UNIVERSIDADE FEDERAL DE SÃO CARLOS CENTRO DE CIÊNCIAS EXATAS E TECNOLOGIA PROGRAMA INTERINSTITUCIONAL DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ESTATÍSTICA UFSCar-USP

Marina Gonzaga de Oliveira

Uma abordagem bayesiana para avaliação de concordância entre dispositivos de medição de uma variável funcional

Tese apresentada ao Departamento de Estatística – Des/UFSCar e ao Instituto de Ciências Matemáticas e de Computação – ICMC-USP, como parte dos requisitos para obtenção do título de Doutor em Estatística - Programa Interinstitucional de Pós-Graduação em Estatística UFSCar-USP.

Orientador: Prof. Dr. Luis Ernesto Bueno Salasar Coorientador: Prof. Dr. Carlos Alberto Ribeiro Diniz

> São Carlos Novembro de 2023

UNIVERSIDADE FEDERAL DE SÃO CARLOS CENTRO DE CIÊNCIAS EXATAS E TECNOLOGIA PROGRAMA INTERINSTITUCIONAL DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ESTATÍSTICA UFSCar-USP

Marina Gonzaga de Oliveira

A bayesian approach for assessing concordance between measuring devices for a functional variable

Doctoral dissertation submitted to the Department of Statistics – Des-UFSCar and to the Institute of Mathematics and Computer Sciences – ICMC-USP in partial fulfillment of the requirements for the degree of the Doctorate Interagency Program Graduate in Statistics.

Advisor: Prof. Dr. Luis Ernesto Bueno Salasar Co-advisor: Prof. Dr. Carlos Alberto Ribeiro Diniz

> São Carlos November 2023



UNIVERSIDADE FEDERAL DE SÃO CARLOS

Centro de Ciências Exatas e de Tecnologia Programa Interinstitucional de Pós-Graduação em Estatística

Folha de Aprovação

Defesa de Tese de Doutorado da candidata Marina Gonzaga de Oliveira, realizada em 15/09/2023.

Comissão Julgadora:

Prof. Dr. Luis Ernesto Bueno Salasar (UFSCar)

Prof. Dr. Danilo Lourenço Lopes (UFSCar)

Prof. Dr. Luis Gustavo Esteves (USP)

Prof. Dr. Erlandson Ferreira Saraiva (UFMS)

Prof. Dr. Rafael Izbicki (UFSCar)

O Relatório de Defesa assinado pelos membros da Comissão Julgadora encontra-se arquivado junto ao Programa Interinstitucional de Pós-Graduação em Estatística.

Este trabalho é dedicado àqueles que sempre estiveram ao meu lado, fornecendo ajuda, ideias e apoio.

O primeiro agradecimento é a Deus, por ter me guiado até aqui. Obrigada, Senhor.

À família, Silvio, Lucilene, Beatriz, Jovelina, Antônio, Darci e Luiz (*in memoriam*) por todo o apoio e carinho. Vocês são as pessoas mais especiais da minha vida.

Aos professores do Programa Interinstitucional de Pós-Graduação em Estatística (PIP-GEs). Em especial, ao professor Luis Ernesto Bueno Salasar e ao professor Carlos Alberto Ribeiro Diniz pela ajuda, discussões e sugestões para este trabalho.

Aos professores Gustavo Henrique Pereira e Rafael Izbicki, do PIPGEs. Obrigada por me aceitarem como aluna especial em suas disciplinas enquanto eu tentava ingressar no doutorado em Estatística.

Aos profissionais do ICMC - USP e do Departamento de Estatística da UFSCar pelas orientações.

Aos amigos Danillo, Alex, Isaac e Fabiano pela ajuda com a pesquisa e com as matérias. Amigos que conheci durante o doutorado e fizeram minha vida mais feliz.

Aos amigos Raissa e Rodrigo pelo carinho e apoio. Já perdi as contas de quantos anos nos conhecemos. O tempo passa e vocês se tornam cada vez mais especiais.

Ao professor Tadashi Yokoyama, meu orientador durante a iniciação científica e o mestrado, por sempre me incentivar a seguir estudando e a ser feliz.

À Maria Luiza Ricomi, psicóloga. Não poderia deixar de agradecê-la, pois sua ajuda profissional foi relevante para a conclusão desta tese. Obrigada.

O presente trabalho foi realizado com apoio da Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior - Brasil (CAPES) - Código de Financiamento 001.

"A chave para a transformação é a continuidade" B. Alan Wallace

RESUMO

DE OLIVEIRA, M. G. **Uma abordagem bayesiana para avaliação de concordância entre dispositivos de medição de uma variável funcional**. 2023. 128 p. Tese (Doutorado em Estatística – Programa Interinstitucional de Pós-Graduação em Estatística) – Instituto de Ciências Matemáticas e de Computação, Universidade de São Paulo, São Carlos – SP, 2023.

É comum no contexto industrial e clínico a busca por equipamentos mais precisos, acurados, acessíveis e baratos. Assim, é importante para essas áreas que exista um modo de comparar a concordância de novos aparelhos com algum já existente e que se supõem confiável e acurado. Por outro lado, é cada vez mais comum que sistemas de medição registrem dados ao longo do tempo com uma discretização muito fina, criando dados do tipo funcional. Considerando esse cenário, propomos a abordagem Probabilidade Preditiva de Concordância Funcional (PPFA - *Predictive Probability of Functional Agreement*), uma técnica de análise de concordância entre dados funcionais sob a perspectiva bayesiana, que permite determinar se dois sistemas podem ser utilizados de forma intercambiada (nomenclatura utilizada nos estudos de comparação de sistemas de medição). O PPFA gera um índice de concordância intuitivo (a probabilidade preditiva) de um sujeito/objeto construir curvas (dos dois aparelhos) que diferem menos que uma quantidade aceitável para a área.

Um exemplo de equipamentos que precisam de uma análise mais detalha sobre o grau de concordância são o Optotrak e o eletrogoniômetro flexível. Esses sistemas são utilizados no estudo da marcha. O Optotrak é um aparelho laboratorial e gera dados mais confiáveis, enquanto o eletrogoniômetro é um equipamento ambulatorial e mais barato. Para realizamos o estudo de comparação entre o Optotrak e o eletrogoniômetro com a nossa ferramenta Probabilidade Preditiva de Concordância Funcional, precisamos da suposição de um modelo. Construímos então o modelo hierárquico *Bayesian Functional Gaussian Process* (BFGP).

Como apresentaremos, o PPFA é uma abordagem simples e intuitiva, enquanto o BFGP é um modelo de fácil interpretação no problema da marcha.

Palavras-chave: Probabilidade Preditiva de Concordância Funcional, Problema da Marcha Humana, Modelo Hierárquico Bayesiano, Processo Gaussiano.

ABSTRACT

DE OLIVEIRA, M. G. A bayesian approach for assessing concordance between measuring devices for a functional variable. 2023. 128 p. Tese (Doutorado em Estatística – Programa Interinstitucional de Pós-Graduação em Estatística) – Instituto de Ciências Matemáticas e de Computação, Universidade de São Paulo, São Carlos – SP, 2023.

It is common in the industrial and clinical context to seek more precision, accurate, accessible and cheaper equipments. Therefore, it is important for these fields to have a way to compare the agreement of new devices with one that already exists and that is assumed to be reliable and accurate. On the other hand, it is increasingly common that systems record data over time with a very fine discretization, creating functional data. Considering this scenario, we propose the approach "Predictive Probability of Functional Agreement" (PPFA), a technique for analyzing the concordance between functional data under a Bayesian perspective, which allows determining whether two systems can be used interchangeably (a nomenclature used in studies of comparison of measurement system). The PPFA generates an intuitive measure of agreement (the predictive probability) of the curves from a new subject (from both devices) differ by less than an acceptable amount for the field.

An example of equipments that need further analysis on the degree of agreement are the Optotrak and the flexible electrogoniometer. These systems are used in gait studies. The Optotrak is a laboratory device and generates accurate data, while the electrogoniometer is an ambulatory and cheaper equipment than Optotrak. In order to carry out the comparison study between the Optotrak and the electrogoniometer with our Predictive Probability of Functional Agreement tool, we need to assume a model. Therefore, we present the Bayesian Functional Gaussian Process hierarchical model (BFGP).

The PPFA is a simple and intuitive approach, while the BFGP is an easily interpreted model for the gait problem.

Keywords: Predictive Probability of Functional Agreement, Gait Problem, Bayesian Hierarchical Model, Gaussian Process.

Figura 1 –	Fases do ciclo da marcha.	33
Figura 2 –	Planos corporais de movimento	34
Figura 3 –	Sistemas com acurácias semelhantes, porém precisões distintas	40
Figura 4 –	Sistemas com precisões similares, mas médias diferentes	41
Figura 5 –	Dados simulados (pontos pretos) com $\mu = 10$, $\sigma_s = 5$, $\alpha = 10$, $\beta = 0, 9$, $\sigma_1 =$	
	2,5, $\sigma_2 = 1,5$. Correlação igual a 0,8921. Linha vermelha representando a	
	função identidade	43
Figura 6 –	Modelo Hierárquico de 3 níveis para os dados gerados pelo Optotrak e	
	eletrogoniômetro	52
Figura 7 –	Modelo hierárquico Bayesian Functional Gaussian Process	55
Figura 8 –	Predição das curvas de um novo indivíduo	62
Figura 9 –	Medições da perna dominante de 15 indivíduos pelo Optotrak	68
Figura 10 –	Medições da perna dominante de 15 indivíduos pelo eletrogoniômetro	69
Figura 11 –	Estimativas de C com a perda quadrática	74
Figura 12 –	Estimativas de σ_1^2 com a perda quadrática $\ldots \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots$	75
Figura 13 –	Estimativas de σ_2^2 com a perda quadrática $\ldots \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots$	75
Figura 14 –	Estimativas das curvas $v(t)$ com a perda quadrática	76
Figura 15 –	Estimativas das curvas $g(t)$ com a perda quadrática $\ldots \ldots \ldots \ldots \ldots$	77
Figura 16 –	Estimativas das curvas $u_6(t)$ com a perda quadrática	78
Figura 17 –	Ideia visual da precisão e acurácia dos equipamentos Optotrak e eletrogoniô-	
	metro	81
Figura 18 –	Histograma de σ_1^2 para $M = 12$	81
Figura 19 –	Histograma de σ_2^2 para $M = 12$	82
Figura 20 –	Histograma de C para $M = 12 \dots $	82
Figura 21 –	Variação dos coeficientes de $\boldsymbol{\gamma}$ para $M = 12$	83
Figura 22 –	Região de credibilidade para $v(t)$ (curva de distorção) para $M = 12$	84
Figura 23 –	Variação dos coeficientes de $\boldsymbol{\beta}_6$ para $M = 12$	85
Figura 24 –	Região de credibilidade para $u_6(t)$ (curva média do passo do indivíduo dg)	
	para $M = 12$	86
Figura 25 –	Variação dos coeficientes de $\boldsymbol{\zeta}$ para $M = 12$	87
Figura 26 –	Região de credibilidade para $g(t)$ (curva média do passo do humano) para	
	$M = 12 \ldots $	88

Figura 27 –	Análise do ajuste para o Optotrak. Em cinza temos representadas as curvas	
	observadas, em azul, a média das curvas observadas e em vermelho, a curva	
	média estimada.	93
Figura 28 –	Análise do ajuste para o Optotrak. Em cinza temos representadas as curvas	
	observadas, em azul, a média das curvas observadas e em vermelho, a curva	
	média estimada.	94
Figura 29 –	Análise do ajuste para o Optotrak. Em cinza temos representadas as curvas	
	observadas, em azul, a média das curvas observadas e em vermelho, a curva	
	média estimada.	95
Figura 30 –	Análise do ajuste para o Optotrak. Em cinza temos representadas as curvas	
	observadas, em azul, a média das curvas observadas e em vermelho, a curva	
	média estimada.	96
Figura 31 –	Análise do ajuste para o eletrogoniômetro. Em cinza temos representadas as	
	curvas observadas, em azul, a média das curvas observadas e em vermelho, a	
	curva média estimada.	97
Figura 32 –	Análise do ajuste para o eletrogoniômetro. Em cinza temos representadas as	
-	curvas observadas, em azul, a média das curvas observadas e em vermelho, a	
	curva média estimada.	98
Figura 33 –	Análise do ajuste para o eletrogoniômetro. Em cinza temos representadas as	
-	curvas observadas, em azul, a média das curvas observadas e em vermelho, a	
	curva média estimada.	99
Figura 34 –	Análise do ajuste para o eletrogoniômetro. Em cinza temos representadas as	
	curvas observadas, em azul, a média das curvas observadas e em vermelho, a	
	curva média estimada.	100
Figura 35 –	Região de predição para a curva $u_{16}(t)$ (curva média para um novo indivíduo)	
	para $M = 12$	101
Figura 36 –	Região de predição para a curva $y_{16}(t)$ (medição do Optotrak) para $M = 12$.	101
Figura 37 –	Região de predição para a curva $z_{16}(t)$ (medição do eletrogoniômetro) para	
C	$M = 12 \dots $	102
Figura 38 –	Curvas de concordância entre o Optotrak e eletrogoniômetro utilizando a	
C	ferramenta PPFA com o modelo BFGP	103
Figura 39 –	Curvas de concordância entre o Optotrak e eletrogoniômetro utilizando a	
-	ferramenta PPFA com o modelo BFGP	105

Algoritmo 1 – Simulação da posteriori $\pi(\{\boldsymbol{\beta}_i\}_{i=1}^P, \boldsymbol{\gamma}, C, \sigma_1^2, \sigma_2^2, \boldsymbol{\zeta}, B \mid \{\{W_{ij}\}_{i=1}^P\}_{j=1}^{Q_i}\}$.	60
Algoritmo 2 – Simulação da preditiva $f((\mathbf{Y}_{\mathbf{P+1}}, \mathbf{Z}_{\mathbf{P+1}}) \{\{W_{ij}\}_{i=1}^{P}\}_{j=1}^{Q_i}\} \dots$	62
Algoritmo 3 – Curva $PPFA(t;\Delta)$	64
Algoritmo 4 – Simulação da preditiva $f((\mathbf{Y}_{\mathbf{P+1}} \{\mathbf{Z}_{\mathbf{P+1},\mathbf{j}}\}_{j=1}^{Q_{P+1}}, \{\mathbf{W}_{\mathbf{ij}}\}_{i=1}^{P})$	66

Tabela 1 – Estimativas de C para diferentes truncamentos da série de Fourier	72
Tabela 2 – Estimativas de σ_1^2 para diferentes truncamentos da série de Fourier	72
Tabela 3 – Estimativas de σ_2^2 para diferentes truncamentos da série de Fourier	72
Tabela 4 – Estimativas de γ para diferentes truncamentos da série de Fourier	72
Tabela 5 – Estimativas de $\boldsymbol{\zeta}$ para diferentes truncamentos da série de Fourier	73
Tabela 6 – Estimativas de $\boldsymbol{\beta}_6$ para diferentes truncamentos da série de Fourier	74
Tabela 7 – Distância L^2 entre as curvas estimadas $\hat{v}(.)$, para M = 6, 8, 10, 12, 14, 16, 18	76
Tabela 8 – Distância L^2 entre as curvas estimadas $\hat{g}(.)$, para M = 6, 8, 10, 12, 14, 16, 18	77
Tabela 9 – Distância L^2 entre as curvas estimadas $\hat{u}_6(.)$, para M = 6, 8, 10, 12, 14, 16, 18	78
Tabela 10 – Estimativas dos parâmetros σ_1^2 , σ_2^2 , <i>C</i> e γ considerando a perda quadrática e	
$M = 12. \dots \dots \dots \dots \dots \dots \dots \dots \dots $	80
Tabela 11 – Distância entre a média das curvas observadas do indivíduo e a estimativa da	
curva média	92

LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

BABF	Bayesian framework with Approximations by Basis Functions
BFGP	Bayesian Functional Gaussian Process
CAD	Diferença Clinicamente Aceitável
CCC	Concordance Correlation Coefficient
FCAD	Função da Diferença Clinicamente Aceitável
FCCC	Functional Concordance Correlation Coefficient
FDA	Análise de Dados Funcionais
FLoA	Functional Limits of Agreement
LoA	Limits of Agreement
MSA	Análise de Sistemas de Medição
MSC	Comparação de Sistemas de Medição
PA	Probability of Agreement
PG	Processo Gaussiano
PPFA	Probabilidade Preditiva de Concordância Funcional
PWI	Processo da Wishart Inversa
TDI	Total Deviation Index

1	INTRODUÇÃO	31
1.1	Descrição do problema que embasou a tese	32
1.1.1	A marcha humana	32
1.1.2	Suavização dos dados	34
1.2	Os objetivos deste trabalho e a estrutura do texto	36
2	MÉTODOS DE AVALIAÇÃO DE CONCORDÂNCIA	37
2.1	Técnicas de análise de concordância para dados escalares	37
2.1.1	Comparação de médias (sem replicação)	39
2.1.2	Comparação de repetibilidade	40
2.1.3	Correlação	41
2.1.4	Limits of Agreement	43
2.1.5	Probability of Agreement	45
2.2	Análise de concordância para dados multivariados e funcionais	46
2.2.1	Functional Limits of Agreement	47
2.3	Probabilidade Preditiva de Concordância Funcional	47
3	MODELO BFGP	51
3.1	Estrutura dos dados obtidos com os aparelhos Optotrak e Eletrogo-	
	niômetro	51
3.2	Modelo Bayesiano Hierárquico com suposição de Processo Gaussiano	52
3.2.1	Posteriores	58
3.2.2	Predição das curvas de um novo indivíduo	61
3.2.3	PPFA	<i>62</i>
3.2.4	Calibração	64
4	AVALIAÇÃO DE CONCORDÂNCIA ENTRE OS EQUIPAMENTOS	
	OPTOTRAK E ELETROGONIÔMETRO	67
4.1	Suposições sobre os dados dos aparelhos Optotrak e Eletrogoniômetro	67
4.2	Aplicação do modelo BFGP ao problema da marcha	69
4.3	Resultados	71
4.3.1	Escolha de M para a série de Fourier	71
4.3.2	Posteriores com M=12	79
4.3.3	Avaliação do ajuste	90

4.3.4	Curvas preditivas
4.3.5	PPFA - Concordância entre Optotrak e eletrogoniômetro 102
4. <i>3.6</i>	<i>Calibração</i>
5	CONCLUSÃO
5.1	Perspectivas futuras
REFERÊ	NCIAS
ANEXO	A DISTRIBUIÇÕES DE PROBABILIDADE
A.1	Distribuições de Probabilidade de dimensão finita
A.2	Processo Gaussiano e Wishart Inversa
ANEXO	B CÁLCULO DAS POSTERIORES DO MODELO BFGP 121

CAPÍTULO

INTRODUÇÃO

Em diversas áreas de aplicação (por exemplo, biomedicina, controle de qualidade, entre outros) quantificar a concordância entre dois dispositivos de medição é uma tarefa primordial. A situação mais comum é quando existe um sistema mais confiável e queremos avaliar em qual grau um novo equipamento pode fornecer medições comparáveis, mas também existe a situação em que ambos os aparelhos têm acurácia desconhecida. Esse tipo de problema tem sido extensivamente considerado na literatura por vários autores (CARSTENSEN, 2004; CHOUDHARY; NAGARAJA, 2007; STEVENS; STEINER; MACKAY, 2017). O artigo mais citado nesta área é Bland e Altman (1986a) que critica abordagens baseadas apenas na comparação de médias, análise de correlação e regressão. Os autores do artigo sugerem realizar a comparação em termos preditivos, usando por exemplo um gráfico descritivo para avaliar a diferença das medições com a medição média (*Bland and Altman plot*) e sobrepondo um intervalo preditivo (*Limits of Agreement*) para uma futura diferença entre as medições. Para uma revisão dos métodos de quantificação de concordância entre sistemas de medição veja por exemplo Lin *et al.* (2002) e Barnhart, Haber e Lin (2007).

Contudo, com o desenvolvimento de novas tecnologias, é cada vez mais comum que equipamentos registrem dados ao longo do tempo com uma discretização muito fina, nos permitindo considerar as observações como curvas ao invés de medições escalares. A análise estatística dedicada a este tipo de dados recebeu o nome de análise de dados funcionais. Atualmente, o escopo das disciplinas que envolvem dados funcionais é muito grande, podemos citar como exemplo climatologia (LÓPEZ-PINTADO; ROMO, 2007), química (FERRATY; MAS; VIEU, 2007; DIAS; GARCIA; SCHMIDT, 2013), bioestatística (RICE; WU, 1989), biomecânica (OLSHEN *et al.*, 1989; SØRENSEN *et al.*, 2012), entre muitas outras. ¹ Então, é importante desenvolver métodos estatísticos para tratar adequadamente esse tipo de conjunto de dados. Embora exista uma grande literatura sobre concordância para dispositivos de medição escalar, poucas tentativas

¹ Para uma descrição geral da teoria e aplicações de dados funcionais, veja Ramsay (2006) e Horváth e Kokoszka (2012).

foram feitas para o caso em que a saída é uma função (LI; CHOW, 2005; RØISLIEN; RENNIE; SKAARET, 2012; OLSEN; PFAU; RITZ, 2013).

Neste trabalho propomos uma ferramenta para análise de concordância entre dados funcionais, a Probabilidade Preditiva de Concordância Funcional (PPFA) - no inglês *Predictive Probability of Functional Agreement* - e discutimos o conceito de intercambialidade (terminologia utilizada na área de comparação de aparelhos para se referir a instrumentos que podem ser usados, ao invés de outro, sem perda de informações) considerando essa técnica. Para utilizar o PPFA é apenas necessário um modelo bayesiano para o qual é possível obter as curvas preditivas. Pensando nessa questão, propomos um modelo hierárquico bayesiano com suposição de Processo Gaussiano (o BFGP).

1.1 Descrição do problema que embasou a tese

Em ambientes clínicos, lesões no joelho são um dos problemas mais comum e geralmente prejudicam os movimentos do mesmo, podendo levar a anormalidades na marcha. Durante a marcha, os ângulos de rotação do joelho podem ser mensurados, dando suporte para que um fisioterapeuta tome decisões sobre as anomalias na marcha e possa prescrever tratamentos, assim como acompanhar e realizar o prognóstico. Os ângulos de rotação podem ser medidos indiretamente, registrando-se as coordenadas 3D dos marcadores durante a marcha por meio de um dispositivo optoeletrônico (Optotrak) ou diretamente por meio de um eletrogoniômetro flexível.

Assim, para fornecer uma ferramenta valiosa para o clínico, os dispositivos de medição devem ser acurados e confiáveis. Adicionalmente, eles precisão ser viáveis e baratos, permitindo um uso mais amplo. O Optotrak é um equipamento do tipo laboratorial e supõem-se que produz medições mais confiáveis e acuradas do que o eletrogoniômetro. Por outro lado, o eletrogoniômetro é um sistema ambulatorial, isto é, portátil e pode ser utilizado em uma ampla variedade de ambientes. Além disso, é mais barato que o sistema Optotrak na escala de 10 : 1.

Estudos anteriores com o objetivo de comparar os dois dispositivos foram realizados na literatura, mas todos confiaram em resumir todos os dados em poucas descrições escalares (por exemplo, Vitali *et al.* (2017)). Tais abordagem apenas podem conduzir conclusões para alguns poucos recursos selecionados, desconsiderando uma grande parte dos dados, o que impede uma visão geral e completa das curvas associadas.

1.1.1 A marcha humana

O padrão de marcha é um movimento cíclico que consiste em ciclos de marcha repetitivos. Um ciclo de marcha (equivalente a uma passada) descreve o movimento que ocorre entre dois golpes (contato com o solo) consecutivos do calcanhar e é dividido nas fases de postura (quando o pé está apoiado no solo) e equilíbrio (quando o pé está balançando). A figura 1 ilustra o ciclo da marcha destacando a perna direita do indivíduo. Normalmente, em estudos de análise de marcha, é solicitado que o indivíduo caminhe sobre o solo ou sobre uma esteira por um período de tempo fixo e ao longo de uma linha reta, e então vários ciclos consecutivos são registrados.



Figura 1 – Fases do ciclo da marcha.

Durante o período do caminhar, definimos 3 planos de movimento baseados no corpo do indivíduo: sagital, frontal e transversal (veja a Figura 2). Em estudos da análise da marcha, existem 3 ângulos de rotação para joelho, cada um associado a um dos plano de movimento: flexo-extensão relacionado ao plano sagital, varus-valgus associado ao plano frontal e de rotação interna-externo ligado ao plano transversal. No que compete a este trabalho nos concentramos apenas nos ângulos flexo-extensão que ocorrem no plano sagital.



Figura 2 – Planos corporais de movimento.

1.1.2 Suavização dos dados

Um passo importante na análise de dados funcionais é a representação dos dados discretizados coletados como funções suaves. Esse processo é denominado suavização dos dados (veja os capítulos 4 e 5 do livro de Ramsay (2006) para diferentes técnicas de suavização de dados funcionais). Considerando o tipo de problema que nos motiva, supomos que os dados com os quais vamos trabalhar são do tipo periódicos (em particular para análise de marcha ver Olshen *et al.* (1989)), assim adotamos a abordagem de suavização com a série de Fourier.

Para uma determinada tentativa do experimento, observamos uma série de ciclos de ângulos de rotação de forma discreta: $\{(t_{ij}, y_{ij}), i = 1, \dots, P, j = 1, \dots, Q_i\}$ em que t_{ij} representa a proporção do ciclo j completo da marcha do indivíduo i e y_{ij} o ângulo de rotação associado. É então natural supor a existência de uma função $f_{ij} : [0,1] \longrightarrow \mathbb{R}$, a qual representa a curva do ângulo de rotação ao longo do j-ésimo ciclo do indivíduo i. Assuma que $f_{ij} \in L^2([0,1])$ (em que $L^2([0,1])$ representa o espaço de Hilbert das funções quadrado integrável, $\int_0^1 f^2(t) dt < \infty$) com produto interno definido como

$$\langle f,g \rangle = \int_0^1 f(t)g(t)dt,$$
 (1.1)

que induz a norma L^2

$$||f|| = \left(\int_0^1 f^2(t)dt\right)^{1/2}.$$

Um modo conveniente de representar uma função $f_{ij} \in L^2([0,1])$ é considerar sua expansão em uma base ortonormal { $\phi_m, m \ge 0$ }, isto é, $\langle \phi_m, \phi_{m'} \rangle = 0$ para $m \ne m'$ e $\langle \phi_m, \phi_m \rangle = 1$
caso contrário. Temos que qualquer função $f \in L^2([0,1])$ tem uma única representação como $\sum_{m=0}^{\infty} \beta_m \phi_m$. No caso da base de Fourier (que é uma base ortonormal), os coeficientes são facilmente determinados por

$$\beta_m = \langle f, \phi_m \rangle = \int_0^1 f(t)\phi_m(t)dt.$$

Vale a pena notar que, para qualquer base ortonormal $\{\phi_m, m \ge 0\}$, o espaço de Hilbert $L^2([0,1])$ com produto interno (1.1) é isomórfico ao espaço de Hilbert l^2 das sequências de números reais e quadrado somáveis ($\{(\xi_0, \xi_1, \ldots,): \sum_{m=0}^{\infty} \xi_m^2 < \infty\}$), munido do produto interno definido por

$$<$$
 ξ , η $>=$ $\sum_{m=0}^{\infty}$ $\xi_m \eta_m$,

isto é, as operações usuais do espaço vetorial e os cálculos do produto interno podem ser realizados usando os conceitos associados ao espaço de sequência l^2 . Por exemplo, se $\{f_n, n \ge 1\}$ é uma sequência de funções em $L^2([0,1])$ com vetor de coeficientes $\boldsymbol{\eta}_n$ in l^2 , então a média de \overline{f} é representada pela média dos $\overline{\boldsymbol{\eta}}$.

Uma escolha natural de base ortonormal para representar dados periódicos é a base de Fourier

$$\begin{split} \phi_0(t) &= 1, \\ \phi_{2j-1}(t) &= \sqrt{2}\sin(2\pi j t), j \ge 1, \\ \phi_{2j}(t) &= \sqrt{2}\cos(2\pi j t), j \ge 1. \end{split}$$

Então, uma curva que representa o ângulo de rotação do joelho pode ser descrita como

$$f_{ij}(t) = \beta_{ij,0} + \sum_{m=1}^{M} \beta_{ij,m} \phi_m(t), \qquad t \in [0,1],$$
(1.2)

em que *M* é um determinado nível de truncamento. De (1.2) observamos que $f_{ij}(0) = f_{ij}(1)$, o que impõe a periodicidade natural das curvas dos ângulos de rotação.

Para um dado nível de truncamento *M*, representamos uma curva discretizada $\{(t_{ij}, y_{ij}), i = 1, ..., n\}$ pela estimativa de mínimos quadrados $\hat{\boldsymbol{\beta}}_i = (\hat{\beta}_{i0}, ..., \hat{\beta}_{iM})$, assumindo $y_{ij} = f_i(t_{ij})$ e f_i represando a soma de Fourier (1.2). A estimativa por mínimos quadrados $\hat{\boldsymbol{\beta}}_i$ é dada por $\hat{\boldsymbol{\beta}}_i = (X^T X)^{-1} X Y_i$, em que $Y_i^T = (y_{i1}, ..., y_{ip_i})$ e X é

$$X = \begin{bmatrix} 1 & \sqrt{2}\sin(2\pi t_{i1}) & \sqrt{2}\cos(2\pi t_{i1}) & \cdots & \sqrt{2}\sin(2\pi M t_{i1}) & \cos(2\pi M t_{i1}) \\ \vdots & & \ddots & & \vdots \\ 1 & \sqrt{2}\sin(2\pi t_{ip_i}) & \sqrt{2}\cos(2\pi t_{ip_i}) & \cdots & \sqrt{2}\sin(2\pi M t_{ip_i}) & \cos(2\pi M t_{ip_i}) \end{bmatrix}.$$

1.2 Os objetivos deste trabalho e a estrutura do texto

Os principais objetivos deste trabalho são construir uma ferramenta bayesiana para análise de concordância entre dados funcionais, a Probabilidade Preditiva de Concordância Funcional (PPFA), e o um modelo interpretável para o problema da marcha, que seja útil para a aplicação do PPFA (o modelo BFGP - *Bayesian Functional Gaussian Process*). Utilizando o PPFA e o BFGP, analisaremos a concordância entre os equipamentos Optotrak e eletrogoniômetro (usados na análise da marcha humana).

No Capítulo 2, apresentamos uma contextualização das técnicas utilizadas para avaliar concordância entre dados. Como já citamos, as técnicas desenvolvidas até aqui são principalmente para dados escalares, mas também existem abordagens frequentistas para dados funcionais. Revisamos algumas dessas metodologias.

Na Seção 2.3 está a primeira contribuição à área de concordância entre curvas. Trata-se da construção da ferramenta Probabilidade Preditiva de Concordância Funcional (PPFA), um método bayesiano de avaliação de concordância entre dados funcional. Apesar do PPFA ser uma abordagem sensível aos critérios impostos por cada área de pesquisa, ele constrói um conceito intuitivo sobre concordância, baseado em probabilidade. O PPFA é uma extensão do *Probability of Agreement*, construído para dados escalares.

O Capítulo 3 é dedicado a construção de um modelo hierárquico bayesiano com priores do tipo Processo Gaussiano e Processo Wishart Inversa, o modelo BFGP (*Bayesian Functional Gaussian Process*). O objetivo deste capítulo é construir cada etapa desse modelo (para utilizá-lo no problema da marcha) e descrever a função probabilidade preditiva das curvas de um novo indivíduo e o estudo que definimos como "calibração" (determinação da região de equipamento de referência).

O modelo BFGP foi inspirado nos trabalhados de Stevens (2014) e de Yang *et al.* (2017). Do trabalho de Stevens (2014), o BFGP herda a estrutura de efeitos mistos e saídas bivariadas. Em Yang *et al.* (2017) é apresentado o modelo BABF (*Bayesian framework with Approximations by Basis Functions*) para funções reais e desse modelo o BFGP considera a estrutura hierárquica, o Processo Gaussiano e o Processo Wishart Inversa. O BFGP possui um nível hierárquico a mais do que o BABF, o que permite considerarmos diferentes indivíduos e repetibilidade, além disso não existe necessidade de reduzir o conjunto de pontos de observação das curvas.

Por fim, no Capítulo 4 avaliamos a concordância dos equipamentos Optotrak e eletrogoniômetro no problema da marcha, utilizando a técnica PPFA juntamente com a suposição do BFGP.

capítulo 2

MÉTODOS DE AVALIAÇÃO DE CONCORDÂNCIA

Neste capítulo apresentamos uma breve revisão de alguns estudos de Comparação de Sistemas de Medição (MSC). Entre os tópicos abordados em MSC é comum estudarmos se um sistema de medição (*SM*2) está de acordo com um já existente (*SM*1). A maneira comum de determinar isso é construir um coeficiente de comparação entre os dois sistemas que define se eles podem ser usados de forma intercambiável. Como discutiremos, esses coeficientes precisam considerar algumas características dos sistemas de medição, como acurácia e precisão.

Na Seção 2.3 propomos uma abordagem bayesiana para análise de concordância entre equipamentos de medição de uma variável funcional. Denominamos a técnica como Probabilidade Preditiva de Concordância Funcional (PPFA, sigla em inglês).

Este capítulo está divido em:

- Seção 2.1 apresentamos alguns métodos de avaliação de concordância para dados escalares;
- Seção 2.2 fazemos uma revisão literária de técnicas para dados funcionais;
- Seção 2.3 apresentamos uma proposta bayesiana para avaliação de concordância entre dois equipamentos que mensuram dados do tipo funcional.

2.1 Técnicas de análise de concordância para dados escalares

Para explicar as abordagens para dados escalares usaremos o modelo de efeitos mistos a seguir (Equação 2.1) como ilustração. É muito importante destacar que embora consideremos um modelo, algumas dessas abordagens não supõem qualquer um. Optamos por assumir uma

modelagem como em Stevens (2014) para facilitar o entendimento do leitor sobre as características de cada metodologia. Além disso, consideramos que ambos os sistemas de medição são não destrutivos (a replicação não altera o real valor da característica mensurada) e não incluímos os efeitos do observador. Então, considere

$$\begin{cases} Y_{i1k} = S_i + \varepsilon_{i1k} \\ Y_{i2k} = \alpha + \beta S_i + \varepsilon_{i2k} \end{cases}$$
(2.1)

em que j = 1 representa o sistema de referência (um sistema não - viesado), j = 2 está associado a um novo sistema de medição e

- *Y_{ijk}* é uma variável aleatória; representa o valor observado quando mensuramos o *i*-ésimo objeto, pela *k*-ésima vez, com o método *j*, *i* = 1, ··· , *n*, *j* = 1, 2 e *k* = 1, ··· , *r*;
- S_i é uma variável aleatória; representa o verdadeiro valor desconhecido do objeto i; supomos que

$$S_i \stackrel{iid}{\sim} N(\mu, \sigma_s^2)$$
 (2.2)

 ε_{ijk} é uma variável aleatória; representa o erro de medição quando realizamos múltiplas medições no sujeito *i* com o sistema *j*; supomos

$$\varepsilon_{ijk} \stackrel{iid}{\sim} N(0, \sigma_j^2)$$
 (2.3)

- $\{\varepsilon_{ijk}\}_{i,j,k}$ e $\{S_i\}_{i=1}^n$ são independentes;
- σ_j é constante, j = 1, 2;
- $\alpha \in \mathbb{R} \ e \ \beta > 0.$

A interpretação dos parâmetros são:

- μ é média geral do valor verdadeiro do mensurando e σ_s^2 é a variância;
- σ_j quantifica a variação de medição no sistema *j* (repetibilidade);
- α é o viés fixo de *SM*2 em relação a *SM*1 e β é o viés proporcional de *SM*2 com relação a *SM*1.

Uma vez que assumimos o modelo (2.1), informalmente dizemos que os dois equipamentos podem ser utilizados de forma indistinta se, quase sempre, os dois sistemas concordam, ou seja, $Y_{i1k} \approx Y_{i2k}$. Considerando (2.1), $Y_{i1k} \approx Y_{i2k}$ (ou $D_{ik} = Y_{i1k} - Y_{i2k} \approx 0$, a diferença) é satisfeito quando $\alpha \approx 0$, $\beta \approx 1$ e σ_1, σ_2 são menores que σ_s . Formalmente, estudamos se dois sistemas podem ser utilizados de forma intercambiada (o que definimos nesse trabalho como sendo a não interferência da escolha do equipamento na decisão final). intercambialidade e concordância estão conectados. Alguns estudos sobre concordância/incambialidade são apresentados a seguir.

Aqui revisamos algumas técnicas. Uma discussão mais detalhada sobre as abordagens pode ser encontrada em Bland e Altman (1986a) e Stevens (2014).

2.1.1 Comparação de médias (sem replicação)

Sob a necessidade de avaliar um novo produto para diagnóstico, Barnett (1965) apresenta em seu trabalho uma metodologia baseada em ferramentas estatísticas simples para comparar um novo instrumento com outro. O trabalho envolve um teste - t com a média da diferença. O método não funciona com repetibilidade então é impossível comparar a precisão entre *SM*1 e *SM*2 (r = 1, k = 1). Denotemos por $Y_{ij1} = Y_{ij}, i = 1, \dots, n, j = 1, 2$. Seguindo as ideias de Barnett (1965) e Stevens (2014), definimos a diferença entre as medições sobre o peça *i* como

$$D_i = Y_{i2} - Y_{i1}, \quad i = 1, \cdots, n.$$

Sob o modelo (2.1) e suas características, temos que $D_i \sim N(\mu_D, \sigma_D^2)$

$$\begin{cases} \mu_D = \operatorname{E}(D_i) = \alpha + (\beta - 1)\mu_s \\ \sigma_D^2 = \operatorname{Var}(D_i) = (\beta - 1)^2 \sigma_s + (\sigma_1^2 + \sigma_2^2) \end{cases}$$

Denotemos por d_i a diferença observada ($d_i = y_{i2} - y_{i1}$, com y_{ij} sendo o valor observado para Y_{ij}). A suposição de normalidade pode ser avaliada com um QQ-plot (quando o tamanho amostral é pequeno - (BARNETT, 1965)) ou com um histograma (ALTMAN; BLAND, 1983; BLAND; ALTMAN, 1986b). Estimamos μ_D e σ_D^2 como

$$\begin{cases} \hat{\mu}_D = \overline{d} = \sum_{i=1}^n d_i \\ \hat{\sigma}_D^2 = s_D^2 = \frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^2 \left(d_i - \overline{d} \right)^2 \end{cases}$$

então podemos aplicar um teste - t com para as hipóteses

$$\mathbf{H}_0: \boldsymbol{\mu}_D = \mathbf{0} \times \mathbf{H}_A: \boldsymbol{\mu}_D \neq \mathbf{0} \tag{2.4}$$

e assim comparar as médias dos sistema de medição através da média da diferença (BAR-NETT, 1965; WESTGARD; HUNT, 1973). Se não houver evidências para rejeitas H_0 , então consideraremos que os sistemas podem ser utilizados de forma intercambiada.

Como podemos observar a técnica de comparação de médias ignora $\sigma_1 e \sigma_2$, as variabilidades dos sistemas. Ou seja, embora compare as acurácias, o teste - t não compara as precisões de cada equipamento. Segundo Altman e Bland (1983), se $\sigma_1 e \sigma_2$ são grandes, então existem evidências contra a concordância, porém o teste - t não rejeitaria H₀. Stevens (2014)

argumenta que esta questão poderia ser superada se (2.4) fosse reestruturado como um teste no qual aceitamos a hipótese nula $\mu_D = 0$ até o momento em que evidências sugiram o contrário (WELLEK, 2010). No entanto, independente da adaptação, persiste a questão de que um teste de igualdade de médias não compara diretamente a repetibilidade. Outro ponto é que dois sistemas podem ser igualmente acurados, mas não necessariamente possuem precisões semelhantes e, portanto, não podemos decidir se um novo sistema é melhor do que o sistema de referência (ver Figura 3).



Figura 3 – Sistemas com acurácias semelhantes, porém precisões distintas Fonte: Elaborada pelo autor.

2.1.2 Comparação de repetibilidade

De acordo com Stevens (2014), no contexto industrial é comum realizar comparação entre sistemas através da comparação das métricas computadas nos estudos de Análise de Sistemas de Medição (MSA). Neste trabalho, não focamos nessas medições e sugerimos o capítulo 1 de Stevens (2014) e os trabalhos de Shrout e Fleiss (1979), Steiner e MacKay (2005) e Majeske (2012) para o leitor interessado em MSA. Considere $r \ge 2$, isto é, cada objeto é mensurado rvezes, então podemos estimar σ_1 e σ_2 . Considere, por exemplo, as métricas

$$D_j = rac{\sigma_S}{\sigma_j}$$

 $\gamma_j = rac{\sigma_j}{\sqrt{\sigma_S^2 + \sigma_j^2}}$

 $\rho_j = \frac{\sigma_S^2}{\sigma_S^2 + \sigma_j^2}$ Coeficiente de correlação interclasses

e defina as razões $\frac{D_1}{D_2}$, $\frac{\gamma_1}{\gamma_2}$ e $\frac{\rho_1}{\rho_2}$. Como queremos construir um teste de comparação entre as repetibilidade podemos considerar o teste de hipótese

$$H_0: razão = 1 \times H_A: razão \neq 1, razão = \frac{D_1}{D_2}, \frac{\gamma_1}{\gamma_2} \text{ ou } \frac{\rho_1}{\rho_2}$$
 (2.5)

Para testar (2.5), Majeske (2012) desenvolveu diversos testes. Em seu artigo, ele considera que depois de um estudo MSA em ambos os sistemas, podemos utilizar as métricas para comparar os sistemas de medição. Para isso, o autor desenvolveu 5 testes, cada um baseado em um tipo de métrica (algumas não citadas aqui). Independente da escolha, definimos que se não existe diferença significante entre a razão e o número 1, então as variabilidades dos sistemas são similares e podemos utilizá-los de forma intercambiada.

Além disso, como consideramos uma única população, o teste de hipóteses pode ser simplificado a

$$\mathbf{H}_0: \boldsymbol{\sigma}_1 = \boldsymbol{\sigma}_2 \times \mathbf{H}_{\mathbf{A}}: \boldsymbol{\sigma}_1 \neq \boldsymbol{\sigma}_2 \tag{2.6}$$

O trabalho de Burdick, Borror e Montgomery (2005) apresenta um estudo sobre o teste (2.6).

O problema nas técnicas de comparação de repetibilidade é que essas ignoram o viés relativo de SM2 (com relação a SM1). Isto é um problema se, por exemplo, SM2 tem um viés alto com relação a SM1, mas os sistemas têm precisões similares. Em resumo, o problema desta abordagem é que ela ignora o estudo da acurácia relativa de SM2 (veja a Figura 4).



Figura 4 - Sistemas com precisões similares, mas médias diferentes

Fonte: Elaborada pelo autor.

2.1.3 Correlação

Suponha que cada sistema de medição realiza diversas medições em cada indivíduo *i*, isto é, $r \ge 2$. Considere a média dessas replicações, $\overline{Y}_{ij} = \sum_{k=1}^{r} Y_{ijk}/r$, $i = 1, \dots, n$, e j = 1, 2. Supondo o modelo (2.1) temos que a correlação é dada por

$$Corr(\overline{Y}_{i1}, \overline{Y}_{i2}) = \frac{r\beta\sigma_s^2}{\sqrt{(r\sigma_s^2 + \sigma_1^2)(r\beta^2\sigma_s^2 + \sigma_2^2)}}.$$
(2.7)

Embora o coeficiente de correlação seja uma medida de linearidade entre \overline{Y}_{i1} e \overline{Y}_{i2} , ela também foi usada como uma medida de concordância, de modo que se $Corr(\overline{Y}_{i1}, \overline{Y}_{i2})$ é próximo

de 1, então *SM*1 e *SM*2 podem ser utilizados de modo intercambiado. Mas, quando observamos a Equação 2.7 podemos formular algumas críticas sobre o uso da correlação como coeficiente de correlação.

Crítica 1. A estimação da correlação pode ser inflada, se o valor de $\hat{\sigma}_s$ aumentar (ALTMAN; BLAND, 1983; BLAND; ALTMAN, 1986b).

Essa é uma crítica feita sobre o designer de alguns experimentos. A ideal é selecionar uma amostra de forma aleatória da população. Mas, se intencionalmente a amostra for selecionada de modo não aleatório para cobrir o maior número de possíveis valores reais, a estimativa de $\hat{\sigma}_s$ aumenta e, da Equação 2.7, $Corr(\overline{Y}_{i1}, \overline{Y}_{i2})$ pode ser inflada, levando a conclusão que os dois sistemas podem ser utilizados de forma intercambiada.

- Crítica 2. Se σ_1 e σ_2 são grandes em comparação a σ_s , então $Corr(\overline{Y}_{i1}, \overline{Y}_{i2})$ será pequeno independentemente da concordância entre os dados dos sistemas de medição. É suficiente observar a Equação 2.7. Mesmo que *SM*1 e *SM*2 sejam idênticos (isto é, $\alpha \approx 0, \beta \approx 1$ e $\sigma_1 \approx \sigma_2$), se $\sigma_1, \sigma_2 >> \sigma_s$ então $Corr(\overline{Y}_{i1}, \overline{Y}_{i2})$ decresce para perto de zero. Em outras palavras, concluímos que dois sistemas idênticos não podem ser utilizados de modo intercambiado.
- Crítica 3. Se aumentamos o valor de r, então a correlação pode ser inflada.
 Claro que depende da situação, mas pode ocorrer segundo (2.7). Depende do comportamento dos outros parâmetros.
- Crítica 4. $Corr(\overline{Y}_{i1}, \overline{Y}_{i2})$ não depende do viés fixo (α).

Explicamos essa crítica considerando um exemplo. Suponha que $\overline{Y}_{i2} = \alpha + \overline{Y}_{i1} \operatorname{com} \alpha \neq 0$. Então temos que $Corr(\overline{Y}_{i1}, \overline{Y}_{i2}) = 1$ e, portanto, baseado no critério da correlação para intercambialidade podemos dizer que em teoria os sistemas podem ser utilizados de forma intercambiada. Mas, existe a possibilidade de α se tão grande que em situações reais o sistema não pode ser usado de modo intercambiado. Isto ocorre porque a correlação é uma medida de linearidade e desconsidera a translação entre os dados (representado por α). Veja a Figura 5.



Figura 5 – Dados simulados (pontos pretos) com $\mu = 10$, $\sigma_s = 5$, $\alpha = 10$, $\beta = 0.9$, $\sigma_1 = 2.5$, $\sigma_2 = 1.5$. Correlação igual a 0,8921. Linha vermelha representando a função identidade.

Fonte: Elaborada pelo autor.

2.1.4 Limits of Agreement

As técnicas anteriores mostram a importância da avaliação simultaneamente do viés relativo ($\alpha \in \beta$) e da repetibilidade dos dois sistemas ($\sigma_1 \in \sigma_2$). Um método que tenta trabalhar com estas duas características é o *Limits of Agreement* (LoA). O artigo de Bland e Altman (1986a) que cita essa técnica já foi referido mais de 48000 vezes e é uma técnica comum na área clínica e biomédica (STEVENS, 2014; SILVA; RATHNAYAKE; CHOUDHARY, 2020).

Faremos um resumo das ideias propostas em Altman e Bland (1983), Bland e Altman (1986a) e Bland e Altman (2007).

Sem replicação

Para a análise de concordância com o LoA sem replicação, considere o roteiro abaixo.

- 1. Construa o gráfico $Y_1 \times Y_2$. Este é o primeiro passo para examinar a relação entre os métodos.
- 2. Defina a diferença $D_i = Y_{i1} Y_{i2}$ e a média $A_i = \frac{Y_{i1} + Y_{i2}}{2}$ e construa o gráfico $A \times D$. Neste gráfico analisamos se existe independência entre D e A, em que A é visto como uma alternativa a variável desconhecida S (valor real).
- Caso não exista dependência entre D e A, podemos resumir a comparação dos aparelhos a diferença entre as medições.
 Caso exista dependência, uma transformação dos dados é necessária.
- 4. Se existe um viés consistente então podemos ajustar os dados subtraindo o viés dos dados Y_2 .

5. Construa os limites $\overline{d} \pm 1,96s_d$, em que $\overline{d} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} e s_d = \sqrt{\frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^{n} (d_i - \overline{d})^2}$. Se a diferença segue uma distribuição normal, então Bland e Altman (1986a) concluem que 95% das diferenças observadas pertencem a esse intervalo. Podemos checar tal suposição através de um histograma.

Por fim, considerando pré-fixado um valor *c* que representa a Diferença Clinicamente Aceitável (CAD), podemos definir que dois sistemas de medição podem ser utilizados de forma intercambiada se $-c < \overline{d} - 1,96s_d < \overline{d} + 1,96s_d < c$. É importante avaliar se o zero pertence ao intervalo $(\overline{d} - 1,96s_d,\overline{d} + 1,96s_d)$, pois assim verificamos que não existe qualquer viés significativo.

Com replicação

Considere que cada objeto é mensurado *r* vezes por cada método. Defina as médias das replicações $\overline{Y}_{ij.} = \sum_{k=1}^{r} Y_{ijk}/r$, $i = 1, \dots, n$, e j = 1, 2. Sejam

$$D_{i.} = \overline{Y}_{i2.} - \overline{Y}_{i1.}$$

e

e

$$A_{i.}=\frac{\overline{Y}_{i1.}+\overline{Y}_{i2.}}{2}.$$

Estime

$$\hat{\sigma}_{j}^{2} = \frac{1}{n(r-1)} \sum_{i=1}^{n} \sum_{k=1}^{r} (y_{ijk} - \overline{y}_{ij.})^{2}$$

$$s_d^* = \sqrt{\frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^n (\overline{d}_{i.} - \overline{d}_{.})^2} + \left(1 - \frac{1}{r}\right) (\hat{\sigma}_1^2 + \hat{\sigma}_2^2)$$

Agora, definimos os limites de concordância como

$$\hat{\mu}_d \pm 1,96s_d^*$$

e fixado um valor de *c*, concluímos que existe intercambialidade se $-c < \hat{\mu}_d - 1,96s_d^* < \hat{\mu}_d + 1,96s_d^* < c$.

Críticas

São críticas a essa abordagem (STEVENS, 2014)

 o gráfico A × D (média vs diferença) não informa a verdadeira relação entre os sistemas de medição. Essa característica é agravada no caso de ausência de replicações, pois o gráfico pode conduzir a uma conclusão errônea;

- realizar a comparação entre os equipamentos sem replicação impossibilita a estimação dos parâmetros α, β, σ₁², σ₂² e σ_s² separadamente. Stevens (2014) cita que as estimações possíveis são de combinações desses parâmetros como α + βμ. O único parâmetro que conseguiríamos estimar é μ. Ausência da estimação dos parâmetros impede que avaliações sobre os vieses aditivo e proporcional sejam realizados, assim como a comparação direta entre σ₁² e σ₂² para comparação de precisão;
- um gráfico com as médias das replicações pode mascarar o nível de concordância entre os equipamentos;
- mesmo em cenários com repetibilidade, não existe a comparação explícita de $\sigma_1^2 e \sigma_2^2$, assim no caso de o sistema alternativo ser mais preciso, ignoraríamos essa característica;
- o LoA só considera intercambialidade entre os sistemas se $-c < \hat{\mu}_d 1,96s_d^* < \hat{\mu}_d + 1,96s_d^* < c$ (no cenário com repetibilidade).

2.1.5 Probability of Agreement

O Probability of Agreement (PA) é uma proposta que supera os problemas do Limits of Agreement (BLAND; ALTMAN, 1986a). A ideia é avaliar intercambialidade de maneira intuitiva, como uma probabilidade, e obrigando a suposição de um modelo para os dados (como o de efeitos mistos que estamos considerando para explicar as abordagens). Semelhante ao LoA, o PA (STEVENS, 2014; STEVENS; STEINER; MACKAY, 2017) compara a diferença entre medições individuais feitas por cada sistema e um intervalo que representa o CAD (a Diferença Clinicamente Aceitável). O PA considera replicações das medições.

Considere o CAD da forma (-c, c), c > 0, o PA é definido como

$$\theta(s) = \mathbb{P}(|Y_2 - Y_1| \le c \mid S = s)$$
(2.8)

em que Y_i é uma variável aleatória que representa o valor observado pelo sistema j, j = 1, 2, e S é uma variável aleatória que representa o real valor desconhecido do mensurando.

A interpretação do PA é simples, trata-se da probabilidade de a diferença entre os dados ser menor que *c*, dado que a medida real da curva é *s*. Como desconhecemos o real valor da curva, podemos calcular essa probabilidade para os possíveis valores de *s*, construindo assim $\theta(s)$.

Sob o modelo de efeitos mistos, segue da acumulada da normal padrão (Φ) que

$$\theta(s) = \Phi\left(\frac{c - \alpha - (\beta - 1)s}{\sqrt{\sigma_1^2 + \sigma_2^2}}\right) - \Phi\left(\frac{-c - \alpha - (\beta - 1)s}{\sqrt{\sigma_1^2 + \sigma_2^2}}\right)$$
(2.9)

em que *s* representa o real valor da característica. Assim, podemos construir o "gráfico de probabilidade de concordância", uma ferramenta visual sobre os resultados da comparação.

Definimos que dois sistemas são intercambiáveis se $\theta(s) > \theta$, $\forall s$, para algum valor de $\theta \in [0, 1]$. Interpretamos θ como o valor mínimo que precisamos atingir para considerar dois sistemas intercambiáveis.

A suposição de um modelo e a replicação permitem que façamos a estimação dos parâmetros envolvido e, assim, podemos calcular $\theta(s)$. Se concluirmos que os sistemas não podem ser utilizados de forma intercambiada, a avaliação dos estimadores pode indicar o porquê os sistemas não concordam. Assim, temos uma ferramenta que:

- constrói um índice de concordância simples entre os dados. Avalia-se qual a probabilidade de que a diferença entre os equipamentos seja menor do que um c > 0;
- mescla ferramentas estatísticas com o conhecimento que o pesquisador da área tem sobre os dados;
- a estimação de cada parâmetro separadamente, permite a comparação entre as precisões e acurácias de cada sistema. Isso permite, por exemplo, que não ignoremos um sistema alternativo quando esse é mais preciso do que o de referência ou conseguimos avaliar o que pode levar a não concordância entre os aparelhos.

2.2 Análise de concordância para dados multivariados e funcionais

Com a evolução dos equipamentos de medição, a mensuração de dados é realizada em discretizações cada vez mais finas, ou seja, para um intervalo de tempo, temos cada vez mais dados sobre a evolução/mudanças de uma característica de interesse. Logo, os métodos para dados escalares abordados na seção anterior não são adequados para estudar concordância entre dois aparelhos desse tipo. Então, é necessário a construção de novas ferramentas para análise de concordância. Nesta seção apresentamos o *Functional Limits of Agreement* (FLoA), uma adaptação do LoA para dados escalares. Contudo, na literatura também podemos encontrar outros métodos como o *Functional Concordance Correlation Coefficient* (FCCC) para dados longitudinais intensivos (YOO, 2011), o *functional* CCC e o *functional* TDI para dados funcionais (SILVA; RATHNAYAKE; CHOUDHARY, 2020), adaptações do *Concordance Correlation Coefficient* (TCC) de Lawrence e Lin (1989) e do *Total Deviation Index* (TDI) de Lin (2000), respectivamente, entre outros. Todas essas abordagens são adaptações frequentista de métodos para dados escalares de concordâncias como funções do tempo. Apresentamos a seguir o *Functional Limits of Agreement* (FLoA).

2.2.1 Functional Limits of Agreement

O *Functional Limits of Agreement* (FLoA) é uma adaptação do LoA para dados funcionais. O método foi apresentado em Røislien, Rennie e Skaaret (2012) sob uma perspectiva frequentista e nesse trabalho foi realizado uma aplicação da abordagem em dados da marcha humana.

Considere dois sistemas realizando medições (que podem ou não ser simultâneas) em *n* indivíduos. Para o *i*-ésimo indivíduo, o sistema *j* produz o conjunto de dados $\{y_{ij1}, \dots, y_{ijp_{ij}}\}$. Suponha o a base de funções $\{\phi_m(t)\}_{m=0}^M$, podemos suavizar os dados construindo as funções $f_{ij}(t) = \sum_{m=0}^M c_{ijm} \phi_m(t), i = 1, \dots, n$ e j = 1, 2. Os próximos passos são análogos ao LoA:

- defina as funções diferença $d_i(t) = f_{i1}(t) f_{i2}$ e as funções médias $a_i(t) = \frac{f_{i1}(t) + f_{i2}}{2}$;
- avalie a correlação entre d(t) e a(t) através da generalização funcional da regressão linear (RAMSAY JAMES O; SILVERMAN, 2005);
- supondo que não exista correlação entre d(t) e a(t), temos que d(t) tem toda a informação necessária sobre a concordância entre os dados funcionais e podemos construir os limites

$$\overline{d}(t) \pm 1,96 \cdot SD(d(t)),$$

em que $\overline{d}(t)$ representa a função média dos $d_i(t)$ e SD(d(t)) o desvio - padrão.

Como o LoA, é preciso ainda uma análise clínica para avaliar se os limites $\overline{d}(t) \pm 1,96 \cdot SD(d(t))$ estão dentro da diferença clinicamente aceitável, que agora é representada pela função c(t).

O FLoA herda todos os problemas do LoA já citados aqui (Seção 2.1.4).

2.3 Probabilidade Preditiva de Concordância Funcional

Como visto neste capítulo existem várias maneiras de analisar se dois sistemas de medição podem ser utilizados de forma intercambiada. Em particular para dados funcionais só encontramos na literatura métodos frequentistas para construir índices de concordância.

A seguir apresentamos uma proposta para analisar dados originados de curvas. Escolhemos adaptar o *Probability of Agreement* (PA) de Stevens (2014), construindo a Probabilidade Preditiva de Concordância Funcional (PPFA), uma abordagem bayesiana para a análise de concordância entre dados funcionais. O PPFA preserva a forma intuitiva que PA estabelece para concordância através do conceito de probabilidade. Além disso, mantém a suposição de um modelo para os dados.

Suponha que a característica de interesse é representada por dados do tipo funcional em um intervalo compacto $\tau = [a, b] \subset \mathbb{R}$ e a real curva que produz tais dados é desconhecida.

Assuma que 2 equipamentos computam essa característica simultaneamente e dependem dos reais valores que a característica assume. Supomos que os objetos mensurados são não destrutivos, ou seja, replicar a medição não altera sua medida. Dado que desconhecemos a real curva que gera os dados, consideramos que um dos equipamentos é um sistema de referência (*SM*1), enquanto o outro sistema (*SM*2) será comparado com *SM*1. Supondo *n* independentes curvas pareadas $(y_i, z_i), i = 1, \dots, n$, cujo registro do *i* - ésimo par é feito sobre o conjunto $T_i = \{t_{i1}, \dots, t_{ip_i}\}$.

Análogo ao que foi discutido na seção 2.1, informalmente podemos dizer que dois sistemas de medição podem ser utilizados de forma indistinta se, para quase todos os $t \in \tau$, $y_i(t) \approx z_i(t), i = 1, \dots, n$.

Conceito 1. Seja $\Delta : \tau \to (0, \infty)$ uma função bem definida, determinada por um especialista da área de atuação da pesquisa, tal que para cada $t \in \tau$, $\Delta(t)$ representa a diferença clinicamente aceitável (o CAD do *Limits of Agreement* e do *Probability of Agreement*). Denominaremos Δ como Função da Diferença Clinicamente Aceitável (FCAD).

Conceito 2. Seja $\Delta : \tau \to (0, \infty)$ uma FCAD. Definimos a Probabilidade Preditiva de Concordância Funcional como a função *PPFA* : $\tau \to [0, 1]$ tal que

$$PPFA(t;\Delta) = \mathbb{P}(|y_{n+1}(t) - z_{n+1}(t)| < \Delta(t) \mid \{Y_i, Z_i\}_{i=1}^n), \forall t \in \tau.$$
(2.10)

em que \mathbb{P} representa a função probabilidade.

Dos conceitos acima podemos concluir que:

- o resultado do PPFA depende do modelo suposto para os dados (no capítulo 3, apresentamos um modelo para aplicação da ferramenta);
- o PPFA é um índice de concordância sensível a escolha do $\Delta(t)$;
- o PPFA é uma ferramenta visual, isto é, fixado Δ(t) podemos construir o gráfico t × PPFA(t,Δ) e analisar a concordância entre os sistemas ao longo do domínio τ;
- a interpretação do $PPFA(t, \Delta)$ é a probabilidade de observar no instante *t* uma diferença futura menor que $\Delta(t)$.

Para definir a intercambialidade considere:

Conceito 3. Seja θ : $\tau \to (0,1)$ uma função bem definida, determinada por um especialista da área em que os equipamentos *SM*1 e *SM*2 atuam, de modo que fixado $t \in \tau$, $\theta(t)$ representa o nível pré-fixado que *PPFA*(t; Δ) deve superar para que os sistemas *SM*1 e *SM*2 possam ser descritos como sistemas intercambiáveis ao nível $\Delta(t)$, em $t \in \tau$.

Podemos, então, definir o conceito de intercambialidade como

Conceito 4. Sejam $\Delta: \tau \to (0, \infty)$ uma FCAD e $\theta: \tau \to (0, 1)$ uma função bem definida. Suponha que observamos o conjunto de pares de vetor $\{Y_i, Z_i\}_{i=1}^n$, em que $Y_i = (y_i(t_{i1}), \cdots, y_i(t_{ip_i}))^T$ e $Z_i = (z_i(t_{i1}), \cdots, z_i(t_{ip_i}))^T$ os dados obtidos por *SM*1 e *SM*2, obtidos na *i*-ésima coleta pareada e no conjunto de instantes $T_i = \{t_{i1}, \cdots, t_{ip_i}\} \subset \tau$. Definimos que, dado $\Delta \in \theta$, *SM*1 e *SM*2 podem ser usados de modo intercambiado

(a) no instante $t \in \tau$, se

$$PPFA(t;\Delta) > \theta(t), t \in \tau$$
 (2.11)

(b) no subconjunto $S \subset \tau$, se

$$PPFA(t;\Delta) > \theta(t), \forall t \in S \subset \tau$$
(2.12)

(c) no domínio τ , se

$$PPFA(t;\Delta) > \theta(t), \forall t \in \subset \tau$$
(2.13)

- a intercambialidade é um conceito sensível a escolha de $\Delta(t) \in \theta(t)$;
- afirmar que dois sistemas são intercambiáveis dado Δ(t) e θ(t) em t (ou S ou τ) significa que a probabilidade de uma futura observação da diferença entre os sistemas em t (ou S ou τ) ser menor que Δ(t) é maior que θ(t);
- as regiões onde ocorrem intercambialidade podem ser observadas considerando o gráfico de t × PPFA com a sobreposição do gráfico de θ(t), assim podemos visualizar e analisar os pontos e/ou as regiões onde ocorrem intercambialidade.

Seguindo as ideias apresentadas em Stevens (2014), se concluímos que *SM*1 e *SM*2 não podem ser utilizados de modo intercambiado, é interessante debater o que influenciou esta conclusão.

CAPÍTULO

MODELO BFGP

Para utilizar a ferramenta de concordância proposta no Capítulo 2 (o PPFA) é necessário definir um modelo para os dados funcionais que permita a construção de curvas de predição. Neste capítulo apresentamos o modelo hierárquico *Bayesian Functional Gaussian Process* (BFGP). O BFGP foi inspirado no modelo utilizado em Stevens (2014), que descreve as medições do sistema alternativo com distorções e no BABF (*Bayesian framework with Approximations by Basis Functions*) de Yang *et al.* (2017), que constrói um modelo hierárquico bayesiano para dados funcionais.

3.1 Estrutura dos dados obtidos com os aparelhos Optotrak e Eletrogoniômetro

No problema de comparação entre os sistemas de medição Optotrak e eletrogoniômetro, temos P indivíduos que andam sob uma esteira durante um período de tempo, de modo que cada um realiza Q_i passos (que denominaremos como ciclos), em que i representa o sujeito, $i = 1, \dots, P$. Cada ciclo é uma curva, mensurada pelos dois equipamentos de forma emparelhada, construindo os conjuntos de curvas y_{ij} e z_{ij} (ou mais especificamente, observações dessas curvas). As curvas y_{ij} e z_{ij} formam o 1° nível de um modelo hierárquico. Para o indivíduo i, cada ciclo realizado é uma representação da sua curva (passo) padrão (u_i). As curvas observadas no 1° nível são distorções dessa curva padrão, juntamente com erros de medição dos sistemas. As curvas a u_i podem ser avaliadas como o 2° nível do modelo. Por fim, assumimos que o modo de andar de todos os indivíduos são variações de um movimento genérico. Esse movimento está associado a uma curva g que denominaremos de curva média do passo de um humano e essa está no 3° nível da hierarquia. A Figura 6 representa o esquema.

Supondo as características do problema de comparação entre os equipamentos Optotrak e eletrogoniômetro apresentado acima, propomos um modelo hierárquico bayesiano para a



comparação de dois sistemas de medição que mensuram de forma emparelhada dados funcionais.

Figura 6 - Modelo Hierárquico de 3 níveis para os dados gerados pelo Optotrak e eletrogoniômetro

Fonte: Elaborada pelo autor.

3.2 Modelo Bayesiano Hierárquico com suposição de Processo Gaussiano

Suponha que um conjunto de dados funcionais constituído ao todo por 2*Q* trajetórias, de modo que 2*Q_i* estão associadas ao indivíduo *i*, *i* = 1, ··· ,*P*. Para cada indivíduo, as 2*Q_i* trajetórias são resultados da união de dois conjuntos de *Q_i* curvas, representadas por $\mathscr{Y}_i = \{y_{ij} : [a,b] \to \mathbb{R}; j = 1, \cdots, Q_i\}$ e $\mathscr{Z}_i = \{z_{ij} : [a,b] \to \mathbb{R}; j = 1, \cdots, Q_i\}$. Assuma que as curvas *y_{ij}* estão associadas ao sistema de medição de referência e as trajetórias *z_{ij}* a um segundo equipamento. Podemos definir as funções *w_{ij}* : [*a*,*b*] $\to \mathbb{R}^2$ tais que

$$w_{ij}(t) := (y_{ij}(t), z_{ij}(t)).$$
 (3.1)

Sem perda de generalidade, supomos que o domínio [a,b] = [0,1].

Assuma para as trajetórias o seguinte modelo funcional de efeitos mistos apresentado em Stevens (2014) (simplificação do modelo apresentado em Guo (2002))

$$\begin{cases} y_{ij}(t) = u_i(t) + e_{1ij}(t) \\ z_{ij}(t) = C \times u_i(t) + v(t) + e_{2ij}(t) \end{cases}$$
(3.2)

em que $e_{1ij}(.)$ e $e_{2ij}(.)$ são ruídos aditivos do equipamento que produz as medições de referência (SM1) e seu concorrente (SM2), respectivamente. Enquanto $C \in \mathbb{R}$ e $v : [0,1] \rightarrow \mathbb{R}$ são distorções que o equipamento SM2 comete e não dependem do indivíduo/objeto. Adicionalmente supomos que $u_i(.)$, $i = 1, \dots, P$, e v(.) são funções pertencentes a L^2 com período igual a 1 e que possuem representação na série de Fourier $\{\phi_m(.)\}_{m=0}^{\infty}$, ou seja, existem sequências reais $\{\beta_{im}\}_{m\geq 0}$ e $\{\gamma_m\}_{m\geq 0}$ que pertencem ao conjunto das sequências cuja soma dos quadrados dos termos é finita (conjunto l^2) tais que:

$$u_i(.) = \sum_{m=0}^{\infty} \beta_{im} \phi_m(.), \quad i = 1, \cdots, P$$

$$v(.) = \sum_{m=0}^{\infty} \gamma_m \phi_m(.)$$

(3.3)

e, portanto,

$$\begin{cases} y_{ij}(.) = \sum_{m=0}^{\infty} \beta_{im} \phi_m(.) + e_{1ij}(.) \\ z_{ij}(.) = \sum_{m=0}^{\infty} (C\beta_{im} + \gamma_m) \phi_m(.) + e_{2ij}(.) \end{cases}, \ i = 1, \cdots, P, \ j = 1, \cdots, Q_i. \end{cases}$$

Adicionalmente, observe que fixado um valor $M \in \mathbb{N}$, podemos definir as funções

$$\begin{cases} y_{ij}^{(M)}(.) = \sum_{m=0}^{M} \beta_{im} \phi_m(.) + e_{1ij}(.) \\ z_{ij}^{(M)}(.) = \sum_{m=0}^{M} (C\beta_{im} + \gamma_m) \phi_m(.) + e_{2ij}(.) \end{cases}, i = 1, \cdots, P, j = 1, \cdots, Q_i$$

de modo que, $\forall t \in [0, 1]$,

$$\begin{aligned} ||y_{ij}^{(M)}(t) - y_{ij}(t)||_{L^2} &\xrightarrow[M \to \infty]{} 0 \\ ||z_i^{(M)}(t) - z_{ij}(t)||_{L^2} &\xrightarrow[M \to \infty]{} 0 \end{aligned}$$
(3.4)

A relação descrita em (3.4) é importante para aplicação computacional do modelo, pois garante que, uma vez que a série de Fourier é adequada aos dados, existirá um valor de *M* tal que se M' > M, então $\sum_{m=0}^{M'} \beta_{im} \phi_m(t) \approx \sum_{m=0}^{M} \beta_{im} \phi_m(t), \forall t \in [0,1] \text{ e } i \in \{1, \dots, P\}$. Temos o resultado análogo para a sequência $\{\gamma_m\}_{m\geq 0}$.

Prosseguindo, assumimos que os ruídos aditivos $\{e_{sij}(.)\}$ são funções aleatórias tais que

$$e_{sij} \stackrel{iid}{\sim} PG(0_f(.), \sigma_s^2 \kappa_s(.,.)), s = 1, 2$$
 (3.5)

em que $0_f(.)$ é a função nula nos reais e $\kappa_s(.,.)$ são funções kernel definidas previamente. Adicionalmente definimos que e_{1ij} é independente de $e_{2i'j'}$ para quaisquer valores de i, i', j, j' e também que os erros são independentes de β_{im} , γ_m e *C*. Das suposições de independência, temos que para $i, i' \in \{1, \dots, P\}$ e $j, j' \in \{1, \dots, Q_i\}$

$$y_{ij}(.) \perp z_{i'j'}(.) \mid \{\{\beta_{im}\}_{m \ge 0}\}_{l=1}^{P}, \{\gamma_m\}_{m \ge 0}, C, \sigma_1^2, \sigma_2^2$$
(3.6)

e

$$\begin{cases} y_{ij}(.) \mid \{\{\beta_{im}\}_{m\geq 0}\}_{l=1}^{P}, \{\gamma_{m}\}_{m\geq 0}, C, \sigma_{1}^{2}, \sigma_{2}^{2} \stackrel{ind}{\sim} PG\left(\sum_{m=0}^{\infty} \beta_{im}\phi_{m}(.), \sigma_{1}^{2}\kappa_{1}(.,.)\right) \\ z_{ij}(.) \mid \{\{\beta_{im}\}_{m\geq 0}\}_{l=1}^{P}, \{\gamma_{m}\}_{m\geq 0}, C, \sigma_{1}^{2}, \sigma_{2}^{2} \stackrel{ind}{\sim} PG\left(\sum_{m=0}^{\infty} (C\beta_{im} + \gamma_{m})\phi_{m}(.), \sigma_{2}^{2}\kappa_{2}(.,.)\right) \\ \Rightarrow \begin{cases} y_{ij}(.) \mid \{\beta_{im}\}_{m\geq 0}, \sigma_{1}^{2} \stackrel{ind}{\sim} PG\left(\sum_{m=0}^{\infty} \beta_{im}\phi_{m}(.), \sigma_{1}^{2}\kappa_{1}(.,.)\right) \\ z_{ij}(.) \mid \{\beta_{im}\}_{m\geq 0}, \{\gamma_{m}\}_{m\geq 0}, C, \sigma_{2}^{2} \stackrel{ind}{\sim} PG\left(\sum_{m=0}^{\infty} (C\beta_{im} + \gamma_{m})\phi_{m}(.), \sigma_{2}^{2}\kappa_{2}(.,.)\right) \end{cases}$$
(3.7)

Logo, a verossimilhança do modelo é dada por

$$f(\{w_{ij}(.)\}_{i,j} \mid \{\{\beta_{im}\}_{m \ge 0}\}_{l=1}^{P}, \{\gamma_{m}\}_{m \ge 0}, C, \sigma_{1}^{2}, \sigma_{2}^{2}) = \\ = \left(\prod_{i=1}^{P} \prod_{j=1}^{Q_{i}} f\left(y_{ij}(.) \mid \{\beta_{im}\}_{m \ge 0}, \sigma_{1}^{2}\right)\right) \times \left(\prod_{i=1}^{P} \prod_{j=1}^{Q_{i}} f\left(z_{ij}(.) \mid \{\beta_{im}\}_{m \ge 0}, C, \{\gamma_{m}\}_{m \ge 0}, \sigma_{2}^{2}\right)\right)$$

$$(3.8)$$

em que cada termo do lado direito do Equação 3.8 é um Processo Gaussiano.

Fazendo uma analogia ao problema da comparação entre os equipamentos Optotrak e eletrogoniômetro, temos que $u_i(.)$ seria a curva padrão do passo do indivíduo *i*. Observe que da expansão na série de Fourier, a estimação de qualquer uma das curvas u_i está associada a estimação da sua respectiva sequência de números reais $\{\beta_{im}\}_{m\geq0}$. O mesmo ocorre com a curva v(.) e a sequência $\{\gamma_m\}_{m\geq0}$. Logo, podemos associar os parâmetros $\{\{\{\beta_{im}\}_{m\geq0}\}_{i=1}^{P}, \{\gamma_m\}_{m\geq0}, C, \sigma_1^2, \sigma_2^2\}$ ao 2º nível do modelo hierárquico. Assumimos as seguintes distribuições a priori para os parâmetros desse nível:

$$\begin{cases}
\{\beta_{im}\}_{m\geq 0} \mid \{\zeta_m\}_{m\geq 0}, \kappa_{\beta} \stackrel{iid}{\sim} PG(\{\zeta_m\}_{m\geq 0}, \kappa_{\beta}(.,)), i = 1, \cdots, P \\
\{\gamma_m\}_{m\geq 0} \sim PG(\{\xi_m\}_{m\geq 0}, \kappa_{\gamma}(.,.)) \\
C \sim N_{[0,\infty)}(\omega, \sigma_C^2) \\
\sigma_1^2 \sim gamma - inv(a_1, b_1) \\
\sigma_2^2 \sim gamma - inv(a_2, b_2)
\end{cases}$$
(3.9)

em que são definidos previamente os hiper parâmetros: $\{\xi_m\}_{m\geq 0} \in \mathbb{R}^{\infty}, \kappa_{\gamma}, \omega, \sigma_C^2, a_1, b_1, a_2 \in b_2$. A notação $N_{[0,\infty)}$ representa a normal truncada no intervalo $[0,\infty)$. Observe que $(\{\zeta_m\}_{m\geq 0}, \kappa_{\beta})$ formam o 3º nível do modelo hierárquico e para esses parâmetros assumimos as priores:

$$\begin{cases} \{\zeta\}_{m\geq 0} \mid \kappa_{\beta} \sim PG(\{\eta_m\}_{m\geq 0}, d^{-1}\kappa_{\beta}) \\ \kappa_{\beta} \sim PWI(\tau, \kappa_{\Sigma}) \end{cases}$$
(3.10)

em que $\{\eta_m\}_{m\geq 0} \in \mathbb{R}^{\infty}$, $d \in \mathbb{R}_+$, $\tau \in \mathbb{R}_+$ e κ_{Σ} também são hiper parâmetros definidos e *PWI* é um Processo Wishart Inversa (YANG *et al.*, 2016). Temos que $\{\zeta_m\}_{m=0}^{\infty}$ podem ser interpretados como os coeficientes de série de Fourier que define a curva média geral, g(.) (no problema de comparação entre os equipamentos Optotrak e eletrogoniômetro foi denominada como curva média do passo de um humano).



Figura 7 - Modelo hierárquico Bayesian Functional Gaussian Process

Fonte: Elaborada pelo autor.

O modelo descrito por (3.8), (3.9) e (3.10), representado na Figura 7, é um modelo hierárquico bayesiano para dados funcionais com suposições de Processos Gaussianos, que denominaremos como *Bayesian Functional Gaussian Process* (BFGP). A escolha do Processo Gaussiano deve-se a estrutura genérica das curvas. A hierarquia proposta no BFGP, permite o compartilhamento de informação entre as curvas mensuradas, preservando a característica de cada uma e de cada indivíduo. Além disso, diferentemente de outros modelos hierárquicos bayesianos, tal como *Bayesian framework with Approximations by Basis Functions* (BABF) apresentado em

Yang *et al.* (2017), o BFGP utilizará todos os instantes observados para determinar os parâmetros (sem a necessidade de restringir a grade de instantes a um conjunto muito menor do que a união de todos os instantes) e não faz uso da inversa generalizada para matrizes não quadradas. Ao assumirmos uma função de perda, podemos estimar os parâmetros, de modo que determinamos as curvas envolvidas no modelo e podemos avaliá-las em qualquer instante do domínio. Ademais, o modelo foi construído para incorporar a repetição de medições sobre um indivíduo, assim como a avaliação simultânea de todos os sujeitos.

Apesar do BFGP ser construído sobre funções aleatórias, uma vez que não conseguimos trabalhar na prática com curvas, assim como não conseguimos trabalhar com infinitos termos, faremos uso do truncamento da série de Fourier (3.4) e das relações entre o Processo Gaussiano e a Distribuição Normal Multivariada e entre o Processo Wishart Inversa e a distribuição Wishart Inversa com a parametrização de Dawid (1981) (YANG *et al.*, 2016) para construir as posteriores dos parâmetros. Suponha que as curvas $y_{ij}(.) e z_{ij}(.)$ são observadas no conjunto ordenado e comum de pontos $\mathcal{T}_{ij} = \{t_{ij1} < t_{ij2} < \cdots < t_{ijn_{ij}}\}$. Defina para cada $i = 1, \cdots, P$ e $j = 1, \cdots, Q_i$, variáveis aleatórias

$$\begin{cases}
Y_{ijk} := y_{ij}(t_k) \\
Z_{ijk} := z_{ij}(t_k) & k = 1, \cdots, n_{ij}. \\
W_{ijk} := (Y_{ijk}, Z_{ijk})
\end{cases}$$
(3.11)

e denote por y_{ijk} , z_{ijk} e w_{ijk} os valores observados. Assim, temos os conjuntos de dados:

$$\mathscr{D}_{ij} = \{(t_{ijk}, w_{ijk}); k = 1, \cdots, n_{ij}\} = \{(t_{ijk}, y_{ijk}, z_{ijk}); k = 1, \cdots, n_{ij}\},$$
(3.12)

 $i = 1, \dots, P, j = 1, \dots, Q_i$ que, quando unidos, formam os dados observados no 1º nível do modelo hierárquico

$$\mathscr{D} = \bigcup_{i=1}^{P} \bigcup_{j=1}^{Q_i} \mathscr{D}_{ij}.$$
(3.13)

Defina as representações matriciais, para $i = 1, \dots, P, j = 1, \dots, Q_i$ e M fixado

• Dados

$$\mathbf{Y_{ij}} := \begin{bmatrix} Y_{ij1} \\ \vdots \\ Y_{ijn_{ij}} \end{bmatrix} \quad ; \quad \mathbf{Z_{ij}} := \begin{bmatrix} Z_{ij1} \\ \vdots \\ Z_{ijn_{ij}} \end{bmatrix} \quad ; \quad W_{ij} := \begin{bmatrix} \mathbf{Y_{ij}} & \mathbf{Z_{ij1}} \\ \vdots & \vdots \\ Y_{ijn_{ij}} & \mathbf{Z_{ijn_{ij}}} \end{bmatrix}$$

• Coeficientes de Fourier

$$\boldsymbol{\beta}_{i} := \begin{bmatrix} \beta_{i0} \\ \vdots \\ \beta_{iM} \end{bmatrix} \quad ; \quad \boldsymbol{\gamma} := \begin{bmatrix} \gamma_{0} \\ \vdots \\ \gamma_{M} \end{bmatrix} \quad ; \quad \boldsymbol{\zeta} := \begin{bmatrix} \zeta_{0} \\ \vdots \\ \zeta_{M} \end{bmatrix} \quad ; \quad \boldsymbol{\xi} := \begin{bmatrix} \xi_{0} \\ \vdots \\ \xi_{M} \end{bmatrix} \quad ; \quad \boldsymbol{\eta} := \begin{bmatrix} \eta_{0} \\ \vdots \\ \eta_{M} \end{bmatrix}$$

• Funções da série de Fourier

$$\Phi_{ij} := \begin{bmatrix} \phi_0(t_{ij1}) & \cdots & \phi_M(t_{ij1}) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \phi_0(t_{ijn_{ij}}) & \cdots & \phi_M(t_{ijn_{ij}}) \end{bmatrix}$$

• Matrizes de covariância

$$K_{1ij} := \begin{bmatrix} \kappa_1(t_{ij1}, t_{ij1}) & \cdots & \kappa_1(t_{ij1}, t_{ijn_{ij}}) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \kappa_1(t_{ijn_{ij}}, t_{ij1}) & \cdots & \kappa_1(t_{ijn_{ij}}, t_{ijn_{ij}}) \end{bmatrix}$$

$$K_{2ij} := \begin{bmatrix} \kappa_2(t_{ij1}, t_{ij1}) & \cdots & \kappa_2(t_{ij1}, t_{ijn_{ij}}) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \kappa_2(t_{ijn_{ij}}, t_{ij1}) & \cdots & \kappa_2(t_{ijn_{ij}}, t_{ijn_{ij}}) \end{bmatrix}$$

$$B := \begin{bmatrix} \kappa_{\beta}(0,0) & \cdots & \kappa_{\beta}(0,M) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \kappa_{\beta}(M,0) & \cdots & \kappa_{\beta}(M,M) \end{bmatrix}$$

$$H := \begin{bmatrix} \kappa_{\gamma}(0,0) & \cdots & \kappa_{\gamma}(0,M) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \kappa_{\gamma}(M,0) & \cdots & \kappa_{\gamma}(M,M) \end{bmatrix}$$

$$\Sigma := \begin{bmatrix} \kappa_{\Sigma}(0,0) & \cdots & \kappa_{\Sigma}(0,M) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \kappa_{\Sigma}(M,0) & \cdots & \kappa_{\Sigma}(M,M) \end{bmatrix}$$
(3.14)

Assim, para *M* fixado e $\forall i \in \{1 \dots, P\}$ e $\forall j \in \{1, \dots, Q_i\}$, temos que as Equações (3.8), (3.9) e (3.10) se transformam no modelo com o qual trabalharemos na prática

$$\begin{aligned}
\mathbf{Y}_{\mathbf{ij}} \mid \boldsymbol{\beta}_{i}, \sigma_{1}^{2} \stackrel{iid}{\sim} N_{n_{ij}} \left(\Phi_{ij} \boldsymbol{\beta}_{i}, \sigma_{1}^{2} K_{1ij} \right) \\
\mathbf{Z}_{\mathbf{ij}} \mid \boldsymbol{\beta}_{i}, \boldsymbol{\gamma}, C, \sigma_{2}^{2} \stackrel{iid}{\sim} N_{n_{ij}} \left(\Phi_{ij} \left(C \boldsymbol{\beta}_{i} + \boldsymbol{\gamma} \right), \sigma_{2}^{2} K_{2ij} \right) \\
\boldsymbol{\beta}_{i} \mid \boldsymbol{\zeta}, B \stackrel{iid}{\sim} N_{M+1} (\boldsymbol{\zeta}, B) \\
\boldsymbol{\gamma} \sim N_{M+1} (\boldsymbol{\xi}, H) & i = 1, \cdots, P \\
C \sim N_{[0,\infty)} (\boldsymbol{\omega}, \sigma_{C}^{2}) &, j = 1, \cdots, Q_{i} \\
\sigma_{1}^{2} \sim gamma - inv(a_{1}, b_{1}) \\
\sigma_{2}^{2} \sim gamma - inv(a_{2}, b_{2}) \\
\boldsymbol{\zeta} \mid B \sim N_{M+1} (\boldsymbol{\eta}, d^{-1}B) \\
B \sim WI_{M+1} (\boldsymbol{\tau}, \Sigma)
\end{aligned}$$
(3.15)

em que WI_{M+1} é a distribuição Wishart - Inversa com a parametrização descrita em Dawid (1981). Apesar de suprimido na notação, o modelo descrito depende do valor fixado para M. Mas, como afirmado em (3.4), conforme M cresce, mais próximos ficamos das curvas v(.) e $u_i(.), i = 1, \dots, P$, consequentemente de $y_{ij}(.)$ e $z_{ij}(.)$.

Temos como objetivo construir as curvas preditas deste modelo. Para tanto, precisamos definir as distribuições a posteriores dos parâmetros.

3.2.1 Posteriores

Para simular a distribuição a posteriori $\pi(\{\boldsymbol{\beta}_{i}\}_{i=1}^{P}, \boldsymbol{\gamma}, C, \sigma_{1}^{2}, \sigma_{2}^{2}, \boldsymbol{\zeta}, B \mid \{W_{ij}\}_{i,j})$ utilizamos o algoritmo Gibbs Sampler. Observe que

$$\pi(\{\boldsymbol{\beta}_{\boldsymbol{i}}\}_{i=1}^{P},\boldsymbol{\gamma},C,\sigma_{1}^{2},\sigma_{2}^{2},\boldsymbol{\zeta},B \mid \{W_{ij}\}_{i,j}) \propto \prod_{i=1}^{P} \prod_{j=1}^{Q_{i}} f(\mathbf{Y}_{ij} \mid \boldsymbol{\beta}_{\boldsymbol{i}},\sigma_{1}^{2}) \times \prod_{i=1}^{P} \prod_{j=1}^{Q_{i}} f(\mathbf{Z}_{ij} \mid \boldsymbol{\beta}_{\boldsymbol{i}},\boldsymbol{\gamma},C,\sigma_{2}^{2}) \times \\ \times \prod_{i=1}^{P} \pi(\boldsymbol{\beta}_{\boldsymbol{i}} \mid \boldsymbol{\zeta},B) \times \pi(\boldsymbol{\gamma}) \times \pi(C) \times \pi(\sigma_{1}^{2}) \times \pi(\sigma_{2}^{2}) \times \\ \times \pi(\boldsymbol{\zeta} \mid B) \times \pi(B).$$

Assim, temos as posteriores condicionais. A seguir "…" representa os demais parâmetros e $\{W_{ij}\}_{i,j}$ todos os dados observados (dos dois aparelhos). As relações das posteriores condicionais são de extrema importância para as demais construções desse capítulo, suas demonstrações estão no Anexo B.

•
$$\boldsymbol{\beta}_{i} \mid ..., \{W_{ij}\}_{i,j}, i = 1, \cdots, P$$
:

$$\begin{cases} \boldsymbol{\beta}_{i} \mid ..., \{W_{ij}\}_{i,j} \sim N_{M+1}(\boldsymbol{\mu}_{i}, \Delta_{i}) \\ \Delta_{i} = \left\{ \sum_{j=1}^{Q_{i}} \Phi_{ij}^{T} \left[\frac{1}{\sigma_{1}^{2}} \left(K_{1ij}\right)^{-1} + \frac{C^{2}}{\sigma_{2}^{2}} \left(K_{2ij}\right)^{-1} \right] \Phi_{ij} + B^{-1} \right\}^{-1} \\ \boldsymbol{\mu}_{i} = \Delta_{i} \left[\frac{1}{\sigma_{1}^{2}} \sum_{j=1}^{Q_{i}} \Phi_{ij}^{T} \left(K_{1ij}\right)^{-1} \mathbf{Y}_{ij} + \frac{C}{\sigma_{2}^{2}} \sum_{j=1}^{Q_{i}} \Phi_{ij}^{T} \left(K_{2ij}\right)^{-1} \left(\mathbf{Z}_{ij} - \Phi_{ij}\boldsymbol{\gamma}\right) + B^{-1}\boldsymbol{\zeta} \right] \end{cases}$$
(3.16)

• $\boldsymbol{\gamma} | ..., \{W_{ij}\}_{i,j}$:

$$\begin{cases} \boldsymbol{\gamma} \mid ..., \{W_{ij}\}_{i,j} \sim N_{M+1}(\boldsymbol{\mu}, \Delta) \\ \Delta = \left[H^{-1} + \frac{1}{\sigma_2^2} \sum_{i=1}^{P} \sum_{j=1}^{Q_i} \Phi_{ij}^T (K_{2ij})^{-1} \Phi_{ij} \right]^{-1} \\ \boldsymbol{\mu} = \Delta \left[H^{-1} \boldsymbol{\xi} + \frac{1}{\sigma_2^2} \sum_{i}^{P} \sum_{j=1}^{Q_i} \Phi_{ij}^T (K_{2ij})^{-1} (\mathbf{Z}_{ij} - C \Phi_{ij} \boldsymbol{\beta}_i) \right] \end{cases}$$
(3.17)

• $C \mid ..., \{W_{ij}\}_{i,j}$:

$$\begin{cases} C \mid ..., \{W_{ij}\}_{i,j} \sim N_{[0,\infty)}(\boldsymbol{\omega}^{*}, \boldsymbol{\rho}^{*2}) \\ \rho^{*2} = \left[\frac{1}{\rho^{2}} + \frac{1}{\sigma_{2}^{2}} \sum_{i=1}^{P} \sum_{j=1}^{Q_{i}} \boldsymbol{\beta}_{i}^{T} \Phi_{ij}^{T} (K_{2ij})^{-1} \Phi_{ij} \boldsymbol{\beta}_{i}\right]^{-1} \\ \omega^{*} = \rho^{*2} \left[\frac{\omega}{\rho^{2}} + \frac{1}{\sigma_{2}^{2}} \sum_{i=1}^{P} \sum_{j=1}^{Q_{i}} \boldsymbol{\beta}_{i}^{T} \Phi_{ij}^{T} (K_{2ij})^{-1} (\mathbf{Z}_{ij} - \Phi_{ij} \boldsymbol{\gamma})\right] \end{cases}$$
(3.18)

• $\sigma_1^2 \mid ..., \{W_{ij}\}_{i,j}$:

$$\begin{cases} \sigma_{1}^{2} \mid ..., \{W_{ij}\}_{i,j} \sim gamma - inv(a_{1}^{*}, b_{1}^{*}) \\ a_{1}^{*} = a_{1} + \sum_{i=1}^{P} \sum_{j=1}^{Q_{i}} \frac{n_{ij}}{2} \\ b_{1}^{*} = b_{1} + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{P} \sum_{j=1}^{Q_{i}} (\mathbf{Y}_{ij} - \Phi_{ij}\boldsymbol{\beta}_{i})^{T} (K_{1ij})^{-1} (\mathbf{Y}_{ij} - \Phi_{ij}\boldsymbol{\beta}_{i}) \end{cases}$$
(3.19)

• $\sigma_2^2 \mid ..., \{W_{ij}\}_{i,j}$:

$$\begin{cases} \sigma_{2}^{2} \mid ..., \{W_{ij}\}_{i,j} \sim gamma - inv(a_{2}^{*}, b_{2}^{*}) \\ a_{2}^{*} = a_{2} + \sum_{i=1}^{P} \sum_{j=1}^{Q_{i}} \frac{n_{ij}}{2} \\ b_{2}^{*} = b_{2} + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{P} \sum_{j=1}^{Q_{i}} \left[\mathbf{Z}_{ij} - \Phi_{ij}(C\boldsymbol{\beta}_{i} + \boldsymbol{\gamma}) \right]^{T} \left(K_{2ij} \right)^{-1} \left[\mathbf{Z}_{ij} - \Phi_{ij}(C\boldsymbol{\beta}_{i} + \boldsymbol{\gamma}) \right] \end{cases}$$
(3.20)

• $\boldsymbol{\zeta} \mid ..., \{W_{ij}\}_{i,j}$:

$$\begin{cases} \boldsymbol{\zeta} \mid ..., \{W_{ij}\}_{i,j} \sim N_{M+1} \left(\boldsymbol{\mu}, \Delta \right) \\ \boldsymbol{\mu} = \frac{d\boldsymbol{\eta} + \sum_{i=1}^{P} \boldsymbol{\beta}_{i}}{d+P} \\ \Delta = \frac{1}{d+P} B \end{cases}$$
(3.21)

• $B \mid ..., \{W_{i\,i}\}_{i,\,i}$:

$$\begin{cases} B \mid ..., \{W_{ij}\}_{i,j} \sim WI_p(\tau^*, A^*) \\ \tau^* = \tau + P + 1 \\ A^* = A + d(\boldsymbol{\zeta} - \boldsymbol{\eta})(\boldsymbol{\zeta} - \boldsymbol{\eta})^T + \sum_{i=1}^{P} (\boldsymbol{\beta}_i - \boldsymbol{\zeta})(\boldsymbol{\beta}_i - \boldsymbol{\zeta})^T \end{cases}$$
(3.22)

Logo, o algoritmo Gibbs Sampler para simular $\boldsymbol{\theta} = (\boldsymbol{\beta}_i)_{i=1}^{P}, \boldsymbol{\gamma}, C, \sigma_1^2, \sigma_2^2, \boldsymbol{\zeta}, B)$ dado $\{W_{ij}\}_{i,j}$) é descrito pelo pseudocódigo abaixo:

Algoritmo 1 – Simulação da posteriori $\pi(\{\boldsymbol{\beta}_i\}_{i=1}^P, \boldsymbol{\gamma}, C, \sigma_1^2, \sigma_2^2, \boldsymbol{\zeta}, B \mid \{\{W_{ij}\}_{i=1}^P\}_{i=1}^{Q_i}\}$

1: Defina um valor inicial para $(\{\boldsymbol{\beta}_{i}\}_{i=1}^{P}, \boldsymbol{\gamma}, C, \sigma_{1}^{2}, \sigma_{2}^{2}, \boldsymbol{\zeta}, B)$ e denote por $(\{\boldsymbol{\beta}_{i}\}_{i=1}^{P}, \boldsymbol{\gamma}, C, \sigma_{1}^{2}, \sigma_{2}^{2}, \boldsymbol{\zeta}, B)$ e denote por utilizados para definir esse valor inicial 2: para n de 1 a N faça 3: Simule $\boldsymbol{\beta}_{i}^{(n)}$ com a expressão (3.16), para cada $i \in \{1, \dots, P\}$, condicionada a $(\{\boldsymbol{\beta}_{i}^{(n-1)}\}, \dots, \boldsymbol{\gamma}_{i}^{(n-1)}\}, \boldsymbol{\gamma}_{i}^{(n-1)}, \boldsymbol{\sigma}_{i}^{2(n-1)}, \boldsymbol{\sigma}_{i}^$

$$(\{\boldsymbol{\beta}_{i}^{(n)}\}_{i\neq i}^{p}, \boldsymbol{\gamma}^{(n-1)}, \boldsymbol{\sigma}_{1}^{2}, \cdots, \boldsymbol{\sigma}_{2}^{2}, \cdots, \boldsymbol{\zeta}^{(n-1)}, \boldsymbol{\beta}^{(n-1)});$$
4: Simule $\boldsymbol{\gamma}^{(n)}$ com a expressão (3.17), condicionada a $(\{\boldsymbol{\beta}_{i}^{(n)}\}_{i=1}^{p}, C^{(n-1)}, \boldsymbol{\sigma}_{1}^{2^{(n-1)}}, \boldsymbol{\sigma}_{2}^{2^{(n-1)}}, \boldsymbol{\zeta}^{(n-1)}, \boldsymbol{\beta}^{(n-1)});$

5: Simule
$$C^{(n)}$$
 com a expressão (3.18), condicionada a $(\{\boldsymbol{\beta}_{i}^{(n)}\}_{i=1}^{P}, \boldsymbol{\gamma}^{(n)}, \sigma_{1}^{2(n-1)}, \sigma_{2}^{2(n-1)}, \boldsymbol{\zeta}^{(n-1)}, B^{(n-1)});$

- (3.19), condicionada а
- 6: Simule $\sigma_1^{2(n)}$ com a expressão $(\{\boldsymbol{\beta}_{i}^{(n)}\}_{i=1}^{P}, \boldsymbol{\gamma}^{(n)}, C^{(n)}, \sigma_2^{2(n-1)}, \boldsymbol{\zeta}^{(n-1)}, B^{(n-1)});$ 7: Simule $\sigma_2^{2(n)}$ com a expressão $(\{\boldsymbol{\beta}_{i}^{(n)}\}_{i=1}^{P}, \boldsymbol{\gamma}^{(n)}, C^{(n)}, \sigma_1^{2(n)}, \boldsymbol{\zeta}^{(n-1)}, B^{(n-1)});$ condicionada (3.20), а

8: Simule
$$\boldsymbol{\zeta}^{(n)}$$
 com a expressão (3.21), condicionada a $(\{\boldsymbol{\beta}_{i}^{(n)}\}_{i=1}^{P}, \boldsymbol{\gamma}^{(n)}, C_{1}^{(n)}, \sigma_{2}^{2(n)}, B^{(n-1)});$

9: Simule
$$B^{(n)}$$
 com a expressão (3.22), condicionada a $(\{\boldsymbol{\beta}_{i}^{(n)}\}_{i=1}^{P}, \boldsymbol{\gamma}^{(n)}, C^{(n)}, \sigma_{1}^{2(n)}, \sigma_{2}^{2(n)}, \boldsymbol{\zeta}^{(n)});$
10: fim para

O algoritmo Gibbs Sampler já tem uma estrutura conhecida e é um algoritmo fácil de ser implementado uma vez que conhecemos as posteriores condicionais.

Para otimizar o processo de inversão de matrizes, utilizamos a decomposição de Cholesky.

3.2.2 Predição das curvas de um novo indivíduo

Aqui o objetivo é determinar a distribuição preditiva de um par de curvas associados ao um novo indivíduo, (y_{P+1}, z_{P+1}) . Temos que

$$f((y_{P+1}(.), z_{P+1}(.)) | \{\{(y_{ij}(.), z_{ij}(.)\}_{j=1}^{Q_i}\}_{i=1}^{P}\} = f((y_{P+1}(.), z_{P+1}(.)) | \{w_{ij}(.)\}_{i,j}) = = \int f(y_{P+1}(.), z_{P+1}(.), \{\boldsymbol{\beta}_i\}_{i=1}^{P+1}, \boldsymbol{\gamma}, C, \sigma_1^2, \sigma_2^2, \boldsymbol{\zeta}, B | \{w_{ij}(.)\}_{i,j}\} \{d\boldsymbol{\beta}_i\}_{i=1}^{P+1} d\boldsymbol{\gamma} dC d\sigma_1^2 d\sigma_2^2 d\boldsymbol{\zeta} dB = = \int f(y_{P+1}(.), z_{P+1}(.) | \{\boldsymbol{\beta}_i\}_{i=1}^{P+1}, \boldsymbol{\gamma}, C, \sigma_1^2, \sigma_2^2, \boldsymbol{\zeta}, B, \{w_{ij}(.)\}_{i,j}\} \times \times \pi(\{\boldsymbol{\beta}_i\}_{i=1}^{P+1}, \boldsymbol{\gamma}, C, \sigma_1^2, \sigma_2^2, \boldsymbol{\zeta}, B | \{w_{ij}(.)\}_{i,j}\} \{d\boldsymbol{\beta}_i\}_{i=1}^{P+1} d\boldsymbol{\gamma} dC d\sigma_1^2 d\sigma_2^2 d\boldsymbol{\zeta} dB = = \int f(y_{P+1}(.), z_{P+1}(.) | \boldsymbol{\beta}_{P+1}, \boldsymbol{\gamma}, C, \sigma_1^2, \sigma_2^2) \times \times \pi(\boldsymbol{\beta}_{P+1} | \{\boldsymbol{\beta}_i\}_{i=1}^{P}, \boldsymbol{\gamma}, C, \sigma_1^2, \sigma_2^2, \boldsymbol{\zeta}, B, \{w_{ij}(.)\}_{i,j}\} \langle d\boldsymbol{\beta}_i\}_{i=1}^{P+1} d\boldsymbol{\gamma} dC d\sigma_1^2 d\sigma_2^2 d\boldsymbol{\zeta} dB = = \int f(y_{P+1}(.) | \boldsymbol{\beta}_{P+1}, \sigma_1^2) \times f(z_{P+1}(.) | \boldsymbol{\beta}_{P+1}, \boldsymbol{\gamma}, C, \sigma_2^2) \times \times \pi(\boldsymbol{\beta}_{P+1} | \boldsymbol{\zeta}, B) \times \pi(\{\boldsymbol{\beta}_i\}_{i=1}^{P}, \boldsymbol{\gamma}, C, \sigma_1^2, \sigma_2^2, \boldsymbol{\zeta}, B | \{w_{ij}(.)\}_{i,j}\} \langle d\boldsymbol{\beta}_i\}_{i=1}^{P+1} d\boldsymbol{\gamma} dC d\sigma_1^2 d\sigma_2^2 d\boldsymbol{\zeta} dB = = \int f(y_{P+1}(.) | \boldsymbol{\beta}_{P+1}, \sigma_1^2) \times f(z_{P+1}(.) | \boldsymbol{\beta}_{P+1}, \boldsymbol{\gamma}, C, \sigma_2^2) \times \times \pi(\boldsymbol{\beta}_{P+1} | \boldsymbol{\zeta}, B) \times \pi(\{\boldsymbol{\beta}_i\}_{i=1}^{P}, \boldsymbol{\gamma}, C, \sigma_1^2, \sigma_2^2, \boldsymbol{\zeta}, B | \{w_{ij}(.)\}_{i,j}\} \langle d\boldsymbol{\beta}_i\}_{i=1}^{P+1} d\boldsymbol{\gamma} dC d\sigma_1^2 d\sigma_2^2 d\boldsymbol{\zeta} dB = (3.23)$$

Das suposições do modelo, segue que

$$\boldsymbol{\beta}_{P+1} \mid \boldsymbol{\zeta}, B \sim N_{M+1}(\boldsymbol{\zeta}, B) \tag{3.24}$$

e

$$\begin{cases} y_{P+1}(.) \mid \boldsymbol{\beta}_{P+1}, \sigma_1^2 \sim PG\left(\sum_{m=0}^M \beta_{P+1,m} \phi_m(.), \sigma_1^2 \kappa_1(.,.)\right) \\ z_{P+1}(.) \mid \boldsymbol{\beta}_{P+1}, \boldsymbol{\gamma}, C, \sigma_2^2 \sim PG\left(\sum_{m=0}^M (C\beta_{P+1,m} + \gamma_m) \phi_m(.), \sigma_2^2 \kappa_2(.,.)\right). \end{cases}$$
(3.25)

Sabemos simular a distribuição a posterior dos parâmetros através de Gibbs Sampler (Subseção 3.2.1). Assim, fixado uma grade de pontos do domínio [0,1], $\mathscr{T}_{P+1} = \{t_{P+1,1} < \cdots < t_{P+1,n_{P+1}}\}$, podemos simular a distribuição de $f((\mathbf{Y}_{P+1}, \mathbf{Z}_{P+1}) | \{\{(\mathbf{Y}_{ij}, \mathbf{Z}_{ij}\}_{j=1}^{Q_i}\}_{i=1}^{P})$ através do algoritmo 2, em que

$$\begin{cases} \boldsymbol{\theta} = (\{\boldsymbol{\beta}_{i}\}_{i=1}^{P}, \boldsymbol{\gamma}, C, \sigma_{1}^{2}, \sigma_{2}^{2}, \boldsymbol{\zeta}, B) \\ \mathbf{Y}_{\mathbf{P+1}} = [y_{P+1}(t_{P+1,1}) \cdots y_{P+1}(t_{P+1,n_{P+1}})]^{T} \\ \mathbf{Z}_{\mathbf{P+1}} = [z_{P+1}(t_{P+1,1}) \cdots z_{P+1}(t_{P+1,n_{P+1}})]^{T} \end{cases}$$

Algoritmo 2 – Simulação da preditiva $f((\mathbf{Y}_{\mathbf{P+1}}, \mathbf{Z}_{\mathbf{P+1}}) | \{\{W_{ij}\}_{i=1}^{P}\}_{j=1}^{Q_i}\}$

- 1: para n de 1 a N faça
- Simule $\boldsymbol{\theta}^{(n)}$ de $\pi(\{\boldsymbol{\beta}_i\}_{i=1}^{P}, \boldsymbol{\gamma}, C, \sigma_1^2, \sigma_2^2, \boldsymbol{\zeta}, B \mid \{W_{ij}\}_{i,j})$ através do algoritmo 1; Simule $\boldsymbol{\beta}_{P+1}^{(n)}$ de $\boldsymbol{\beta}_{P+1} \mid \boldsymbol{\zeta}^{(n)}, B^{(n)}$ com (3.24); Simule $\mathbf{Y}_{\mathbf{P+1}}^{(\mathbf{n})}$ de $\mathbf{Y}_{\mathbf{P+1}} \mid \boldsymbol{\beta}_{P+1}^{(n)}, \sigma_1^{2(n)}$ utilizando (3.25); Simule $\mathbf{Z}_{\mathbf{P+1}}^{(\mathbf{n})}$ de $\mathbf{Z}_{\mathbf{P+1}}(.) \mid \boldsymbol{\beta}_{P+1}^{(n)}, \boldsymbol{\gamma}^{(n)}, C^{(n)}, \sigma_2^{2(n)}$ utilizando (3.25); 2:
- 3:
- 4:
- 5:





Figura 8 - Predição das curvas de um novo indivíduo



3.2.3 **PPFA**

Sob as suposições do BFGP, podemos pensar de forma informal que a concordância entre os equipamentos *SM*1 e *SM*2 ocorre quando C = 1, $v(.) = 0_f(.)$ e $\sigma_1^2 \approx \sigma_2^2$. A construção formal da concordância pode ser realizada através da curva $PPFA(t;\Delta)$, em que $\Delta(.)$ é a Função da Diferença Clinicamente Aceitável (FCAD). A simulação da curva $PPFA(t;\Delta)$ permite que analisemos a concordância entre os equipamentos de medição SM1 e SM2. Para tanto, da definição de $PPFA(t;\Delta)$, denotando por $d(.) = (y_{P+1}(.) - z_{p+1}(.))$, precisamos simular a distribuição $d(.) | \{\{W_{ij}\}_{i=1}^{P}\}_{j=1}^{Q_i}$, em que P+1 representa um novo indivíduo e $W_{ij} = [\mathbf{Y}_{ij}, \mathbf{Z}_{ij}]$ são os dados

observados, $i = 1, \dots, P, j = 1, \dots, Q_i$. Temos que

$$f(d(.) | \{\{(y_{ij}(.), z_{ij}(.)\}_{j=1}^{Q_{i}}\}_{i=1}^{P}\} = f(d(.) | \{w_{ij}(.)\}_{i,j}) =$$

$$= \int f(d(.) \{\beta_{i}\}_{i=1}^{P+1}, \gamma, C, \sigma_{1}^{2}, \sigma_{2}^{2}, \zeta, B | \{w_{ij}(.)\}_{i,j}) \{d\beta_{i}\}_{i=1}^{P+1} d\gamma dC d\sigma_{1}^{2} d\sigma_{2}^{2} d\zeta dB =$$

$$= \int f(d(.) | \{\beta_{i}\}_{i=1}^{P+1}, \gamma, C, \sigma_{1}^{2}, \sigma_{2}^{2}, \zeta, B, \{w_{ij}(.)\}_{i,j}) \times$$

$$\times \pi(\{\beta_{i}\}_{i=1}^{P+1}, \gamma, C, \sigma_{1}^{2}, \sigma_{2}^{2}, \zeta, B | \{w_{ij}(.)\}_{i,j}) \{d\beta_{i}\}_{i=1}^{P+1} d\gamma dC d\sigma_{1}^{2} d\sigma_{2}^{2} d\zeta dB =$$

$$= \int f(d(.) | \beta_{P+1}, \gamma, C, \sigma_{1}^{2}, \sigma_{2}^{2}) \times$$

$$\times \pi(\{\beta_{i}\}_{i=1}^{P}, \gamma, C, \sigma_{1}^{2}, \sigma_{2}^{2}, \zeta, B, \{w_{ij}(.)\}_{i,j}) \times$$

$$\times \pi(\{\beta_{i}\}_{i=1}^{P}, \gamma, C, \sigma_{1}^{2}, \sigma_{2}^{2}, \zeta, B | \{w_{ij}(.)\}_{i,j}) \{d\beta_{i}\}_{i=1}^{P+1} d\gamma dC d\sigma_{1}^{2} d\sigma_{2}^{2} d\zeta dB =$$

$$= \int f(d(.) | \beta_{P+1}, \gamma, C, \sigma_{1}^{2}, \sigma_{2}^{2}) \times$$

$$\times \pi(\{\beta_{P+1} | \{\beta_{i}\}_{i=1}^{P}, \gamma, C, \sigma_{1}^{2}, \sigma_{2}^{2}) \times$$

$$\times \pi(\{\beta_{P+1} | \{\beta_{i}\}_{i=1}^{P}, \gamma, C, \sigma_{1}^{2}, \sigma_{2}^{2}) \times$$

$$\times \pi(\{\beta_{P+1} | \{\beta_{i}\}_{i=1}^{P}, \gamma, C, \sigma_{1}^{2}, \sigma_{2}^{2}) \times$$

$$\times \pi(\{\beta_{P+1} | \{\beta_{i}\}_{i=1}^{P}, \gamma, C, \sigma_{1}^{2}, \sigma_{2}^{2}) \times$$

$$\times \pi(\{\beta_{P+1} | \{\beta_{i}\}_{i=1}^{P}, \gamma, C, \sigma_{1}^{2}, \sigma_{2}^{2}) \times$$

$$\times \pi(\{\beta_{P+1} | \{\beta_{i}\}_{i=1}^{P}, \gamma, C, \sigma_{1}^{2}, \sigma_{2}^{2}) \times$$

$$\times \pi(\{\beta_{P+1} | \{\beta_{i}\}_{i=1}^{P}, \gamma, C, \sigma_{1}^{2}, \sigma_{2}^{2}) \times$$

$$\times \pi(\{\beta_{P+1} | \{\beta_{i}\}_{i=1}^{P}, \gamma, C, \sigma_{1}^{2}, \sigma_{2}^{2}) \times$$

$$\times \pi(\{\beta_{P+1} | \{\beta_{i}\}_{i=1}^{P}, \gamma, C, \sigma_{1}^{2}, \sigma_{2}^{2}) \times$$

$$\times \pi(\{\beta_{P+1} | \{\beta_{i}\}_{i=1}^{P}, \gamma, C, \sigma_{1}^{2}, \sigma_{2}^{2}) \times$$

$$\times \pi(\{\beta_{P+1} | \{\beta_{i}\}_{i=1}^{P}, \gamma, C, \sigma_{1}^{2}, \sigma_{2}^{2}) \times$$

$$\times \pi(\{\beta_{P+1} | \{\beta_{i}\}_{i=1}^{P}, \gamma, C, \sigma_{1}^{2}, \sigma_{2}^{2}) \times$$

$$\times \pi(\{\beta_{P+1} | \{\beta_{i}\}_{i=1}^{P}, \gamma, C, \sigma_{1}^{2}, \sigma_{2}^{2}) \times$$

$$\times \pi(\{\beta_{P+1} | \{\beta_{i}\}_{i=1}^{P}, \gamma, C, \sigma_{1}^{2}, \sigma_{2}^{2}) \times$$

$$\times \pi(\{\beta_{P+1} | \{\beta_{P+1}\}_{i=1}^{P}, \gamma, C, \sigma_{1}^{2}, \sigma_{2}^{2}, \zeta, B | \{w_{ij}(.)\}_{i,j}\} \} d\beta_{i}\}_{i=1}^{P+1} d\gamma dC d\sigma_{1}^{2} d\sigma_{2}^{2} d\zeta dB =$$

$$= \int f(d(.) | \beta_{P+1} | \{\beta_{P}\}_{i=1}^{P}, \gamma, C, \sigma_{1}^{2}, \sigma_{2}^{2}, \zeta, B | \{w_{ij}(.)\}_{i,j}\} \} d\beta_{i}\}_{i=1}^{P+1} d\gamma dC d\sigma_{1}^{2} d\sigma_{2}^{2} d\zeta dB =$$

$$=$$

Das suposições do modelo, novamente temos que

$$\boldsymbol{\beta}_{P+1} \mid \boldsymbol{\zeta}, B \sim N_{M+1}\left(\boldsymbol{\zeta}, B\right).$$

Além disso das suposições de independências do modelo segue que

$$d(.) \mid \boldsymbol{\beta}_{P+1}, \boldsymbol{\gamma}, C, \sigma_1^2, \sigma_2^2 \sim PG\left(\sum_{m=0}^{M} [(1-C) \times \boldsymbol{\beta}_{P+1,m} - \boldsymbol{\gamma}_m] \phi_m(.), \sigma_1^2 \kappa_1(.,.) + \sigma_2^2 \kappa_2(.,.)\right)$$
(3.27)

Apesar do $PPFA(t;\Delta)$ ser uma função, as limitações computacionais apenas nos permitem avaliar o $PPFA(t;\Delta)$ em grades de pontos, assim fixado o subconjunto de [0,1], $\mathscr{T}_{P+1} = \{t_{P+1,1} < \cdots < t_{P+1,n_{P+1}}\}$, de modo que

$$\begin{cases} \mathbf{Y}_{\mathbf{P+1}} = [y_{P+1}(t_{P+1,1})\cdots y_{P+1}(t_{P+1,n_{P+1}})]^T \\ \mathbf{Z}_{\mathbf{P+1}} = [z_{P+1}(t_{P+1,1})\cdots z_{P+1}(t_{P+1,n_{P+1}})]^T \\ \mathbf{D} = [D_1\cdots D_{n_{P+1}}]^T = \mathbf{Y}_{\mathbf{P+1}} - \mathbf{Z}_{\mathbf{P+1}} \end{cases}$$

podemos utilizar os Algoritmo 3 e construir a função $PPFA(t;\Delta)$.

Algoritmo 3 – Curva $PPFA(t; \Delta)$

- 1: Defina $\mathbf{S} = [S_1 \cdots S_{n_{P+1}}]^T$ e $S_k = 0, \forall k \in \{1, \cdots, n_{P+1}\};$
- 2: **para** *n* de 1 a *N* **faca**
- Simule $\boldsymbol{\theta}^{(n)}$ de $\pi(\{\boldsymbol{\beta}_i\}_{i=1}^P, \boldsymbol{\gamma}, C, \sigma_1^2, \sigma_2^2, \boldsymbol{\zeta}, B \mid \{W_{ij}\}_{i,j})$ através do algoritmo 1; 3:
- 4:
- Simule $\boldsymbol{\beta}_{P+1}^{(n)}$ de $\boldsymbol{\beta}_{P+1} | \boldsymbol{\zeta}^{(n)}, B^{(n)} \operatorname{com} (3.24);$ Simule $\mathbf{D}^{(n)}$ de $d(.) | \boldsymbol{\beta}_{P+1}^{(n)}, \boldsymbol{\gamma}^{(n)}, C^{(n)}, \sigma_1^{2(n)}, \sigma_2^{2(n)}$ utilizando (3.27); para $k \in \{1, \dots, n_{P+1}\}$ faça 5:
- 6:
- Se $|D_k^{(n)}| \leq \Delta(t_0)$, então $S_k = S_k + 1$; caso contrário S_k ; 7:
- fim para 8:
- 9: fim para
- 10: Defina $PPFA(t_k, \Delta) = S_k/N$

Da definição de intercambialidade apresentada no capítulo anterior temos que, se previamente definirmos a função $\theta : [0,1] \rightarrow [0,1]$,

$$\begin{cases} PPFA(t,\Delta) \ge \theta(t) \Rightarrow \text{ sistemas são intercambiáveis em t} \\ PPFA(t,\Delta) < \theta(t) \Rightarrow \text{ sistemas não são intercambiáveis em t} \end{cases}$$
(3.28)

Como mencionado no Capítulo 2, a vantagem do PPFA em relação aos seus concorrentes como o Functional Limits of Agreement é sua capacidade de resumir a informação de concordância em uma informação simples (a probabilidade de ocorrência de um evento). Além disso, a replicação das medições e suposição de um modelo, permitem a comparação entre as acurácias e as precisões dos sistemas de medição explicitamente, característica herdada da ferramenta Probability of Agreement.

3.2.4 Calibração

Outro aspecto importante da definição de um modelo é a possibilidade de calibração. Nos referimos a calibração como a capacidade de predizer a região onde as medições realizadas pelo equipamento de referência (SM1) para um novo indivíduo estarão, dado que observamos as curvas construídas pelo sistema concorrente (SM2) para o mesmo sujeito e o conjunto treino. A calibração é um tópico interessante quando concluímos que os sistemas de medição não são intercambiáveis, pois com a calibração o especialista ainda pode utilizar o sistema SM2, contudo ao invés de considerar seus dados para sua conclusão, ele pode utilizá-los para prever em qual região o sistema SM1 posicionaria suas medições e, então, produzir suas conclusões.

Para construir a calibração precisamos definir

$$f\left(y_{P+1}(.) \mid \{Z_{P+1,j}\}_{j=1}^{Q_{P+1}}, \{\{W_{ij}\}_{i=1}^{P}\}_{j=1}^{Q_{i}}\right)$$
(3.29)

Temos que, se $\boldsymbol{\theta} = (\{\boldsymbol{\beta}_i\}_{i=1}^{p}, \boldsymbol{\gamma}, C, \sigma_1^2, \sigma_2^2, \boldsymbol{\zeta}, B),$

$$f((y_{P+1}(.)) | \{Z_{P+1,j}\}_{j=1}^{Q_{P+1}}, \{\{W_{ij}\}_{i=1}^{P}\}_{j=1}^{Q_{i}}\}) =$$

$$= \int f(y_{P+1}(.), \boldsymbol{\beta}_{P+1}, \boldsymbol{\theta} | \{Z_{P+1,j}\}_{j=1}^{Q_{P+1}}, \{\{W_{ij}\}_{i=1}^{P}\}_{j=1}^{Q_{i}}\} d\boldsymbol{\beta}_{P+1} d\boldsymbol{\theta} =$$

$$= \int f(y_{P+1}(.) | \boldsymbol{\beta}_{P+1}, \boldsymbol{\theta}, \{Z_{P+1,j}\}_{j=1}^{Q_{P+1}}, \{\{W_{ij}\}_{i=1}^{P}\}_{j=1}^{Q_{i}}\} d\boldsymbol{\beta}_{P+1} d\boldsymbol{\theta}$$

$$= \int f(y_{P+1}(.) | \boldsymbol{\beta}_{P+1}, \sigma_{1}^{2}) \times \pi(\boldsymbol{\beta}_{P+1} | \boldsymbol{\theta}, \{Z_{P+1,j}\}_{j=1}^{Q_{P+1}}, \{\{W_{ij}\}_{i=1}^{P}\}_{j=1}^{Q_{i}}\}) d\boldsymbol{\beta}_{P+1} d\boldsymbol{\theta}$$

$$= \int f(y_{P+1}(.) | \boldsymbol{\beta}_{P+1}, \sigma_{1}^{2}) \times \pi(\boldsymbol{\beta}_{P+1} | \boldsymbol{\theta}, \{Z_{P+1,j}\}_{j=1}^{Q_{P+1}}, \{\{W_{ij}\}_{i=1}^{P}\}_{j=1}^{Q_{i}}\}) \times$$

$$\times \pi(\boldsymbol{\theta} | \{Z_{P+1,j}\}_{j=1}^{Q_{P+1}}, \{W_{ij}\}_{i=1}^{P}\}_{j=1}^{Q_{i}}\} d\boldsymbol{\beta}_{P+1} d\boldsymbol{\theta} =$$

$$= \int f(y_{P+1}(.) | \boldsymbol{\beta}_{P+1}, \sigma_{1}^{2}) \times \pi(\boldsymbol{\beta}_{P+1} | \boldsymbol{\theta}, \{Z_{P+1,j}\}_{j=1}^{Q_{P+1}}, \{\{W_{ij}\}_{i=1}^{P}\}_{j=1}^{Q_{i}}\}) \times$$

$$\times \pi(\boldsymbol{\theta} | \{\{W_{ij}\}_{i=1}^{P}\}_{j=1}^{Q_{i}}\} d\boldsymbol{\beta}_{P+1} d\boldsymbol{\theta}$$
(3.30)

em que

$$\begin{aligned} & \boldsymbol{\beta}_{P+1} \mid \boldsymbol{\theta}, \{Z_{P+1,j}\}_{j=1}^{Q_{P+1}}, \{\{W_{ij}\}_{i=1}^{P}\}_{j=1}^{Q_{i}} \propto \\ & \propto f(\{Z_{P+1,j}\}_{j=1}^{Q_{P+1}} \mid \boldsymbol{\beta}_{P+1}, \boldsymbol{\theta}, \{\{W_{ij}\}_{i=1}^{P}\}_{j=1}^{Q_{i}}) \times \pi(\boldsymbol{\beta}_{P+1} \mid \boldsymbol{\theta}, \{\{W_{ij}\}_{i=1}^{P}\}_{j=1}^{Q_{i}}) \propto \\ & \propto f(\{Z_{P+1,j}\}_{j=1}^{Q_{P+1}} \mid \boldsymbol{\beta}_{P+1}, \boldsymbol{\gamma}, C, \sigma_{2}^{2}) \times \pi(\boldsymbol{\beta}_{P+1} \mid \boldsymbol{\zeta}, B) \\ & \propto \prod_{j=1}^{Q_{P+1}} \exp\left\{-\frac{1}{2}\left[\mathbf{Z}_{\mathbf{P}+1,\mathbf{j}} - \Phi_{P+1,j}(C \times \boldsymbol{\beta}_{P+1} + \boldsymbol{\gamma})\right]^{T} (\sigma_{2}^{2}K_{2,P+1,j})^{-1} \\ & \left[\mathbf{Z}_{\mathbf{P}+1,\mathbf{j}} - \Phi_{P+1,j}(C \times \boldsymbol{\beta}_{P+1} + \boldsymbol{\gamma})\right]\right\} \times \exp\left\{-\frac{1}{2} \left(\boldsymbol{\beta}_{P+1} - \boldsymbol{\zeta}\right)^{T} B^{-1} \left(\boldsymbol{\beta}_{P+1} - \boldsymbol{\zeta}\right)\right\} \propto \\ & \propto \exp\left\{-\frac{1}{2}\left[\boldsymbol{\beta}_{P+1}^{T} \left(B^{-1} + \frac{C^{2}}{\sigma_{2}^{2}} \sum_{j=1}^{Q_{P+1}} \Phi_{P+1,j}^{T} \Phi_{P+1,j}\right)\boldsymbol{\beta}_{P+1} - \\ & 2\boldsymbol{\beta}_{P+1}^{T} \left(B^{-1}\boldsymbol{\zeta} + \frac{C}{\sigma_{2}^{2}} \sum_{j}^{Q_{P+1}} \left(\Phi_{P+1,j}^{T} \mathbf{Z}_{\mathbf{P}+1,\mathbf{j}} - \Phi_{P+1,j}^{T} \Phi_{P+1,j}\boldsymbol{\gamma}\right)\right)\right]\right\}, \end{aligned}$$

ou seja,

$$\begin{cases} \boldsymbol{\beta}_{P+1} \mid \boldsymbol{\theta}, \{Z_{P+1,j}\}_{j=1}^{Q_{P+1}}, \{\{W_{ij}\}_{i=1}^{P}\}_{j=1}^{Q_{i}}) \sim N_{M+1}(m, V)) \\ V = \left[B^{-1} + \frac{C^{2}}{\sigma_{2}^{2}} \sum_{j=1}^{Q_{P+1}} \Phi_{P+1,j}^{T} \Phi_{P+1,j}\right]^{-1} \\ m = V \left[B^{-1} \boldsymbol{\zeta} + \frac{C}{\sigma_{2}^{2}} \sum_{j=1}^{Q_{P+1}} \left(\Phi_{P+1,j}^{T} \mathbf{Z}_{\mathbf{P}+1,\mathbf{j}} - \Phi_{P+1,j}^{T} \Phi_{P+1} \boldsymbol{\gamma}\right)\right] \end{cases}$$
(3.31)

Assim, fixado uma grade { $t_1 < t_2 < \cdots < t_n$ }, definimos $\boldsymbol{Y}_{P+1} = [y_{P+1}(t_1) y_{P+1}(t_2) \cdots y_{P+1}(t_n)]^T$ e simulamos valores através do algoritmo:

Algoritmo 4 – Simulação da preditiva $f((\mathbf{Y}_{\mathbf{P+1}} | \{\mathbf{Z}_{\mathbf{P+1},j}\}_{j=1}^{Q_{P+1}}, \{\mathbf{W}_{ij}\}_{i=1}^{P})$

- 1: para n de 1 a N faça
- Simule $\boldsymbol{\theta}^{(n)} \det \{\boldsymbol{\beta}_i\}_{i=1}^{P}, \boldsymbol{\gamma}, C, \sigma_1^2, \sigma_2^2, \boldsymbol{\zeta}, B \mid \{W_{ij}\}_{i,j}\}$ através do algoritmo 1; Simule $\boldsymbol{\beta}_{P+1}^{(n)} \det \boldsymbol{\beta}_{P+1}^{(n)} \mid \boldsymbol{\theta}^{(n)}, \{Z_{P+1,j}\}_{j=1}^{Q_{P+1}}, \{W_{ij}\}_{i=1}^{P} \sum_{j=1}^{Q_i} \operatorname{com}(3.31);$ Simule $\mathbf{Y}_{P+1}^{(n)} \det \mathbf{Y}_{P+1} \mid \boldsymbol{\beta}_{P+1}^{(n)}, \sigma_1^{2(n)}$ utilizando a suposição do modelo. 2:
- 3:
- 4:
- 5: fim para

capítulo 4

AVALIAÇÃO DE CONCORDÂNCIA ENTRE OS EQUIPAMENTOS OPTOTRAK E ELETROGONIÔMETRO

Este capítulo é dedicado a aplicação da ferramenta de concordância PPFA (*Predictive Probability of Functional Agreement*) considerando o BFGP (Bayesian Functional Gaussian Process) como modelo para avaliar a concordância entre os equipamentos Optotrak (sistema de medição de referência, considerado acurado e preciso) e o eletrogoniômetro (um sistema de medição mais barato e acessível, contudo que precisamos definir se é uma alternativa ao Optotrak).

4.1 Suposições sobre os dados dos aparelhos Optotrak e Eletrogoniômetro

No ensaio realizado para a comparação entre os sistemas de medição Optotrak e eletrogoniômetro, temos 15 indivíduos saudáveis que andam sob uma esteira durante um período de tempo, de modo que cada um realiza uma certa quantidade de ciclos. Cada ciclo constrói 3 curvas (as variações dos ângulos flexo - extensão, varus - valgus e rotação interna - externo) mensuradas pelos dois equipamentos de forma emparelhada. Os indivíduos nunca tiveram problemas nos joelhos. Em nosso estudo apenas consideraremos as curvas associadas ao ângulo flexo - extensão e vamos definir que o passo é definido por ele, assim temos os conjuntos de curvas adjacentes y_{ij} e z_{ij} (ou mais especificamente, observações dessas curvas - a quantidade de observações varia por ciclo acima de 100 pontos). Os sistemas avaliam os passos para cada uma das pernas, que são divididas em dois grupos: dominante e não dominante. Para cada um dos grupos, supomos que o movimento realizado por cada um dos participantes é resultado de uma variação de uma curva padrão (seu passo padrão). Além disso, assumimos que todas as curvas padrão são variações do uma curva média do passo de um humano. Consideraremos que curvas das pernas dominantes e não dominantes são variações de curvas média diferentes do passo de uma humano. Para aplicação das ferramentas descritas anteriormente trabalharemos com as curvas da perna dominante.



Figura 9 - Medições da perna dominante de 15 indivíduos pelo Optotrak

Fonte: Elaborada pelo autor.



Figura 10 – Medições da perna dominante de 15 indivíduos pelo eletrogoniômetro Fonte: Elaborada pelo autor.

4.2 Aplicação do modelo BFGP ao problema da marcha

Considerando os dados obtidos através das curvas mensuradas pelos aparelhos Optotrak e eletrogoniômetro, que representam os ciclos das pernas dominantes de 15 indivíduos, assumiremos o modelo apresentado no Capítulo 3 para explicá-los.

Ao assumirmos o modelo BFGP, estamos considerando que os dados possuem a seguinte estrutura (Figura 6)

• observamos para o indivíduo *i* e ciclo *j*, $i = 1, \dots, 15$ e $j = 1, \dots, Q_i$, os pares de dados

funcionais $\{(y_{ijk}, z_{ijk}), k = 1, \dots, n_{ij}\}$ que são observações das curvas $y_{ij}(.)$ (medições do ângulo flexo - extensão pelo Optotrak) e $z_{ij}(.)$ (medições do mesmo objeto pelo eletrogoniômetro) nos instantes $\{t_{ij1} < \cdots < t_{ijn_{ij}}\} \subset [0, 1];$

para o indivíduo *i*, propomos que as curvas (y_{ij}(.), z_{ij}(.)), ∀j ∈ {1, · · · , Q_i}, são variações da curva u_i(.) (passo padrão do indivíduo) dadas por

$$\begin{cases} y_{ij}(.) = u_i(.) + e_{1ij}(.) \longrightarrow \text{ (sistema de referência)} \\ z_{ij}(.) = C \times u_i(.) + v(.) + e_{2ij}(.) \end{cases}$$
(4.1)

em que $C \in \mathbb{R}$ e $v : [0,1] \to \mathbb{R}$ são distorções que o eletrogoniômetro possui e e_{sij} : [0,1] $\to \mathbb{R}$, s = 1,2, são curvas de erro intrínsecas ao sistema 1 (o Optotrak) e 2 (o eletrogoniômetro);

as curvas u_i(.), i = 1,..., 15, são variações de uma curva g(.) que representa a curva média do passo do humano (nesse caso para a perna dominante).

Seguindo as construções apresentadas no Capítulo 3, assumimos que as curvas $u_i(.)$ e v(.) podem ser reescritas como a série de Fourier $\{\phi_m\}_{m\geq 0}$, truncada em *M* termos, pois o problema da marcha humana é formado por curvas periódicas, de modo que temos

$$\begin{cases} y_{ij}(.) = \sum_{m=0}^{M} \beta_{im} \phi_m(.) + e_{1ij}(.) \\ z_{ij}(.) = \sum_{m=0}^{M} (C\beta_{im} + \gamma_m) \phi_m(.) + e_{2ij}(.) \end{cases}$$

Com todas as definições e suposições feitas no Capítulo 3, temos ferramentas suficientes para estudar o problema da marcha e a concordância entre os equipamentos Optotrak e eletrogoniômetro. Suponha como hiper parâmetros do modelo BFGP:

- supomos que o erro cometido pelo Optotrak no instante s, independe do tempo t
 κ₁(t,s) = 1, se t = s, e κ₁(t,s) = 0, caso contrário;
- supomos que o erro cometido pelo eletrogoniômetro no instante s, independe do tempo t
 κ₂(t,s) = 1, se t = s, e κ₂(t,s) = 0, caso contrário;
- consideraremos a falta de informação a priori sobre a função de covariância κ_{β}

$$\kappa_{\Sigma}(t,s) = 1$$
, se $t = s$, e $\kappa_{\Sigma}(t,s) = 0$, caso contrário;

$$\tau = 7;$$

$$d = 1;$$
consideraremos a falta de informação a priori sobre a sequência {γ_m}_{m≥0}, então sugerimos que sua distribuição é centrada na sequência nulo, em que cada termo tem uma alta variabilidade e existe independência entre eles

 $\kappa_{\gamma}(t,s) = 100$, se t = s, e $\kappa_{\gamma}(t,s) = 0$, caso contrário;

 $\boldsymbol{\eta} = \boldsymbol{\xi} = 0_f(t) = 0;$

• consideraremos a falta de informação a priori sobre a distorção *C*, então sugerimos que sua distribuição é centrada em 1 com alta variabilidade

$$\omega = 1 \text{ e } \sigma_C^2 = 100$$

• consideraremos a falta de informação a priori sobre as variabilidades $\sigma_1^2 e \sigma_2^2$, então sugerimos que suas distribuições são iguais, com média 1 e variância 1

$$a_1 = a_2 = 3 e b_1 = b_2 = 2.$$

4.3 Resultados

Para as rotinas, consideramos 30000 iterações, com *burn-in* de 5000 e, para evitar autocorrelação, consideramos saltos de 25 unidades entre as iterações. Repetimos o processo considerando a série de Fourier truncada em M = 6, 8, 10, 12, 14, 16, 18 (ou seja, séries com 7,9, 11, 13, 15, 17, 19 termos). O trabalho de Milani (2019) traz evidências de que a expansão com 13 termos é uma boa escolha para o problema analisado. O estudo de diferentes truncamentos, mostrará novamente que 13 termos são suficientes para estudar esses dados. Mais de um chute inicial foi testado.

4.3.1 Escolha de M para a série de Fourier

Para os dados com os quais estamos trabalhando é conhecido que a série de Fourier truncada em M = 12 (13 termos na série) é a representação mínima e suficiente para observamos as curvas do Optotrak e eletrogoniômetro (MILANI, 2019). A seguir faremos uma nova análise para determinar o valor "ótimo" de M com o qual trabalharemos. A avaliação é baseada na comparação das estimativas dos parâmetros.

Temos que o estimador de um parâmetro é sua média a posteriori. Realizamos as simulações dos parâmetros para M = 6, 8, 10, 12, 14, 16, 18 e supomos a perda quadrática para calcular as estimativas dos parâmetros C, σ_1^2 , σ_2^2 , γ , $\zeta \in \beta_6$, associado ao indivíduo dg, todos arredondadas na 3^a casa decimal. Como podemos observar pelos resultados apresentados nas tabelas e visualmente nos gráficos a seguir, para M > 12 temos que as estimativas dos parâmetros escalares ficam próximos da estimativa quando supomos M = 12. Outro forte indicativo é análise das estimativas de parâmetros multidimensionais que estão associados a curvas (os coeficientes de $g(t), v(t) \in u_6(t)$). Observamos que as entradas 13, 14, 15, 16, 17 e 18 diferem muito pouco de 0,

além disso os termos da série de Fourier que acompanham esses coeficientes são responsáveis por padrões rápidos, assim podemos truncar a série de Fourier em M = 12 sem perdas significativas.

• C

<i>M</i> =	6	8	10	12	14	16	18
<i>C</i> =	1,036	1,049	1,049	1,048	1,048	1,048	1,048

Tabela 1 - Estimativas de C para diferentes truncamentos da série de Fourier

• σ₁²

M	=	6	8	10	12	14	16	18
σ_1^2	2 =	5,115	4,039	3,478	3,390	3,393	3,395	3,394

Tabela 2 – Estimativas de σ_1^2 para diferentes truncamentos da série de Fourier

• σ_2^2

<i>M</i> =	6	8	10	12	14	16	18
$\sigma_2^2 =$	4,740	3,353	2,865	2,849	2,836	2,832	2,833

Tabela 3 – Estimativas de σ_2^2 para diferentes truncamentos da série de Fourier

• γ

<i>M</i> =	6	8	10	12	14	16	18
<i>γ</i> ₀ =	-3,154	-3,365	-3,378	-3,346	-3,352	-3,354	-3,346
$\gamma_1 =$	1,426	1,611	1,622	1,595	1,600	1,602	1,595
$\gamma_2 =$	0,856	0,918	0,922	0,913	0,914	0,915	0,912
<i>γ</i> ₃ =	-1,675	-1,791	-1,798	-1,781	-1,784	-1,786	-1,780
$\gamma_4 =$	1,177	1,281	1,287	1,272	1,274	1,276	1,271
<i>γ</i> ₅ =	-0,774	-0,817	-0,819	-0,813	-0,814	-0,814	-0,813
$\gamma_6 =$	-0,182	-0,198	-0,199	-0,197	-0,197	-0,197	-0,197
$\gamma_7 =$	-	-0,043	-0,044	-0,042	-0,042	-0,042	-0,042
$\gamma_8 =$	-	0,091	0,091	0,090	0,091	0,091	0,090
γ ₉ =	-	-	-0,279	-0,278	-0,279	-0,278	-0,278
$\gamma_{10} =$	-	-	0,298	0,299	0,299	0,299	0,299
$\gamma_{11} =$	-	-	-	-0,082	-0,081	-0,081	-0,082
$\gamma_{12} =$	-	-	-	-0,064	-0,064	-0,064	-0,064
$\gamma_{13} =$	-	-	-	-	0,024	0,025	0,025
$\gamma_{14} =$	-	-	-	-	0,067	0,067	0,067
$\gamma_{15} =$	-	-	-	-	-	-0,015	-0,015
$\gamma_{16} =$	-	-	-	-	-	0,021	0,022
$\gamma_{17} =$	-	-	-	-	-	-	0,001
$\gamma_{18} =$	-	-	-	-	-	-	0,009

Tabela 4 – Estimativas de γ para diferentes truncamentos da série de Fourier

•ζ

<i>M</i> =	6	8	10	12	14	16	18
$\zeta_0 =$	15,648	15,649	15,634	15,623	15,666	15,682	15,653
$\zeta_1 =$	-13,813	-13,785	-13,777	-13,781	-13,801	-13,842	-13,801
$\zeta_2 =$	-4,633	-4,655	-4,657	-4,633	-4,650	-4,666	-4,656
$\zeta_3 =$	8,617	8,589	8,597	8,598	8,615	8,632	8,618
$\zeta_4 =$	-7,731	-7,701	-7,704	-7,714	-7,725	-7,728	-7,710
$\zeta_5 =$	3,278	3,259	3,251	3,265	3,273	3,274	3,273
$\zeta_6 =$	1,144	1,139	1,142	1,142	1,140	1,150	1,139
$\zeta_7 =$	-	0,968	0,971	0,968	0,972	0,971	0,972
$\zeta_8 =$	-	-0,167	-0,166	-0,169	-0,170	-0,167	-0,168
$\zeta_9 =$	-	-	0,654	0,665	0,660	0,660	0,655
$\zeta_{10} =$	-	-	0,133	0,135	0,136	0,137	0,134
$\zeta_{11} =$	-	-	-	0,097	0,096	0,097	0,096
$\zeta_{12} =$	-	-	-	0,184	0,185	0,187	0,186
$\zeta_{13} =$	-	-	-	-	-0,018	-0,017	-0,017
$\zeta_{14} =$	-	-	-	-	0,006	0,008	0,010
$\zeta_{15} =$	-	-	-	-	-	-0,021	-0,013
$\zeta_{16} =$	-	-	-	-	-	0,001	0,004
$\zeta_{17} =$	-	-	-	-	-	-	- 0,016
$\zeta_{18} =$	-	-	-	-	-	-	0,003

Tabela 5 – Estimativas de $\boldsymbol{\zeta}$ para diferentes truncamentos da série de Fourier

<i>M</i> =	6	8	10	12	14	16	18
$\beta_{6,0} =$	17,030	16,990	16,987	16,994	16,992	16,992	16,993
$\beta_{6,1} =$	-14,337	-14,299	-14,297	-14,304	-14,301	-14,300	-14,301
$\beta_{6,2} =$	-3,507	-3,515	-3,514	-3,514	-3,513	-3,514	-3,514
$\beta_{6,3} =$	9,526	9,497	9,496	9,501	9,499	9,499	9,498
$\beta_{6,4} =$	-9,415	-9,379	-9,377	-9,382	-9,381	-9,381	-9,381
$\beta_{6,5} =$	4,485	4,473	4,472	4,475	4,473	4,473	4,474
$\beta_{6,6} =$	1,023	1,002	1,001	1,003	1,003	1,003	1,002
$\beta_{6,7} =$	-	1,380	1,380	1,379	1,379	1,380	1,379
$\beta_{6,8} =$	-	-0,566	-0,566	-0,566	-0,566	-0,566	-0,565
$\beta_{6,9} =$	-	-	1,062	1,062	1,062	1,063	1,062
$\beta_{6,10} =$	-	-	0,096	0,094	0,094	0,095	0,094
$\beta_{6,11} =$	-	-	-	0,304	0,305	0,303	0,305
$\beta_{6,12} =$	-	-	-	0,237	0,237	0,237	0,236
$\beta_{6,13} =$	-	-	-	-	0,007	0,007	0,007
$\beta_{6,14} =$	-	-	-	-	0,037	0,037	0,038
$\beta_{6,15} =$	-	-	-	-	-	-0,004	-0,003
$\beta_{6,16} =$	-	-	-	-	-	0,001	0,000
$\beta_{6,17} =$	-	-	-	-	-	-	- 0,020
$\beta_{6,18} =$	-	-	-	-	-	-	0,000

Tabela 6 – Estimativas de $\boldsymbol{\beta}_6$ para diferentes truncamentos da série de Fourier



Figura 11 – Estimativas de C com a perda quadrática



Figura 12 – Estimativas de σ_1^2 com a perda quadrática Fonte: Elaborada pelo autor.



Figura 13 – Estimativas de σ_2^2 com a perda quadrática Fonte: Elaborada pelo autor.



Figura 14 – Estimativas das curvas v(t) com a perda quadrática

M	6	8	10	12	14	16	18
6	0,000	0,345	0,547	0,527	0,538	0,540	0,532
8	0,345	0,000	0,409	0,422	0,428	0,428	0,429
10	0,547	0,409	0,000	0,115	0,132	0,133	0,139
12	0,527	0,422	0,115	0,000	0,072	0,077	0,077
14	0,538	0,428	0,132	0,072	0,000	0,026	0,030
16	0,540	0,428	0,133	0,077	0,026	0,000	0,016
18	0,532	0,429	0,139	0,177	0,030	0,016	0,000

Tabela 7 – Distância L^2 entre as curvas estimadas $\hat{v}(.)$, para M = 6, 8, 10, 12, 14, 16, 18



Figura 15 – Estimativas das curvas g(t) com a perda quadrática

M	6	8	10	12	14	16	18
6	0,000	0,984	1,192	1,213	1,213	1,214	1,211
8	0,984	0,000	0,668	0,711	0,707	0,712	0,702
10	1,192	0,668	0,000	0,211	0,216	0,233	0,217
12	1,213	0,711	0,211	0,000	0,058	0,103	0,060
14	1,213	0,707	0,216	0,058	0,000	0,055	0,036
16	1,214	0,712	0,233	0,103	0,055	0,000	0,060
18	1,211	0,702	0,217	0,060	0,036	0,060	0,000

Tabela 8 – Distância L^2 entre as curvas estimadas $\hat{g}(.)$, para M = 6, 8, 10, 12, 14, 16, 18



Figura 16 – Estimativas das curvas $u_6(t)$ com a perda quadrática

M	6	8	10	12	14	16	18
6	0,000	1,493	1,836	1,874	1,875	1,875	1,874
8	1,493	0,000	1,067	1,134	1,135	1,135	1,135
10	1,836	1,067	0,000	0,386	0,388	0,387	0,388
12	1,874	1,134	0,386	0,000	0,038	0,038	0,044
14	1,875	1,135	0,388	0,038	0,000	0,005	0,021
16	1,875	1,135	0,387	0,038	0,005	0,000	0,021
18	1,874	1,135	0,388	0,044	0,021	0,021	0,000

Tabela 9 – Distância L^2 entre as curvas estimadas $\hat{u}_6(.)$, para M = 6, 8, 10, 12, 14, 16, 18

4.3.2 Posteriores com M=12

Esta subseção apresenta e discuti os resultados quando supomos o BFGP para o problema da marcha. Também é realizado a análise de concordância entre os equipamentos Optotrak e eletrogoniômetro, considerando a série de Fourier truncada em M = 12. Segundo Stevens (2014), na abordagem clássica, é interessante comparar as estimativas dos parâmetros do modelo suposto pois essas nos indicam características intrínsecas dos equipamentos como, por exemplo, a acurácia. No estudo, avaliar as estimativas e regiões de credibilidade, nos permite discutir sobre precisão e acurácia dos equipamentos, características relevantes para as áreas que utilizam os sistemas de medição. Também é uma etapa importante para entender os resultados da ferramenta PPFA (*Predictive Probability of Functional Agreement*).

Na proposta do modelo BFGP temos 4 parâmetros associados diretamente a precisão e/ou acurácia dos equipamentos Optotrak (*SM*1 ou 1) e eletrogoniômetro (*SM*2 ou 2)

- σ₁²: representa a variabilidade da função aleatória e_{1ij}(.) (erro do Optotrak). No modelo proposto, consideramos que σ₁² independe do instante observado (a dependência é um ponto que pode ser abordado em futuros estudos) e adicionalmente supomos que o kernel do Processo Gaussiano de e_{1ij} é a função Delta de Kronecker, ou seja, o erro cometido no instante *t* tem mesma variabilidade que o erro no instante *s*, contudo o erro que cometemos em *t* não tem influência no erro do instante *s*. O parâmetro σ₁² está relacionado à precisão do Optotrak quando mensura uma curva;
- σ_2^2 : com interpretação análoga a σ_1^2 , mas associado ao equipamento eletrogoniômetro, o parâmetro σ_2^2 representa a variabilidade da função aleatória $e_{2ij}(.)$ (erro do eletrogoniômetro) e independe do instante de observação. Para os erros $e_{2ij}(.)$ também foi suposto um Processo Gaussiano com kernel igual a função Delta de Kronecker, replicando a explicação do tópico anterior "o erro cometido no instante *t* tem mesma variabilidade que o erro no instante *s*, contudo o erro que cometemos em *t* não tem influência no erro do instante *s*". Temos que σ_2^2 está associado à precisão do eletrogoniômetro quando mensura uma curva;
- C: parâmetro escalar associado ao eletrogoniômetro, responsável por ampliar/achatar a curva real. Essa é uma distorção que o equipamento *SM2* produz ao visualizar a curva u_i(.) e que independe de instante observado. O parâmetro está associado a acurácia;
- γ: vetor de coeficientes da série de Fourier truncada da curva de distorção v(.) associada ao equipamento SM2, independente do indivíduo observado. Esse parâmetro complementa a distorção C, adicionando/subtraindo v(t) unidades das curvas C × u_i(t) (o instante observado é relevante). É um parâmetro associado a acurácia.

Os estimadores e distribuições a posteriori desses 4 parâmetros nos permitem inferir sobre a precisão e acurácia de cada equipamento. As estimativas são dadas pelas médias a posteriores. A seguir um quadro com estimativas dos parâmetros.

Parâmetro	Estimativa (média a posteriori)	Desvio-padrão do estimador
σ_1^2	3,390	0,021
σ_2^2	2,849	0,018
С	1,048	0,003
γ	$\begin{bmatrix} -3,346\\ 1,595\\ 0,913\\ -1,781\\ 1,272\\ -0,813\\ -0,197\\ -0,042\\ 0,090\\ -0,278\\ 0,299\\ -0,082\\ -0,064 \end{bmatrix}$	$\approx \mathbb{O}$ (variâncias pequenas e covariâncias quase nulas)

Tabela 10 – Estimativas dos parâmetros σ_1^2 , σ_2^2 , *C* e γ considerando a perda quadrática e M = 12.

A primeira análise que fazemos é sobre a acurácia dos equipamentos. O Optotrak é considerado o sistema de referência, ou seja, desconsiderando os erros do próprio sistema de medição, assumimos que os dados gerados por ele condizem com as curvas mensuradas. Ao analisar o eletrogoniômetro, as estimativas $\hat{C} \in \hat{\gamma}$ sugerem que o equipamento interpreta a curva observada com distorções, ele não amplia/achata significativamente a curva observada (parâmetro C), mas a distorce a cada instante adicionando/subtraindo unidades da observação (curva v(.) representada pelo vetor de coeficientes γ). Em termos informais poderíamos descrever a situação como: o Optotrak vê e entende a curva que observa, apenas comete erros ao descrever o que observou; enquanto o eletrogoniômetro vê a mesma curva, contudo a interpreta de forma distorcida $(C \times u_i(.) + v(.))$ e ao descrever o que observou comete erros de medição do próprio aparelho. De maneira simples, o eletrogoniômetro só seria um equipamento acurado (tendo como referência o Optotrak) se $\hat{C} \approx 1$ e $\hat{\gamma} = 0$ e os desvios fossem pequenos (o que até ocorre). A segunda análise sobre as estimativas da Tabela 10 é em relação a precisão dos equipamentos. Apesar do Optotrak ser considerado o sistema de referência, baseado nos dados coletados e no modelo hierárquico suposto, concluímos que, em comparação com o eletrogoniômetro, o equipamento é menos acurado ($\hat{\sigma}_1^2 > \hat{\sigma}_2^2$). Ou seja, quando o Optotrak observa a mesma curva (imutável) repetidas vezes, o equipamento tende a construir resultados mais variados em torno da curva real do que o eletrogoniômetro constrói para a sua interpretação distorcida da curva. Visualmente podemos resumir esses resultados na Figura 17.

As simulações de σ_1^2 , σ_2^2 , *C* e γ podem ser visualizadas nas Figuras 18, 19, 20 e 21. A região de credibilidade de 95% da curva v(.) está na Figura 22.



Figura 17 – Ideia visual da precisão e acurácia dos equipamentos Optotrak e eletrogoniômetro Fonte: Elaborada pelo autor.



Figura 18 – Histograma de σ_1^2 para M = 12





Fonte: Elaborada pelo autor.



Figura 20 – Histograma de C para M = 12



Figura 21 – Variação dos coeficientes de γ para M = 12Fonte: Elaborada pelo autor.



Figura 22 – Região de credibilidade para v(t) (curva de distorção) para M = 12Fonte: Elaborada pelo autor.

O modelo hierárquico bayesiano proposto para o problema da marcha também permite estimar a curva do passo padrão de cada indivíduo $(u_i(.))$. O modelo constrói a distribuição a posteriori dos coeficientes da série de Fourier truncada em $M(\boldsymbol{\beta}_i)$. As estimativas das curvas $u_i(.)$ são definidas através das equações

$$\hat{u}_i(t) = \sum_{m=0}^M \hat{\beta}_{im} \phi_m(t), \,\forall i$$
(4.2)

em que $\hat{\beta}_{im}$ são entradas do vetor $\hat{\beta}_i$ definido pela média a posteriori do parâmetro. A seguir um exemplo da estimativa da curva $u_i(.)$ dentre os 15 indivíduos avaliados no problema. O indivíduo

representado é o dg (sexto na lista). A estimação do parâmetro $\boldsymbol{\beta}_6$ tem desvio dado pela matriz $10^{-4} \times diag(2;3;2;3;2;2;2;2;2;2)$ e

$$\hat{\boldsymbol{\beta}}_{6} = \begin{bmatrix} 16,994 \\ -14,304 \\ 9,501 \\ -9,382 \\ 4,475 \\ 1,003 \\ 1,379 \\ -0,566 \\ 1,062 \\ 0,094 \\ 0,304 \\ 0,237 \end{bmatrix}$$

A Figura 23 apresenta a simulação dos coeficientes $\beta_{6,m}$, enquanto a Figura 24 representa a região de credibilidade de 95% da curva $u_6(.)$. Temos resultados semelhantes para os demais indivíduos.



Figura 23 – Variação dos coeficientes de β_6 para M = 12Fonte: Elaborada pelo autor.



Figura 24 – Região de credibilidade para $u_6(t)$ (curva média do passo do indivíduo dg) para M = 12Fonte: Elaborada pelo autor.

Por fim, outro parâmetro para qual temos uma interpretação no problema da marcha e conseguimos observar graficamente seus resultados é a curva g(.) - curva média do passo do humano. Ao assumimos o modelo hierárquico bayesiano, supomos que o passo que qualquer indivíduo realiza é a variação dessa uma curva média. O vetor de coeficientes associado a g(.) é o ζ . A Figura 25 apresenta os resultados das iterações da simulação. Os coeficientes ζ_m ficam em torno de valores apresentados abaixo, mas os primeiros termos tendem a variar mais entre as iterações. A Figura 26 apresenta a região de credibilidade de 95% para g(.).

$$\hat{\boldsymbol{\zeta}} = \begin{bmatrix} 15,623 \\ -13,781 \\ -4,633 \\ 8,598 \\ -7,714 \\ 3,265 \\ 1,142 \\ 0,968 \\ -0,169 \\ 0,655 \\ 0,135 \\ 0,097 \\ 0,184 \end{bmatrix}$$



Figura 25 – Variação dos coeficientes de ζ para M = 12Fonte: Elaborada pelo autor.



Região de credibilidade para g(t)

Figura 26 – Região de credibilidade para g(t) (curva média do passo do humano) para M = 12Fonte: Elaborada pelo autor.

Outros estimadores

O estimador da matriz *B*, que representa a covariância das variáveis $\boldsymbol{\beta}_i$, é dado por

), 147 -0, 128 -0, 036), 084 -0, 11), 084), 003), 003), 003), 003), 003), 006	0,002 0,057
0, 107 0 -0, 079 - 0, 027 - 0, 037 0 0, 037 - 0, 037 - 0, 037 - 0, 037 - 0, 012 0 0, 012 0 0, 002 0), 002 (
0, 141 -0,088 -0,088 0,088 0,088 0,001 0,005 0,006 0,005 0,006 0,006 0,006 0,006 0,0000 0,0000 0,0000 0,0000 0,0000 0,0000 0,00000	-0,006 (
0,568 -0,512 $-0,512$ $-0,012$ $-0,012$ $-0,436$ $-0,436$ $-0,195$ $0,032$ $0,045$ $0,045$ $0,0045$ $0,006$ $0,107$ $0,006$ $0,006$	0,012 - 0,017
-0,301 0,072 -0,083 0,139 -0,103 0,139 -0,103 0,012 0,012	-0,012 0,003
$\begin{array}{c} 1,033\\ -0,621\\ -0,512\\ 0,455\\ 0,455\\ 0,241\\ 0,241\\ 0,14\\ 0,14\\ 0,14\\ 0,045\\ 0,006\\ 0,006\\ 0,013\\ \end{array}$	0,008
$\begin{array}{c} 0,768\\ -0,98\\ -0,581\\ 0,697\\ 0,697\\ 0,048\\ 0,048\\ 0,0289\\ 0,008\\ 0,008\\ 0,033\\ 0,033\\ 0,003\end{array}$	0,022
2,861 -2,305 -0,121 1,489 -1,899 1,043 0,048 0,241 0,241 0,241 0,195 0,001	0,047 0,035
-6,982 5,846 1,026 -3,502 4,38 -1,899 -0,342 -0,342 0,139 0,139 0,139 0,139 0,086	-0,000 -0,11
7,439 -6,088 -2,683 4,839 -3,502 1,489 0,697 0,455 0,029 0,029 0,0088	0,037 0,084
-5,328 3,028 3,61 -2,683 1,026 -0,121 -0,212 -0,212 -0,012 -0,012 -0,012	-0,036
-10,909 11,853 3,028 -6,088 5,846 -2,305 -0,98 -0,621 0,072 -0,512 -0,088 0,070	-0,079 -0,128
$16,287 \\ -10,909 \\ -5,328 \\ 7,439 \\ -6,982 \\ 2,861 \\ 0,768 \\ 1,033 \\ -0,301 \\ 0,568 \\ 0,141 \\ 0,107 $	0, 107 0, 147
₿ ₩	1

Os estimadores de todas as curvas $u_i(t)$ são apresentados a seguir (seus gráficos se comportam de forma semelhante ao gráfico de β_6 , assim como seus intervalos de credibilidade, por isso foram omitidos).

Ind	1	2	3	4	5	6	7	8
$\beta_{i,0}$	15,316	19,106	18,029	20,992	13,875	16,994	16,272	18,841
$\beta_{i,1}$	-14,080	-14,724	-13,625	-12,992	-14,382	-14,304	-16,979	-14,120
$\beta_{i,2}$	-5,767	-6,041	-6,956	-6,609	-4,444	-3,514	-7,661	-6,655
$\beta_{i,3}$	9,110	9,174	11,214	9,896	9,589	9,501	8,396	10,288
$\beta_{i,4}$	-6,160	-8,730	-7,186	-10,160	-7,269	-9,382	-6,781	-7,718
$\beta_{i,5}$	3,060	3,791	2,924	4,074	3,325	4,475	1,777	3,489
$\beta_{i,6}$	1,240	1,180	1,220	1,349	1,482	1,003	2,137	1,055
$\beta_{i,7}$	0,808	0,918	1,211	1,399	0,954	1,379	0,814	1,140
$\beta_{i,8}$	-0,199	-0,125	-0,075	-0,196	-0,027	-0,566	0,194	-0,360
$\beta_{i,9}$	0,346	0,613	0,461	0,848	0,616	1,062	0,548	0,735
$\beta_{i,10}$	0,030	0,067	0,183	0,354	0,305	0,094	0,332	0,130
$\beta_{i,11}$	0,092	0,108	0,055	0,101	-0,013	0,304	0,050	0,145
$\beta_{i,12}$	0,095	0,076	0,118	0,331	0,169	0,237	0,261	0,178

Ind	9	10	11	12	13	14	15
$\beta_{i,0}$	17,525	16,613	16,655	16,991	13,264	13,724	16,377
$\beta_{i,1}$	-12,924	-16,988	-17,101	-13,701	-13,912	-16,814	-14,340
$\beta_{i,2}$	-4,359	-5,780	-3,083	-6,108	-3,945	-1,424	-2,053
$\beta_{i,3}$	7,938	9,603	7,785	8,176	10,575	8,703	7,956
$\beta_{i,4}$	-8,990	-8,376	-9,171	-6,426	-8,398	-9,504	-9,307
$\beta_{i,5}$	3,456	2,935	4,278	2,498	3,783	3,764	4,709
$\beta_{i,6}$	0,795	1,735	0,780	0,900	2,041	1,150	0,211
$\beta_{i,7}$	1,090	0,756	1,022	1,048	0,709	0,870	1,411
$\beta_{i,8}$	-0,444	0,217	-0,577	-0,414	0,493	-0,232	-0,398
$\beta_{i,9}$	0,947	0,589	0,921	0,412	0,908	0,876	0,681
$\beta_{i,10}$	0,232	0,258	0,038	-0,049	0,128	0,066	-0,009
$\beta_{i,11}$	0,128	-0,029	0,161	0,059	0,061	0,207	0,121
$\beta_{i,12}$	0,341	0,233	0,247	0,089	0,310	0,189	0,081

4.3.3 Avaliação do ajuste

Utilizando M = 12 (os 13 primeiros termos da série de Fourier) e o métodos dos mínimos quadrados, podemos estimar os coeficientes da média das curvas observadas para o indivíduo *i*. Esse procedimento é realizado considerando a suavização das curvas observadas, isto é, definimos

$$\mathbf{Y}_{ij} = \begin{bmatrix} y_{ij1} & \cdots & y_{ijn_{ij}} \end{bmatrix}^T = \Phi_{ij} \mathbf{\iota}_{ij}$$
$$\mathbf{Z}_{ij} = \begin{bmatrix} z_{ij1} & \cdots & z_{ijn_{ij}} \end{bmatrix}^T = \Phi_{ij} \boldsymbol{\varphi}_{ij}$$

$$\mathbf{\iota}_{ij} = (\Phi_{ij}^T \Phi_{ij})^{-1} \Phi_{ij}^T \mathbf{Y}_{ij}^*$$
$$\boldsymbol{\varphi}_{ij} = (\Phi_{ij}^T \Phi_{ij})^{-1} \Phi_{ij}^T \mathbf{Z}_{ij}^*$$

Definindo $\boldsymbol{\iota}_{ij} = [\boldsymbol{\iota}_{1j,0} \cdots \boldsymbol{\iota}_{1j,12}]^T$ e $\boldsymbol{\varphi}_{ij} = [\boldsymbol{\varphi}_{1j,0} \cdots \boldsymbol{\varphi}_{1j,12}]^T$, é evidente que

$$\bar{y}_i(t) = \sum_{m=0}^{12} \left(\sum_{j=1}^{Q_i} \frac{\iota_{ij,m}}{Q_i} \right) \phi_m(t)$$
$$\bar{z}_i(t) = \sum_{m=0}^{12} \left(\sum_{j=1}^{Q_i} \frac{\varphi_{ij,m}}{Q_i} \right) \phi_m(t)$$

Defina

$$\bar{\boldsymbol{\iota}}_{i} = \sum_{j=1}^{Q_{i}} \frac{\boldsymbol{\iota}_{ij}}{Q_{i}}$$

$$\bar{\boldsymbol{\varphi}}_{i} = \sum_{j=1}^{Q_{i}} \frac{\boldsymbol{\varphi}_{ij}}{Q_{i}}$$
(4.3)

Uma primeira análise do ajuste do modelo proposto é comparar a distância entre as curvas $\sum_{m=0}^{12} \bar{\iota}_{i,m} \phi_m(t) \operatorname{com} \hat{\beta}_{i,m} \phi_m(t) \operatorname{e} \sum_{m=0}^{12} \bar{\varphi}_{i,m} \phi_m(t) \operatorname{com} (\hat{C}\hat{\beta}_{i,m} + \hat{\gamma}) \phi_m(t)$, mas veja que aplicando a distância L^2 para funções temos que:

$$\begin{cases} d_{yi}^{2} = \int_{0}^{1} \left(\sum_{m=0}^{12} \bar{\iota}_{i,m} \phi_{m}(t) - \hat{\beta}_{i,m} \phi_{m}(t) \right)^{2} dt \\ d_{zi}^{2} = \int_{0}^{1} \left(\sum_{m=0}^{12} \bar{\varphi}_{i,m} \phi_{m}(t) - (\hat{C}\hat{\beta}_{i,m} + \hat{\gamma}) \phi_{m}(t) \right)^{2} dt \end{cases}$$

em que $\{\phi_m\}$ é a série de Fourier, isto é, uma série de funções ortonormais, logo

$$\begin{cases} d_{yi}^{2} = \sum_{m=0}^{12} \left(\bar{\iota}_{i,m} - \hat{\beta}_{i,m} \right)^{2} \\ d_{zi}^{2} = \sum_{m=0}^{12} \left(\bar{\varphi}_{i,m} \phi_{m}(t) - (\hat{C}\hat{\beta}_{i,m} + \hat{\gamma}) \right)^{2} \end{cases}$$
(4.4)

Utilizando (4.4), temos uma análise sobre o ajuste.

Perna dominante	Distância L ²			
Sujeito	Optotrak	Eletrogoniômetro		
al	0,877	0,704		
as	1,182	0,947		
at	0,982	0,789		
az	0,666	0,536		
ba	1,022	0,822		
dg	1,389	1,112		
eb	0,836	0,664		
ff	0,778	0,622		
jd	1,360	1,093		
jf	1,012	0,811		
jj	1,177	0,945		
mb	0,402	0,318		
mk	1,070	0,861		
rp	1,222	0,985		
to	1,674	1,353		

Tabela 11 - Distância entre a média das curvas observadas do indivíduo e a estimativa da curva média

Os resultados da Tabela 11 indicam que existe uma boa aproximação entre as médias das curvas observadas e as curvas médias estimadas para cada indivíduo, o que sugere que o modelo está bem ajustado aos dados. Os gráficos abaixo demonstram o comportamento das curvas médias estimadas e das médias das curvas observadas. Em cinza temos representadas as curvas observadas, em azul, a média das curvas observadas e em vermelho, a curva média estimada.



Figura 27 – Análise do ajuste para o Optotrak. Em cinza temos representadas as curvas observadas, em azul, a média das curvas observadas e em vermelho, a curva média estimada.



Figura 28 – Análise do ajuste para o Optotrak. Em cinza temos representadas as curvas observadas, em azul, a média das curvas observadas e em vermelho, a curva média estimada.



Figura 29 – Análise do ajuste para o Optotrak. Em cinza temos representadas as curvas observadas, em azul, a média das curvas observadas e em vermelho, a curva média estimada.



Figura 30 – Análise do ajuste para o Optotrak. Em cinza temos representadas as curvas observadas, em azul, a média das curvas observadas e em vermelho, a curva média estimada.



Figura 31 – Análise do ajuste para o eletrogoniômetro. Em cinza temos representadas as curvas observadas, em azul, a média das curvas observadas e em vermelho, a curva média estimada.



Figura 32 – Análise do ajuste para o eletrogoniômetro. Em cinza temos representadas as curvas observadas, em azul, a média das curvas observadas e em vermelho, a curva média estimada.



Figura 33 – Análise do ajuste para o eletrogoniômetro. Em cinza temos representadas as curvas observadas, em azul, a média das curvas observadas e em vermelho, a curva média estimada.



Figura 34 – Análise do ajuste para o eletrogoniômetro. Em cinza temos representadas as curvas observadas, em azul, a média das curvas observadas e em vermelho, a curva média estimada.

4.3.4 Curvas preditivas

Outro tópico abordado no Capítulo 3 é a construção das curvas de predição de um novo indivíduo: u_{P+1} , y_{P+1} e z_{P+1} . Observar essas predições, podem ajudar a entender a presença, ou não, de concordância entre os equipamentos (junto com a estimativas descritas anteriormente).

Como podemos observar pelas Figuras 35, a região de predição da curva média do passo de um novo indivíduo é larga, isso pode ser explicado pelos parâmetros ζ (relacionado a curva g(.) - curva média do passo do humano) e a matriz B. A estimativa de B demonstra que a variabilidade em torno da curva g(.) é elevado, além disso observamos na Figura 25 os coeficientes ζ_m variam com as iterações. Observando as estimativas anteriores, podemos concluir que as amplitudes das regiões de predição de $y_{16}(.)$ e z_{16} são reflexos da região de confiança de $u_{16}(.)$.



Figura 35 – Região de predição para a curva $u_{16}(t)$ (curva média para um novo indivíduo) para M = 12Fonte: Elaborada pelo autor.



Figura 36 – Região de predição para a curva $y_{16}(t)$ (medição do Optotrak) para M = 12



Figura 37 – Região de predição para a curva $z_{16}(t)$ (medição do eletrogoniômetro) para M = 12Fonte: Elaborada pelo autor.

4.3.5 PPFA - Concordância entre Optotrak e eletrogoniômetro

No Capítulo 2 propomos a ferramenta de concordância para dados funcionais e no Capítulo 3 desenvolvemos um modelo bayesiano hierárquico para dados funcionais com suposições de Processos Gaussianos. Agora, considerando todas as análises que realizamos para os dados do problema da marcha, apresentamos os resultados de concordância entre os equipamentos Optotrak e eletrogoniômetro com o PPFA e o BFGP.

Relembrando a definição do PPFA temos que dado uma curva $\Delta : [0,1] \rightarrow \mathbb{R}$ (FCAD que é a Função da Diferença Clinicamente Aceitável, isto é, a curva que define a diferença máxima entre as medições dos equipamentos em cada ponto do domínio e que é definida por especialistas da área de estudo), afirmamos que dois aparelhos concordam no instante *t* (podem ser utilizados de forma intercambiada) se ao realizar uma nova observação, a probabilidade preditiva da diferença, em módulo, entre as medições dos sistemas no instante *t* ser menor que $\Delta(t)$ é maior que uma função corte $\theta(t)$ (definida como uma probabilidade mínima no instante *t* e determinado pelos especialistas), dados que observamos *P* indivíduos anteriormente.

$$PPFA(t;\Delta) = \mathbb{P}\left(\|y_{P+1}(t) - z_{P+1}(t)\| < \Delta(t) \mid \{Y_{ij}, Z_{ij}\}_{i=1, j=1}^{P, Q_i}\right) \ge \theta(t) \Rightarrow \text{Concordam em t.}$$

Para a análise de concordância entre o Optotrak e eletrogoniômetro, consideramos alguns valores de FCAD (Diferença Clinicamente Aceitável Funcional) e funções corte. Os resultados

são apresentados na Figura 38. Em azul, as regiões onde os equipamentos concordam e em vermelho, as regiões onde não existe concordância. Concluímos que a utilização do eletrogoniômetro ao invés do Optotrak em novos dados de marcha, pode levar as conclusões erradas (diagnósticos errados), pois a probabilidade de a diferença entre dados desses equipamentos ser menor que 4 unidades é baixa, algumas vezes nula.

Além dos resultados observados na Figura 38, as estimativas dos parâmetros σ_1^2 , σ_2^2 , $C \in \boldsymbol{\gamma}$ já indicavam que as chances de os equipamentos concordarem eram baixas. Como discutimos anteriormente, ao observamos os 15 indivíduos do estudo temos que $\hat{C} \approx 1$, mas a curva $\hat{v}(.) = \sum_{m=0}^{M} \hat{\gamma}_m \phi_m(.)$ difere consideravelmente da função nula. Além disso a variabilidade da diferença $y_{P+1}(.) - z_{P+1}(.)$ é uma soma (ponderada pelos kernels) de $\sigma_1^2 \in \sigma_2^2$, para os quais temos estimativas de valor significativo, $\hat{\sigma}_1^2 \approx 3, 4 \in \hat{\sigma}_2^2 \approx 2, 8$. Outro indicativo são as regiões de predição de $y_{P+1}(.) \in z_{P+1}(.)$ que apesar de possuírem o mesmo formato, são amplas e atingem valores diferentes.

A ausência de concordância entre o Optotrak e eletrogoniômetro, nos permite avançar para a calibração.



Figura 38 – Curvas de concordância entre o Optotrak e eletrogoniômetro utilizando a ferramenta PPFA com o modelo BFGP

4.3.6 Calibração

Embora tenhamos denominado de calibração, o objetivo dessa subseção é descrever a região que onde o Optotrak construiria as medições de um novo indivíduo (P + 1), dado que observamos dados do Optotrak e eletrogoniômetro para *P* sujeitos e os dados do eletrogoniômetro para o indivíduo P + 1.

$\mathbb{P}(y_{P+1}(.) \mid \{\{(Y_{ij}, Z_{ij}\}_{i=1}^{P}\}_{j=1}^{Q_i}, \{Z_{Pj}\}_{j=1}^{Q_{P+1}})$

Para representar essa ideia, excluímos um entre os 15 indivíduos dos dados. Esse sujeito será utilizado como teste. Os outros 14 indivíduos são utilizados como dados observados. Repetimos esse procedimento com os 15 sujeitos. Os resultados das regiões de predição do Optotrak são apresentados a seguir, na Figura 39.

Figura 39 – Curvas de concordância entre o Optotrak e eletrogoniômetro utilizando a ferramenta PPFA com o modelo BFGP



Indivíduo al

Fonte: Elaborada pelo autor.





Indivíduo az















Indivíduo ff



Indivíduo jf




Indivíduo mk



Indivíduo to



....



1.0

Observamos que em alguns casos a região predita não corresponde ao foi mensurado pelo Optotrak para o indivíduo teste. Esses "erros" ocorrem principalmente no 70% do ciclo, no ponto mais elevado das curvas, e são mais evidentes quando a diferença entre as medidas entre os equipamentos ultrapassa 20 unidades (é o caso dos indivíduos dg, jd e to, esses sujeitos, como os demais, nunca tiveram lesões nos joelhos, não indicando a priori que possam ser *outliers*, contudo a confirmação só pode ser feita com um estudo de curvas *outliers*). Para os demais indivíduos e regiões do ciclo, o processo de calibração conseguiu descrever boas regiões de predição para o Optotrak, isso foi concluído observando que as curvas mensuradas pelo equipamento estão na região de credibilidade de 95%.

capítulo

CONCLUSÃO

Em diversas áreas quando uma característica de interesse precisa ser mensurada, comumente existe uma técnica ou equipamento considerado como referência, isto é, que constroem observações confiáveis. A qualidade dos dados pode estar associada a tecnologia empregada, o que eleva o custo de aquisição do aparelho e/ou torna seu uso algo restrito (por exemplo, apenas uso laboratorial). Dado o preço e/ou restrição, é natural que exista a busca por equipamentos mais acessíveis, que sejam capazes de obter medições comparáveis ao sistema de referência. A comparação entre os equipamentos de referência (SM1) e alternativo (SM2) é o objetivo da Avaliação de Concordância (MSC), em que uma técnica é escolhida para determinar se SM1 e SM2 podem ser utilizados de forma intercambiada (nomenclatura da área para informar que SM2 pode ser usado, ao invés de SM1, sem perda de informação ou sem possibilidade de interferir na decisão do técnico/especialista que está manuseando).

A definição de uma técnica de análise de concordância depende tipo de dado trabalhado. Para dados escalares, podemos encontrar diversos trabalhos, a exemplo Bland e Altman (1986a), Carstensen (2004), Choudhary e Nagaraja (2007), Stevens (2014), onde cada um propõem uma técnica. O trabalho de Bland e Altman (1986a) é o mais citado entre os artigos, pois nesse é feito uma crítica as abordagens baseadas apenas na comparação de médias, análise de correlação ou regressão. A técnica, denominada LoA, é popular no campo da biomedicina, pois , principalmente, considera o conhecimento do especialista para definir quando dois sistemas podem ser utilizados de forma intercambiada. Em Stevens (2014) é apresentado uma alternativa ao LoA, o PA (*Probability of Agreement*) que é uma técnica cuja interpretação é simples, pois trata-se de uma probabilidade (de observar uma distância aceitável entre as medições). Além disso, o PA requer que as medições sejam feitas com replicações, o que permite a estimação dos parâmetros do modelo suposto para dados seja realizada e a comparação entre as acurácias e as precisões dos aparelhos sejam avaliadas. Tal como o LoA, no PA considera o conhecimento do especialista para determinar a concordância, mas adiciona uma nova fonte de conhecimento: é o especialista quem determina previamente qual a probabilidade mínima para considerarmos dois sistemas intercambiáveis.

Apesar das técnicas propostas por Bland e Altman (1986a) e Stevens, Steiner e MacKay (2017) (por exemplo) serem úteis, suas aplicações estão restritas a dados escalares. Contudo, é cada vez mais comum que equipamentos registrem dados ao longo do tempo com uma discretização muito fina, nos permitindo considerar as observações como curvas ao invés de medições escalares. A análise estatística dedicada a este tipo de dados recebeu o nome de Análise de Dados Funcionais (FDA). Embora exista uma grande literatura sobre concordância para dispositivos de medição escalar, poucas tentativas foram feitas para o caso em que a saída é uma função, as que existem são (em maioria) resultados de extensões de ferramentas para dados escalares e resumem o resultado de concordância em um único valor: Li e Chow (2005), Røislien, Rennie e Skaaret (2012) Olsen, Pfau e Ritz (2013). Uma ferramenta para avaliar concordância entre dados funcionais com origem em 2 aparelhos é o FLoA (*Functional Limits of Agreement*), uma extensão para curvas da ferramenta LoA (*Limits of Agreement*). O FLoA herda todas as características do LoA e críticas que Stevens, Steiner e MacKay (2017) faz a técnica de Bland e Altman (1986a). Independentemente do tipo de dado, poucos estudos da área de concordância são construídos com uma abordagem bayesiana.

Temos como exemplos de equipamentos que mensuram dados funcionais, os aparelhos Optotrak e eletrogoniômetro. O estudo da concordância entre as medições desses sistemas foi a inspiração desta tese. Esses sistemas mensuram os ângulos relacionados a marcha ao longo de vários ciclos, construindo assim dados do tipo funcional. Para avaliar a concordância entre equipamentos que mensuram dados funcionais, propomos uma extensão da ferramenta *Probability of Agreement*, o PPFA (*Predictive Probability of Functional Agreement*). Essa técnica, herda do PA a característica de ser uma ferramenta de fácil interpretação (uma probabilidade), de considerar o conhecimento prévio de um especialista da área estudada e necessitar de réplicas das medições, o que garante a possibilidade de comparar a acurácia e precisão dos aparelhos. Diferentemente do PA, a interpretação do PPFA é dada pela probabilidade da diferença de medições ser menor que uma Função da Diferença Clinicamente Aceitável (FCAD) ao observar um novo indivíduo/objeto, isso porque o PPFA é construído com uma abordagem bayesiana.

Para construir a ideia de concordância e intercambialidade para o PPFA, propomos diversos conceitos, generalizando aqueles apresentados em Stevens (2014). A principal ideia desses conceitos e permitir que o PPFA avalie a concordância e intercambialidade ao longo do domínio das curvas estudadas. Essa ideia auxilia na compreensão de quais regiões apresentam diferenças significativas e aprimorar o equipamento alternativo, SM2, para corrigir esses intervalos.

Como mencionado o PPFA herda do PA, a necessidade da definição de um modelo que explique os dados dos equipamentos SM1 e SM2. Por esse motivo, considerando a estrutura dos dados do problema da marcha, propomos o modelo hierárquico BFGP (*Bayesian Functional Gaussian Process*). Esse modelo foi inspirado nos trabalhados de Stevens (2014) (que utiliza o modelo efeitos mistos para dados escalares) e de Yang *et al.* (2017) (que propõe um modelo

hierárquico bayesiano para dados funcionais com suposição de Processo Gaussiano, o BABF -*Bayesian framework with Approximations by Basis Functions*). No modelo de Stevens (2014), é suposto que o equipamento SM1 é um o aparelho de referência, assim as medições que esse fornece são o próprio valor real do objeto mensurado, com erros de medição do equipamento. Enquanto isso, os resultados de SM2 são os valores reais com desvios multiplicativo e aditivo, que não dependem do objeto em análise ou do aparelho, acrescidos de erros cometidos pelo SM2. Já o modelo BABF não possuí como saídas funções bivariadas, apenas unidimensionais, contudo sua estrutura é interessante, uma vez que considera o compartilhamento de informação entre as curvas. Ademais, a estrutura de expandir as curvas em função de alguma série de funções foi inspiração para a construção do BFGP.

Tivemos acesso aos dados mensurados pelo Optotrak (SM1) e eletrogoniômetro (SM2) para 15 indivíduos, que construíram réplicas de seus passos. Os dois aparelhos mensuravam de forma emparelhada. Para essa estrutura de dados, primeiro precisávamos expandir a ideia apresentada em Stevens (2014) para funções, então consideramos que, ainda, SM1 era o sistema de referência. Ao construirmos as relações que regem os dados, propomos que cada ciclo de marcha era a medição da mesma curva (o passo/curva média do indivíduo), com erros aleatórios. Fazendo uso das ideias de Yang *et al.* (2017), expandimos as curvas na série de Fourier, utilizamos um estrutura hierárquica para compartilhar informações entre as curvas de cada indivíduo e entre os sujeitos do estudo (mantendo as caraterísticas de cada um) e utilizamos como priores o Processo Gaussiano (PG) e o Processo da Wishart Inversa (PWI). Diferente de Yang *et al.* (2017), não restringimos nossa grade de pontos observados e avaliamos funções bivariadas. Além disso, o modelo BFGP é mais geral, pois amplia o BABF, pois considera as réplicas para um mesmo indivíduo, isto é, o BFGP tem um nível hierárquico adicional.

Depois de construímos toda a estrutura do BFGP, determinamos as posteriores dos parâmetros, a probabilidade preditiva para curvas de cada sistema e como construir os resultados da técnica PPFA. Adicionalmente, propomos mais uma técnica: a calibração. Essa técnica constrói regiões de predição das medidas de um novo indivíduo no sistema de referência, considerando os indivíduos observados anteriormente e as medidas resultantes da mensuração do novo sujeito pelo equipamento alternativo. A técnica é útil quando o PPFA afirma que não existe concordância entre os dados de SM1 e SM2.

O modelo BFGP, juntamente com a técnica PPFA, foram aplicados ao problema de concordância entre o Optotrak e eletrogoniômetro no estudo da marcha humana. Construímos toda a argumentação necessária para afirmarmos que os equipamentos não são sistemas de medição que concordam, ou seja, a troca do Optotrak (sistema de referência no estudo da marcha) pelo eletrogoniômetro pode interferir no diagnóstico do especialista. Supondo o modelo hierárquico bayesiano proposto, que possui interpretação no problema da marcha, conseguimos demonstrar através da estimação de parâmetros que o eletrogoniômetro não é um equipamento acurado, apesar de ser um pouco mais preciso que o Optotrak. Com a ferramenta funcional de

análise de concordância PPFA mostramos que, dado os dados observados para 15 indivíduos, a probabilidade, do eletrogoniômetro e do Optotrak construírem em uma nova avaliação (novo indivíduo) resultados que distem menos que 4 unidades, é baixa. Enfatizando que utilizar o eletrogoniômetro pode levar a diagnósticos errados. Dado esse resultado, utilizamos a ferramenta de calibração para construir a região de predição do Optotrak para um novo indivíduo, a partir de dados observados anteriormente e do conhecimento das medições do eletrogoniômetro para o sujeito em estudo. Dos 15 indivíduos, apenas 3 construíram regiões de calibração que diferem do que realmente foi observado com o Optotrak e, portanto, consideramos uma técnica de calibração eficiente.

5.1 Perspectivas futuras

Neste trabalho fizemos algumas suposições para o BFGP que podem ser alteradas de modo a permitir que o modelo capture e avalie outras variações. Como exemplo, podemos:

- modelar os parâmetros σ₁² e σ₁² do BFGP como funções do tempo. Nesse trabalho propomos que esses parâmetros são inalteráveis, assim, para diferentes instantes do domínio, o erro cometido pelo equipamento é o mesmo;
- construção de uma modelagem em que M é aleatório, permitindo que o modelo transite em diferentes dimensões. Uma possibilidade é englobar no modelo metodologias como *Reversible Jump*;
- adaptação do modelo BFGP a outros métodos de expansão de funções em séries, tais como as séries de polinômios Legendre, Lagrange, B-spline (Ramsay James O; Silverman (2005)).

Os tópicos acima são exemplos de como aprimorar o BFGP. Outra possibilidade de estudo é adaptar o PPFA para que as características do objeto/indivíduo sejam variáveis da ferramenta de concordância. Isso transformaria o PPFA em uma função de \mathbb{R}^n nos reais.

ALTMAN, D. G.; BLAND, J. M. Measurement in medicine: the analysis of method comparison studies. **Journal of the Royal Statistical Society: Series D** (**The Statistician**), Wiley Online Library, v. 32, n. 3, p. 307–317, 1983. Citado nas páginas 39, 42 e 43.

BARNETT, R. N. A scheme for the comparison of quantitative methods. **American journal of clinical pathology**, Oxford University Press Oxford, UK, v. 43, n. 6, p. 562–569, 1965. Citado na página 39.

BARNHART, H. X.; HABER, M. J.; LIN, L. I. An overview on assessing agreement with continuous measurements. **Journal of biopharmaceutical statistics**, Taylor & Francis, v. 17, n. 4, p. 529–569, 2007. Citado na página 31.

BLAND, J. M.; ALTMAN, D. Statistical methods for assessing agreement between two methods of clinical measurement. **The lancet**, Elsevier, v. 327, n. 8476, p. 307–310, 1986. Citado nas páginas 31, 39, 43, 44, 45, 109 e 110.

_____. Statistical methods for assessing agreement between two methods of clinical measurement. **The lancet**, Elsevier, v. 327, n. 8476, p. 307–310, 1986. Citado nas páginas 39 e 42.

BLAND, J. M.; ALTMAN, D. G. Agreement between methods of measurement with multiple observations per individual. **Journal of biopharmaceutical statistics**, Taylor & Francis, v. 17, n. 4, p. 571–582, 2007. Citado na página 43.

BURDICK, R. K.; BORROR, C. M.; MONTGOMERY, D. C. Design and analysis of gauge **R&R studies: making decisions with confidence intervals in random and mixed ANOVA models**. [S.1.]: SIAM, 2005. Citado na página 41.

CARSTENSEN, B. Comparing and predicting between several methods of measurement. **Biostatistics**, Oxford University Press, v. 5, n. 3, p. 399–413, 2004. Citado nas páginas 31 e 109.

CHOUDHARY, P. K.; NAGARAJA, H. Tests for assessment of agreement using probability criteria. **Journal of Statistical Planning and Inference**, Elsevier, v. 137, n. 1, p. 279–290, 2007. Citado nas páginas 31 e 109.

DAWID, A. P. Some matrix-variate distribution theory: notational considerations and a bayesian application. **Biometrika**, Oxford University Press, v. 68, n. 1, p. 265–274, 1981. Citado nas páginas 56, 58 e 118.

DIAS, R.; GARCIA, N. L.; SCHMIDT, A. M. A hierarchical model for aggregated functional data. **Technometrics**, v. 55, n. 3, p. 321–334, 2013. Citado na página 31.

FERRATY, F.; MAS, A.; VIEU, P. Nonparametric regression on functional data: inference and practical aspects. Australian & New Zealand Journal of Statistics, v. 49, n. 3, p. 267–286, 2007. Citado na página 31.

GUO, W. Functional mixed effects models. **Biometrics**, Wiley Online Library, v. 58, n. 1, p. 121–128, 2002. Citado na página 52.

HORVÁTH, L.; KOKOSZKA, P. Inference for functional data with applications. [S.l.]: Springer Science & Business Media, 2012. v. 200. Citado na página 31.

LAWRENCE, I.; LIN, K. A concordance correlation coefficient to evaluate reproducibility. **Biometrics**, JSTOR, p. 255–268, 1989. Citado na página 46.

LI, R.; CHOW, M. Evaluation of reproducibility for paired functional data. **Journal of multivariate analysis**, Elsevier, v. 93, n. 1, p. 81–101, 2005. Citado nas páginas 32 e 110.

LIN, L.; HEDAYAT, A.; SINHA, B.; YANG, M. Statistical methods in assessing agreement: Models, issues, and tools. **Journal of the American Statistical Association**, Taylor & Francis, v. 97, n. 457, p. 257–270, 2002. Citado na página 31.

LIN, L. I.-K. Total deviation index for measuring individual agreement with applications in laboratory performance and bioequivalence. **Statistics in medicine**, Wiley Online Library, v. 19, n. 2, p. 255–270, 2000. Citado na página 46.

LÓPEZ-PINTADO, S.; ROMO, J. Depth-based inference for functional data. **Computational Statistics & Data Analysis**, Elsevier, v. 51, n. 10, p. 4957–4968, 2007. Citado na página 31.

MAJESKE, K. D. Two-sample tests for comparing measurement systems. **Quality Engineering**, Taylor & Francis, v. 24, n. 4, p. 501–513, 2012. Citado nas páginas 40 e 41.

MILANI, A. B. G. **Análise Bayesiana de dados funcionais com o uso de processo Gaussiano e metanálise: uma aplicação para a marcha humana**. Tese (Doutorado) — USP - São Carlos / Universidade Federal de São Carlos, https://uwspace.uwaterloo.ca/handle/10012/8976, 05 2019. Citado na página 71.

OLSEN, E.; PFAU, T.; RITZ, C. Functional limits of agreement applied as a novel method comparison tool for accuracy and precision of inertial measurement unit derived displacement of the distal limb in horses. **Journal of Biomechanics**, Elsevier, v. 46, n. 13, p. 2320–2325, 2013. Citado nas páginas 32 e 110.

OLSHEN, R. A.; BIDEN, E. N.; WYATT, M. P.; SUTHERLAND, D. H. Gait analysis and the bootstrap. **The annals of statistics**, JSTOR, v. 17, n. 4, p. 1419–1440, 1989. Citado nas páginas 31 e 34.

RAMSAY, J. O. **Functional data analysis**. [S.l.]: Wiley Online Library, 2006. Citado nas páginas 31 e 34.

RAMSAY JAMES O; SILVERMAN, B. W. **Functional data analysis**. [S.l.]: Springer-Verlag New York, 2005. Citado nas páginas 47 e 112.

RASMUSSEN, C. E.; WILLIAMS, C. K. I. Gaussian Process for Machine Learning. [S.l.]: The MIT press, 2006. Citado na página 118.

RICE, J. A.; WU, C. O. Nonparametric mixed effects models for unequally sampled noisy curves. **Biometrics**, v. 57, n. 1, p. 253–259, 1989. Citado na página 31.

RØISLIEN, J.; RENNIE, L.; SKAARET, I. Functional limits of agreement: a method for assessing agreement between measurements of gait curves. **Gait & posture**, Elsevier, v. 36, n. 3, p. 495–499, 2012. Citado nas páginas 32, 47 e 110.

SHI, J.; WANG, B.; MURRAY-SMITH, R.; TITTERINGTON, D. Gaussian process functional regression modeling for batch data. **Biometrics**, Wiley Online Library, v. 63, n. 3, p. 714–723, 2007. Citado na página 118.

SHROUT, P. E.; FLEISS, J. L. Intraclass correlations: uses in assessing rater reliability. **Psy-chological bulletin**, American Psychological Association, v. 86, n. 2, p. 420, 1979. Citado na página 40.

SILVA, G. S. de; RATHNAYAKE, L. N.; CHOUDHARY, P. K. Modeling and analysis of functional method comparison data. **Communications in Statistics-Simulation and Computation**, Taylor & Francis, p. 1–21, 2020. Citado nas páginas 43 e 46.

SØRENSEN, H.; TOLVER, A.; THOMSEN, M. H.; ANDERSEN, P. H. Quantification of symetry for functional data with application to equine lameness classification. **Journal of Applied Statistics**, v. 39, n. 2, p. 337–360, 2012. Citado na página 31.

STEINER, S. H.; MACKAY, R. J. Statistical Engineering: an algorithm for reducing variation in manufacturing processes. [S.l.]: Quality Press, 2005. v. 1. Citado na página 40.

STEVENS, N. Assessment and comparison of continuous measurement systems. Tese (Doutorado) — University of Waterloo, https://uwspace.uwaterloo.ca/handle/10012/8976, 12 2014. Citado nas páginas 36, 38, 39, 40, 43, 44, 45, 47, 49, 51, 52, 79, 109, 110 e 111.

STEVENS, N. T.; STEINER, S. H.; MACKAY, R. J. Assessing agreement between two measurement systems: An alternative to the limits of agreement approach. **Statistical Methods in Medical Research**, SAGE, v. 26, n. 6, p. 2487–2504, 2017. Citado nas páginas 31, 45 e 110.

VITALI, R. V.; CAIN, S. M.; MCGINNIS, R. S.; ZAFERIOU, A. M.; OJEDA, L. V.; DAVID-SON, S. P.; PERKINS, N. C. Method for estimating three-dimensional knee rotations using two inertial measurement units: Validation with a coordinate measurement machine. **Sensors**, Multidisciplinary Digital Publishing Institute, v. 17, n. 9, p. 1970, 2017. Citado na página 32.

WELLEK, S. **Testing statistical hypotheses of equivalence and noninferiority**. [S.1.]: CRC Press, 2010. Citado na página 40.

WESTGARD, J. O.; HUNT, M. R. Use and interpretation of common statistical tests in methodcomparison studies. **Clinical chemistry**, Oxford University Press, v. 19, n. 1, p. 49–57, 1973. Citado na página 39.

YANG, J.; COX, D. D.; LEE, J. S.; REN, P.; CHOI, T. Efficient bayesian hierarchical functional data analysis with basis function approximations using gaussian–wishart processes. **Biometrics**, Wiley Online Library, v. 73, n. 4, p. 1082–1091, 2017. Citado nas páginas 36, 51, 56, 110 e 111.

YANG, J.; ZHU, H.; CHOI, T.; COX, D. D. Smoothing and mean–covariance estimation of functional data with a bayesian hierarchical model. **Bayesian Analysis**, v. 11, n. 3, p. 649–670, 2016. Citado nas páginas 55 e 56.

YOO, M. Measures of Agreement in Method Comparison Studies for Intensive Longitudinal Data. Tese (Doutorado) — The Pennsylvania State University The Graduate School, https://etda.libraries.psu.edu/catalog/12131, 8 2011. Citado na página 46.

ZHU, H.; STRAWN, N.; DUNSON, D. B. Bayesian graphical models for multivariate functional data. **Journal of Machine Learning Research**, p. 1–27, 2016. Citado na página 119.

DISTRIBUIÇÕES DE PROBABILIDADE

A.1 Distribuições de Probabilidade de dimensão finita

Abaixo, descrevemos a notação e a parametrização das distribuições de probabilidade consideradas neste trabalho.

Distribuição Normal

Notação:
$$X \sim N(\mu, \sigma^2), \quad \mu \in \mathbb{R}, \ \sigma^2 > 0$$

f.d.p: $f_X(x \mid \mu, \sigma^2) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \exp\left\{-\frac{1}{2}\left(\frac{x-\mu}{\sigma}\right)^2\right\}, \quad x \in \mathbb{R}$

Distribuição Normal Truncada

Notação:
$$\mathbf{X} \sim N_{(a,b)}(\mu, \sigma^2), \quad \mu \in \mathbb{R}, \ \sigma^2 > 0, \ a < b, \ a, b \in \mathbb{R}$$

f.d.p: $f_X(x \mid \mu, \sigma^2) = \frac{1}{(\Phi(b) - \Phi(a))} \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \exp\left\{-\frac{1}{2}\left(\frac{x - \mu}{\sigma}\right)^2\right\}, \quad a < x < b$

Normal Multivariada

Notação:
$$\mathbf{X} \sim N_k(\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma}), \quad \boldsymbol{\mu}^T = (\boldsymbol{\mu}_1, \dots, \boldsymbol{\mu}_k) \in \mathbb{R}^k,$$

 $\mathbf{\Sigma} = (\Sigma_{i,j})_{k \times k} \in \mathbb{R}^{k \times k}$ matriz simétrica e positiva definida
f.d.p: $f_X(\mathbf{x} \mid \boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma}) = \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^n |\boldsymbol{\Sigma}|}} \exp\left\{-\frac{1}{2}(\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu})^T \boldsymbol{\Sigma}(\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu})\right\}, \quad \mathbf{x} \in \mathbb{R}^k.$

Gamma-Inversa

Notação:
$$X \sim gamma - inv(a,b), \quad a,b > 0$$

f.d.p: $f_X(x \mid a,b) = \frac{b^a}{\Gamma(a)} \left(\frac{1}{x}\right)^{a+1} \exp\left\{-\frac{b}{x}\right\}, x > 0$

Wishart

Notação: $X \sim W_p(\varphi, V), \ p \in \mathbb{N}, \ \varphi > p-1, \ V = (v_{i,j})_{p \times p}$ simétrica e positiva definida

f.d.p:
$$f_X(\Delta \mid p, \varphi, V) = \frac{1}{2^{\varphi p/2} \mid V \mid^{\varphi/2} \Gamma_p(\varphi/2)} \mid \Delta \mid^{(\varphi - p - 1)/2} \exp\left\{-\frac{1}{2}tr(V^{-1}\Delta)\right\},$$

 $\Delta = (\Delta_{i,j})_{p \times p}$ matriz simétrica e positiva definida,

em que Γ_p é a função Gama multivariada definida como

$$\Gamma_p\left(\frac{\varphi}{2}\right) = \pi^{p(p-1)/4} \prod_{j=1}^p \Gamma\left(\frac{\varphi}{2} - \frac{j-1}{2}\right)$$

Wishart-Inversa

Notação: $X \sim WI_p(\tau, V), \ p \in \mathbb{N}, \tau > 0, \ V = (v_{i,j})_{p \times p}$ simétrica e positiva definida,

f.d.p:
$$f_X(\Delta \mid \tau, V) = \frac{|V|^{(\tau+p-1)/2}}{2^{(\tau+p-1)p/2}\Gamma_p((\tau+p-1)/2)} |\Delta|^{-(\tau+2p)/2} \exp\left\{-\frac{1}{2}tr(V\Delta^{-1})\right\},$$
$$\Delta = (\Delta_{i,j})_{p \times p} \text{ matriz simétrica e positiva definida.}$$

A distribuição de Wishart e Wishart-Inversa (parametrizada por Dawid (1981)) satisfazem à seguinte relação:

$$X \sim W_p(\boldsymbol{\varphi}, V) \iff X^{-1} \sim WI_p(\boldsymbol{\varphi} - p + 1, V^{-1}).$$

A parametrização da distribuição Wishart Inversa dada em Dawid (1981) é vantajosa pois (i) o parâmetro τ pode variar entre os reais positivos sem nenhuma restrição com respeito ao valor da dimensão *p* e (ii) a distribuição obtida é consistente sob marginalização. Estas características facilitam a construção do Processo Wishart - Inversa, que será apresentado a seguir.

A.2 Processo Gaussiano e Wishart Inversa

A definição dada a seguir para o Processo Gaussiano (PG) se baseou em Rasmussen e Williams (2006) e Shi *et al.* (2007), que podem ser consultados para maiores detalhes acerca deste processo.

Definição 1. (Processo Gaussiano) Uma coleção de variáveis aleatórias $Y = \{Y_t, t \in \mathscr{T}\}$ indexadas por um conjunto de índices \mathscr{T} é chamada de Processo Gaussiano se para todo conjunto finito de índices $T = \{t_1, t_2, ..., t_k\} \subseteq \mathscr{T}$ o vetor aleatório $(Y_{t_1}, ..., Y_{t_k})$ tiver distribuição Normal Multivariada, isto é, as distribuições finito-dimensionais do processo são Normais multivariadas. Neste caso, a distribuição do processo é unicamente determinada por sua função média $\mu: \mathscr{T} \longrightarrow \mathbb{R}$ e sua função de covariância $\kappa: \mathscr{T} \times \mathscr{T} \longrightarrow \mathbb{R}$ definidas como

$$\begin{cases} \mu(t) = \mathbb{E}[Y(t)], & t \in \mathscr{T}, \\ \kappa(t,t^*) = \mathbb{E}[(Y(t) - \mu(t))(Y(t^*) - \mu(t^*))], & t, t^* \in \mathscr{T}. \end{cases}$$

Neste caso, usamos a notação $Y \sim PG(\mu, \kappa)$.

Definição 2. (Processo Wishart Inversa) Uma coleção de variáveis aleatórias $\Sigma = \{\Sigma(s,t); s,t \in \mathcal{T}\}$ indexadas por um conjunto de índices da forma \mathcal{T}^2 é um Processo Wishart Inversa com parâmetros $\tau > 0$ e $\Delta : \mathcal{T} \times \mathcal{T} \longrightarrow \mathbb{R}$, um kernel simétrico e positivo definido, caso para qualquer vetor $\mathbf{t} = (t_1, \ldots, t_p) \in \mathcal{T}^p$ tivermos que $\Sigma(\mathbf{t}, \mathbf{t}) \sim WI_p(\tau, \Delta(\mathbf{t}, \mathbf{t}))$, em que

$$\Sigma(\mathbf{t}, \mathbf{t}) = (\Sigma(t_i, t_j))_{p \times p},$$
$$\Delta(\mathbf{t}, \mathbf{t}) = (\Delta(t_i, t_j))_{p \times p}.$$

Neste caso, denotamos por $\Sigma \sim PWI(\tau, \Delta)$.

Em particular, podemos considerar o caso $\mathscr{T} = \mathbb{N}$. O Lema a seguir garante a existência de um Processo Wishart Inversa sob certas condições. A prova deste resultado pode ser consultada em Zhu, Strawn e Dunson (2016).

Lema: Seja $\mathbb{N} = \{1, 2, ..., \}$ o conjunto dos números naturais, $\delta > 4$ um número natural e $u : \mathbb{N} \times \mathbb{N} \longrightarrow \mathbb{R}$ um kernel simétrico, positivo semi-definido tal que a matriz $U_{I \times I} = (u(i, j) :$ $i, j \in I)$ é simétrica e positiva semi-definida para todo $I \subset \mathbb{N}$ finito. Então, existe uma única medida de probabilidade μ sobre $(\mathbb{R}^{\mathbb{N} \times \mathbb{N}}, \mathscr{B}(\mathbb{R}^{\mathbb{N} \times \mathbb{N}}))$ tal que

- (i) Para todo *I* ⊂ N, μ(π⁻¹_{I×I}(A)) = μ_{I×I}(A), para todo A ∈ 𝔅(ℝ^{I×I}), em que μ_{I×I} é a medida dada pela distribuição WI_p(τ, U_{I×I}), sendo p = |I| o número de elementos de I;
- (ii) Se $B = \{(\alpha_i, \beta_i) : i = 1, ..., n\} \subseteq \mathbb{N} \times \mathbb{N}$ e $g = \{\alpha_1, ..., \alpha_n, \beta_1, ..., \beta_n\} \subset \mathbb{N}$, então $\mu(\pi_B^{-1}(A)) = \mu_{g \times g}(\pi_{g \times g, B}^{-1}(A))$ para todo $A \in \mathscr{B}(\mathbb{R}^B)$,

em que $\pi_B : \mathbb{R}^{\mathbb{N} \times \mathbb{N}} \longrightarrow \mathbb{R}^B$, $B \subset \mathbb{N} \times \mathbb{N}$, é a projeção coordenada de $\mathbb{R}^{\mathbb{N} \times \mathbb{N}}$ em \mathbb{R}^B , enquanto $\pi_{B_1, B_2} : \mathbb{R}^{B_1} \longrightarrow \mathbb{R}^{B_2}$ é a projeção coordenada de \mathbb{R}^{B_1} em \mathbb{R}^{B_2} , em que $B_2 \subset B_1 \subset \mathbb{N} \times \mathbb{N}$.

O resultado acima garante a existência de um processo estocástico $\Sigma = {\Sigma(i, j) : i, j \in \mathbb{N}}$ com distribuição μ , que denotaremos por $\Sigma \sim PWI(\delta, u)$, que satisfaz

$$\Sigma(I,I) \sim WI_p(\delta, U_{I\times I}),$$

em que p = |I| e $\Sigma(I, I) = (\Sigma(i, j) : i, j \in I)_{p \times p}$.

ANEXO

CÁLCULO DAS POSTERIORES DO MODELO BFGP

Apresentamos aqui o cálculo das posteriores do modelo hierárquico BFGP do Capítulo 3. Para a construção utilizamos as relações apresentadas no Anexo A.

Trabalhamos na prática com o modelo (3.15)

$$\begin{cases} \mathbf{Y}_{\mathbf{ij}} \mid \boldsymbol{\beta}_{\mathbf{i}}, \sigma_{1}^{2} \stackrel{iid}{\sim} N_{n_{ij}} \left(\Phi_{ij} \boldsymbol{\beta}_{\mathbf{i}}, \sigma_{1}^{2} K_{1ij} \right) \\ \mathbf{Z}_{\mathbf{ij}} \mid \boldsymbol{\beta}_{\mathbf{i}}, \boldsymbol{\gamma}, C, \sigma_{2}^{2} \stackrel{iid}{\sim} N_{n_{ij}} \left(\Phi_{ij} \left(C \boldsymbol{\beta}_{\mathbf{i}} + \boldsymbol{\gamma} \right), \sigma_{2}^{2} K_{2ij} \right) \\ \boldsymbol{\beta}_{\mathbf{i}} \mid \boldsymbol{\zeta}, B \stackrel{iid}{\sim} N_{M+1} (\boldsymbol{\zeta}, B) \\ \boldsymbol{\gamma} \sim N_{M+1} (\boldsymbol{\xi}, H) & i = 1, \cdots, P \\ C \sim N_{[0,\infty)} (\boldsymbol{\omega}, \sigma_{C}^{2}) &, j = 1, \cdots, Q_{i} \\ \sigma_{1}^{2} \sim gamma - inv(a_{1}, b_{1}) \\ \sigma_{2}^{2} \sim gamma - inv(a_{2}, b_{2}) \\ \boldsymbol{\zeta} \mid B \sim N_{M+1} (\boldsymbol{\eta}, d^{-1}B) \\ B \sim WI_{M+1} (\boldsymbol{\tau}, \boldsymbol{\Sigma}) \end{cases}$$

cuja definição de cada matriz e vetor pode ser encontrada no capítulo 3 e $W_{ij} = [\mathbf{Y}_{ij}, \mathbf{Z}_{ij}]$.

Nas demonstrações a seguir, entenda "..." como os demais parâmetros do modelo, $\boldsymbol{\theta}$ como todos os parâmetros e $\{W_{ij}\} = \{W_{11}, \dots, W_{1Q_i}, \dots, W_{P1}, \dots, W_{PQ_P}\}.$

 $\bullet \pi(\boldsymbol{\beta}_i \mid ..., \{W_{ij}\})$

$$\begin{split} \pi(\pmb{\beta}_{i} \mid ..., \{W_{ij}\}) & \approx \prod_{i=1}^{p} \prod_{j=1}^{Q_{i}} f(W_{ij} \mid \pmb{\theta}) \pi(\pmb{\beta}_{i} \mid \pmb{\zeta}, B) \propto \\ & \propto \prod_{j=1}^{p} \prod_{i=1}^{Q_{i}} f(\mathbf{Y}_{ij} \mid \pmb{\theta}) f(\mathbf{Z}_{ij} \mid \pmb{\theta}) \pi(\pmb{\beta}_{i} \mid \pmb{\zeta}, B) \propto \\ & \propto \prod_{j=1}^{Q} \exp\left\{-\frac{1}{2} (\mathbf{Y}_{ij} - \Phi_{ij} \pmb{\beta}_{i})^{T} (\sigma_{i}^{2} \mathbf{x}_{1ij})^{-1} \} (\mathbf{Y}_{ij} - \Phi_{ij} \pmb{\beta}_{i}) \right\} \times \\ & \prod_{j=1}^{Q_{i}} \exp\left\{-\frac{1}{2} (\mathbf{Z}_{ij} - \Phi_{ij} (C \pmb{\beta}_{i} + \pmb{\gamma}))^{T} (\sigma_{2}^{2} \mathbf{X}_{2ij})^{-1} \} (\mathbf{Z}_{ij} - \Phi_{ij} (C \pmb{\beta}_{i} + \pmb{\gamma})) \right\} \times \\ & \exp\left\{-\frac{1}{2} (\pmb{\beta}_{i} - \pmb{\zeta})^{T} B^{-1} (\pmb{\beta}_{i} - \pmb{\zeta}) \right\} \propto \\ & \exp\left\{-\frac{1}{2} \sum_{j=1}^{Q_{i}} \frac{1}{\sigma_{i}^{2}} \left(\mathbf{Y}_{ij}^{T} \mathbf{K}_{1j}^{-1} \mathbf{Y}_{ij} - 2 \pmb{\beta}_{i}^{T} \Phi_{ij}^{T} \mathbf{K}_{1j}^{-1} \mathbf{Y}_{ij} + \pmb{\beta}_{i}^{T} \Phi_{ij}^{T} \mathbf{K}_{1j}^{-1} \Phi_{ij} \pmb{\beta}_{i}) \right\} \times \\ & \exp\left\{-\frac{1}{2} \sum_{j=1}^{Q_{i}} \frac{1}{\sigma_{i}^{2}} \left((\mathbf{Z}_{ij} - \Phi_{ij} \pmb{\gamma})^{T} \mathbf{K}_{2ij}^{-1} (\mathbf{Z}_{ij} - \Phi_{ij} \pmb{\gamma}) \right) \\ & -2 \boldsymbol{\beta}_{i}^{T} C \Phi_{ij}^{T} \mathbf{K}_{2ij}^{-1} (\mathbf{Z}_{ij} - \Phi_{ij} \pmb{\gamma})^{T} \mathbf{K}_{2ij}^{-1} \mathbf{K}_{1i} \mathbf{Y}_{ij} + \mathbf{\beta}_{i}^{T} \Phi_{ij}^{T} \mathbf{K}_{2ij}^{-1} \Phi_{ij} \pmb{\beta}_{i}) \right\} \times \\ & \exp\left\{-\frac{1}{2} \sum_{j=1}^{Q_{i}} \frac{1}{\sigma_{i}^{2}} \left((\mathbf{Z}_{ij} - \Phi_{ij} \pmb{\gamma})^{T} \mathbf{K}_{2ij}^{-1} (\mathbf{Z}_{ij} - \Phi_{ij} \pmb{\gamma}) \right\} \\ & \exp\left\{-\frac{1}{2} \left(\boldsymbol{\beta}_{i}^{T} B^{-1} \pmb{\beta}_{i} - 2 \boldsymbol{\beta}_{i}^{T} B^{-1} \pmb{\zeta} + \boldsymbol{\zeta}^{T} B^{-1} \pmb{\zeta} \right) \right\} \times \\ & \exp\left\{-\frac{1}{2} \left(\boldsymbol{\beta}_{i}^{T} B^{-1} \pmb{\beta}_{i} - 2 \boldsymbol{\beta}_{i}^{T} B^{-1} \pmb{\zeta}_{i} \right) \right\} \times \\ & \exp\left\{-\frac{1}{2} \left(\frac{D_{i}}{2} \frac{1}{\sigma_{i}^{2}} \left((-2 \boldsymbol{\beta}_{i}^{T} \Phi_{ij}^{T} \mathbf{K}_{2ij}^{-1} (\mathbf{Z}_{ij} - \Phi_{ij} \pmb{\gamma}) \right) - 2 \boldsymbol{\beta}_{i}^{T} B^{-1} \pmb{\zeta} \right) \right\} \times \\ & \exp\left\{-\frac{1}{2} \left(\frac{D_{i}}{2} \frac{1}{\sigma_{i}^{2}} \left(\frac{1}{\sigma_{i}^{2}} \Phi_{ij}^{T} \mathbf{K}_{2ij}^{-1} \mathbf{K}_{ij}^{-1} \mathbf{K}_{ij}^{-1} \Phi_{ij} \pmb{\beta}_{i} \right) \right\} \times \\ \\ & \exp\left\{-\frac{1}{2} \left(\frac{D_{i}}{i} \mathbf{K}_{i}^{-1} \mathbf{\beta}_{i}^{T} \mathbf{K}_{ij}^{-1} \mathbf{K}_{ij}^{$$

esse é o núcleo da normal multivariada $N_{M+1}(\mu, V)$ em que

$$\begin{cases} V^{-1} = \sum_{j=1}^{Q_i} \left[\Phi_{ij}^T \left(\frac{1}{\sigma_1^2} K_{1ij}^{-1} + \frac{C^2}{\sigma_2^2} K_{2ij}^{-1} \right) \Phi_{ij} \right] + B^{-1} \\ \mu = V \left\{ B^{-1} \boldsymbol{\zeta} + \sum_{j=1}^{Q_i} \left[\Phi_{ij}^T \left(\frac{1}{\sigma_1^2} K_{1ij}^{-1} \boldsymbol{Y}_{ij} + \frac{C}{\sigma_2^2} K_{2ij}^{-1} (\boldsymbol{Z}_{ij} - \Phi_{ij} \boldsymbol{\gamma}) \right) \right] \right\} \end{cases}$$

 $\bullet \pi(\boldsymbol{\gamma} \mid ..., \{W_{ij}\})$

$$\begin{split} \pi(\mathbf{\gamma} \mid ..., \{W_{ij}\}) &\propto \prod_{i=1}^{p} \prod_{j=1}^{Q_i} f(W_{ij} \mid \boldsymbol{\theta}) \pi(\mathbf{\gamma}) \propto \\ &\propto \prod_{i=1}^{p} \prod_{j=1}^{Q_i} f(\mathbf{Z}_{ij} \mid \boldsymbol{\theta}) \pi(\mathbf{\gamma}) \propto \\ &\propto \prod_{i=1}^{p} \prod_{j=1}^{Q_i} \exp\left\{-\frac{1}{2}(\mathbf{Z}_{ij} - \Phi_{ij}(C\boldsymbol{\beta}_i + \mathbf{\gamma}))^T (\sigma_2^2 K_{2ij})^{-1} (\mathbf{Z}_{ij} - \Phi_{ij}(C\boldsymbol{\beta}_i + \mathbf{\gamma}))\right\} \times \\ &\exp\left\{(\mathbf{\gamma} - \boldsymbol{\xi})^T H^{-1} (\mathbf{\gamma} - \boldsymbol{\xi})\right\} \propto \\ &\propto \prod_{i=1}^{p} \prod_{j=1}^{Q_i} \exp\left\{-\frac{1}{2} \frac{1}{\sigma_2^2} \left[(\mathbf{Z}_{ij} - C\Phi_{ij}\boldsymbol{\beta}_i)^T K_{2ij}^{-1} (\mathbf{Z}_{ij} - C\Phi_{ij}\boldsymbol{\beta}_i) - 2\mathbf{\gamma}^T \Phi_{ij}^T K_{2ij}^{-1} (\mathbf{Z}_{ij} - C\Phi_{ij}\boldsymbol{\beta}_i) + \mathbf{\gamma}^T \Phi_{ij}^T K_{2ij}^{-1} \Phi_{ij}\mathbf{\gamma}\right]\right\} \times \\ &\exp\left\{-\frac{1}{2} \left(\mathbf{\gamma}^T H^{-1} \mathbf{\gamma} - 2\mathbf{\gamma}^T H^{-1} \boldsymbol{\xi} + \boldsymbol{\xi}^T H^{-1} \boldsymbol{\xi}\right)\right\} \\ &\propto \prod_{i=1}^{p} \prod_{j=1}^{Q_i} \exp\left\{-\frac{1}{2} \frac{1}{\sigma_2^2} \left[-2\mathbf{\gamma}^T \Phi_{ij}^T K_{2ij}^{-1} (\mathbf{Z}_{ij} - C\Phi_{ij}\boldsymbol{\beta}_i) + \mathbf{\gamma}^T \Phi_{ij}^T K_{2ij}^{-1} \Phi_{ij}^T \mathbf{\gamma}\right]\right\} \times \\ &\exp\left\{-\frac{1}{2} \left(\mathbf{\gamma}^T H^{-1} \mathbf{\gamma} - 2\mathbf{\gamma}^T H^{-1} \boldsymbol{\xi}\right)\right\} \\ &\propto \exp\left\{-\frac{1}{2} \frac{1}{\sigma_2^2} \left[-2\mathbf{\gamma}^T \left(\sum_{i=1}^{p} \sum_{j=1}^{Q_i} \Phi_{ij}^T K_{2ij}^{-1} (\mathbf{Z}_{ij} - C\Phi_{ij}\boldsymbol{\beta}_i)\right) + \right. \\ &+ \mathbf{\gamma}^T \left(\sum_{i=1}^{p} \sum_{j=1}^{Q_i} \Phi_{ij}^T K_{2ij}^{-1} \Phi_{ij}\right)\mathbf{\gamma}\right]\right\} \times \exp\left\{-\frac{1}{2} \left(\mathbf{\gamma}^T H^{-1} \mathbf{\gamma} - 2\mathbf{\gamma}^T H^{-1} \boldsymbol{\xi}\right)\right\} \\ &\propto \exp\left\{-\frac{1}{2} \left[-2\mathbf{\gamma}^T \left(\left(\sum_{i=1}^{p} \sum_{j=1}^{Q_i} \Phi_{ij}^T K_{2ij}^{-1} (\mathbf{Z}_{ij} - C\Phi_{ij}\boldsymbol{\beta}_i)\right) + H^{-1} \mathbf{\xi}\right)\right\} \\ &\propto \exp\left\{-\frac{1}{2} \left[-2\mathbf{\gamma}^T \left(\left(\sum_{i=1}^{p} \sum_{j=1}^{Q_i} \Phi_{ij}^T K_{2ij}^{-1} (\mathbf{Z}_{ij} - C\Phi_{ij}\boldsymbol{\beta}_i)\right) + H^{-1} \mathbf{\xi}\right)\right\} \\ &\propto \exp\left\{-\frac{1}{2} \left[-2\mathbf{\gamma}^T \left(\left(\sum_{i=1}^{p} \sum_{j=1}^{Q_i} \Phi_{ij}^T K_{2ij}^{-1} (\mathbf{Z}_{ij} - C\Phi_{ij}\boldsymbol{\beta}_i)\right) + H^{-1} \mathbf{\xi}\right)\right\}$$

esse é o núcleo da normal multivariada $N_{M+1}(\mu, V)$ em que

$$\begin{cases} V^{-1} = \left(\sum_{i=1}^{P} \sum_{j=1}^{Q_{i}} \frac{1}{\sigma_{2}^{2}} \Phi_{ij}^{T} K_{2ij}^{-1} \Phi_{ij}\right) + H^{-1} \\ \mu = V \left[\left(\sum_{i=1}^{P} \sum_{j=1}^{Q_{i}} \frac{1}{\sigma_{2}^{2}} \Phi_{ij}^{T} K_{2ij}^{-1} (\mathbf{Z}_{ij} - C \Phi_{ij} \boldsymbol{\beta}_{i}) \right) + H^{-1} \boldsymbol{\xi} \right] \end{cases}$$

$$\bullet \pi(C \mid ..., \{W_{ij}\})$$

esse é o núcleo da normal truncada $N_{[0,\infty)}(\omega^*,\sigma_C^{2^*})$ em que

$$\begin{cases} \frac{1}{\sigma_C^{2^*}} = \left(\sum_{i=1}^P \sum_{j=1}^{Q_i} \frac{1}{\sigma_2^2} \boldsymbol{\beta}_i^T \Phi_{ij}^T K_{1ij}^2 \Phi_{ij} \boldsymbol{\beta}_i\right) + \frac{1}{\sigma_C^2} \\ \boldsymbol{\omega}^* = \sigma_C^{2^*} \left(\left(\sum_{i=1}^P \sum_{j=1}^{Q_i} \frac{1}{\sigma_2^2} \boldsymbol{\beta}_i^T \Phi_{ij}^T K_{2ij}^{-1} (\boldsymbol{Z}_{ij} - \Phi_{ij} \boldsymbol{\gamma})\right) + \frac{\boldsymbol{\omega}}{\sigma_C^2}\right) \end{cases}$$

 $\bullet \pi(\sigma_1^2 \mid ..., \{W_{ij}\})$

$$\begin{aligned} \pi(\sigma_{1}^{2} \mid ..., \{W_{ij}\}) &\propto \prod_{i=1}^{p} \prod_{j=1}^{Q_{i}} f(W_{ij} \mid \boldsymbol{\theta}) \pi(\sigma_{1}^{2}) \propto \\ &\propto \prod_{i=1}^{p} \prod_{j=1}^{Q_{i}} f(\boldsymbol{Y}_{ij} \mid \boldsymbol{\theta}) \pi(\sigma_{1}^{2}) \propto \\ &\propto \prod_{i=1}^{p} \prod_{j=1}^{Q_{i}} |\sigma_{1}^{2} K_{1ij}|^{-1/2} \exp\left\{-\frac{1}{2} (\boldsymbol{Y}_{ij} - \Phi_{ij}\boldsymbol{\beta}_{i})^{T} (\sigma_{1}^{2} K_{1ij}^{-1} (\boldsymbol{Y}_{ij} - \Phi_{ij}\boldsymbol{\beta}_{i})\right\} \times \\ &\left(\frac{1}{\sigma_{1}^{2}}\right)^{a_{i}+1} \exp\left\{-\frac{b_{1}}{\sigma_{1}^{2}}\right\} \propto \\ &\propto \prod_{i=1}^{p} \prod_{j=1}^{Q_{i}} (\sigma_{1}^{2})^{-n_{ij}/2} \exp\left\{-\frac{1}{\sigma_{1}^{2}} \frac{1}{2} (\boldsymbol{Y}_{ij} - \Phi_{ij}\boldsymbol{\beta}_{i})^{T} (K_{1ij}^{-1} (\boldsymbol{Y}_{ij} - \Phi_{ij}\boldsymbol{\beta}_{i})\right\} \times \\ &\left(\frac{1}{\sigma_{1}^{2}}\right)^{a_{i}+1} \exp\left\{-\frac{b_{1}}{\sigma_{1}^{2}}\right\} \propto \\ &\propto \left(\frac{1}{\sigma_{1}^{2}}\right)^{\sum_{i=1}^{p} \sum_{j=1}^{Q_{i}} n_{ij}/2} \left(\frac{1}{\sigma_{1}^{2}}\right)^{a_{i}+1} \times \\ &\exp\left\{-\frac{1}{\sigma_{1}^{2}} \left[b_{1} + \frac{1}{2} (\boldsymbol{Y}_{ij} - \Phi_{ij}\boldsymbol{\beta}_{i})^{T} (K_{1ij}^{-1} (\boldsymbol{Y}_{ij} - \Phi_{ij}\boldsymbol{\beta}_{i})\right]\right\} \propto \\ &\propto \left(\frac{1}{\sigma_{1}^{2}}\right)^{a_{i}+1} \sum_{i=1}^{p} \sum_{j=1}^{Q_{i}} n_{ij}/2} \exp\left\{-\frac{1}{\sigma_{1}^{2}} \left[b_{1} + \frac{1}{2} (\boldsymbol{Y}_{ij} - \Phi_{ij}\boldsymbol{\beta}_{i})^{T} (K_{1ij}^{-1} (\boldsymbol{Y}_{ij} - \Phi_{ij}\boldsymbol{\beta}_{i})\right]\right\} \end{aligned}$$

esse é o núcleo da gamma - inversa $gamma - inv(a_1^*, b_1^*)$ em que

$$\begin{cases} a_1^* = a_1 + \sum_{i=1}^{P} \sum_{j=1}^{Q_i} \frac{n_{ij}}{2} \\ b_1^* = b_1 + \frac{1}{2} (\mathbf{Y}_{ij} - \Phi_{ij} \boldsymbol{\beta}_i)^T (K_{1ij}^{-1} (\mathbf{Y}_{ij} - \Phi_{ij} \boldsymbol{\beta}_i) \end{cases}$$

$$\bullet\pi(\sigma_2^2 \mid ..., \{W_{ij}\})$$

$$\begin{split} \pi(\sigma_{2}^{2} \mid ..., \{W_{ij}\}) &\propto \prod_{i=1}^{p} \prod_{j=1}^{Q_{i}} f(W_{ij} \mid \boldsymbol{\theta}) \pi(\sigma_{2}^{2}) \propto \\ &\propto \prod_{i=1}^{p} \prod_{j=1}^{Q_{i}} f(\mathbf{Z}_{ij} \mid \boldsymbol{\theta}) \pi(\sigma_{2}^{2}) \\ &\propto \prod_{i=1}^{p} \prod_{j=1}^{Q_{i}} \mid \sigma_{2}^{2} K_{2ij} \mid^{-1/2} \exp\left\{-\frac{1}{2} (\mathbf{Z}_{ij} - \Phi_{ij}(C\boldsymbol{\beta}_{i} + \boldsymbol{\gamma}))^{T} (\sigma_{2}^{2} K_{2ij}^{-1} (\mathbf{Z}_{ij} - \Phi_{ij}(C\boldsymbol{\beta}_{i} + \boldsymbol{\gamma}))\right\} \times \\ &\left(\frac{1}{\sigma_{2}^{2}}\right)^{a_{2}+1} \exp\left\{-\frac{b_{2}}{\sigma_{2}^{2}}\right\} \propto \\ &\propto \prod_{i=1}^{p} \prod_{j=1}^{Q_{i}} (\sigma_{2}^{2})^{-n_{ij}/2} \exp\left\{-\frac{1}{\sigma_{2}^{2}} \frac{1}{2} (\mathbf{Z}_{ij} - \Phi_{ij}(C\boldsymbol{\beta}_{i} + \boldsymbol{\gamma}))^{T} (K_{2ij}^{-1} (\mathbf{Z}_{ij} - \Phi_{ij}(C\boldsymbol{\beta}_{i} + \boldsymbol{\gamma}))\right\} \times \\ &\left(\frac{1}{\sigma_{2}^{2}}\right)^{a_{2}+1} \exp\left\{-\frac{b_{2}}{\sigma_{2}^{2}}\right\} \propto \\ &\propto \left(\frac{1}{\sigma_{2}^{2}}\right)^{\sum_{i=1}^{p} \sum_{j=1}^{Q_{i}} n_{ij}/2} \left(\frac{1}{\sigma_{2}^{2}}\right)^{a_{2}+1} \times \\ &\exp\left\{-\frac{1}{\sigma_{2}^{2}} \left[b_{2} + \frac{1}{2} (\mathbf{Z}_{ij} - \Phi_{ij}(C\boldsymbol{\beta}_{i} + \boldsymbol{\gamma}))^{T} (K_{2ij}^{-1} (\mathbf{Z}_{ij} - \Phi_{ij}(C\boldsymbol{\beta}_{i} + \boldsymbol{\gamma}))\right]\right\} \propto \\ &\propto \left(\frac{1}{\sigma_{2}^{2}}\right)^{a_{2}+1+\sum_{i=1}^{p} \sum_{j=1}^{Q_{i}} n_{ij}/2} \times \\ &\exp\left\{-\frac{1}{\sigma_{2}^{2}} \left[b_{2} + \frac{1}{2} (\mathbf{Z}_{ij} - \Phi_{ij}(C\boldsymbol{\beta}_{i} + \boldsymbol{\gamma}))^{T} (K_{2ij}^{-1} (\mathbf{Z}_{ij} - \Phi_{ij}(C\boldsymbol{\beta}_{i} + \boldsymbol{\gamma}))\right]\right\} \end{split}$$

esse é o núcleo da gamma - inversa $gamma - inv(a_2^*, b_2^*)$ em que

$$\begin{cases} a_{2}^{*} = a_{2} + \sum_{i=1}^{P} \sum_{j=1}^{Q_{i}} \frac{n_{ij}}{2} \\ b_{2}^{*} = b_{2} + \frac{1}{2} (\mathbf{Z}_{ij} - \Phi_{ij} (C \boldsymbol{\beta}_{i} + \boldsymbol{\gamma}))^{T} (K_{1ij}^{-1} (\mathbf{Z}_{ij} - \Phi_{ij} (C \boldsymbol{\beta}_{i} + \boldsymbol{\gamma})) \end{cases} \end{cases}$$

$$\pi(\boldsymbol{\zeta} \mid ..., \{W_{ij}\}) \propto \prod_{i=1}^{P} f(\boldsymbol{\beta}_{i} \mid \boldsymbol{\zeta}, B) \pi(\boldsymbol{\zeta} \mid B) \propto$$

$$\propto \prod_{i=1}^{P} \exp\left\{-\frac{1}{2}(\boldsymbol{\beta}_{i} - \boldsymbol{\zeta})^{T} B^{-1}(\boldsymbol{\beta}_{i} - \boldsymbol{\zeta})\right\} \exp\left\{-\frac{1}{2}(\boldsymbol{\zeta} - \boldsymbol{\eta})^{T} (d^{-1}B)^{-1}(\boldsymbol{\zeta} - \boldsymbol{\eta})\right\} \propto$$

$$\propto \exp\left\{-\frac{1}{2}\left[\sum_{i=1}^{P} \left(\boldsymbol{\beta}_{i}^{T} B^{-1} \boldsymbol{\beta}_{i} - 2\boldsymbol{\zeta}^{T} B^{-1} \boldsymbol{\beta}_{i} + \boldsymbol{\zeta}_{i} B^{-1} \boldsymbol{\zeta}_{i}\right)\right]\right\} \times$$

$$\exp\left\{-\frac{1}{2}d\left(\boldsymbol{\zeta}^{T} B^{-1} \boldsymbol{\zeta} - 2\boldsymbol{\zeta}^{T} B^{-1} \boldsymbol{\eta} + \boldsymbol{\eta} B^{-1} \boldsymbol{\eta}\right)\right\} \propto$$

$$\propto \exp\left\{-\frac{1}{2}\left(-2\boldsymbol{\zeta}^{T} B^{-1} \sum_{i=1}^{P} \boldsymbol{\beta}_{i} - 2d\boldsymbol{\zeta}^{T} B^{-1} \boldsymbol{\eta} + P\boldsymbol{\zeta}^{T} B^{-1} \boldsymbol{\zeta} + d\boldsymbol{\zeta}^{T} B^{-1} \boldsymbol{\zeta}\right)\right\} \propto$$

$$\propto \exp\left\{-\frac{1}{2}\left[-2\boldsymbol{\zeta}^{T} B^{-1} \left(\sum_{i=1}^{P} \boldsymbol{\beta}_{i} + d\boldsymbol{\eta}\right) + \boldsymbol{\zeta}^{T} \left(PB^{-1} + dB^{-1}\right)\boldsymbol{\zeta}\right]\right\}$$

esse é o núcleo da normal multivariada $N_{M+1}(\mu, V)$ em que

$$\begin{cases} V^{-1} = PB^{-1} + dB^{-1} = (P+d)B^{-1} \Rightarrow V = \frac{1}{P+d}B\\ \mu = VB^{-1}\left(\sum_{i=1}^{P} \boldsymbol{\beta}_{i} + d\boldsymbol{\eta}\right) = \frac{1}{P+d}\left(\sum_{i=1}^{P} \boldsymbol{\beta}_{i} + d\boldsymbol{\eta}\right) \end{cases}$$

 $\bullet \pi(B \mid ..., \{W_{ij}\})$

$$\begin{split} \pi(B \mid ..., \{W_{ij}\}) &\propto \prod_{i=1}^{p} f(\boldsymbol{\beta}_{i} \mid \boldsymbol{\zeta}, B) \pi(\boldsymbol{\zeta} \mid B) \pi(B) \propto \\ &\propto \prod_{i=1}^{p} \mid B \mid^{-1/2} \exp\left\{-\frac{1}{2}(\boldsymbol{\beta}_{i} - \boldsymbol{\zeta})^{T} B^{-1}(\boldsymbol{\beta}_{i} - \boldsymbol{\zeta})\right\} \times \\ &\mid d^{-1}B \mid^{-1/2} \exp\left\{-\frac{1}{2}(\boldsymbol{\zeta} - \boldsymbol{\eta})^{T}(d^{-1}B)^{-1}(\boldsymbol{\zeta} - \boldsymbol{\eta})\right\} \times \\ &\mid B \mid^{-((\varphi - M) + (M+1) + 1)/2} \exp\left\{-\frac{1}{2}tr(\Sigma B^{-1})\right\} \propto \\ &\propto \mid B \mid^{-p/2} \exp\left\{\sum_{i=1}^{p} \frac{1}{2}(\boldsymbol{\beta}_{i} - \boldsymbol{\zeta})^{T} B^{-1}(\boldsymbol{\beta}_{i} - \boldsymbol{\zeta})\right\} \times \\ &\mid B \mid^{-1/2} \exp\left\{\frac{1}{2}d(\boldsymbol{\zeta} - \boldsymbol{\eta})^{T} B^{-1}(\boldsymbol{\zeta} - \boldsymbol{\eta})\right\} \times \\ &\mid B \mid^{-(\tau + 2M)/2} \exp\left\{-\frac{1}{2}tr(\Sigma B^{-1})\right\} \\ &\propto \mid B \mid^{-(\tau + P + 1 + 2M)/2} \exp\left\{tr\left(\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{p} (\boldsymbol{\beta}_{i} - \boldsymbol{\zeta})^{T} B^{-1}(\boldsymbol{\beta}_{i} - \boldsymbol{\zeta})\right)\right\} \times \\ &\exp\left\{\frac{1}{2}tr(d(\boldsymbol{\zeta} - \boldsymbol{\eta})^{T} B^{-1}(\boldsymbol{\zeta} - \boldsymbol{\eta}))\right\} \exp\left\{-\frac{1}{2}tr(\Sigma B^{-1})\right\} \\ &\propto \mid B \mid^{-(\tau + P + 1 + 2M)/2} \times \\ &\exp\left\{\frac{1}{2}tr\left(\sum_{i=1}^{p} [(\boldsymbol{\beta}_{i} - \boldsymbol{\zeta})(\boldsymbol{\beta}_{i} - \boldsymbol{\zeta})^{T} B^{-1}] + d(\boldsymbol{\zeta} - \boldsymbol{\eta})(\boldsymbol{\zeta} - \boldsymbol{\eta})^{T} B^{-1} + \Sigma B^{-1}\right)\right\} \\ &\propto \mid B \mid^{-(\tau + P + 1 + 2M)/2} \times \\ &\exp\left\{\frac{1}{2}tr\left(\sum_{i=1}^{p} ((\boldsymbol{\beta}_{i} - \boldsymbol{\zeta})(\boldsymbol{\beta}_{i} - \boldsymbol{\zeta})^{T} B^{-1}] + d(\boldsymbol{\zeta} - \boldsymbol{\eta})(\boldsymbol{\zeta} - \boldsymbol{\eta}) + \Sigma\right] B^{-1}\right)\right\} \end{split}$$

esse é o núcleo da Wishart - Inversa $WI_p(\tau + P + 1, \Sigma^*)$ em que

$$\Sigma^* = \Sigma + \sum_{i=1}^{P} \left((\boldsymbol{\beta}_i - \boldsymbol{\zeta}) (\boldsymbol{\beta}_i - \boldsymbol{\zeta})^T \right) + d(\boldsymbol{\zeta}_i - \boldsymbol{\eta}) (\boldsymbol{\zeta}_i - \boldsymbol{\eta})^T$$