre a variável resposta e as covariáveis.

Entretanto, como sabemos, não são em todos os casos que esse modelo é adequado e eficiente. Observe, por exemplo, a Figura 3.1 que mostra um gráfico de dispersão do tempo que uma determinada onda ultrassônica demora para percorrer diferentes distâncias em uma parede. Os dados são do Laboratório de Reabilitação e Durabilidade das Construções (LAREB) da Universidade Federal do Ceará (UFC), laboratório que forneceu os dados desse trabalho.



Figura 3.1: Gráfico do tempo de propagação de uma onda ultrassônica pela distância percorrida.

Na Figura 3.1, observamos que quanto maior a distância, maior o tempo que uma onda demora para percorrê-la. Logo é esperado que exista uma correlação positiva alta entre as variáveis tempo e distância. Se ajustarmos uma função de regressão linear entre elas obtemos o modelo representado na Figura 3.2. Analisando a reta, vemos que o ponto da distância de 35*cm* parece funcionar como ponto alavanca, afetando a inclinação da reta e uma função linear parece não ser adequada para representar esses dados. Porém, se o desconsiderássemos da análise, certamente a técnica utilizada pareceria razoável. Porém, uma suposição forte da regressão simples não está sendo atendida, já que as observações não são independentes, ou seja, os dados são de medidas repetidas e as observações da mesma curva são correlacionadas.



Figura 3.2: Reta de regressão para o tempo de propagação de uma onda ultrassônica em relação à distância percorrida.

Devido ao exposto acima (observações correlacionadas e a tendência entres os dados não parecer ser linear), o processo Gaussiano parece ser uma boa ferramenta para ser utilizada nesse trabalho que busca explicar o tempo de propagação de uma onda ultrassônica em função da distância percorrida e outras covariáveis, em paredes de alvenarias tradicionais.

Um processo Gaussiano consegue, com suas propriedades, incorporar correlação entra as observações e ajustar uma função não linear entre as covariáveis e a variável resposta.

Ao tratar um PG em uma regressão, usualmente o modelo assume o seguinte formato:

$$\mathbf{Y}_i = \eta(\mathbf{d}_i) + \boldsymbol{\epsilon}_i, \tag{3.1}$$

para i = 1, 2, 3, ..., n sendo

 \mathbf{Y}_i é o vetor com as variáveis respostas da *i*-ésima unidade experimental; $\eta(\mathbf{d}_i) \sim PG(m(\mathbf{d}_i), K(\mathbf{d}_i, \mathbf{d}_i));$

 \mathbf{d}_i é o vetor de covariáveis associadas à $i\text{-}\acute{e}sima$ unidade experimental; e

 $\boldsymbol{\epsilon}_i$ é o vetor de erros da *i*-ésima unidade experimental.

Uma ilustração dessa metodologia é feita no Capítulo 5 a partir dos dados reais analisados nesse trabalho.

3.4 A função média

Segundo Lopes (2014), a função média, usualmente, é considerada nula. Quando temos informação de covariáveis na base de dados, podemos escrever a função média como uma combinação do valor dessas covariáveis na estrutura de um modelo de regressão. Lopes (2014) afirma também que podemos assumir quaisquer funções para a média, embora funções lineares tenham propriedades analíticas desejáveis.

Para que todo conhecimento prévio da função do processo seja levado em consideração, introduzimos todas as informações sobre as observações do banco do dados em $m(\mathbf{d}_i)$. A partir daqui, como vamos incorporar várias covariáveis na função média, vamos substituir $m(\mathbf{d}_i)$ por $m(\mathbf{X}_i)$. Logo, $m(\mathbf{X}_i)$ para a *i*-ésima unidade amostral é definida como $m(\mathbf{X}_i) =$ $\mathbf{X}_i \boldsymbol{\beta}$, sendo \mathbf{X}_i a matriz das *t* covariáveis para todas as observações associadas à *i*-ésima unidade amostral e $\boldsymbol{\beta}$ o vetor de parâmetros de uma combinação linear de tamanho $(t \times 1)$.

Temos duas formas de construir o modelo, a primeira é utilizar o $m(\mathbf{X}_i)$ dentro do processo Gaussiano como sua função média e, assim, o modelo seria do formato da Equação (3.1). Outra maneira é considerar a média do *PG* nula e adicionarmos $m(\mathbf{X}_i)$ fora do processo Gaussiano, tendo assim o modelo na seguinte forma:

$$\mathbf{Y}_{i} = m(\mathbf{X}_{i}) + \eta(\mathbf{d}_{i}) + \boldsymbol{\epsilon}_{i}, \qquad (3.2)$$

em que,

- $\mathbf{Y}_i = (Y_{i1}, Y_{i2}, Y_{i3}, ..., Y_{ip_i})^T$ é o vetor das variáveis respostas da *i*-ésima unidade experimental de dimensão $p_i \times 1$;
- $\mathbf{X}_i = (\mathbf{X}_{i1}, \mathbf{X}_{i2}, \mathbf{X}_{i3}, ..., \mathbf{X}_{ip_i})^T$ é a matriz com t covariáveis, não consideradas no PG, associadas as p_i observações da *i*-ésima unidade experimental de dimensão $p_i \times t$;
- $\eta(.) \sim PG(\mathbf{0}, K);$

е

- $\mathbf{d}_i = (\mathbf{d}_{i1}, \mathbf{d}_{i2}, \mathbf{d}_{i3}, ..., \mathbf{d}_{ip_i})^T$ é a matriz com p covariáveis, tratadas pelo PG, de dimensão $p_i \times p$;
- $\boldsymbol{\epsilon}_i = (\boldsymbol{\epsilon}_{i1}, \boldsymbol{\epsilon}_{i2}, \boldsymbol{\epsilon}_{i3}, ..., \boldsymbol{\epsilon}_{ip_i})^T$ é o vetor de erros aleatórios de dimensão $p_i \times 1$ com distribuição normal, média zero, independentes e com variância σ^2 (homocedásticos);

• $\eta(.) \in \epsilon_i$ são independentes.

Dessa maneira, $\mathbf{Y}_i \sim N_{p_i}(m(\mathbf{X}_i), \mathbf{K}_i + \sigma^2 I)$, em que \mathbf{K}_i é uma matriz de dimensão $p_i \times p_i$ originária da função de covariância escolhida e calculada para cada par das p_i observações e I a matriz identidade com dimensão $p_i \times p_i$.

Considerando todas as unidades experimentais, i = 1, 2, 3, ..., n, temos:

$$\mathbf{Y} = m(\mathbf{X}) + \eta(\mathbf{D}) + \boldsymbol{\epsilon},$$

em que

- **Y** tem dimensão $N \times 1$ e **Y** ~ $PG(m(\mathbf{X}), \mathbf{K} + \sigma^2 I)$;
- $m(\mathbf{X})$ é o vetor de médias de \mathbf{Y} de dimensão $N \times 1$;
- K é parte da matriz de covariância de Y de dimensão N × N originária da função de covariância escolhida para o processo Gaussiano e;
- $\eta(.) \sim N_N(\mathbf{0}, \mathbf{K}).$

Dessa maneira, $\mathbf{Y}|\eta, \sigma^2, \boldsymbol{\beta} \sim N_N(m(\mathbf{X}) + \eta(\mathbf{D}), \sigma^2 I).$

O modelo acima trata-se de uma regressão linear múltipla comum, porém acrescida de um PG. Esse modelo parece ser mais adequado às características dos dados a serem analisados, considerando que temos correlação entre as medidas de uma mesma unidade experimental e que a relação parece não ser linear entre as variáveis.

Devido a isso, utilizaremos a Equação (3.2) e com ela podemos fazer uma comparação entre modelos mistos e o modelo com processo Gaussiano. Observamos que ambas são parecidas com uma regressão linear, porém acrescidas de algum componente que representa a dependência entre as observações (a matriz de variância e covariância dos efeitos aleatórios para o caso do modelo misto e a função de covariância para o caso do processo Gaussiano).

3.5 A função de covariância

A função de covariância $K(\mathbf{d}, \mathbf{d}')$ é chamada de *kernel* e mede a covariância entre dois pontos num processo Gaussiano através de sua distância. A função de covariância define a suavidade da função η , ou seja, se o valor de $K(\mathbf{d}, \mathbf{d}')$ for grande para valores de $\mathbf{d} \in \mathbf{d}'$ próximos, teremos uma função η mais suave e para valores menores de $K(\mathbf{d}, \mathbf{d}')$ a função η será menos suave.

Existem vários tipos de *kernel* que podem ser utilizados para representar a covariância entre as observações num processo Gaussiano, assim como visto em modelos mistos com as matrizes de covariâncias. Nesta seção apresentaremos alguns desses *kernels* mais comumente utilizados. São eles:

• Função constante:

$$K(\mathbf{d}, \mathbf{d}') = C$$
, para $C \in \mathbb{R}^+$;

• Função linear:

$$K(\mathbf{d},\mathbf{d}') = \mathbf{d}^T \mathbf{d}';$$

• Função de ruído Gaussiano:

$$K(\mathbf{d}, \mathbf{d}') = \sigma^2 \delta_{\mathbf{d}, \mathbf{d}'},$$

sendo $\sigma > 0$ o desvio padrão das flutuações dos resíduos
e δ o delta de Kronecker, que não será detalhado nesse trabalho;

• Função Ornstein-Uhlenbeck:

$$K(\mathbf{d}, \mathbf{d}') = e^{-\frac{d_e}{l}},$$

em que d_e representa a distância euclidiana entre **d** e **d**' e l é um hiperparâmetro conhecido que funciona como a variância dessa função. Logo, um l grande fará com que a função não tenha variações bruscas e um l pequeno fará com que a função η varie muito rapidamente;

• Função periódica:

$$K(\mathbf{d},\mathbf{d}') = e^{-\frac{2sen^2\left\{\frac{(d_e)}{2}\right\}}{l^2}};$$

• Função racional quadrática:

$$K(\mathbf{d}, \mathbf{d}') = (1 + d_e^2)^{-\alpha}$$
, para $\alpha \ge 0$ e;

• Função exponencial quadrática:

$$K(\mathbf{d}, \mathbf{d}') = e^{-\frac{d_e^2}{2l^2}}.$$

Assim como as matrizes de variância e covariância dos modelos mistos, vemos que existem *kernels* mais flexíveis e com mais parâmetros que outros. A função constante, por exemplo, não possui nenhum parâmetro para ser estimado, mas é menos flexível que outros *kernels* que possuem pelo menos um parâmetro. Um dos *kernels* mais usados é o chamado de *kernel* Gaussiano (também chamado de exponencial quadrático) sendo basicamente uma função Gaussiana, com exceção da constante de padronização. Nesse trabalho é utilizado esse *kernel*.

Assim, ao estudarmos as correlações e as covariáveis de $m(\mathbf{X})$ e $m(\mathbf{D})$ do processo Gaussiano, podemos observar o comportamento de uma função e verificar quais elementos desta mais influenciam em sua suavidade e identificar as variáveis mais significativas, assim como é feito em Rocha *et al.* (2015).

3.6 Estimação

Assim como em modelos mistos, há muitas maneiras de estimarmos um modelo que envolve processos Gaussianos, e seguindo a mesma linha de raciocínio da metodologia anterior, a estimação será feita por métodos Bayesianos. Porém, é possível ver um exemplo de estimação frequentista de um processo Gaussiano em Reis (2020).

3.6.1 Distribuições a priori

Para estimar todos os parâmetros associados ao Modelo (3.2) por métodos Bayesianos, além de definir o processo Gaussiano como distribuição *a priori* para a função η , precisamos também definir para os demais parâmetros. Assim, como nas distribuições *a priori* dos modelos mistos, aqui foram escolhidas *prioris* que retornem distribuições condicionais completas *a posteriori* conhecidas. Logo:

- $\phi = \frac{1}{\sigma^2} \sim Gama(\varphi_1, \varphi_2)$ e
- $\pi(\beta) \propto h$, sendo h uma constante positiva conhecida,

sendo φ_1 e φ_2 hiperparâmetros conhecidos e maiores que zero.

3.6.2 Distribuições a posteriori

Primeiramente a função de verossimilhança é dada por

$$f(\mathbf{y}|\eta,\sigma^2,\boldsymbol{\beta}) \propto \phi^{\frac{N}{2}} e^{-\frac{\phi}{2}(\mathbf{y}-\mathbf{X}\boldsymbol{\beta}-\eta)^T(\mathbf{y}-\mathbf{X}\boldsymbol{\beta}-\eta)}.$$

Assim como é visível uma semelhança da verossimilhança do modelo Gaussiano com o modelo misto apresentado anteriormente, veremos que as distribuições condicionais *a posteriori* dos parâmetros são bem parecidas com as *posterioris* da outra metodologia. Temos então as seguintes distribuições condicionais completas *a posteriori* :

• $\eta | \mathbf{y}, \phi, \boldsymbol{\beta} \sim N_N((I + (\phi \mathbf{K})^{-1})^{-1} (\mathbf{y} - \mathbf{X}\boldsymbol{\beta}), (\phi I + \mathbf{K}^{-1})^{-1});$

•
$$\phi | \mathbf{y}, \eta, \boldsymbol{\beta} \sim Gama \left(\frac{N}{2} + \varphi_1, \frac{(\mathbf{y} - \mathbf{X}\boldsymbol{\beta} - \eta)^T (\mathbf{y} - \mathbf{X}\boldsymbol{\beta} - \eta)}{2} - \varphi_2 \right); e$$

•
$$\boldsymbol{\beta}|\mathbf{y}, \eta, \phi \sim N_t((\mathbf{X}^T\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}^T(\mathbf{y}-\eta), (\phi\mathbf{X}^T\mathbf{X})^{-1}).$$

Todas as estimações feitas para o modelo misto e PG foram realizadas no software R com a utilização da biblioteca Rstan (Team *et al.*, 2016).

Capítulo 4

Banco de dados

O banco de dados utilizado nesse trabalho foi disponibilizado pelo Laboratório de Reabilitação e Durabilidade das Construções (LAREB) da Universidade Federal do Ceará (UFC) e coletado através do equipamento Pundit Lab-PROCEQ, com transdutores de 54 kHz, que possui um emissor de ondas ultrassônicas e calcula o tempo que estas ondas demoram até chegar em seu receptor. Para fazer as medições, foram construídas duas paredes: P1 (sem vazios internos) e P2 (com vazios internos) de tijolos maciços com mesmas dimensões (1,50 m de altura, 1,00 m de largura e 13,5 cm de espessura), conforme pode ser visto na Figura 4.1.



Fonte: Laboratório de Reabilitação e Durabilidade das Construções (LAREB).

Figura 4.1: Paredes $P1 \in P2$ de alvenaria maciça.

Adaptando o que é recomendado na NBR - 8802 (2019), cada parede foi dividida em 12 quadrantes iguais, como podemos observar na Figura 4.2.



Fonte: Laboratório de Reabilitação e Durabilidade das Construções (LAREB).

Figura 4.2: Parede dividida em quadrantes.

Em cada quadrante foi medido o tempo de propagação da onda do transmissor ao receptor em diferentes distâncias d_i , para i = 1, 2, 3, 4, 5, 6, medidas na horizontal em centímetros, sendo $(d_1, d_2, d_3, d_4, d_5, d_6) = (10, 15, 20, 25, 30, 35)$. Para isso, o transmissor ficou fixo na origem (distância zero $d_0 = 0$) e apenas o receptor foi movido de lugar.

No banco de dados foi incluído também o valor da altura que o transmissor ficou em relação ao solo em cada medição e se o quadrante possui vazios internos. Para conseguir uma maior variabilidade dos dados e controlar o erro de medição, foram feitas 10 réplicas em cada quadrante.

Para entender a propagação da onda no tijolo, argamassa e interface dos dois, no banco de dados possui uma varável que indica em qual parte da parede (tijolo, argamassa ou interface do tijolo com argamassa) ocorreu as medições.

O segundo quadrante da parede com vazios não possui réplicas pois, quando as medições das réplicas foram feitas, as ondas ultrassônicas não chegaram ao receptor, provavelmente devido a um vazio interno nesse quadrante ou próximo a ele. Na última réplica do quarto quadrante também da parede com vazios ocorreu o mesmo problema para a medição das duas últimas distâncias.

No total temos 1382 observações (N = 1382). As covariáveis disponíveis para análise são:

- Quadrante a que pertence cada observação (1 a 12);
- Altura (em metros) em que a medição foi realizada em relação ao solo (0.3, 0.5, 0.7,

0.9, 1.1, 1.3;

- Material sobre o qual a onda foi propagada (tijolo, argamassa ou interface);
- distância (em centímetros) do receptor em relação ao transmissor em cada medição (10, 15, 20, 25, 30 e 35); e
- Parede da medição (sem ou com vazios);

A variável dos quadrantes não foi utilizada no modelo, pois possui praticamente a mesma informação da distância da medição em relação ao solo, porém a informação dos quadrantes foi utilizada para fazer os gráficos com as curvas observadas e estimadas.

4.1 Análise descritiva

Com o banco de dados, primeiramente, foi realizada uma análise descritiva. Utilizando o software estatístico R. Foram gerados gráficos para cada combinação de quadrante e parede e os gráficos do mesmo quadrante são disponibilizados em pares, o da esquerda sempre representando o quadrante da parede sem vazios internos (anomalias) e o da direita a parede com os buracos internos. No eixo x estão as distâncias do receptor ao transmissor em centímetros e no eixo y o tempo em 10^{-6} segundos.



Figura 4.3: Perfis de propagação da onda para o primeiro quadrante.

Em todos os gráficos vemos que o tempo de propagação da onda foi, geralmente, menor nas paredes com anomalias, o que implica que as ondas percorreram na parede mais rapidamente com destaque para as Figuras 4.3 e 4.7 que possuem uma diferença de velocidade aparentemente mais significativa entre os perfis na parede com e sem anomalias.



Figura 4.4: Perfis de propagação da onda para o segundo quadrante.



Figura 4.5: Perfis de propagação da onda para o terceiro quadrante.

Na Figura 4.4, a segunda parede possui medições faltantes, provavelmente devido a uma interferência causada por vazios internos, que impediram a onda ultrassônica de chegar ao receptor. Dessa maneira, não é possível representarmos na figura todas as réplicas feitas e a única curva de tempo de propagação completa (que possui medições para todas as distâncias) possui uma tendência muito parecida com os perfis da outra parede, que possui todas as réplicas presentes no gráfico.

Nas Figuras 4.6, 4.10, 4.13 e 4.14, observamos que as paredes representadas possuem curvas para a velocidade de propagação da onda parecidas para as distâncias menores entre o transmissor e receptor. Contudo, a partir da distância de 20cm, o décimo primeiro e décimo segundo quadrantes apresentam uma mudança de tendência nas paredes com imperfeições internas apresentando mudanças mais bruscas das observações. O mesmo acontece com o quarto quadrante, a partir das distâncias de 25cm, e oitavo quadrante, a



Figura 4.6: Perfis de propagação da onda para o quarto quadrante.



Figura 4.7: Perfis de propagação da onda para o quinto quadrante.

partir dos 30cm.

Nas Figuras 4.5, 4.8, 4.9 e 4.12, a tendência entre as curvas dos gráficos das duas paredes são parecidas, entretanto na parede maciça a variância entre as réplicas parece ser maior.

Na Figura 4.15, temos as curvas de propagação separadas por material sobre o qual a onda foi propagada. Ressaltamos que esse conjunto de dados se trata de um segundo conjunto que não foi considerado na estimação dos modelos desse trabalho, mas que nos ajuda a visualizar a influência do elemento na propagação da onda. Na figura observamos que o tempo de propagação de uma onda no tijolo é maior que o tempo de propagação na interface do tijolo com argamassa que, por sua vez, é maior que o tempo de propagação apenas na argamassa. Isso nos leva a pensar que uma onda se propaga mais rapidamente na argamassa que no tijolo e que, quando há um vazio interno na parede, a onda não con-



Figura 4.8: Perfis de propagação da onda para o sexto quadrante.



Figura 4.9: Perfis de propagação da onda para o sétimo quadrante.

segue passar por ele, provavelmente se propaga pela argamassa e o tempo de propagação da onda é menor. Isso pode explicar o que observamos na análise gráfica, onde vemos que todos os quadrantes da parede com anomalias possui uma velocidade maior de propagação da onda.

Portanto, analisando os gráficos da análise descritiva, vemos que os quadrantes 3, 6, 7 e 10 parecem não ter a tendência de propagação influenciada pelos vazios já que possuem comportamento parecido em ambas as paredes, enquanto os demais quadrantes contêm essa influência mais acentuada. Também observamos que, devido aos vazios que provavelmente fazem a onda se propagar pela argamassa, temos que a parede com anomalia possui a maior velocidade de propagação, especialmente para distâncias maiores.



Figura 4.10: Perfis de propagação da onda para o oitavo quadrante.



Figura 4.11: Perfis de propagação da onda para o nono quadrante.



Figura 4.12: Perfis de propagação da onda para o décimo quadrante.



Figura 4.13: Perfis de propagação da onda para o décimo primeiro quadrante.



Figura 4.14: Perfis de propagação da onda para o décimo segundo quadrante.



Figura 4.15: Perfis de propagação da onda no tijolo, argamassa e interface dos dois.

Capítulo 5

Resultados

5.1 Modelos mistos

Como dito anteriormente, o modelo misto utilizado é da forma:

$$\mathbf{Y}_i = \mathbf{X}_i \boldsymbol{\beta} + \mathbf{Z}_i \mathbf{b}_i + \boldsymbol{\epsilon}_i$$
, para $i = 1, 2, ..., n$.

A partir daqui, definimos o que esses termos representam no conjunto de dados reais considerado nesse estudo.

Temos que Y_i é um vetor contendo as variáveis aleatórias do tempo de propagação da *i*-ésima curva. Como cada onda possui o tempo em seis diferentes distâncias, temos que cada \mathbf{Y}_i tem dimensão 6×1 , ou seja, temos que $p_i = 6$, para i = 1, 2, 3, ..., n.

Ao construir a matriz de planejamento \mathbf{X} estamos definindo a quantidade de efeitos fixos do modelo, já que essa quantidade é a mesma do número de colunas de \mathbf{X} e, consequentemente, estamos definindo quais covariáveis estão associadas a eles.

Levando em consideração que os efeitos fixos são iguais para todas as unidades amostrais do modelo e sabendo que cada curva do tempo de propagação pelo tempo é considerada uma unidade amostral, as covariáveis acompanhadas por efeitos fixos são as covariáveis que acreditamos não impactar a tendência de cada curva de forma diferente.

Assim, a matriz X foi construída com as seguintes covariáveis:

- Altura da medição em relação ao solo em centímetros (variável quantitativa);
- Presença ou não de vazios internos na parede (variável binária); e
- Material da parede em que foi realizado as medições (variável com 3 categorias: tijolo, armagassa e interface).

Para apenas incorporar a variável tipo de material em que foram feitas as medições foi necessário transformá-la em variáveis binárias. Assim, além de \mathbf{X} conter uma coluna inteira de valores um, para o intercepto, uma coluna com as alturas das medições em relação ao solo, e a variável binária que identifica se a parede tem vazios internos ou não, a matriz possui outras três colunas cada uma para as seguintes covariáveis binárias criadas:

- Variável que assume valor um se a medição da observação foi feita na interface do tijolo com argamassa e zero, caso contrário;
- Variável que assume valor um se a medição da observação foi feita no tijolo e teve algum vazio na trajetória da onda e zero, caso contrário; e
- Variável que assume valor um se a medição da observação foi feita no tijolo e não teve nenhum vazio na trajetória da onda e zero, caso contrário.

A variável binária que indicaria se a medição foi feita no tijolo ou não foi dividida em duas outras variáveis, pois observando estudos anteriores sobre esses tipos de dados, percebemos que quando a medição é feita sobre o tijolo mas com buracos próximos, a onda também parece se propagar pela argamassa em vez de se propagar pelo tijolo.

Como a matriz X possui seis colunas, o modelo consequentemente terá seis efeitos fixos (t = 6), ou seja, $\beta = (\beta_0, \beta_1, \beta_2, \beta_3, \beta_4, \beta_5)$.

Considerando as covariáveis disponíveis no estudo e que não são contempladas na matriz de planejamento dos efeitos fixos, temos a variável distância entre o transmissor e receptor da onda para inclusão na matriz de planejamento \mathbf{Z} . Utilizar essa variável na matriz \mathbf{Z} implica que consideramos que ela tem efeitos diferentes em cada curva observada, ou seja, acreditamos que, por exemplo, uma observação medida na distância de 15*cm* em uma curva tem um coeficiente de regressão diferente de outra observação medida na distância de 15*cm* em distância de 15*cm* em outra curva.

Como já observamos anteriormente através de gráficos de dispersão da distância pelo tempo de propagação da onda, não temos uma tendência linear entre essas variáveis e uma função linear não seria adequada para descrever essa relação. Contudo, um modelo misto pode ser facilmente adaptado para modelar uma função polinomial entre elas.

Primeiramente, é necessário definirmos qual é o grau da função que melhor descreve a relação entre distância e tempo. Zuanetti *et al.* (Em revisão) realizou análises sobre o banco de dados utilizado deste trabalho e indicou que um polinômio de grau três é o que melhor descreve essa relação. Pelo formato das curvas observadas nos gráficos, vemos que esse grau de polinômio faz sentido e será adotado nesse trabalho.

Para incluirmos uma função polinomial de terceira ordem entre distância e tempo de propagação da onda, incluímos na matriz de planejamento \mathbf{Z}_i , além de uma coluna de valores um para o intercepto e a distância, as covariáveis distância ao quadrado e distância ao cubo. Dessa maneira, a matriz \mathbf{Z} que é uma matriz bloco diagonal formada por todas as \mathbf{Z}_i s e possui 4n colunas.

As duas últimas covariáveis adicionadas em \mathbf{Z}_i s são uma função da distância e para evitarmos problemas de multicolinearidade, em vez de usarmos as covariáveis no seu valor original, optamos por utilizar as suas versões do polinômio ortogonal.

Com esses polinômios criados temos, então, as seguintes colunas para \mathbf{Z}_i :

- Coluna com valor um em todas as linhas para o intercepto;
- Coluna com o valor do polinômio ortogonal que representa a distância medida em cada observação;
- Coluna com o valor do polinômio ortogonal que representa a distância medida em cada observação ao quadrado; e
- Coluna com o valor do polinômio ortogonal que representa a distância medida em cada observação ao cubo.

Como **Z** possui 4 * n colunas (q = 4), logo $\mathbf{b} = (\mathbf{b}_1^T, \mathbf{b}_2^T, \mathbf{b}_3^T, ..., \mathbf{b}_n^T)^T$, sendo cada $\mathbf{b}_i = (b_{i1}, b_{i2}, b_{i3}, b_{i4})^T$ para i = 1, 2, 3, ..., n. O banco de dados possui n = 231 unidades amostrais (curvas observadas), logo \mathbf{b} tem 231*4 parâmetros, totalizando 924 efeitos aleatórios no modelo.

5.2 Estimação

Definidas a matriz \mathbf{X} e a matriz \mathbf{Z} , utilizamos o pacote rstan do software estatístico Rstudio para estimarmos via inferência Bayesiana os parâmetros do modelo. Os códigos implementados estão disponíveis no apêndice desse trabalho.

Para as distribuições *a priori*, fixamos os hiperparâmetros $\lambda_1 = \lambda_2 = 0.1$, v = 5 e W uma matriz diagonal com o valor 100, de modo a assumir distribuições com grande variabilidade e vagas para os parâmetros do modelo. Duas cadeias MCMC com 10000 iterações foram geradas a partir de pontos iniciais diferentes. Descartamos as primeiras 1000 iterações como *burn-in* e registramos para a inferência uma a cada duas iterações. A convergência das cadeias foi verificada via gráfico de traço para cada parâmetro, mostrados no apêndice desse trabalho. Os resultados obtidos foram:

• Para σ^2 :

Tabela 5.1: Tabela resumo dos valores gerados da <i>posteriori</i> para σ^2 .						
Média	Desvio padrão	Mediana	Intervalo de credibilidade (95%)			
21,17	0,52	21,16	[20,19; 22,23]			

Na Tabela 5.1 observamos que tanto a média (melhor estimador se utilizarmos a utilidade de distância quadrática) como a mediana (melhor estimador se utilizarmos a utilidade do desvio absoluto) possuem valores próximos. Além disso, podemos concluir com 95% de probabilidade que o intervalo [20,19; 22,23] engloba o verdadeiro valor de σ^2 ;

• Para $\boldsymbol{\beta}$:

Parâmetro Média Desvio padrão Mediana Intervalo de credibilidade (95%)49,273,84 49,2841,70; 56,67 β_0 β_1 -1,962,18-1,99[-6,21; 2,31] β_2 5,97 -1,19; 13,053,656,01 β_3 4,152,614,18[-1,01; 9,20]3,279,54 [3,07; 15,99] β_4 9,511,68; 11,85 β_5 6,812,556,83

Tabela 5.2: Tabela resumo dos valores gerados da *posteriori* para β .

A Tabela 5.2 traz as estimativas dos efeitos fixos. Cada um dos valores de β possuem média e mediana parecidos. Além disso, vemos que $\beta_1, \beta_2, \beta_3$ possuem intervalo de credibilidade que engloba o número zero. Isso significa que as covariáveis que acompanham esses efeitos não são tão relevantes para explicar o tempo de propagação da onda. Elas são: a indicadora se a parede possui ou não vazios internos; a altura da medição em relação ao solo e a indicadora se a medição foi feita na interface (em comparação com a categoria referência que é a argamassa), respectivamente. Logo, concluímos que essas covariáveis não são importantes para descrever o comportamento de propagação da onda. As covariáveis restantes: indicadora se a medição foi feita no tijolo com vazios na trajetória da onda ou medição no tijolo sem vazios na trajetória da onda são relevantes para descrever o comportamento da onda. Como seus coeficientes são positivos, isso reflete que a onda tende a demorar mais tempo para se propagar no tijolo (especialmente quando há vazios na trajetória da onda) quando comparado à argamassa (que é a categoria de referência).

• Para G:

Tabela 5.3: Tabela resumo dos valores gerados da <i>posteriori</i> para G.							
Parâmetro	Média	Desvio padrão	Mediana	Intervalo de credibilidade (95%)			
σ_{11}	9657,78	990,48	$9588,\!40$	[7921, 96; 11809, 32]			
σ_{12}	23256,73	$2234,\!17$	$23113,\!96$	[19301, 12; 28084, 68]			
σ_{13}	$5956,\!62$	$627,\!00$	$5918,\!96$	[4840, 39; 7273, 96]			
σ_{14}	$1415,\!97$	$230,\!27$	$1404,\!85$	[1000, 42; 1900, 00]			
σ_{22}	56373,96	5293,51	56044,87	[47092,90; 67764,78]			
σ_{23}	$14968,\!00$	$1508,\!05$	14884,89	[12287, 63; 18185, 23]			
σ_{24}	3725,21	$558,\!88$	3698,09	[2718,74; 4906,80]			
σ_{33}	5021,70	$502,\!80$	4992,52	$[4127,77;\ 6090,95]$			
σ_{34}	1563, 19	186,96	1550,28	[1234,47; 1962,59]			
σ_{44}	587,41	90,91	581,40	[428, 14; 783, 11]			

Tabela 5.3: Tabela resumo dos valores gerados da *posteriori* para **G**

A Tabela 5.3 mostra as estimativas da matriz de variância e covariância G. Novamente, a média e a mediana são valores próximos. Contudo, diferentemente dos demais parâmetros, os intervalos de credibilidade de cada parâmetro da matriz de variância e covariância dos efeitos aleatórios são grandes. Entretanto, mesmo com esses intervalos grandes, o método estima intervalos pequenos para os efeitos aleatórios; e

• Para \mathbf{b}_i :

Para facilitar a visualização dos valores estimados dos efeitos aleatórios, já que temos 924 efeitos, criamos quatro histogramas, um com todos as estimativas de b_{i1} , outro com todas as estimativas de b_{i2} e, assim sucessivamente. A estimativa apresentada é a média *a posteriori* de cada efeito.

Vemos pela Figura 5.1 todas as estimativas de b_{i1} são positivas. Vemos também que temos uma frequência maior de valores entre 50 e 100 e que os valores possuem uma assimetria à direita. Essa é a estimativa do intercepto aleatório de cada curva. Como



Figura 5.1: Histograma dos valores estimados de b_{i1} .

usamos a distância na escala do polinômio ortogonal, o intercepto corresponde ao tempo de propagação de cada curva na distância 22.5cm (e não na distância 0cm). Logo, como esperado, ele é positivo para todas as curvas e reflete o comportamento diferente de propagação de cada uma.



Figura 5.2: Histograma dos valores estimados de b_{i2} .

Percebemos pela Figura 5.2 que os valores estimados de b_{i2} também possuem um assimetria à direita e possuem maior frequência entre os valores de 100 a 200. Essas são as estimativas dos coeficientes que acompanham a distância na escala do polinômio ortogonal. Como são positivas refletem que quanto maior a distância entre o transmissor e o receptor da onda em cada medição, maior é o tempo de propagação.



Figura 5.3: Histograma dos valores estimados de b_{i3} .

A Figura 5.3 mostra que os valores estimados de b_{i3} tem uma assimetria à direita menor que para b_{i1} e b_{i2} . Além disso, possuem poucos valores negativos, alguns nulos e positivos com maior frequência para valores entre 0 e 100. Essas estimativas acompanham a distância ao quadrado (na escala do polinômio ortogonal) e como alguns valores próximos a zero já acontecem, evidenciam que o comportamento de propagação de algumas curvas são bem representados por uma reta linear. No entanto, o comportamento de grande parte das curvas é melhor descrito por uma função curvilínea entre distância e tempo.



Figura 5.4: Histograma dos valores estimados de b_{i4} .

Por fim, a Figura 5.4 mostra que os valores estimados de b_{i4} tem uma assimetria

à direita menor do que para os demais efeitos aleatórios estimados e também uma maior quantidade de valores em torno de zero, com maior frequência entre -25 e 25. Poucas curvas se destacam com estimativas maiores que 50. Essas estimativas refletem que poucas curvas precisam da componente de terceiro grau para descrever sua propagação.



Figura 5.5: Boxplots comparativos para os bs estimados.

Para comparar todos os valores estimados para os efeitos aleatórios, geramos os boxplots da Figura 5.5. Esse gráfico reflete as informações já descritas acima.

5.3 Processos Gaussianos

Como o modelo via processo Gaussiano tem muitos termos parecidos com os modelos mistos, alguns componentes foram assumidos como idênticos entre os dois modelos. Entre eles, a matriz de planejamento \mathbf{X} e os hiperparâmetros da distribuição *Gama* para a precisão associada ao erro aleatório.

Como só teremos a variável distância sendo trabalhada pelo processo Gaussiano e assumindo o hiperparâmetro l = 3, a função de covariância entre as observações de cada curva terá o formato:

$$K(d, d') = e^{-\frac{(d-d')^2}{18}}$$

Assumimos que observações de curvas diferentes são independentes e apresentam covariância zero. A matriz \mathbf{K} , portanto, tem dimensão 1384 × 1384 e é bloco diagonal. As matrizes na diagonal são todas iguais (exceto pela matriz que representa a matriz de covariância da curva com menos pontos observados), pois as medições são feitas sempre nas mesmas distâncias para todas as curvas. Cada matriz na diagonal representa a matriz de covariância do PG associado às observações de cada curva.

5.4 Estimação

Utilizamos novamente o pacote rstan do software estatístico Rstudio para implementação da metodologia e simulamos as cadeias MCMC com as mesmas características das cadeias dos modelos mistos. A convergência das cadeias foi verificada via gráficos de traço, alguns apresentados no apêndice desse trabalho.

Assim, temos os seguintes resultados por parâmetro:

• Para σ^2 :

Tabela 5.4:Tabela resumo dos valores gerados da posteriori para σ^2 .MédiaDesvio padrãoMedianaIntervalo de credibilidade (95%)112,442,15112,43[108,30; 116,84]

Na Tabela 5.4 observamos que tanto a média como a mediana possuem valores próximos. Além disso, podemos concluir com 95% de probabilidade que o intervalo [108,30; 116,84] engloba o verdadeiro valor de σ^2 ;

• Para β:

Tabela 5.5: Tabela resumo dos valores gerados da *posteriori* para β .

Parâmetro	Média	Desvio padrão	Mediana	Intervalo de credibilidade (95%)		
β_0	91,59	11,16	91,61	[69,75; 113,50]		
β_1	-7,43	7,31	-7,39	[-21,72; 6,92]		
β_2	70,11	9,96	70,11	[50,47;89,51]		
eta_3	10,21	8,72	10,16	[-6,70; 27,20]		
eta_4	-27,54	10,58	-27,67	[-48,08; -6,36]		
β_5	7,02	8,48	6,97	[-9,60; 23,64]		

A Tabela 5.5 traz as estimativas dos valores de β e todos possuem média e mediana parecidos. Além disso, vemos que $\beta_1, \beta_3, \beta_5$ possuem intervalo de credibilidade que engloba o número zero. Isso significa que nenhuma das covariáveis que acompanham esses efeitos fixos são relevantes. São elas: a indicadora se a parede possui ou não vazios internos; a indicadora se a medição foi feita na interface (em comparação com a categoria referência que é a argamassa) e a indicadora se a medição foi feita no tijolo sem vazios na trajetória da onda, respectivamente. Logo, concluímos que essas covariáveis não são importantes para descrever o comportamento de propagação da onda.

As covariáveis restantes: a altura da medição em relação ao solo e a indicadora se a medição foi feita no tijolo com vazios na trajetória da onda são relevantes para descrever o comportamento da onda. O coeficientes β_4 é negativo, isso indica que a onda tende a demorar menos tempo para se propagar no tijolo quando há vazios na trajetória da onda. Como o coeficiente β_2 é positivo, isso reflete que a onda tende a demorar mais tempo para se propagar conforme aumentamos a altura da medição em relação ao solo; e

• Para η :

Seguindo o raciocínio utilizado para apresentar as estimativas dos efeitos aleatórios, os valores estimados $\eta(d_i)$ também serão apresentados através de um histograma e de um box plot.



Figura 5.6: Histograma dos $\eta(d_i)$ estimados.

Vemos pela Figura 5.6 que os $\eta(d_i)$ estimados possuem uma grande simetria e que os valores se concentram entre -0,5 e 0,5.



Figura 5.7: Boxplot dos $\eta(d_i)$ estimados.

A Figura 5.7 mostra que o primeiro e o terceiro quartil dos valores do processo Gaussiano estimados são muito próximos de zero e que a mediana é zero. Vemos também que temos alguns valores outliers, porém até mesmo esses valores são baixos sendo que o maior possui valor aproximado de 0,08.

5.5 Comparação entre modelo mistos e processos Gaussianos

Ao longo deste trabalho, estudamos duas metodologias para modelar os dados de propagação da onda (dados com medidas repetidas): modelos mistos e processos Gaussianos. Nessa seção, vamos comparar as duas metodologias em termos de predição, covariáveis importantes, número de parâmetros de cada modelo e o tempo de processamento que cada um demandou.

Os coeficientes de regressão β estimados são diferentes entre os dois métodos e foram identificadas como relevantes covariáveis diferentes. Enquanto o modelo misto selecionou a variável que indica se a medição foi feita no tijolo com vazios internos ou não na trajetória da onda, o processo Gaussiano selecionou a variável que indica se a medição foi feita no tijolo com vazio interno na trajetória da onda e a altura em que a medição foi feita em relação ao solo.

Além de identificar como mais importante covariáveis diferentes dentro da matriz de planejamento \mathbf{X} , vemos que a informação da distância entre o transmissor e receptor da onda em cada medição, considerada com efeitos aleatórios no modelo misto e dentro do processo Gaussiano na segunda metodologia, foi relevante na primeira metodologia e não muito na segunda. Nos modelos mistos, os efeitos aleatórios estimados são bem distintos de zero enquanto que os valores estimados de $\eta(d_i)$ no processo Gaussiano são muito próximos a zero.

O tempo de processamento também foi diferente. O modelo com processo Gaussiano demorou cerca de 31 horas para rodar e o modelo misto demorou cerca de duas horas, que mostra que o PG possui um custo computacional bem maior do que a outra metodologia. Aqui vale ressaltar que a metodologia de processos Gaussianos, especificamente a manipulação da matriz de variância e covariância do processo (que possui alta dimensão), não necessariamente foi implementada de maneira muito eficiente.

Por fim, podemos comparar os valores preditos pelos modelos estimados e, assim, verificar qual conseguiu fazer estimações mais precisas.

5.5.1 Análise preditiva

Para calcular os valores preditos do modelo misto, definimos a média *a posteriori* como as estimativas dos parâmetros. Com isso, chamaremos de $\hat{\beta}$ o estimador para β sendo

 $\hat{\boldsymbol{\beta}} = (\hat{\beta}_0, \hat{\beta}_1, \hat{\beta}_2, \hat{\beta}_3, \hat{\beta}_4, \hat{\beta}_5)^T e \hat{\beta}_i \text{ a média a posteriori de } \beta_i, \text{ para } i = 0, 1, 2, 3, 4 e 5. \text{ A mesma definição é utilizada para } \hat{\mathbf{b}} = (\hat{\mathbf{b}}_1^T, \hat{\mathbf{b}}_2^T, ..., \hat{\mathbf{b}}_n^T)^T.$

Com os valores de $\hat{\boldsymbol{\beta}}$ e $\hat{\mathbf{b}}$ definidos, calculamos os valores do tempo de propagação preditos pelo modelo misto ($\hat{\mathbf{y}}$) pela seguinte equação:

$$\hat{\mathbf{y}} = \mathbf{X}\hat{\boldsymbol{\beta}} + \mathbf{Z}\hat{\mathbf{b}}$$

Seguindo o que foi feito para os modelos mistos, conseguimos calcular os valores preditos do modelo com o PG (que chamaremos de $\hat{\mathbf{y}}_{pg}$) usando como estimativa de $\boldsymbol{\beta}$, $\hat{\boldsymbol{\beta}}_{pg}$ e dos valores dos processos Gaussianos ($\hat{\boldsymbol{\eta}}(\mathbf{D})$) também a sua média *a posteriori*. Assim, temos:

$$\hat{\mathbf{y}}_{pg} = \mathbf{X} \boldsymbol{\beta}_{pg} + \hat{\boldsymbol{\eta}}(\mathbf{d}).$$

Com os valores preditos é possível calcular os resíduos do modelo ao subtrair o valor observado da variável resposta do seu valor predito. Os resíduos para o modelo misto são iguais a $\mathbf{y} - \hat{\mathbf{y}}$ e os resíduos para o processo Gaussiano são iguais a $\mathbf{y} - \hat{\mathbf{y}}_{pg}$.

Utilizando os valores observados e os valores preditos por cada método, construímos gráficos com as curvas preditas e observadas para compararmos visualmente qual método conseguiu ter melhores predições. As Figuras 5.8 a 5.19 mostram as curvas observadas e preditas para os 12 quadrantes de cada uma das duas paredes. No eixo x estão as distâncias entre o receptor e o transmissor em centímetros e no eixo y está o tempo de propagação da onda em 10^{-6} segundos.



Figura 5.8: Comparação das curvas preditas e observadas do quadrante 1.



Figura 5.9: Comparação das curvas preditas e observadas do quadrante 2.

Vemos que em todos os gráficos as curvas estimadas pelo modelo misto (MM) tem perfil muito parecido com as curvas observadas, o que mostra que a estimação foi boa. Já no modelo com processos Gaussianos, as curvas estimadas são quase constantes e não descrevem bem os perfis das curvas observadas. Isso mostra que esse modelo não foi capaz de estimar bem as curvas.

Com os resíduos de cada método, geramos um gráfico dos resíduos associados a cada observação (Figuras 5.20 e 5.23), um histograma (Figuras 5.21 e 5.24) e um box plot (Figuras 5.22 e 5.25) para cada método para visualizar como que os valores residuais se comportam.

Vemos pela Figura 5.20 que os resíduos gerados pelo modelo misto estão dispersos em torno de zero, com variância constante e com maior concentração em valores próximos a zero. Observamos pela Figura 5.21 que os resíduos gerados pelo modelo misto são simétricos e com a maior parte dos valores entre -25 e 25. A Figura 5.22 mostra que os resíduos gerados pelo modelo misto possuem vários *outliers* negativos e positivos e que o intervalo interquartil está próximo de zero.

Observamos pela Figura 5.23 que os resíduos gerados pelo modelo com PG possui maior concentração em volta do valor zero, mas possui muitos valores altos. Na Figura 5.24 vemos que esses mesmos resíduos tem uma assimetria à direita e maior frequência entre -200 e 200. Por fim, pela Figura 5.25 observamos que os resíduos gerados pelo modelo com PG possuem apenas *outliers* positivos e o maior valor é próximo de 800.

Portanto, analisando os resíduos dos dois métodos, vemos que o modelo misto possui



Figura 5.10: Comparação das curvas preditas e observadas do quadrante 3.

valores menores, menos *outliers* e uma maior simetria do que o modelo com PG. Isso nos dá indícios que o modelo misto foi a metodologia com melhor predição.

Com os resíduos, podemos calcular o erro quadrático médio (EQM) de cada modelo, que é uma medida muito utilizada para comparar a capacidade preditiva dos modelos e quanto menor esse valor melhor é a predição. O EQM é definido como a média dos quadrados dos resíduos. Obtemos um EQM para o modelo misto de 304,2 e um EQM dos processos Gaussianos de 12562,9. Esse resultado confirma o que vimos na análise gráfica de que, para os dados desse trabalho e sob as condições consideradas, o modelo misto possui uma estimação melhor do que os processos Gaussianos.

A má performance do modelo com PG observada nesses resultados, e não esperada, talvez se deva ao fato de que assumimos um processo Gaussiano muito simplificado e restritivo considerando a complexidade dos dados analisados. Como comentamos, fixamos o hiperparâmetro l = 3 da função de covariância exponencial quadrática e ele poderia ter sido também estimado. Essa mesma função de covariância permite a inclusão de mais um hiperparâmetro conhecido como sinal de variância, que nesse trabalho foi fixado como 1 e pode ser estimado. Para o modelo misto, em contrapartida, assumimos um modelo mais flexível com matriz de covariância não-estruturada para os efeitos aleatórios.



Figura 5.11: Comparação das curvas preditas e observadas do quadrante 4.



Figura 5.12: Comparação das curvas preditas e observadas do quadrante 5.



Figura 5.13: Comparação das curvas preditas e observadas do quadrante 6.



Figura 5.14: Comparação das curvas preditas e observadas do quadrante 7.



Figura 5.15: Comparação das curvas preditas e observadas do quadrante 8.



Figura 5.16: Comparação das curvas preditas e observadas do quadrante 9.


Figura 5.17: Comparação das curvas preditas e observadas do quadrante 10.



Figura 5.18: Comparação das curvas preditas e observadas do quadrante 11.



Figura 5.19: Comparação das curvas preditas e observadas do quadrante 12.



Figura 5.20: Gráfico dos resíduos do modelo misto para cada observação.



Figura 5.21: Histograma para os resíduos do modelo misto.



Figura 5.22: Boxplot para os resíduos do modelo misto.



Figura 5.23: Gráfico dos resíduos do modelo com PG de cada observação.



Figura 5.24: Histograma para os resíduos do modelo com PG.



Resíduos

Figura 5.25: Boxplot para os resíduos do modelo com PG.

Capítulo 6

Conclusão e estudos futuros

Nesse trabalho aplicamos os modelos mistos e os processos Gaussianos para descrever e analisar dados de propagação de onda ultrassônica através de paredes de alvenaria. Como se tratam de dados com medidas repetidas, a aplicação desses métodos se justifica porque ambos consideram uma estrutura de covariância entre as observações e também são flexíveis para descrever relações não lineares entre as variáveis.

Observamos que, sob as condições consideradas, o modelo misto estimou melhor os perfis de propagação das ondas. Ele selecionou como mais relevantes as variáveis que indicam se a onda foi propagada através do tijolo com ou sem vazios internos na sua trajetória e a distância entre o receptor e o transmissor. Logo, temos indícios que se medirmos a velocidade de propagação da onda no tijolo com desgaste (vazio ou rachadura) na sua trajetória, temos um perfil de onda diferente daquele medido no tijolo sem desgaste (vazio ou rachadura) na sua trajetória, na argamassa ou na interface.

Para o modelo com PG, observamos que ele não estima bem os perfis das ondas, então não vamos, com base nos seus resultados, concluir quais covariáveis são mais relevantes para descrever o perfil de propagação das ondas. Essa metodologia, contudo, poderá trazer melhores resultados e descrever mais adequadamente os dados analisados se utilizada de outra forma, com funções de covariância mais flexíveis e outras funções de média, por exemplo.

Portanto, podemos dizer que da maneira como foi apresentado, o modelo com PG não foi uma boa metodologia para a estimação das curvas. Contudo, o modelo misto conseguiu trazer bons resultados e com ele conseguimos selecionar as características da alvenaria que alteram o comportamento de propagação das ondas e, possivelmente, comprometem sua estabilidade. Como estudos adicionais e futuros aos realizados nesse trabalho, ressaltamos a importância de análise de predição desses modelos em bases de dados independentes à utilizada na estimação dos modelos; utilização de covariáveis alternativas nos efeitos aleatórios e no PG e analisar seu efeito na predição dos modelos; flexibilização da função de covariância considerada no PG, estimando os valores dos hiperparâmetros associados e; implementação de outras funções de covariância e de média no processo Gaussiano.

Apêndice A

Cálculo das distribuições condicionais completas *a posteriori*

A.1 Modelo misto

No modelo misto, temos as seguintes distribuições condicionais completas a posteriori:

• Para ϕ : $\pi(\phi|\mathbf{y}, \boldsymbol{\beta}, \mathbf{b}) \propto f(\mathbf{y}|\boldsymbol{\beta}, \mathbf{b}, \phi) \times \pi(\phi)$ $\propto \phi^{\frac{N}{2}} e^{-\frac{\phi}{2}(\mathbf{y} - \mathbf{X}\boldsymbol{\beta} - \mathbf{Z}\mathbf{b})^T(\mathbf{y} - \mathbf{X}\boldsymbol{\beta} - \mathbf{Z}\mathbf{b})} \times \phi^{\lambda_1 - 1} e^{-\phi\lambda_2}$ $= \phi^{\frac{N}{2} + \lambda_1 - 1} e^{-\frac{\phi}{2}(\mathbf{y} - \mathbf{X}\boldsymbol{\beta} - \mathbf{Z}\mathbf{b})^T(\mathbf{y} - \mathbf{X}\boldsymbol{\beta} - \mathbf{Z}\mathbf{b}) - \phi\lambda_2}$ $= \phi^{\frac{N}{2} + \lambda_1 - 1} e^{-\phi(\frac{(\mathbf{y} - \mathbf{X}\boldsymbol{\beta} - \mathbf{Z}\mathbf{b})^T(\mathbf{y} - \mathbf{X}\boldsymbol{\beta} - \mathbf{Z}\mathbf{b})} - \lambda_2)}.$

Portanto, $\phi | \mathbf{y}, \boldsymbol{\beta}, \mathbf{b} \sim Gama(\frac{N}{2} + \lambda_1, \frac{(\mathbf{y} - \mathbf{X}\boldsymbol{\beta} - \mathbf{Z}\mathbf{b})^T(\mathbf{y} - \mathbf{X}\boldsymbol{\beta} - \mathbf{Z}\mathbf{b})}{2} - \lambda_2).$

• Para
$$\boldsymbol{\beta}$$
: $\pi(\boldsymbol{\beta}|\mathbf{y}, \mathbf{b}, \phi) \propto f(\mathbf{y}|\boldsymbol{\beta}, \mathbf{b}, \phi) \times \pi(\boldsymbol{\beta})$
 $\propto e^{-\frac{\phi}{2}(\mathbf{y}-\mathbf{X}\boldsymbol{\beta}-\mathbf{Z}\mathbf{b})^{T}(\mathbf{y}-\mathbf{X}\boldsymbol{\beta}-\mathbf{Z}\mathbf{b})}$
 $= e^{-\frac{\phi}{2}[(\mathbf{y}-\mathbf{Z}\mathbf{b})^{T}-(\mathbf{X}\boldsymbol{\beta})^{T}][(\mathbf{y}-\mathbf{Z}\mathbf{b})-(\mathbf{X}\boldsymbol{\beta})]}$
 $= e^{-\frac{\phi}{2}[(\mathbf{y}-\mathbf{Z}\mathbf{b})^{T}(\mathbf{y}-\mathbf{Z}\mathbf{b})-(\mathbf{y}-\mathbf{Z}\mathbf{b})^{T}(\mathbf{X}\boldsymbol{\beta})-(\mathbf{X}\boldsymbol{\beta})^{T}(\mathbf{y}-\mathbf{Z}\mathbf{b})+(\mathbf{X}\boldsymbol{\beta})^{T}(\mathbf{X}\boldsymbol{\beta})]}$
 $= e^{-\frac{\phi}{2}[(\mathbf{y}-\mathbf{Z}\mathbf{b})^{T}(\mathbf{y}-\mathbf{Z}\mathbf{b})+[\boldsymbol{\beta}-(\mathbf{X}^{T}\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}^{T}(\mathbf{y}-\mathbf{Z}\mathbf{b})]^{T}(\mathbf{X}^{T}\mathbf{X})[\boldsymbol{\beta}-(\mathbf{X}^{T}\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}^{T}(\mathbf{y}-\mathbf{Z}\mathbf{b})]]}$
 $\times e^{\frac{\phi}{2}[(\mathbf{y}-\mathbf{Z}\mathbf{b})^{T}-((\mathbf{y}-\mathbf{Z}\mathbf{b})^{T}\mathbf{X}(\mathbf{X}^{T}\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}^{T}(\mathbf{y}-\mathbf{Z}\mathbf{b})]}$
 $= e^{-\frac{\phi}{2}[(\mathbf{y}-\mathbf{Z}\mathbf{b})^{T}[1-(\mathbf{X}(\mathbf{X}^{T}\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}^{T})](\mathbf{y}-\mathbf{Z}\mathbf{b})-\frac{\phi}{2}[\boldsymbol{\beta}-(\mathbf{X}^{T}\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}^{T}(\mathbf{y}-\mathbf{Z}\mathbf{b})]^{T}(\mathbf{X}^{T}\mathbf{X})[\boldsymbol{\beta}-(\mathbf{X}^{T}\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}^{T}(\mathbf{y}-\mathbf{Z}\mathbf{b})]}]}$
 $\propto \phi^{-\frac{p}{2}}e^{-\frac{1}{2}[\boldsymbol{\beta}-(\mathbf{X}^{T}\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}^{T}(\mathbf{y}-\mathbf{Z}\mathbf{b})]^{T}(\boldsymbol{\phi}\mathbf{X}^{T}\mathbf{X})[\boldsymbol{\beta}-(\mathbf{X}^{T}\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}^{T}(\mathbf{y}-\mathbf{Z}\mathbf{b})]}.$
Portanto, $\boldsymbol{\beta}|\mathbf{y}, \mathbf{b}, \phi \sim N_{t}((\mathbf{X}^{T}\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}^{T}(\mathbf{y}-\mathbf{Z}\mathbf{b}), (\boldsymbol{\phi}\mathbf{X}^{T}\mathbf{X})^{-1}).$

• Para
$$\mathbf{b}_i$$
: $\pi(\mathbf{b}_i | \mathbf{y}_i, \boldsymbol{\beta}, \mathbf{G}, \phi) \propto f(\mathbf{y}_i | \boldsymbol{\beta}, \mathbf{b}_i, \phi) \times \pi(\mathbf{b}_i)$
 $\propto e^{-\frac{\phi}{2}(\mathbf{y}_i - \mathbf{X}_i \boldsymbol{\beta} - \mathbf{Z}_i \mathbf{b}_i)^T (\mathbf{y}_i - \mathbf{X}_i \boldsymbol{\beta} - \mathbf{Z}_i \mathbf{b}_i)} \times e^{-\frac{1}{2} \mathbf{b}_i^T \mathbf{G}^{-1} \mathbf{b}_i}$
 $= e^{-\frac{\phi}{2}[(\mathbf{y}_i - \mathbf{X}_i \boldsymbol{\beta} - \mathbf{Z}_i \mathbf{b}_i)^T (\mathbf{y}_i - \mathbf{X}_i \boldsymbol{\beta} - \mathbf{Z}_i \mathbf{b}_i)] - \frac{1}{2}[\mathbf{b}_i^T \mathbf{G}^{-1} \mathbf{b}_i]}$
 $= e^{-\frac{\phi}{2}[(\mathbf{y}_i^T - \boldsymbol{\beta}^T \mathbf{X}_i^T - \mathbf{b}_i^T \mathbf{Z}_i^T)(\mathbf{y}_i - \mathbf{X}_i \boldsymbol{\beta} - \mathbf{Z}_i \mathbf{b}_i)] - \frac{1}{2}[\mathbf{b}_i^T \mathbf{G}^{-1} \mathbf{b}_i]}$
 $= e^{-\frac{\phi}{2}[(\mathbf{y}_i^T - \boldsymbol{\beta}^T \mathbf{X}_i^T - \mathbf{b}_i^T \mathbf{Z}_i^T)(\mathbf{y}_i - \mathbf{X}_i \boldsymbol{\beta} - \mathbf{Z}_i \mathbf{b}_i)] - \frac{1}{2}[\mathbf{b}_i^T \mathbf{G}^{-1} \mathbf{b}_i]}$
 $= e^{-\frac{\phi}{2}[\mathbf{y}_i^T \mathbf{y}_i - \mathbf{y}_i^T \mathbf{X}_i \boldsymbol{\beta} - \mathbf{y}_i^T \mathbf{Z}_i \mathbf{b}_i - \boldsymbol{\beta}^T \mathbf{X}_i^T \mathbf{y}_i + \boldsymbol{\beta}^T \mathbf{X}_i^T \mathbf{X}_i \boldsymbol{\beta} + \boldsymbol{\beta}^T \mathbf{X}_i^T \mathbf{Z}_i \mathbf{b}_i - \mathbf{b}_i^T \mathbf{Z}_i^T \mathbf{y}_i + \mathbf{b}_i^T \mathbf{Z}_i^T \mathbf{X}_i \boldsymbol{\beta} + \mathbf{b}_i^T \mathbf{Z}_i^T \mathbf{Z}_i \mathbf{b}_i]}$
 $\times e^{-\frac{1}{2}[\mathbf{b}_i^T \mathbf{G}^{-1} \mathbf{b}_i]}$
 $= e^{\frac{\phi}{2} \mathbf{y}_i^T \mathbf{Z}_i \mathbf{b}_i - \frac{\phi}{2} \boldsymbol{\beta}^T \mathbf{X}_i^T \mathbf{Z}_i \mathbf{b}_i + \frac{\phi}{2} \mathbf{b}_i^T \mathbf{Z}_i^T \mathbf{y}_i - \frac{\phi}{2} \mathbf{b}_i^T \mathbf{Z}_i^T \mathbf{X}_i \boldsymbol{\beta} - \frac{\phi}{2} \mathbf{b}_i^T \mathbf{Z}_i^T \mathbf{Z}_i \mathbf{b}_i - \frac{1}{2}[\mathbf{b}_i^T \mathbf{G}^{-1} \mathbf{b}_i]}$
 $\times e^{-\frac{\phi}{2}[\mathbf{y}_i^T \mathbf{y}_i + \mathbf{y}_i^T \mathbf{X}_i \boldsymbol{\beta} - \boldsymbol{\beta}^T \mathbf{X}_i^T \mathbf{y}_i - \boldsymbol{\beta}^T \mathbf{X}_i^T \mathbf{X}_i \boldsymbol{\beta}]}.$

Vemos que a segunda exponencial não depende de \mathbf{b}_i logo ela pode ser considerada, neste caso uma constante. Assim,

$$\pi(\mathbf{b}_{i}|\mathbf{y}_{i},\boldsymbol{\beta},\phi,\mathbf{G}) \propto e^{\frac{\phi}{2}\mathbf{y}_{i}^{T}\mathbf{Z}_{i}\mathbf{b}_{i}-\frac{\phi}{2}\boldsymbol{\beta}^{T}\mathbf{X}_{i}^{T}\mathbf{Z}_{i}\mathbf{b}_{i}+\frac{\phi}{2}\mathbf{b}_{i}^{T}\mathbf{Z}_{i}^{T}\mathbf{y}_{i}-\frac{\phi}{2}\mathbf{b}_{i}^{T}\mathbf{Z}_{i}^{T}\mathbf{X}_{i}\boldsymbol{\beta}-\frac{\phi}{2}\mathbf{b}_{i}^{T}\mathbf{Z}_{i}^{T}\mathbf{Z}_{i}\mathbf{b}_{i}-\frac{1}{2}[\mathbf{b}_{i}^{T}\mathbf{G}^{-1}\mathbf{b}_{i}]$$

$$= e^{(\frac{\phi}{2}\mathbf{y}_{i}^{T}\mathbf{Z}_{i}-\frac{\phi}{2}\boldsymbol{\beta}^{T}\mathbf{X}_{i}^{T}\mathbf{Z}_{i})\mathbf{b}_{i}+\mathbf{b}_{i}^{T}(\frac{\phi}{2}\mathbf{Z}_{i}^{T}\mathbf{y}_{i}-\frac{\phi}{2}\mathbf{Z}_{i}^{T}\mathbf{X}_{i}\boldsymbol{\beta})-\mathbf{b}_{i}^{T}(\frac{\phi}{2}\mathbf{Z}_{i}^{T}\mathbf{Z}_{i}+\frac{1}{2}\mathbf{G}^{-1})\mathbf{b}_{i}$$

$$= e^{-\frac{1}{2}[(-\phi\mathbf{y}_{i}^{T}\mathbf{Z}_{i}+\phi\boldsymbol{\beta}^{T}\mathbf{X}_{i}^{T}\mathbf{Z}_{i})\mathbf{b}_{i}+[(-\phi\mathbf{y}_{i}^{T}\mathbf{Z}_{i}+\phi\boldsymbol{\beta}^{T}\mathbf{X}_{i}^{T}\mathbf{Z}_{i})\mathbf{b}_{i}]^{T}+\mathbf{b}_{i}^{T}(\phi\mathbf{Z}_{i}^{T}\mathbf{Z}_{i}+\mathbf{G}^{-1})\mathbf{b}_{i}]$$

$$= e^{-\frac{1}{2}[-\phi(\mathbf{y}_{i}-\mathbf{X}_{i}\boldsymbol{\beta})^{T}\mathbf{Z}_{i}\mathbf{b}_{i}-\phi\mathbf{b}_{i}^{T}\mathbf{Z}_{i}^{T}(\mathbf{y}_{i}-\mathbf{X}_{i}\boldsymbol{\beta})+\mathbf{b}_{i}^{T}(\phi\mathbf{Z}_{i}^{T}\mathbf{Z}_{i}+\mathbf{G}^{-1})\mathbf{b}_{i}].$$
(A.1)

Para o próximo passo devemos antes reparar que se tivermos três matrizes **B**, **C**, **D**, podemos ter a seguinte expressão

$$(\mathbf{B} - \mathbf{C})^T \mathbf{D}^{-1} (\mathbf{B} - \mathbf{C}) = (\mathbf{B}^T \mathbf{D}^{-1} - \mathbf{C}^T \mathbf{D}^{-1}) (\mathbf{B} - \mathbf{C})$$
$$= -\mathbf{C}^T \mathbf{D}^{-1} \mathbf{B} - \mathbf{B}^T \mathbf{D}^{-1} \mathbf{C} + \mathbf{B}^T \mathbf{D}^{-1} \mathbf{B} + \mathbf{C}^T \mathbf{D}^{-1} \mathbf{C}.$$
(A.2)

Olhando esse resultado, vemos que se considerarmos \mathbf{b}_i como nossa matriz $\mathbf{B} \in \mathbf{D}^{-1}$ como ($\phi \mathbf{Z}_i^T \mathbf{Z}_i + \mathbf{G}^{-1}$), teremos Equação (A.1) proporcional à Equação (A.2), e para isso, temos que

$$\mathbf{D}^{-1}\mathbf{C} = (\mathbf{C}^T\mathbf{D}^{-1})^T = \mathbf{Z}_i^T(\mathbf{y}_i - \mathbf{X}_i\boldsymbol{\beta})\phi \text{ e}$$
$$\mathbf{C} = (\phi\mathbf{Z}_i^T\mathbf{Z}_i + \mathbf{G}^{-1})^{-1}\mathbf{Z}_i^T(\mathbf{y}_i - \mathbf{X}_i\boldsymbol{\beta})\phi$$
$$= \frac{1}{\phi}(\mathbf{Z}_i^T\mathbf{Z}_i + (\phi\mathbf{G})^{-1})^{-1}\mathbf{Z}_i^T(\mathbf{y}_i - \mathbf{X}_i\boldsymbol{\beta})\phi$$
$$= (\mathbf{Z}_i^T\mathbf{Z}_i + (\phi\mathbf{G})^{-1})^{-1}\mathbf{Z}_i^T(\mathbf{y}_i - \mathbf{X}_i\boldsymbol{\beta}).$$

Logo, $\pi(\mathbf{b}_i | \mathbf{y}_i, \boldsymbol{\beta}, \mathbf{G}, \phi)$ será proporcional a

$$\begin{split} |(\phi \mathbf{Z}_i^T \mathbf{Z}_i + \mathbf{G}^{-1})|^{-\frac{q}{2}} e^{-\frac{1}{2}[\mathbf{b}_i - (\mathbf{Z}_i^T \mathbf{Z}_i + (\phi \mathbf{G})^{-1})^{-1} \mathbf{Z}_i^T (\mathbf{y}_i - \mathbf{X}_i \beta)]^T} \\ \times e^{(\phi \mathbf{Z}_i^T \mathbf{Z}_i + \mathbf{G}^{-1})[\mathbf{b}_i - (\mathbf{Z}_i^T \mathbf{Z}_i + (\phi \mathbf{G})^{-1})^{-1} \mathbf{Z}_i^T (\mathbf{y}_i - \mathbf{X}_i \beta)]}, \end{split}$$

então, $\mathbf{b}_i | \mathbf{y}_i, \boldsymbol{\beta}, \mathbf{G}, \boldsymbol{\phi} \sim \mathbf{N}_q((\mathbf{Z}_i^T \mathbf{Z}_i + (\boldsymbol{\phi} \mathbf{G})^{-1})^{-1} \mathbf{Z}_i^T(\mathbf{y}_i - \mathbf{X}_i \boldsymbol{\beta}), (\boldsymbol{\phi} \mathbf{Z}_i^T \mathbf{Z}_i + \mathbf{G}^{-1})^{-1}).$

• Para G:

Para encontrar essa *posteriori*, não podemos usar a distribuição $f(\mathbf{y}|\boldsymbol{\beta}, \mathbf{b}, \phi)$ pois a mesma não contêm a matriz **G**. As únicas componentes da distribuição conjunta dos dados e parâmetros que contêm **G** é a distribuição dos efeitos aleatórios \mathbf{b}_i s e a *priori* para **G** que não contemplam os dados observados.

Nesse caso, os \mathbf{b}_i s funcionarão como observações e seus valores serão simulados da sua distribuição *a posteriori* condicional já definida acima. Dessa maneira, $\pi(\mathbf{G}|\mathbf{b}) \propto \pi(\mathbf{G}) \times \pi(\mathbf{b}|\mathbf{G})$ $= \pi(\mathbf{G}) \prod_{i=1}^n \pi(\mathbf{b}_i|\mathbf{G})$ $\propto |\mathbf{G}|^{\frac{-n}{2}} e^{\sum_{i=1}^n -\frac{1}{2}\mathbf{b}_i^T \mathbf{G}^{-1} \mathbf{b}_i} \times |\mathbf{G}|^{\frac{-v-q-1}{2}} e^{-\frac{1}{2}Tr[\mathbf{W}\mathbf{G}^{-1}]}$ $= |\mathbf{G}|^{\frac{v-q-n-1}{2}} e^{-\frac{1}{2}Tr[(\sum_{i=1}^n \mathbf{b}_i \mathbf{b}_i^T)\mathbf{G}^{-1}] - \frac{1}{2}Tr[\mathbf{W}\mathbf{G}^{-1}]}$ $= |\mathbf{G}|^{\frac{-v-q-n-1}{2}} e^{-\frac{1}{2}Tr[(\sum_{i=1}^n \mathbf{b}_i \mathbf{b}_i^T)\mathbf{G}^{-1} + \mathbf{W}\mathbf{G}^{-1}]}$ $= |\mathbf{G}|^{\frac{-v-q-n-1}{2}} e^{-\frac{1}{2}Tr[((\sum_{i=1}^n \mathbf{b}_i \mathbf{b}_i^T) + \mathbf{W})\mathbf{G}^{-1}]}.$ Então, $\mathbf{G}|\mathbf{y}, \boldsymbol{\beta}, \mathbf{b}, \boldsymbol{\phi} \sim IW_q(v + n, (\sum_{i=1}^n \mathbf{b}_i \mathbf{b}_i^T) + \mathbf{W}).$

A.2 Processos Gaussianos

No modelo com PG, temos as seguintes distribuições condicionais completas a posteriori:

• Para η :

$$\pi(\eta | \mathbf{y}, \phi, \boldsymbol{\beta}) \propto f(\mathbf{y} | \eta, \phi, \boldsymbol{\beta}) \times \pi(\eta)$$
$$\propto e^{-\frac{\phi}{2}(\mathbf{y} - \mathbf{X}\boldsymbol{\beta} - \eta)^{T}(\mathbf{y} - \mathbf{X}\boldsymbol{\beta} - \eta)} \times e^{-\frac{1}{2}(\eta)^{T}\mathbf{K}^{-1}(\eta)}$$

Como $\eta | \mathbf{y}, \phi, \boldsymbol{\beta}$ é proporcional a multiplicação de duas normais multivariadas, temos um caso muito parecido com a *posteriori* dos efeitos aleatórios do modelo misto. Logo, seguindo a mesma linha de raciocínio, teremos que $\eta | \mathbf{y}, \phi, \boldsymbol{\beta} \sim N_N((\mathbb{I} + (\phi \mathbf{K})^{-1})^{-1}(\mathbf{y} - \mathbf{X}\boldsymbol{\beta}), (\phi \mathbb{I} + \mathbf{K}^{-1})^{-1});$ • Para ϕ :

 $\pi(\phi|\mathbf{y},\eta,\boldsymbol{\beta}) \propto \pi(\mathbf{y}|\eta,\phi,\boldsymbol{\beta}) \times \pi(\phi)$ $\propto \phi^{\frac{N}{2}} e^{-\frac{\phi}{2}(\mathbf{y}-\mathbf{X}\boldsymbol{\beta}-\eta)^{T}(\mathbf{y}-\mathbf{X}\boldsymbol{\beta}-\eta)} \times \phi^{\varphi_{1}-1} e^{-\phi\varphi_{2}}.$

temos novamente uma equação semelhante nos modelos mistos ao estimar a *posteri*ori de ϕ . Logo seguindo o mesmo raciocínio, $\phi | \mathbf{y}, \eta, \boldsymbol{\beta} \sim Gama(\frac{N}{2} + \varphi_1, \frac{(\mathbf{y} - \mathbf{X}\boldsymbol{\beta} - \eta)^T(\mathbf{y} - \mathbf{X}\boldsymbol{\beta} - \eta)}{2} - \varphi_2);$

• Para $\boldsymbol{\beta}$:

 $\begin{aligned} \pi(\boldsymbol{\beta}|\mathbf{y},\eta,\phi) &\propto \pi(\mathbf{y}|\eta,\phi,\boldsymbol{\beta}) \\ &\propto e^{-\frac{\phi}{2}(\mathbf{y}-\mathbf{X}\boldsymbol{\beta}-\eta)^T(\mathbf{y}-\mathbf{X}\boldsymbol{\beta}-\eta)}. \end{aligned}$

Assim como nos casos anteriores, seguindo o que foi feito para estimar a *posteriori* de $\boldsymbol{\beta}$ nos modelos mistos, temos que $\boldsymbol{\beta}|\mathbf{y}, \eta, \phi \sim N_t((\mathbf{X}^T\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}^T(\mathbf{y}-\eta), (\phi\mathbf{X}^T\mathbf{X})^{-1}).$

Apêndice B

Códigos

}

B.1 Código stan do modelo misto

```
parameters {
  real<lower=0> sigma; // variancia dos erros
  vector[t] beta; // efeitos fixos
  matrix[q,m] b; // efeitos aleatórios
```

```
cov_matrix[q] G; // matriz da IW
}
model {
real media; // média da variável resposta
beta ~ normal(0,1000); // priori dos efeitos fixos
1/sigma ~ gamma(0.1,0.1); // priori dos efeitos aleatórios
G ~ inv_wishart(5,W); // priori da matriz de variância e covariância
                      //dos efeitos aleatórios
for(i in 1:m){
 b[,i] ~ multi_normal(u,G); //priori dos efeitos aleatórios
}
//to_vector(b) ~ multi_normal(u,G);
for(j in 1:N){
media = x[j,]*beta+z[j,]*b[,amostra[j]]; //média de cada observação
y[j] ~ normal(media, sigma); //verossimilhança
}
}
```

B.2 Código stan para o modelo com PG

```
data {
  int<lower=0> N; // número de observações
  int<lower=0> t; // número de efeitos fixos
  vector[N] v; // vetor de médias do processo Gaussiano
  matrix[N, t] x; // matrix X
  cov_matrix[N] K; // matriz K
  matrix[N,1] y; // variável resposta
}
```

```
parameters {
    real<lower=0> sigma; // variancia dos erros
```

```
vector[t] beta; // efeitos fixos
vector[N] eta; // PG
}
model {
real media; // média da variável resposta
beta ~ normal(0,1000); // priori dos efeitos fixos
1/sigma ~ gamma(0.1,0.1); // priori sigma
eta ~ multi_normal(v, K); // priori PG
for(j in 1:N){
media = x[j,]*beta+ eta[j]; //média de cada observação
y[j] ~ normal(media, sigma); //verossimilhança
}
```

B.3 Construção das matrizes de planejamento e de variância e covariância

```
#Bibliotecas
library(rstan)
library(bayesplot)
library(ggplot2)
library(readx1)
library(LaplacesDemon)
library(magic)
library(MCMCpack)
```

```
#importando o banco de dados ######
dados<-read.table(paste("C:/Users/Renan/Desktop/dados),h=T,sep=",")</pre>
```

```
tira<-which(dados[,4]==0 & dados[,5]==0)</pre>
dados<-dados[-tira,]</pre>
indiv<-as.numeric(dados[,2])</pre>
#dados[dados[,1]==1,1]<-0
#dados[dados[,1]==2,1]<-1
#
m=length(table(indiv))
                            #número de individuos
repl=table(indiv) #número de replicações no tempo para cada indivíduo
n=length(indiv)
                   # total de medições
#
#
# VARIAVEL EXPLICATIVA DO EFEITO FIXO #######
#
X<-as.matrix(dados[,c(1,6)])</pre>
for (i in 1:nrow(X)){
if (X[i,1]==2) X[i,1]<-1 else X[i,1]<-0}
X < -cbind(rep(1,n), X)
#
parede<-dados[,1]</pre>
quadrante<-dados[,3]
#
##### Marcação do elemento - criar dummies para essas variáveis
#
tijolo_sb<-which(quadrante %in% c(2,3) &</pre>
parede==2 | (quadrante %in% c(5,6,7,8,10) & parede==1))
tijolo_cb<-which(quadrante %in% c(1,5,6,10) & parede==2)</pre>
argamassa<-which((quadrante %in% c(1,2,3,11) & parede==1) |
(quadrante %in% c(7,8) & parede==2))
interface<-which(quadrante %in% c(4,9,12) | (quadrante %in% c(11) &</pre>
parede==2))
```

68

#

```
categoria<-NULL
categoria[tijolo_sb]<-"Tij_sem_buraco"</pre>
categoria[tijolo_cb] <- "Tij_com_buraco"</pre>
categoria[argamassa]<-"Argamassa"</pre>
categoria[interface] <- "Interface"</pre>
# Matriz K para o processo Gaussiano
Dist<-c(10,15,20,25,30,35)
H<-NULL
for (i in 1:m) H<-c(H,Dist[1:repl[i]])</pre>
#
K<-matrix(0,nrow=n,ncol=n)
1<-3
replc<-c(0,cumsum(repl))</pre>
for (k \text{ in } 1:m){
  for (i in (replc[k]+1):replc[k+1]){
    for (j in (replc[k]+1):replc[k+1]){
```

```
K[i,j]<-round(exp(-((H[i]-H[j])^2/(2*1^2))),4)}}</pre>
```

VARIAVEL EXPLICATIVA DO EFEITO ALEATÓRIO

```
Vt<-c(10,15,20,25,30,35)
aux=matrix(round(poly(Vt, degree=3),3),ncol=3)
aux<-cbind(1,aux)
Z<-NULL
for (i in 1:m) Z<-rbind(Z,aux[1:repl[i],])
#
Y<-as.matrix(dados[,4],ncol=1)</pre>
```

Amostra<-dados[,2]</pre>

B.4 Estimação dos modelos

```
# Definindo os inputs do modelo
m = m
N = length(Y)
q = ncol(Z)
amostra = Amostra
u = rep(0,q)
X_complementar = model.matrix(Y ~ factor(categoria))
X_complementar = X_complementar[,-1]
x = cbind(X,X_complementar)
t = ncol(x)
z = 7
diagonal_W = rep(100,q)
W = diag(diagonal_W)
y = Y
v = rep(0, N)
set.seed(1000)
#estimando o modelo misto
fit <- stan(file = 'C:/Users/Renan Rodrigues/Desktop/modmistos.stan',</pre>
            data = list(N=N, t=t, q=q, amostra=amostra, u=u, x=x, z=z, W=W, y=y),
            chains = 2, iter = 10000, warmup = 1000, thin = 2
)
#estimando o modelo com processo Gaussiano
fit2 <- stan(file = 'C:/Users/Renam Rodrigues/Desktop/processos_gaussianos.stan',</pre>
             data = list(m=m, N=N, t=t, v=v, x=x, K=K, y=y),
```

chains = 2, iter = 10000, warmup = 1000, thin = 2

)

Apêndice C

Gráficos de traço e de autocorrelação

Para verificar a convergência das cadeias MCMC, geramos os gráficos de traço.

Como é necessário gerar um gráfico de traço para cada parâmetro e o modelo misto possui no total 942 parâmetros (1 parâmetro ϕ , 6 parâmetros do vetor β , 924 parâmetros do efeitos aleatórios e 10 parâmetros diferentes da matriz **G**) e o modelo com *PG* possui 1391 parâmetros (1 parâmetro ϕ , 6 parâmetros do vetor β e 1384 valores do *PG*) é inviável apresentar todos os gráficos de todos os efeitos aleatórios e *PG*s nesse trabalho. Contudo, foram conferidos e em todos ocorreu a convergência.

Os gráficos possuem duas cores diferentes, pois cada uma representa uma das duas cadeias geradas. Geramos duas amostras, pois ao comparar as duas, podemos ter uma informação a mais para verificar se houve convergência ou não das cadeias. Se as duas amostras (cadeias) apresentarem comportamentos parecidos, significa que temos uma boa amostra das distribuições *a posteriori* conjuntas dos parâmetros.

Os gráficos de autocorrelação também auxiliam a verificar se temos boas amostras geradas, pois a teoria Bayesiana considera que as interações devem ser não correlacionadas. Assim, verificamos através desses gráficos que nenhuma cadeia possuía autocorrelação o que é mais um indício as estimativas realizadas estão corretas.

Alguns gráficos de traço e autocorrelação são apresentados a seguir.



Figura C.1: Gráfico de traço para o parâmetro σ^2 do modelo misto.



Figura C.2: Gráfico de traço para o parâmetro β_1 do modelo misto.



Figura C.3: Gráfico de traço para o parâmetro β_3 do modelo misto.



Figura C.4: Gráfico de traço para o parâmetro β_5 do modelo misto.



Figura C.5: Gráfico de traço para o parâmetro b_{11} .



Figura C.6: Gráfico de traço para o parâmetro σ^2 do modelo com PG.



Figura C.7: Gráfico de traço para o parâmetro β_1 do modelo com PG.



Figura C.8: Gráfico de traço para o parâmetro β_3 do modelo com PG.



Figura C.9: Gráfico de traço para o parâmetro β_5 do modelo com PG.



Figura C.10: Gráfico de traço para o parâmetro $\eta(d_1)$.



Figura C.11: Gráfico de traço para o parâmetro $\eta(d_{1382}).$



Figura C.12: Gráfico de autocorrelação para o parâmetro β_1 do modelo misto.



Figura C.13: Gráfico de autocorrelação para o parâmetro β_3 do modelo misto.



Figura C.14: Gráfico de autocorrelação para o parâmetro β_5 do modelo misto.



Figura C.15: Gráfico de autocorrelação para o parâmetro b_{11} .



Figura C.16: Gráfico de autocorrelação para o parâmetro σ^2 do modelo com PG.



Figura C.17: Gráfico de autocorrelação para o parâmetro β_1 do modelo com PG.



Figura C.18: Gráfico de autocorrelação para o parâmetro β_5 do modelo com PG.



Figura C.19: Gráfico de autocorrelação para o parâmetro $\eta(d_1)$.



Figura C.20: Gráfico de autocorrelação para o parâmetro $\eta(d_{1382}).$

Referências Bibliográficas

- Azevedo, C. (2015). Modelos lineares mistos. Disponível em: https://www.ime.unicamp.br/ cnaber/aula_mod_lin_misto_adl_2s_2015.pdf.
- Banerjee, S., Gelfand, A. E., Finley, A. O. e Sang, H. (2008). Gaussian predictive process models for large spatial data sets. *Journal of the Royal Statistical Society: Series B* (Statistical Methodology), **70**(4), 825–848.
- Camarinha Filho, J. A. (2002). Nota metodológica sobre modelos lineares mistos. Notas de aula, Universidade Federal do Paraná, Departamento de Estatística.
- de Resende, M. D. V. (2000). Análise estatística de modelos mistos via REML/BLUP na experimentação em melhoramento de plantas perenes. *Embrapa Florestas-Documentos (INFOTECA-E)*.
- de Resende, M. D. V., Duda, L. L., Guimarães, P. R. B. e Fernandes, J. S. C. (2001). Análise de modelos lineares mistos via inferência Bayesiana. *Rev. Mat. Estat*, **19**, 41–70.
- De Souza, R., Reboita, M. S., Werle, A. P. e Costa, E. B. C. (2016). Influência das variáveis atmosféricas na degradação dos materiais da construção civil. *REEC-Revista Eletrônica de Engenharia Civil*.
- Diggle, P. (1988). An approach to the analysis of repeated measurements. Biometrics, 44(4), 959–971.
- Diggle, P. J., Heagerty, P. J., Liang, K. Y. e Zeger, S. L. (2002). Analysis of longitudinal data. Oxford Statistical Science Serires, second edition.
- Ebden, M. (2008). Gaussian processes for regression: A quick introduction. Disponível em: http://www.robots.ox.ac.uk/~ mebden/reports. *GPtutorial. pdf*.

- Esteves, L. G., Izbicki, R. e Stern, R. B. (2020). Inferência Bayesiana. Notas de aula, Universidade Federal de São Carlos.
- Lopes, D. (2014). O modelo de processos gaussianos e suas aplicações. Notas de aula, Universidade Federal de São Carlos.
- Mesquita, E., Paupério, E., Arêde, A. e Varum, H. (2016). Caracterização, avaliação e recuperação estrutural de construções históricas. Asociación Latinoamericana de Control de Calidad, Patología y recuperación de la Construción, 11(1), 5–17.
- NBR 8802 (2019). Concreto endurecido determinação da velocidade de propagação de onda ultrassônica. Rio de Janeiro.
- Nogueira, D. A., Sáfadi, T., Bearzoti, E. e Bueno-Filho, J. d. S. (2003). Análises clássica e Bayesiana de um modelo misto aplicado ao melhoramento animal: uma ilustração. *Ciência e Agrotecnologia, Lavras*, 27, 1614–1624.
- Ramirez, F. C. (2015). Detecção de danos em estruturas de concreto por meio de tomografia ultrassônica. Tese de doutorado, Universidade de São Paulo.
- Reis, V. C. (2020). Processos gaussianos com enfoque em analise de regressão.
- Rocha, A. L. M. M. d. (2017). Modelos lineares mistos: uma abordagem Bayesiana. Tese de doutorado, Universidade de Brasília.
- Rocha, F. H. M. d., Grassi Júnior, V. e Wolf, D. F. (2015). Identificação do modelo longitudinal de um veículo de grande porte utilizando processos gaussianos.
- Rodrigues, A. M. (2009). Linear mixed models: A practical guide using statistical software. Silva Lusitana, 17, 123–125.
- Rodrigues, Araujo, S. C. P. M. (2020). Análise de dados ultrassônicos para o reconhecimento de vazios no interior de painéis de alvenaria maciça. Tese de doutorado, Universidade Federal do Ceará.
- Singer, J. M. e Andrade, D. d. (1986). Análise de dados longitudinais. Simpósio Nacional de Probabilidade e Estatística, 7.
- Team, S. D. et al. (2016). Rstan: the R interface to Stan. R package version, 2(1).

Zuanetti, D. A., Paz, R. F. d., Rodrigues, T. e Mesquita, E. (Em revisão). Clustering ultrasonic waves propagation time: a hierarchical polynomial semi-parametric approach. *Applied Stochastic Models in Business and Industry*.