

PEDRO LUIZ COELHO RODRIGUES

**Algoritmos para inferência de conectividade neural
em potenciais evento-relacionados**

São Paulo
2016

PEDRO LUIZ COELHO RODRIGUES

**Algoritmos para inferência de conectividade neural
em potenciais evento-relacionados**

Dissertação apresentada à Escola Politécnica
da Universidade de São Paulo para obtenção
do título de Mestre em Ciências.

São Paulo
2016

PEDRO LUIZ COELHO RODRIGUES

Algoritmos para inferência de conectividade neural em potenciais evento-relacionados

Dissertação apresentada à Escola Politécnica
da Universidade de São Paulo para obtenção
do título de Mestre em Ciências.

Área de Concentração: Sistemas Eletrônicos

Orientador: Prof. Dr. Luiz Antonio Baccalá

São Paulo

2016

Catálogo-na-publicação

Rodrigues, Pedro Luiz Coelho
Algoritmos para inferência de conectividade neural em potenciais
evento-relacionados / P. L. C. Rodrigues -- São Paulo, 2016.
155 p.

Dissertação (Mestrado) - Escola Politécnica da Universidade de São
Paulo. Departamento de Engenharia de Telecomunicações e Controle.

1.Processamento de sinais 2.Sinais Biomédicos 3.Potenciais evocados
I.Universidade de São Paulo. Escola Politécnica. Departamento de
Engenharia de Telecomunicações e Controle II.t.

Aos meus pais

AGRADECIMENTOS

Terminar esta dissertação é uma enorme vitória pessoal, fruto de muito esforço, dedicação e paixão pelos estudos. No entanto, eu não teria chegado a lugar nenhum sem que diversas pessoas me ajudassem a percorrer este caminho. Agora é o momento de agradecê-las.

Começo agradecendo ao professor Luiz Antonio Baccalá, meu orientador. Agradeço por todas as conversas, sobre assuntos técnicos ou não, e toda a ajuda, em assuntos técnicos ou não. Não houve nenhuma ocasião que eu tenha ido à sua sala com uma dúvida e tenha saído insatisfeito com a resposta. Agradeço, também, por ter me mostrado muitos temas interessantes de pesquisa e nunca impedido que eu explorasse coisas que achasse interessante, fossem elas pertinentes ou não ao tema da minha dissertação.

Este trabalho não teria sido fácil se feito sozinho, por isso, agradeço a companhia, a ajuda, as risadas, as caronas e os conselhos dos outros alunos de pós graduação que frequentaram a sala D3-18 comigo ao longo destes dois anos: Lucas, Diana e Flávio. Espero que nossas batalhas pela soberania do ar-condicionado se tornem boas lembranças e que possamos rir delas no futuro.

Agradeço, também, a quem esteve comigo fora da universidade, garantindo que eu tivesse uma vida muito feliz além dos livros e contas. Agradeço aos meus pais, Lique e Márcia, que me apoiaram em todos os momentos, não só neste mestrado mas desde o meu primeiro minuto de vida, minha irmã, Sofia, pelo amor incondicional e pelas risadas e histórias contadas na velocidade da luz em cada noite de sexta-feira, e a Camila, por me acompanhar de perto ao longo desta jornada e pelas muitas aventuras que tivemos e ainda teremos.

Por fim, agradeço ao programa de pós-graduação em engenharia elétrica da EPUSP (PPGEE) por me acolher como aluno e ao CNPq pelo suporte financeiro ao longo deste trabalho.

RESUMO

Esta dissertação apresenta o desenvolvimento, a validação e a aplicação de algoritmos para inferência de conectividade neural em registros de EEG contendo potenciais evento-relacionados (ERP). Os sinais foram caracterizados via modelos auto-regressivos multivariados (MVAR) e empregou-se a coerência parcial direcionada (PDC) no estudo das relações de causalidade entre eles. Certas características dos ERPs, como sua transitoriedade intrínseca e as múltiplas repetições em experimentos, levaram ao desenvolvimento de novos algoritmos, como a estimação de modelos conjuntos a partir de vários segmentos de sinal e um procedimento em janela deslizante capaz de descrever a evolução temporal da estatística dos sinais de interesse. Ademais, mostrou-se a possibilidade de estender os resultados da análise assintótica da estatística da PDC ao caso multi-trecho, tornando possível o estudo de sua significância estatística sem recorrer a procedimentos de reamostragem. Os algoritmos foram validados em exemplos com *neural mass models*, modelos não-lineares capazes de gerar sinais com características muito semelhantes a sinais de EEG reais, e aplicados a uma base de dados pública contendo resultados de experimentos com ratos.

Palavras-chave: Conectividade neural. Coerência parcial direcionada. Modelos auto-regressivos para segmentos. Potenciais evento-relacionados.

ABSTRACT

This dissertation presents the development, validation, and application of algorithms for inferring neural connectivity in EEG signals containing event-related potentials (ERP). The time series were described via multivariate auto-regressive models (MVAR) and partial directed coherence (PDC) was used to study causal relations between them. Certain features of the ERPs, such as their transitory behavior and the existence of multiple trials in an experiment, lead to the development of a new algorithm capable of estimating a joint model from multiple segments and a sliding-window procedure for describing the non-stationarity behavior of the signals of interest. Furthermore, the possibility of extending the asymptotic results for PDC's statistics to the multi-trial case was demonstrated, allowing, therefore, the study of its statistical significance without recurring to resampling methods. The algorithms were validated in examples with neural mass models, non-linear models capable of generating signals with features very similar to real EEG recordings, and then applied to a publicly available dataset of experiments in rats.

Keywords: Neural connectivity. Partial directed coherence. Auto-regressive models for segments. Event-related potentials.

LISTA DE ILUSTRAÇÕES

Figura 1	– Exemplos de séries temporais geradas por um processo AR(1)	31
Figura 2	– Exemplo de série temporal gerada por um processo AR(2).	32
Figura 3	– Exemplos de séries temporais geradas por um processo MVAR(2) como da Equação 3.3 com $a_{21}(1) = 0$	34
Figura 4	– Exemplos de séries temporais geradas por um processo MVAR(2) como da Equação 3.3 com $a_{21}(1) = 0.5$	34
Figura 5	– Gráfico em dB da densidade espectral de potência estimada para uma realização $x(n)$ do processo da Figura 2 com $N = 4096$ amostras. Em azul , os resultados da estimação do espectro usando o método de Welch com janelas de tamanho 512 pontos e 50% de sobreposição entre si. A curva em vermelho é o resultado da estimação espectral com um modelo AR(2) para a mesma realização.	36
Figura 6	– Gráficos em dB da densidade espectral de potência estimada para os canais $x_1(n)$ e $x_2(n)$ a partir de uma realização do processo descrito pela Equação 3.3 com $a_{21}(1) = 0$ e $N = 4096$ amostras. Em azul , os resultados da estimação em cada canal empregando o método de Welch com janelas de tamanho 512 e 50% de sobreposição entre si. As curvas em vermelho são obtidas a partir dos coeficientes de um modelo MVAR(2) e usando o resultado descrito por (3.7).	37
Figura 7	– Resultados das estimatórias paramétricas e não-paramétricas nas mesmas condições da Figura 6, mas, com $a_{21}(1) = 0.5$	38
Figura 8	– Neste exemplo temos apenas um canal, com o qual desejamos estimar vários modelos auto-regressivos usando um procedimento de janela retangular deslizante. A figura representa as amostras usadas ao estimar os coeficientes nos instantes n_1 e n_2	48
Figura 9	– Valores de $ \pi_{12}(f) ^2$ e $ \pi_{21}(f) ^2$ estimados a partir de um modelo MVAR(2) para os sinais na Figura 4.	51
Figura 10	– Em azul , os resultados da PDC entre as séries temporais que registram casos de melanoma em Connecticut (EUA) e o índice de Wolfer entre os anos de 1936 e 1972. Em vermelho , os valores estimados com a g PDC para estas mesmas séries temporais. Em ambos os casos as estimatórias foram feitas com modelos MVAR de ordem 4.	53
Figura 11	– Resultados obtidos sob as mesmas condições da Figura 10. As linhas tracejadas indicam limiares de rejeição da hipótese nula de inexistência de conexão a um nível de confiança de 5%.	55

Figura 12 – Exemplo de realizações de sinais evento-relacionados. Os dados foram obtidos por meio de simulações usando modelos matemáticos propostos em (DAVID; FRISTON, 2003) e discutidos na Seção 3.5.	56
Figura 13 – Sinal médio associado aos potenciais evento-relacionados da Figura 12.	57
Figura 14 – Diagrama do modelo não linear de geração de sinais de EEG proposto em (JANSEN; RIT, 1995).	61
Figura 15 – Exemplo de sinal de EEG simulado usando parâmetros propostos em (JANSEN; RIT, 1995). O sinal emula oscilações características do ritmo alpha.	63
Figura 16 – Estimação da densidade espectral de potência do sinal representado na Figura 15. Utilizamos o método de Welch com janelas de 256 pontos e 50% de sobreposição. A frequência de amostragem é 1000 Hz.	64
Figura 17 – Diagrama de interligação entre duas colunas corticais (JANSEN; RIT, 1995). O conjunto de constantes C_1, C_2, C_3, C_4 associado a cada coluna pode variar, assim como os valores de A, a, B, b e v_0 . Os sinais $p_1(t)$ e $p_2(t)$ representam as influências dos potenciais de ação disparados por neurônios vizinhos às colunas 1 e 2, respectivamente.	65
Figura 18 – Exemplos de sinais de ERP simulados com o modelo matemático proposto em (JANSEN; RIT, 1995). As curvas em diferentes cores representam os sinais obtidos em diferentes realizações.	66
Figura 19 – Mapa dos 15 eletrodos de EEG colocados no escalpo do rato. O eletrodo de referência é denotado por R.	76
Figura 20 – Potenciais evocados registrados em cada eletrodo depois de estímulos na víscera direita do rato. Os sinais são calculados por meio de médias ao longo das várias realizações do experimento. As cores de cada sinal correspondem às cores dos eletrodos da Figura 19.	76
Figura 21 – Fonte: adaptado de (PLOMP et al., 2014)	76
Figura 22 – Representação visual das alternativas para estimação de modelo MVAR conjunto e da conectividade entre canais. Dispostos de cima para baixo os métodos 1, 2 e 3, respectivamente.	79
Figura 23 – Grafo de conexões entre os quatro canais da série temporal descrita pelas Equações 5.1. Nota-se que o sistema é formado por três osciladores conectados, um dado pela conexão entre os canais 2 e 3 e outros dois pelas retroalimentações dos canais 1 e 4.	80

Figura 24 – Resultados das estimações de autoespectro (na diagonal, em dB) e $ gPDC ^2$ para o caso de amostras geradas pelas Equações 5.1 com $N_S = 12$, $N_T = 50$ e ordem $P = 3$ para os modelos MVAR. Os gráficos mostram os valores teóricos em preto , os resultados com <i>stacking</i> dos segmentos em vermelho , com a média dos resultados em cada <i>trial</i> em verde e com o algoritmo Nuttall-Strand para segmentos em azul	81
Figura 26 – NMM ₁ gera um sinal de EEG com características de oscilação principalmente na banda γ ($\simeq 41$ Hz) enquanto NMM ₂ oscila na banda β ($\simeq 20$ Hz). A conexão de NMM ₁ para NMM ₂ é controlada pelo coeficiente $k_{21} = 0.5$. A frequência de amostragem é $F_S = 1000$ Hz	81
Figura 25 – Resultados das estimações de autoespectro (na diagonal, em dB) e $ gPDC ^2$ para o caso de amostras geradas pelas Equações 5.1 com $N_S = 1024$ e $N_T = 50$. A ordem dos modelos MVAR é $P = 3$. As cores dos gráficos seguem o mesmo padrão descrito na Figura 24.	82
Figura 27 – Valores do critério de informação de Akaike para modelos MVAR com diferentes ordens. A estrutura de dados $\mathbf{x}(n, s)$ tem $N_S = 100$ amostras em $N_T = 10$ segmentos estatisticamente independentes.	83
Figura 28 – Resultados obtidos para o autoespectro (em dB, na diagonal) e $gPDC$ entre as <i>neural mass models</i> representadas na Figura 26. As estimações foram feitas usando o algoritmo NS-seg em um conjunto de dados com $N_S = 100$ e $N_T = 10$. A frequência de amostragem é $F_S = 1000$ Hz.	83
Figura 29 – Grafo de conexões entre os dois canais da série temporal descrita pelas Equações 5.2. Nota-se que o sistema é formado por dois osciladores conectados.	84
Figura 30 – Sinais gerados pelas Equações 5.2. Em azul , o gráfico de uma das realizações em cada canal e em preto as médias ao longo dos múltiplos <i>trials</i> . Nota-se a presença de um potencial evento-relacionado para $n \geq 500$	85
Figura 31 – Resultados das estimações de autoespectro (em dB, na diagonal) e $gPDC$ para modelos MVAR de ordem $P = 2$ estimados a partir de amostras geradas pelas Equações 5.2 em uma janela com $L = 400$ pontos entre $n = 600$ e $n = 1000$. Em azul , os resultados com pré-processamento e em vermelho sem.	85
Figura 32 – Grafo de conexões entre os dois canais da série temporal descrita pelas Equações 5.3. Nota-se que o sistema é formado por dois osciladores cuja conexão é modulada pelo coeficiente $a_{21}(1)$. As amostras geradas são armazenadas em uma estrutura de dados $\mathbf{x}(n, s)$ com $N_S = 1400$ e $N_T = 50$	86

Figura 33 – Representação tempo-frequência de $ _g\pi_{21}(n, f) ^2$ para sinais simulados a partir das Equações 5.3. A janela deslizante tem tamanho $L = 12$ e há $N_T = 50$ segmentos disponíveis para as estimações dos modelos.	87
Figura 34 – Comparação das representações tempo-frequência da $ gPDC ^2$ do canal 1 para o canal 2. Na figura de cima, a janela deslizante tem tamanho $L = 12$ e as estimações usam apenas $N_T = 25$ trials, enquanto na figura de baixo temos $N_T = 250$	88
Figura 35 – Evolução temporal da $gPDC$ do canal 1 para o canal 2 na frequência normalizada $f = 0.31$. As curvas representam os resultados obtidos com tamanhos diferentes da janela deslizante mas todos com $N_T = 50$	88
Figura 36 – Grafo de conexões entre os três canais do exemplo descrito na Seção 5.3.2. A variância dos $u_i(n)$ são escolhidas de modo a termos uma SNR igual a 5. Os coeficientes são $a_{21} = 0.6, \tau_{21} = 1, a_{32} = 0.7, \tau_{32} = 1$ e $\tau_{31} = 2$. O coeficiente a_{31} é chaveado de zero para um em $n = 225$	89
Figura 37 – Representação tempo-frequência de $ _g\pi_{31}(n, f) ^2$ usando uma janela deslizante de tamanho $L = 24$ pontos, $N_T = 80$ repetições disponíveis e modelos MVAR de ordem $P = 3$	90
Figura 38 – Representação tempo-frequência do autoespectro do canal 3 estimado nas mesmas condições da Figura 37.	90
Figura 39 – Evolução temporal de $ _g\pi_{31}(n, f) ^2$ para f fixo em 0.05. Cada gráfico representa uma situação com fator de esquecimento C diferente no algoritmo RLS. As linhas cheias são os valores médios para 1000 simulações de Monte-Carlo, ao passo que as linhas tracejadas representam os limites dos intervalos contendo 95% dos valores obtidos nas simulações.	91
Figura 40 – As <i>neural mass models</i> do exemplo da Seção 5.3.3 são simuladas com os mesmos parâmetros da Figura 26. A conexão de NMM_1 para NMM_2 é controlada pelo coeficiente $k_{21} = 0.5$, que é chaveado para zero e volta para seu valor inicial 500 ms depois.	91
Figura 41 – Representação tempo-frequência da $gPDC$ de NMM_1 para NMM_2 com uma janela deslizante de tamanho $L = 30$ pontos e $N_T = 50$ realizações disponíveis. Os modelos MVAR têm ordem $P = 6$ e são estimados usando o algoritmo Nuttall-Strand para segmentos.	92
Figura 42 – Grafo representando as conexões do exemplo com três canais descrito pelas Equações 5.5. O valor do coeficiente $a_{21}(1)$ é escolhido conforme a situação de interesse, com $a_{21}(1) = 0$ quando a conexão entre os canais 1 e 2 está desligada e $a_{21}(1) = 0.5$ quando ligada.	93

Figura 43 – Histogramas dos valores de $\hat{a}_{21}(1)$ em simulações com $N_T = 50$ trials e diferentes valores de trechos curtos: $L = 12, 45$ e 500 pontos. Os sinais são gerados com as Equações 5.5. A configuração ON se refere ao caso em que se tem $a_{21}(1) = 0.5$ e OFF quando $a_{21}(1) = 0$	94
Figura 44 – Histogramas dos valores de $ \pi_{21}(0.3) ^2$ em simulações com as mesmas características descritas na Figura 43.	94
Figura 45 – Resultados para simulações com sinais gerados pelas Equações 5.5 e $N_S = 12, N_T = 50$. Em azul , a função de distribuição acumulada (c.d.f.) calculada empiricamente a partir dos valores de $ \hat{\pi}_{21}(0.3) ^2$ em 10000 simulações de Monte-Carlo com $a_{21}(1) = 0$. As linhas tracejadas indicam os valores de limiar que a extensão da teoria assintótica da PDC fornece para a determinação da significância estatística a níveis de confiança 5% (em vermelho) e 1% (em preto) em uma simulação com $a_{21}(1) = 0.5$. A curva em verde é a c.d.f. teórica prevista para $ \hat{\pi}_{21}(0.3) ^2$ em \mathcal{H}_0 quando $a_{21}(1) = 0.5$	96
Figura 46 – Resultados para simulações geradas a partir das Equações 5.5 com $N_S = 12, N_T = 50$ e $a_{21}(1) = 0.5$. Em azul o histograma normalizado (p.d.f. empírica) dos valores de $ \hat{\pi}_{21}(0.3) ^2$ e em vermelho uma densidade de probabilidade Gaussiana com média e variância calculadas via extensão da análise assintótica da PDC para o conjunto de dados disponível.	97
Figura 47 – Resultados de estimações feitas em amostras geradas pelas Equações 5.5 com $N_T = 50, N_S = 12, a_{21}(1) = 0$. No gráfico (A), em preto , estão representadas as B estimativas de $ \hat{\pi}_{21}^{(b)}(f) ^2$ calculadas a partir das estruturas de dados $\tilde{\mathbf{x}}^{(b)}(n, s)$. O gráfico (B) mostra, em azul , $ \hat{\pi}_{21}(f) ^2$ estimado usando $\mathbf{x}(n, s)$ bem como os limiares de detecção, em preto tracejado, determinados pelos 95-ésimo percentis dos resultados do gráfico da esquerda	99
Figura 48 – Resultados das estimações sob as mesmas condições da Figura 47, exceto por $a_{21}(1) = 0.5$. No gráfico (A), em azul , estão representados os valores de $ \hat{\pi}_{21}^{(b)}(f) ^2$ estimados a partir de $\mathbf{x}^{(b)}(n, s)$ e, em preto , para $\tilde{\mathbf{x}}^{(b)}(n, s)$. O gráfico (B) mostra, em linha cheia azul , a estimativa de $ \hat{\pi}_{21}(f) ^2$ usando a estrutura de dados original $\mathbf{x}(n, s)$ e seus intervalos de confiança a 95%. Os limiares de detecção a 5% estão representados em linha tracejada preta	99

- Figura 49 – Evolução temporal da $gPDC$ do canal 1 para o canal 2 no exemplo descrito na Seção 5.3.1. Os modelos MVAR têm ordem $P = 2$ e são estimados com uma janela deslizante de $L = 12$ pontos e $N_T = 50$ repetições. A linha tracejada ilustra para cada instante de tempo os limiares para rejeição da hipótese nula de que não há conexão (nível de confiança $\alpha = 1\%$) calculados usando a extensão da teoria assintótica. 100
- Figura 50 – Resultados da $gPDC$ entre as colunas corticais especificadas na Seção 5.2.2. O modelo MVAR tem ordem $P = 12$ e foi estimado com $N_S = 100$ e $N_T = 10$. As linhas tracejadas representam os limiares de detecção para a significância estatística de $|\pi_{ij}(f)|^2$ a um nível de confiança $\alpha = 1\%$ calculados usando a extensão da teoria assintótica. 101
- Figura 51 – Resultados da estimação do autoespectro (na diagonal, em dB) e da $gPDC$ entre as colunas corticais usando janelas de tamanho $L = 30$ pontos, $N_T = 50$ repetições e modelos MVAR de ordem $P = 6$. Em **verde**, resultados quando há conexão ($k_{21} = 0.5$) e em **vermelho** quando não há ($k_{21} = 0$). As linhas tracejadas representam limiares para a rejeição da hipótese nula de inexistência de $gPDC$ a um nível de confiança $\alpha = 1\%$ calculados usando a extensão da teoria assintótica. 102
- Figura 52 – Evolução no tempo da estimação da $gPDC$ de NMM_1 para NMM_2 na frequência $f = 41.18$ Hz. Os resultados foram obtidos nas mesmas condições descritas na Figura 51. As linhas tracejadas representam limiares para a rejeição da hipótese nula de inexistência de $gPDC$ a um nível de confiança $\alpha = 1\%$ 102
- Figura 53 – Representações tempo-frequência do auto-espectro do eletrodo 4 (chamado de cS1) do sujeito IC070523. A figura superior mostra os resultados para a transformada S e a de baixo para os espectros associados aos modelos MVAR de uma janela deslizante. O eixo de tempo está deslocado para ter como origem a excitação feita na vibrissa direita do rato analisado. 105
- Figura 54 – Valores do critério AIC durante a escolha da ordem dos modelos MVAR em um procedimento de janela deslizante com $L = 30$ pontos e $N_T = 40$ realizações disponíveis. 105
- Figura 55 – Representações tempo-frequência da soma da PDC saindo de cS1 e a evolução temporal destes resultados para uma frequência fixa em $f = 62.75$ Hz. Comparam-se as estimações feitas seguindo as especificações dadas no artigo (PLOMP et al., 2014) com o algoritmo RLS ($C = 0.02$) em duas opções de PDC: normalizada nas colunas ou nas linhas. 106

Figura 56 – Representações tempo-frequência da soma da conectividade saindo de cS1 e a evolução temporal destes resultados para uma frequência fixa em $f = 62.75$ Hz. Os gráficos de cima mostram os resultados da estimação usando w PDC e os de baixo para o procedimento de janela deslizante com $L = 30$ pontos e conectividade neural calculada via g PDC.	106
Figura 57 – Valores do critério AIC durante a escolha da ordem dos modelos MVAR em um procedimento de janela deslizante com $L = 30$ pontos e $N_T = 40$ realizações disponíveis. As estimações foram realizadas usando apenas os sinais nos eletrodos $\{1, 2, 3, 4, 5, 6\}$ do experimento.	107
Figura 58 – Representações tempo-frequência da soma da conectividade saindo de cS1 e a evolução temporal destes resultados para uma frequência fixa em $f = 62.75$ Hz. Os gráficos de cima mostram os resultados da estimação usando w PDC e os inferiores para o procedimento de janela deslizante com $L = 30$ pontos e conectividade neural calculada via g PDC. As estimações foram realizadas usando apenas os sinais nos eletrodos $\{1, 2, 3, 4, 5, 6\}$ do experimento.	108
Figura 59 – Evoluções temporais da g PDC entre cS1 (eletrodo 4) e seus vizinhos a uma frequência fixa em $f = 62.75$ Hz. As estimações foram feitas nas mesmas condições da Figura 58. As linhas tracejadas em azul são limiares de significância estatística da g PDC para cada instante de tempo e a um nível $\alpha = 1\%$	109
Figura 60 – Evolução temporal da g PDC entre cS1(eletrodo 4) e o eletrodo 2 a uma frequência fixa em $f = 62.75$ Hz. As estimações foram feitas nas mesmas condições da Figura 58. As linhas tracejadas representam limiares de significância estatística da g PDC a um nível $\alpha = 1\%$. Em azul são os calculados usando a extensão da teoria assintótica e em vermelho os obtidos com o método de <i>bootstrap</i> (100 sorteios).	110
Figura 61 – Sumário dos principais resultados apresentados no Capítulo 5.	111
Figura 62 – Resultados da estimação dos coeficientes $a(1, n)$ e $a(2, n)$ usando o algoritmo de janela deslizante e RLS. Os valores de L e C foram escolhidos de modo garantirem resultados semelhantes. Em vermelho os resultados com RLS e em azul com a janela deslizante.	145
Figura 63 – Resultados da estimação do coeficiente $a_{21}(1, n)$ usando o algoritmo de janela deslizante e RLS. Os valores de L e C foram escolhidos de modo a garantir resultados semelhantes. Em vermelho os resultados com RLS e em azul com a janela deslizante.	146

LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

EEG	Eletroencefalograma
ERP	Potencial evento-relacionado
PDC	Coerência parcial direcionada
<i>g</i> PDC	Coerência parcial direcionada generalizada
AR	Processo ou modelo auto-regressivo
MVAR	Processo ou modelo AR multivariado
TV-MVAR	Modelo auto-regressivo multivariado variante no tempo
AIC	Critério de informação de Akaike
PSD	Densidade espectral de potência
NMM	<i>Neural mass model</i>
NS	Algoritmo de Nuttall-Strand
NS-seg	Algoritmo NS para múltiplos segmentos
RLS	Algoritmo de <i>least squares</i> recursivo
SW	Algoritmo de janela deslizante

LISTA DE SÍMBOLOS

$x(n)$	Série temporal univariada
$\mathbf{x}(n)$	Série temporal multivariada
N_c	Número de dimensões de uma série temporal multivariada
N_S	Número de amostras de uma série temporal
N_T	Número de repetições de uma série temporal
π_{ij}	Coerência parcial direcionada do canal j para o canal i
${}_g\pi_{ij}$	Coerência parcial direcionada generalizada do canal j para o canal i
$a_{ij}(k)$	Elemento (i, j) da matriz $\mathbf{A}(k)$ de um modelo MVAR
$\mathbf{A}(\cdot, n)$	Coefficientes de um modelo TV-MVAR no instante n
\mathcal{H}_0	Hipótese nula de um teste estatístico
\mathcal{H}_1	Hipótese alternativa de um teste estatístico
α	Nível de significância de um teste estatístico
L	Tamanho de uma janela deslizante
C	Coefficiente de esquecimento do algoritmo RLS
P	Ordem de um modelo MVAR
Σ	Matriz de covariância de um processo estocástico multivariado
σ^2	Variância de um processo estocástico univariado
$\hat{\theta}$	Estimador do parâmetro θ de um modelo

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	20
1.1	Contextualização e objetivos	20
1.2	Contribuições e resultados obtidos	21
1.3	Estrutura da dissertação	22
2	REVISÃO BIBLIOGRÁFICA	24
2.1	Introdução	24
2.2	Estimação de modelo conjunto para vários segmentos	24
2.3	Análise de conectividade variável no tempo	25
2.4	Conclusões do capítulo	28
3	FORMULAÇÃO DO PROBLEMA	30
3.1	Introdução	30
3.2	Modelos auto-regressivos	30
3.2.1	Caso univariado: definição e exemplos	30
3.2.2	Caso multivariado: definição e exemplos	33
3.2.3	Análise espectral de séries temporais	35
3.2.4	Estimação dos parâmetros de um modelo auto-regressivo	38
3.2.5	Lidando com sinais não-estacionários	47
3.3	Causalidade entre séries temporais	49
3.3.1	Definição e exemplos	50
3.3.2	Testes de significância estatística	52
3.4	Sinais de EEG e potenciais evento-relacionados	54
3.4.1	Modelo utilizado	56
3.5	Modelos para simulação de EEG e ERP	59
3.5.1	Modelo não-linear de geração de sinais de EEG	60
3.5.2	Interligando colunas corticais	63
3.5.3	Gerando potenciais evento-relacionados	63
3.6	Conclusões do capítulo	64
4	MATERIAIS E MÉTODOS	67
4.1	Introdução	67
4.2	Simulações com <i>toy models</i>	67
4.2.1	Simulação de processos auto-regressivos	67
4.2.2	Geração de sinais com <i>neural mass models</i>	69

4.2.3	Múltiplos trechos independentes	69
4.3	Estimação de modelo conjunto para vários segmentos	70
4.3.1	Pré-processamento	70
4.3.2	Escolha do algoritmo de estimação	71
4.3.3	Ordem do modelo	71
4.3.4	Verificando a qualidade do modelo	72
4.4	Análise de conectividade variável no tempo	72
4.4.1	Tamanho da janela	72
4.4.2	Ordem do modelo	73
4.4.3	Estimação da conectividade	73
4.4.4	O algoritmo de estimação em janela deslizante	74
4.5	Testes de significância estatística	74
4.6	Base de dados reais	75
4.7	Conclusões do capítulo	76
5	RESULTADOS E DISCUSSÃO	77
5.1	Introdução	77
5.2	Estimação de modelo conjunto para vários segmentos	78
5.2.1	Propostas de estimação de modelo único para vários segmentos	78
5.2.2	<i>Toy model</i> com duas colunas corticais	80
5.2.3	Efeitos do pré-processamento de sinais	82
5.3	Análise de conectividade variável no tempo	84
5.3.1	Exemplo com dois canais	86
5.3.2	Exemplo com três canais	87
5.3.3	<i>Toy model</i> com duas colunas corticais	91
5.4	Testes de significância estatística	92
5.4.1	Validação da extensão para múltiplos trechos	92
5.4.2	Usando técnicas de reamostragem	97
5.4.3	Exemplo com dois canais	100
5.4.4	<i>Toy model</i> com duas colunas corticais	100
5.5	Análise de dados reais: experimentos com ratos	101
5.5.1	Comparando os resultados	103
5.5.2	Estendendo os resultados	104
5.6	Conclusões do capítulo	107
6	CONSIDERAÇÕES FINAIS	112
6.1	Conclusões do trabalho	112
6.2	Trabalhos futuros	112

	REFERÊNCIAS	114
	APÊNDICE A – ESTIMAR MODELOS MVAR	121
A.1	Introdução	121
A.2	Definições gerais	121
A.3	Equações de Yule-Walker de multicanal	122
A.4	Algoritmo de Levinson multivariado	124
A.4.1	Estimação backward	124
A.4.2	Recursão em ordem	125
A.4.3	Recursão dos coeficientes do modelo MVAR	129
A.4.4	Coeficientes de reflexão	130
A.4.5	Algoritmo de Levinson multivariado	130
A.4.6	Vantagens do algoritmo LWR	132
A.5	O algoritmo de Nuttall-Strand	132
A.5.1	Minimizando a função $\mathcal{E}(\cdot)$	134
A.5.2	Usando o algoritmo de Nuttall-Strand	138
	APÊNDICE B – EQUIVALÊNCIA DE SW E RLS	140
B.1	Introdução	140
B.2	Definições gerais	140
B.3	Resultados importantes	141
B.4	Estatística de $\hat{a}(n)$	141
B.5	Exemplos ilustrativos	144
B.5.1	Exemplo 1	145
B.5.2	Exemplo 2	145

1 INTRODUÇÃO

1.1 CONTEXTUALIZAÇÃO E OBJETIVOS

O trabalho apresentado neste texto tem o estudo do cérebro como tema central. Mais precisamente, a pesquisa realizada se insere no estudo do conectoma humano (SPORNS, 2010), em que se deseja compreender como estruturas cerebrais se comunicam em diversas situações e contextos.

Diferentes grupos de pesquisa usam sinais de EEG, EMG, fMRI e PET, entre outros, para estudar e determinar interligações no cérebro. Cada uma dessas técnicas tem suas vantagens e desvantagens, tendo em comum o fato de as amostras coletadas serem séries temporais, cujos valores estão diretamente relacionados a fenômenos que ocorrem dentro do cérebro. Embora os resultados discutidos neste texto sejam aplicáveis a todas as modalidades de neuroimagem mencionadas, optou-se por restringir a apresentação a estudos envolvendo sinais de eletroencefalograma.

Entre as muitas técnicas existentes para análise de sinais de EEG, uma que tem recebido especial atenção por parte da comunidade científica (SAMESHIMA; BACCALÁ, 2014; GERSCH, 1970; PFURTSCHELLER, 1972; FRANASZCZUK; BLINOWSKA, 1985; WRIGHT; KYDD; SERGEJEW, 1990) é a caracterização via modelos auto-regressivos multivariados (MVAR), com os quais os coeficientes das matrizes do modelo são usadas como ferramenta para melhor compreender o processo de geração dos sinais coletados.

Uma aplicação deste tipo de modelo é a inferência de conectividade neural entre regiões do cérebro a partir de relações de causalidade entre séries temporais em canais de EEG, em que se usa a coerência parcial direcionada, ou PDC (BACCALÁ; SAMESHIMA, 2001), como instrumento para explorar a causalidade de Granger (GRANGER, 1969) no domínio da frequência.

Os sinais de EEG considerados aqui são coletados em protocolos experimentais envolvendo potenciais evento-relacionados. Nesses experimentos, um sujeito é exposto a uma série de estímulos sensoriais, devendo realizar pequenas tarefas cognitivas logo em seguida. Sinais assim coletados têm sido usados extensivamente em estudos sobre a cognição humana (LUCK, 2005) e servem como janela de exploração para o comportamento cerebral durante tais atividades.

Ao empregar modelos MVAR ao estudo de potenciais evento-relacionados, é preciso se atentar a algumas características desse tipo de sinal, sendo a primeira delas a existência de múltiplas repetições do experimento. É comum assumir como hipótese a possibilidade de estimar um modelo conjunto para as várias repetições do sinal e que eventuais relações

de conectividade neural são consistentes ao longo das várias realizações do experimento.

Outra característica importante é que potenciais evento-relacionados são intrinsecamente associados a efeitos transitórios e são, portanto, não-estacionários. No entanto, é possível considerar as séries temporais como aproximadamente estacionárias em pequenos intervalos de tempo e estimar modelos auto-regressivos a partir destes trechos. Vale notar que a existência de múltiplas realizações de sinal acaba por compensar a redução das amostras disponíveis para estimar cada modelo e garante que descrições adequadas sejam obtidas mesmo para pequenos intervalos de tempo.

O objetivo deste trabalho foi propor ferramentas matemáticas para analisar a dinâmica temporal de conexões entre diferentes estruturas do cérebro durante tarefas cognitivas a partir de potenciais evento-relacionados. Além da estimação de modelos adequados para tal paradigma de sinal, explorou-se a possibilidade de estudar a significância estatística dos valores estimados com auxílio de resultados teóricos propostos na literatura. Houve, também, grande interesse em propor simulações e validações com exemplos realistas e bases de dados públicas, contribuições metodológicas que, infelizmente, ainda não são muito comuns na comunidade interessada por questões de conectividade neural.

1.2 CONTRIBUIÇÕES E RESULTADOS OBTIDOS

As principais contribuições deste trabalho para os estudos de conectividade neural no contexto de potenciais evento-relacionados foram:

1. **Algoritmo de Nuttall-Strand para segmentos (NS-seg):** Adaptação do algoritmo de Nuttall-Strand (STRAND, 1977), extensão multivariada do algoritmo de Burg (BURG, 1975), ao caso envolvendo estruturas de dados com múltiplos trechos curtos de sinal. Além de adaptar o algoritmo em si, etapas de pré-processamento foram propostas de modo a lidar com as características particulares de potenciais evento-relacionados.
2. **Estimação em janela deslizante via NS-seg:** A fim de capturar a dinâmica temporal da conectividade neural em situações evento-relacionadas, foi preciso propor algoritmos que conseguissem acompanhar a não-estacionariedade dos sinais registrados. A proposta deste trabalho foi seguir um procedimento de janela deslizante no qual modelos MVAR são estimados usando o algoritmo NS-seg em pequenos trechos de sinal. Os resultados foram publicados no congresso internacional IEEE EMBC 2015 (RODRIGUES; BACCALÁ, 2015).
3. **Extensão da análise assintótica da PDC para trechos curtos:** A partir dos coeficientes MVAR em cada janela de sinal, é possível calcular os valores da PDC (BACCALÁ; SAMESHIMA, 2001) e estudar a dinâmica temporal da conectividade entre

diferentes regiões do cérebro. Testes de significância estatística dos valores obtidos neste contexto foram baseados em extensões dos resultados assintóticos da estatística da PDC (BACCALÁ et al., 2013) ao caso de estimativas com múltiplos trechos curtos. Os resultados foram publicados no congresso internacional IEEE EMBC 2016 (RODRIGUES; BACCALÁ, 2016).

4. **Uso de *neural mass models*:** Ao desenvolver novos algoritmos, é sempre importante usar exemplos que validem e demonstrem a utilidade do que está sendo proposto. No entanto, é bastante comum que novos algoritmos de estimação de conectividade neural sejam validados em exemplos demasiadamente simples, o que nem sempre traz confiança quanto à validade dos resultados obtidos com dados reais. Por isso, houve um interesse bastante grande em propor exemplos de validação suficientemente ricos e que permitam testar os algoritmos em situações próximas ao que se vê em dados reais. Entre as propostas com esse fim, o uso de *neural mass models* (JANSEN; ZOURIDAKIS; BRANDT, 1993; JANSEN; RIT, 1995), modelos não-lineares capazes de simular séries temporais com características muito semelhantes aos de sinais de EEG encontrados na vida real, foi particularmente importante e trouxe resultados que confirmam a possibilidade de acompanhar a evolução de transitórios de conectividade neural.
5. **Interesse por bases de dados públicas:** Outro problema recorrente entre trabalhos da área é o uso de bases de dados privadas que impossibilitam a reprodução dos resultados divulgados. Levando isto em conta, empregou-se uma base de dados pública coletada e descrita por (QUAIRIAUX et al., 2011). O principal interesse foi incentivar que outros pesquisadores também usem esta base de dados e possam assim realizar comparações entre metodologias de forma objetiva e unificada, como em (RODRIGUES; BACCALÁ, 2016) e (RODRIGUES; ANDRADE, 2015).

1.3 ESTRUTURA DA DISSERTAÇÃO

Esta dissertação está dividida em 6 capítulos e 2 apêndices, tratando de temas conforme descrito a seguir:

Capítulo 2 - Revisão bibliográfica: É dado um panorama geral das contribuições da literatura que culminaram no estado da arte da área de pesquisa em conectividade neural. Evita-se o uso de fórmulas e equações, optando-se por explicações conceituais das contribuições de outros pesquisadores e das lacunas ainda existentes na área.

Capítulo 3 - Formulação de problema: Este capítulo formaliza diversos conceitos necessários para a compreensão do que foi feito neste trabalho, servindo como material de referência a ser consultado durante a leitura dos capítulos seguintes.

Capítulo 4 - Materiais e métodos: Por se tratar de um trabalho com um enfoque bastante metodológico, foi necessário redigir um capítulo no qual todo o processo de estimação de modelos MVAR e conectividade neural fosse explicado com detalhes. Há, também, descrições da base de dados reais e as características dos modelos não-lineares usados para simular sinais de EEG.

Capítulo 5 - Resultados e discussão: Cada uma das seções deste capítulo toca em um dos tópicos de interesse deste trabalho, apresentando os resultados e discutindo as conclusões a elas associadas. É o capítulo mais extenso e mais importante da dissertação.

Capítulo 6 - Considerações finais: Este capítulo retoma as principais contribuições feitas e aponta linhas de pesquisa a serem exploradas em trabalhos futuros.

Apêndice A - Estimação MVAR: Apêndice que apresenta uma dedução do algoritmo de Nuttall-Strand (STRAND, 1977) para estimar modelos auto-regressivos multivariados. Tomou-se o cuidado de expor as idéias do algoritmo de forma construtiva, tomando o desenvolvimento feito no livro de Marple (MARPLE, 1987) como inspiração.

Apêndice B - Equivalência de SW e RLS: Apêndice que apresenta a fórmula exata que permite encontrar equivalências entre tamanho de uma janela deslizante e o fator de esquecimento de um algoritmo RLS. A exposição é baseada nos trabalhos de Niedzwiecki em (NIEDZWIECKI, 1984), (NIEDZWIECKI, 1988) e (NIEDZWIECKI; GUO, 1991) e consolidados no livro (NIEDZWIECKI, 2000).

2 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

2.1 INTRODUÇÃO

O presente capítulo apresenta uma visão panorâmica de avanços recentes relatados pela comunidade científica internacional ligada a estudos de conectividade neural. A discussão é dividida em duas partes: estimação de modelos conjuntos para vários segmentos e análise de conectividade neural variável no tempo.

O leitor sem conhecimento prévio de alguns dos assuntos tratados pode consultar o Capítulo 3, no qual as principais grandezas de interesse são definidas.

2.2 ESTIMAÇÃO DE MODELO CONJUNTO PARA VÁRIOS SEGMENTOS

Existem diferentes formas de modelar sinais reais, sendo modelos auto-regressivos (ou AR) os mais comumente usados por pesquisadores e engenheiros (PERCIVAL; WALDEN, 1993; MARPLE, 1987). Embora boas razões conceituais justifiquem tal escolha, existe nela uma grande dose de pragmatismo, pois estimar parâmetros de um modelo AR a partir de um conjunto finito de amostras é um problema de otimização convexa cuja solução é sempre global e abundam métodos para resolvê-lo (BOYD; VANDENBERGHE, 2004).

Estimadores clássicos de modelos AR consideram situações nas quais o sinal de interesse é registrado continuamente. No entanto, em situações experimentais, as informações disponíveis podem estar dispostas de diferentes formas: um só registro contínuo e longo, vários trechos curtos, registros intermitentes de duração variável, etc. Supondo que em todos estes casos as amostras sejam geradas por um mesmo processo auto-regressivo com características desconhecidas, é possível propor diferentes métodos para combinar esses dados e estimar um modelo AR conjunto do sinal. Alguns exemplos são:

- Determinar um modelo para cada trecho e calcular a média dos coeficientes;
- Concatenar todos os trechos e estimar um modelo para este novo sinal;
- Calcular a média dos coeficientes de reflexão de cada trecho e a partir deles construir os coeficientes do modelo AR.

Em situações com registros longos, os resultados com cada método mencionado são muito semelhantes, devido ao comportamento dos estimadores de modelos auto-regressivos quando se tem um número assintótico de amostras (MARPLE, 1987). No entanto, em trechos curtos, cada opção pode ter resultados bastante diferentes, como mostra o trabalho

de Beex e Rahman (BEEEX; RAHMAN, 1986), no qual a proposta baseada na média de coeficientes de reflexão demonstra características melhores que seus concorrentes em termos de viés e variância.

Waele e Broersen propuseram uma extensão do famoso algoritmo de Burg (BURG, 1975) para o caso de múltiplos segmentos (WAELE; BROERSEN, 2000). A partir de simulações, notou-se uma clara superioridade deste novo algoritmo em comparação às opções citadas acima, particularmente em casos com modelos AR contendo pólos próximos do círculo unitário.

Naturalmente, o próximo passo seria estender o algoritmo de Broersen ao caso de modelos de sinais multivariados. No entanto, a comunidade de processamento de sinais não se mostrou interessada em formalizar tal método, talvez devido à complexidade da generalização do algoritmo de Burg, conhecido como algoritmo de Nuttall-Strand (STRAND, 1977), ou à aparente dificuldade em adaptá-lo para situações de múltiplos trechos de sinal.

Ainda assim, o interesse por modelos auto-regressivos multivariados (MVAR) conjuntos para vários trechos só cresceu com o tempo, particularmente na área de processamento de sinais biomédicos, na qual é bastante comum trabalhar com registros experimentais contendo múltiplas realizações de sinal, como em potenciais evento-relacionados.

Em (DING et al., 2000), Ding et al. propuseram estimar um modelo MVAR conjunto empregando um algoritmo em que as matrizes de autocovariância são medianizadas ao longo de várias realizações do sinal e os coeficientes são obtidos usando o algoritmo de Vieira-Morf (MORF et al., 1978). Já (MOLLER et al., 2001) calcula os coeficientes matriciais invertendo diretamente a matriz associada às equações de Yule-Walker, com auxílio de procedimentos recursivos para acelerar os cálculos.

Por fim, deve-se ressaltar a hipótese de que todos os trechos disponíveis são gerados por um mesmo processo auto-regressivo. Ao assumir tal fato, desconsideram-se possíveis variações estatísticas entre segmentos, o que nem sempre é razoável. Por exemplo, no contexto de potenciais evento-relacionados, é comum que o sujeito sob análise passe a mostrar sinais de fadiga, diminuição de tempo de reação ou mesmo adaptação a estímulos (LUCK, 2005). Nesses casos, é importante levar em conta a variação das estatísticas do sinal ao longo das várias realizações do experimento. Um estudo pioneiro que se propôs a analisar os efeitos desta variabilidade estatística ao longo dos *trials* foi (PETTI et al., 2015), e é um tópico que deverá ser discutido com maior profundidade nos próximos anos.

2.3 ANÁLISE DE CONECTIVIDADE VARIÁVEL NO TEMPO

Avanços recentes de estudos de conectividade neural têm demonstrado um interesse crescente por situações não-estacionárias, nas quais descrições quiescentes da estrutura do

cérebro deram lugar a investigações sobre a dinâmica cerebral em processos cognitivos e respostas sensoriais. Exemplos desses trabalhos são (SIEGEL; BUSCHMAN; MILLER, 2015), no qual é examinado o fluxo de informação em cérebros de macacos durante processos de tomada de decisão, e (PLOMP et al., 2014), em que é analisada a evolução temporal da conectividade neural de ratos em resposta a estímulos em vibrissas.

Conforme explicado no Capítulo 3, a coerência parcial direcionada (PDC) é uma ferramenta frequentemente adotada por pesquisadores em estudos de conectividade neural usando sinais de EEG ou MEG, tanto em situações estacionárias (ASTOLFI et al., 2006a; WINTERHALDER et al., 2005; TAKAHASHI; BACCALÁ; SAMESHIMA, 2007; SAMESHIMA; BACCALÁ, 2014) quanto não-estacionárias (ASTOLFI et al., 2008; LEIS-TRITZ et al., 2013; PLOMP et al., 2014; RODRIGUES; ANDRADE, 2015; TOPPI et al., 2016). Além da PDC, outros indicadores de conectividade neural comumente usados são a *directed transfer function* (DTF) (KAMINSKI; BLINOWSKA, 1991; KUS; GINTER; BLINOWSKA, 2006; KORZENIEWSKA et al., 2008; BLINOWSKA et al., 2013), índice de causalidade de Granger (CGI) (MILDE et al., 2010) ou simples análises de correlação entre sinais (DING et al., 2000; MOLLER et al., 2001).

Uma das primeiras propostas de algoritmo para estimar conectividade neural variável no tempo é a de Ding (DING et al., 2000), em que a dinâmica dos sinais é capturada empregando um procedimento de janela deslizante. O número menor de amostras presentes em cada janela é compensado pela existência de múltiplos *trials* de sinal, sendo necessário, portanto, que os modelos para cada instante de tempo sejam estimados conjuntamente. Infelizmente, (DING et al., 2000) não deixa claro como realizar esta estimação conjunta, dizendo apenas que usa o algoritmo de Vieira-Morf (MORF et al., 1978).

Diversos trabalhos na literatura empregaram o procedimento de janela deslizante para análise de conectividade neural, como em (KORZENIEWSKA et al., 2008) ao estudar processos de cognição em tarefas de linguagem, (KUS; GINTER; BLINOWSKA, 2006; GINTER et al., 2005) em experimentos envolvendo movimentos da mão e (KUS et al., 2005) em testes de atenção.

Cabe notar que (DING et al., 2000) fala sobre a importância de extrair a média síncrona dos *trials* antes de estimar modelos auto-regressivos em janela deslizante. Tal etapa é crucial, pois garante que os sinais usados no processo de estimação de conectividade terão média nula, além de evitar que componentes de baixas frequências de potenciais evocados poluam a análise no domínio da frequência de estimadores como a PDC e a DTF. Infelizmente, são poucos os artigos na literatura que levam em consideração esse fato, não ficando muito claro se eles extraem a média síncrona antes de proceder aos cálculos ou se simplesmente ignoram esse passo.

Outro algoritmo frequentemente adotado para estimar conectividade neural variável

no tempo é o proposto por Moller (MOLLER et al., 2001), no qual um procedimento recursivo de mínimos quadrados (RLS) com fator de esquecimento é usado para acompanhar as mudanças nos valores de coeficientes do modelo auto-regressivo ao longo do tempo. Talvez por conta do tempo bastante inferior de processamento quando comparado ao SW e a possibilidade de usá-lo em aplicações em tempo real, o RLS teve uma aceitação maior na comunidade acadêmica internacional.

Algumas aplicações interessantes do RLS ao problema de estimação de conectividade neural variante no tempo são as de (ASTOLFI et al., 2008) e (FALLANI et al., 2008) em estudos de movimento dos pés, (HESSE et al., 2003) em testes de atenção e (PLOMP et al., 2014) ao analisar o fluxo de informação no cérebro de ratos após estímulos em vibrissas.

É importante ressaltar que a estimação de modelos via janela deslizante e RLS com fator de esquecimento são muito semelhantes, sendo possível, inclusive, calcular o tamanho de uma janela retangular equivalente a um dado fator de esquecimento, conforme apresentado nos trabalhos de Niedzwiecki (NIEDZWIECKI, 1984; NIEDZWIECKI, 1988; NIEDZWIECKI; GUO, 1991) e discutido no Apêndice B. No entanto, ao realizar a pesquisa bibliográfica para este trabalho, ficou evidente que a comunidade científica interessada em estudos de conectividade neural variável no tempo não está ciente dessa equivalência, acreditando que o método RLS é superior à janela deslizante por não usar hipóteses de estacionariedade local sobre os sinais (MOLLER et al., 2001; ASTOLFI et al., 2008), o que não é verdade (NIEDZWIECKI, 2000). Ademais, a escolha de um fator de esquecimento compatível com uma resolução temporal fixada de antemão é tarefa pouco intuitiva quando não se sabe o tamanho da janela retangular equivalente, fato que raramente é mencionado em trabalhos que empregam o algoritmo RLS.

Visando estender a proposta de Moller para casos envolvendo muitos canais, Milde et al. (MILDE et al., 2010) sugeriram uma versão de filtro de Kalman com características semelhantes ao RLS com fator de esquecimento, mas com estabilidade numérica superior. O nome dado a este algoritmo é GLKF, ou Filtro de Kalman Linear Generalizado. Como em todo filtro de Kalman, a estimação gira em torno de um vetor de estados, que aqui são os próprios coeficientes variantes no tempo do modelo MVAR procurado. Vale dizer que a dinâmica dos coeficientes é modelada por um passeio aleatório (*random walk*), abordagem bastante comum quando não se deseja impor informação *a priori* sobre a evolução do vetor de estados (HAYKIN, 1995; NIEDZWIECKI, 2000). Outro algoritmo interessante é o Kalman *smoother* proposto por (HU; ZHANG; HU, 2012), que se aproveita de dados passados e futuros para melhorar as estimações feitas pelo GLKF, tendo em vista que estimações de conectividade neural são geralmente feitas quando já se tem disponível todo o registro de sinal.

A proposta (MILDE et al., 2010) tem feito bastante sucesso na comunidade acadêmica internacional, como na análise de respostas sensoriais a estímulos com laser (MILDE

et al., 2010) e luz (WACKER et al., 2011) ou estudos cognitivos (TOPPI et al., 2016). Vale ressaltar, porém, que os coeficientes de esquecimento do GLKF, chamados de C e c em (MILDE et al., 2010), são ainda menos intuitivos que no RLS, não havendo também nenhum resultado conhecido de equivalência com janelas deslizantes retangulares.

A partir do que foi descrito acima, nota-se que atualmente existem três métodos principais para estimar modelos auto-regressivos com coeficientes variantes no tempo: o RLS com fator de esquecimento, o GLKF e o procedimento de janela deslizante.

Não há consenso entre a comunidade científica sobre qual algoritmo usar para cada tipo de situação, nem os passos de pré-processamento a serem tomados, o que é natural em tópicos de pesquisa ainda não muito bem consolidados. Ainda assim, é evidente o interesse crescente por estudos de conectividade neural variável no tempo e a evolução dos algoritmos de estimação tem sido crucial para os avanços observados nos últimos anos.

2.4 CONCLUSÕES DO CAPÍTULO

Este capítulo apresentou os avanços que levaram aos estado atual dos estudos de conectividade neural. Por se tratar de um assunto interdisciplinar com contribuições de pesquisadores de diversas áreas do conhecimento, é evidente que muitos trabalhos interessantes não sejam citados, o que não significa que sejam menos importantes.

Por exemplo, (SATO et al., 2007) propõe usar Wavelets para estimar modelos MVAR com coeficientes variantes no tempo, uma alternativa que permite analisar sinais não-estacionários sob uma ótica diferente daquela geralmente adotada. Por conta de dificuldades de implementação em situações com um número reduzido de amostras, este algoritmo não tem sido muito usado pela comunidade internacional. Porém, é possível que avanços recentes na área de processamento digital de sinais o tornem uma opção mais atraente e se torne mais um concorrente aos procedimentos de janela deslizante e RLS.

Outro estudo interessante é o de Rodrigues e Andrade em (RODRIGUES; ANDRADE, 2015), no qual é usado o conceito de EMD (*empirical mode decomposition*) para analisar sinais não-estacionários e não-lineares com auxílio da transformada de Huang-Hilbert (HUANG et al., 1998). Os resultados expostos em (RODRIGUES; ANDRADE, 2015) são animadores e podem ser vistos como uma etapa extra na sequência de pré-processamentos para estudos de conectividade neural. Outra frente de pesquisa bastante relevante para os próximos anos é aquela que se interessa pelo pré-processamento dos sinais de EEG para combater efeitos da condução de volume, como feito por Hu em (HU; ZHANG; HU, 2012) e Omidvarnia em (OMIDVARNIA et al., 2014).

Vale ressaltar, porém, que é preciso tomar bastante cuidado com rotinas de pré-processamento de sinal, pois elas podem comprometer a qualidade de inferências de causalidade, como mostra o trabalho de Florin (FLORIN et al., 2010).

O próximo capítulo formaliza diversos conceitos fundamentais à compreensão do que foi desenvolvido neste trabalho, além de prover explicações conceituais que auxiliam a leitura do texto por pesquisadores com formação não necessariamente em engenharia elétrica ou estatística.

3 FORMULAÇÃO DO PROBLEMA

3.1 INTRODUÇÃO

O capítulo a seguir introduz os temas essenciais sobre os quais este trabalho se apoia. Não há intenção de desenvolver com profundidade cada um dos tópicos, mas prover uma visão global deles e de como se inserem no contexto da pesquisa realizada. Vale lembrar que trabalhos multidisciplinares são sempre interessantes, porém, pagam o preço de terem que ser cuidadosamente explicados, pois pessoas de diferentes áreas devem ser capazes de entender o que foi desenvolvido.

O texto começa com a apresentação do conceito de modelo auto-reregressivo de séries temporais, uma ferramenta amplamente usada por estatísticos e engenheiros na análise de sinais cujos valores respeitam alguma distribuição estatística. Em seguida, a noção de causalidade entre séries temporais é definida e estimadores para detectar tais relações são apresentados. Com os conceitos de séries temporais devidamente explicados, o texto continua com a discussão do modelo de sinal utilizado para descrever sinais de EEG e potenciais evento-relacionados. O capítulo termina com uma descrição sucinta de modelos não-lineares propostos na literatura para simulação de sinais de EEG e potenciais evento-relacionados.

3.2 MODELOS AUTO-REGRESSIVOS

Embora a maior parte deste trabalho tenha focado em modelos auto-regressivos para séries temporais multivariadas, esta seção começa discutindo conceitos fundamentais de processos auto-regressivos no caso univariado. O motivo disto é puramente didático, pois as manipulações algébricas no caso escalar são mais simples e as idéias principais podem ser extrapoladas ao caso de múltiplos canais. São apresentadas as definições de processos e modelos auto-regressivos, algoritmos para estimação de seus coeficientes e procedimentos para lidar com sinais não-estacionários. As extensões ao caso multivariado são motivadas a partir de resultados do caso univariado.

3.2.1 Caso univariado: definição e exemplos

Ao analisar séries temporais, é natural que se tenha interesse em compreender o significado de certas características observáveis do sinal, como linhas de tendência, oscilações, intervalos que delimitam os valores das amostras, etc.

Para tanto, é bastante comum que se utilizem modelos matemáticos para descrever o processo estatístico de geração das amostras. Nesse caso, eleva-se o nível de abstração e o

interesse passa a ser pelas características do modelo do sinal e não pelos valores registrados durante algum intervalo de tempo particular. Tal abordagem permite extrair informações realmente relevantes de um conjunto de amostras e evita que se tente explicar fenômenos puramente aleatórios.

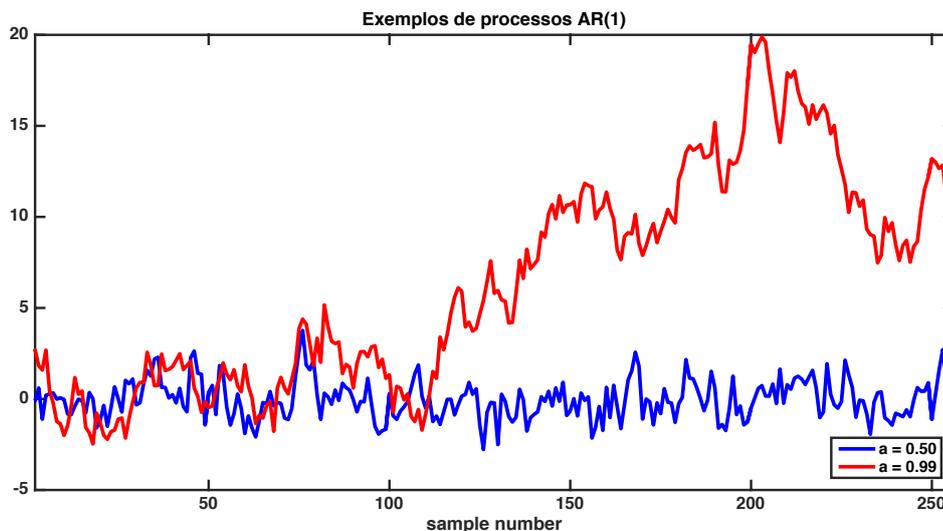
Existem diversos modelos matemáticos utilizados no estudo de séries temporais, sendo o modelo auto-regressivo (AR) um dos mais conhecidos. Em um modelo AR de sinal, toma-se a hipótese de que as amostras $x(n)$ são geradas por um processo auto-regressivo, ou seja, que se tem

$$x(n) = \mu + \sum_{k=1}^P a(k)x(n-k) + u(n), \quad (3.1)$$

em que P é a ordem do processo AR, μ é a média do sinal e o resíduo $u(n)$ é um processo de inovações com média nula e variância σ^2 . Embora não seja o único tipo de processo AR possível, este trabalho focou apenas em processos auto-regressivos em que $u(n)$ é um ruído branco com valores gerados por uma distribuição normal centrada em zero e variância σ^2 . Considerou-se, também, que $\mu = 0$. Denota-se um processo AR de ordem P com estas características por AR(P).

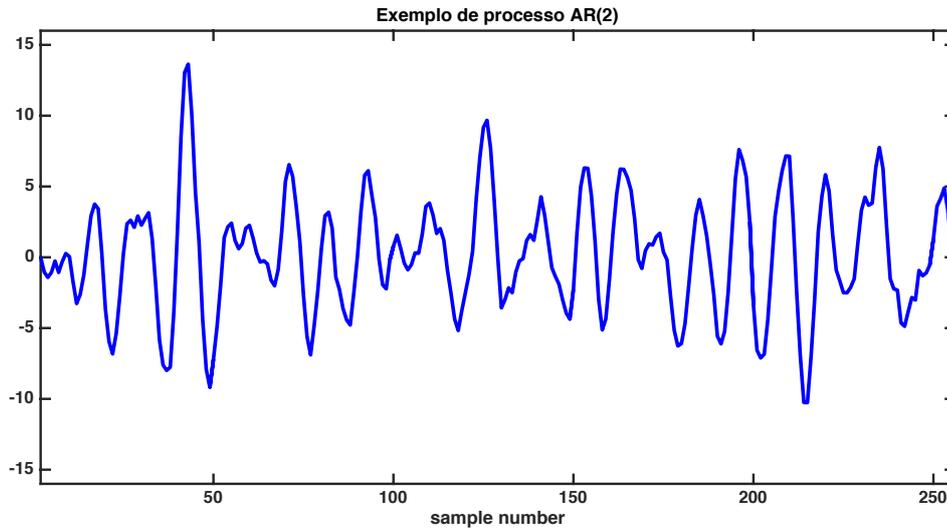
Evidentemente, diferentes combinações de coeficientes $a(k)$ levam a séries temporais com características distintas. Por exemplo, no caso da Figura 1, em que se tem amostras geradas por processos AR(1), vê-se que com $a(1) = 0.99$ a série temporal tem excursões maiores que quando $a(1) = 0.50$. Nota-se, também, que a série temporal gerada pelo processo AR(2) da Figura 2 tem um comportamento oscilatório bastante pronunciado, fato diretamente determinado pela escolha dos valores dos coeficientes $a(1)$ e $a(2)$.

Figura 1 – Exemplos de séries temporais geradas por um processo AR(1)



Fonte: autoria própria

Figura 2 – Exemplo de série temporal gerada por um processo AR(2).



Fonte: autoria própria

Antes de continuar, vale ressaltar dois conceitos que causam certa confusão entre pesquisadores e engenheiros que trabalham com séries temporais.

O sinal $u(n)$ na Equação (3.1) não modela os erros de medição que eventualmente tenhamos ao obter as amostras de uma série temporal gerada por um processo AR(P). Na realidade, ele é um processo de inovação, sendo responsável por prover a aleatoriedade intrínseca da geração das amostras $x(n)$. Usando conceitos de engenharia elétrica, pode-se dizer que $u(n)$ é um ruído branco Gaussiano na entrada de um filtro digital de função de transferência racional com coeficientes $a(k)$ no denominador e numerador igual a 1. O processo AR(P) é o sinal de saída deste filtro.

Outro conceito por vezes não muito claro é a diferença entre um modelo auto-regressivo e um processo auto-regressivo. Estimar um modelo auto-regressivo para uma sequência de amostras $\{x(1), x(2), \dots, x(N)\}$ significa assumir a hipótese de que a série temporal é um processo auto-regressivo AR(P). Neste caso, calcula-se estimativas $\hat{a}(k)$ dos coeficientes do processo auto-regressivo usando algoritmos de estimação como os apresentados na Seção 3.2.4. Portanto, um modelo auto-regressivo é na realidade um conjunto de estimadores $\hat{a}(k)$ tidos como suficientes para descrever adequadamente o processo AR(P) que se assume ser o gerador da série temporal em estudo.

Por fim, deve-se ressaltar que os coeficientes de um processo AR(P) são constantes ao longo do tempo, o que significa que ele é estacionário e, portanto, suas características estatísticas (média, variância e auto-correlação) são sempre as mesmas. A Seção 3.2.5 apresenta casos em que os coeficientes $a(k)$ variam ao longo do tempo e discute como analisar esta classe de sinais.

3.2.2 Caso multivariado: definição e exemplos

Uma extensão natural do estudo de séries temporais é considerar o caso multivariado, em que amostras a cada instante de tempo não são mais valores escalares e sim vetores. Neste caso, é possível estudar relações de causalidade entre séries temporais e descrever de forma unificada amostras registradas em locais diferentes. Alguns exemplos de séries temporais multivariadas são: medições em experimentos com múltiplos eletrodos, valores de diferentes ações na bolsa de Londres, gravações de áudio usando vários microfones, etc.

A notação mais usual para séries temporais multivariadas é a que denota as amostras a cada instante de tempo por $\mathbf{x}(n)$, em que

$$\mathbf{x}(n) = \begin{bmatrix} x_1(n) \\ x_2(n) \\ \vdots \\ x_{N_c}(n) \end{bmatrix},$$

e cada $x_i(n)$ é uma série temporal diferente ou, usando o jargão da engenharia elétrica, um canal diferente. Nota-se, portanto, que cada $\mathbf{x}(n)$ é um vetor de dimensões $N_c \times 1$, em que N_c é chamado de número de canais da série temporal.

Da mesma forma que no caso univariado, é bastante comum trabalhar com modelos auto-regressivos, em que se considera que as amostras são geradas por um processo MVAR(P) dado por

$$\mathbf{x}(n) = \sum_{k=1}^P \mathbf{A}(k)\mathbf{x}(n-k) + \mathbf{u}(n), \quad (3.2)$$

em que os coeficientes $\mathbf{A}(k)$ são matrizes de dimensões $N_c \times N_c$ e $\mathbf{u}(n)$ é um processo de inovações Gaussiano multivariado com matriz de covariância $\Sigma_{\mathbf{u}}$. O coeficiente (i, j) da matriz $\mathbf{A}(k)$ é denotado por $a_{ij}(k)$.

Da definição na Equação (3.2), nota-se que os coeficientes fora das diagonais das matrizes $\mathbf{A}(k)$ são capazes de modelar relações de causalidade entre as séries temporais de cada canal. Por exemplo, em um processo MVAR(2) com

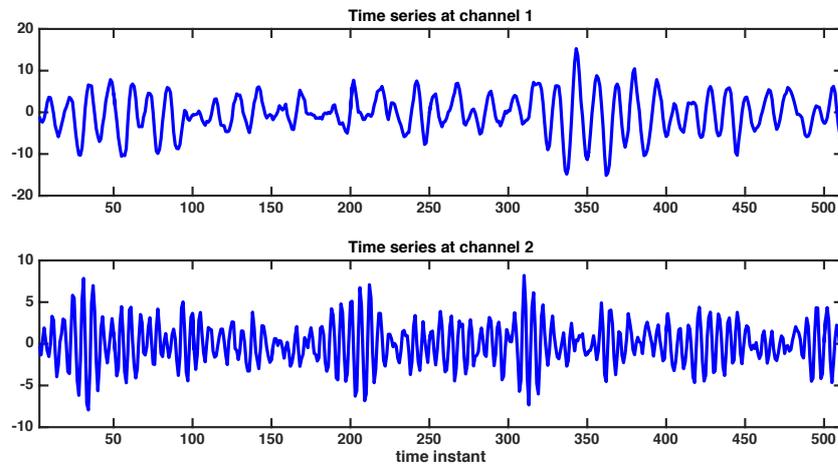
$$\mathbf{x}(n) = \begin{bmatrix} 1.645 & 0 \\ a_{21}(1) & 0.95 \end{bmatrix} \mathbf{x}(n-1) + \begin{bmatrix} -0.9025 & 0 \\ 0 & -0.9025 \end{bmatrix} \mathbf{x}(n-2) + \mathbf{u}(n), \quad (3.3)$$

o valor do coeficiente $a_{21}(1)$ tem papel decisivo na existência, ou não, de alguma influência da série temporal do canal 1 sobre a do canal 2, pois temos

$$x_2(n) = 0.95x_2(n-1) - 0.9025x_2(n-2) + a_{21}(1)x_1(n-1) + u_2(n).$$

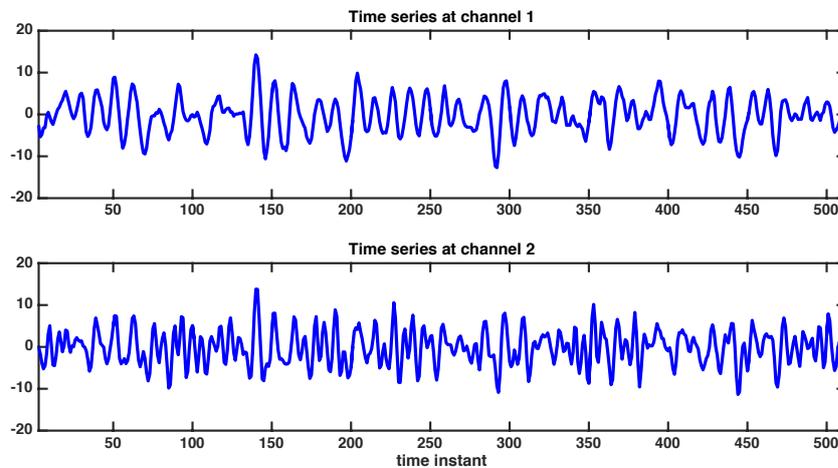
As Figuras 3 e 4 ilustram as séries temporais geradas pelo processo da Equação (3.3) em duas situações: $a_{21}(1) = 0$ e $a_{21}(1) = 0.5$.

Figura 3 – Exemplos de séries temporais geradas por um processo MVAR(2) como da Equação 3.3 com $a_{21}(1) = 0$.



Fonte: autoria própria

Figura 4 – Exemplos de séries temporais geradas por um processo MVAR(2) como da Equação 3.3 com $a_{21}(1) = 0.5$.



Fonte: autoria própria

É interessante ressaltar que não é possível inferir visualmente a existência de causalidade de $x_i(n)$ sobre $x_j(n)$ a partir somente dos gráficos dos sinais de uma série temporal multivariada. Esse é o caso, por exemplo, dos sinais nas Figuras 3 e 4. No entanto, ao estimar um modelo MVAR a partir de um conjunto de amostras $\{\mathbf{x}(1), \mathbf{x}(2), \dots, \mathbf{x}(N)\}$, existem testes estatísticos sobre os valores de $\hat{a}_{ij}(k)$ para concluir quanto a existência, ou não, da conexão $x_i \rightarrow x_j$. A Seção 3.3 apresenta algumas formas de detectar relações de causalidade entre séries temporais.

3.2.3 Análise espectral de séries temporais

Em muitas situações, particularmente no estudo de sinais biomédicos, nota-se um comportamento oscilatório bastante evidente nas séries temporais analisadas, o que leva ao interesse pelo estudo de seu espectro em frequência. Por exemplo, em eletroencefalografia a análise espectral pode indicar a existência de oscilações do tipo alfa, beta e gama no sinal, cujas interpretações fisiológicas têm sido estudadas há bastante tempo (BUZSAKI, 2011).

Embora a noção de transformada de Fourier não seja aplicável diretamente a sinais aleatórios, é possível estendê-la ao conceito de densidade espectral de potência (PSD), no qual as eventuais oscilações consistentes do sinal $x(n)$ são reveladas na forma de picos no espectro de frequência de $S_{xx}(f)$ (PERCIVAL; WALDEN, 1993). Formalmente, pode-se mostrar que a PSD de um sinal aleatório $x(n)$ é a transformada de Fourier de tempo discreto de sua função de auto-correlação

$$r_{xx}(k) = \mathbb{E}[x(n)x(n-k)],$$

isto é,

$$S_{xx}(f) = \sum_{k=-\infty}^{\infty} r_{xx}(k)e^{-j2\pi fk}, \quad (3.4)$$

em que a frequência f é dada em unidades de frequência normalizada (com $|f| < 0.5$). A PSD descreve a distribuição da variância de um processo aleatório $x(n)$ ao longo da frequência (PERCIVAL; WALDEN, 1993).

A análise espectral de sinais estatísticos de tempo discreto a partir de um conjunto finito de amostras pode ser feita de duas maneiras: usando estimadores paramétricos ou não-paramétricos.

No caso de estimadores não-paramétricos, o método mais simples de obter a PSD de um sinal é usando a noção periodograma, na qual é calculada uma versão medianizada do módulo quadrático de sua transformada de Fourier a partir de um conjunto de N amostras:

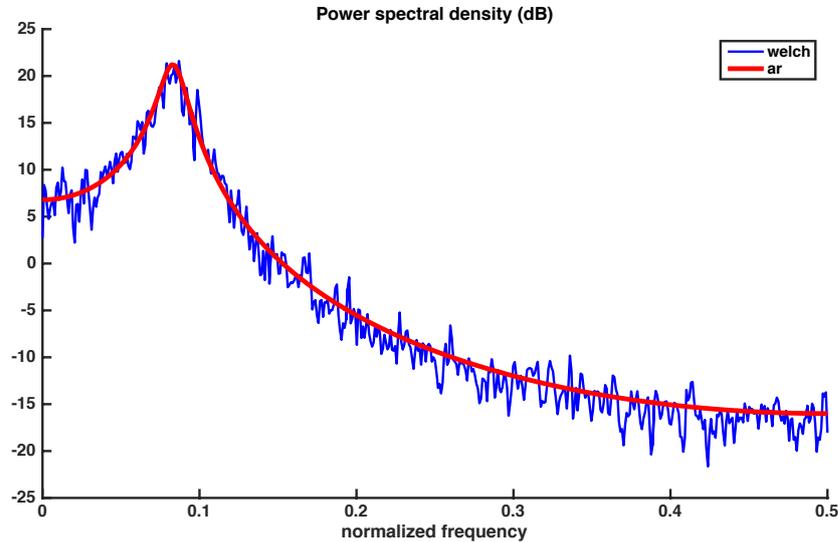
$$\hat{S}_{xx}(f) = \frac{1}{N} \left| \sum_{k=1}^N x(n)e^{-j2\pi fk} \right|^2. \quad (3.5)$$

No entanto, é possível mostrar que este estimador tem características estatísticas bastante ruins em termos de viés e variância (PERCIVAL; WALDEN, 1993), o que motiva a existência de diversas propostas na literatura que estendem a definição em (3.5), como os métodos de Bartlett, Blackman-Tukey e Welch.

Já entre os estimadores paramétricos, é muito comum estimar um modelo auto-regressivo do sinal para estudar seu espectro a partir dos coeficientes $\hat{a}(k)$, com a PSD sendo dada por

$$\hat{S}_{xx}(f) = \frac{\hat{\sigma}^2}{\left| 1 - \sum_{k=1}^P \hat{a}(k)e^{-j2\pi fk} \right|^2}, \quad (3.6)$$

Figura 5 – Gráfico em dB da densidade espectral de potência estimada para uma realização $x(n)$ do processo da Figura 2 com $N = 4096$ amostras. Em **azul**, os resultados da estimação do espectro usando o método de Welch com janelas de tamanho 512 pontos e 50% de sobreposição entre si. A curva em **vermelho** é o resultado da estimação espectral com um modelo AR(2) para a mesma realização.



Fonte: autoria própria

em que $\hat{\sigma}^2$ é o valor estimado da variância do processo de inovações $u(n)$ do modelo AR(P).

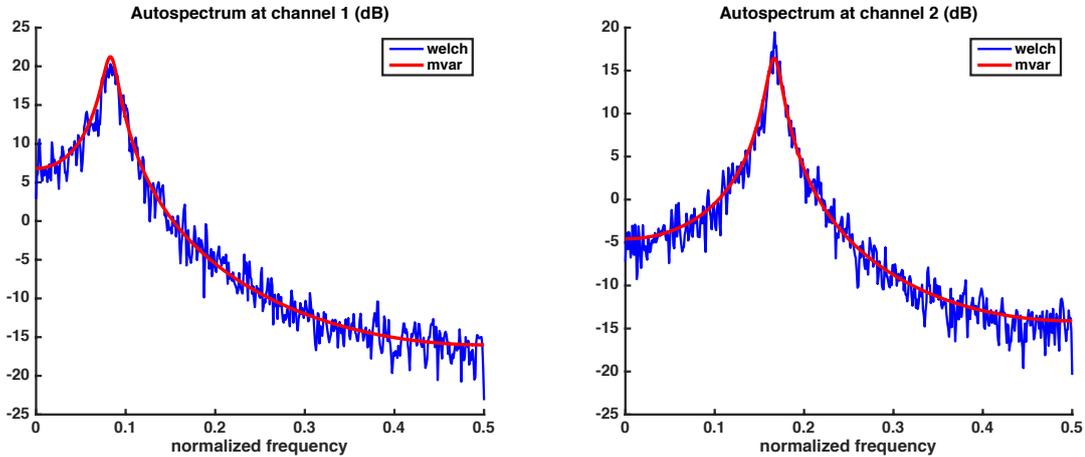
Assim como em qualquer outra análise estatística de dados, estimações espectrais não-paramétricas têm variância maior que de seus concorrentes paramétricos (PERCIVAL; WALDEN, 1993). Isso se deve ao fato de que no primeiro caso a estimação é feita sem se apoiar sobre qualquer hipótese a respeito do sinal (exceto pela sua estacionariedade), ao passo que em estimações paramétricas a construção de um modelo envolve, necessariamente, assumir hipóteses mais fortes (como obedecer à Equação (3.1)). Deste modo, o fato de incluir informação *a priori* no processo de estimação espectral acarreta em estimativas com menor variância.

Para ilustrar as diferenças entre estimações espectrais paramétricas e não-paramétricas, tomemos como exemplo o sinal $x(n)$ da Figura 2. Os resultados da estimação espectral estão retratados na Figura 5.

Nota-se que a estimação do espectro baseado no algoritmo não-paramétrico de Welch indica a existência de uma forte componente em torno da frequência normalizada 0,08. No entanto, o resultado é bastante ruidoso, por conta da variância do estimador. O espectro calculado via modelo AR(2) também apresenta um pico de potência em 0,08, mas com uma curva muito mais suave.

De forma semelhante, a estimação espectral de séries temporais multivariadas pode ser feita usando métodos paramétricos e não-paramétricos. A estimação não-paramétrica

Figura 6 – Gráficos em dB da densidade espectral de potência estimada para os canais $x_1(n)$ e $x_2(n)$ a partir de uma realização do processo descrito pela Equação 3.3 com $a_{21}(1) = 0$ e $N = 4096$ amostras. Em azul, os resultados da estimação em cada canal empregando o método de Welch com janelas de tamanho 512 e 50% de sobreposição entre si. As curvas em vermelho são obtidas a partir dos coeficientes de um modelo MVAR(2) e usando o resultado descrito por (3.7).



Fonte: autoria própria

envolve simplesmente a aplicação de algoritmos como o de Welch aos sinais $x_i(n)$ em cada canal de $\mathbf{x}(n)$.

No caso da estimação espectral via modelo MVAR(P), a densidade espectral de potência de $\mathbf{x}(n)$ é denotada por $\mathbf{S}(f)$ e pode ser obtida a partir de

$$\mathbf{S}(f) = \mathbb{A}^{-1}(f) \boldsymbol{\Sigma}_u \left(\mathbb{A}^{-1}(f) \right)^H, \quad (3.7)$$

em que

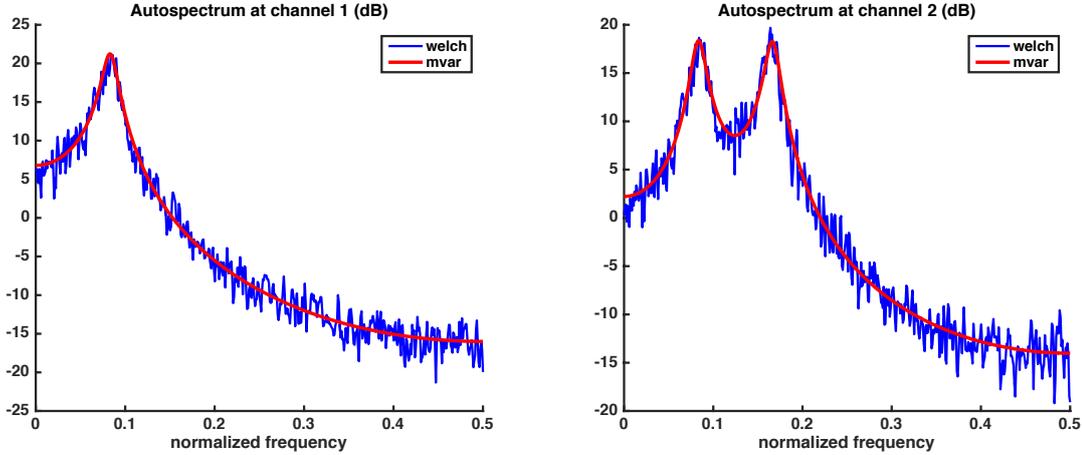
$$\mathbb{A}(f) = \mathbf{I} - \sum_{k=1}^P \mathbf{A}(k) e^{-j2\pi f k},$$

e \mathbf{M}^H denota a versão transposta conjugada (hermitiano) de \mathbf{M} . Note que $\mathbf{S}(f)$ é uma matriz $N_c \times N_c$, em que os espectros de cada canal são os elementos em sua diagonal, isto é, a PSD do canal $x_i(n)$ é simplesmente $\mathbf{S}_{ii}(f)$.

Considere os exemplos das Figuras 3 e 4, em que os sinais de cada canal são gerados a partir do modelo MVAR(2) descrito em (3.3), com $a_{21}(1) = 0$ e $a_{21}(1) = 0.5$, respectivamente. As Figuras 6 e 7 ilustram os espectros de $x_1(n)$ e $x_2(n)$ estimados de forma paramétrica e não-paramétrica.

Mais uma vez, nota-se a diferença de suavidade (e, portanto, variância) entre os resultados da estimação paramétrica e não-paramétrica do espectro dos sinais. Além disso, é possível observar outro fato bastante interessante: na Figura 6, a PSD de $x_2(n)$ tem apenas um pico, ao passo que na Figura 7 vê-se claramente a presença de dois picos no espectro. Tal diferença ocorre pois em um caso temos $a_{21}(1)$ igual a zero e no outro não, fato que implica a existência de influência do sinal no canal 1 sobre o do canal 2.

Figura 7 – Resultados das estimações paramétricas e não-paramétricas nas mesmas condições da Figura 6, mas, com $a_{21}(1) = 0.5$.



Fonte: autoria própria

3.2.4 Estimação dos parâmetros de um modelo auto-regressivo

Estimar os parâmetros de um modelo a partir de um conjunto de dados é um problema antigo e já muito estudado em diversos contextos (HASTIE; TIBSHIRANI; FRIEDMAN, 2011; CASELLA, 2008; BENDAT; PIERSOL, 2010). Naturalmente, diferentes áreas adotam nomenclaturas próprias, bem como notações matemáticas que sejam mais adequadas para cada tipo de pergunta que se deseja responder. Este texto usa a terminologia mais comum na área de processamento estatístico de sinais, além de recorrer a algumas interpretações da estatística.

O processo de estimação de parâmetros recai, invariavelmente, em um problema de otimização, no qual a escolha de um conjunto de parâmetros θ é feita de modo a minimizar um funcional f do custo do erro de predição de um modelo \mathcal{M} quando aplicado a um conjunto de dados \mathcal{X} , como em

$$\hat{\theta} = \operatorname{argmin}_{\theta} \left(f(\mathcal{M}, \mathcal{X}; \theta) \right). \quad (3.8)$$

Por exemplo, considere que temos um conjunto de amostras $\{x(1), x(2), \dots, x(N)\}$ de uma série temporal univariada e que desejamos estimar os parâmetros de um processo AR univariado de ordem P para descrevê-la. Naturalmente, os coeficientes $\hat{a}(k)$ devem ser aqueles que melhor descrevam os dados disponíveis segundo um modelo $\text{AR}(P)$. Para tanto, define-se primeiro uma grandeza chamada erro de predição,

$$e_P^f(n) = x(n) - \sum_{k=1}^P a(k)x(n-k), \quad (3.9)$$

em que se mede a discrepância entre o valor de uma amostra $x(n)$ e sua predição via combinação linear de P valores passados. O superscrito f em $e_P^f(n)$ denota *forward* e se

refere justamente ao fato de se estar fazendo previsões a partir de valores passados de $x(n)$. Os coeficientes $\hat{a}(k)$ serão aqueles que minimizam a esperança do erro quadrático do modelo,

$$\underset{a(1), \dots, a(P)}{\text{minimizar}} \quad \mathbb{E} \left[\left(x(n) - \sum_{k=1}^P a(k)x(n-k) \right)^2 \right] = \mathbb{E} \left[\left(e_P^f(n) \right)^2 \right], \quad (3.10)$$

em que o operador esperança é calculado segundo a lei estatística dos $x(n)$. Lembrando que $\mathbb{E}[x(n)] = 0$, tem-se a variância de $u(n)$ dada por

$$\hat{\sigma}^2 = \mathbb{E} \left[\left(x(n) - \sum_{k=1}^P \hat{a}(k)x(n-k) \right)^2 \right] = \mathbb{E} \left[\left(e_P^f(n) \right)^2 \right]. \quad (3.11)$$

Os parâmetros de um modelo $\text{MVAR}(P)$ são estimados de modo semelhante, com os coeficientes $\hat{\mathbf{A}}(k)$ correspondendo à solução do problema de minimização

$$\underset{\mathbf{A}(1), \dots, \mathbf{A}(P)}{\text{minimizar}} \quad \mathbb{E} \left[\left\| \mathbf{x}(n) - \sum_{k=1}^P \mathbf{A}(k)\mathbf{x}(n-k) \right\|_2^2 \right], \quad (3.12)$$

em que $\|\cdot\|_2$ denota a norma euclidiana de um vetor. Definindo o erro de previsão do caso multivariado como

$$\mathbf{e}_P^f(n) = \mathbf{x}(n) - \sum_{k=1}^P \mathbf{A}(k)\mathbf{x}(n-k), \quad (3.13)$$

pode-se reescrever o problema de minimização na forma

$$\underset{\mathbf{A}(1), \dots, \mathbf{A}(P)}{\text{minimizar}} \quad \mathbb{E} \left[\left\| \mathbf{e}_P^f(n) \right\|_2^2 \right]. \quad (3.14)$$

Façamos duas observações importantes antes de continuar.

A escolha do erro quadrático como função a ser minimizada é completamente arbitrária. Seria possível adotar o módulo dos desvios, a quarta potência destes, ou qualquer outro tipo de medida de diferença. No entanto, é muito comum que se utilize uma função objetivo quadrática, pois isso garante que o problema de otimização será convexo e que conseguiremos uma forma analítica de sua solução.

Outra fato interessante é que se os $x(n)$ seguirem uma distribuição normal multivariada, a estimação dos parâmetros pode ser interpretada como um problema de maximização de verossimilhança, um conceito fundamental em Estatística (BROCKWELL; DAVIS, 2009). Vale dizer, inclusive, que essa é a razão para termos optado por trabalhar com processos $\text{AR}(P)$ e $\text{MVAR}(P)$ em que os resíduos $u(n)$ são gerados por uma distribuição Gaussiana.

Estimando os parâmetros no caso univariado

Levando em conta que o problema descrito na Equação (3.10) é convexo e não tem restrições, é possível resolvê-lo recorrendo ao procedimento clássico de minimização de uma função multivariada a partir do cálculo de seu gradiente.

Sendo assim, para $1 \leq \ell \leq P$,

$$\frac{\partial}{\partial a(\ell)} \mathbb{E} \left[\left(x(n) - \sum_{k=1}^P a(k)x(n-k) \right)^2 \right] = 0, \quad (3.15)$$

$$\mathbb{E} \left[2 \left(x(n) - \sum_{k=1}^P a(k)x(n-k) \right) - x(n-\ell) \right] = 0, \quad (3.16)$$

$$\mathbb{E} \left[x(n)x(n-\ell) - \sum_{k=1}^P a(k)x(n-k)x(n-\ell) \right] = 0. \quad (3.17)$$

Lembrando que $\mathbb{E}[x(n)x(n-\ell)] = r_{xx}(\ell)$ é a função de auto-correlação do sinal $x(n)$, os coeficientes $a(k)$ serão obtidos a partir das equações

$$r_{xx}(\ell) = \sum_{k=1}^P a(k)r_{xx}(\ell-k) \quad 1 \leq \ell \leq P. \quad (3.18)$$

O conjunto de equações (3.18) é chamado de equações de Yule-Walker e é bastante conhecido na literatura de processamento digital de sinais e séries temporais (MARPLE, 1987; BROCKWELL; DAVIS, 2009). Note que são P equações com P incógnitas, sendo possível reescrevê-las em forma matricial (MARPLE, 1987):

$$\begin{bmatrix} r_{xx}(1) \\ r_{xx}(2) \\ \vdots \\ r_{xx}(P) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} r_{xx}(0) & r_{xx}(1) & r_{xx}(2) & \cdots & r_{xx}(P-1) \\ r_{xx}(1) & r_{xx}(0) & r_{xx}(1) & \cdots & r_{xx}(P-2) \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ r_{xx}(P-1) & r_{xx}(P-2) & r_{xx}(P-3) & \cdots & r_{xx}(0) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a(1) \\ a(2) \\ \vdots \\ a(P) \end{bmatrix}, \quad (3.19)$$

em que se usa fato de que $r_{xx}(k) = r_{xx}(-k)$. A estimação de $\hat{\sigma}^2$ é feita a partir dos valores de $\hat{a}(k)$, com

$$\hat{\sigma}^2 = r_{xx}(0) - \sum_{k=1}^P \hat{a}(k)r_{xx}(k). \quad (3.20)$$

À primeira vista, poderia-se dizer que o problema da estimação de parâmetros de um modelo auto-regressivo univariado está resolvido, bastando inverter a matriz em (3.19) e obter os valores de $\hat{a}(k)$. No entanto, diversas considerações podem ser feitas antes de prosseguir.

Primeiramente, é importante notar que os valores das auto-correlações de $x(n)$ precisam ser estimados a partir do conjunto de amostras disponíveis. Conforme discutido em (PERCIVAL; WALDEN, 1993), existem dois tipos de estimadores para a auto-correlação: com viés e sem viés. O estimador com viés é definido por

$$\hat{r}_{xx}^b(\ell) = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N x(n)x(n-\ell), \quad (3.21)$$

em que se considera que $x(n) = 0$ para $n > N$ e $n < 1$. Já o estimador sem viés apresenta uma correção no denominador de $\hat{r}_{xx}^b(\ell)$, com

$$\hat{r}_{xx}^u(\ell) = \frac{1}{N - \ell} \sum_{n=1}^N x(n)x(n - \ell). \quad (3.22)$$

Embora o estimador sem viés pudesse parecer o mais adequado para a maioria das situações, ele raramente é utilizado, pois suas características não garantem que a matriz das equações de Yule-Walker seja positiva semi-definida, propriedade muito importante para o funcionamento de certos algoritmos que realizam sua inversão (PERCIVAL; WALDEN, 1993).

Outro fato relevante é que procedimentos para estimar modelos auto-regressivos costumam ser aplicados sem que se saiba de antemão a ordem P mais adequada para o conjunto de dados. Nesse contexto, é comum estimar vários modelos AR com ordens crescentes até que algum critério indique que se tem um bom modelo.

Graças à estrutura Toeplitz da matriz das equações de Yule-Walker, é possível propor um algoritmo recursivo que estime os parâmetros de um modelo $AR(P + 1)$ a partir dos coeficientes de um modelo $AR(P)$ previamente calculado. Esse procedimento, chamado de recursão de Levinson-Durbin, é bastante útil, pois permite uma economia considerável no tempo de processamento. Ademais, ao evitar múltiplas inversões de matrizes, eventuais erros numéricos são controlados e garante-se melhores resultados nos cálculos envolvidos (MARPLE, 1987).

As recursões de Levinson-Durbin

As recursões de Levinson-Durbin se baseiam no fato de que, para estimar um modelo $AR(p)$, pode-se juntar as equações (3.18) e (3.20) em uma versão expandida da equação matricial em (3.19) e escrever

$$\begin{bmatrix} r_{xx}(0) & r_{xx}(1) & \cdots & r_{xx}(p) \\ r_{xx}(1) & r_{xx}(0) & \cdots & r_{xx}(p-1) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ r_{xx}(p) & r_{xx}(p-1) & \cdots & r_{xx}(0) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ -a(1) \\ \vdots \\ -a(p) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \Sigma_p^f \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix}, \quad (3.23)$$

em que Σ_p^f é o valor médio quadrático do erro de predição $e_p^f(n)$, isto é

$$\Sigma_p^f = \mathbb{E} \left[\left(e_p^f(n) \right)^2 \right].$$

A partir do sistema de equações expandido, diversas manipulações algébricas (descritas em (BROCKWELL; DAVIS, 2009)) podem ser feitas para determinar uma relação recursiva

entre os coeficientes de um modelo $AR(p+1)$ e de um modelo $AR(p)$:

$$a_{p+1}(p+1) = \frac{r_{xx}(p+1) - \sum_{k=1}^p a_p(k)r_{xx}(p+1-k)}{\Sigma_p^f}, \quad (3.24)$$

$$a_{p+1}(k) = a_p(k) - a_{p+1}(p+1)a_p(k) \quad (1 \leq k \leq p), \quad (3.25)$$

$$\Sigma_{p+1} = r_{xx}(0) - \sum_{k=1}^{p+1} a_{p+1}(k)r_{xx}(k), \quad (3.26)$$

com valores iniciais

$$a_1(1) = \frac{r_{xx}(1)}{r_{xx}(0)} \quad \text{e} \quad \Sigma_1^f = r_{xx}(0) - a_1(1)r_{xx}(1).$$

É possível, ainda, manipular as equações das recursões de Levinson-Durbin para se obter uma forma alternativa de atualizar os erros de predição *forward*, com

$$\Sigma_{p+1} = \left(1 - a_{p+1}(p+1)^2\right)\Sigma_p.$$

Levando em conta que os coeficientes $a_{p+1}(p+1)$ de processos auto-regressivos estacionários são sempre menores que 1 (MARPLE, 1987), percebe-se que a sequência de erros de predição é não crescente. Deste modo, modelos com ordens cada vez maiores têm, naturalmente, erro quadrático médio menor em suas predições (HASTIE; TIBSHIRANI; FRIEDMAN, 2011). Esse fato pode ser usado como critério de parada para o procedimento de escolha da ordem de um modelo auto-regressivo, conforme discutido no Capítulo 4.

É fácil observar que, usando o procedimento descrito acima, apenas operações entre vetores e escalares são realizadas. Compara-se, então, a complexidade computacional de inverter diretamente a matriz em (3.19), $\mathcal{O}(P^3)$, com as recursões de Levinson-Durbin, $\mathcal{O}(P^2)$. Pode não parecer muito, porém, o simples fato de evitar inverter uma matriz possivelmente mal condicionada é razão suficiente para preferir este método.

Os coeficientes de reflexão

Analisando as Equações (3.24), (3.25) e (3.26), nota-se que o coeficiente $a_{p+1}(p+1)$, por vezes chamado de coeficiente de reflexão de ordem $p+1$, tem um papel de destaque nas recursões. Ele é o primeiro coeficiente a ser estimado a cada passo, além de atuar como fator de correção na atualização dos demais coeficientes do modelo $AR(p+1)$. Pode-se, inclusive, interpretar as equações das recursões de Levinson-Durbin em três passos:

1. Estimar $a_{p+1}(p+1)$
2. Usar $a_{p+1}(p+1)$ para atualizar os coeficientes $a_{p+1}(k)$ com $1 \leq k \leq p$

3. Atualizar o erro de predição do modelo de ordem $p + 1$

Uma propriedade importante que decorre deste protagonismo dos coeficientes reflexão é a existência de uma bijeção entre os conjuntos de coeficientes dos modelos $AR(p)$ e os coeficientes $a_p(p)$ calculados a cada passo das recursões de Levinson-Durbin (PERCIVAL; WALDEN, 1993). Mais precisamente, pode-se dizer que a partir dos valores de $a_q(q)$ e Σ_q^f para $q = 1, 2, \dots, P$, é possível reconstruir todos os coeficientes $\{a_q(1), \dots, a_q(q)\}$ de todos os modelos $AR(q)$ com $q = 1, 2, \dots, P$. O mesmo vale no sentido contrário.

Devido à importância dos coeficientes de reflexão, existem algoritmos que os calculam diretamente a partir dos dados, recuperando em seguida os coeficientes dos modelos $AR(p)$ via recursões de Levinson-Durbin. Um exemplo importante desta categoria de algoritmos é o proposto por Burg (BURG, 1975), no qual os coeficientes de reflexão a cada passo são soluções de um problema de minimização envolvendo a média aritmética de dois tipos de erro de predição devidamente definidos (KAY; MARPLE, 1981).

Vale ressaltar que o algoritmo de Burg é considerado por muitos como um dos melhores algoritmos de estimação espectral paramétrica, devido a garantias de estabilidade dos modelos auto-regressivos e a resolução espectral superior da PSD associada (BROERSEN, 2006). A razão de tal superioridade vem do fato de que Burg propõe um procedimento embasado no conceito de maximização de entropia, uma idéia bastante conhecida em diversas áreas da ciência (JAYNES, 2003; MACKAY, 2003) e que teve muito sucesso na área de estimação espectral. Esse princípio se traduz nas características da estimação dos valores da função de auto-correlação. Ao passo que o método tradicional baseado nas equações de Yule-Walker considera que os valores de $x(n)$ em $n < 0$ e $n > N$ são iguais a zero, o método de Burg não faz qualquer hipótese a respeito disso, optando por usar apenas a informação que o conjunto de amostras provê.

O caso multivariado

De forma análoga ao caso univariado, a estimação dos parâmetros de um modelo $MVAR(P)$ passa pelo processo de minimizar o gradiente da função objetivo na Equação (3.14). No entanto, como as amostras de $\mathbf{x}(n)$ são vetores e os coeficientes do modelo auto-regressivo são matrizes, as manipulações algébricas do processo de estimação não são tão simples quanto no caso escalar. Por isso, apenas os resultados principais estão apresentados a seguir, com as devidas deduções disponíveis no Apêndice A ou em (MARPLE, 1987).

O equivalente multivariado das equações (3.18) são as equações de Yule-Walker multicanal, que podem ser escritas matricialmente da seguinte forma:

$$\underline{\mathbf{a}}_P \mathbf{R}_P = \begin{bmatrix} \Sigma_P^f & \mathbf{0}_m & \cdots & \mathbf{0}_m \end{bmatrix}, \quad (3.27)$$

em que os coeficientes matriciais do modelo auto-regressivo são concatenados,

$$\underline{\mathbf{a}}_p = \begin{bmatrix} \mathbf{I}_m & -\mathbf{A}(1) & \cdots & -\mathbf{A}(P) \end{bmatrix}, \quad (3.28)$$

Σ_P^f é a matriz de auto-covariância do erro de predição *forward*,

$$\Sigma_P^f = \mathbb{E} \left[\mathbf{e}_P^f(n) (\mathbf{e}_P^f(n))^T \right], \quad (3.29)$$

e a matriz em blocos $\underline{\mathbf{R}}_P$, de dimensões $(P+1)N_c \times (P+1)N_c$,

$$\underline{\mathbf{R}}_P = \begin{bmatrix} \mathbf{R}_{xx}(0) & \mathbf{R}_{xx}(1) & \cdots & \mathbf{R}_{xx}(P) \\ \mathbf{R}_{xx}(-1) & \mathbf{R}_{xx}(0) & \cdots & \mathbf{R}_{xx}(P-1) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \mathbf{R}_{xx}(-P) & \mathbf{R}_{xx}(-P+1) & \cdots & \mathbf{R}_{xx}(0) \end{bmatrix}, \quad (3.30)$$

é composta de várias matrizes de auto-covariância de $\mathbf{x}(n)$,

$$\mathbf{R}_{xx}(k) = \mathbb{E} \left[\mathbf{x}(n) \mathbf{x}^T(n-k) \right].$$

Ora, a partir de (3.27) é possível obter diretamente as matrizes $\mathbf{A}(\cdot)$, bastando inverter a matriz $\underline{\mathbf{R}}_P$. No entanto, da mesma forma que no caso univariado, tal inversão é computacionalmente custosa.

Por conta da estrutura Toeplitz em blocos de $\underline{\mathbf{R}}_P$, é possível recorrer a um processo recursivo semelhante às recursões de Levinson-Durbin, chamadas de recursões de Levinson-Wiggins-Robinson, ou simplesmente LWR (WIGGINS; ROBINSON, 1965). A dedução destas recursões lança mão das propriedades decorrentes da estacionariedade do sinal $x(n)$ e define um novo tipo de erro de predição, ao qual se dá o nome de “erro *backward*”, e denota-se por $e_P^b(n)$.

O erro de predição *backward* é definido a partir da estimação do valor de $\mathbf{x}(n)$ usando P amostras futuras do processo,

$$\hat{\mathbf{x}}_P^b(n) = \sum_{k=1}^P \mathbf{B}(k) \mathbf{x}(n+k), \quad (3.31)$$

em que

$$\mathbf{e}_P^b(n) = \mathbf{x}(n) - \sum_{k=1}^P \mathbf{B}(k) \mathbf{x}(n+k). \quad (3.32)$$

Pode-se escrever uma equação análoga a (3.27) com os coeficientes do modelo *backward*,

$$\underline{\mathbf{b}}_P \underline{\mathbf{R}}_P = \begin{bmatrix} \mathbf{0}_m & \cdots & \mathbf{0}_m & \Sigma_P^b \end{bmatrix}, \quad (3.33)$$

em que Σ_P^b é a matriz de covariância do erro de predição *backward*,

$$\Sigma_P^b = \mathbb{E} \left[\mathbf{e}_P^b(n) (\mathbf{e}_P^b(n))^T \right]. \quad (3.34)$$

Seguindo os passos descritos em (MARPLE, 1987) (e deduzidos no Apêndice A), obtém-se um algoritmo recursivo para a estimação das matrizes $\mathbf{A}_p(\cdot)$ e $\mathbf{B}_p(\cdot)$ de modelos auto-regressivos AR(p):

1. Começar em $p = 0$. Usando o sinal $\mathbf{x}(n)$, calcular a matriz $\mathbf{R}_{xx}(0)$,

$$\boldsymbol{\Sigma}_0^f = \boldsymbol{\Sigma}_0^b = \mathbf{R}_{xx}(0) = \mathbb{E}[\mathbf{x}(n)\mathbf{x}^T(n)]. \quad (3.35)$$

2. Calcular os coeficientes de reflexão matriciais $\boldsymbol{\nabla}_1$ e $\boldsymbol{\Delta}_1$ usando

$$\boldsymbol{\Delta}_1 = \mathbb{E} \left[\mathbf{e}_0^f(n) \left(\mathbf{e}_0^b(n-1) \right)^T \right] = \boldsymbol{\nabla}_1^T. \quad (3.36)$$

Os erros de predição em $p = 0$ são dados por

$$\mathbf{e}_0^f(n) = \mathbf{x}(n), \quad (3.37)$$

$$\mathbf{e}_0^b(n-1) = \mathbf{x}(n-1), \quad (3.38)$$

portanto,

$$\boldsymbol{\Delta}_1 = \mathbb{E} \left[\mathbf{x}(n)\mathbf{x}^T(n-1) \right] = \boldsymbol{\nabla}_1^H. \quad (3.39)$$

3. Calcular os coeficientes $\mathbf{A}_1(1)$ e $\mathbf{B}_1(1)$:

$$\mathbf{A}_1(1) = \boldsymbol{\Delta}_1 \left(\mathbf{R}_{xx}(0) \right)^{-1}, \quad (3.40)$$

$$\mathbf{B}_1(1) = \boldsymbol{\nabla}_1 \left(\mathbf{R}_{xx}(0) \right)^{-1}. \quad (3.41)$$

4. Calcular as matrizes $\boldsymbol{\Sigma}_1^f$ e $\boldsymbol{\Sigma}_1^b$ e os erros $\mathbf{e}_1^f(n)$ e $\mathbf{e}_1^b(n-1)$:

$$\boldsymbol{\Sigma}_1^f = \boldsymbol{\Sigma}_0^f - \mathbf{A}_1(1)\boldsymbol{\nabla}_1, \quad (3.42)$$

$$\boldsymbol{\Sigma}_1^b = \boldsymbol{\Sigma}_0^b - \mathbf{B}_1(1)\boldsymbol{\Delta}_1. \quad (3.43)$$

$$\mathbf{e}_1^f(n) = \mathbf{e}_0^f(n) - \mathbf{A}_1(1)\mathbf{e}_0^b(n-1), \quad (3.44)$$

$$\mathbf{e}_1^b(n) = \mathbf{e}_0^b(n) - \mathbf{B}_1(1)\mathbf{e}_0^f(n+1). \quad (3.45)$$

5. Para $p > 0$, os coeficientes são sempre atualizações de grandezas obtidas no passo $p-1$. Primeiro, calcula-se as matrizes $\boldsymbol{\Delta}_p$ e $\boldsymbol{\nabla}_p$,

$$\boldsymbol{\Delta}_p = \mathbb{E} \left[\mathbf{e}_{p-1}^f(n) \left(\mathbf{e}_{p-1}^b(n-p) \right)^T \right] = \boldsymbol{\nabla}_p^T. \quad (3.46)$$

Em seguida, as matrizes $\mathbf{A}_p(p)$ e $\mathbf{B}_p(p)$ são calculadas:

$$\mathbf{A}_p(p) = \boldsymbol{\Delta}_p \left(\boldsymbol{\Sigma}_{p-1}^b \right)^{-1}, \quad (3.47)$$

$$\mathbf{B}_p(p) = \boldsymbol{\nabla}_p \left(\boldsymbol{\Sigma}_{p-1}^f \right)^{-1}. \quad (3.48)$$

Finalmente, os coeficientes $\mathbf{A}_p(\cdot)$ e $\mathbf{B}_p(\cdot)$ são obtidos a partir das seguintes equações de atualização:

$$\mathbf{A}_p(k) = \mathbf{A}_{p-1}(k) - \mathbf{A}_p(p)\mathbf{B}_{p-1}(p-k) \quad \text{para } 1 \leq k \leq p-1, \quad (3.49)$$

$$\mathbf{B}_p(k) = \mathbf{B}_{p-1}(k) - \mathbf{B}_p(p)\mathbf{A}_{p-1}(p-k) \quad \text{para } 1 \leq k \leq p-1. \quad (3.50)$$

Para que seja possível continuar com a recursão no passo $p + 1$, deve-se atualizar os vetores de erros e as matrizes Σ_p^f e Σ_p^b adotando as seguintes recursões:

$$\Sigma_p^f = \Sigma_{p-1}^f - \mathbf{A}_p(p) \nabla_p, \quad (3.51)$$

$$\Sigma_p^b = \Sigma_{p-1}^b - \mathbf{B}_p(p) \Delta_p. \quad (3.52)$$

$$\mathbf{e}_p^f(n) = \mathbf{e}_{p-1}^f(n) - \mathbf{A}_p(p) \mathbf{e}_{p-1}^b(n - p), \quad (3.53)$$

$$\mathbf{e}_p^b(n) = \mathbf{e}_{p-1}^b(n) - \mathbf{B}_p(p) \mathbf{e}_{p-1}^f(n + p). \quad (3.54)$$

Embora o algoritmo LWR necessite estimar mais grandezas que as envolvidas em (3.27), a complexidade computacional total dele é $\mathcal{O}(N_c^3 P^2)$. Isso pode ser deduzido com o seguinte raciocínio: o algoritmo realiza P vezes a sequência de passos descrita acima. Em cada um desses passos, ocorre um número de operações matemáticas proporcional a $N_c^3 P$, dentre as quais estão inclusas os produtos e inversões de matrizes. Se temos P passos com $N_c^3 P$ operações, então a complexidade computacional total é $\mathcal{O}(N_c^3 P^2)$ e apenas matrizes de dimensões $N_c \times N_c$ são invertidas. Vale lembrar que a complexidade da solução direta de (3.27) é $\mathcal{O}(N_c^3 P^3)$.

Para se ter uma idéia, suponha que temos uma série temporal multivariada com $N_c = 8$ canais e que se deseja estimar um modelo auto-regressivo de ordem $P = 5$. A solução direta das equações de Yule-Walker de multicanal envolveria inverter uma matriz com dimensões 48×48 , ao passo que as recursões LWR permitem trabalhar apenas com inversões de matrizes 8×8 .

O leitor mais atento terá notado que, de forma semelhante ao caso univariado, as atualizações dos coeficientes matriciais e dos erros de predição em cada passo p das recursões de LWR são feitas com auxílio de dois coeficientes, $\mathbf{A}_p(p)$ e $\mathbf{B}_p(p)$, a quem dá-se o nome de coeficientes matriciais de reflexão *forward* e *backward*, respectivamente.

Tal qual no caso univariado, existem métodos propostos na literatura que estimam os coeficientes de reflexão matriciais diretamente a partir dos dados. Entre diversas opções disponíveis, uma que se destacou ao longo dos anos foi o algoritmo de Nuttall-Strand (STRAND, 1977), proposto nos anos 70 como generalização para o caso multivariado do princípio de máxima entropia espectral. Já nos anos 80, o artigo de Marple e Nuttall (MARPLE; NUTTALL, 1983) mostrou com clareza a superioridade do algoritmo Nuttall-Strand em relação a outras opções da época, como o algoritmo Vieira-Morf (MORF; VIEIRA; KAILATH, 1978) e a solução direta das equações de Yule-Walker multicanal. Esta superioridade se evidenciou particularmente em situações com um número reduzido de amostras, fato bastante importante para o paradigma de sinal considerado neste trabalho.

3.2.5 Lidando com sinais não-estacionários

Modelos MVAR pressupõem que o processo estocástico $\mathbf{x}(n)$ é estacionário, o que se reflete no fato de seus coeficientes se manterem constantes ao longo do tempo. No entanto, existem diversas situações em que as séries temporais sob análise não podem ser consideradas estacionárias, como em registros de EEG durante atividades cognitivas ou experimentos sensoriais. Nesses casos, o principal objetivo é justamente descrever a não-estacionariedade do sinal, de modo a caracterizar a evolução temporal das características do processo que gera as amostras. Dito isso, é fácil perceber o grande interesse prático em definir uma extensão do conceito de modelo auto-regressivo para a análise de sinais não-estacionários, como em

$$\mathbf{x}(n) = \sum_{k=1}^P \mathbf{A}(k, n) \mathbf{x}(n - k) + \mathbf{u}(n), \quad (3.55)$$

em que se nota a dependência dos coeficientes com o tempo.

Tendo em mãos um modelo MVAR associado a cada instante de tempo n , pode-se, por exemplo, estudar a evolução temporal das densidades espectrais de potência de cada canal com auxílio de uma representação tempo-frequência. Outra possibilidade é estimar os valores das relações de causalidade entre os canais e analisar de que forma as conexões evoluem ao longo do tempo.

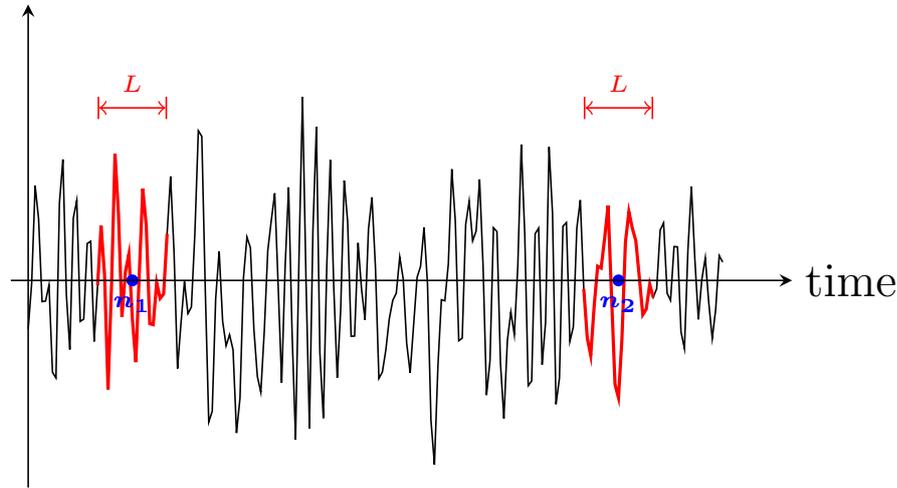
Vários algoritmos já foram propostos para estimar modelos auto-regressivos com coeficientes que variam no tempo (DING et al., 2000; KAIPIO, 1996; MOLLER et al., 2001; NIEDZWIECKI, 2000), sendo possível dividi-los em duas grandes classes: algoritmos adaptativos e algoritmos em bloco (HAYKIN, 1995).

Algoritmos de estimação em bloco

Nos algoritmos em bloco, as amostras utilizadas na estimação de $\hat{\mathbf{A}}(\cdot, n)$ pertencem a uma janela de $L + 1$ pontos adjacentes ao instante n , geralmente indo de $n - L/2$ a $n + L/2$ (L deve ser par neste caso). A escolha do tamanho deste intervalo é feita usando a hipótese de que o sinal $\mathbf{x}(n)$ pode ser considerado aproximadamente estacionário em pequenos intervalos de tempo. A partir dessas $L + 1$ amostras da janela deslizante, algoritmos clássicos de estimação MVAR como os apresentados na Seção 3.2.4 são empregados para estimar os conjuntos de matrizes $\hat{\mathbf{A}}(\cdot, n)$ a cada instante de tempo. A Figura 8 ilustra este processo em duas janelas diferentes.

É evidente a semelhança do processo descrito acima com algoritmos clássicos da análise tempo-frequência de sinais (MALLAT, 2008). Vale dizer que aqui também existe uma relação de compromisso a ser considerada ao escolher o tamanho de janela, uma vez que valores menores de L nos garantem resolução temporal melhor, mas, ao custo de

Figura 8 – Neste exemplo temos apenas um canal, com o qual desejamos estimar vários modelos auto-regressivos usando um procedimento de janela retangular deslizante. A figura representa as amostras usadas ao estimar os coeficientes nos instantes n_1 e n_2 .



Fonte: autoria própria

menos amostras disponíveis para estimar os coeficientes de cada modelo (acarretando em maior viés e variância nas estimativas).

Diversas heurísticas são possíveis para a escolha de L , indo desde considerações puramente práticas, como dizer que sinais de EEG são aproximadamente estacionários em janelas de algumas centenas de milissegundos (DING et al., 2000), a métodos que de fato analisam se a variância e a correlação entre canais são aproximadamente constantes em algum intervalo de tempo (DING et al., 2000). Em todo caso, o valor escolhido determina qual será o número de amostras disponíveis para estimar o modelo do sinal a cada instante de tempo, tendo impacto direto sobre a qualidade das estimativas de densidade espectral dos canais e relações de causalidade entre eles.

Uma das principais desvantagens de algoritmos em bloco é o fato da estimação dos conjuntos de coeficientes a cada instante de tempo não reaproveitarem informações sobre os modelos em instantes anteriores. Em casos em que o sinal $x(n)$ pode ser considerado não-estacionário mas com uma dinâmica temporal não muito rápida, tem-se um claro desperdício em termos de tempo de processamento, uma vez que não se lança mão da suavidade do sinal e a possíveis informações *a priori* que as estimativas em instantes anteriores podem dar sobre os coeficientes no instante atual.

Algoritmos adaptativos

Outra abordagem possível é a que usa algoritmos adaptativos. Nesse caso, a estimação dos coeficientes $\hat{\mathbf{A}}(\cdot, n)$ reaproveita os cálculos em instantes anteriores e garante

procedimentos otimizados e passíveis de serem aplicados em tempo real.

Um dos algoritmos adaptativos mais empregados na análise de sinais não-estacionários é o algoritmo RLS (*Recursive Least Squares*) com fator de esquecimento, conforme apresentado em (HAYKIN, 1995) e usado nos trabalhos de Moller em (MOLLER et al., 2001). Para estimar os coeficientes $\mathbf{A}(\cdot, n)$, esta proposta usa todos os valores do sinal anteriores a n , mas com uma ponderação, o fator de esquecimento, dando mais importância a amostras próximas do instante n . Com esta construção, o algoritmo é capaz de reaproveitar os modelos determinados em instantes anteriores e usá-los como ponto de partida para cada novo conjunto de coeficientes.

A implementação do RLS com fator de esquecimento costuma ser mais eficiente que a de algoritmos em blocos, o que é um forte atrativo no caso de aplicações em tempo real (HAYKIN, 1995). No entanto, no caso deste trabalho, os registros de EEG estão todas armazenadas de antemão e não há necessidade de processamento em tempo real. Ademais, diferentes trabalhos já mostraram que algoritmos RLS implementados sem muito cuidado são instáveis numericamente, devido ao possível acúmulo de erros numéricos ao longo da estimação (HAYKIN, 1995).

Vale ressaltar que a escolha de um fator de esquecimento não é tão intuitiva quanto a do tamanho de uma janela deslizante, o que pode ser um fator decisivo na escolha de um procedimento ou outro. Por outro lado, um algoritmo RLS com fator de esquecimento C nada mais é do que uma janela exponencial deslizante (NIEDZWIECKI, 1984), sendo possível calcular o tamanho de uma janela retangular equivalente L_{eq} com as mesmas características estatísticas do RLS, conforme discutido no Apêndice B e apresentado por Maciej Niedzwiecki em (NIEDZWIECKI, 2000).

3.3 CAUSALIDADE ENTRE SÉRIES TEMPORAIS

Ao estudar séries temporais multivariadas, é natural indagar-se quanto a possíveis influências que uma série temporal $x_j(n)$ tenha sobre outra $x_i(n)$. Outro nome para isto é a análise da causalidade do sinal do canal j sobre o canal i .

Por exemplo, se estivessemos monitorando ações da bolsa de valores, poderíamos nos perguntar como decisões políticas influenciam o mercado financeiro. Outro exemplo seria registrar o índice Wölfer de manchas solares ao longo de vários anos e observar como isto afeta a incidência de câncer de pele na população mundial.

No caso deste trabalho, o estudo de influências entre séries temporais é aplicado a sinais de EEG que, por sua vez, são interpretadas como indicativos de conectividade entre diferentes partes do cérebro (SAMESHIMA; BACCALÁ, 2014).

3.3.1 Definição e exemplos

Embora a noção intuitiva de causa e consequência seja natural para qualquer pessoa, defini-la matematicamente não é tarefa simples. Existem diferentes definições na literatura, sendo uma das mais utilizadas a atribuída a Clive Granger, nos 1960 (GRANGER, 1969).

Granger era um estudioso da área de econometria e se interessava justamente por caracterizar relações de causalidade entre séries temporais. A definição proposta por ele pode ser condensada da seguinte forma: se uma variável x afeta uma variável z , então a primeira deve ajudar de alguma forma a melhorar as previsões que se pode fazer a respeito da segunda. Embora esta definição pareça um pouco vaga, ela é suficiente para caracterizar precisamente a influência de uma série temporal $x_j(n)$ sobre outra $x_i(n)$ (LUTKEPOHL, 2007).

No contexto de processos auto-regressivos multivariados de ordem P , a causalidade de Granger de um canal j sobre um canal i (que passaremos a chamar simplesmente de causalidade) se traduz da seguinte forma:

$$\{x_j(n) \text{ não causa } x_i(n)\} \Leftrightarrow \{a_{ij}(k) = 0 \text{ para } k = 1, 2, \dots, P\}, \quad (3.56)$$

em que $a_{ij}(k)$ é o coeficiente (i, j) da matriz $\mathbf{A}(k)$ na definição da Equação (3.2).

Naturalmente, é possível estimar modelos MVAR(P) para registros de séries temporais multivariadas e realizar testes estatísticos com os coeficientes $\hat{a}_{ij}(k)$. Neste caso, é preciso recorrer à estatística assintótica dos coeficientes estimados de um modelo auto-regressivo, conforme discutido em (LUTKEPOHL, 2007).

Embora a caracterização da causalidade entre séries temporais descrita na Equação (3.59) seja bastante útil, seria interessante poder estendê-la ao domínio da frequência. Isto permitiria, por exemplo, usar sinais de EEG para analisar conexões entre partes do cérebro em diferentes bandas de frequência de interesse fisiológico.

Define-se, então, a coerência parcial direcionada (PDC),

$$\pi_{ij}(f) = \frac{\bar{A}_{ij}(f)}{\sqrt{\sum_{k=1}^m |\bar{A}_{kj}(f)|^2}}, \quad (3.57)$$

em que

$$\bar{A}_{ij}(f) = \begin{cases} 1 - \sum_{k=1}^p a_{ij}(k)e^{-j2\pi fk}, & \text{se } i = j \\ -\sum_{k=1}^p a_{ij}(k)e^{-j2\pi fk}, & \text{caso contrário} \end{cases} \quad (3.58)$$

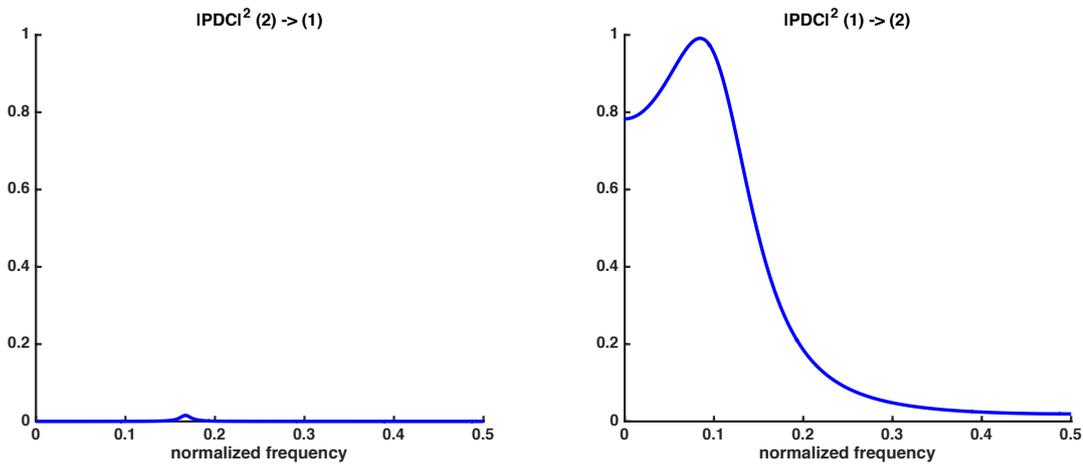
com $\mathbf{j} = \sqrt{-1}$ e f dada em unidades de frequência normalizada (BACCALÁ; SAMESHIMA, 2001). De modo análogo ao teste tradicional de causalidade de Granger, temos

$$\{x_j(n) \text{ não causa } x_i(n)\} \Leftrightarrow \{|\pi_{ij}(f)|^2 \text{ para } |f| \leq 0.5\}. \quad (3.59)$$

Da mesma forma que antes, pode-se estimar a PDC entre dois sinais a partir do modelo auto-regressivo multivariado que os descreve e realizar testes estatísticos sobre os valores de $|\hat{\pi}_{ij}(f)|^2$ para concluir quanto a existência de conexão de j para i na frequência f . Para tanto, são usados resultados assintóticos apresentados em (BACCALÁ; SAMESHIMA; TAKAHASHI, 2007) e que são discutidos na Seção 3.3.2.

A fim de ilustrar a análise de causalidade entre séries temporais usando a PDC, considere sinais gerados pelo processo MVAR(2) descrito na Equação (3.3) com $a_{21}(1) = 0.5$. A Figura 9 mostra os valores de $|\pi_{12}|^2$ e $|\pi_{21}|^2$, deixando claro que existe influência do canal 1 sobre o canal 2 e não o contrário. Além disso, nota-se que o pico de $|\pi_{21}|^2$ ocorre justamente na frequência do máximo da PSD de $x_1(n)$.

Figura 9 – Valores de $|\pi_{12}(f)|^2$ e $|\pi_{21}(f)|^2$ estimados a partir de um modelo MVAR(2) para os sinais na Figura 4.



Fonte: autoria própria

Vale ressaltar que da mesma maneira que a qualidade da estimação paramétrica da PSD de um sinal depende das características do modelo auto-regressivo, o estudo da causalidade entre duas séries temporais no espectro da frequência também só é bem sucedido se os devidos cuidados forem tomados. Por exemplo, suponha que $\mathbf{x}(n)$ seja um processo MVAR com $a_{12}(k) = 0$ para todo k , exceto para $k = 5$. Neste caso, se um modelo MVAR de ordem 2 for estimado para $\mathbf{x}(n)$, não se pode esperar que os valores de $|\pi_{12}|^2$ reflitam adequadamente a conexão do canal 2 para o canal 1.

Ao longo dos anos, a PDC se tornou uma ferramenta bastante conhecida entre pesquisadores interessados por caracterizar a conectividade neural (ASTOLFI et al., 2006b; KORZENIEWSKA et al., 2008; BIAZOLI et al., 2013), existindo, inclusive, adaptações para adequá-la a diferentes tipos de situação (TAKAHASHI; BACCALÁ; SAMESHIMA, 2010; OMIDVARNIA et al., 2014; PLOMP et al., 2014). Entre estas versões alternativas da

PDC, a g PDC, ou coerência parcial direcionada generalizada (BACCALÁ; SAMESHIMA; TAKAHASHI, 2007), é a de maior interesse neste trabalho, sendo a medida de conectividade empregada na maior parte dos resultados apresentados no Capítulo 5.

Define-se a g PDC da seguinte maneira:

$$g\pi_{ij}(f) = \frac{\frac{1}{\sigma_{ii}} \bar{A}_{ij}(f)}{\sqrt{\sum_{k=1}^m \frac{1}{\sigma_{kk}^2} |\bar{A}_{kj}(f)|^2}}, \quad (3.60)$$

em que a grandeza σ_{ii} representa o elemento na posição i da diagonal da matriz de covariância $\Sigma_{\mathbf{u}}$ do processo de inovações $\mathbf{u}(n)$ associado ao modelo MVAR de $\mathbf{x}(n)$.

A definição em (3.60) é motivada pelo fato da PDC não ser invariante por escala, o que significa que em casos em que as energias dos canais de $\mathbf{x}(n)$ são de ordens de grandeza muito diferentes, a estimação da coerência parcial direcionada entre elas pode ser problemática. Este é o caso, por exemplo, quando se analisa o conjunto de dados contendo registros de incidência de melanoma no estado de Connecticut (EUA) entre 1936 e 1972 e a evolução anual do índice Wölfer de manchas solares (dados disponíveis em (ANDREWS; HERZBERG, 1985)).

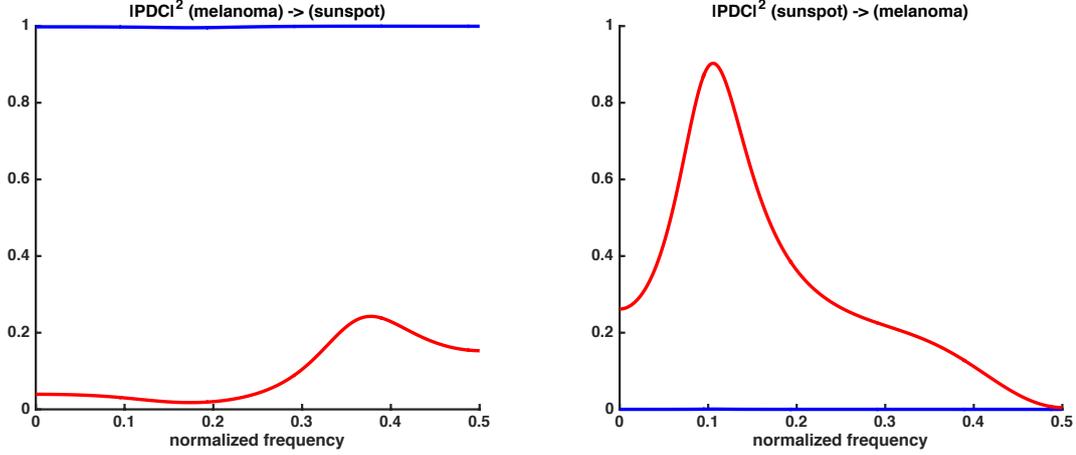
A Figura 10 ilustra a PDC entre as séries temporais e indica que há algo de muito errado nos resultados. Evidentemente, não seria razoável esperar que os casos de melanoma em Connecticut fossem capazes de causar alguma influência nas manchas do Sol, no entanto, isto é justamente o que a PDC indica. Tal resultado ocorre porque os valores da série temporal $x_{\text{melanoma}}(n)$ têm ordem de grandeza muito diferentes de $x_{\text{wölfer}}(n)$. Por outro lado, quando as relações de causalidade entre as séries temporais são estimadas com a g PDC, os resultados são mais condizentes com o esperado, isto é, que são as manchas solares que causam os casos de câncer de pele e não o contrário.

3.3.2 Testes de significância estatística

Conforme já mencionado, a nulidade de $\pi_{ij}(f)$ corresponde à ausência de conexão parcial direcionada entre os canais i e j de uma série temporal multivariada. No entanto, é preciso reconhecer que esta afirmação só faz sentido quando conhecemos perfeitamente os coeficientes do processo MVAR estudado. Quando a PDC é calculada a partir de estimadores dos coeficientes $\hat{\mathbf{A}}(k)$, deve-se levar em consideração os aspectos estatísticos de $\hat{\pi}_{ij}(f)$. Dito de outro modo, conclusões sobre a existência de conexão entre séries temporais só fazem realmente sentido quando feitas com base em testes estatísticos bem definidos.

Sendo assim, é importante que saibamos o comportamento estatístico de $\hat{\pi}_{ij}(f)$, ainda que seja apenas por meio de análises que consideram um número assintoticamente grande de amostras N_S no momento da estimação do modelo MVAR do sinal. Os trabalhos

Figura 10 – Em **azul**, os resultados da PDC entre as séries temporais que registram casos de melanoma em Connecticut (EUA) e o índice de Wolfer entre os anos de 1936 e 1972. Em **vermelho**, os valores estimados com a *gPDC* para estas mesmas séries temporais. Em ambos os casos as estimações foram feitas com modelos MVAR de ordem 4.



Fonte: autoria própria

em (TAKAHASHI; BACCALÁ; SAMESHIMA, 2007) e (BACCALÁ et al., 2013) descrevem esta análise assintótica, determinando intervalos de confiança para os valores estimados de $|\hat{\pi}_{ij}(f)|^2$. Conhecendo estes intervalos, é possível definir testes estatísticos e averiguar a significância estatística de valores de coerência parcial direcionada, como em

$$\begin{cases} \mathcal{H}_0 : |\pi_{ij}(f)|^2 = 0, \\ \mathcal{H}_1 : |\pi_{ij}(f)|^2 \neq 0. \end{cases} \quad (3.61)$$

Os principais resultados da análise assintótica da PDC são:

- *Reformulação da expressão da PDC*: é possível reescrever a expressão da PDC de j para i como sendo:

$$|\pi_{ij}(f)|^2 = \pi(\boldsymbol{\theta}, f) = \frac{\pi_n(\boldsymbol{\theta}, f)}{\pi_d(\boldsymbol{\theta}, f)}, \quad (3.62)$$

em que o vetor $\boldsymbol{\theta}$ é composto por todos os coeficientes $a_{ij}(k)$ do modelo MVAR e pelos valores das variâncias σ_{ij} na diagonal da matriz $\hat{\Sigma}_{\mathbf{u}}$.

- *Método Delta*: aplica-se o método Delta (CASELLA, 2008) ao estimador da PDC e determina-se a distribuição de $|\pi_{ij}(f)|^2$ em \mathcal{H}_0 e \mathcal{H}_1 .
- *Intervalos de confiança*: na hipótese \mathcal{H}_1 , o primeiro termo da expansão via método Delta indica que os valores de $|\pi_{ij}(f)|^2$ seguem uma lei normal

$$\sqrt{N_S} \left(|\hat{\pi}_{ij}(f)|^2 - |\pi_{ij}(f)|^2 \right) \rightarrow \mathcal{N}(0, \gamma^2(f)), \quad (3.63)$$

em que $\gamma^2(f)$ é uma variância cujo valor depende da frequência e de quais canais i e j estão sendo analisados (TAKAHASHI; BACCALÁ; SAMESHIMA, 2007).

- *Limiar para a hipótese nula:* sob a hipótese nula \mathcal{H}_0 , o primeiro termo da expansão do item anterior vale zero, sendo necessário que utilizemos o segundo termo. Nesse caso, tem-se que a distribuição de $|\hat{\pi}_{ij}(f)|^2$ segue uma combinação linear de variáveis com lei χ_1^2 e pesos $l_k(f)$ que dependem da frequência,

$$\pi_d(\boldsymbol{\theta}, f) N_S \left(|\hat{\pi}_{ij}(f)|^2 - |\pi_{ij}(f)|^2 \right) \rightarrow \sum_{k=1}^2 l_k(f) \chi_1^2. \quad (3.64)$$

A partir desse resultado, podemos calcular limiares para os quais a hipótese de inexistência de conexão entre os canais i e j deve ser rejeitada.

Os resultados descritos aqui estão resumidos, provendo pouca informação quanto as características dos coeficientes $\gamma^2(f)$ e $l_k(f)$. Optou-se por assim fazê-lo pois a dedução da expressão destas grandezas é bastante laboriosa, fugindo do escopo deste texto, cujo caráter é introdutório. O leitor interessado é aconselhado a ler os desenvolvimentos feitos em (SAMESHIMA; BACCALÁ, 2014) e (TAKAHASHI; BACCALÁ; SAMESHIMA, 2007). Todos os resultados descritos para a PDC podem ser adaptados para a g PDC, conforme descrito em (BRITO et al., 2010).

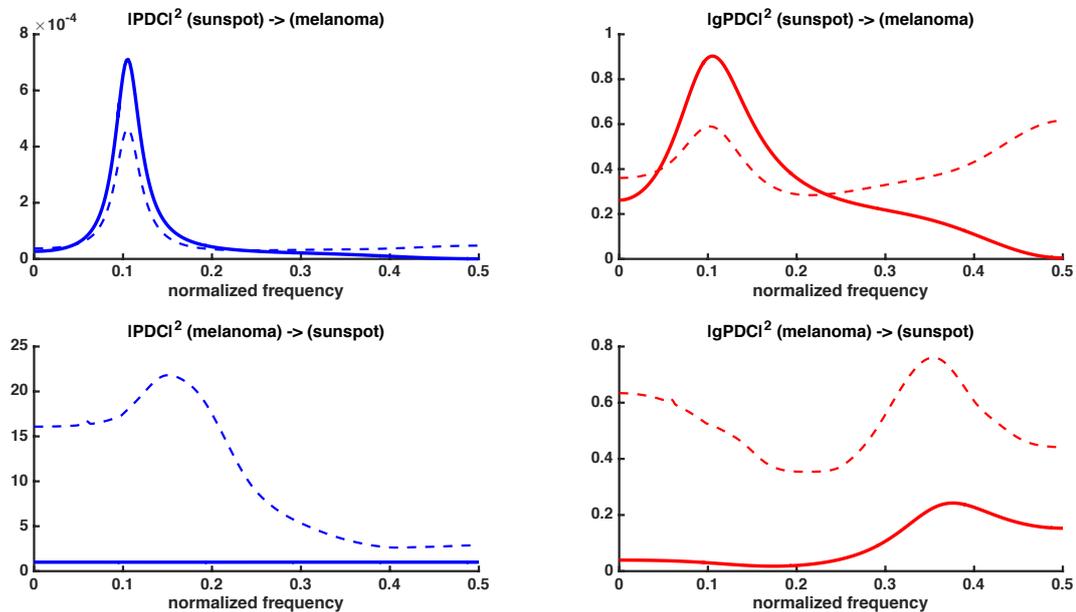
Para ilustrar o uso dos limiares de significância estatística da PDC, a Figura 11 mostra com linhas tracejadas os valores que a PDC e a g PDC entre as séries temporais da Figura 10 deveriam ter para que pudessem ser consideradas estatisticamente significantes. Note que neste caso as conclusões com ambos os estimadores serão corretas, a despeito dos possíveis desbalanços de energia em cada canal.

Por fim, cabe notar que em situações em que uma teoria assintótica bem estabelecida não está disponível, a análise da variabilidade das grandezas estimadas pode ser feita usando técnicas de reamostragem como o *bootstrap* (EFRON, 1979), como feito em (BACCALÁ; SAMESHIMA, 2006) e (ASTOLFI et al., 2008). Porém, paga-se o preço em termos de complexidade computacional, com rotinas de processamento que podem levar várias horas ou mesmo dias.

3.4 SINAIS DE EEG E POTENCIAIS EVENTO-RELACIONADOS

As ferramentas matemáticas apresentadas até aqui foram definidas em um contexto amplo de séries temporais, sem atenção a qualquer aplicação específica. No entanto, como o título do trabalho indica, o principal interesse aqui foi desenvolver algoritmos e aplicá-los ao estudo da causalidade entre sinais de EEG contendo potenciais evento-relacionados. Com auxílio destes sinais, tenta-se compreender um pouco mais sobre o funcionamento do cérebro em diferentes contextos.

Figura 11 – Resultados obtidos sob as mesmas condições da Figura 10. As linhas tracejadas indicam limiares de rejeição da hipótese nula de inexistência de conexão a um nível de confiança de 5%.

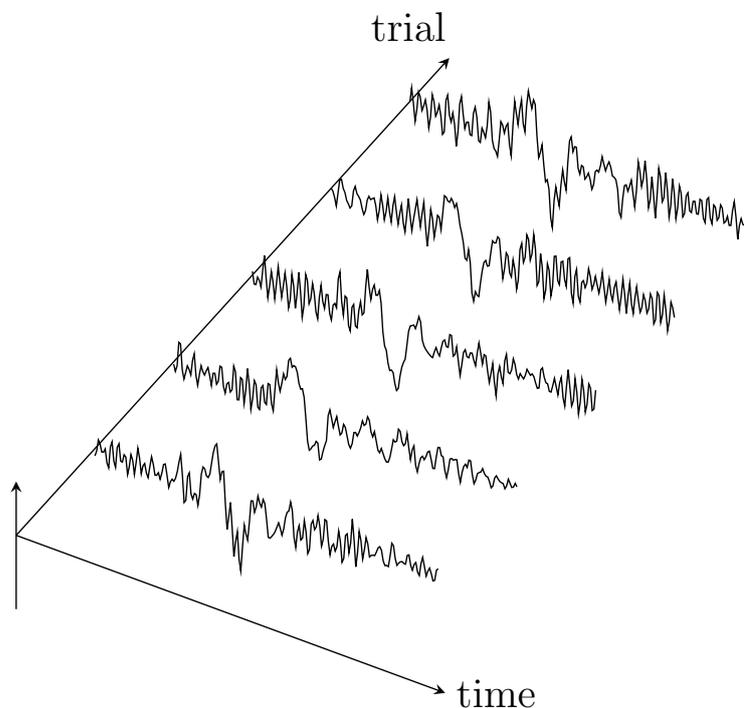


Fonte: autoria própria

Sinais de EEG coletados em protocolos experimentais nos quais são feitos estímulos visuais, auditivos ou sensoriais têm uma característica bastante marcante, conforme se vê na Figura 12. Durante o tempo em que o sujeito fica em repouso aguardando o estímulo, o sinal evolui sem muitas flutuações em torno de um comportamento médio. Logo após o estímulo, a série temporal apresenta uma mudança brusca de dinâmica temporal, descrevendo um tipo de oscilação que destoa de seu comportamento pré-estímulo. Neste momento, o sinal de EEG não pode mais ser considerado um processo estacionário (DING et al., 2000; KORZENIEWSKA et al., 2008) e deve ser analisado com auxílio das técnicas discutidas na Seção 3.2.5. Um fato notório é que a oscilação que surge após cada estímulo tem uma forma de onda aproximadamente consistente ao longo das várias realizações do experimento (LUCK, 2005), à qual se dá o nome de potencial evento-relacionado (ERP). A Figura 12 ilustra alguns exemplos de ERPs em sinais de EEG simulados.

Não se pretende realizar aqui uma apresentação extensiva de métodos e protocolos em experimentos com EEG. Na realidade, a intenção é discutir alguns aspectos importantes que justificam uma abordagem baseada em séries temporais e modelos auto-regressivos ao estudo da dinâmica temporal da conectividade neural de um sujeito.

Figura 12 – Exemplo de realizações de sinais evento-relacionados. Os dados foram obtidos por meio de simulações usando modelos matemáticos propostos em (DAVID; FRISTON, 2003) e discutidos na Seção 3.5.



Fonte: autoria própria

3.4.1 Modelo utilizado

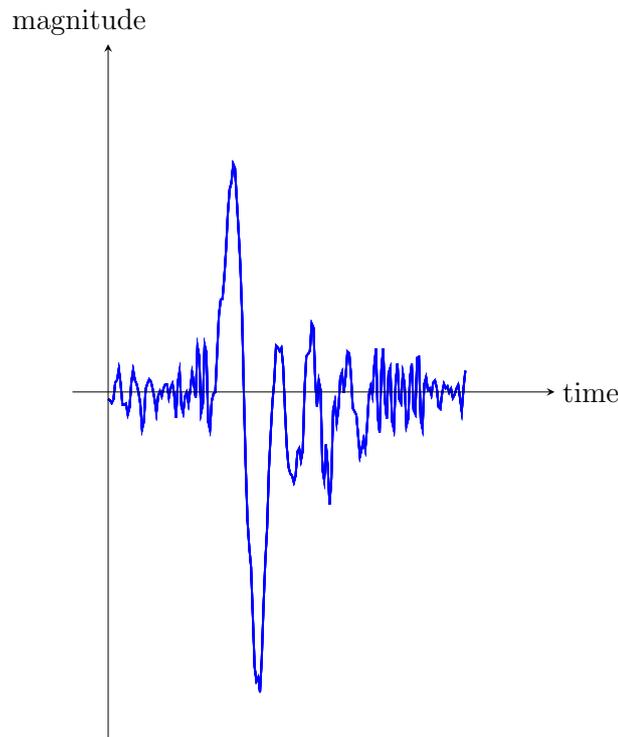
Tradicionalmente, os estudos de potenciais evento-relacionados limitaram-se à análise de um sinal médio obtido a partir da medianização de ERPs ao longo de vários *trials* (LUCK, 2005), ao qual se dá o nome de sinal evocado. A partir desta forma de onda média, diversas hipóteses costumam ser feitas sobre o processo de cognição ou de resposta sensorial que ocorre no experimento.

Características relevantes do sinal evocado são: número de picos positivos e negativos, tempo de latência de cada um desses picos, amplitude dos picos em certos instantes de tempo, entre outros (LUCK, 2005). A Figura 13 mostra um exemplo de sinal de ERP médio calculado a partir da média síncrona (ou de *ensemble*) dos sinais da Figura 12.

Como se pode imaginar, um estudo que se restrinja à análise de um sinal médio conta apenas uma parte da história. Estudos recentes (DAVID; FRISTON, 2003; DAVID; KILNER; FRISTON, 2006; DAVID et al., 2006; ARIELI et al., 1996; TRUCCOLO et al., 2002) discutem a importância de levarmos em conta a variabilidade dos sinais de ERP ao longo dos *trials*, uma vez que tal propriedade é muitas vezes reflexo de mudanças estruturais entre diferentes partes do cérebro sob análise¹.

¹ Por mudança estrutural refere-se a possíveis alterações sinápticas ou anatômicas entre diferentes

Figura 13 – Sinal médio associado aos potenciais evento-relacionados da Figura 12.



Fonte: autoria própria

Um dos modelos propostos na literatura (DAVID et al., 2006), e usado aqui, sugere que um sinal $s(t)$ ($t \in \mathbf{R}$) de EEG medido durante o advento de um ERP pode ser decomposto da seguinte maneira:

$$s(t) = b(t) + e(t), \quad (3.65)$$

em que $b(t)$ representa o sinal associado à dinâmica de fundo do cérebro e $e(t)$ é um sinal que surge devido ao estímulo externo. Dizemos que $e(t)$ representa a parcela evento-relacionada de $s(t)$ e $b(t)$ está associada às características quiescentes do cérebro sem o estímulo.

O sinal $e(t)$ pode, ainda, ser decomposto em duas partes,

$$e(t) = e_{\text{pvk}}(t) + e_{\text{ind}}(t). \quad (3.66)$$

O termo $e_{\text{pvk}}(t)$, chamado aqui de sinal provocado, representa uma espécie de resposta ao impulso unitário do cérebro, com uma forma de onda aproximadamente constante ao longo dos *trials* a menos de uma pequena variabilidade nos valores de amplitude e período de latência (TRUCCOLO et al., 2002).

estruturas corticais, possíveis por conta da plasticidade do cérebro.

Já $e_{\text{ind}}(t)$ é um sinal sincronizado em tempo, mas não em fase, ao estímulo externo, associado a mudanças estruturais do cérebro e responsável por grande parte da variabilidade dos ERPs em cada *trial*.

Em (DAVID; KILNER; FRISTON, 2006), a parcela $e_{\text{ind}}(t)$ é chamada de sinal induzido, mas outros trabalhos como (PFURTSCHELLER et al., 2006) e (PFURTSCHELLER; Lopes Da Silva, 1999) chamam o sinal $|e_{\text{ind}}(t)|^2$ de sincronização ou dessincronização cortical (ERS/ERD). Cabe notar que diversos trabalhos recentes têm explorado o papel de sinais de ERS e ERD em diferentes fenômenos neuronais, como em (TOLEDO et al., 2016) e (ROACH; MATHALON, 2008).

Tomando como hipótese que as características estocásticas do sinal $e_{\text{ind}}(t)$ são tais que sua média síncrona ao longo de múltiplos *trials* é nula (DAVID et al., 2006), pode-se escrever

$$\langle e_{\text{ind}}(t) \rangle = \frac{1}{N_T} \sum_{r=1}^{N_T} e_{\text{ind}}(t, r) \simeq 0, \quad (3.67)$$

em que $e_{\text{ind}}(t, r)$ representa a r -ésima realização de $e_{\text{ind}}(t)$ e N_T é o número total de realizações do experimento.

Usando o modelo matemático apresentado anteriormente e mantendo a notação de indexação de sinais de cada *trial*, percebe-se que o procedimento clássico de média síncrona de potenciais evento-relacionados pode ser modelado por

$$\langle s(t) \rangle = \frac{1}{N_T} \sum_{r=1}^{N_T} s(t, r) = \frac{1}{N_T} \sum_{r=1}^{N_T} b(t, r) + \frac{1}{N_T} \sum_{r=1}^{N_T} e_{\text{ind}}(t, r) + \frac{1}{N_T} \sum_{r=1}^{N_T} e_{\text{pvk}}(t, r). \quad (3.68)$$

Considerando que a dinâmica de fundo $b(t)$ é tal que sua média ao longo dos trials é zero, o que não é uma hipótese muito restritiva (DAVID; KILNER; FRISTON, 2006; ARIELI et al., 1996), tem-se

$$\langle s(t) \rangle \simeq \frac{1}{N_T} \sum_{r=1}^{N_T} s_{\text{pvk}}(t, r) = \langle e_{\text{pvk}}(t) \rangle. \quad (3.69)$$

O sinal $\langle s(t) \rangle$ é de fato importante na análise de sinais ERP, porém, estudos que tratam apenas de investigar as características desse sinal médio acabam desconsiderando os efeitos associados ao sinal $e_{\text{ind}}(t)$. No modelo de sinal apresentado aqui, as séries temporais utilizadas são denotadas por $x(t, r)$, em que

$$x(t, r) = s(t, r) - \langle s(t) \rangle \simeq b(t, r) + e_{\text{ind}}(t, r), \quad (3.70)$$

ou seja, sinais cuja parcela provocada do ERP foi extraída. Uma das principais consequências deste fato é que os sinais considerados têm média nula ao longo das realizações, característica essencial ao bom funcionamento de estimadores de modelos auto-regressivos (MARPLE, 1987).

No decorrer deste trabalho, as estimações de conectividade neural durante ERPs são feitas a partir da análise dos sinais $x(t, r)$ em diferentes partes do escalpo do sujeito do experimento.

Devido ao interesse pela evolução temporal da conectividade neural em experimentos com ERPs, não há necessidade de distinguir quais conexões detectadas são devidas à dinâmica de fundo e quais ao sinal $e_{\text{ind}}(t, r)$. Um trabalho que se interessasse em fazer tal distinção precisaria considerar também explicações anatômicas e fisiológicas do cérebro, o que foge do escopo deste projeto.

A extração de informações dos registros experimentais via computador é possível se feita a partir de versões amostradas do sinal $x(t, r)$, que denotaremos por $x(n, s)$, em que n é um número inteiro que indexa o tempo e s indica a realização (ou *trial*) considerada.

Outro aspecto prático a ser levado em conta é o fato de que experimentos de EEG são feitos usando vários eletrodos conectados ao escalpo do sujeito sob estudo. A notação matemática adotada é a seguinte: a cada eletrodo i se associa um conjunto de dados $x_i(n, s)$ que representa as séries temporais registradas naquele eletrodo durante a realização do s -ésimo *trial* do experimento. Supondo N_c eletrodos (ou canais), pode-se usar a notação de séries temporais multivariadas como em

$$\mathbf{x}(n, s) = \begin{bmatrix} x_1(n, s) & x_2(n, s) & \cdots & x_m(n, s) \end{bmatrix}^T.$$

3.5 MODELOS PARA SIMULAÇÃO DE EEG E ERP

Conforme mencionado anteriormente, houve um grande interesse em propor exemplos mais realistas que os geralmente encontrados na literatura de processamento de sinais biomédicos, especialmente na área de estimadores de conectividade neural. Deste modo, uma das propostas deste trabalho foi estudar modelos matemáticos para simular sinais de EEG em colunas corticais.

Os trabalho de Lopes da Silva nos anos 70 foram pioneiros nesta área, nos quais os primeiros modelos de massas neurais (ou *neural mass models*) (SILVA et al., 1974) tornaram possível simular séries temporais com características qualitativas muito semelhantes às aquelas encontradas em sinais de EEG reais.

Extensões feitas por Jansen (JANSEN; ZOURIDAKIS; BRANDT, 1993; JANSEN; RIT, 1995) e David (DAVID; KILNER; FRISTON, 2006) nos anos 90 e 2000, respectivamente, permitiram a simulação de sinais de EEG em mais de uma coluna cortical e considerar conexões entre elas. Com isto, abriu-se um horizonte de possibilidades, como a geração de sinais de EEG para exemplos de conectividade neural e simulações da propagação de potenciais evento-relacionados entre colunas corticais.

O texto que segue é uma apresentação sucinta dos principais resultados desta área

e visa prover subsídios para que o leitor interessado possa explorar as opções que existem na área de simulação de sinais de EEG.

3.5.1 Modelo não-linear de geração de sinais de EEG

O modelo de geração de sinais proposto em (SILVA et al., 1974) se baseia em considerações neurofisiológicas, partindo do conhecido fato de que o córtex cerebral pode ser dividido em colunas. Cada coluna cortical é modelada por uma população de células piramidais que recebem sinapses excitatórias e inibitórias de interneurônios da própria coluna, além de sinapses excitatórias vindas de outras colunas corticais vizinhas.

O modelo matemático em questão é chamado de “concentrado”, em oposição a outros chamados de “distribuídos”. Em um modelo concentrado, o comportamento dos vários neurônios de cada população é modelado conjuntamente por meio de uma só constante ou função. Já no caso distribuído, a simulação numérica é feita para cada um dos neurônios, levando em consideração a posição espacial de cada um deles além de possíveis interações com seus vizinhos. Como se pode imaginar, em um modelo distribuído a simulação é muito mais demorada, embora a riqueza das informações obtidas seja útil para alguns tipos de estudo (SILVA et al., 1974). Em uma analogia com a área de engenharia elétrica, pode-se dizer que a análise de circuitos elétricos a partir das leis de Kirchhoff adota um modelo concentrado dos elementos, ao passo que um modelo distribuído utiliza as equações de Maxwell para calcular precisamente as influências entre os campos elétricos e magnéticos de cada ponto do circuito.

Quando se adota o modelo concentrado na descrição de colunas corticais, a geração dos sinais de EEG acaba sendo fruto de uma série de relações não-lineares entre dois tipos grandezas: a densidade de pulsos, ou densidade de potenciais de ação, que representa a quantidade média de potenciais de ação disparados em um determinado instante de tempo por uma determinada população de neurônios, e o potencial de membrana dos neurônios, que modela a média do potencial elétrico nos diversos neurônios das populações da coluna.

O modelo matemático proposto por (SILVA et al., 1974) associa a cada uma destas populações de neurônios (células piramidais e interneurônios) dois tipos de blocos. O primeiro bloco transforma a densidade média de potenciais de ação em um valor médio de potencial de membrana pós-sináptico, que pode ser tanto excitatório quanto inibitório. Este bloco é chamado de bloco PSP (*post-synaptic potential*) e representa uma transformação muito usada em modelos sinápticos na área de neurociência computacional, a função alfa (DAYAN; ABBOTT, 2005). No caso de uma sinapse excitatória, temos

$$h_e(t) = \begin{cases} Aa \cdot te^{-at} & t \geq 0 \\ 0 & t < 0 \end{cases}, \quad (3.71)$$

ao passo que em sinapses inibitórias

$$h_i(t) = \begin{cases} Bb \cdot t e^{-at} & t \geq 0 \\ 0 & t < 0 \end{cases} \quad (3.72)$$

Considerações sobre os valores dos coeficientes A, B, a e b e a escolha da forma das funções $h_i(t)$ e $h_e(t)$ podem ser encontradas nos trabalhos de Lopes da Silva em (SILVA et al., 1974) e Jansen em (JANSEN; RIT, 1995).

O segundo tipo de bloco transforma os valores médios de potencial de membrana em densidade de potenciais de ação, seguindo uma função sigmóide dada por:

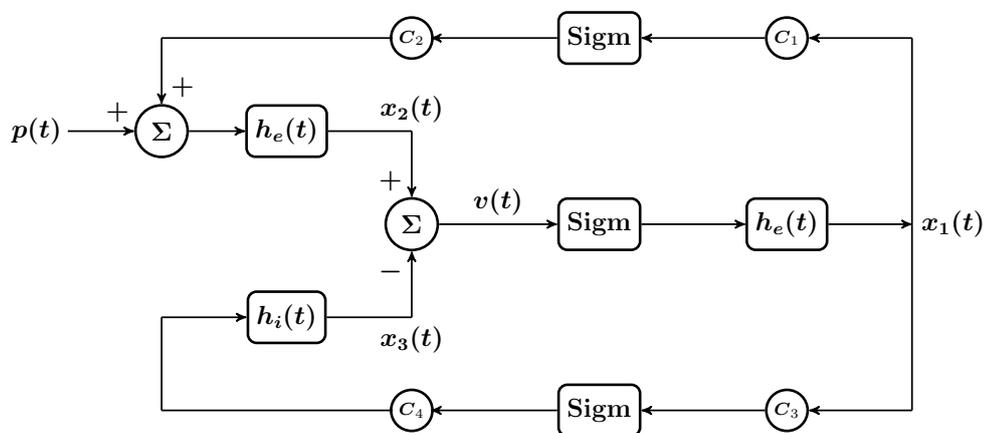
$$\mathcal{S}(v) = \frac{2e_0}{1 + e^{r(v-v_0)}}, \quad (3.73)$$

em que v representa o potencial de membrana da população de neurônios em questão. Considerações sobre a escolha dos valores das constantes e_0, r e v_0 também podem ser encontradas em (SILVA et al., 1974) e (JANSEN; RIT, 1995).

A influência dos potenciais de ação disparados por neurônios em colunas corticais vizinhas é modelada com um sinal $p(t)$, que representa a densidade de potenciais de ação vindos de colunas vizinhas. Conforme mostrado em (JANSEN; RIT, 1995), $p(t)$ costuma ser gerado por um sinal aleatório sem correlação temporal, com valores a cada instante de tempo sorteados a partir de uma distribuição estatística uniforme.

O modelo de geração de sinais de EEG usado aqui é o proposto por Jansen em (JANSEN; RIT, 1995), que apresenta algumas extensões em relação ao modelo proposto por Lopes da Silva em (SILVA et al., 1974). O diagrama na Figura 14 ilustra as interligações entre as diferentes populações consideradas no modelo da coluna cortical. As constantes

Figura 14 – Diagrama do modelo não linear de geração de sinais de EEG proposto em (JANSEN; RIT, 1995).



Fonte: adaptado de (JANSEN; RIT, 1995)

C_1, C_2, C_3, C_4 representam as interações entre as populações de células piramidais e de interneurônios. Denotamos por $v(t)$ o sinal de EEG simulado pelo modelo.

Cada bloco PSP na Figura 14 introduz uma equação diferencial na forma de

$$\ddot{y}(t) = Aau(t) - 2a\dot{y}(t) - a^2y(t) \quad (3.74)$$

para o caso excitatório e

$$\ddot{y}(t) = Bbu(t) - 2b\dot{y}(t) - b^2y(t) \quad (3.75)$$

no caso inibitório, em que $u(t)$ representa a entrada do bloco e $y(t)$ a saída. Os sinais de A, a, B, b são escolhidos de modo a garantir sub-sistemas com caráter excitatório ou inibitório.

Reescrevendo as equações diferenciais de cada bloco na forma de equações de estado, isto é, com

$$\begin{cases} \dot{y}(t) = z(t) \\ \dot{z}(t) = Aau(t) - 2az(t) - a^2y(t) \end{cases} \quad (3.76)$$

para o caso excitatório e

$$\begin{cases} \dot{y}(t) = z(t) \\ \dot{z}(t) = Bbu(t) - 2bz(t) - b^2y(t) \end{cases} \quad (3.77)$$

para o caso inibitório, chegamos em um sistema de equações diferenciais:

$$\dot{x}_1(t) = x_4(t); \quad \dot{x}_2(t) = x_5(t); \quad \dot{x}_3(t) = x_6(t), \quad (3.78)$$

$$\dot{x}_4(t) = Aa \cdot \mathcal{S}(x_2(t) - x_3(t)) - 2ax_4(t) - a^2x_1(t), \quad (3.79)$$

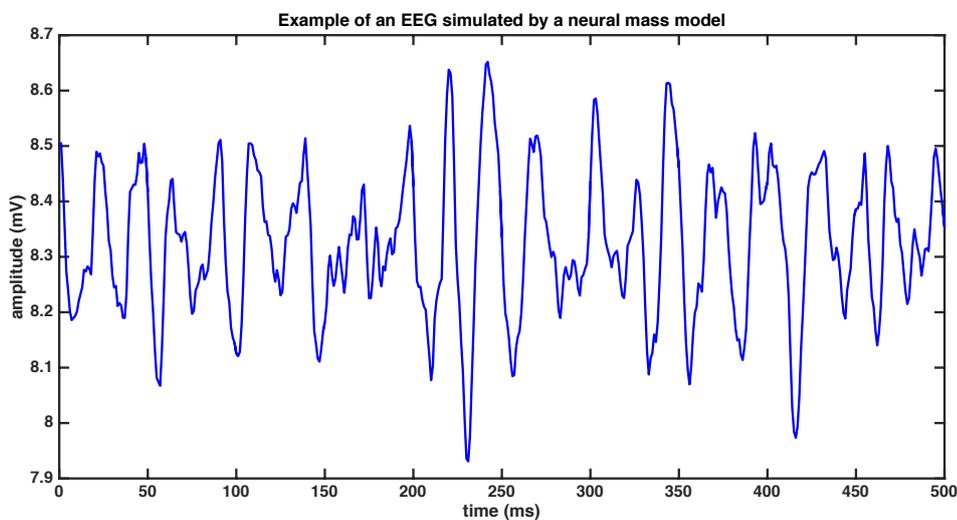
$$\dot{x}_5(t) = Aa \cdot \left(p(t) + C_2 \cdot \mathcal{S}(C_1x_1(t)) \right) - 2ax_5(t) - a^2x_2(t), \quad (3.80)$$

$$\dot{x}_6(t) = Bb \cdot \left(C_4 \cdot \mathcal{S}(C_3x_1(t)) \right) - 2bx_6(t) - b^2x_3(t), \quad (3.81)$$

em que as grandezas $x_1(t), x_2(t)$ e $x_3(t)$ estão representadas explicitamente na Figura 14 e $x_4(t), x_5(t)$ e $x_6(t)$ são variáveis de estado internas aos blocos PSP. O sinal de EEG simulado pelo modelo é obtido a partir de $v(t) = x_2(t) - x_3(t)$.

A Figura 15 ilustra um exemplo de sinal de EEG simulado usando o modelo descrito, em que o conjunto de parâmetros foi escolhido com base nos valores propostos em (JANSEN; RIT, 1995). Para confirmar se o sinal tem de fato as características espectrais desejadas, sua densidade espectral de potência está ilustrada na Figura 16, em que se nota um pico bastante evidente na região dos 10 Hz, como é o caso de sinais de EEG em ritmo alfa, além de um decaimento na forma de $1/f$, característica típica de sinais de EEG.

Figura 15 – Exemplo de sinal de EEG simulado usando parâmetros propostos em (JANSEN; RIT, 1995). O sinal emula oscilações características do ritmo alpha.



Fonte: autoria própria

3.5.2 Interligando colunas corticais

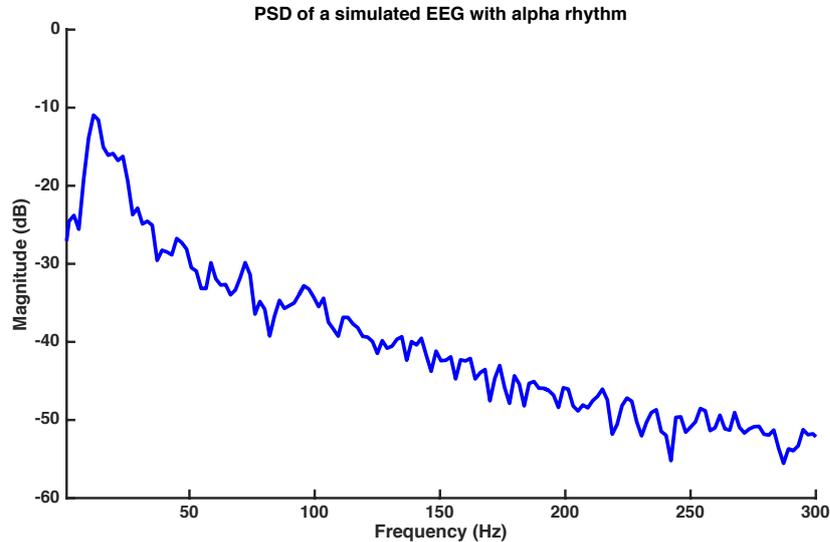
Além de simulações de sinais de EEG captados no escalpo e associados à atividade de colunas corticais individuais, houve interesse em simular possíveis interações entre colunas, partindo da hipótese de que estas interações são responsáveis por certos componentes dos potenciais evento-relacionados, conforme discutido em (JANSEN; ZOURIDAKIS; BRANDT, 1993), (JANSEN; RIT, 1995) e (DAVID; COSMELLI; FRISTON, 2004). Para tanto, foi necessário estender o modelo apresentado na Figura 14, seguindo as considerações feitas em (JANSEN; RIT, 1995) e (DAVID; COSMELLI; FRISTON, 2004). No caso mais simples, em que apenas duas colunas corticais são interligadas, o diagrama na Figura 17 ilustra os coeficientes extras necessários. As constantes k_{21} e k_{12} modulam as possíveis conexões entre as colunas e a_d o tempo de atraso associado à propagação dos sinais.

Fazendo as mesmas considerações da Seção 3.5.1 sobre as equações diferenciais associadas a cada bloco PSP, o modelo interligado representado na Figura 17 pode ser descrito por um sistema não-linear composto de 16 equações diferenciais, conforme discutido em (JANSEN; RIT, 1995).

3.5.3 Gerando potenciais evento-relacionados

Fazendo pequenas adições aos modelos não-lineares apresentados acima, é possível simular sinais com as mesmas características qualitativas de potenciais evento-relacionados observados em procedimentos experimentais. Para tanto, segue-se a proposta feita em (JANSEN; RIT, 1995), em que o disparo de um potencial evento-relacionado em uma coluna

Figura 16 – Estimação da densidade espectral de potência do sinal representado na Figura 15. Utilizamos o método de Welch com janelas de 256 pontos e 50% de sobreposição. A frequência de amostragem é 1000 Hz.



Fonte: autoria própria

i é feito por meio de um curto pulso adicionado ao sinal de entrada $p_i(t)$, gerando um transiente no sinal de EEG da coluna. Sendo assim, o ERP é disparado adicionando

$$p_{\text{evk}}(t) = q \left(\frac{t}{w} \right)^n e^{-t/w} \quad (3.82)$$

ao sinal $p(t)$ que entra na coluna cortical. Os parâmetros q , w e n são escolhidos para garantir que o pulso $p_{\text{evk}}(t)$ seja suficientemente curto e intenso, de modo a causar os efeitos desejados no sinal de EEG da coluna cortical (JANSEN; RIT, 1995).

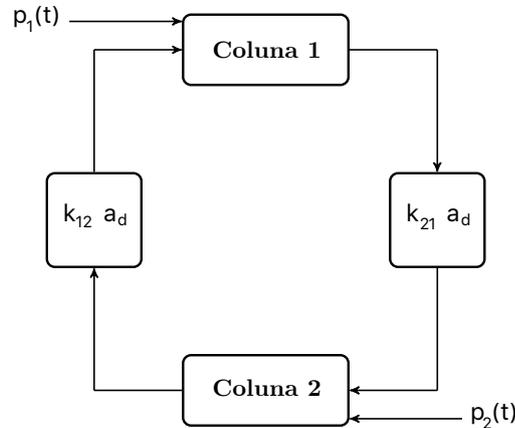
Devido às interligações entre as colunas corticais modeladas, um transiente no EEG da coluna i será propagado para os sinais de EEG nas colunas vizinhas. Essa propagação tem características qualitativas semelhantes às encontradas experimentalmente, tendo sido bastante útil nas simulações numéricas deste trabalho.

A Figura 18 mostra alguns exemplos de potenciais evento-relacionados simulados no caso de duas colunas corticais interligadas.

3.6 CONCLUSÕES DO CAPÍTULO

Este capítulo formalizou diversos conceitos envolvidos no estudo de conectividade neural, como modelos paramétricos de sinal e descrições de causalidade entre séries temporais. Evitou-se discutir detalhes muito técnicos de cada assunto, prezando por explicações conceituais e esclarecimentos de algumas confusões recorrentes entre pesquisadores e engenheiros.

Figura 17 – Diagrama de interligação entre duas colunas corticais (JANSEN; RIT, 1995). O conjunto de constantes C_1, C_2, C_3, C_4 associado a cada coluna pode variar, assim como os valores de A, a, B, b e v_0 . Os sinais $p_1(t)$ e $p_2(t)$ representam as influências dos potenciais de ação disparados por neurônios vizinhos às colunas 1 e 2, respectivamente.



Fonte: autoria própria

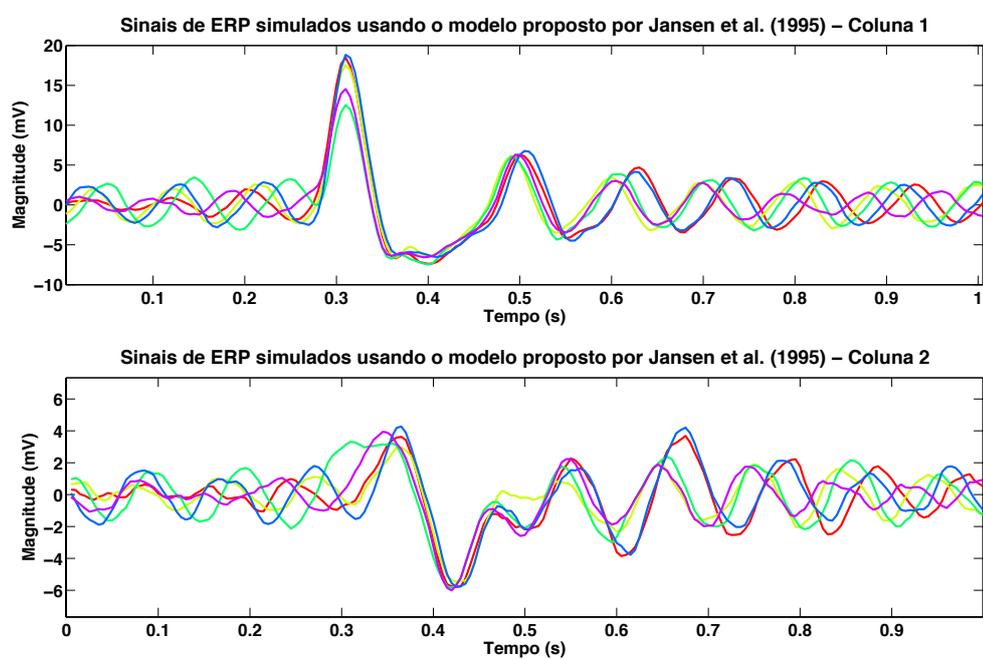
Uma excelente fonte para se aprofundar no estudo de séries temporais é o livro (BROCKWELL; DAVIS, 2009), em que se adota o formalismo de espaços de Hilbert para compreender processos auto-regressivos e são apresentados diversos testes estatísticos para inferências em séries temporais. O livro (MARPLE, 1987) é outra boa referência, com uma abordagem mais próxima daquela feita em departamentos de engenharia elétrica, em que séries temporais são tratadas como sinais aleatórios de tempo discreto.

Naturalmente, o estudo de séries temporais multivariadas é consideravelmente mais complicado que o de séries univariadas. Talvez por isso, as opções de leitura de tal tema são mais escassas que no caso univariado. No entanto, o livro (LUTKEPOHL, 2007) é uma excelente referência, trazendo uma vasta coletânea de testes estatísticos para a inferência de causalidade entre séries temporais além de resultados assintóticos sobre a distribuição estatística dos estimadores dos coeficientes $\hat{a}_{ij}(k)$.

Existem diversas referências de muito boa qualidade para quem quer se aprofundar na área de estimação espectral. O livro (PERCIVAL; WALDEN, 1993) apresenta uma excelente introdução à estimação não-paramétrica do espectro de um sinal, apontando os prós e os contras de algoritmos propostos na literatura. Outra boa referência é o livro (MARPLE, 1987), que discute com mais profundidade opções de estimação espectral paramétrica baseada não só em modelos AR, mas, também, modelos MA (média móvel) e ARMA.

O próximo capítulo apresenta detalhes técnicos das implementações de algoritmos feitas ao longo deste trabalho e que culminaram nos resultados expostos no Capítulo 5, além de especificar as características das simulações e bases de dados reais.

Figura 18 – Exemplos de sinais de ERP simulados com o modelo matemático proposto em (JANSEN; RIT, 1995). As curvas em diferentes cores representam os sinais obtidos em diferentes realizações.



Fonte: autoria própria

4 MATERIAIS E MÉTODOS

4.1 INTRODUÇÃO

O capítulo a seguir apresenta detalhes práticos das simulações e estimações realizadas ao longo deste trabalho, visando prover informações que permitam reproduzir os resultados descritos no Capítulo 5. Primeiramente, na Seção 4.2, alguns pontos importantes da geração de sinais com *toy models* são discutidos, como o descarte de amostras iniciais e a obtenção de múltiplos trechos estatisticamente independentes. Em seguida, considerações como pré-processamento de sinais e escolha de ordem de modelo são ilustrados no caso da estimação de modelos MVAR com vários segmentos (Seção 4.3) e de janela deslizante (Seção 4.4). Detalhes da análise de significância estatística das estimativas de conectividade são apresentados na Seção 4.5. Por fim, na Seção 4.6, descreve-se a base de dados à qual os algoritmos foram aplicados.

4.2 SIMULAÇÕES COM *TOY MODELS*

Sempre que se desenvolvem algoritmos para estimar modelos, é fundamental ser capaz de propor exemplos de aplicação sobre os quais se tem controle total das condições de teste. No caso aqui deste trabalho, os exemplos propostos utilizam sinais gerados por “*toy models*” com parâmetros conhecidos e cuidadosamente escolhidos para que diferentes aspectos do algoritmo de estimação sejam analisados. Duas classes de *toy models* são empregadas: processos puramente auto-regressivos e modelos não lineares de colunas corticais, também chamados de *neural mass models*.

4.2.1 Simulação de processos auto-regressivos

Considere um processo MVAR de dimensão N_C e ordem P como o dado por

$$\mathbf{x}(n) = \sum_{k=1}^P \mathbf{A}(k)\mathbf{x}(n-k) + \mathbf{u}(n), \quad (4.1)$$

em que $\mathbf{u}(n)$ é um processo de inovações Gaussiano com matriz de covariância $\Sigma_{\mathbf{u}}$.

Nos exemplos, diferentes escolhas de matrizes $\mathbf{A}(k)$ são feitas, de modo a criar conexões arbitrárias entre canais e oscilações em diferentes frequências.

Ao gerar N_S amostras de um processo MVAR, é preciso lembrar que as condições iniciais da simulação, isto é, os valores de

$$\mathbf{x}(1), \dots, \mathbf{x}(P),$$

são responsáveis por efeitos transitórios cujas estatísticas em seu início não corresponderem àquelas do regime estacionário de $\mathbf{x}(n)$ (MARPLE, 1987). Uma forma simples de contornar este problema é usar a técnica de *burn-in*, na qual se descarta um número N_B de amostras iniciais da simulação. A motivação para tal procedimento vem do fato de que transientes, como o próprio nome indica, são passageiros, tendo seus efeitos anulados a partir de um número suficientemente grande de amostras. Em geral, N_B costuma ser escolhido sem muito rigor, na ordem de alguns milhares de amostras (VALDÉS-SOSA et al., 2005; SCHELTER, 2006).

Neste trabalho, a simulação de *toy models* baseados em processos MVAR é feita usando uma escolha adaptativa de N_B em função das características do processo a ser gerado. Optou-se por tal abordagem pois existe uma relação direta entre os coeficientes do processo MVAR e a duração de seus transientes, sendo possível, portanto, escolher valores de N_B que não sejam muito maiores (ou menores) do que o necessário.

Para ilustrar este fato, consideremos o caso do modelo na Equação (4.1) com $P = 1$, isto é,

$$\mathbf{x}(n) = \mathbf{A}\mathbf{x}(n-1) + \mathbf{u}(n).$$

Se analisarmos de forma explícita a dependência de $\mathbf{x}(n)$ nas condições iniciais, teremos que

$$\mathbf{x}(2) = \mathbf{A}\mathbf{x}(1) + \mathbf{u}(2),$$

$$\mathbf{x}(3) = \mathbf{A}\mathbf{x}(2) + \mathbf{u}(3) = \mathbf{A}^2\mathbf{x}(1) + \mathbf{A}\mathbf{u}(2) + \mathbf{u}(3),$$

$$\vdots$$

$$\mathbf{x}(n) = \mathbf{A}^{n-1}\mathbf{x}(1) + \sum_{k=2}^n \mathbf{A}^{n-k}\mathbf{u}(k).$$

Ora, fica evidente que a dependência de $\mathbf{x}(n)$ devido à $\mathbf{x}(1)$ ocorre através da matriz \mathbf{A} .

Para processos MVAR estáveis, os módulos dos autovalores de \mathbf{A} são estritamente menores do que um (LUTKEPOHL, 2007). Isto garante que a primeira parcela de $\mathbf{x}(n)$ decai exponencialmente com n a uma velocidade determinada pelo módulo do maior autovalor de \mathbf{A} (KRAUTH, 2006). Sendo assim, uma forma inteligente de determinar um valor adequado de N_B é calculando o maior autovalor de \mathbf{A} , λ_{\max} , e escolhendo N_B tal que

$$(\lambda_{\max})^{N_B} = 10^{-6} \rightarrow N_B = \frac{-6}{\log_{10}(\lambda)}.$$

Para $\lambda_{\max} = 0.5$, temos $N_B \simeq 20$ e, para $\lambda_{\max} = 0.95$, $N_B \simeq 270$. Note que a escolha de 10^{-6} foi arbitrária, refletindo o desejo de garantirmos que os transientes sejam suficientemente pequenos para as amostras $\mathbf{x}(n)$ com $n > N_B$.

As considerações acima se estendem de forma simples ao caso $P > 1$, bastando que se faça uma transformação de variáveis em (4.1) como proposto em (LUTKEPOHL, 2007),

em que se tem

$$\mathbf{X}(n) = \mathcal{A}\mathbf{X}(n-1) + \mathbf{U}(n), \quad (4.2)$$

com

$$\mathbf{X}(n) = \begin{bmatrix} \mathbf{x}(n) \\ \mathbf{x}(n-1) \\ \vdots \\ \mathbf{x}(n-p+1) \end{bmatrix} \quad \mathcal{A} = \begin{bmatrix} \mathbf{A}(1) & \mathbf{A}(2) & \cdots & \mathbf{A}(p-1) & \mathbf{A}(p) \\ I_{N_C} & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & I_{N_C} & & 0 & 0 \\ \vdots & & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & I_{N_C} & 0 \end{bmatrix} \quad \mathbf{U}(n) = \begin{bmatrix} \mathbf{u}(n) \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix}$$

Neste caso, a escolha de N_B deve ser feita em função do maior autovalor da matriz companheira \mathcal{A} formada pelos coeficientes do processo auto-regressivo.

4.2.2 Geração de sinais com *neural mass models*

As simulações de sinais de EEG via *neural mass models* (JANSEN; RIT, 1995) usam o método de Runge-Kutta de 4a ordem para resolver as equações diferenciais não-lineares que regem tais modelos. O passo de integração h do método numérico depende da frequência de amostragem F_S desejada, de modo que se tem

$$h = \frac{1}{F_S}.$$

Tal qual no caso dos processos auto-regressivos, o problema de transientes de condições iniciais também se faz presente, fato que é contornado adotando-se períodos de *burn-in* da ordem de F_S amostras, isto é, um segundo do tempo de simulação.

4.2.3 Múltiplos trechos independentes

Outra questão importante na geração de sinais com *toy models* é determinar como criar estruturas de dados dotadas de N_T realizações estatisticamente independentes. Para tanto, dois métodos foram propostos:

1. Simular N_T *trials* de $\mathbf{x}(n)$ de forma independente, com trechos de tamanho N_S e respeitando o tempo de *burn-in* de cada um deles. Esta abordagem garante a independência estatística entre os trechos (a menos das limitações dos geradores pseudo-aleatórios do computador), mas é computacionalmente ineficiente, pois a geração de cada *trial* é repetida inteiramente para cada uma das N_T repetições
2. Gerar uma série temporal muito maior do que o tamanho dos segmentos desejados (por exemplo, $N'_S = 25 \times N_T \times N_S$) e, em seguida, escolher aleatoriamente sub-trechos de tamanho N_S a serem armazenados em uma estrutura de dados adequada. Embora a independência estatística entre os intervalos não seja garantida, os resultados

obtidos em simulações revelam que esta abordagem dá resultados satisfatórios, além de ser computacionalmente mais eficiente que a anterior, pois passa pela etapa de *burnin* apenas uma vez.

Neste trabalho, o Método 1 é empregado nas simulações envolvendo análise de conectividade neural variável no tempo, ao passo que os estudos estatísticos via simulações de Monte-Carlo têm amostras geradas pelo Método 2.

4.3 ESTIMAÇÃO DE MODELO CONJUNTO PARA VÁRIOS SEGMENTOS

A estimação de modelos MVAR envolve considerações práticas importantes que vão muito além da simples escolha entre os algoritmos apresentados na Seção 3.2. Ademais, o interesse particular deste trabalho por modelos conjuntos formados a partir de múltiplas realizações de sinal difere do procedimento padrão encontrado na literatura, sendo importante, portanto, uma descrição das etapas envolvidas. De forma resumida, para uma estrutura de dados $\mathbf{x}(n, s)$ contendo N_T segmentos de N_S pontos, quatro passos são realizados:

1. Pré-processamento das amostras
2. Escolha do algoritmo de estimação
3. Escolha da ordem do modelo
4. Verificação da qualidade do modelo estimado

4.3.1 Pré-processamento

A etapa de pré-processamento dos sinais é feita em três partes, na seguinte ordem:

1. Extração de linha de tendência (*detrend*): Para cada segmento s , com $s = 1, 2, \dots, N_T$,

$$\mathbf{x}(n, s) \leftarrow \text{detrend}\left(\mathbf{x}(n, s)\right).$$

2. Extração da média temporal: Para cada segmento s , com $s = 1, 2, \dots, N_T$,

$$\mathbf{x}(n, s) \leftarrow \mathbf{x}(n, s) - \frac{1}{N_S} \sum_{k=1}^{N_S} \mathbf{x}(k, s).$$

3. Extração da média de conjunto: Para cada instante n , com $n = 1, 2, \dots, N_S$,

$$\mathbf{x}(n, s) \leftarrow \mathbf{x}(n, s) - \frac{1}{N_T} \sum_{t=1}^{N_T} \mathbf{x}(n, t).$$

Não há nenhuma normalização de variância nas séries temporais pois o estimador de conectividade adotado aqui é a *gPDC*, cuja definição garante robustez a desbalanços de energia entre os canais (BACCALÁ; SAMESHIMA; TAKAHASHI, 2007).

4.3.2 Escolha do algoritmo de estimação

Conforme discutido na Seção 2.2, diferentes propostas de algoritmos para obter modelos MVAR em múltiplos segmentos são possíveis, sendo todas as estimações deste trabalho feitas usando uma extensão do algoritmo de Nuttall-Strand, à qual deu-se o nome de Nuttall-Strand para segmentos, ou NS-seg.

Partindo das definições da Seção 3.2.4 e do desenvolvimento feito no Apêndice A, o procedimento de estimação é adaptado alterando-se todas as matrizes de covariância $\hat{\Sigma}_p^{(\cdot)}$ para que sejam médias ao longo de N_T repetições disponíveis,

$$\langle \hat{\Sigma}_p^{(\cdot)} \rangle = \frac{1}{N_T} \sum_{s=1}^{N_T} \hat{\Sigma}_p^{(\cdot)}(s), \quad (4.3)$$

em que (\cdot) denota matrizes de covariância dos erros de predição *forward* e *backward* ou o produto cruzado entre eles, como em

$$\begin{aligned} \hat{\Sigma}_p^f(s) &= \frac{1}{N_S - p - 1} \sum_{n=p+1}^{N_S} \mathbf{e}_p^f(n, s) \left(\mathbf{e}_p^f(n, s) \right)^T, \\ \hat{\Sigma}_p^b(s) &= \frac{1}{N_S - p} \sum_{n=1}^{N_S-p} \mathbf{e}_p^b(n, s) \left(\mathbf{e}_p^b(n, s) \right)^T, \\ \hat{\Sigma}_p^{fb}(s) &= \frac{1}{N_S - p - 1} \sum_{n=p+2}^{N_S} \mathbf{e}_p^f(n, s) \left(\mathbf{e}_p^b(n - (p + 1), s) \right)^T. \end{aligned} \quad (4.4)$$

Note que temos N_S pontos em cada trecho, porém, as somas que definem as matrizes de covariância têm apenas $N_S - p$ termos, evidenciando, assim, a importância de escolher uma ordem de modelo que não seja muito grande quando comparada ao número de pontos em cada trecho.

Com os valores medianizados de $\langle \hat{\Sigma}_p^{(\cdot)} \rangle$, o resto da estimação segue os mesmos passos do algoritmo de Nuttall-Strand clássico, em que as recursões de LWR são usadas para atualizar os modelos a cada passo p e os coeficientes matriciais de reflexão são obtidos via maximização de entropia espectral (vide Apêndice A).

4.3.3 Ordem do modelo

A escolha da ordem de um modelo MVAR é uma questão bastante importante que, infelizmente, é muitas vezes negligenciada, talvez por envolver conceitos nem sempre muito claros de teoria da informação que causam certa confusão entre pesquisadores (MARPLE, 1987). No caso das estimações deste trabalho, empregou-se uma versão adaptada do critério de informação de Akaike (AIC) como proposto em (DING et al., 2000), com

$$\text{AIC}(p) = 2 \log \left(\det(\hat{\Sigma}_f^p) \right) + \frac{2N_C^2 p}{N_S N_T},$$

em que $\hat{\Sigma}_f^p$ é a matriz de covariância dos resíduos obtidos após a estimação com um modelo MVAR de ordem p . A ordem P do modelo final é aquela que minimiza $AIC(p)$.

4.3.4 Verificando a qualidade do modelo

Em modelos auto-regressivos, a qualidade do modelo estimado é comumente verificada por meio de testes estatísticos sobre os resíduos

$$\hat{e}_P^f(n) = \mathbf{x}(n) - \sum_{k=1}^P \hat{\mathbf{A}}(k)\mathbf{x}(n-k),$$

em que se analisa a hipótese de que eles sejam processos de inovação.

Quando os registros de sinal na estrutura de dados são longos, um teste estatístico muito empregado é o teste de Portmanteau (LUTKEPOHL, 2007), em que se verifica não só se os resíduos são brancos mas também se existem regularidades significativas nas funções de autocorrelação.

A extensão do teste de Portmanteau ao caso de múltiplos trechos curtos não é simples, pois sua construção considera que o número de amostras contíguas do sinal é grande. Sendo assim, no paradigma deste trabalho, a verificação da qualidade dos modelos estimados se limita a testes simples de autocorrelação dos resíduos em cada canal.

4.4 ANÁLISE DE CONECTIVIDADE VARIÁVEL NO TEMPO

Existem diferentes propostas para estimar conectividade neural variável no tempo, sendo a abordagem escolhida aqui aquela baseada em um procedimento de janela deslizante, ou *sliding-window*.

Neste método, modelos MVAR são estimados em vários trechos do sinal $\mathbf{x}(n, s)$ de modo a obtermos um conjunto de coeficientes associado a cada instante de tempo n . Ao final do algoritmo, obtém-se uma representação tempo-frequência de um estimador de conectividade.

As seguintes considerações são importantes ao fazer este tipo de estimação:

1. Escolha do tamanho de janela
2. Escolha da ordem do modelo
3. Como estimar a conectividade a cada instante de tempo

4.4.1 Tamanho da janela

O tamanho da janela deslizante é escolhido em função da escala temporal dos fenômenos de interesse e do número de amostras disponíveis para estimar cada modelo.

Em janelas com tamanho L , o número de amostras disponíveis para estimar cada modelo de ordem P é $(L - P) \times N_T$, devendo ser pelo menos maior do que $N_C^2 \times P$, o número total de coeficientes a serem estimados. De modo geral, as estimações feitas neste trabalho obedeceram à regra empírica proposta em (MARPLE, 1987) que diz que o número de amostras deve ser pelo menos três vezes maior do que o número de coeficientes estimados.

Por exemplo, para o caso dos dados de rato descritos na Seção 4.6, a frequência de amostragem era $F_S = 2000$ Hz e os fenômenos de interesse são da ordem de algumas dezenas de milissegundos, impondo um tamanho de janela da ordem de algumas dezenas de amostras. Com apenas $N_T = 40$ realizações disponíveis, é preciso escolher uma ordem de modelo suficientemente pequena para que o número de amostras disponíveis seja compatível com a quantidade de coeficientes a calcular a cada instante de tempo.

4.4.2 Ordem do modelo

A rigor, seria possível escolher uma ordem diferente para cada modelo MVAR estimado com uma janela deslizante. Porém, neste caso seria necessário aplicar o critério de AIC para cada pequeno trecho de $\mathbf{x}(n, s)$, o que seria computacionalmente custoso. Por isso, optou-se por manter a ordem dos modelos sempre a mesma ao longo do processamento, após determiná-la da seguinte maneira: selecionar, aleatoriamente, um número arbitrário (por exemplo 10) de intervalos com L pontos de $\mathbf{x}(n, s)$. Aplicar o critério AIC às janelas selecionadas e obter o valor máximo P_{\max} entre as ordens obtidas para cada janela. Fixar ordem P_{\max} para todos os modelos MVAR estimados com a janela deslizante.

4.4.3 Estimação da conectividade

Tendo em mãos um modelo MVAR para cada trecho de tamanho L , o próximo passo é escolher um estimador para analisar as relações de causalidade entre as séries temporais de $\mathbf{x}(n, s)$. No caso deste trabalho, duas razões levaram à escolha da g PDC: sua robustez a situações com energias muito diferentes entre os canais de $\mathbf{x}(n, s)$ (BACCALÁ; SAMESHIMA; TAKAHASHI, 2007) e a existência de métodos para determinar sua significância estatística sem o uso de procedimentos de reamostragem (BACCALÁ et al., 2013).

Ao final do procedimento de estimação de conectividade variável no tempo, obtém-se uma representação tempo-frequência da g PDC, denotada por ${}_g\pi_{ij}(n, f)$, em que cada n é associado a uma janela de tamanho L de $\mathbf{x}(n, s)$.

4.4.4 O algoritmo de estimação em janela deslizante

Feitas todas as considerações anteriores, chegou-se ao seguinte algoritmo para estimar a g PDPC do canal j para o canal i ao longo do tempo:

Algoritmo 1: PROCEDIMENTO DE JANELA DESLIZANTE

Entrada: Estrutura de dados $\mathbf{x}(n, s)$, tamanho da janela L , canais i e j
Saída: g PDPC de j para i ao longo do tempo, denotado por ${}_g\pi_{ij}(n, f)$

```

1 início
2    $\mathcal{W} = \text{CREATEWINDOWS}(\mathbf{x}, L)$ 
3    $P = \text{CHOOSEMODELORDER}(\mathbf{x}, \mathcal{W})$ 
4   para cada  $w \in \mathcal{W}$  faça
5      $n_w = \lfloor (w(1) + w(\text{end})) / 2 \rfloor$ 
6      $\mathbf{x}_w = \mathbf{x}(w, :)$ 
7      $\mathbf{x}_w \leftarrow \text{PREPROCESS}(\mathbf{x}_w)$ 
8      $\{\hat{\mathbf{A}}_w(1), \dots, \hat{\mathbf{A}}_w(P), \hat{\Sigma}_P^f\} = \text{ESTIMATE-MVAR}(\mathbf{x}_w, P)$ 
9      ${}_g\pi_w = \text{ESTIMATE-GPDC}(\hat{\mathbf{A}}_w(1), \dots, \hat{\mathbf{A}}_w(P), \hat{\Sigma}_P^f)$ 
10     ${}_g\pi_{ij}(n_w, :) = {}_g\pi_w(i, j, :)$ 
11 fim
12 fim
13 retorna  ${}_g\pi_{ij}(n, f)$ 

```

Vale ressaltar que o procedimento `CREATEWINDOWS` gera uma estrutura de dados contendo vários vetores de tamanho L com as coordenadas temporais correspondentes a cada janela w_i . De forma mais explícita, considere uma janela deslizante com L pontos ande apenas uma unidade de tempo a cada estimação. Neste caso, teremos $N_W = N_S - L$ intervalos de amostras a serem armazenados em $\mathcal{W} = \{w_1, w_2, \dots, w_{N_W}\}$. Cada vetor w_i tem L componentes e pode ser escrito, usando notação de MATLAB, da seguinte maneira:

$$w_i = (i - 1) + [1 : L].$$

Os procedimentos `CHOOSEMODELORDER` e `PREPROCESS` executam instruções seguindo a descrição das Seções 4.3.3 e 4.3.1, respectivamente.

4.5 TESTES DE SIGNIFICÂNCIA ESTATÍSTICA

Uma vez estimada a g PDPC em diferentes instantes de tempo, é bastante útil ser capaz de aplicar testes de hipótese a um dado nível de confiança α para estudar a significância estatística dos valores calculados.

Quando se tem registros longos de sinal, os limiares de rejeição da hipótese nula $\text{thr}_{ij}(n, f)$ podem ser determinados usando os resultados da teoria assintótica da PDC

discutida na Seção 3.3.2, cuja implementação em MATLAB está disponível na internet na forma de um *toolbox* chamado `asymptdc`¹.

Já no caso de múltiplos trechos curtos, não é possível aplicar diretamente os resultados da teoria assintótica em (TAKAHASHI; BACCALÁ; SAMESHIMA, 2007), sendo necessário adaptá-los a estruturas de dados contendo N_T trechos de N_S pontos cada. Uma adaptação razoável e de certo modo intuitiva é considerar um valor corrigido de N_S nas equações (3.63) e (3.64), dado por

$$\bar{N}_S = (N_S - p) \times N_T,$$

refletindo, assim, o número de amostras de fato usadas ao estimar os parâmetros do modelo MVAR do sinal sob análise. Em diversos momentos ao longo deste texto, esta adaptação é referida como a “extensão da teoria assintótica da PDC para múltiplos trechos curtos”.

Com os valores de $\text{thr}_{ij}(n, f)$ em mãos, aplica-se uma máscara sobre ${}_g\pi_{ij}(n, f)$, como em

$${}_g\pi_{ij}^{\text{sig}}(n, f) = \begin{cases} {}_g\pi_{ij}(n, f) & \text{se } |{}_g\pi_{ij}(n, f)|^2 > \text{thr}_{ij}(n, f) \\ 0 & \text{se } |{}_g\pi_{ij}(n, f)|^2 \leq \text{thr}_{ij}(n, f) \end{cases} \quad (4.5)$$

Cabe notar que os testes de hipótese envolvendo ${}_g\pi_{ij}(n, f)$ são feitos para cada n e cada f , em uma só conexão entre canais i e j . Portanto, é importante se atentar aos efeitos relativos a múltiplas comparações quando se estuda a significância da $g\text{PDC}$ ao longo de várias frequências, conexões ou instantes de tempo.

4.6 BASE DE DADOS REAIS

Além de dados simulados com *toy models*, os algoritmos aqui propostos foram aplicados a uma base de dados reais disponível na internet². No experimento que gerou a base de dados utilizada, as vibrissas de ratos do tipo Wistar p21 são estimuladas repetidas vezes e a atividade cortical é registrada em diversos pontos do cérebro, conforme ilustrado na Figura 19.

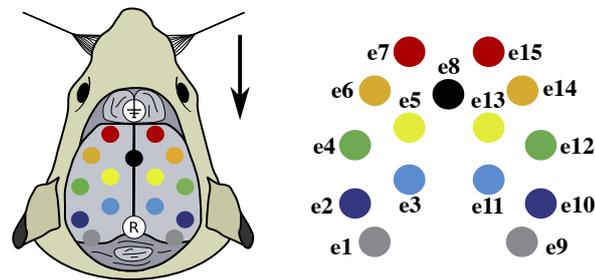
A base de dados contém registros de EEG para 10 ratos diferentes com 40 estímulos em cada vibrissa (direita e esquerda). A frequência de amostragem é $F_S = 2000$ Hz. Mais detalhes a respeito da concepção do experimento podem ser encontrados em (QUAIRIAUX et al., 2011).

Espera-se observar um potencial evocado somatosensorial (SEP) no lado contralateral ao estímulo cerca de 10 ms após cada estímulo, atividade que é subsequentemente difundida para outras regiões do cérebro e devanesce depois de cerca de 30 ms (QUAIRIAUX et al., 2011). O local de início do SEP é chamado cS1 e, para estímulos na vibrissa

¹ Disponível em <http://www.lcs.poli.usp.br/~baccala/pdc/> (Acessado em Março de 2016)

² Disponível em <http://www.fbmlab.com/data/> (Acessado em Março de 2016)

Figura 19 – Mapa dos 15 eletrodos de EEG colocados no escalpo do rato. O eletrodo de referência é denotado por R.



Fonte: adaptado de (PLOMP et al., 2014)

Figura 20 – Potenciais evocados registrados em cada eletrodo depois de estímulos na víscera direita do rato. Os sinais são calculados por meio de médias ao longo das várias realizações do experimento. As cores de cada sinal correspondem às cores dos eletrodos da Figura 19.

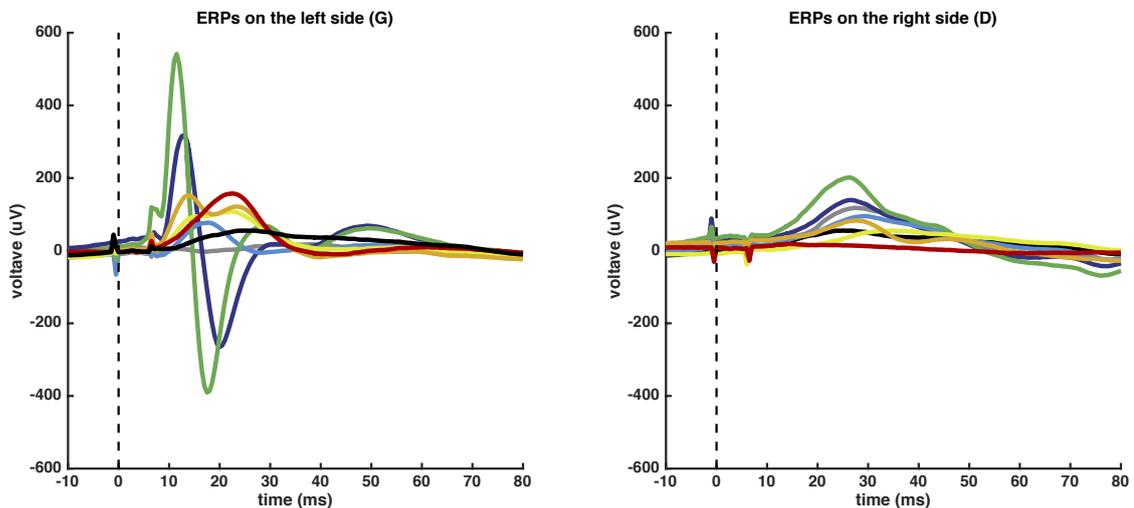


Figura 21 – Fonte: adaptado de (PLOMP et al., 2014)

direita do rato, pode ser mapeado no eletrodo 4 da Figura 19. Os sinais na Figura 20 representam os potenciais evocados medianizados ao longo dos *trials* para cada eletrodo.

4.7 CONCLUSÕES DO CAPÍTULO

Este capítulo discutiu diversos aspectos práticos ligados ao estudo de conectividade neural via sinais de EEG. De considerações gerais sobre a ordem de modelos auto-regressivos, passando pelo pré-processamento de sinais até os testes de significância estatística da *gPDC*, o objetivo aqui foi prover uma visão global de como implementamos os diversos algoritmos e estimadores discutidos nos outros capítulos do texto.

O próximo capítulo apresenta os resultados obtidos em simulações com *toy models* e em dados reais, além de prover discussões e reflexões a respeito do que foi observado.

5 RESULTADOS E DISCUSSÃO

5.1 INTRODUÇÃO

Este capítulo coleta os principais resultados das investigações deste trabalho e discute pontos importantes a respeito de cada um deles.

Foram feitas diversas simulações para ilustrar o desempenho dos algoritmos propostos em situações não triviais, como pólos próximos do círculo unitário, sinais gerados com modelos não-lineares e diferentes combinações de tamanho de janela e número de *trials*. As simulações seguem a descrição feita na Seção 4.2 e são parte importante deste trabalho. Além disso, empregou-se uma base de dados reais pública para validar a proposta em sinais de EEG e comparar os resultados com aqueles obtidos em outro estudo da literatura. Questões como análise de significância estatística das estimativas da PDC e efeitos do pré-processamento de sinais também são tratadas.

Tendo em vista que o texto que segue é relativamente extenso, é feita a seguir uma apresentação geral dos pontos discutidos em cada seção.

Seção 5.2: Estimação de modelo conjunto para vários segmentos

Considera-se aqui o caso de múltiplas realizações disponíveis de um sinal e a hipótese de que elas todas são geradas por um mesmo processo estocástico desconhecido. Compara-se três propostas de estimação de modelo MVAR conjunto e conclui-se que o Nuttall-Strand para segmentos (NS-seg) é a melhor alternativa entre elas. Em seguida, aplica-se o NS-seg a um exemplo pouco visto na literatura de estimadores de conectividade neural: dois *neural mass models* conectados gerando sinais com características espectrais muito próximas de registros reais de EEG. Por fim, alguns dos efeitos do pré-processamento proposto na Seção 4.3.1 são ilustrados em um *toy model* com dois canais conectados e um potencial evento-relacionado ocorrendo em um instante de tempo conhecido.

Seção 5.3: Análise de conectividade variável no tempo

Esta seção apresenta exemplos em que um procedimento de janela deslizante é usado para detectar mudanças de relações de causalidade entre séries temporais. Os modelos MVAR em cada janela são estimados com o algoritmo NS-seg validado na seção anterior e a conectividade é estimada via *gPDC*. Adota-se primeiro um exemplo com apenas dois canais para mostrar os efeitos que diferentes tamanhos de janela e número de *trials* têm sobre os resultados da estimação de conectividade. Em seguida, compara-se o desempenho do algoritmo de janela deslizante a outra proposta muito

comum na literatura de conectividade neural, o RLS com fator de esquecimento. Por fim, um exemplo com dois *neural mass models* é usado para ilustrar os resultados a conexão entre eles é desligada durante um determinado intervalo de tempo.

Seção 5.4: Testes de significância estatística

A sequência de experimentos e considerações que validam a proposta de extensão da teoria assintótica da PDC discutida no Capítulo 1 são apresentadas. Simulações de Monte-Carlo são usadas para averiguar se os limiares de rejeição da hipótese nula garantem o devido controle da taxa de falsos positivos e se a potência dos testes estatísticos é adequada. Exemplos com *toy models* são usados para ilustrar a análise de significância estatística. Os resultados são promissores, particularmente no caso do sinais de EEG simulados com *neural mass models*.

Seção 5.5: Análise de dados reais: experimentos com ratos

Os algoritmos desenvolvidos foram aplicados a uma base de dados reais contendo registros de EEG de ratos do tipo Wistar p21 descritos na Seção 4.6. Esses dados são públicos e já foram analisados sob ótica semelhante à deste trabalho em ao menos dois outros trabalhos na literatura (PLOMP et al., 2014; RODRIGUES; ANDRADE, 2015), permitindo, portanto, comparações entre os resultados. A seção termina mostrando como limiares de significância estatística podem ser usados para caracterizar a evolução temporal da conectividade neural.

5.2 ESTIMAÇÃO DE MODELO CONJUNTO PARA VÁRIOS SEGMENTOS

Experimentos envolvendo potenciais evento-relacionados têm como principal característica o registro de múltiplas realizações dos sinais de interesse. Uma hipótese comumente feita é a de que estas repetições são estatisticamente independentes e geradas por um processo estocástico em comum. Os exemplos a seguir apresentam o desempenho do algoritmo NS-seg na estimação dos coeficientes de um modelo MVAR neste contexto.

5.2.1 Propostas de estimação de modelo único para vários segmentos

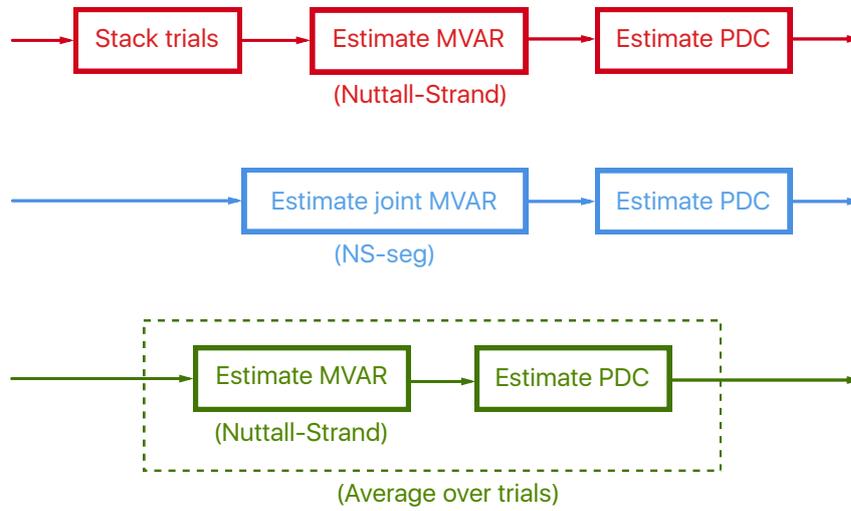
Existem diferentes formas de estimar modelos MVAR para múltiplos trechos de sinal. Considere que temos uma estrutura de dados $\mathbf{x}(n, s)$ contendo N_T trechos de N_S pontos cada, pode-se:

1. Concatenar os trechos de $\mathbf{x}(n, s)$ na forma de uma única série temporal contígua e estimar um modelo MVAR para o sinal com $N_S \times N_T$ amostras. O autoespectro e a g PDC são então calculados a partir dos coeficientes deste modelo único.

2. Usar o algoritmo de Nuttall-Strand para segmentos (NS-seg) descrito na Seção 3.2 e estimar um modelo MVAR conjunto dos vários *trials*. A *gPDC* e autoespectro são calculados a partir dos coeficientes deste modelo.
3. Estimar um modelo MVAR para cada *trial* e calcular a média dos módulos quadráticos dos autoespectros e relações de conectividade ao longo destes.

A Figura 22 sintetiza estas diferentes opções.

Figura 22 – Representação visual das alternativas para estimação de modelo MVAR conjunto e da conectividade entre canais. Dispostos de cima para baixo os métodos 1, 2 e 3, respectivamente.



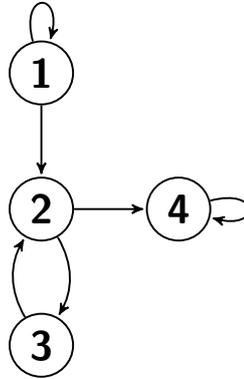
Fonte: autoria própria

Neste exemplo, consideramos um processo auto-regressivo multivariado descrito pelas seguintes equações:

$$\begin{cases} x_1(n) = 0.95\sqrt{2}x_1(n-1) - 0.9025x_1(n-2) + w_1(n) \\ x_2(n) = +0.6875\sqrt{2}x_3(n-1) - 0.9x_1(n-2) - 0.4x_1(n-3) + w_2(n) \\ x_3(n) = -0.6875\sqrt{2}x_2(n-1) + w_3(n) \\ x_4(n) = 0.95\sqrt{2}x_4(n-1) - 0.9025x_4(n-2) + 0.95x_2(n-1) + w_4(n) \end{cases} \quad (5.1)$$

em que $w_i(n)$ são processos de inovação Gaussianos independentes entre si com variância unitária e média nula. As relações de conectividade entre canais é representada na Figura 23.

Figura 23 – Grafo de conexões entre os quatro canais da série temporal descrita pelas Equações 5.1. Nota-se que o sistema é formado por três osciladores conectados, um dado pela conexão entre os canais 2 e 3 e outros dois pelas retroalimentações dos canais 1 e 4.



Fonte: autoria própria

As Figuras 24 e 25 ilustram os resultados comparados das estimações quando se aplica cada um dos métodos mencionados acima em amostras geradas pelas (5.1) com múltiplos trechos.

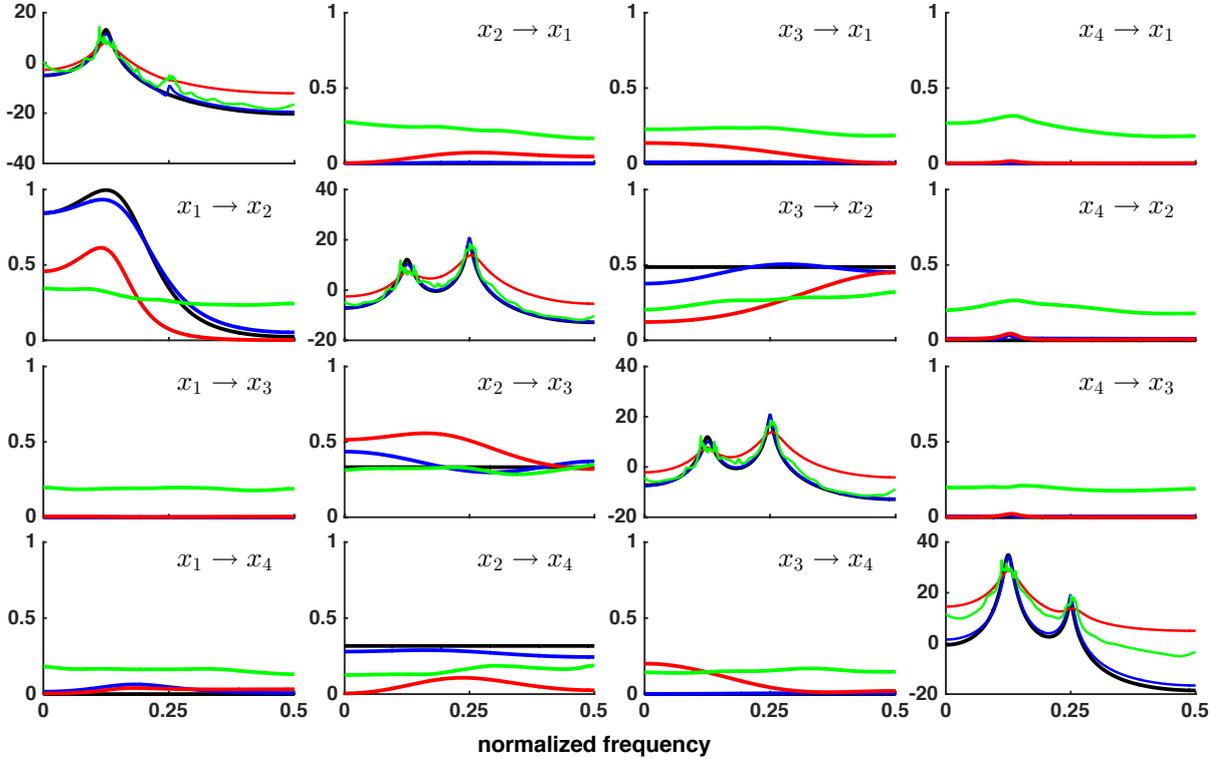
As curvas da Figura 24 mostram que a concatenação de segmentos e a medianização de resultados ao longo de *trials* levam a versões alisadas do autoespectro e falsos positivos em algumas conexões. Porém, nota-se que ao aumentarmos o número de amostras em cada trecho, como é o caso na Figura 25, os resultados são praticamente iguais. Este resultado não é surpreendente, uma vez que algoritmos de estimação de modelos auto-regressivos são equivalentes quando temos um número assintoticamente grande de amostras.

Uma observação interessante é que o método de estimação baseado em médias ao longo dos *trials* é visivelmente inferior ao NS-seg em trechos curtos de sinal, fato que pode ser associado à má qualidade dos modelos estimados em cada trecho e o consequente viés e variância destas estimativas. Outro fato relevante é que, ao concatenarmos os vários trechos disponíveis, formamos uma série temporal dotada de uma espécie de periodicidade artificial, o que pode explicar a degradação dos modelos auto-regressivos assim estimados e os resultados ruins das estimações de conectividade e autoespectro com este método.

5.2.2 Toy model com duas colunas corticais

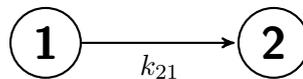
Neste exemplo, os sinais são simulados usando dois *neural mass models* (NMM) conectados como mostra a Figura 26.

Figura 24 – Resultados das estimações de autoespectro (na diagonal, em dB) e $|gPDC|^2$ para o caso de amostras geradas pelas Equações 5.1 com $N_S = 12$, $N_T = 50$ e ordem $P = 3$ para os modelos MVAR. Os gráficos mostram os valores teóricos em **preto**, os resultados com *stacking* dos segmentos em **vermelho**, com a média dos resultados em cada *trial* em **verde** e com o algoritmo Nuttall-Strand para segmentos em **azul**.



Fonte: autoria própria

Figura 26 – NMM_1 gera um sinal de EEG com características de oscilação principalmente na banda γ ($\simeq 41$ Hz) enquanto NMM_2 oscila na banda β ($\simeq 20$ Hz). A conexão de NMM_1 para NMM_2 é controlada pelo coeficiente $k_{21} = 0.5$. A frequência de amostragem é $F_S = 1000$ Hz



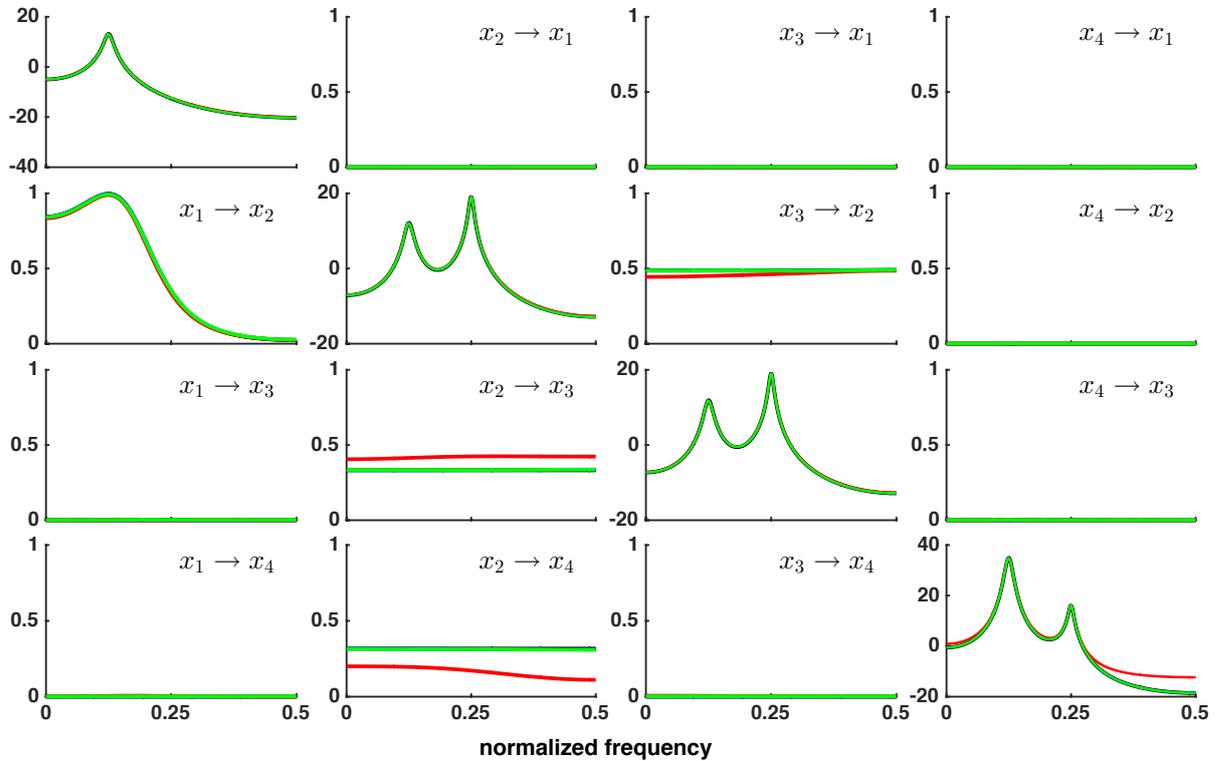
Fonte: autoria própria

O objetivo deste exemplo foi verificar a possibilidade de detectar corretamente a conexão de NMM_1 para NMM_2 a partir de um modelo MVAR para as séries temporais.

Para tanto, os coeficientes são estimados a partir de uma estrutura de dados $\mathbf{x}(n, s)$ contendo $N_T = 10$ trechos e $N_S = 100$. A escolha da ordem do modelo é feita adotando o critério AIC, conforme mostra a Figura 27. Os valores de $gPDC$ e autoespectro para modelos de ordem $P = 12$ estão ilustrados na Figura 28.

Os resultados evidenciam que, pelo menos para esse exemplo, um modelo linear

Figura 25 – Resultados das estimções de autoespectro (na diagonal, em dB) e $|gPDC|^2$ para o caso de amostras geradas pelas Equações 5.1 com $N_S = 1024$ e $N_T = 50$. A ordem dos modelos MVAR é $P = 3$. As cores dos gráficos seguem o mesmo padrão descrito na Figura 24.



Fonte: autoria própria

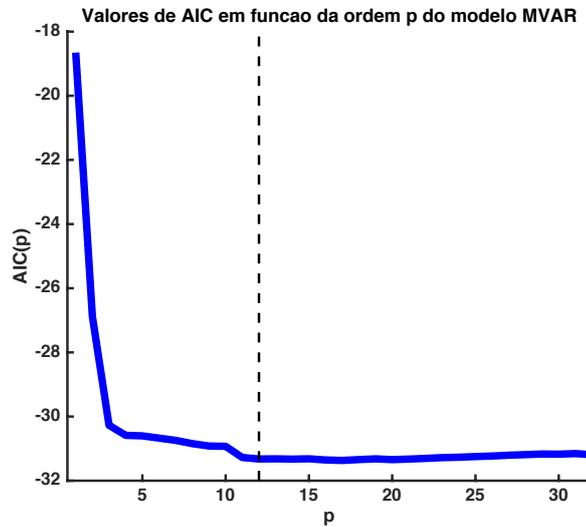
como o MVAR consegue capturar boa parte das características dos sinais estudados, ainda que tenham sido gerados por um processo sabidamente não-linear (mas com conexões lineares). Todavia, deve-se frisar que isto não se estende diretamente a qualquer sistema não-linear, vide diferentes estudos na literatura mostrando as limitações da PDC neste contexto (SAMESHIMA; BACCALÁ, 2014).

É interessante notar que os valores de $|g\pi_{21}|^2$ ilustrados na Figura 28 não são estritamente nulos, embora tal conexão entre colunas corticais seja inexistente. Poderíamos argumentar que valores baixos como o deste caso não deveriam ser considerados significantes, porém, para que tal tipo de análise seja consistente, é necessário um método rigoroso para determinar limiares de significância estatística dos valores estimados de $gPDC$. Uma teoria apresentando justamente este tipo de ferramenta foi descrita na Seção 3.3 e a Seção 5.4 contém alguns exemplos de aplicação.

5.2.3 Efeitos do pré-processamento de sinais

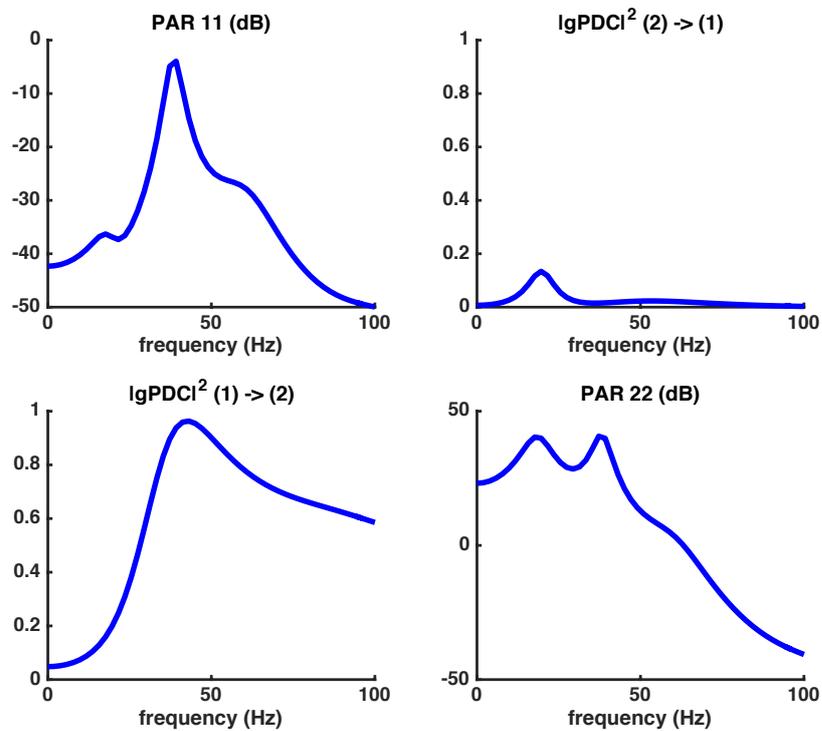
Etapas de pré-processamento como as descritas na Seção 4.3 são frequentemente negligenciadas em estudos de conectividade neural com potenciais evento-relacionados. Embora os algoritmos de estimação continuem conseguindo calcular coeficientes para um

Figura 27 – Valores do critério de informação de Akaike para modelos MVAR com diferentes ordens. A estrutura de dados $\mathbf{x}(n, s)$ tem $N_S = 100$ amostras em $N_T = 10$ segmentos estatisticamente independentes.



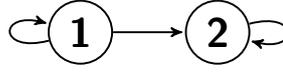
Fonte: autoria própria

Figura 28 – Resultados obtidos para o autoespectro (em dB, na diagonal) e $gPDC$ entre as *neural mass models* representadas na Figura 26. As estimações foram feitas usando o algoritmo NS-seg em um conjunto de dados com $N_S = 100$ e $N_T = 10$. A frequência de amostragem é $F_S = 1000$ Hz.



Fonte: autoria própria

Figura 29 – Grafo de conexões entre os dois canais da série temporal descrita pelas Equações 5.2. Nota-se que o sistema é formado por dois osciladores conectados.



Fonte: autoria própria

modelo MVAR associado aos sinais, as relações de causalidade obtidas podem não condizer com a realidade.

Para ilustrar este fato, adotemos um exemplo com dois canais, com amostras geradas pelas equações

$$\begin{cases} x_1(n) = -0.5562x_1(n-1) - 0.81x_1(n-2) + w_1(n) + i(n) \\ x_2(n) = +0.50x_2(n-1) - 0.5x_1(n-1) + w_2(n) \end{cases} \quad (5.2)$$

em que $w_i(n)$ são processos de inovação Gaussianos com variância 0.8 e o sinal $i(n)$ é um potencial evento-relacionado que ocorre no instante $n = 500$ e é simulado usando um *neural mass model*. A Figura 29 ilustra as conexões entre canais e exemplos dos sinais simulados estão retratados na Figura 30.

Simulando uma estrutura de dados $\mathbf{x}(n, s)$ contendo $N_S = 1600$ amostras e $N_T = 50$ realizações, modelos MVAR de ordem $P = 2$ foram estimados com e sem pré-processamento em uma janela de tamanho $L = 400$ pontos com $600 \leq n \leq 1000$.

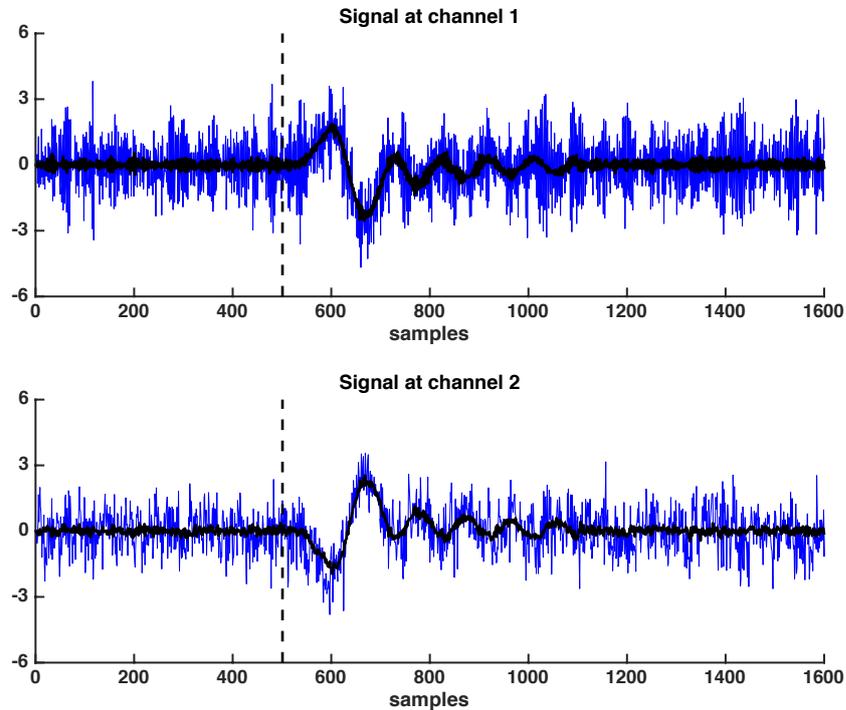
Os gráficos de autoespectro na Figura 31 mostram uma parcela de energia bastante considerável na região de baixas frequências de sinais sem pré-processamento, fato que pode ser associado à baixa frequência do potencial evocado somado aos sinais de cada realização. Ademais, os valores da $gPDC$ de $x_2 \rightarrow x_1$ revelam que as relações de conectividade também podem ser afetadas pela falta de pré-processamento dos sinais.

5.3 ANÁLISE DE CONECTIVIDADE VARIÁVEL NO TEMPO

Com o algoritmo de estimação de modelos para múltiplos trechos devidamente validado, o próximo objetivo foi usar *toy models* para estudar o desempenho do algoritmo de janela deslizante proposto na Seção 4.4.4 e ilustrar diferentes aspectos da estimação de conectividade neural em um contexto não estacionário. Exceto quando explicitamente avisado, os coeficientes de todos os modelos MVAR são estimados via algoritmo de Nuttall-Strand para segmentos (NS-seg).

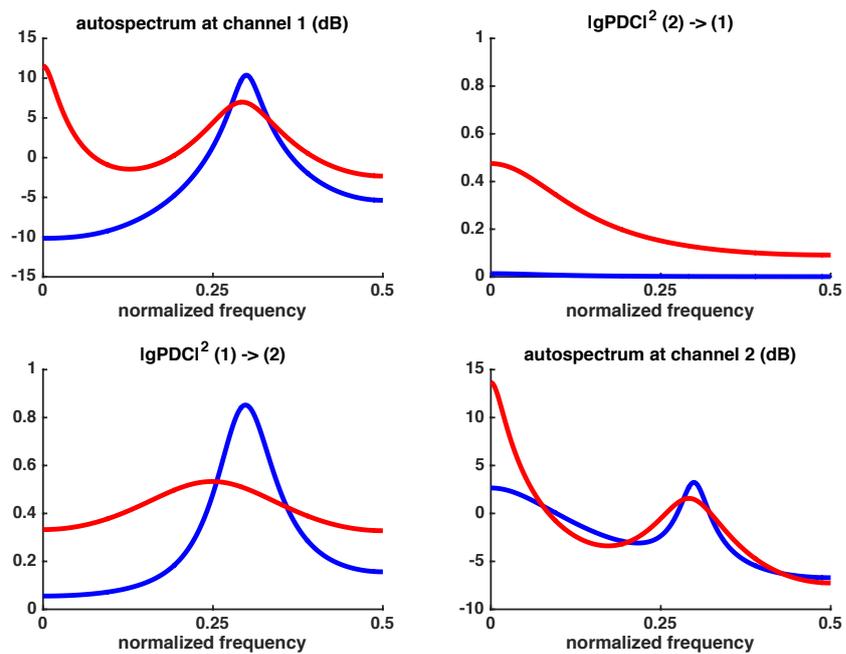
A apresentação se inicia com um exemplo envolvendo dois canais, no qual se atesta a viabilidade do procedimento de janela deslizante na detecção de mudanças de conexão ao longo do tempo. Evidencia-se, também, como diferentes condições do algoritmo (tamanho de janela, número de *trials*, etc.) impactam o resultado final das estimações.

Figura 30 – Sinais gerados pelas Equações 5.2. Em **azul**, o gráfico de uma das realizações em cada canal e em **preto** as médias ao longo dos múltiplos *trials*. Nota-se a presença de um potencial evento-relacionado para $n \geq 500$.



Fonte: autoria própria

Figura 31 – Resultados das estimações de autoespectro (em dB, na diagonal) e $gPDC$ para modelos MVAR de ordem $P = 2$ estimados a partir de amostras geradas pelas Equações 5.2 em uma janela com $L = 400$ pontos entre $n = 600$ e $n = 1000$. Em **azul**, os resultados com pré-processamento e em **vermelho** sem.



Fonte: autoria própria

Em seguida, compara-se o procedimento de janela deslizante ao algoritmo RLS em (MOLLER et al., 2001), apontando prós e contras de cada método.

Por fim, o exemplo com duas colunas corticais da Seção 5.2.2 é usado, mas com a conexão entre as colunas sendo desligada durante um certo intervalo de tempo.

5.3.1 Exemplo com dois canais

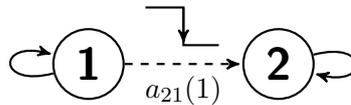
Neste exemplo, os sinais são gerados por um processo estocástico definido por

$$\begin{cases} x_1(n) = -0.5562x_1(n-1) - 0.81x_1(n-2) + u_1(n) \\ x_2(n) = 0.50x_2(n-1) + a_{21}(1)x_1(n-1) + u_2(n) \end{cases} \quad (5.3)$$

em que $a_{21}(1)$ é um coeficiente que vale -0.5 para $n < 640$ e zero para $n \geq 640$. Os sinais $u_i(n)$ são processos de inovação Gaussianos independentes com média nula e variância unitária. A Figura 32 ilustra as conexões entre os canais.

Usando uma janela deslizante com $L = 12$ pontos e modelos MVAR de ordem $P = 2$, estimou-se a $gPDC$ entre canais a cada instante de tempo. A representação tempo-frequência da $gPDC$ de $x_1 \rightarrow x_2$ na Figura 33 confirma que o algoritmo de janela deslizante é capaz de acompanhar mudanças de conectividade ao longo tempo. Observa-se, também, que a $gPDC$ estimada tem valores mais intensos na região do espectro associada à frequência de oscilação do canal 1. Isto é particularmente útil em estudos com sinais de EEG, pois permite descrever conexões entre regiões do cérebro em diferentes bandas de interesse fisiológico, como a alfa ($\simeq 10$ Hz), beta ($\simeq 20$ Hz) e gama ($\simeq 40$ Hz).

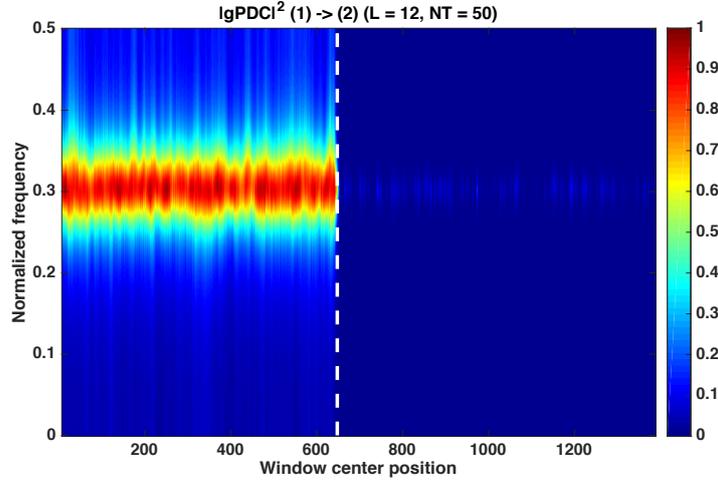
Figura 32 – Grafo de conexões entre os dois canais da série temporal descrita pelas Equações 5.3. Nota-se que o sistema é formado por dois osciladores cuja conexão é modulada pelo coeficiente $a_{21}(1)$. As amostras geradas são armazenadas em uma estrutura de dados $\mathbf{x}(n, s)$ com $N_S = 1400$ e $N_T = 50$.



Fonte: autoria própria

Para mostrar como a qualidade das estimações é afetada pelo número de *trials* N_T em $\mathbf{x}(n, s)$, a Figura 34 contrasta os casos de $N_T = 25$ com $N_T = 250$. Nota-se que quando o número N_T de segmentos aumenta (diminui) a qualidade das estimações da $gPDC$ melhora (piora). Efeito semelhante é observado na Figura 35, em que se vê o efeito de diferentes tamanhos de janela deslizante sobre a variância das estimações de $gPDC$ ao longo do tempo.

Figura 33 – Representação tempo-frequência de $|\hat{g}\pi_{21}(n, f)|^2$ para sinais simulados a partir das Equações 5.3. A janela deslizante tem tamanho $L = 12$ e há $N_T = 50$ segmentos disponíveis para as estimações dos modelos.



Fonte: autoria própria

Conclui-se, portanto, que um número menor de amostras em cada estimação de modelo (menos *trials* ou janelas menores) tem impacto direto sobre a variabilidade dos resultados, o que não é surpreendente se lembrarmos de conceitos básicos de estimadores estatísticos (HASTIE; TIBSHIRANI; FRIEDMAN, 2011). Percebe-se, também, a existência de uma relação de compromisso na escolha da janela deslizante, em que valores menores de L levam a estimações com uma localização melhor no tempo, ainda que com maior variância.

5.3.2 Exemplo com três canais

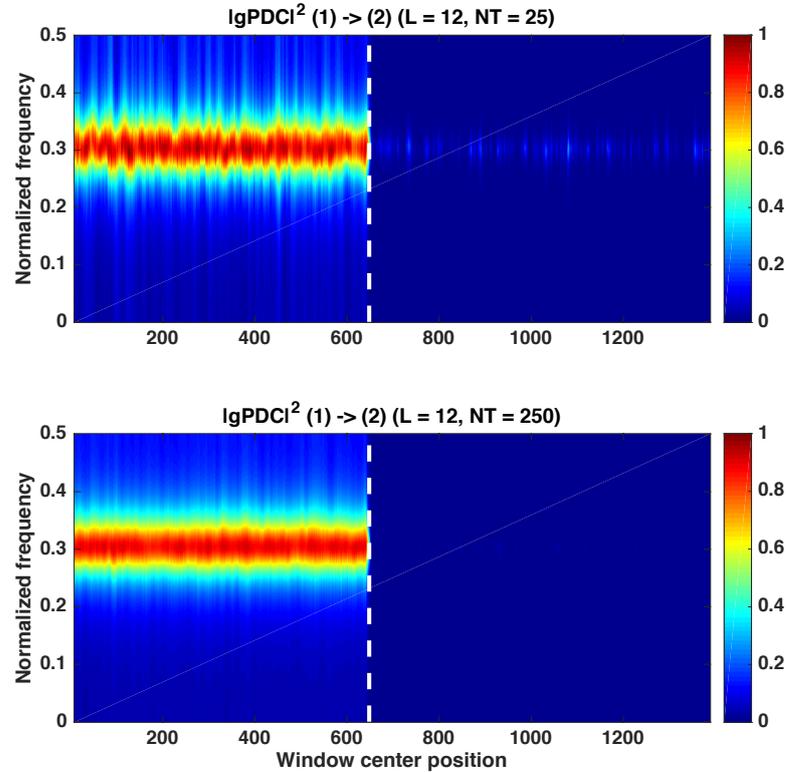
Neste exemplo tem-se $N_C = 3$ canais conectados conforme a Figura 36, com

$$x_i(n) = \sum_{j=1}^{N_C} a_{ij}(n)x_j(n - \tau_{ij}) + u_i(n) \quad i = 2, \dots, N_C, \quad (5.4)$$

em que $u_i(n)$ são processos de inovação Gaussianos independentes com média nula e variância escolhida em função de uma relação de sinal-ruído (SNR) previamente fixada. O sinal $x_1(n)$ foi obtido simulando sinais de EEG em um *neural mass model* oscilando na banda alfa ($\simeq 10$ Hz). Note que os coeficientes $a_{ij}(n)$ são todos constantes ao longo do tempo, exceto $a_{31}(n)$, que começa com valor nulo e fica $a_{31}(n) = 1$ quando $n > 225$.

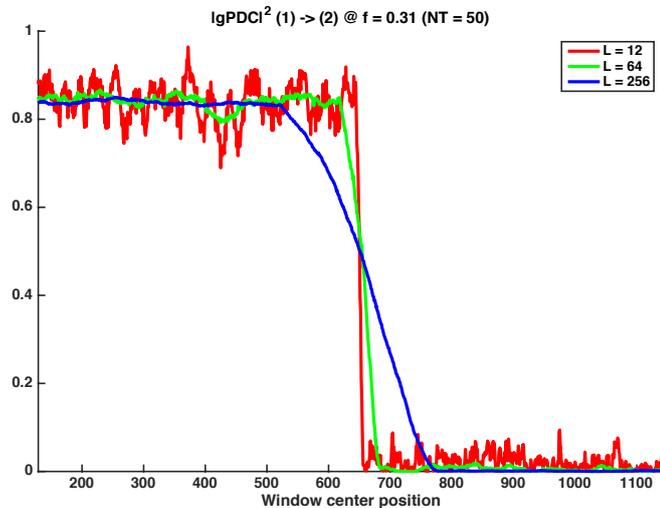
As simulações geraram um conjunto de amostras $\mathbf{x}(n, s)$ com $N_S = 450$ amostras e $N_T = 80$ realizações, em que as variâncias dos processos $u_i(n)$ eram tais que $\text{SNR} = 5$. A Figura 37 mostra os resultados de conectividade para uma janela deslizante com $L = 24$ pontos e modelos MVAR de ordem $P = 3$. A Figura 38 ilustra a evolução do autoespectro do canal 3 nas mesmas condições. Os resultados obtidos confirmam que as estimações

Figura 34 – Comparação das representações tempo-frequência da $|gPDC|^2$ do canal 1 para o canal 2. Na figura de cima, a janela deslizante tem tamanho $L = 12$ e as estimações usam apenas $N_T = 25$ trials, enquanto na figura de baixo temos $N_T = 250$.



Fonte: autoria própria

Figura 35 – Evolução temporal da $gPDC$ do canal 1 para o canal 2 na frequência normalizada $f = 0.31$. As curvas representam os resultados obtidos com tamanhos diferentes da janela deslizante mas todos com $N_T = 50$.



Fonte: autoria própria

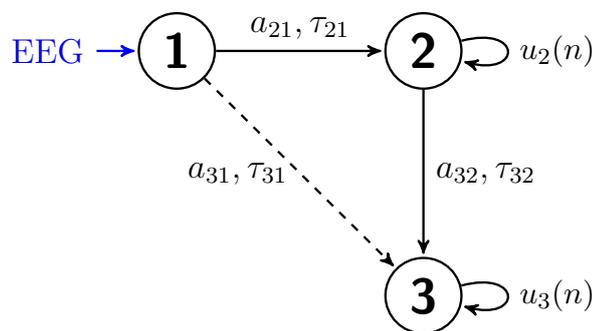
com janela deslizante capturam adequadamente variações de conectividade entre canais, contrariando, portanto, a asserção feita em (ASTOLFI et al., 2008) que diz que o algoritmo RLS seria o único procedimento adequado para estudos de conectividade variável no tempo.

A Figura 39 compara o algoritmo de janela deslizante ao RLS, mostrando a maior variabilidade dos resultados no RLS em situações com resolução temporal equivalente. Nota-se, também, que é possível escolher um fator de esquecimento que dê resultados com variância equivalente à da janela deslizante, mas com uma resolução temporal pior. Isto pode ser explicado pela superioridade do algoritmo Nuttall-Strand na estimação de modelos MVAR em trechos curtos (MARPLE; NUTTALL, 1983), fato que influencia diretamente a qualidade das estimativas de $gPDC$ entre canais.

É importante ressaltar que a escolha do tamanho da janela deslizante é muito mais intuitiva que a de um coeficiente de esquecimento no RLS, sendo, portanto, outro fator a ser considerado ao escolhermos qual procedimento desejamos usar para estudar relações de causalidade variáveis no tempo. Ademais, existem ferramentas estatísticas baseados na teoria assintótica da $gPDC$ para decidir quanto à significância estatística de estimativas de conectividade neural em janela deslizante, conforme discutido na Seção 4.5.

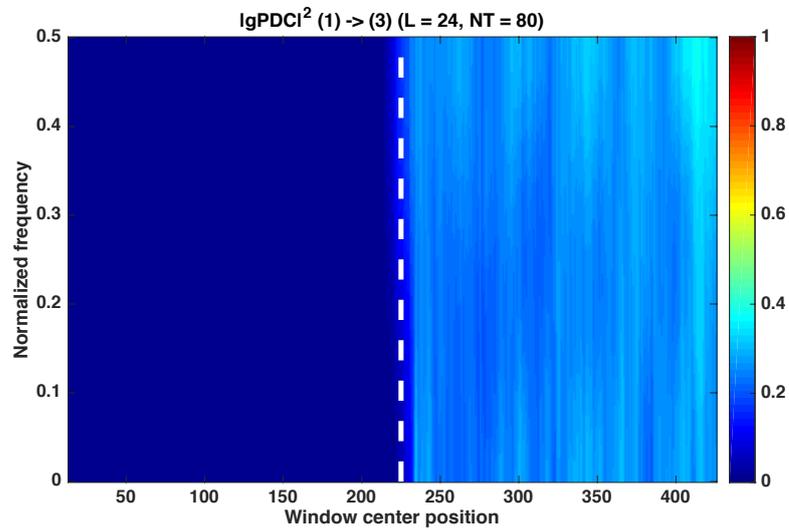
No tocante ao tempo de processamento, o RLS é consideravelmente mais rápido que o procedimento de janela deslizante, com diferenças de tempo de processamento que chegam a até dez vezes, o que pode ser explicado pela recursividade do RLS, em que as matrizes do modelo em um instante n são calculadas reaproveitando resultados obtidos em instantes anteriores.

Figura 36 – Grafo de conexões entre os três canais do exemplo descrito na Seção 5.3.2. A variância dos $u_i(n)$ são escolhidas de modo a termos uma SNR igual a 5. Os coeficientes são $a_{21} = 0.6$, $\tau_{21} = 1$, $a_{32} = 0.7$, $\tau_{32} = 1$ e $\tau_{31} = 2$. O coeficiente a_{31} é chaveado de zero para um em $n = 225$.



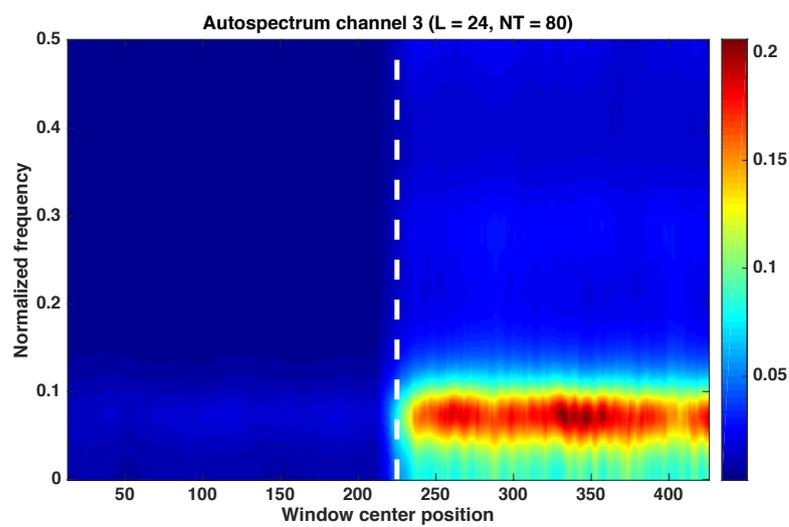
Fonte: autoria própria

Figura 37 – Representação tempo-frequência de $|\pi_{31}(n, f)|^2$ usando uma janela deslizante de tamanho $L = 24$ pontos, $N_T = 80$ repetições disponíveis e modelos MVAR de ordem $P = 3$.



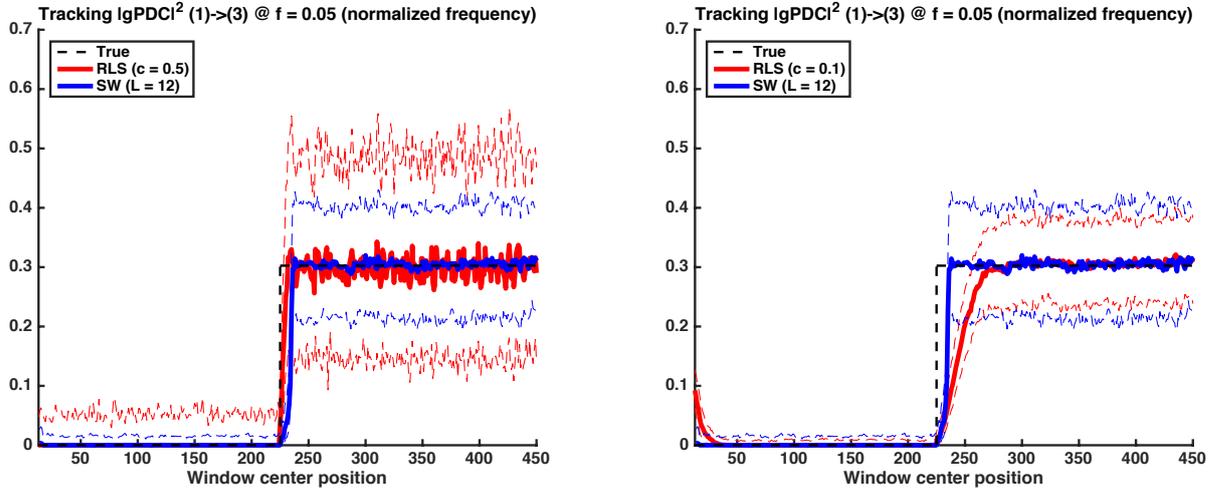
Fonte: autoria própria

Figura 38 – Representação tempo-frequência do autoespectro do canal 3 estimado nas mesmas condições da Figura 37.



Fonte: autoria própria

Figura 39 – Evolução temporal de $|g\pi_{31}(n, f)|^2$ para f fixo em 0.05. Cada gráfico representa uma situação com fator de esquecimento C diferente no algoritmo RLS. As linhas cheias são os valores médios para 1000 simulações de Monte-Carlo, ao passo que as linhas tracejadas representam os limites dos intervalos contendo 95% dos valores obtidos nas simulações.

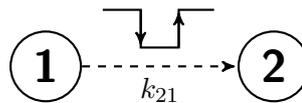


Fonte: autoria própria

5.3.3 Toy model com duas colunas corticais

Este exemplo usou as mesmas *neural mass models* descritas na Seção 5.2.2, porém, o coeficiente k_{21} é chaveado para zero durante um número de amostras correspondendo a 500 ms.

Figura 40 – As *neural mass models* do exemplo da Seção 5.3.3 são simuladas com os mesmos parâmetros da Figura 26. A conexão de NMM_1 para NMM_2 é controlada pelo coeficiente $k_{21} = 0.5$, que é chaveado para zero e volta para seu valor inicial 500 ms depois.

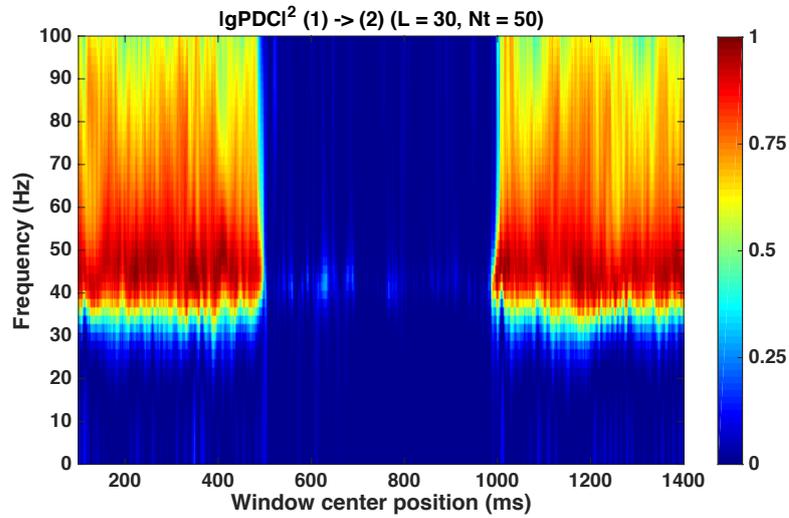


Fonte: autoria própria

A representação tempo-frequência da $gPDC$ de NMM_1 para NMM_2 ilustrada na Figura 41 mostra que os valores da conectividade entre os canais se anulam exatamente quando $k_{21} = 0$. Ademais, quando há conexão entre as colunas corticais observa-se um pico na região próxima de 40 Hz corresponde precisamente à oscilação gama da coluna cortical 1.

Os resultados deste exemplo são bastante promissores, pois mostram mais uma vez que modelos lineares podem descrever adequadamente as relações de causalidade entre séries temporais geradas por um modelo não-linear como o *neural mass model*.

Figura 41 – Representação tempo-frequência da $gPDC$ de NMM_1 para NMM_2 com uma janela deslizante de tamanho $L = 30$ pontos e $N_T = 50$ realizações disponíveis. Os modelos MVAR têm ordem $P = 6$ e são estimados usando o algoritmo Nuttall-Strand para segmentos.



Fonte: autoria própria

5.4 TESTES DE SIGNIFICÂNCIA ESTATÍSTICA

Nesta etapa, investigou-se empiricamente como analisar a significância estatística da PDC no caso de múltiplos trechos curtos de sinal.

O estudo começou pela viabilidade da extensão dos resultados assintóticos da PDC discutida na Seção 4.5, em que o número de amostras N_S das equações (3.63) e (3.64) são corrigidas de modo a levar em conta a presença de múltiplos *trials*.

Em seguida, discutiu-se um método alternativo de análise estatística que emprega uma versão de *bootstrap* para múltiplas séries temporais curtas.

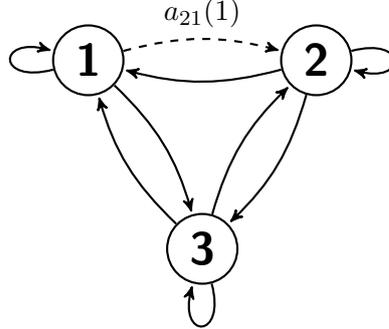
Por fim, aplicou-se a extensão da teoria assintótica aos exemplos das Seções 5.2.2, 5.3.1 e 5.3.3.

5.4.1 Validação da extensão para múltiplos trechos

O desenvolvimento da teoria estatística assintótica da PDC se baseia no fato de que os estimadores dos coeficientes de um modelo MVAR seguem uma lei normal quando o número de amostras disponíveis tende a infinito. No entanto, no caso deste trabalho, em que registros contínuos de sinal são trocados por N_T trechos contendo N_S amostras, não há nenhum resultado na literatura que afirme este fato.

Dito isso, a primeira etapa de investigação envolveu observar o comportamento estatístico dos $\hat{a}_{ij}(k)$ ao longo de várias simulações de Monte-Carlo. Para tanto, foi usado um *toy model* com $N_C = 3$ canais conectados como ilustrado na Figura 42, em que as

Figura 42 – Grafo representando as conexões do exemplo com três canais descrito pelas Equações 5.5. O valor do coeficiente $a_{21}(1)$ é escolhido conforme a situação de interesse, com $a_{21}(1) = 0$ quando a conexão entre os canais 1 e 2 está desligada e $a_{21}(1) = 0.5$ quando ligada.



Fonte: autoria própria

equações das séries temporais são

$$\begin{cases} x_1(n) = 0.2x_1(n-1) - 0.4x_2(n-1) - 0.2x_2(n-2) + 0.3x_3(n-1) + w_1(n) \\ x_2(n) = a_{21}(1)x_1(n-1) + 0.8x_2(n-1) - 0.1x_2(n-2) + 0.4x_3(n-1) + w_2(n) \\ x_3(n) = 0.5x_1(n-2) - 0.1x_2(n-1) + 0.2x_2(n-2) + 0.4x_3(n-1) + 0.1x_3(n-2) + w_3(n) \end{cases} \quad (5.5)$$

e os $w_i(n)$ são processos de inovação Gaussianos independentes com média nula e variância unitária. O coeficiente $a_{21}(1)$ tem valores diferentes conforme a situação que se deseja analisar.

Os histogramas da Figura 43 evidenciam como se distribuem os valores das estimativas de $\hat{a}_{21}(1)$ ao longo de 10000 simulações de Monte-Carlo com diferentes L e em situações em que a conexão $x_1 \rightarrow x_2$ está ligada ($a_{21}(1) = 0$, ON) ou desligada ($a_{21}(1) = 0.5$, OFF).

A Figura 44 mostra histogramas dos valores de $|\hat{\pi}_{21}(0.3)|^2$ em cada uma das condições, confirmando que as distribuições das estimativas dos modelos MVAR e PDC no caso de trechos curtos seguem as mesmas daquelas previstas por (BACCALÁ et al., 2013) no caso assintótico com registro único.

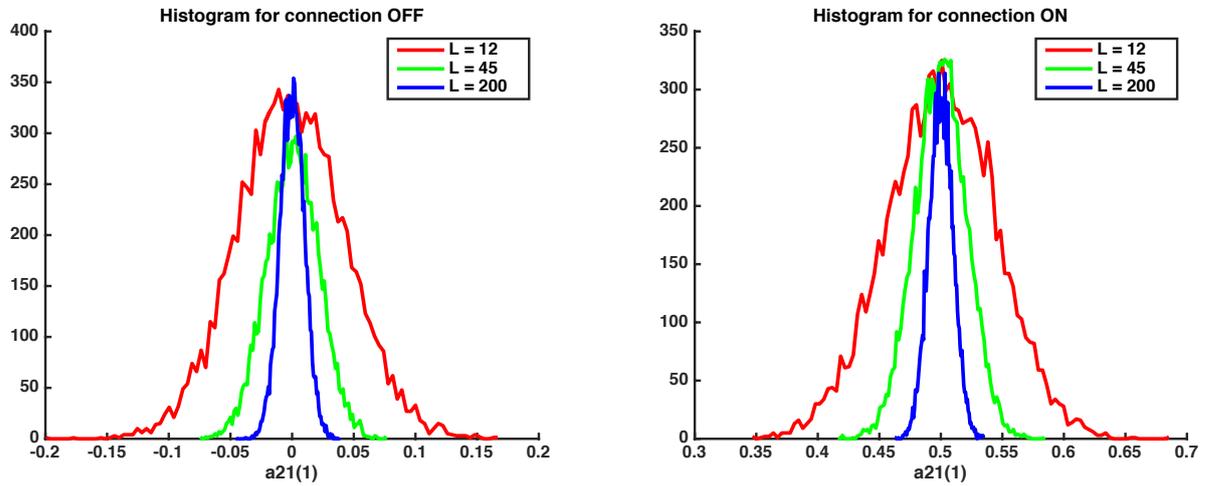
Este resultado assegura que a hipótese básica da teoria assintótica da estatística da PDC também é válida para o nosso paradigma de sinal. Cabe notar que tal verificação transcende aspectos qualitativos, contando com testes estatísticos de aderência devidamente escolhidos (CASELLA, 2008).

O próximo passo envolveu simular as (5.5) com $N_S = 12$, $N_T = 50$ e $a_{21}(1) = 0.5$, e usar a extensão da teoria assintótica para calcular os limiares $t_{0.01}$ e $t_{0.05}$ que permitiriam rejeitar a hipótese nula

$$\mathcal{H}_0 : |\hat{\pi}_{21}(0.3)|^2 = 0$$

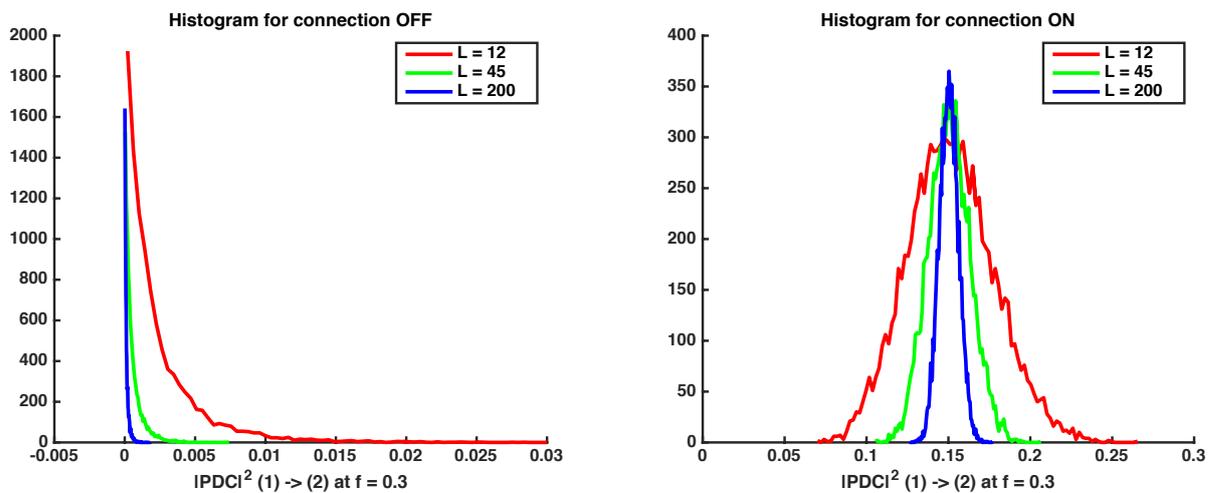
a níveis de confiança 1% e 5%, respectivamente.

Figura 43 – Histogramas dos valores de $\hat{a}_{21}(1)$ em simulações com $N_T = 50$ trials e diferentes valores de trechos curtos: $L = 12, 45$ e 500 pontos. Os sinais são gerados com as Equações 5.5. A configuração ON se refere ao caso em que se tem $a_{21}(1) = 0.5$ e OFF quando $a_{21}(1) = 0$.



Fonte: autoria própria

Figura 44 – Histogramas dos valores de $|\pi_{21}(0.3)|^2$ em simulações com as mesmas características descritas na Figura 43.



Fonte: autoria própria

Em seguida, foram feitas 10000 simulações de Monte-Carlo nas mesmas condições do parágrafo anterior, porém, com $a_{21}(1) = 0$. Os valores da PDC de 1 para 2 em cada uma destas simulações foram usados para calcular a função de distribuição acumulada empírica (e.c.d.f.) de $|\hat{\pi}_{21}(0.3)|^2$ no caso $a_{21}(1) = 0$. Os resultados estão disponíveis na Figura 45, em que se vê que os limiares de detecção da significância estatística da PDC calculados via extensão da teoria assintótica conseguem prever de forma bastante satisfatória os 95-ésimo e 99-ésimo percentis de resultados obtidos em 10000 simulações de Monte-Carlo. Percebe-se, inclusive, que a função distribuição acumulada (c.d.f.) prevista com nossa proposta é bastante próxima daquela obtida empiricamente com os resultados das simulações.

Outra sequência de simulações de Monte-Carlo foi realizada adotando diferentes valores de $a_{21}(1)$ nas Equações 5.5. Em cada uma destas simulações, o valor de $|\hat{\pi}_{21}(0.3)|^2$ foi comparado a seu respectivo limiar de significância estatística calculado via extensão da teoria assintótica. As porcentagens de rejeição da hipótese \mathcal{H}_0 estão registradas na Tabela 1, em que se vê, sem grande surpresa, a elevação da porcentagem de rejeição de \mathcal{H}_0 para a conexão $x_1 \rightarrow x_2$ quando aumenta-se gradualmente os valores de $a_{21}(1)$. Para o caso em que $a_{21}(1) = 0$, esta porcentagem de rejeição pode ser interpretada como taxa de falsos positivos.

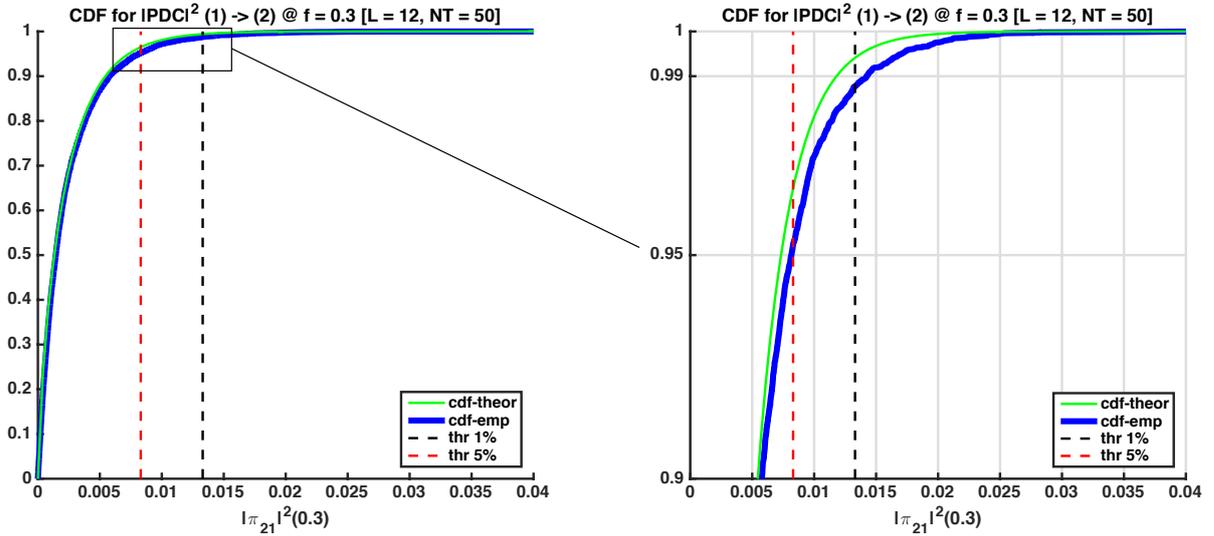
As porcentagens de rejeição de \mathcal{H}_0 no caso de trechos curtos são bastante semelhantes àquelas do caso com registro único de sinal ($L = 600, N_T = 1$). No entanto, as taxas de falsos negativos (isto é, não rejeição da hipótese nula quando $a_{21}(1) \neq 0$) são maiores, indicando que a potência dos testes estatísticos no caso de múltiplos segmentos é um pouco pior do que quando temos um só registro longo de sinal. Dizemos, portanto, que os testes estatísticos de significância da g PDC são mais conservadores nesse contexto.

Observa-se, também, que a taxa de falsos positivos para o caso sem correção no número de amostras (isto é, sem seguir a proposta da Seção 3.3), é ligeiramente maior que os valores de α estipulados. Isto pode ser explicado pelo fato de estarmos considerando um número maior de amostras, o que resulta em limiares mais baixos que os necessários para o controle da taxa de falsos positivos no nível α desejado. Por exemplo, com $L = 12, N_T = 50, P = 5$, temos $n_s = 600$ contra $n'_s = 350$.

A última parte do processo de validação tratou de checar se é possível usar a extensão da análise assintótica da PDC para também estimar a variância de $|\hat{\pi}_{ij}(f)|^2$ quando \mathcal{H}_0 é rejeitada. Para tanto, foram feitas 10000 simulações de Monte-Carlo com amostras geradas a partir das Equações 5.5 e $N_S = 12, N_T = 50, a_{21}(1) = 0.5$.

A Figura 46 compara o histograma normalizado (p.d.f. empírica) das estimativas de PDC a uma densidade de probabilidade Gaussiana teórica com média e variância calculados com a extensão da análise assintótica. Nota-se uma pequena diferença entre o valor estimado de $\hat{\pi}_{ij}(f)$ e a média dos resultados ao longo das simulações de Monte-Carlo,

Figura 45 – Resultados para simulações com sinais gerados pelas Equações 5.5 e $N_S = 12$, $N_T = 50$. Em azul, a função de distribuição acumulada (c.d.f.) calculada empiricamente a partir dos valores de $|\hat{\pi}_{21}(0.3)|^2$ em 10000 simulações de Monte-Carlo com $a_{21}(1) = 0$. As linhas tracejadas indicam os valores de limiar que a extensão da teoria assintótica da PDC fornece para a determinação da significância estatística a níveis de confiança 5% (em vermelho) e 1% (em preto) em uma simulação com $a_{21}(1) = 0.5$. A curva em verde é a c.d.f. teórica prevista para $|\hat{\pi}_{21}(0.3)|^2$ em \mathcal{H}_0 quando $a_{21}(1) = 0.5$.



Fonte: autoria própria

fato que pode ser associado ao viés inerente de estimativas de modelos MVAR em trechos curtos.

Tabela 1 – Tabela comparando as taxas de rejeição da hipótese \mathcal{H}_0 para $|\hat{\pi}_{21}(0.3)|^2$ com diferentes valores de $a_{21}(1)$. A comparação é feita entre os casos em que se adota, ou não, a correção proposta na Seção 3.3 para múltiplos trechos curtos. Mostra-se, também, os resultados de quando se tem uma estrutura de dados contendo um trecho contíguo de sinal com 600 pontos.

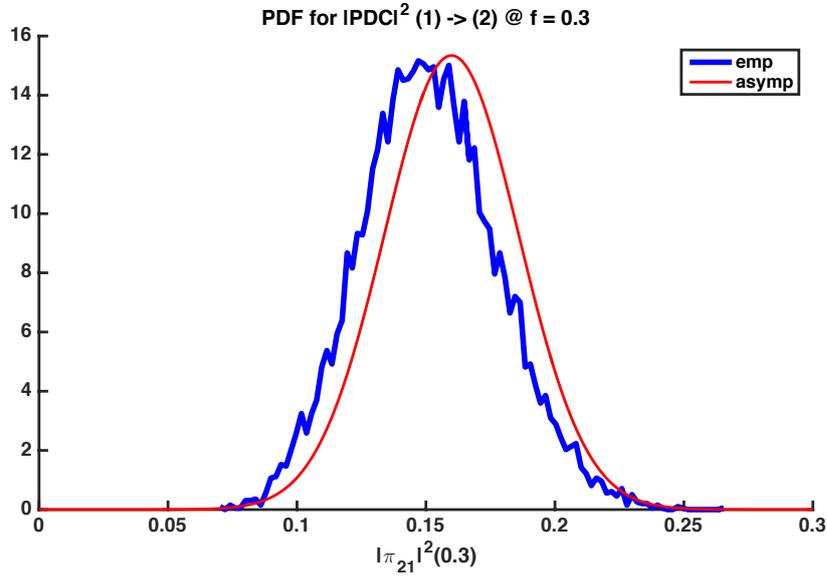
		Porcentagem de rejeição (%)					
		$L = 12, N_t = 50$		$L = 12, N_t = 50$		$L = 600, N_t = 1$	
$a_{21}(1)$	$ \pi_{21}(0.3) ^2$	$\alpha = 5\%$	$\alpha = 1\%$	$\alpha = 5\%$	$\alpha = 1\%$	$\alpha = 5\%$	$\alpha = 1\%$
0.00	0	8.56	2.91	5.86	1.63	5.19	1.06
0.05	0.0018	21.06	9.23	16.01	5.96	16.84	6.21
0.10	0.0070	56.15	35.17	47.90	26.05	53.98	30.03
0.15	0.0157	88.69	73.41	84.33	64.38	89.01	72.02
0.20	0.0275	99.03	95.66	98.16	92.07	99.23	95.82
0.50	0.1503	100.0	100.0	100.0	100.0	100.0	100.0

Not corrected Corrected

Fonte: autoria própria

A partir das observações acima, conclui-se que a análise estatística da PDC em situações com trechos curtos pode ser feita de forma bastante satisfatória usando a extensão da teoria assintótica propostas neste trabalho. Cabe notar, porém, que a validação foi baseada em resultados de estimativas da PDC. Não obstante, não existem motivos para

Figura 46 – Resultados para simulações geradas a partir das Equações 5.5 com $N_S = 12$, $N_T = 50$ e $a_{21}(1) = 0.5$. Em **azul** o histograma normalizado (p.d.f. empírica) dos valores de $|\hat{\pi}_{21}(0.3)|^2$ e em **vermelho** uma densidade de probabilidade Gaussiana com média e variância calculadas via extensão da análise assintótica da PDC para o conjunto de dados disponível.



Fonte: autoria própria

suspeitar que as mesmas conclusões não possam ser diretamente aplicadas a estudos com g PDC.

5.4.2 Usando técnicas de reamostragem

Em muitas situações práticas, não é possível garantir a validade das hipóteses que permeiam a teoria assintótica da PDC. Nesses casos, é útil ter em mãos uma ferramenta alternativa.

Uma técnica muito utilizada neste contexto é o *bootstrap*, no qual estatísticas de segunda ordem dos estimadores (média, variância, intervalo de confiança, etc.) são obtidas via procedimentos de reamostragem dos dados disponíveis (EFRON, 1979; SCHELTER, 2006).

Muito poderia ser dito sobre técnicas de *bootstrap* aplicadas ao paradigma de múltiplos trechos curtos de sinal, porém, nos limitaremos a ilustrar sua utilização em simulações geradas com as Equações 5.5 e comparar os resultados àqueles obtidos empregando a extensão da análise assintótica da PDC. O leitor interessado é convidado a ler o Capítulo 16 (SCHELTER, 2006) para discussões mais aprofundadas sobre técnicas de reamostragem aplicadas a séries temporais e relações de causalidade.

A partir de uma estrutura de dados $\mathbf{x}(n, s)$, a reamostragem de dados permite determinar a significância estatística de $|\hat{\pi}_{ij}(f)|^2$ da seguinte forma:

1. Estime modelos auto-regressivos univariados para cada um dos canais de $\mathbf{x}(n, s)$
2. Forme um processo multivariado auto-regressivo com coeficientes matriciais $\tilde{\mathbf{A}}(\cdot)$ cujos valores nas diagonais sejam os coeficientes dos modelos univariados de cada canal. Fora da diagonal, as matrizes são preenchidas por zeros, garantindo não haver conexão alguma entre canais
3. Gere B novas estruturas de dados $\tilde{\mathbf{x}}^{(b)}(n, s)$ por meio de simulações usando os coeficientes $\tilde{\mathbf{A}}(\cdot)$ e os resíduos gerados na estimação dos modelos univariados de cada canal (seguir os procedimentos descritos na Seção 4.2.1)
4. Calcule os valores de $|\hat{\pi}_{ij}^{(b)}(f)|^2$ em cada $\tilde{\mathbf{x}}^{(b)}(n, s)$ para $b = 1, 2, \dots, B$
5. Escolha os limiares para rejeição da hipótese nula em cada frequência f como sendo os 95-ésimo percentis de cada conjunto de resultados $|\hat{\pi}_{ij}^{(b)}(f)|^2$

Vale ressaltar que técnicas de *bootstrap* são geralmente usadas em situações nas quais as amostras disponíveis em uma estrutura de dados são independentes entre si e identicamente distribuídas. No caso de trechos curtos em $\mathbf{x}(n, s)$, consideramos que os N_T segmentos são de fato independentes, porém, as amostras dentro de cada uma das realizações podem ser correlacionadas entre si. É por esta razão que os sorteios com reposição são feitos com os resíduos dos modelos univariados de cada canal, uma vez que estes sinais são processos de inovação e, por definição, não têm correlação temporal.

O gráfico na Figura 47(A) mostra os resultados de $|\hat{\pi}_{21}^{(b)}(f)|^2$ para $B = 100$ e estruturas de dados contendo $N_T = 50$ trechos de $N_S = 12$ pontos e $a_{21}(1) = 0$. Já a Figura 47(B) compara $|\hat{\pi}_{21}(f)|^2$ calculado na estrutura de dados original aos limiares de detecção obtidos pelo método de *bootstrap*.

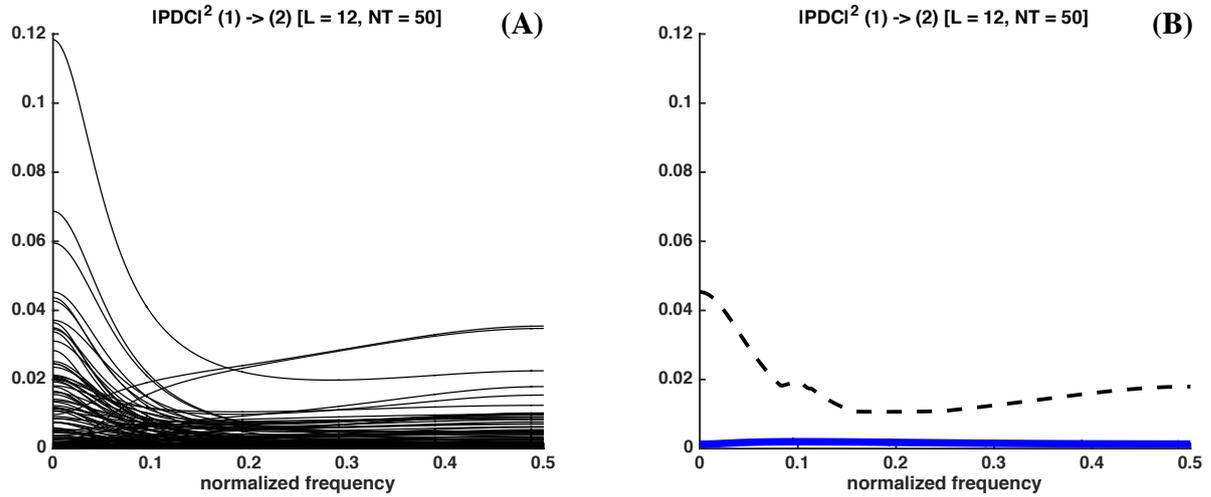
Também podemos aplicar técnicas de reamostragem para estudar o intervalo de confiança das estimativas de $|\hat{\pi}_{ij}(f)|^2$:

1. Criar B novas estruturas de dados $\mathbf{x}^{(b)}(n, s)$ compostas de N_T *trials* escolhidos por meio de sorteios, com reposição, dos trechos disponíveis em $\mathbf{x}(n, s)$
2. Calcular os valores de $|\hat{\pi}_{ij}^{(b)}(f)|^2$ para cada uma destas estruturas de dados e definir os intervalos de confiança de $|\hat{\pi}_{ij}(f)|^2$ usando os percentis dos conjuntos de resultados

Os gráficos da Figura 48 retratam os limiares de detecção de $|\hat{\pi}_{ij}(f)|^2$ e seu intervalo de confiança no caso em que a estrutura de dados $\mathbf{x}(n, s)$ tem $N_T = 50$ trechos com $N_S = 12$ pontos e os sinais são gerados pelas Equações 5.5 com $a_{21}(1) = 0.5$.

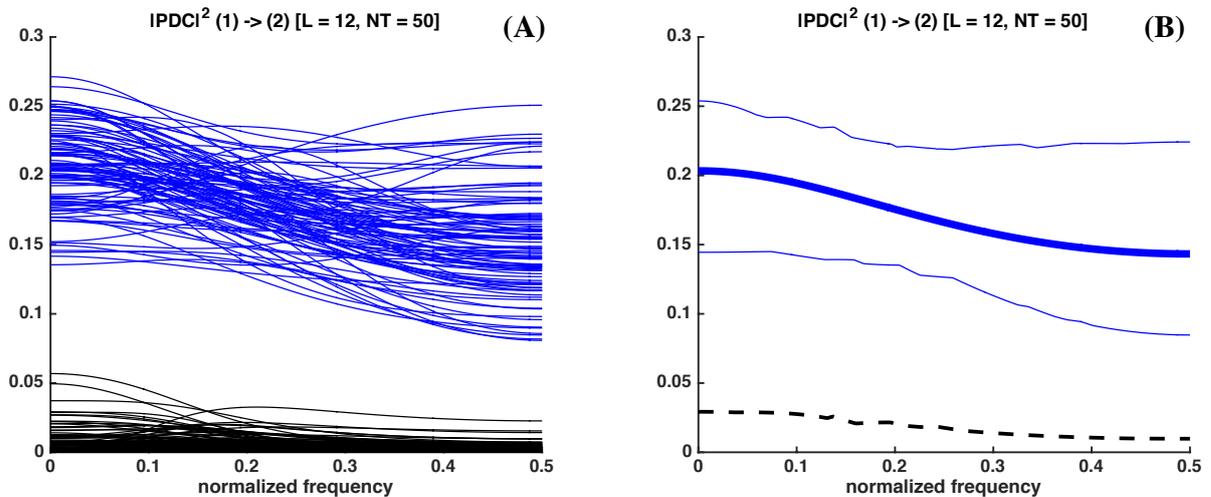
A partir dos resultados acima é possível concluir que a análise de significância estatística via *bootstrap* garante resultados bastante adequados e serve como opção quando a teoria assintótica da PDC não pode ser aplicada à estrutura de dados em estudo.

Figura 47 – Resultados de estimações feitas em amostras geradas pelas Equações 5.5 com $N_T = 50$, $N_S = 12$, $a_{21}(1) = 0$. No gráfico (A), em **preto**, estão representadas as B estimativas de $|\hat{\pi}_{21}^{(b)}(f)|^2$ calculadas a partir das estruturas de dados $\tilde{\mathbf{x}}^{(b)}(n, s)$. O gráfico (B) mostra, em **azul**, $|\hat{\pi}_{21}(f)|^2$ estimado usando $\mathbf{x}(n, s)$ bem como os limiares de detecção, em **preto** tracejado, determinados pelos 95-ésimo percentis dos resultados do gráfico da esquerda



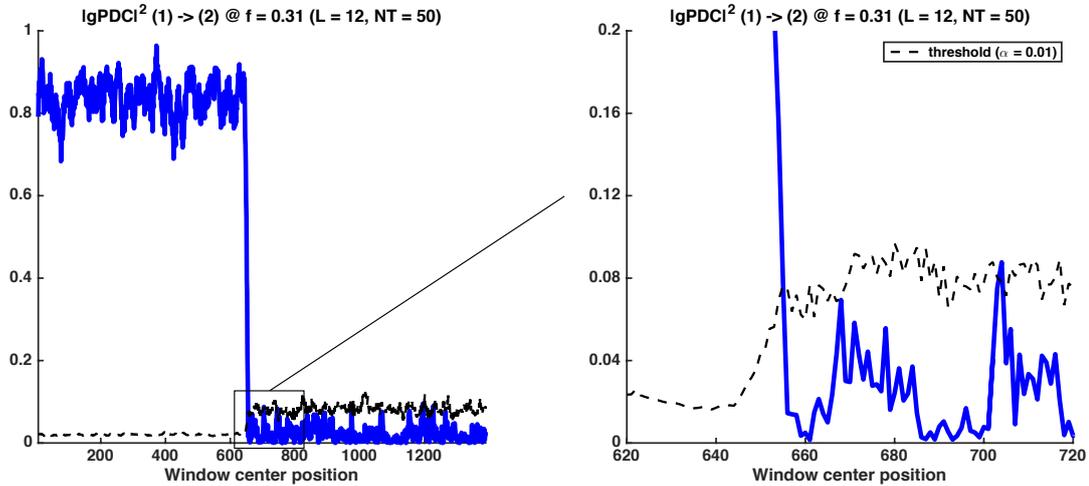
Fonte: autoria própria

Figura 48 – Resultados das estimações sob as mesmas condições da Figura 47, exceto por $a_{21}(1) = 0.5$. No gráfico (A), em **azul**, estão representados os valores de $|\hat{\pi}_{21}^{(b)}(f)|^2$ estimados a partir de $\mathbf{x}^{(b)}(n, s)$ e, em **preto**, para $\tilde{\mathbf{x}}^{(b)}(n, s)$. O gráfico (B) mostra, em linha cheia **azul**, a estimativa de $|\hat{\pi}_{21}(f)|^2$ usando a estrutura de dados original $\mathbf{x}(n, s)$ e seus intervalos de confiança a 95%. Os limiares de detecção a 5% estão representados em linha tracejada **preta**



Fonte: autoria própria

Figura 49 – Evolução temporal da $gPDC$ do canal 1 para o canal 2 no exemplo descrito na Seção 5.3.1. Os modelos MVAR têm ordem $P = 2$ e são estimados com uma janela deslizante de $L = 12$ pontos e $N_T = 50$ repetições. A linha tracejada ilustra para cada instante de tempo os limiares para rejeição da hipótese nula de que não há conexão (nível de confiança $\alpha = 1\%$) calculados usando a extensão da teoria assintótica.



Fonte: autoria própria

5.4.3 Exemplo com dois canais

Feita a validação empírica da extensão da teoria assintótica da PDC, retomamos o exemplo da Seção 5.3.1. Os gráficos da Figura 49 ilustram a evolução temporal dos valores de $|\hat{\pi}_{21}(0.31, n)|^2$ e seus respectivos limiares de detecção.

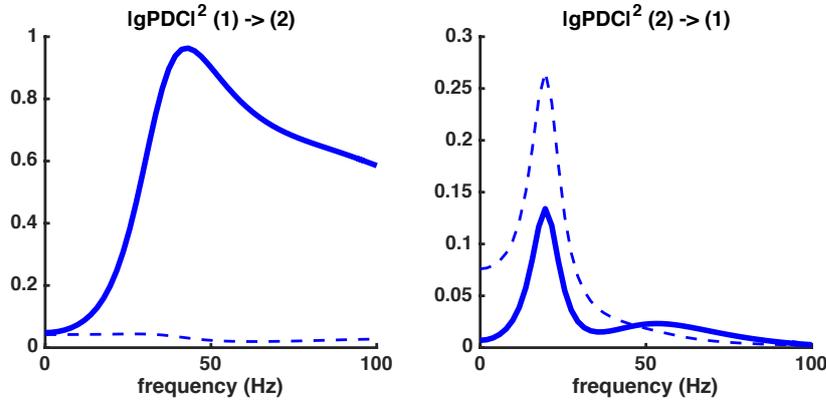
Nota-se claramente uma mudança no patamar dos limiares de detecção quando a conexão é desligada ($a_{21}(1) = 0$), mantendo-se, no entanto, sempre superior às oscilações dos valores estimados de conectividade. Este resultado é bastante interessante, pois mostra como os limiares de detecção se adaptam para diferentes estados do sistema.

5.4.4 Toy model com duas colunas corticais

Neste exemplo, empregou-se a extensão da teoria assintótica da $gPDC$ para estudar a significância estatística das grandezas estimadas nos exemplos descritos nas Seções 5.2.2 e 5.3.3. Primeiramente, com o coeficiente k_{21} fixo ao longo do tempo, calcula-se a $gPDC$ entre as colunas corticais com seus respectivos limiares de detecção a um nível de confiança $\alpha = 1\%$.

Os resultados da Figura 50 evidenciam que, embora $|\hat{\pi}_{12}(f)|^2$ tenha tido valores diferentes de zero em 20 Hz, ela não pode ser considerada estatisticamente significativa, pois os limiares desta região de frequência se elevam e impedem que rejeitemos a hipótese nula de conexão entre canais. De modo semelhante, as curvas na Figura 51 mostram os valores de $gPDC$ para situações com e sem conexão de 1 para 2. Nota-se, portanto, que

Figura 50 – Resultados da $gPDC$ entre as colunas corticais especificadas na Seção 5.2.2. O modelo MVAR tem ordem $P = 12$ e foi estimado com $N_S = 100$ e $N_T = 10$. As linhas tracejadas representam os limiares de detecção para a significância estatística de $|_g\pi_{ij}(f)|^2$ a um nível de confiança $\alpha = 1\%$ calculados usando a extensão da teoria assintótica.



Fonte: autoria própria

os limiares de significância estatística em cada caso garantem que as conclusões sejam consistentes com o esperado teoricamente.

Em seguida, dando a k_{21} o mesmo comportamento de chaveamento da Seção 5.3.3, estima-se a $gPDC$ entre as colunas corticais em intervalos de tempo com e sem conexão. A Figura 52 retrata a evolução temporal da $gPDC$ entre as colunas corticais em uma frequência fixa $f = 41.18$ Hz, revelando uma excelente robustez dos testes de significância estatística de $|_g\pi_{21}|^2$.

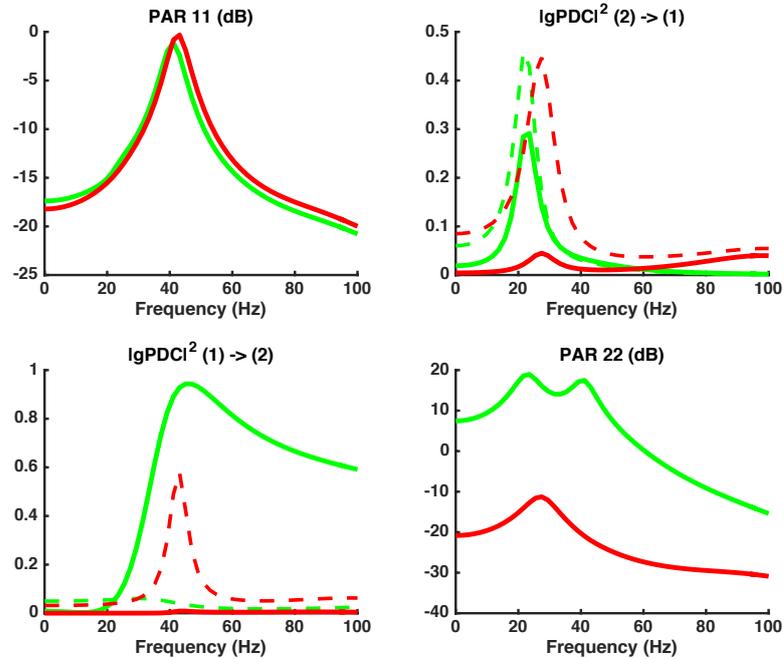
5.5 ANÁLISE DE DADOS REAIS: EXPERIMENTOS COM RATOS

Embora simulações digam muito sobre o desempenho de estimadores e algoritmos, é fundamental ter sempre em mente que o objetivo de tais desenvolvimentos é (ou deveria ser) aplicá-los a bases de dados reais.

Dito isso, a discussão a seguir mostra resultados de estimações de conectividade neural variável no tempo em um conjunto de dados reais contendo EEG de ratos em experimentos sensoriais. Vale ressaltar que esta base de dados é pública e já foi material de estudo em ao menos três artigos na literatura (QUAIRIAUX et al., 2011; PLOMP et al., 2014; RODRIGUES; ANDRADE, 2015). Uma descrição sucinta das características da base de dados e o que se espera observar como resultado de cada estímulo externo está disponível na Seção 4.6.

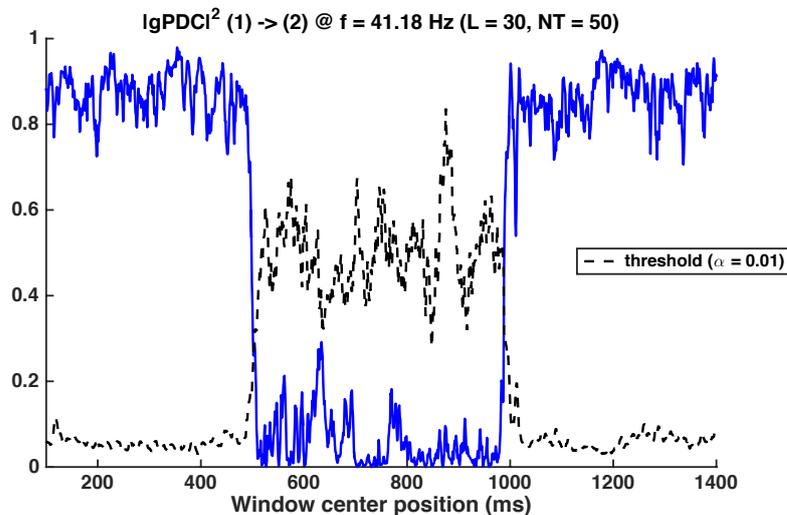
A investigação ilustrada aqui se interessou principalmente pelos registros de estímulos na vibrissa direita do rato identificado pelo código IC070523, pois permite comparações com os resultados de (PLOMP et al., 2014).

Figura 51 – Resultados da estimação do autoespectro (na diagonal, em dB) e da $gPDC$ entre as colunas corticais usando janelas de tamanho $L = 30$ pontos, $N_T = 50$ repetições e modelos MVAR de ordem $P = 6$. Em **verde**, resultados quando há conexão ($k_{21} = 0.5$) e em **vermelho** quando não há ($k_{21} = 0$). As linhas tracejadas representam limiares para a rejeição da hipótese nula de inexistência de $gPDC$ a um nível de confiança $\alpha = 1\%$ calculados usando a extensão da teoria assintótica.



Fonte: autoria própria

Figura 52 – Evolução no tempo da estimação da $gPDC$ de NMM_1 para NMM_2 na frequência $f = 41.18$ Hz. Os resultados foram obtidos nas mesmas condições descritas na Figura 51. As linhas tracejadas representam limiares para a rejeição da hipótese nula de inexistência de $gPDC$ a um nível de confiança $\alpha = 1\%$.



Fonte: autoria própria

5.5.1 Comparando os resultados

A evolução temporal da densidade espectral de potência na região cS1 do cérebro do rato foi estudada empregando dois métodos:

1. Média da transformada de Stockwell (transformada S) (STOCKWELL; MANSINHA; LOWE, 1996) aplicada a cada uma das $N_T = 40$ realizações disponíveis.
2. Estimação do autoespectro via janela deslizante com $L = 30$ pontos e usando o algoritmo Nuttall-Strand para segmentos. A ordem $P = 3$ destes modelos auto-regressivos foi determinada adotando o critério AIC descrito na Seção 4.3.3, conforme mostra a Figura 54.

Os resultados estão disponíveis na Figura 53 e revelam, sem grande surpresa, que a estimação não-paramétrica do espectro via transformada S tem resolução tempo-frequência inferior à de quando adotamos um procedimento de janela deslizante com modelos paramétricos como o MVAR.

Em seguida, implementou-se o algoritmo de estimação de conectividade neural variável no tempo proposto em (PLOMP et al., 2014). O método consiste, basicamente, em duas etapas: estimar modelos auto-regressivos com o algoritmo RLS (fator de esquecimento $C = 0.02$) em cada *trial* e tomar médias dos valores da PDC a cada instante. A Figura 55 ilustra as representações tempo-frequência dos resultados com a PDC normalizada por colunas (versão usual) e por linhas.

Nota-se uma clara mudança de conectividade no momento do estímulo externo, porém, a resolução temporal é bastante ruim, devido à péssima escolha de fator de esquecimento. Conforme discutido no Apêndice B, um coeficiente como esse equivaleria a uma janela deslizante de aproximadamente 100 pontos ou, no caso desta base de dados, uma resolução temporal de 50 ms. Ora, se os fenômenos que desejamos observar têm uma duração esperada de aproximadamente 30 ms (vide Seção 4.6), fica claro que este valor de C é inadequado. Outro fato relevante é (PLOMP et al., 2014) ter analisado somente a soma da PDC saindo do canal cS1, escolha provavelmente mais pragmática do que científica, visto que os resultados para a estimativa em cada par de canais é bastante ruidosa e de difícil interpretação.

Para combater os problemas da baixa resolução temporal, (PLOMP et al., 2014) pondera os valores de conectividade saindo de cS1 pelo autoespectro calculado usando a transformada de Stockwell, dando a este estimador o nome *wPDC* (*weighted-PDC*). A Figura 56 compara os resultados com a *gPDC* em janela deslizante aos obtidos via *wPDC*-RLS. Percebe-se que a atividade saindo de cS1 estimada com ambos os métodos é bastante semelhante, com picos ocorrendo em torno de 10 ms pós-estímulo e duração de aproximadamente 30 ms.

Embora os resultados com a w PDC sejam melhores agora do que quando não se usava a ponderação pelo autoespectro, é difícil não ter impressão que sua criação tenha sido um tanto quanto *ad-hoc*, sem primeiro lidar com possíveis melhorias do processo de estimação dos modelos MVAR, como escolher um fator de esquecimento mais sensato. Ademais, o resultado na Figura 53 permite afirmar que a w PDC proposta por (PLOMP et al., 2014) teria uma resolução tempo-frequência melhor caso fosse ponderada pelo autoespectro calculado em janela deslizante.

Percebe-se, também, que o procedimento de janela deslizante é uma opção bastante interessante para o estudo de conectividade neural variável no tempo, sendo capaz de prover resultados fisiologicamente plausíveis a partir de estimadores clássicos e já bem consolidados na literatura.

Para concluir, deve-se ressaltar que ao reproduzir os resultados de (PLOMP et al., 2014), notou-se algumas escolhas metodológicas que vão na contramão de diversas constatações feitas em simulações anteriores em *toy models*.

Por exemplo, no texto inteiro de (PLOMP et al., 2014) não há menção alguma a qualquer rotina de pré-processamento de sinais. Entretanto, os resultados na Figura 31 evidenciam de forma bastante clara que é possível que relações de conectividade espúrias sejam detectadas em situações sem pré-processamento.

Vê-se, também, que (PLOMP et al., 2014) lida com a presença de múltiplos *trials* tomando médias dos valores de PDC, indo contra nosso diagnóstico na Seção 5.2 de que tal abordagem não é a melhor para estimacões de modelos com vários trechos curtos de sinal.

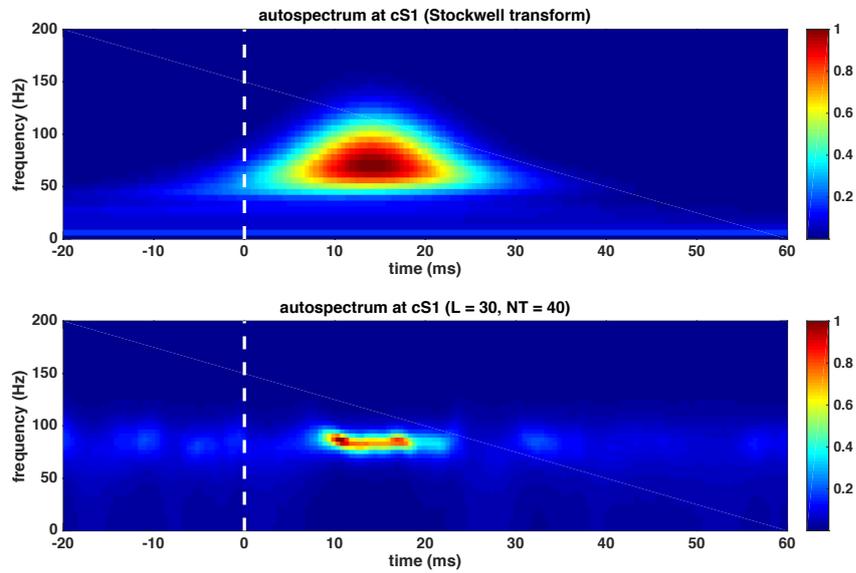
Apesar de tudo isso, os resultados em (PLOMP et al., 2014) são fisiologicamente plausíveis e as interpretações decorrentes são baseadas em trabalhos da literatura, principalmente os de (QUAIRIAUX et al., 2011). Deste modo, embora diversos pontos na metodologia do artigo possam ser considerados falhos, continua sendo válido reproduzir seus resultados e compará-los aos obtidos com o procedimento de janela deslizante.

5.5.2 Estendendo os resultados

Após as comparações entre o algoritmo de janela deslizante e o método proposto em (PLOMP et al., 2014), focou-se a atenção à região mais próxima de cS1, isto é, os eletrodos $\{1, 2, 3, 4, 5, 6\}$. Empregando o critério AIC, determinou-se que a melhor ordem para modelos MVAR com apenas 6 canais é $P = 6$ (vide resultados na Figura 57).

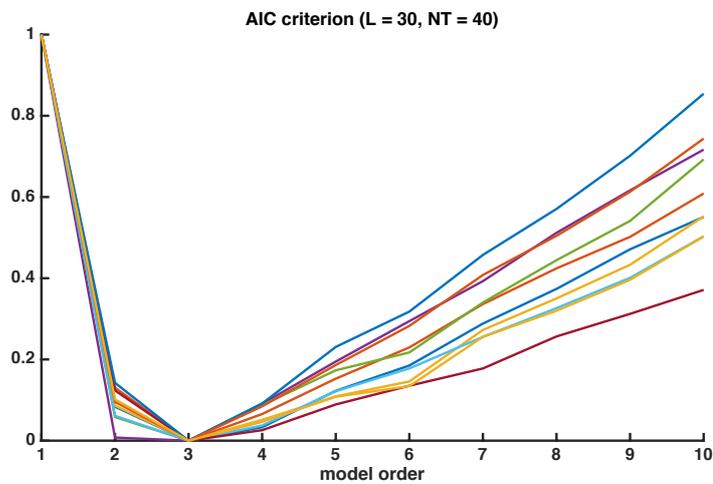
A Figura 58 compara o desempenho da w PDC-RLS ao da g PDC com janela deslizante e mostra não haver grande diferença qualitativa entre os resultados com todos os 15 canais ou apenas um subconjunto deles. Vale dizer esta redução de dimensão garante estimativas de melhor qualidade, pois o número de coeficientes determinados a cada

Figura 53 – Representações tempo-frequência do auto-espectro do eletrodo 4 (chamado de cS1) do sujeito IC070523. A figura superior mostra os resultados para a transformada S e a de baixo para os espectros associados aos modelos MVAR de uma janela deslizante. O eixo de tempo está deslocado para ter como origem a excitação feita na vibrissa direita do rato analisado.



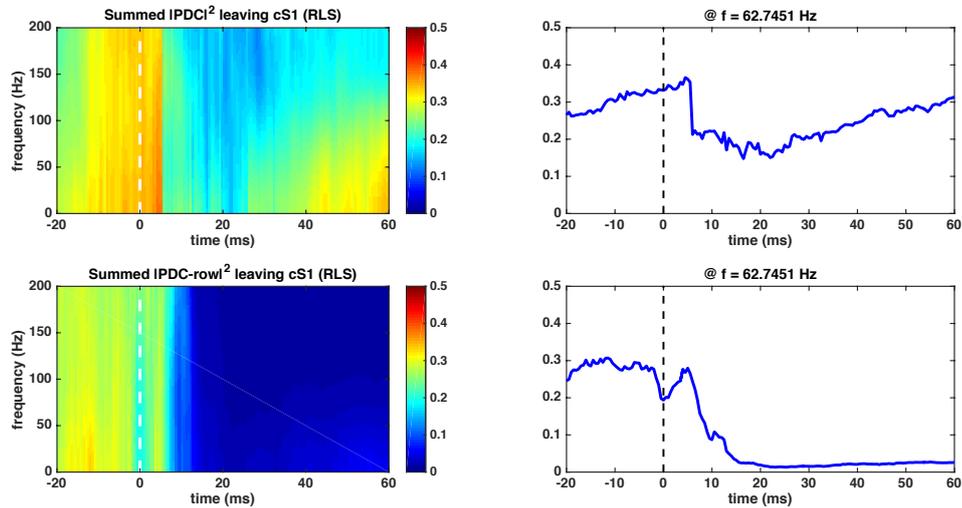
Fonte: autoria própria

Figura 54 – Valores do critério AIC durante a escolha da ordem dos modelos MVAR em um procedimento de janela deslizante com $L = 30$ pontos e $N_T = 40$ realizações disponíveis.



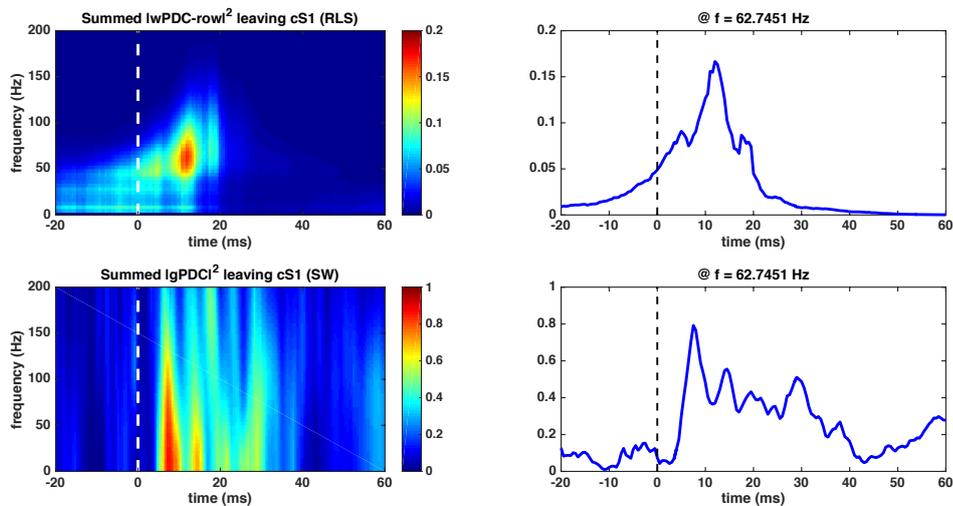
Fonte: autoria própria

Figura 55 – Representações tempo-frequência da soma da PDC saindo de cS1 e a evolução temporal destes resultados para uma frequência fixa em $f = 62.75$ Hz. Comparam-se as estimações feitas seguindo as especificações dadas no artigo (PLOMP et al., 2014) com o algoritmo RLS ($C = 0.02$) em duas opções de PDC: normalizada nas colunas ou nas linhas.



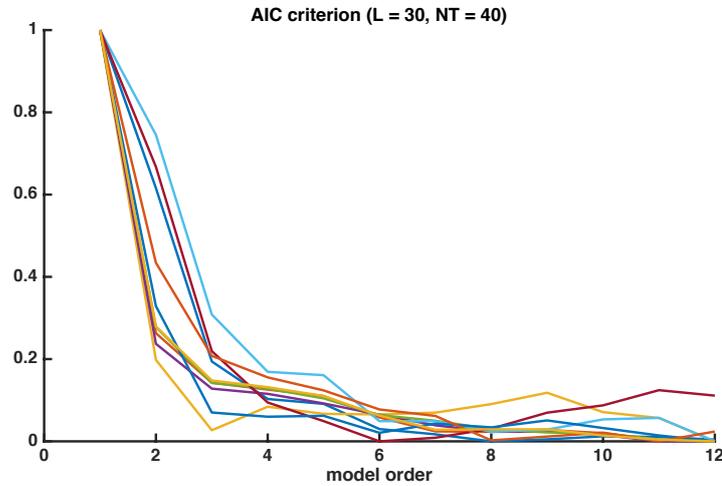
Fonte: autoria própria

Figura 56 – Representações tempo-frequência da soma da conectividade saindo de cS1 e a evolução temporal destes resultados para uma frequência fixa em $f = 62.75$ Hz. Os gráficos de cima mostram os resultados da estimação usando w PDC e os de baixo para o procedimento de janela deslizante com $L = 30$ pontos e conectividade neural calculada via g PDC.



Fonte: autoria própria

Figura 57 – Valores do critério AIC durante a escolha da ordem dos modelos MVAR em um procedimento de janela deslizante com $L = 30$ pontos e $N_T = 40$ realizações disponíveis. As estimações foram realizadas usando apenas os sinais nos eletrodos $\{1, 2, 3, 4, 5, 6\}$ do experimento.



Fonte: autoria própria

instante de tempo passa de $15^2 \times 3 = 675$ a $6^2 \times 6 = 216$, ou seja, aproximadamente um terço.

Em seguida, aplicando a extensão da teoria assintótica da $gPDC$ às estimações com janela deslizante, pôde-se analisar a significância estatística dos valores de conectividade entre cS1 (eletrodo 4) e seus vizinhos mais próximos.

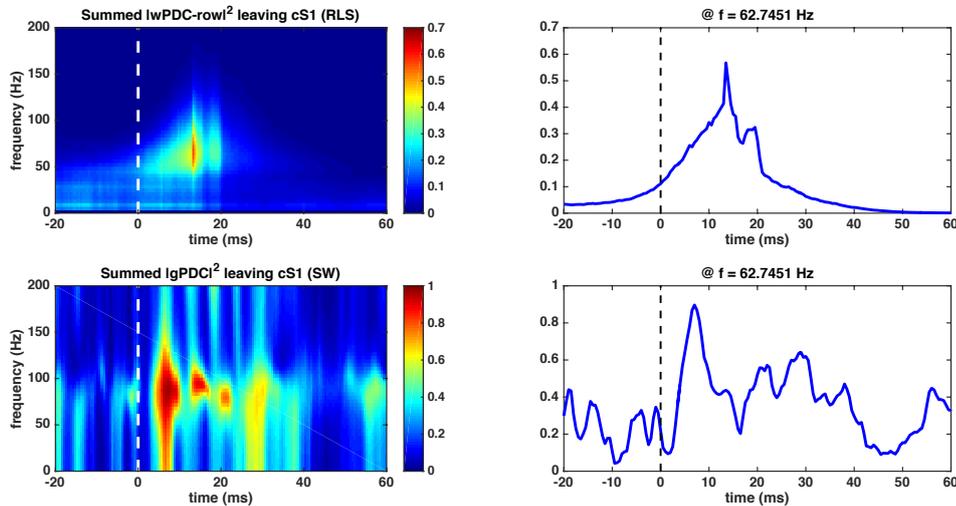
As curvas da Figura 59 indicam que apenas os valores de $|_g\hat{\pi}_{24}|^2$ se tornam estatisticamente significantes durante um intervalo de tempo pós-estímulo. Tal resultado é bastante interessante, pois permite concluir que o fluxo de informação saindo de cS1 tende a se propagar principalmente para a região próxima do eletrodo 2, na região frontal do cérebro do rato. Porém, é importante ressaltar que seria necessário realizar estudos com os dados de outros ratos antes de concluir que estas observações são de fato um fenômeno consistente ao longo de uma população. Tal exploração não foi feita pois a ferramenta de análise estatística da PDC que temos em mãos lida apenas com o caso de um sujeito.

Por fim, a Figura 60 compara os limiares obtidos com a teoria assintótica àqueles em nossa proposta de *bootstrap* para trechos curtos da Seção 5.4.2. Nota-se que ambos os métodos levam a conclusões semelhantes quanto a significância estatística dos valores de $|_g\pi_{ij}|^2$. No entanto, a técnica de reamostragem é muito mais custosa computacionalmente, com um tempo de processamento em torno de 20 vezes maior.

5.6 CONCLUSÕES DO CAPÍTULO

Este capítulo expôs e discutiu os diversos resultados deste trabalho de mestrado. Cientes da extensão do texto, bem como a quantidade de pontos levantados ao longo dele,

Figura 58 – Representações tempo-frequência da soma da conectividade saindo de cS1 e a evolução temporal destes resultados para uma frequência fixa em $f = 62.75$ Hz. Os gráficos de cima mostram os resultados da estimação usando w PDC e os inferiores para o procedimento de janela deslizante com $L = 30$ pontos e conectividade neural calculada via g PDC. As estimações foram realizadas usando apenas os sinais nos eletrodos $\{1, 2, 3, 4, 5, 6\}$ do experimento.



Fonte: autoria própria

recapitulamos abaixo os principais temas de cada seção. A Figura 61 sumariza estes temas visualmente, auxiliando o leitor a ter uma noção global do que foi apresentado.

A Seção 5.2 ilustrou o desempenho de diferentes propostas de estimação de modelos MVAR quando vários trechos de sinal estão disponíveis em uma base de dados. Notou-se uma clara superioridade do algoritmo Nuttall-Strand para segmentos, que foi então usado em todas as outras estimações de modelos auto-regressivos. A seção termina mostrando alguns dos efeitos do pré-processamento de sinais sobre os resultados da estimação de causalidade entre séries temporais.

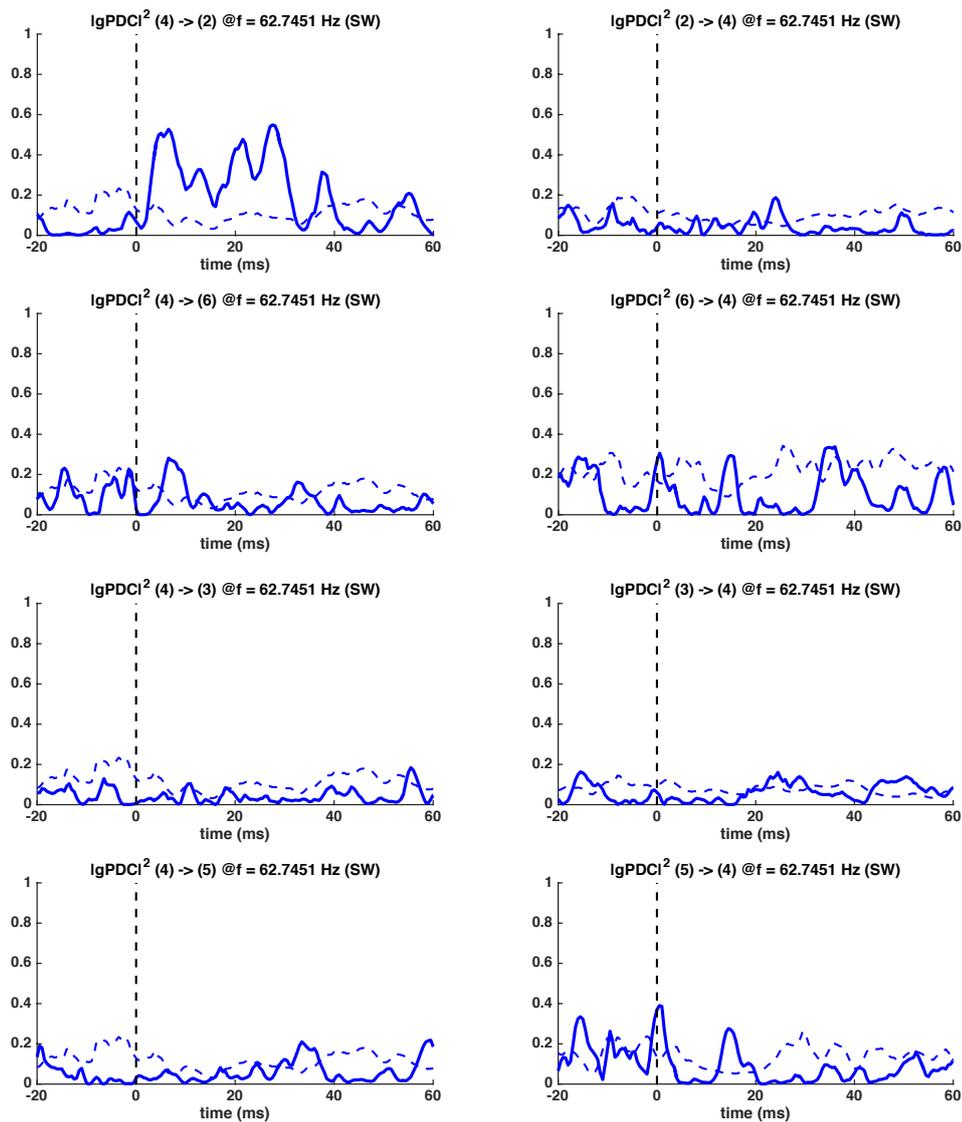
Em seguida, na Seção 5.3, o algoritmo proposto na Seção 4.4.4 foi colocado em prática e usado para detectar mudanças de conectividade em *toy models*. Também foi feita uma comparação entre o procedimento de janela deslizante e o RLS com fator de esquecimento, com um levantamento de pontos positivos e negativos de cada algoritmo.

A Seção 5.4 é a mais longa deste capítulo. Ela mostrou a sequência lógica e experimental usada para validar a proposta de extensão da teoria assintótica da PDC ao caso de múltiplos trechos curtos de sinal.

Por fim, a Seção 5.5 aplicou o algoritmo de estimação de conectividade a uma base de dados reais disponível publicamente e comparou os resultados aos de (PLOMP et al., 2014).

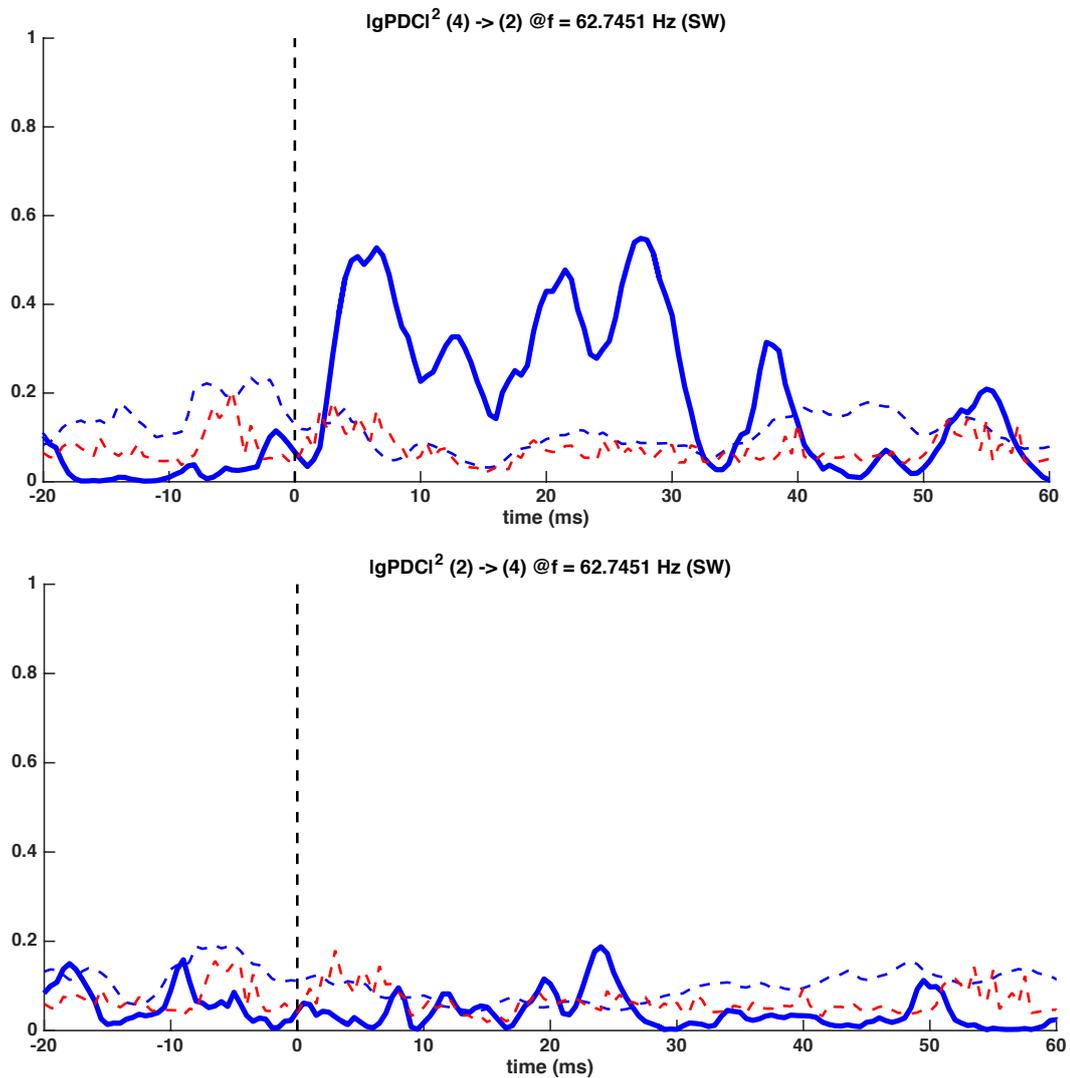
O próximo capítulo conclui a dissertação retomando os principais resultados e contribuições deste trabalho. Discutem-se, também, projetos futuros e temas relevantes ao

Figura 59 – Evoluções temporais da $gPDC$ entre cS1 (eletrodo 4) e seus vizinhos a uma frequência fixa em $f = 62.75$ Hz. As estimações foram feitas nas mesmas condições da Figura 58. As linhas tracejadas em azul são limiares de significância estatística da $gPDC$ para cada instante de tempo e a um nível $\alpha = 1\%$.



Fonte: autoria própria

Figura 60 – Evolução temporal da $gPDC$ entre cS1 (eletrodo 4) e o eletrodo 2 a uma frequência fixa em $f = 62.75$ Hz. As estimações foram feitas nas mesmas condições da Figura 58. As linhas tracejadas representam limiares de significância estatística da $gPDC$ a um nível $\alpha = 1\%$. Em **azul** são os calculados usando a extensão da teoria assintótica e em **vermelho** os obtidos com o método de *bootstrap* (100 sorteios).



Fonte: autoria própria

Figura 61 – Sumário dos principais resultados apresentados no Capítulo 5.

(5.1) Estimação de modelo conjunto para vários segmentos	<ul style="list-style-type: none">• Comparação de algoritmos• Validação em neural mass model• Efeitos do pré-processamento
(5.2) Análise de conectividade variável no tempo	<ul style="list-style-type: none">• Exemplos com dois e três canais• Comparação com o RLS• Chaveamento em neural mass model
(5.3) Testes de significância estatística	<ul style="list-style-type: none">• Validação empírica da correção assintótica• Comparação com o bootstrap• Exemplos de aplicação
(5.4) Análise de dados reais	<ul style="list-style-type: none">• Reprodução de resultados da literatura• Comparação com nossa proposta• Extensão dos resultados da literatura

Fonte: autoria própria

desenvolvimento da pesquisa em conectividade neural nos próximos anos.

6 CONSIDERAÇÕES FINAIS

6.1 CONCLUSÕES DO TRABALHO

Este trabalho se interessou pela conectividade neural, particularmente em situações não-estacionárias ligadas a experimentos com potenciais evento-relacionados.

Entre os diversos resultados obtidos, pode-se destacar a proposta de um novo algoritmo de estimação para modelos auto-regressivos multivariados em estruturas de dados com múltiplos trechos curtos de sinal, além da extensão da teoria assintótica da PDC ao caso de múltiplos segmentos.

A primeira contribuição levou à estimação de modelos autoregressivos com coeficientes variantes no contexto de potenciais evento-relacionados. Embora a proposta seja baseada em um procedimento de janela deslizante não muito inovador, nota-se que ela atende muito bem aos objetivos apresentados, além de ser mais prática do que o algoritmo RLS e seu fator de esquecimento pouco intuitivo.

Já o estudo da estatística da PDC em múltiplos trechos curtos possibilitou a análise da significância estatística dos estimadores de causalidade entre séries temporais sem recorrer a procedimentos de reamostragem, determinando-se diretamente limiares de significância estatística no plano tempo-frequência.

Deve-se mencionar, também, a importância que se deu ao uso de exemplos realistas para simulações, com especial atenção aos *neural mass models*, e a preferência por bases de dados públicas, com as quais é possível comparar objetivamente algoritmos propostos por outros grupos de pesquisa.

6.2 TRABALHOS FUTUROS

Ainda que as frentes de exploração deste trabalho tenham culminado em contribuições bastante interessantes, há sempre espaço para se aprofundar em certos tópicos.

Por exemplo, ao estimar modelos MVAR via janela deslizante com o algoritmo NS-seg, o procedimento que determina os coeficientes a cada instante de tempo ignora completamente resultados obtidos no instante de tempo anterior. No entanto, é bastante razoável imaginar que um modelo auto-regressivo para um instante n seja semelhante a um no instante $n + 1$, de modo que seja possível utilizar algum tipo de conhecimento *a priori* nas estimações. Uma nova adaptação do algoritmo de Nuttall-Strand para atender a esta constatação seria certamente útil em procedimentos de janela deslizante.

Outro ponto a ser explorado é a análise estatística da PDC, particularmente a

possibilidade de fazer comparações entre mais de um par de séries temporais, mais de um sujeito ou em mais de uma frequência.

Por fim, um tema de grande relevância atualmente na área de processamento de sinais biomédicos é o efeito da condução de volume sobre as estimações de conectividade neural com EEG. Há bastante espaço para explorações nesta área e pouco se sabe sobre como garantir a robustez da PDC após a solução do problema inverso e a obtenção das séries temporais no espaço de fontes.

REFERÊNCIAS

ANDREWS, D. F.; HERZBERG, A. *Data: collection of problems from many fields for the student and research worker*. New York City, US: Springer, 1985. ISBN 0387961259.

ARIELI, A. et al. Dynamics of ongoing activity: explanation of the large variability in evoked cortical responses. *Science*, v. 273, n. 5283, p. 1868–1871, 1996. ISSN 0036-8075.

ASTOLFI, L. et al. Assessing cortical functional connectivity by partial directed coherence: simulations and application to real data. *IEEE Transactions on Biomedical Engineering*, v. 53, n. 9, p. 1802–1812, 2006. ISSN 00189294.

ASTOLFI, L. et al. Estimation of the time-varying cortical connectivity patterns by the adaptive multivariate estimators in high resolution EEG studies. In: *INTERNATIONAL CONFERENCE OF THE IEEE ENGINEERING IN MEDICINE AND BIOLOGY SOCIETY, EMBC'06, Conference...* New York City, US: IEEE, 2006. p. 2446–2449. ISBN 1424400325. ISSN 05891019.

ASTOLFI, L. et al. Tracking the time-varying cortical connectivity patterns by adaptive multivariate estimators. *IEEE Transactions on Biomedical Engineering*, v. 55, n. 3, p. 902–913, 2008. ISSN 00189294.

BACCALÁ, L. A. et al. Unified asymptotic theory for all partial directed coherence forms. *Philosophical transactions. Series A, Mathematical, physical, and engineering sciences*, v. 371, n. 1994, p. 20120158, 2013. ISSN 1364-503X.

BACCALÁ, L. A.; SAMESHIMA, K. Partial directed coherence: a new concept in neural structure determination. *Biological cybernetics*, v. 84, n. 6, p. 463–474, 2001. ISSN 0340-1200.

BACCALÁ, L. A.; SAMESHIMA, K. Computer intensive testing for the influence between time series. In: SCHELTER, B.; WINTERHALDER, M. (Ed.). *Handbook of time series analysis: recent theoretical developments and applications*. New Jersey, US: Wiley, 2006. cap. 16.

BACCALÁ, L. A.; SAMESHIMA, K.; TAKAHASHI, D. Y. Generalized Partial Directed Coherence. In: *INTERNATIONAL CONFERENCE ON DIGITAL SIGNAL PROCESSING, 15. Conference...* Cardiff, UK: IEEE, 2007. p. 163–166. ISBN 1-4244-0882-2.

BEEB, A.; RAHMAN, M. On averaging burg spectral estimators for segments. *IEEE Transactions on Acoustics, Speech, and Signal Processing*, v. 34, n. 6, 1986. ISSN 0096-3518.

BENDAT, J. S.; PIERSOL, A. G. *Random data: analysis and measurement procedures*. New Jersey, US: Wiley, 2010. ISBN 0470248777.

BIAZOLI, C. E. et al. Application of partial directed coherence to the analysis of resting-state EEG-fMRI data. *Brain connectivity*, v. 3, n. 6, p. 563–8, 2013. ISSN 2158-0022.

- BLINOWSKA, K. J. et al. Application of directed transfer function and network formalism for the assessment of functional connectivity in working memory task. *Philosophical transactions. Series A, Mathematical, physical, and engineering sciences*, v. 371, p. 20110614, 2013. ISSN 1364-503X.
- BOYD, S.; VANDENBERGHE, L. *Convex optimization*. Cambridge, UK: Cambridge University Press, 2004. ISBN 0521833787.
- BRITO, C. S. N. D. et al. Asymptotic behavior of generalized partial directed coherence. In: IEEE. *INTERNATIONAL CONFERENCE OF THE IEEE ENGINEERING IN MEDICINE AND BIOLOGY SOCIETY, EMBC'10, Conference...* Buenos Aires, Argentina, 2010. p. 1718–1721. ISBN 9781424441235. ISSN 1557-170X.
- BROCKWELL, P. J.; DAVIS, R. A. *Time series: theory and methods* (Springer Series in Statistics). New York City, US: Springer, 2009. ISBN 1441903194.
- BROERSEN, P. M. *Automatic autocorrelation and spectral analysis*. New York City, US: Springer, 2006. ISBN 1846283280.
- BURG, J. P. *Maximum entropy spectral analysis*. Tese (Doutorado) — Stanford University, 1975.
- BUZSAKI, G. *Rhythms of the brain*. Oxford, UK: Oxford University Press, 2011. ISBN 0199828237.
- CASELLA, G. *Statistical inference*. India: Thomson Press, 2008. ISBN 8131503941.
- DAVID, O.; COSMELLI, D.; FRISTON, K. J. Evaluation of different measures of functional connectivity using a neural mass model. *NeuroImage*, v. 21, n. 2, p. 659–673, 2004. ISSN 10538119.
- DAVID, O.; FRISTON, K. J. A neural mass model for MEG/EEG: coupling and neuronal dynamics. *NeuroImage*, v. 20, n. 3, p. 1743–1755, 2003. ISSN 10538119.
- DAVID, O. et al. Dynamic causal modeling of evoked responses in EEG and MEG. *NeuroImage*, v. 30, n. 4, p. 1255–1272, 2006. ISSN 10538119.
- DAVID, O.; KILNER, J. M.; FRISTON, K. J. Mechanisms of evoked and induced responses in MEG/EEG. *NeuroImage*, v. 31, n. 4, p. 1580–1591, 2006. ISSN 10538119.
- DAYAN, P.; ABBOTT, L. F. *Theoretical neuroscience: computational and mathematical modeling of neural systems*. Cambridge, US: The MIT Press, 2005. ISBN 9780262541855.
- DING, M. et al. Short-window spectral analysis of cortical event-related potentials by adaptive multivariate autoregressive modeling: data preprocessing, model validation, and variability assessment. *Biological cybernetics*, v. 83, n. 1, p. 35–45, 2000. ISSN 0340-1200.
- EFRON, B. Bootstrap methods: Another look at the jackknife. *Ann. Statist.*, The Institute of Mathematical Statistics, v. 7, n. 1, p. 1–26, 01 1979.
- FALLANI, F. D. V. et al. Cortical network dynamics during foot movements. *Neuroinformatics*, v. 6, n. 1, p. 23–34, 2008. ISSN 15392791.

- FLORIN, E. et al. The effect of filtering on Granger causality based multivariate causality measures. *NeuroImage*, Elsevier Inc., v. 50, n. 2, p. 577–588, 2010. ISSN 10538119.
- FRANASZCZUK, P. J.; BLINOWSKA, K. J. Linear model of brain electrical activity. *Biological Cybernetics*, v. 25, p. 19–25, 1985.
- GERSCH, W. Spectral analysis of EEGs by autoregressive decomposition of time series. *Mathematical Biosciences*, v. 7, n. 1-2, p. 205–222, 1970. ISSN 00255564.
- GINTER, J. et al. Propagation of EEG activity in the beta and gamma band during movement imagery in humans. *Methods of Information in Medicine*, v. 44, n. 1, p. 106–113, 2005. ISSN 00261270.
- GRANGER, C. W. J. Investigating causal relations by econometric models and cross-spectral methods. *Econometrica*, v. 37, n. 3, p. 424–438, 1969. ISSN 00129682.
- HASTIE, T.; TIBSHIRANI, R.; FRIEDMAN, J. *The elements of statistical learning: data Mining, inference, and prediction*. New York City, US: Springer, 2011. ISBN 0387848576.
- HAYKIN, S. *Adaptive filter theory*. New Jersey, US: Prentice Hall, 1995. ISBN 013322760X.
- HESSE, W. et al. The use of time-variant EEG Granger causality for inspecting directed interdependencies of neural assemblies. *Journal of Neuroscience Methods*, v. 124, n. 1, p. 27–44, 2003. ISSN 01650270.
- HU, L.; ZHANG, Z. G.; HU, Y. A time-varying source connectivity approach to reveal human somatosensory information processing. *NeuroImage*, v. 62, n. 1, p. 217–228, 2012. ISSN 10538119.
- HUANG, N. et al. The empirical mode decomposition and the Hilbert spectrum for nonlinear and non-stationary time series analysis. *Proceedings of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, v. 454, n. 1971, p. 995, 903, 1998. ISSN 13645021.
- JANSEN, B. H.; RIT, V. G. Electroencephalogram and visual evoked potential generation in a mathematical model of coupled cortical columns. *Biological Cybernetics*, v. 366, p. 357–366, 1995.
- JANSEN, B. H.; ZOURIDAKIS, G.; BRANDT, M. E. A neurophysiologically-based mathematical model of flash visual evoked potentials. *Biological Cybernetics*, v. 68, n. 3, p. 275–283, 1993. ISSN 03401200.
- JAYNES, E. T. *Probability theory: the logic of science*. Cambridge, UK: Cambridge University Press, 2003. ISBN 0521592712.
- KAIPIO, J. *Simulation and estimation of nonstationary EEG*. 110 p. Tese (Doutorado) — Kuopio University, 1996.
- KAMINSKI, M. J.; BLINOWSKA, K. J. A new method of the description of the information flow in the brain structures. *Biological cybernetics*, v. 65, n. 3, p. 203–210, 1991. ISSN 0340-1200.

- KAY, S.; MARPLE, S. Spectrum analysis: a modern perspective. *Proceedings of the IEEE*, v. 69, n. 11, p. 1380–1419, 1981. ISSN 0018-9219.
- KORZENIEWSKA, A. et al. Dynamics of event-related causality in brain electrical activity. *Human Brain Mapping*, v. 29, n. 10, p. 1170–1192, 2008. ISSN 10659471.
- KRAUTH, W. *Statistical mechanics: algorithms and computations* (Oxford Master Series in Physics). Oxford, UK: Oxford University Press, 2006. ISBN 0198515367.
- KUS, R. et al. Propagation of EEG activity during continuous attention test. *Bulletin Of The Polish Academy Of Sciences Technical Sciences*, v. 53, n. 3, p. 217–222, 2005. ISSN 02397528.
- KUS, R.; GINTER, J.; BLINOWSKA, K. J. Propagation of EEG activity during finger movement and its imagination. *Acta Neurobiologiae Experimentalis*, v. 66, n. 3, p. 195–206, 2006. ISSN 00651400.
- LEISTRITZ, L. et al. Time-variant partial directed coherence for analysing connectivity: a methodological study. *Philosophical transactions. Series A, Mathematical, physical, and engineering sciences*, v. 371, n. 1997, 2013. ISSN 1364-503X.
- LUCK, S. J. *An Introduction to the event-related potential technique*. Cambridge, US: The MIT Press, 2005. ISBN 0262621967.
- LUTKEPOHL, H. *New introduction to multiple time series analysis*. New York City, US: Springer, 2007. ISBN 3540262393.
- MACKAY, D. J. C. *Information theory, inference and learning algorithms*. Cambridge, US: Cambridge University Press, 2003. ISBN 0521642981.
- MALLAT, S. *A wavelet tour of signal processing: the sparse way*. Cambridge, US: Academic Press, 2008. ISBN 0123743702.
- MARPLE, S. L. *Digital spectral analysis with applications*. New Jersey, US: Prentice Hall, 1987. ISBN 0132141493.
- MARPLE, S. L.; NUTTALL, A. H. Experimental comparison of three multichannel linear prediction spectral estimators. *IEEE Proceedings of Communications, Radar and Signal Processing*, v. 130, n. 3, p. 218, 1983. ISSN 01437070.
- MILDE, T. et al. A new Kalman filter approach for the estimation of high-dimensional time-variant multivariate AR models and its application in analysis of laser-evoked brain potentials. *NeuroImage*, v. 50, n. 3, p. 960–969, 2010. ISSN 10538119.
- MOLLER, E. et al. Instantaneous multivariate EEG coherence analysis by means of adaptive high-dimensional autoregressive models. *Journal of Neuroscience Methods*, v. 105, n. 2, p. 143–158, 2001. ISSN 01650270.
- MORF, M.; VIEIRA, A.; KAILATH, T. Covariance characterization by partial autocorrelation matrices. *The Annals of Statistics*, v. 6, n. 3, p. 643–648, 1978. ISSN 0090-5364.
- MORF, M. et al. Recursive multichannel maximum entropy spectral estimation. *IEEE Transactions on Geoscience Electronics*, v. 16, n. 2, p. 85–94, 1978. ISSN 0018-9413.

- NIEDZWIECKI, M. On the localized estimators and generalized Akaike's criteria. *IEEE Transactions on Automatic Control*, v. 29, n. 11, p. 970–983, 1984. ISSN 15582523.
- NIEDZWIECKI, M. On tracking characteristics of weighted least squares estimators applied to nonstationary system identification. *IEEE Transactions on Automatic Control*, v. 33, n. 1, p. 96–98, 1988. ISSN 00189286.
- NIEDZWIECKI, M. *Identification of time-varying processes*. New Jersey, US: Wiley, 2000. ISBN 0471986291.
- NIEDZWIECKI, M.; GUO, L. Nonasymptotic results for finite-memory WLS filters. *IEEE Transactions on Automatic Control*, v. 36, n. 2, p. 198–206, 1991. ISSN 15582523.
- NUTTALL, A. H. *Multivariate linear predictive spectral analysis employing weighted forward and backward averaging: a generalization of Burg's algorithm*. New London, Connecticut, US, 1976.
- OMIDVARNIA, A. et al. Measuring time-varying information flow in scalp EEG signals: orthogonalized partial directed coherence. *IEEE Transactions on Biomedical Engineering*, v. 61, n. 3, p. 680–693, 2014. ISSN 00189294.
- PERCIVAL, D. B.; WALDEN, A. T. *Spectral analysis for physical applications*. Cambridge, US: Cambridge University Press, 1993. ISBN 0521435412.
- PETERSEN, K. B.; PEDERSEN, M. S. *The matrix cookbook*. [S.l.]: Technical University of Denmark, 2012. Version 20121115.
- PETTI, M. et al. Effect of inter-trials variability on the estimation of cortical connectivity by Partial Directed Coherence. In: *INTERNATIONAL CONFERENCE OF THE IEEE ENGINEERING IN MEDICINE AND BIOLOGY SOCIETY, EMBC'15, Conference...* Milan, Italy: IEEE, 2015. p. 3791–3794.
- PFURTSCHELLER, G. The use of an EEG AR model for the time-saving calculation of spectral power density distributions with a digital computer. p. 113–115, 1972.
- PFURTSCHELLER, G. et al. Mu rhythm (de)synchronization and EEG single-trial classification of different motor imagery tasks. *NeuroImage*, v. 31, n. 1, p. 153–159, 2006. ISSN 10538119.
- PFURTSCHELLER, G.; Lopes Da Silva, F. H. Event-related EEG/MEG synchronization and desynchronization: basic principles. *Clinical Neurophysiology*, v. 110, n. 11, p. 1842–1857, 1999. ISSN 13882457.
- PLOMP, G. et al. The physiological plausibility of time-varying Granger-causal modeling: normalization and weighting by spectral power. *NeuroImage*, v. 97, p. 206–216, 2014. ISSN 10959572.
- QUAIRIAUX, C. et al. Functional development of large-scale sensorimotor cortical networks in the brain. *The Journal of neuroscience: the official journal of the Society for Neuroscience*, v. 31, n. 26, p. 9574–9584, 2011. ISSN 0270-6474.
- ROACH, B. J.; MATHALON, D. H. Event-related EEG time-frequency analysis: an overview of measures and an analysis of early gamma band phase locking in schizophrenia. *Schizophrenia Bulletin*, v. 34, n. 5, p. 907–926, 2008. ISSN 05867614.

- RODRIGUES, J.; ANDRADE, A. Causal inference in neuronal time-series using adaptive decomposition. *Journal of Neuroscience Methods*, Elsevier B.V., v. 245, p. 73–90, 2015. ISSN 01650270.
- RODRIGUES, P. L. C.; BACCALÁ, L. A. A new algorithm for neural connectivity estimation of EEG event related potentials. In: *INTERNATIONAL CONFERENCE OF THE IEEE ENGINEERING IN MEDICINE AND BIOLOGY SOCIETY, EMBC'15, Conference...* Milan, Italy: IEEE, 2015. p. 3787–3790.
- RODRIGUES, P. L. C.; BACCALÁ, L. A. Statistically significant time-varying neural connectivity estimation using Generalized Partial Directed Coherence. In: *INTERNATIONAL CONFERENCE OF THE IEEE ENGINEERING IN MEDICINE AND BIOLOGY SOCIETY, EMBC'16, Conference...* Orlando, US: IEEE, 2016. (aguardando publicação).
- SAMESHIMA, K.; BACCALÁ, L. A. *Methods in brain connectivity inference through multivariate time series analysis*. Boca Raton, Florida, US: CRC Press, 2014. ISBN 1439845727.
- SATO, J. R. et al. Wavelet based time-varying vector autoregressive modelling. *Computational Statistics and Data Analysis*, v. 51, n. 12, p. 5847–5866, 2007. ISSN 01679473.
- SHELTER, B. *Handbook of time series analysis: recent theoretical developments and applications*. New Jersey, US: Wiley, 2006. ISBN 3527406239.
- SIEGEL, M.; BUSCHMAN, T. J.; MILLER, E. K. Cortical information flow during flexible sensorimotor decisions. *Science*, v. 348, n. 6241, p. 1352–55, 2015. ISSN 0036-8075.
- SILVA, F. H. Lopes da et al. Model of brain rhythmic activity: the alpha-rhythm of the thalamus. *Kybernetik*, v. 15, n. 1, p. 27–37, 1974. ISSN 03401200.
- SPORNS, O. *Networks of the brain*. Cambridge, US: The MIT Press, 2010. ISBN 0262014696.
- STOCKWELL, R. G.; MANSINHA, L.; LOWE, R. P. Localization of the complex spectrum: the S transform. *IEEE Transactions on Signal Processing*, v. 44, n. 4, p. 998–1001, 1996. ISSN 1053587X.
- STRAND, O. N. Multichannel complex maximum entropy (autoregressive) spectral analysis. *IEEE Transactions on Automatic Control*, v. 22, n. 4, p. 634–640, 1977.
- TAKAHASHI, D. Y.; BACCALÁ, L. A.; SAMESHIMA, K. Connectivity Inference between neural Structures via Partial Directed Coherence. *Journal of Applied Statistics*, v. 34, n. 10, p. 1259–1273, 2007. ISSN 0266-4763.
- TAKAHASHI, D. Y.; BACCALÁ, L. A.; SAMESHIMA, K. Information theoretic interpretation of frequency domain connectivity measures. *Biological Cybernetics*, v. 103, n. 6, p. 463–469, 2010. ISSN 03401200.
- TOLEDO, D. R. et al. Cortical correlates of response time slowing in older adults: ERP and ERD/ERS analyses during passive ankle movement. *Clinical Neurophysiology*, International Federation of Clinical Neurophysiology, v. 127, n. 1, p. 655–663, 2016. ISSN 18728952.

- TOPPI, J. et al. Time-varying effective connectivity of the cortical neuroelectric activity associated with behavioural microsleeps. *NeuroImage*, v. 124, p. 421–432, 2016. ISSN 10959572.
- TRUCCOLO, W. a. et al. Trial-to-trial variability of cortical evoked responses: implications for the analysis of functional connectivity. *Clinical Neurophysiology*, v. 113, n. 2, p. 206–226, 2002. ISSN 13882457.
- VALDÉS-SOSA, P. et al. Estimating brain functional connectivity with sparse multivariate autoregression. *Philosophical transactions of the Royal Society of London. Series B, Biological sciences*, v. 360, n. 1457, p. 969–981, 2005. ISSN 0962-8436.
- WACKER, M. et al. A time-variant processing approach for the analysis of alpha and gamma MEG oscillations during flicker stimulus generated entrainment. *IEEE Transactions on Biomedical Engineering*, v. 58, n. 11, p. 3069–3077, 2011. ISSN 00189294.
- WAELE, S. D.; BROERSEN, P. The Burg algorithm for segments. *IEEE Transactions on Signal Processing*, v. 48, n. 10, p. 2876–2880, 2000. ISSN 1053-587X.
- WIGGINS, R. A.; ROBINSON, E. A. Recursive solution to the multichannel filtering problem. *Journal of Geophysical Research*, v. 70, n. 8, p. 1885–1891, 1965. ISSN 2156-2202.
- WINTERHALDER, M. et al. Comparison of linear signal processing techniques to infer directed interactions in multivariate neural systems. *Signal Processing*, v. 85, n. 11, p. 2137–2160, 2005. ISSN 01651684.
- WRIGHT, J. J.; KYDD, R. R.; SERGEJEW, A. A. Autoregression models of EEG. *Biological Cybernetics*, v. 62, n. 3, p. 201–210, 1990. ISSN 0340-1200.

APÊNDICE A – ESTIMAR MODELOS MVAR

A.1 INTRODUÇÃO

Este apêndice apresenta as manipulações algébricas necessárias para compreender o algoritmo de Nuttall-Strand (STRAND, 1977) usado em estimações de modelos MVAR. A sequência de raciocínio é inspirada naquela feita por Marple em (MARPLE; NUTTALL, 1983), porém, vários passos omitidos no livro são explicitados e certas considerações do artigo (STRAND, 1977) são discutidas.

A.2 DEFINIÇÕES GERAIS

Conforme explicitado na Equação (3.2), as amostras de um processo estocástico de dimensão N_c , denotado por $\mathbf{x}(n)$, são geradas pela seguinte equação:

$$\mathbf{x}(n) = \sum_{k=1}^P \mathbf{A}(k)\mathbf{x}(n-k) + \mathbf{u}(n), \quad (\text{A.1})$$

em que as matrizes $\mathbf{A}(k)$ são de dimensões $N_c \times N_c$ e o processo $\mathbf{u}(n)$ é um sinal de ruído branco com matriz de covariância $\Sigma_{\mathbf{u}}$.

Nem todo processo estocástico encontrado na prática obedece à relação em (A.1). No entanto, é comum supormos que o modelo MVAR seja válido, de modo que possamos inferir certas propriedades em relação à estrutura de geração dos sinais do modelo aproximado de $\mathbf{x}(n)$. O erro de estimação desta aproximação é chamado de erro de predição *forward* e é definido por

$$\mathbf{e}_P^f(n) = \mathbf{x}(n) - \hat{\mathbf{x}}_P^f(n) = \mathbf{x}(n) - \sum_{k=1}^P \mathbf{A}(k)\mathbf{x}(n-k). \quad (\text{A.2})$$

Definindo a matriz em bloco que junta todas as matrizes $\mathbf{A}(\cdot)$ em uma só

$$\underline{\mathbf{a}}_p = \begin{bmatrix} \mathbf{I}_{N_c} & -\mathbf{A}(1) & \cdots & -\mathbf{A}(P) \end{bmatrix},$$

e um vetor em blocos que junta $P + 1$ amostras de $\mathbf{x}(\cdot)$,

$$\underline{\mathbf{x}}_P(n) = \begin{bmatrix} \mathbf{x}(n) \\ \mathbf{x}(n-1) \\ \vdots \\ \mathbf{x}(n-P) \end{bmatrix},$$

podemos escrever

$$\mathbf{e}_P^f(n) = \underline{\mathbf{a}}_P \underline{\mathbf{x}}_P(n). \quad (\text{A.3})$$

A.3 EQUAÇÕES DE YULE-WALKER DE MULTICANAL

No modelo AR univariado, a obtenção dos parâmetros $a(k)$ pode ser feita por meio da resolução de um sistema linear de equações, levando em consideração as diversas correlações entre cada instância do sinal. Este conjunto de equações é chamado de “Equações de Yule-Walker”. Faremos aqui uma generalização deste sistema de equações, chegando em um conjunto a que daremos o nome de “Equações de Yule-Walker de multicanal”.

Nosso objetivo é estimar as matrizes $\mathbf{A}(\cdot)$ do modelo (A.1) a partir dos valores do processo $\mathbf{x}(n)$. Para tanto, iremos extrair algumas relações úteis da definição do erro *forward*, da mesma forma que se faz na dedução das equações de Yule-Walker no caso univariado. Multiplicando a equação (A.3) à direita por $\underline{\mathbf{x}}_P^H(n)$ ¹ e aplicando o operador esperança, teremos

$$\mathbb{E}\left[\mathbf{e}_P^f(n)\underline{\mathbf{x}}_P^H(n)\right] = \mathbb{E}\left[\underline{\mathbf{a}}_P\underline{\mathbf{x}}_P(n) \cdot \underline{\mathbf{x}}_P^H(n)\right] = \underline{\mathbf{a}}_P \cdot \mathbb{E}\left[\underline{\mathbf{x}}_P(n)\underline{\mathbf{x}}_P^H(n)\right]$$

Define-se a matriz em blocos $\underline{\mathbf{R}}_P$, de dimensões $N_c(P+1) \times N_c(P+1)$, como sendo:

$$\underline{\mathbf{R}}_P = \mathbb{E}\left[\underline{\mathbf{x}}_P(n)\underline{\mathbf{x}}_P^H(n)\right] = \begin{bmatrix} \mathbf{R}_{xx}(0) & \mathbf{R}_{xx}(1) & \cdots & \mathbf{R}_{xx}(P) \\ \mathbf{R}_{xx}(-1) & \mathbf{R}_{xx}(0) & \cdots & \mathbf{R}_{xx}(P-1) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \mathbf{R}_{xx}(-P) & \mathbf{R}_{xx}(-P+1) & \cdots & \mathbf{R}_{xx}(0) \end{bmatrix}$$

É fácil notar que a matriz $\underline{\mathbf{R}}_P$ é bloco-Toeplitz, além de ser hermitiana, embora cada um dos seus blocos constituintes não o seja. Temos, então, que:

$$\mathbb{E}\left[\mathbf{e}_P^f(n)\underline{\mathbf{x}}_P^H(n)\right] = \underline{\mathbf{a}}_P \underline{\mathbf{R}}_P.$$

Por outro lado, podemos escrever a seguinte relação:

$$\begin{aligned} \mathbb{E}\left[\mathbf{e}_P^f(n)\underline{\mathbf{x}}_P^H(n)\right] &= \mathbb{E}\left[\mathbf{e}_P^f(n) \cdot \begin{bmatrix} \mathbf{x}^H(n) & \mathbf{x}^H(n-1) & \cdots & \mathbf{x}^H(n-P) \end{bmatrix}\right] \\ &= \mathbb{E}\left[\begin{bmatrix} \mathbf{e}_P^f(n)\mathbf{x}^H(n) & \cdots & \mathbf{e}_P^f(n)\mathbf{x}^H(n-P) \end{bmatrix}\right]. \end{aligned} \quad (\text{A.4})$$

Usando o fato de que o erro de predição *forward* em um instante n é sempre decorrelacionado dos valores das amostras nos instantes $n-1, \dots, n-P$ (princípio da ortogonalidade (BROCKWELL; DAVIS, 2009)), tem-se

$$\mathbb{E}\left[e_i^f(n)x_j^*(n-k)\right] = 0 \quad \text{para } k \geq 1 \text{ e } \forall i, j,$$

¹ \mathbf{x}^H é a versão tranposta e conjugada de \mathbf{x}

em que $e_i^f(n)$ é a coordenada i do vetor de erro de predição $\mathbf{e}_P^f(n)$ e $x_j^*(n-k)$ é a coordenada j do vetor de amostras $\mathbf{x}^H(n-k)$, vamos calcular cada uma das coordenadas do vetor de esperanças da equação (A.4). Começando pelos índices $k \geq 1$, temos:

$$\mathbb{E}\left[\mathbf{e}_P^f(n)\mathbf{x}^H(n-k)\right] = \begin{bmatrix} e_1^f(n)x_1^*(n-k) & \cdots & e_1^f(n)x_{N_c}^*(n-k) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ e_{N_c}^f(n)x_1^*(n-k) & \cdots & e_{N_c}^f(n)x_{N_c}^*(n-k) \end{bmatrix} = \mathbf{0}_{N_c}.$$

Já para $k = 0$, podemos usar a definição em (A.2) para escrever:

$$\begin{aligned} \mathbb{E}\left[\mathbf{e}_P^f(n)\mathbf{x}^H(n)\right] &= \mathbb{E}\left[\mathbf{e}_P^f(n)(\mathbf{e}_P^f(n) + \hat{\mathbf{x}}(n))^H\right] \\ &= \mathbb{E}\left[\mathbf{e}_P^f(n)\left(\mathbf{e}_P^f(n) + \sum_{l=1}^P \mathbf{A}(l)\mathbf{x}(n-l)\right)^H\right] \\ &= \mathbb{E}\left[\mathbf{e}_P^f(n)\left((\mathbf{e}_P^f(n))^H + \sum_{l=1}^P \mathbf{x}^H(n-l)\mathbf{A}^H(l)\right)\right] \\ &= \mathbb{E}\left[\mathbf{e}_P^f(n)(\mathbf{e}_P^f(n))^H\right]. \end{aligned}$$

Sendo assim, temos:

$$\begin{aligned} \mathbb{E}\left[\mathbf{e}_P^f(n)\underline{\mathbf{x}}_P^H(n)\right] &= \mathbb{E}\left[\begin{bmatrix} \mathbf{e}_P^f(n)(\mathbf{e}_P^f(n))^H & \mathbf{0}_{N_c} & \cdots & \mathbf{0}_{N_c} \end{bmatrix}\right] \\ &= \begin{bmatrix} \underline{\Sigma}_P^f & \mathbf{0}_{N_c} & \cdots & \mathbf{0}_{N_c} \end{bmatrix}, \end{aligned}$$

em que $\underline{\Sigma}_P^f$ é a matriz de covariância do erro de predição *forward*:

$$\underline{\Sigma}_P^f = \mathbb{E}\left[\mathbf{e}_P^f(n)(\mathbf{e}_P^f(n))^H\right] = \underline{\Sigma}_w.$$

Equacionando os dois resultados obtidos, temos um sistema linear de equações a que chamaremos de “equações de Yule-Walker (YW) multicanal”,

$$\underline{\mathbf{a}}_P \underline{\mathbf{R}}_P = \begin{bmatrix} \underline{\Sigma}_P^f & \mathbf{0}_{N_c} & \cdots & \mathbf{0}_{N_c} \end{bmatrix}, \quad (\text{A.5})$$

a partir do qual é possível obter cada um dos $\mathbf{A}(k)$. No entanto, a resolução deste sistema linear de equações é computacionalmente custosa, e gera coeficientes com um comportamento estatístico ruim em termos de viés e variância (MARPLE; NUTTALL, 1983). Veremos nas próximas seções outros algoritmos capazes de resolver o conjunto de equações em (A.5), mas de uma forma numericamente mais eficiente e usando estimadores com comportamentos estatísticos melhores.

A.4 ALGORITMO DE LEVINSON MULTIVARIADO

Embora as equações de YW multicanal sejam suficientes para obtermos os coeficientes $\mathbf{A}(k)$ e $\mathbf{B}(k)$, a resolução deste sistema de equações é computacionalmente custosa. Sendo assim, é importante que sejamos capazes de propor um algoritmo que seja mais eficiente do que simplesmente inverter a matriz $\underline{\mathbf{R}}_P$. No caso univariado, a forma encontrada para contornar a resolução direta do sistema de equações de Yule-Walker foi explorar o uso de um algoritmo recursivo em ordem, chamado de algoritmo de Levinson-Durbin. Esta será a mesma abordagem que faremos aqui, chegando em um algoritmo de Levinson multivariado, chamado de LWR (*Levinson-Wiggins-Robinson*) na literatura (WIGGINS; ROBINSON, 1965). Para tanto, precisamos começar definindo a estimação *backward* de um processo $\mathbf{x}(n)$.

A.4.1 Estimação backward

O motivo do nome *forward* para o erro de predição definido em (A.2) é que nele se faz uma estimação do valor do sinal $\mathbf{x}(n)$ usando valores passados, isto é, usando uma combinação linear de $\mathbf{x}(n-1)$, $\mathbf{x}(n-2)$, \dots , $\mathbf{x}(n-P)$. Tem-se, portanto, uma estimação que é “para frente”. Outro tipo de estimação possível seria uma estimação *backward*, em que se estima o valor de $\mathbf{x}(n)$ a partir de uma combinação linear dos valores de $\mathbf{x}(n+1)$, $\mathbf{x}(n+2)$, \dots , $\mathbf{x}(n+P)$. Neste caso, temos:

$$\hat{\mathbf{x}}_P^b(n) = \sum_{k=1}^P \mathbf{B}(k)\mathbf{x}(n+k). \quad (\text{A.6})$$

De forma análoga ao que fizemos para a estimação *forward*, pode-se definir um erro de predição *backward*:

$$\mathbf{e}_P^b(n) = \mathbf{x}(n) - \sum_{l=1}^P \mathbf{B}(l)\mathbf{x}(n+l). \quad (\text{A.7})$$

Definindo um vetor em blocos $\underline{\mathbf{b}}_P$ dado por

$$\underline{\mathbf{b}}_P = \begin{bmatrix} -\mathbf{B}_P(P) & \cdots & -\mathbf{B}_P(1) & \mathbf{I}_{N_c} \end{bmatrix}, \quad (\text{A.8})$$

teremos a seguinte relação:

$$\mathbf{e}_P^b(n) = \underline{\mathbf{b}}_P \mathbf{x}_P(n+P). \quad (\text{A.9})$$

Fazendo os mesmos tipos de manipulação do caso *forward*, mas lembrando-se que o erro de predição *backward* no instante n é decorrelacionado das amostras de $\mathbf{x}(n)$ nos instantes $(n+p)$, $(n+p-1)$, \dots , $(n+1)$, teremos a seguinte relação matricial:

$$\underline{\mathbf{b}}_P \underline{\mathbf{R}}_P = \begin{bmatrix} \mathbf{0}_{N_c} & \cdots & \mathbf{0}_{N_c} & \underline{\Sigma}_P^b \end{bmatrix}, \quad (\text{A.10})$$

em que a matriz $\underline{\Sigma}_P^b$ é a matriz de covariância do erro de predição *backward*, dada por

$$\underline{\Sigma}_P^b = \mathbb{E} \left[\mathbf{e}_P^b(n) (\mathbf{e}_P^b(n))^H \right].$$

É importante notar que, diferentemente do caso univariado (MARPLE, 1987), os coeficientes $\mathbf{A}_P(k)$ e $\mathbf{B}_P(k)$ não são trivialmente relacionados. Isto ocorre pois a matriz $\underline{\mathbf{R}}_P$ é apenas bloco hermitiana, não sendo completamente simétrica. Uma das consequências deste fato é que as matrizes de covariância do erro *forward* e do erro *backward* não são iguais. Isto é,

$$\Sigma_p^f \neq \Sigma_p^b$$

Juntando as equações (A.5) e (A.10) temos:

$$\begin{bmatrix} \underline{\mathbf{a}}_P \\ \underline{\mathbf{b}}_P \end{bmatrix} \underline{\mathbf{R}}_P = \begin{bmatrix} \Sigma_P^f & \mathbf{0}_{N_c} & \cdots & \mathbf{0}_{N_c} \\ \mathbf{0}_{N_c} & \cdots & \mathbf{0}_{N_c} & \Sigma_P^b \end{bmatrix}. \quad (\text{A.11})$$

A.4.2 Recursão em ordem

A estrutura toeplitz em blocos da matriz $\underline{\mathbf{R}}_P$ nos permite obter um algoritmo recursivo que calcula coeficientes de ordem $p+1$ a partir de informações obtidas no cálculo de coeficientes de ordem p . Deste modo, partindo de $p=0$, obtemos os coeficientes do modelo MVAR em ordens $1, 2, \dots, P$.

Para a recursão em ordem, procederemos da seguinte forma: analisaremos os elementos da equação (A.19) para o caso em que se tem um modelo MVAR de ordem $p+1$. A partir desta equação teremos uma relação recursiva que é função dos elementos obtidos no caso da estimação de um modelo de ordem p (note que na predição de ordem $p+1$ consideramos todos os coeficientes do modelo de ordem p como já conhecidos). Os coeficientes de ordem p são denotados por $\mathbf{A}_p(k)$ e $\mathbf{B}_p(k)$ e os de ordem $p+1$ por $\mathbf{A}_{p+1}(k)$ e $\mathbf{B}_{p+1}(k)$.

As equações de YW multicanal de ordem $p+1$ são dadas por:

$$\underline{\mathbf{a}}_{p+1} \underline{\mathbf{R}}_{p+1} = \begin{bmatrix} \Sigma_{p+1}^f & \mathbf{0}_{N_c} & \cdots & \mathbf{0}_{N_c} \end{bmatrix}, \quad (\text{A.12})$$

$$\underline{\mathbf{b}}_{p+1} \underline{\mathbf{R}}_{p+1} = \begin{bmatrix} \mathbf{0}_{N_c} & \cdots & \mathbf{0}_{N_c} & \Sigma_{p+1}^b \end{bmatrix}, \quad (\text{A.13})$$

em que a matriz $\underline{\mathbf{R}}_{p+1}$ é

$$\underline{\mathbf{R}}_{p+1} = \begin{bmatrix} \mathbf{R}_{xx}(0) & \mathbf{R}_{xx}(1) & \mathbf{R}_{xx}(2) & \cdots & \mathbf{R}_{xx}(p+1) \\ \mathbf{R}_{xx}(-1) & \mathbf{R}_{xx}(0) & \mathbf{R}_{xx}(1) & \cdots & \mathbf{R}_{xx}(P) \\ \mathbf{R}_{xx}(-2) & \mathbf{R}_{xx}(-1) & \mathbf{R}_{xx}(0) & \cdots & \mathbf{R}_{xx}(P-1) \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \mathbf{R}_{xx}(-(p+1)) & \mathbf{R}_{xx}(-P) & \mathbf{R}_{xx}(-P+1) & \cdots & \mathbf{R}_{xx}(0) \end{bmatrix}.$$

Note que podemos particioná-la de duas formas diferentes:

$$\begin{bmatrix} \mathbf{R}_{xx}(0) & \mathbf{R}_{xx}(1) & \mathbf{R}_{xx}(2) & \cdots & \mathbf{R}_{xx}(p+1) \\ \mathbf{R}_{xx}(-1) & \mathbf{R}_{xx}(0) & \mathbf{R}_{xx}(1) & \cdots & \mathbf{R}_{xx}(P) \\ \mathbf{R}_{xx}(-2) & \mathbf{R}_{xx}(-1) & \mathbf{R}_{xx}(0) & \cdots & \mathbf{R}_{xx}(P-1) \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \mathbf{R}_{xx}(-(p+1)) & \mathbf{R}_{xx}(-P) & \mathbf{R}_{xx}(-P+1) & \cdots & \mathbf{R}_{xx}(0) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{R}_{xx}(0) & \underline{\mathbf{r}}_{p+1} \\ \underline{\mathbf{r}}_{p+1}^H & \underline{\mathbf{R}}_p \end{bmatrix}, \quad (\text{A.14})$$

em que:

$$\underline{\mathbf{r}}_{p+1} = \begin{bmatrix} \mathbf{R}_{xx}(1) & \mathbf{R}_{xx}(2) & \cdots & \mathbf{R}_{xx}(p+1) \end{bmatrix}.$$

ou

$$\begin{bmatrix} \mathbf{R}_{xx}(0) & \mathbf{R}_{xx}(1) & \mathbf{R}_{xx}(2) & \cdots & \mathbf{R}_{xx}(p+1) \\ \mathbf{R}_{xx}(-1) & \mathbf{R}_{xx}(0) & \mathbf{R}_{xx}(1) & \cdots & \mathbf{R}_{xx}(P) \\ \mathbf{R}_{xx}(-2) & \mathbf{R}_{xx}(-1) & \mathbf{R}_{xx}(0) & \cdots & \mathbf{R}_{xx}(P-1) \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \mathbf{R}_{xx}(-(p+1)) & \mathbf{R}_{xx}(-P) & \mathbf{R}_{xx}(-P+1) & \cdots & \mathbf{R}_{xx}(0) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \underline{\mathbf{R}}_p & \underline{\mathbf{s}}_{p+1}^H \\ \underline{\mathbf{s}}_{p+1} & \mathbf{R}_{xx}(0) \end{bmatrix}, \quad (\text{A.15})$$

em que:

$$\underline{\mathbf{s}}_{p+1} = \begin{bmatrix} \mathbf{R}_{xx}(-(p+1)) & \mathbf{R}_{xx}(-P) & \cdots & \mathbf{R}_{xx}(-1) \end{bmatrix}.$$

Como não conhecemos os elementos dos vetores em blocos $\underline{\mathbf{a}}_{p+1}$ e $\underline{\mathbf{b}}_{p+1}$, faremos algumas manipulações algébricas para estudar a estrutura das equações. Multiplicando a matriz $\underline{\mathbf{R}}_{p+1}$ à esquerda por um vetor em blocos dado por $\underline{\mathbf{a}}_p$ concatenado a uma matriz nula à direita,

$$\begin{bmatrix} \underline{\mathbf{a}}_p & \mathbf{0}_{N_c} \end{bmatrix} \underline{\mathbf{R}}_{p+1} = \begin{bmatrix} \underline{\mathbf{a}}_p & \mathbf{0}_{N_c} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \underline{\mathbf{R}}_p & \underline{\mathbf{s}}_{p+1}^H \\ \underline{\mathbf{s}}_{p+1} & \mathbf{R}_{xx}(0) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \underline{\mathbf{a}}_p \underline{\mathbf{R}}_p & \underline{\mathbf{a}}_p \underline{\mathbf{s}}_{p+1}^H \end{bmatrix},$$

podemos usar (A.5) para escrever

$$\begin{bmatrix} \underline{\mathbf{a}}_p & \mathbf{0}_{N_c} \end{bmatrix} \underline{\mathbf{R}}_{p+1} = \begin{bmatrix} \underline{\Sigma}_p^f & \mathbf{0}_{N_c} & \cdots & \mathbf{0}_{N_c} & \underline{\mathbf{a}}_p \underline{\mathbf{s}}_{p+1}^H \end{bmatrix},$$

em que

$$\underline{\mathbf{a}}_p \underline{\mathbf{s}}_{p+1}^H = \mathbf{R}_{xx}(p+1) - \sum_{l=1}^p \mathbf{A}_p(l) \mathbf{R}_{xx}(p+1-l). \quad (\text{A.16})$$

Fazendo o mesmo procedimento, mas usando o vetor em blocos $\underline{\mathbf{b}}_p$ concatenado a uma matriz nula à esquerda,

$$\begin{bmatrix} \mathbf{0}_{N_c} & \underline{\mathbf{b}}_p \end{bmatrix} \underline{\mathbf{R}}_{p+1} = \begin{bmatrix} \mathbf{0}_{N_c} & \underline{\mathbf{b}}_p \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{R}_{xx}(0) & \underline{\mathbf{r}}_{p+1} \\ \underline{\mathbf{r}}_{p+1}^H & \underline{\mathbf{R}}_p \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \underline{\mathbf{b}}_p \underline{\mathbf{r}}_{p+1}^H & \underline{\mathbf{b}}_p \underline{\mathbf{R}}_p \end{bmatrix}.$$

Do resultado obtido em (A.10) teremos

$$\begin{bmatrix} \mathbf{0}_{N_c} & \underline{\mathbf{b}}_p \end{bmatrix} \underline{\mathbf{R}}_{p+1} = \begin{bmatrix} \underline{\mathbf{b}}_p \underline{\mathbf{r}}_{p+1}^H & \mathbf{0}_{N_c} & \cdots & \mathbf{0}_{N_c} & \underline{\Sigma}_p^b \end{bmatrix},$$

em que

$$\underline{\mathbf{b}}_p \underline{\mathbf{r}}_{p+1}^H = \mathbf{R}_{xx}[-p-1] - \sum_{l=1}^p \mathbf{B}_p(l) \mathbf{R}_{xx}[l-p-1].$$

Pois bem, temos agora as seguintes equações matriciais:

$$\begin{bmatrix} \underline{\mathbf{a}}_p & \mathbf{0}_{N_c} \end{bmatrix} \underline{\mathbf{R}}_{p+1} = \begin{bmatrix} \underline{\Sigma}_p^f & \mathbf{0}_{N_c} & \cdots & \mathbf{0}_{N_c} & \underline{\Delta}_{p+1} \end{bmatrix}, \quad (\text{A.17})$$

$$\begin{bmatrix} \mathbf{0}_{N_c} & \underline{\mathbf{b}}_p \end{bmatrix} \underline{\mathbf{R}}_{p+1} = \begin{bmatrix} \underline{\nabla}_{p+1} & \mathbf{0}_{N_c} & \cdots & \mathbf{0}_{N_c} & \underline{\Sigma}_p^b \end{bmatrix}, \quad (\text{A.18})$$

em que $\underline{\Delta}_{p+1}$ e $\underline{\nabla}_{p+1}$ são matrizes $N_c \times N_c$ que descrevem as relações de correlação cruzada entre erros *backward* e *forward*.

$$\underline{\Delta}_{p+1} = \underline{\mathbf{a}}_p \underline{\mathbf{s}}_{p+1}^H \quad \underline{\nabla}_{p+1} = \underline{\mathbf{b}}_p \underline{\mathbf{r}}_{p+1}^H.$$

Podemos mostrar duas propriedades importantes para as matrizes $\underline{\Delta}_{p+1}$ e $\underline{\nabla}_{p+1}$:

- Note que:

$$\begin{aligned} \begin{bmatrix} \underline{\mathbf{a}}_p & \mathbf{0}_{N_c} \end{bmatrix} \underline{\mathbf{R}}_{p+1} \begin{bmatrix} \underline{\mathbf{b}}_p & \mathbf{0}_{N_c} \end{bmatrix}^H &= \left(\begin{bmatrix} \underline{\mathbf{a}}_p & \mathbf{0}_{N_c} \end{bmatrix} \underline{\mathbf{R}}_{p+1} \right) \begin{bmatrix} \underline{\mathbf{b}}_p & \mathbf{0}_{N_c} \end{bmatrix}^H \\ &= \begin{bmatrix} \underline{\Sigma}_p^f & \mathbf{0}_{N_c} & \cdots & \mathbf{0}_{N_c} & \underline{\Delta}_{p+1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{0}_{N_c} \\ -\mathbf{B}_p^H(p) \\ \vdots \\ -\mathbf{B}_p^H(1) \\ \mathbf{I}_{N_c} \end{bmatrix} \\ &= \underline{\Delta}_{p+1}. \end{aligned}$$

Por outro lado, temos que:

$$\begin{aligned} \begin{bmatrix} \underline{\mathbf{a}}_p & \mathbf{0}_{N_c} \end{bmatrix} \underline{\mathbf{R}}_{p+1} \begin{bmatrix} \underline{\mathbf{b}}_p & \mathbf{0}_{N_c} \end{bmatrix}^H &= \begin{bmatrix} \underline{\mathbf{a}}_p & \mathbf{0}_{N_c} \end{bmatrix} \left(\begin{bmatrix} \underline{\mathbf{b}}_p & \mathbf{0}_{N_c} \end{bmatrix} \underline{\mathbf{R}}_{p+1}^H \right)^H \\ &= \begin{bmatrix} \underline{\mathbf{a}}_p & \mathbf{0}_{N_c} \end{bmatrix} \left(\begin{bmatrix} \underline{\mathbf{b}}_p & \mathbf{0}_{N_c} \end{bmatrix} \underline{\mathbf{R}}_{p+1} \right)^H \\ &= \begin{bmatrix} \underline{\mathbf{a}}_p & \mathbf{0}_{N_c} \end{bmatrix} \left(\begin{bmatrix} \underline{\nabla}_{p+1} & \mathbf{0}_{N_c} & \cdots & \mathbf{0}_{N_c} & \underline{\Sigma}_p^b \end{bmatrix} \right)^H \\ &= \begin{bmatrix} \mathbf{I}_{N_c} & -\mathbf{A}_p(1) & \cdots & -\mathbf{A}_p(p) & \mathbf{0}_{N_c} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \underline{\nabla}_{p+1}^H \\ \mathbf{0}_{N_c} \\ \vdots \\ \mathbf{0}_{N_c} \\ (\underline{\Sigma}_p^b)^H \end{bmatrix} \\ &= \underline{\nabla}_{p+1}^H. \end{aligned}$$

Ou seja, as matrizes são conjugadas transpostas uma da outra,

$$\Delta_{p+1} = \nabla_{p+1}^H.$$

- Temos que:

$$\begin{aligned} \mathbb{E} \left[\mathbf{e}_p^f(n) (\mathbf{e}_p^b(n - (p + 1)))^H \right] &= \mathbb{E} \left[\mathbf{e}_p^f(n) \left(\mathbf{x}(n - p - 1) - \sum_{l=1}^p \mathbf{B}_p(l) \mathbf{x}(n - p - 1 + l) \right)^H \right] \\ &= \mathbb{E} \left[\mathbf{e}_p^f(n) \left(\mathbf{x}^H(n - p - 1) - \sum_{l=1}^p \mathbf{x}^H(n - p - 1 + l) \mathbf{B}_p^H(l) \right) \right] \end{aligned}$$

Lembrando que o erro de predição *forward* no instante n é decorrelacionado das amostras em instantes $n - 1, n - 2, \dots, n - p$, podemos escrever:

$$\begin{aligned} \mathbb{E} \left[\mathbf{e}_p^f(n) (\mathbf{e}_p^b(n - (p + 1)))^H \right] &= \mathbb{E} \left[\mathbf{e}_p^f(n) \left(\mathbf{x}^H(n - p - 1) - \sum_{l=1}^p \mathbf{x}^H(n - p - 1 + l) \mathbf{B}_p^H(k) \right) \right] \\ &= \mathbb{E} \left[\mathbf{e}_p^f(n) \mathbf{x}^H(n - p - 1) \right] \\ &= \mathbb{E} \left[\left(\mathbf{x}(n) - \sum_{l=1}^p \mathbf{A}(l) \mathbf{x}(n - l) \right) \mathbf{x}^H(n - p - 1) \right]. \end{aligned}$$

Conclue-se, então, que

$$\begin{aligned} \mathbb{E} \left[\mathbf{e}_p^f(n) (\mathbf{e}_p^b(n - (p + 1)))^H \right] &= \mathbf{R}_{xx}(p + 1) - \sum_{l=1}^p \mathbf{A}_p(l) \mathbf{R}_{xx}(p + 1 - l) \\ &= \Delta_{p+1}, \end{aligned}$$

em que a última passagem foi feita usando a relação obtida em (A.16). Temos, então, que

$$\Delta_{p+1} = \mathbb{E} \left[\mathbf{e}_p^f(n) (\mathbf{e}_p^b(n - (p + 1)))^H \right] = \Sigma_p^{fb}.$$

- Diferentemente do caso univariado, em que tínhamos apenas uma grandeza para descrever as correlações entre erro *forward* e *backward*, no caso multivariado temos duas matrizes, relacionadas por meio de uma operação de transposta conjugada.

Vale lembrar que a simetria hermitiana e a estrutura toeplitz da matriz de autocorrelação do modelo AR univariado garantiam que os coeficientes *forward* e *backward* do modelo escalar fossem trivialmente relacionados, sendo conjugados complexos um do outro. No caso multivariado, a matriz $\underline{\mathbf{R}}_p$ é hermitiana mas toeplitz em blocos, o que impede que as matrizes $\mathbf{A}_p(k)$ e $\mathbf{B}_p(k)$ sejam relacionadas de forma simples.

A.4.3 Recursão dos coeficientes do modelo MVAR

Comparando as equações (A.17) e (A.18) com as equações (A.12) e (A.13), é fácil notar que podemos realizar algumas manipulações algébricas para chegarmos em relações úteis.

Multiplicar a equação (A.18) à esquerda pela matriz $-\Delta_{p+1}(\Sigma_p^b)^{-1}$ e somá-la com a equação (A.17) nos dá:

$$\begin{aligned} \begin{bmatrix} \underline{\mathbf{a}}_p & \mathbf{0}_{N_c} \end{bmatrix} \underline{\mathbf{R}}_{p+1} &= \begin{bmatrix} \Sigma_p^f & \mathbf{0}_{N_c} & \cdots & \mathbf{0}_{N_c} & \Delta_{p+1} \end{bmatrix} \\ -\Delta_{p+1}(\Sigma_p^b)^{-1} \begin{bmatrix} \mathbf{0}_{N_c} & \underline{\mathbf{b}}_p \end{bmatrix} \underline{\mathbf{R}}_{p+1} &= -\Delta_{p+1}(\Sigma_p^b)^{-1} \begin{bmatrix} \nabla_{p+1} & \mathbf{0}_{N_c} & \cdots & \mathbf{0}_{N_c} & \Sigma_p^b \end{bmatrix} \\ \left(\begin{bmatrix} \underline{\mathbf{a}}_p & \mathbf{0}_{N_c} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \mathbf{0}_{N_c} & -\Delta_{p+1}(\Sigma_p^b)^{-1} \underline{\mathbf{b}}_p \end{bmatrix} \right) \underline{\mathbf{R}}_{p+1} &= \begin{bmatrix} \left(\Sigma_p^f - \Delta_{p+1}(\Sigma_p^b)^{-1} \nabla_{p+1} \right) & \mathbf{0}_{N_c} & \cdots & \mathbf{0}_{N_c} \end{bmatrix}. \end{aligned}$$

Comparando com a equação de YW multicanal de ordem $p+1$

$$\underline{\mathbf{a}}_{p+1} \underline{\mathbf{R}}_{p+1} = \begin{bmatrix} \Sigma_{p+1}^f & \mathbf{0}_{N_c} & \cdots & \mathbf{0}_{N_c} \end{bmatrix},$$

vemos que temos

$$\begin{aligned} \underline{\mathbf{a}}_{p+1} &= \begin{bmatrix} \underline{\mathbf{a}}_p & \mathbf{0}_{N_c} \end{bmatrix} + \left(-\Delta_{p+1}(\Sigma_p^b)^{-1} \right) \begin{bmatrix} \mathbf{0}_{N_c} & \underline{\mathbf{b}}_p \end{bmatrix}, \\ \Sigma_{p+1}^f &= \Sigma_p^f + \left(-\Delta_{p+1}(\Sigma_p^b)^{-1} \right) \nabla_{p+1}. \end{aligned}$$

De maneira completamente análoga, pode-se mostrar a seguinte relação para o vetor em blocos dos coeficientes de predição *backward*:

$$\begin{aligned} \underline{\mathbf{b}}_{p+1} &= \begin{bmatrix} \mathbf{0}_{N_c} & \underline{\mathbf{b}}_p \end{bmatrix} + \left(-\nabla_{p+1}(\Sigma_p^f)^{-1} \right) \begin{bmatrix} \underline{\mathbf{a}}_p & \mathbf{0}_{N_c} \end{bmatrix}, \\ \Sigma_{p+1}^b &= \Sigma_p^b + \left(-\nabla_{p+1}(\Sigma_p^f)^{-1} \right) \Delta_{p+1}. \end{aligned}$$

Os vetores em blocos $\underline{\mathbf{a}}_{p+1}$ e $\underline{\mathbf{b}}_{p+1}$ são compostos pelos coeficientes dos modelos de ordem $p+1$

$$\begin{aligned} \underline{\mathbf{a}}_{p+1} &= \begin{bmatrix} \mathbf{I}_{N_c} & -\mathbf{A}_{p+1}(1) & \cdots & -\mathbf{A}_{p+1}(p+1) \end{bmatrix}, \\ \underline{\mathbf{b}}_{p+1} &= \begin{bmatrix} -\mathbf{B}_{p+1}(p+1) & \cdots & -\mathbf{B}_{p+1}(1) & \mathbf{I}_{N_c} \end{bmatrix}. \end{aligned}$$

Deste modo, é fácil ver que temos a seguinte relação de recursão para os coeficientes $\mathbf{A}_{p+1}(k)$ e $\mathbf{B}_{p+1}(k)$:

$$\begin{aligned} \mathbf{A}_{p+1}(p+1) &= \Delta_{p+1}(\Sigma_p^b)^{-1}, \\ \mathbf{A}_{p+1}(k) &= \mathbf{A}_p(k) - \mathbf{A}_{p+1}(p+1)\mathbf{B}_p(p+1-k) \quad \text{para } 1 \leq k \leq p. \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\mathbf{B}_{p+1}(p+1) &= \nabla_{p+1}(\boldsymbol{\Sigma}_p^f)^{-1}, \\ \mathbf{B}_{p+1}(k) &= \mathbf{B}_p(k) - \mathbf{B}_{p+1}(p+1)\mathbf{A}_p(p+1-k) \quad \text{para } 1 \leq k \leq p.\end{aligned}$$

Ademais, as matrizes de covariância dos erros de predição *forward* e *backward* na ordem $p+1$ são dadas por

$$\begin{aligned}\boldsymbol{\Sigma}_{p+1}^f &= \boldsymbol{\Sigma}_p^f - \mathbf{A}_{p+1}(p+1)\nabla_{p+1}, \\ \boldsymbol{\Sigma}_{p+1}^b &= \boldsymbol{\Sigma}_p^b - \mathbf{B}_{p+1}(p+1)\boldsymbol{\Delta}_{p+1},\end{aligned}$$

e os erros de predição *forward* e *backward* são atualizados segundo:

$$\begin{aligned}\mathbf{e}_{p+1}^f(n) &= \mathbf{e}_p^f(n) - \mathbf{A}_{p+1}(p+1)\mathbf{e}_p^b(n-(p+1)), \\ \mathbf{e}_{p+1}^b(n) &= \mathbf{e}_p^b(n) - \mathbf{B}_{p+1}(p+1)\mathbf{e}_p^f(n+(p+1)).\end{aligned}$$

A.4.4 Coeficientes de reflexão

No caso univariado do modelo AR, é comum chamarmos os coeficientes $a_1(1), \dots, a_p(P)$ de coeficientes de reflexão. Devido às simetrias das matrizes do caso escalar, é suficiente definirmos um só coeficiente de reflexão para cada ordem do modelo, uma vez que temos uma relação bastante simples entre os coeficientes de predição *forward* e *backward*

$$a_p(k) = \left(b_p(k)\right)^*.$$

Já no caso multivariado, os coeficientes de predição $\mathbf{A}_p(\cdot)$ e $\mathbf{B}_p(\cdot)$ não são tão trivialmente relacionados, o que nos obriga a definir dois coeficientes de reflexão diferentes, um do tipo *forward* e outro do tipo *backward*

$$\begin{aligned}\mathbf{A}_{p+1}(p+1) &= \boldsymbol{\Delta}_{p+1}(\boldsymbol{\Sigma}_p^b)^{-1}, \\ \mathbf{B}_{p+1}(p+1) &= \nabla_{p+1}(\boldsymbol{\Sigma}_p^f)^{-1}.\end{aligned}$$

A.4.5 Algoritmo de Levinson multivariado

A partir das equações obtidas no desenvolvimento feito até aqui, podemos escrever o algoritmo recursivo de obtenção dos coeficientes $\mathbf{A}_p(\cdot)$ da seguinte forma:

1. Usando o vetor de amostras $\mathbf{x}(n)$, calcular a matriz $\mathbf{R}_{xx}(0)$. Temos, então,

$$\boldsymbol{\Sigma}_0^f = \boldsymbol{\Sigma}_0^b = \mathbf{R}_{xx}(0) = \mathbb{E}[\mathbf{x}(n)\mathbf{x}^H(n)].$$

2. Calcular as matrizes ∇_1 e $\boldsymbol{\Delta}_1$, usando

$$\boldsymbol{\Delta}_1 = \mathbb{E} \left[\mathbf{e}_0^f(n) \left(\mathbf{e}_0^b(n-1) \right)^H \right] = \nabla_1^H,$$

Mas sabemos que os erros de predição são dados por

$$\begin{aligned} \mathbf{e}_0^f(n) &= \underline{\mathbf{x}}(n), \\ \mathbf{e}_0^b(n-1) &= \underline{\mathbf{x}}(n-1), \end{aligned}$$

portanto, teremos

$$\Delta_1 = \mathbb{E} \left[\underline{\mathbf{x}}(n) \underline{\mathbf{x}}^H(n-1) \right] = \nabla_1^H.$$

3. Calcular os coeficientes $\mathbf{A}_1(1)$ e $\mathbf{B}_1(1)$:

$$\begin{aligned} \mathbf{A}_1(1) &= \Delta_1 \left(\mathbf{R}_{xx}(0) \right)^{-1}, \\ \mathbf{B}_1(1) &= \nabla_1 \left(\mathbf{R}_{xx}(0) \right)^{-1}. \end{aligned}$$

4. Calcular as matrizes Σ_1^f e Σ_1^b e os erros $\mathbf{e}_1^f(n)$ e $\mathbf{e}_1^b(n-1)$:

$$\begin{aligned} \Sigma_1^f &= \Sigma_0^f - \mathbf{A}_1(1) \nabla_1, \\ \Sigma_1^b &= \Sigma_0^b - \mathbf{B}_1(1) \Delta_1. \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \mathbf{e}_1^f(n) &= \mathbf{e}_0^f(n) - \mathbf{A}_1(1) \mathbf{e}_0^b(n-1), \\ \mathbf{e}_1^b(n) &= \mathbf{e}_0^b(n) - \mathbf{B}_1(1) \mathbf{e}_0^f(n+1). \end{aligned}$$

5. Para $p > 0$, queremos calcular os coeficientes do modelo MVAR. Para isso, deve-se primeiro calcular as matrizes Δ_{p+1} e ∇_{p+1} a partir dos vetores de erros de ordem p ,

$$\Delta_{p+1} = \mathbb{E} \left[\mathbf{e}_p^f(n) (\mathbf{e}_p^b(n - (p+1)))^H \right] = \nabla_{p+1}^H.$$

Em seguida, deve-se calcular as matrizes de coeficientes de reflexão $\mathbf{A}_{p+1}(p+1)$ e $\mathbf{B}_{p+1}(p+1)$, usando as matrizes Σ_p^b e Σ_p^f , obtidas no passo anterior do algoritmo:

$$\begin{aligned} \mathbf{A}_{p+1}(p+1) &= \Delta_{p+1} \left(\Sigma_p^b \right)^{-1}, \\ \mathbf{B}_{p+1}(p+1) &= \nabla_{p+1} \left(\Sigma_p^f \right)^{-1}. \end{aligned}$$

e calcula-se os coeficientes $\mathbf{A}_{p+1}(\cdot)$ e $\mathbf{B}_{p+1}(\cdot)$ por meio das equações de atualização:

$$\begin{aligned} \mathbf{A}_{p+1}(k) &= \mathbf{A}_p(k) - \mathbf{A}_{p+1}(p+1) \mathbf{B}_p(p+1-k) \quad \text{para } 1 \leq k \leq p, \\ \mathbf{B}_{p+1}(k) &= \mathbf{B}_p(k) - \mathbf{B}_{p+1}(p+1) \mathbf{A}_p(p+1-k) \quad \text{para } 1 \leq k \leq p. \end{aligned}$$

Por fim, deve-se atualizar os vetores de erros e as matrizes Σ_{p+1}^f e Σ_{p+1}^b , usando as seguintes recursões:

$$\begin{aligned} \Sigma_{p+1}^f &= \Sigma_p^f - \mathbf{A}_{p+1}(p+1) \nabla_{p+1}, \\ \Sigma_{p+1}^b &= \Sigma_p^b - \mathbf{B}_{p+1}(p+1) \Delta_{p+1}. \\ \mathbf{e}_{p+1}^f(n) &= \mathbf{e}_p^f(n) - \mathbf{A}_{p+1}(p+1) \mathbf{e}_p^b(n - (p+1)), \\ \mathbf{e}_{p+1}^b(n) &= \mathbf{e}_p^b(n) - \mathbf{B}_{p+1}(p+1) \mathbf{e}_p^f(n + (p+1)). \end{aligned}$$

A.4.6 Vantagens do algoritmo LWR

Como mencionado anteriormente, o desenvolvimento do algoritmo LWR se deu por conta da necessidade de se propor uma forma computacionalmente mais eficiente de se obter os coeficientes $\mathbf{A}(k)$ e $\mathbf{B}(k)$. Ora, as equações de Yule-Walker multicanal são

$$\begin{bmatrix} \underline{\mathbf{a}}_P \\ \underline{\mathbf{b}}_P \end{bmatrix} \underline{\mathbf{R}}_P = \begin{bmatrix} \underline{\Sigma}_P^f & \mathbf{0}_{N_c} & \cdots & \mathbf{0}_{N_c} \\ \mathbf{0}_{N_c} & \cdots & \mathbf{0}_{N_c} & \underline{\Sigma}_P^b \end{bmatrix}. \quad (\text{A.19})$$

A resolução direta deste sistema de equações envolveria a inversão da matriz $\underline{\mathbf{R}}_P$, que tem dimensões $N_c(P+1) \times N_c(P+1)$. Sendo assim, é fácil ver que este método envolveria uma complexidade $\mathcal{O}(P^3)$, seja pela inversão direta de $\underline{\mathbf{R}}_P$, seja pelo método de eliminação de Gauss. Já no caso do algoritmo recursivo de *Levinson-Wiggins-Robinson*, os coeficientes $\mathbf{A}(k)$ e $\mathbf{B}(k)$ são obtidos após $P+1$ recursões, durante as quais os coeficientes $\mathbf{A}_p(k)$ e $\mathbf{B}_p(k)$ são calculados para $p = 0, 1, \dots, P$. Em cada uma dessas recursões, a complexidade das operações envolvidas é sempre linear em P , de modo que temos uma complexidade $\mathcal{O}(P^2)$ para o algoritmo final.

A.5 O ALGORITMO DE NUTTALL-STRAND

Duas opções foram apresentadas nas seções anteriores para estimar um modelo MVAR: resolver diretamente as equações de YW multicanal ou usar o algoritmo LWR via recursão em ordem. Porém, tal como no caso univariado, é possível propor um terceiro método, baseado no conceito de maximização de entropia de Burg (BURG, 1975), a que chamamos de algoritmo de Nuttall-Strand (STRAND, 1977). Neste algoritmo, as matrizes $\underline{\Delta}_p$ e $\underline{\nabla}_p$ são diretamente estimadas a partir dos dados, sendo então usadas nas recursões LWR para gerar os coeficientes $\mathbf{A}_p(k)$ e $\mathbf{B}_p(k)$.

Para obter $\hat{\underline{\Delta}}_p$, uma estimativa da matriz $\underline{\Delta}_p$, deve-se minimizar a seguinte soma ponderada de energias:

$$\mathcal{E}_0(\hat{\underline{\Delta}}_p) = \mathbb{E} \left[\left(\mathbf{e}_p^f(n) \right)^H \mathbf{Q}_1^{-1} \mathbf{e}_p^f(n) + \left(\mathbf{e}_p^b(n) \right)^H \mathbf{Q}_2^{-1} \mathbf{e}_p^b(n) \right],$$

em que as matrizes \mathbf{Q}_1 e \mathbf{Q}_2 são positivas definidas. Note que este funcional nada mais é do que a soma das energia do erro *forward* e *backward*.

Quando se tem um conjunto de N amostras de $\mathbf{x}(n)$, pode-se escrever:

$$\begin{aligned} \mathbf{e}_p^f(n) &= \mathbf{x}(n) - \sum_{l=1}^p \mathbf{A}_p(l) \mathbf{x}(n-l) \\ &= \underline{\mathbf{a}}_p \mathbf{x}_p(n) \quad (\text{definido para } n = p+1, \dots, N), \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \mathbf{e}_p^b(n) &= \mathbf{x}(n) - \sum_{l=1}^p \mathbf{B}_p(l) \mathbf{x}(n+l) \\ &= \underline{\mathbf{b}}_p \mathbf{x}_p(n+p) \quad (\text{definido para } n = 1, \dots, N-p). \end{aligned}$$

Deste modo, o problema de minimização a ser resolvido tem como função objetivo:

$$\mathcal{E}(\hat{\Delta}_p) = \frac{1}{N-p} \sum_{n=p+1}^N \left(\mathbf{e}_p^f(n) \right)^H \mathbf{Q}_1^{-1} \mathbf{e}_p^f(n) + \frac{1}{N-p} \sum_{n=1}^{N-p} \left(\mathbf{e}_p^b(n) \right)^H \mathbf{Q}_2^{-1} \mathbf{e}_p^b(n).$$

Usando o fato de que

$$\mathbf{x}^H \mathbf{A} \mathbf{x} = \text{tr}(\mathbf{A} \mathbf{x} \mathbf{x}^H),$$

e a definição dos estimadores

$$\begin{aligned} \hat{\Sigma}_p^f &= \frac{1}{N-p} \sum_{n=p+1}^N \mathbf{e}_p^f(n) (\mathbf{e}_p^f(n))^H, \\ \hat{\Sigma}_p^b &= \frac{1}{N-p} \sum_{n=1}^{N-p} \mathbf{e}_p^b(n) (\mathbf{e}_p^b(n))^H, \\ \hat{\Sigma}_p^{fb} &= \frac{1}{N-p-1} \sum_{n=p+2}^N \mathbf{e}_p^f(n) \left(\mathbf{e}_p^b(n-(p+1)) \right)^H, \end{aligned}$$

podemos reescrever \mathcal{E} em uma forma mais compacta

$$\mathcal{E}(\hat{\Delta}_p) = \text{tr} \left(\mathbf{Q}_1^{-1} \hat{\Sigma}_p^f + \mathbf{Q}_2^{-1} \hat{\Sigma}_p^b \right),$$

e é exatamente esta função que será minimizada para determinarmos a matriz $\hat{\Delta}_p$.

Antes de continuar, deve-se decidir quais matrizes \mathbf{Q}_1 e \mathbf{Q}_2 utilizar. Em (NUTTALL, 1976), Nuttall faz uma extensa análise usando diferentes matrizes de ponderação, chegando à conclusão de que a ponderação que traz os melhores resultados, e que provê uma generalização consistente do algoritmo de Burg para o caso multivariado, é a que usa

$$\mathbf{Q}_1 = \Sigma_{p-1}^f \quad \mathbf{Q}_2 = \Sigma_{p-1}^b.$$

Note que as matrizes Σ_{p-1}^f e Σ_{p-1}^b não têm o simbolo de estimador (um chapéu) pois estando no passo p da recursão, considera-se que as grandezas relativas à ordem $p-1$ são conhecidas, embora na prática elas também tenham sido estimadas a partir dos dados no passo anterior do algoritmo.

Temos, portanto, o seguinte problema de minimização: Determinar $\hat{\Delta}_p$ de modo a minimizar

$$\mathcal{E}(\hat{\Delta}_p) = \text{tr} \left(\left(\Sigma_{p-1}^f \right)^{-1} \hat{\Sigma}_p^f + \left(\Sigma_{p-1}^b \right)^{-1} \hat{\Sigma}_p^b \right). \quad (\text{A.20})$$

Resolver este problema de minimização envolve bastante trabalho algébrico, e é isso que faremos nas próximas sub-seções.

A.5.1 Minimizando a função $\mathcal{E}(\cdot)$

Começaremos deixando explícito o papel de $\hat{\Delta}_p$ na definição da função a ser minimizada. Fazendo as contas por partes, tem-se que para as parcelas relativas à estimação *forward*:

$$\mathbf{e}_p^f(n) = \mathbf{e}_{p-1}^f(n) - \Delta_p \left(\Sigma_{p-1}^b \right)^{-1} \mathbf{e}_{p-1}^b(n-p),$$

e, portanto,

$$\hat{\Sigma}_p^f = \frac{1}{N-p} \sum_{n=p+1}^N \left(\mathbf{e}_{p-1}^f(n) - \hat{\Delta}_p \left(\Sigma_{p-1}^b \right)^{-1} \mathbf{e}_{p-1}^b(n-p) \right) \left(\left(\mathbf{e}_{p-1}^f(n) \right)^H - \left(\mathbf{e}_{p-1}^b(n-p) \right)^H \left(\Sigma_{p-1}^b \right)^{-1} \hat{\Delta}_p^H \right).$$

Manipulando a equação,

$$\begin{aligned} (N-p) \hat{\Sigma}_p^f &= \sum_{n=p+1}^N \mathbf{e}_{p-1}^f(n) \left(\mathbf{e}_{p-1}^f(n) \right)^H - \sum_{n=p+1}^N \mathbf{e}_{p-1}^f(n) \left(\mathbf{e}_{p-1}^b(n-p) \right)^H \left(\Sigma_{p-1}^b \right)^{-1} \hat{\Delta}_p^H + \dots \\ &\quad \dots - \sum_{n=p+1}^N \hat{\Delta}_p \left(\Sigma_{p-1}^b \right)^{-1} \mathbf{e}_{p-1}^b(n-p) \left(\mathbf{e}_{p-1}^f(n) \right)^H + \dots \\ &\quad \dots + \sum_{n=p+1}^N \hat{\Delta}_p \left(\Sigma_{p-1}^b \right)^{-1} \mathbf{e}_{p-1}^b(n-p) \left(\mathbf{e}_{p-1}^b(n-p) \right)^H \left(\Sigma_{p-1}^b \right)^{-1} \hat{\Delta}_p^H \\ &= \left(\frac{N-p}{N-p+1} \right) \hat{\Sigma}_p^f = \left(\hat{\Sigma}_{p-1}^f - \frac{\mathbf{e}_{p-1}^f(p) \left(\mathbf{e}_{p-1}^f(p) \right)^H}{(N-p+1)} \right) + \dots \\ &\quad \dots - \left(\frac{N-p}{N-p+1} \right) \hat{\Sigma}_{p-1}^{fb} \left(\Sigma_{p-1}^b \right)^{-1} \hat{\Delta}_p^H - \left(\frac{N-p}{N-p+1} \right) \hat{\Delta}_p \left(\Sigma_{p-1}^b \right)^{-1} \left(\hat{\Sigma}_{p-1}^{fb} \right)^H + \dots \\ &\quad \dots + \hat{\Delta}_p \left(\Sigma_{p-1}^b \right)^{-1} \left(\hat{\Sigma}_{p-1}^b - \frac{\mathbf{e}_{p-1}^b(N-p+1) \left(\mathbf{e}_{p-1}^b(N-p+1) \right)^H}{(N-p+1)} \right) \left(\Sigma_{p-1}^b \right)^{-1} \hat{\Delta}_p^H. \end{aligned}$$

Para N suficientemente grande, podemos considerar que:

$$\left(\frac{N-p}{N-p+1} \right) \simeq 1.$$

Além disso, pode-se desprezar os efeitos de certas parcelas presentes nas equações acima:

$$\hat{\Sigma}_{p-1}^f - \frac{\mathbf{e}_{p-1}^f(p) \left(\mathbf{e}_{p-1}^f(p) \right)^H}{(N-p+1)} \simeq \hat{\Sigma}_{p-1}^f,$$

$$\hat{\Sigma}_{p-1}^b - \frac{\mathbf{e}_{p-1}^b(N-p+1) \left(\mathbf{e}_{p-1}^b(N-p+1) \right)^H}{(N-p+1)} \simeq \hat{\Sigma}_{p-1}^b.$$

Deste modo, chegamos na seguinte relação:

$$\hat{\Sigma}_p^f = \hat{\Sigma}_{p-1}^f - \hat{\Sigma}_{p-1}^{fb} \left(\Sigma_{p-1}^b \right)^{-1} \hat{\Delta}_p^H - \hat{\Delta}_p \left(\Sigma_{p-1}^b \right)^{-1} \left(\hat{\Sigma}_{p-1}^{fb} \right)^H + \hat{\Delta}_p \left(\Sigma_{p-1}^b \right)^{-1} \hat{\Sigma}_{p-1}^b \left(\Sigma_{p-1}^b \right)^{-1} \hat{\Delta}_p^H.$$

Realizando o mesmo procedimento para o lado *backward*, tem-se:

$$\mathbf{e}_p^b(n) = \mathbf{e}_{p-1}^b(n) - \Delta_p^H \left(\Sigma_{p-1}^f \right)^{-1} \mathbf{e}_{p-1}^f(n+p),$$

e

$$\hat{\Sigma}_p^b = \frac{1}{N-p} \sum_{n=1}^{N-p} \left(\mathbf{e}_{p-1}^b(n) - \Delta_p^H \left(\Sigma_{p-1}^f \right)^{-1} \mathbf{e}_{p-1}^f(n+p) \right) \left(\left(\mathbf{e}_{p-1}^b(n) \right)^H - \left(\mathbf{e}_{p-1}^b(n+p) \right)^H \left(\Sigma_{p-1}^f \right)^{-1} \Delta_p \right).$$

Manipulando a equação,

$$\begin{aligned} (N-p) \hat{\Sigma}_p^b &= \sum_{n=1}^{N-p} \mathbf{e}_{p-1}^b(n) \left(\mathbf{e}_{p-1}^b(n) \right)^H - \sum_{n=1}^{N-p} \mathbf{e}_{p-1}^b(n) \left(\mathbf{e}_{p-1}^f(n+p) \right)^H \left(\Sigma_{p-1}^f \right)^{-1} \Delta_p + \dots \\ &\quad \dots - \sum_{n=1}^{N-p} \Delta_p^H \left(\Sigma_{p-1}^f \right)^{-1} \mathbf{e}_{p-1}^f(n+p) \left(\mathbf{e}_{p-1}^b(n) \right)^H + \dots \\ &\quad \dots + \sum_{n=1}^{N-p} \Delta_p^H \left(\Sigma_{p-1}^f \right)^{-1} \mathbf{e}_{p-1}^f(n+p) \left(\mathbf{e}_{p-1}^f(n+p) \right)^H \left(\Sigma_{p-1}^f \right)^{-1} \Delta_p \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{(N-p)}{(N-p+1)} \hat{\Sigma}_p^b &= \left(\hat{\Sigma}_{p-1}^b - \frac{\mathbf{e}_{p-1}^b(N-p+1) \left(\mathbf{e}_{p-1}^b(N-p+1) \right)^H}{N-p+1} \right) + \dots \\ &- \left(\frac{N-p}{N-p+1} \right) \Delta_p^H \left(\Sigma_{p-1}^f \right)^{-1} \hat{\Sigma}_{p-1}^{fb} - \left(\frac{N-p}{N-p+1} \right) \left(\hat{\Sigma}_{p-1}^{fb} \right)^H \left(\Sigma_{p-1}^f \right)^{-1} \Delta_p + \dots \\ &\quad \dots + \Delta_p^H \left(\Sigma_{p-1}^f \right)^{-1} \left(\hat{\Sigma}_{p-1}^f - \frac{\mathbf{e}_{p-1}^f(p) \left(\mathbf{e}_{p-1}^f(p) \right)^H}{N-p+1} \right) \left(\Sigma_{p-1}^f \right)^{-1} \Delta_p \end{aligned}$$

Fazendo considerações análogas às feitas no lado *forward*, temos:

$$\hat{\Sigma}_p^b = \hat{\Sigma}_{p-1}^b - \left(\hat{\Sigma}_{p-1}^{fb} \right)^H \left(\Sigma_{p-1}^f \right)^{-1} \Delta_p - \Delta_p^H \left(\Sigma_{p-1}^f \right)^{-1} \hat{\Sigma}_{p-1}^{fb} + \Delta_p^H \left(\Sigma_{p-1}^f \right)^{-1} \hat{\Sigma}_{p-1}^f \left(\Sigma_{p-1}^f \right)^{-1} \Delta_p.$$

Ora, agora podemos reescrever a expressão (A.20) deixando $\hat{\Delta}_p$ explícito na equação:

$$\begin{aligned} \mathcal{E}(\hat{\Delta}_p) = & \text{tr} \left(\left(\Sigma_{p-1}^f \right)^{-1} \left[\hat{\Sigma}_{p-1}^f - \hat{\Sigma}_{p-1}^{fb} \left(\Sigma_{p-1}^b \right)^{-1} \hat{\Delta}_p^H - \hat{\Delta}_p \left(\Sigma_{p-1}^b \right)^{-1} \left(\hat{\Sigma}_{p-1}^{fb} \right)^H + \dots \right. \right. \\ & \left. \left. \dots + \hat{\Delta}_p \left(\Sigma_{p-1}^b \right)^{-1} \hat{\Sigma}_{p-1}^b \left(\Sigma_{p-1}^b \right)^{-1} \hat{\Delta}_p^H \right] \right) + \dots \\ & \dots + \text{tr} \left(\left(\Sigma_{p-1}^b \right)^{-1} \left[\hat{\Sigma}_{p-1}^b - \left(\hat{\Sigma}_{p-1}^{fb} \right)^H \left(\Sigma_{p-1}^f \right)^{-1} \hat{\Delta}_p - \hat{\Delta}_p^H \left(\Sigma_{p-1}^f \right)^{-1} \hat{\Sigma}_{p-1}^{fb} + \dots \right. \right. \\ & \left. \left. \dots + \hat{\Delta}_p^H \left(\Sigma_{p-1}^f \right)^{-1} \hat{\Sigma}_{p-1}^f \left(\Sigma_{p-1}^f \right)^{-1} \hat{\Delta}_p \right] \right), \end{aligned}$$

em que se usa a propriedade aditiva do traço.

Fazendo as devidas manipulações algébricas, pode-se reescrever a função objetivo do nosso problema de minimização como

$$\mathcal{E}(\hat{\Delta}_p) = C(\hat{\Delta}_p) - L(\hat{\Delta}_p) + Q(\hat{\Delta}_p),$$

em que $C(\hat{\Delta}_p)$ é composto pelos termos constantes de $\mathcal{E}(\cdot)$,

$$C(\hat{\Delta}_p) = \text{tr} \left(\left(\Sigma_{p-1}^f \right)^{-1} \hat{\Sigma}_{p-1}^f + \left(\Sigma_{p-1}^b \right)^{-1} \hat{\Sigma}_{p-1}^b \right),$$

$L(\hat{\Delta}_p)$ são os termos lineares em $\hat{\Delta}_p$ de $\mathcal{E}(\cdot)$,

$$\begin{aligned} L(\hat{\Delta}_p) = & \text{tr} \left(\left(\Sigma_{p-1}^f \right)^{-1} \left[\hat{\Sigma}_{p-1}^{fb} \left(\Sigma_{p-1}^b \right)^{-1} \hat{\Delta}_p^H + \hat{\Delta}_p \left(\Sigma_{p-1}^b \right)^{-1} \left(\hat{\Sigma}_{p-1}^{fb} \right)^H \right] \right) + \dots \\ & \dots + \text{tr} \left(\left(\Sigma_{p-1}^b \right)^{-1} \left[\left(\hat{\Sigma}_{p-1}^{fb} \right)^H \left(\Sigma_{p-1}^f \right)^{-1} \hat{\Delta}_p + \hat{\Delta}_p^H \left(\Sigma_{p-1}^f \right)^{-1} \hat{\Sigma}_{p-1}^{fb} \right] \right), \end{aligned}$$

e $Q(\hat{\Delta}_p)$ são os termos quadráticos em $\hat{\Delta}_p$ de $\mathcal{E}(\cdot)$,

$$\begin{aligned} Q(\hat{\Delta}_p) = & \text{tr} \left(\left(\Sigma_{p-1}^f \right)^{-1} \left[\hat{\Delta}_p \left(\Sigma_{p-1}^b \right)^{-1} \hat{\Sigma}_{p-1}^b \left(\Sigma_{p-1}^b \right)^{-1} \hat{\Delta}_p^H \right] \right) + \dots \\ & \dots + \text{tr} \left(\left(\Sigma_{p-1}^b \right)^{-1} \left[\hat{\Delta}_p^H \left(\Sigma_{p-1}^f \right)^{-1} \hat{\Sigma}_{p-1}^f \left(\Sigma_{p-1}^f \right)^{-1} \hat{\Delta}_p \right] \right). \end{aligned}$$

Se estamos interessados em escolher um $\hat{\Delta}_p$ capaz de minimizar a função $\mathcal{E}(\hat{\Delta}_p)$, é evidente que a parcela $C(\hat{\Delta}_p)$ não nos será de grande interesse. Ou seja, podemos limitar a análise à minimização da função

$$f(\hat{\Delta}_p) = Q(\hat{\Delta}_p) - L(\hat{\Delta}_p).$$

Para que não precisemos carregar muitos termos em nossas manipulações algébricas, faremos a seguinte substituição de variável:

$$\mathbf{X} = \left(\boldsymbol{\Sigma}_{p-1}^f \right)^{-1} \hat{\boldsymbol{\Delta}}_p \left(\boldsymbol{\Sigma}_{p-1}^b \right)^{-1}.$$

Usando esta nova variável, a minimização de $f(\hat{\boldsymbol{\Delta}}_p)$ pode passar a ser vista como sendo a minimização de $f(\mathbf{X})$, em que:

$$f(\mathbf{X}) = \text{tr} \left(\mathbf{X} \hat{\boldsymbol{\Sigma}}_{p-1}^b \mathbf{X}^H \boldsymbol{\Sigma}_{p-1}^f + \mathbf{X} \boldsymbol{\Sigma}_{p-1}^b \mathbf{X}^H \hat{\boldsymbol{\Sigma}}_{p-1}^f \right) - 2 \text{tr} \left(\hat{\boldsymbol{\Sigma}}_{p-1}^{fb} \mathbf{X}^H + \left(\hat{\boldsymbol{\Sigma}}_{p-1}^{fb} \right)^H \mathbf{X} \right).$$

Pois bem, a minimização de uma função de várias variáveis complexas a valores reais, como é o caso de $f(\cdot)$, é feita procurando-se pela matriz \mathbf{X}_{opt} tal que

$$\nabla_{\mathbf{X}} f(\mathbf{X}_{\text{opt}}) = 2 \left. \frac{df(\mathbf{X})}{d\mathbf{X}^*} \right|_{\mathbf{X}=\mathbf{X}_{\text{opt}}} = \mathbf{0}, \quad (\text{A.21})$$

em que \mathbf{X}^* denota uma matriz formada pela conjugação complexa de cada uma das componentes da matriz \mathbf{X} .

Do Matrix Cookbook (PETERSEN; PEDERSEN, 2012), temos as seguintes relações:

$$\begin{aligned} \frac{d}{d\mathbf{Z}^*} \text{tr} \left(\mathbf{Z} \mathbf{A}_0 \mathbf{Z}^H \mathbf{A}_1 \right) &= \mathbf{A}_1 \mathbf{Z} \mathbf{A}_0, \\ \frac{d}{d\mathbf{Z}^*} \text{tr} \left(\mathbf{A} \mathbf{Z} \right) &= \mathbf{0}, \\ \frac{d}{d\mathbf{Z}^*} \text{tr} \left(\mathbf{A} \mathbf{Z}^H \right) &= \mathbf{A}, \end{aligned}$$

que usadas em $f(\cdot)$ nos darão

$$\frac{df(\mathbf{X})}{d\mathbf{X}^*} = 0 \iff \boldsymbol{\Sigma}_{p-1}^f \mathbf{X} \hat{\boldsymbol{\Sigma}}_{p-1}^b + \hat{\boldsymbol{\Sigma}}_{p-1}^f \mathbf{X} \boldsymbol{\Sigma}_{p-1}^b - 2 \hat{\boldsymbol{\Sigma}}_{p-1}^{fb} = \mathbf{0}.$$

Portanto, pode-se concluir que a função objetivo $\mathcal{E}(\cdot)$ será minimizada se, e somente se, escolhermos um $\hat{\boldsymbol{\Delta}}_p$ que satisfaça à seguinte equação de Lyapunov:

$$\hat{\boldsymbol{\Sigma}}_{p-1}^f (\boldsymbol{\Sigma}_{p-1}^f)^{-1} \hat{\boldsymbol{\Delta}}_p + \hat{\boldsymbol{\Delta}}_p (\boldsymbol{\Sigma}_{p-1}^b)^{-1} \hat{\boldsymbol{\Sigma}}_{p-1}^b = 2 \hat{\boldsymbol{\Sigma}}_{p-1}^{fb}. \quad (\text{A.22})$$

No caso escalar, as grandezas envolvidas em (A.22) passam a ser todas escalares. Ademais, tem-se que $\boldsymbol{\Sigma}_{p-1}^f = \boldsymbol{\Sigma}_{p-1}^b$. Deste modo, a estimação do coeficiente de reflexão

$$\mathbf{A}_p(p) = \boldsymbol{\Delta}_p \left(\boldsymbol{\Sigma}_{p-1}^b \right)^{-1},$$

é feita por meio de

$$\hat{\boldsymbol{\Sigma}}_{p-1}^f \mathbf{A}_p(p) + \mathbf{A}_p(p) \hat{\boldsymbol{\Sigma}}_{p-1}^b = 2 \hat{\boldsymbol{\Sigma}}_{p-1}^{fb},$$

$$\mathbf{A}_p(p) = \frac{2 \hat{\boldsymbol{\Sigma}}_{p-1}^{fb}}{\hat{\boldsymbol{\Sigma}}_{p-1}^f + \hat{\boldsymbol{\Sigma}}_{p-1}^b}, \quad (\text{A.23})$$

que é exatamente o estimador de máxima entropia de Burg para os coeficientes de reflexão.

A.5.2 Usando o algoritmo de Nuttall-Strand

Resolvendo (A.22), obtém-se uma estimativa para a matriz $\mathbf{\Delta}_p$. A partir desta estimativa, calcula-se os coeficientes $\mathbf{A}_p(p)$ e $\mathbf{B}_p(p)$. Em seguida, podemos atualizar os coeficientes $\mathbf{A}_p(k)$ e $\mathbf{B}_p(k)$ para $k = 1, \dots, p - 1$.

Em resumo, o algoritmo de Nuttall-Strand se estrutura da seguinte forma:

1. Começar calculando as matrizes $\mathbf{\Sigma}_0^f$ e $\mathbf{\Sigma}_0^b$:

$$\mathbf{\Sigma}_0^f = \mathbf{\Sigma}_0^b = \hat{\mathbf{R}}_{xx}(0) = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \mathbf{x}(n)\mathbf{x}^H(n).$$

2. Calcular os erros *forward* e *backward* de ordem 1:

$$\begin{aligned} \mathbf{e}_0^f(n) &= \mathbf{x}(n), \\ \mathbf{e}_0^b(n-1) &= \mathbf{x}(n-1). \end{aligned}$$

3. Calcular as matrizes $\hat{\mathbf{\Sigma}}_0^f$, $\hat{\mathbf{\Sigma}}_0^b$ e $\hat{\mathbf{\Sigma}}_0^{fb}$ usando:

$$\hat{\mathbf{\Sigma}}_0^f = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \mathbf{e}_0^f(n) \left(\mathbf{e}_0^f(n) \right)^H,$$

$$\hat{\mathbf{\Sigma}}_0^b = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \mathbf{e}_0^b(n) \left(\mathbf{e}_0^b(n) \right)^H,$$

$$\hat{\mathbf{\Sigma}}_0^{fb} = \frac{1}{N-1} \sum_{n=2}^N \mathbf{e}_0^f(n) \left(\mathbf{e}_0^b(n-1) \right)^H.$$

4. Resolver a equação de Lyapunov

$$\hat{\mathbf{\Sigma}}_0^f (\mathbf{\Sigma}_0^f)^{-1} \hat{\mathbf{\Delta}}_1 + \hat{\mathbf{\Delta}}_1 (\mathbf{\Sigma}_0^b)^{-1} \hat{\mathbf{\Sigma}}_0^b = 2\hat{\mathbf{\Sigma}}_0^{fb}.$$

5. A partir de $\hat{\mathbf{\Delta}}_1$ calcular as matrizes $\mathbf{\Sigma}_1^f$ e $\mathbf{\Sigma}_1^b$:

$$\mathbf{\Sigma}_1^f = \mathbf{\Sigma}_0^f - \hat{\mathbf{\Delta}}_1 (\mathbf{\Sigma}_0^b)^{-1} \hat{\mathbf{\Delta}}_1^H,$$

$$\mathbf{\Sigma}_1^b = \mathbf{\Sigma}_0^b - \hat{\mathbf{\Delta}}_1^H (\mathbf{\Sigma}_0^f)^{-1} \hat{\mathbf{\Delta}}_1.$$

6. Calcular as matrizes de coeficientes de reflexão:

$$\mathbf{A}_1(1) = \hat{\mathbf{\Delta}}_1 (\mathbf{\Sigma}_0^b)^{-1},$$

$$\mathbf{B}_1(1) = \hat{\mathbf{\Delta}}_1^H (\mathbf{\Sigma}_0^f)^{-1}.$$

7. Atualizar os erros de predição *forward* e *backward*:

$$\mathbf{e}_1^f(n) = \mathbf{e}_0^f(n) - \mathbf{A}_1(1)\mathbf{e}_0^b(n-1),$$

$$\mathbf{e}_1^b(n) = \mathbf{e}_0^b(n) - \mathbf{B}_1(1)\mathbf{e}_0^f(n+1).$$

8. Para $p > 1$, realizar os mesmos passos do algoritmo de Levinson, lembrando-se sempre de obter a estimativa da matriz $\hat{\Delta}_p$ por meio da solução da equação (A.22). Notar que os estimadores $\hat{\Sigma}_p^f$, $\hat{\Sigma}_p^b$ e $\hat{\Sigma}_p^{fb}$ têm seus somatórios com cada vez menos termos conforme aumentamos p .

APÊNDICE B – EQUIVALÊNCIA DE SW E RLS

B.1 INTRODUÇÃO

O presente texto é uma adaptação do desenvolvimento contido em (NIEDZWI-ECKI, 2000) ao analisar o comportamento estatístico da estimação de coeficientes de um modelo auto-regressivo. Uma característica importante daquele trabalho é que uma janela ponderada $w(i)$ permite que modelos auto-regressivos com coeficientes variantes no tempo também sejam considerados.

Nosso objetivo aqui é determinar uma relação analítica que indique o tamanho efetivo de uma janela exponencial de fator esquecimento λ frente a uma janela retangular (*sliding window* ou SW) de tamanho L .

Cabe notar que os resultados são limitados ao caso univariado, porém, é facilmente possível estendê-los ao caso multivariado. O texto termina com alguns exemplos de estimações de modelos auto-regressivos em processos univariados e multivariados.

B.2 DEFINIÇÕES GERAIS

De forma semelhante ao discutido na Seção 3.2.1, um processo auto-regressivo com coeficientes variantes no tempo (TV-AR) segue

$$x(n) = \sum_{k=1}^P a(k, n)x(n-k) + u(n), \quad (\text{B.1})$$

em que $u(n)$ é um processo de inovações Gaussiano de média nula e variância σ_u^2 . Ao estimar um modelo TV-AR para um sinal $x(n)$, é comum definir o erro de predição *forward* como

$$e_P^f(n) = x(n) - \sum_{k=1}^P a(k, n)x(n-k) = x(n) - \mathbf{a}(n)^T \mathbf{x}(n), \quad (\text{B.2})$$

em que

$$\mathbf{x}(n) = \begin{bmatrix} x(n-1) \\ \vdots \\ x(n-P) \end{bmatrix}, \quad \mathbf{a}(n) = \begin{bmatrix} a(1, n) \\ \vdots \\ a(P, n) \end{bmatrix}. \quad (\text{B.3})$$

Para estimar o vetor de coeficientes $\mathbf{a}(n)$, definimos um funcional de energia

$$\mathcal{E}_{\mathbf{w}}(\mathbf{a}(n)) = \sum_{i=0}^{N-1} w(n-i) \left(e_P^f(i) \right)^2 = \sum_{i=0}^{N-1} w(n-i) \left(x(i) - \mathbf{a}(n)^T \mathbf{x}(i) \right)^2, \quad (\text{B.4})$$

em que a janela de ponderação $w(i)$ permite que apenas amostras próximas do instante n contribuam para a estimação de $\mathbf{a}(n)$.

O vetor $\hat{\mathbf{a}}(n)$ que provê a melhor descrição via modelo auto-regressivo no instante n é o que minimiza $\mathcal{E}_{\mathbf{w}}(\hat{\mathbf{a}}(n))$, ou seja,

$$\nabla \mathcal{E}_{\mathbf{w}}(\mathbf{a}(n)) = 0.$$

Existem diversas opções de janela $w(i)$, mas consideraremos a seguir apenas janelas retangulares de tamanho L e janelas exponenciais com fator de esquecimento λ .

B.3 RESULTADOS IMPORTANTES

Calculando o gradiente de $\mathcal{E}_{\mathbf{w}}(\mathbf{a}(n))$, temos

$$\nabla \mathcal{E}_{\mathbf{w}}(\mathbf{a}(n)) = 0 \Leftrightarrow \sum_{i=0}^{N-1} w(n-i)x(i)\underline{\mathbf{x}}(i) = \sum_{i=0}^{N-1} w(n-i)\underline{\mathbf{x}}(i)\hat{\mathbf{a}}(n)^T \underline{\mathbf{x}}(i), \quad (\text{B.5})$$

que pode ser reescrito como

$$\hat{\mathbf{a}}(n) = \left(\sum_{i=0}^{N-1} w(n-i)\underline{\mathbf{x}}(i)\underline{\mathbf{x}}^T(i) \right)^{-1} \left(\sum_{i=0}^{N-1} w(n-i)x(i)\underline{\mathbf{x}}(i) \right). \quad (\text{B.6})$$

No caso de uma janela retangular de tamanho L , tem-se:

$$w(i) = \begin{cases} 1 & \text{para } 0 \leq i < L \\ 0 & \text{para todo o resto} \end{cases} \quad (\text{B.7})$$

de modo que

$$\hat{\mathbf{a}}(n) = \left(\sum_{i=0}^{L-1} \underline{\mathbf{x}}(n-i)\underline{\mathbf{x}}(n-i)^T \right)^{-1} \left(\sum_{i=0}^{L-1} x(n-i)\underline{\mathbf{x}}(n-i) \right). \quad (\text{B.8})$$

Já para a janela exponencial com fator de esquecimento λ ($\lambda < 1$):

$$w(i) = \begin{cases} \lambda^i & \text{para } i \geq 0 \\ 0 & \text{para } i < 0 \end{cases} \quad (\text{B.9})$$

de tal modo que

$$\hat{\mathbf{a}}(n) = \left(\sum_{i=0}^n \lambda^{n-i} \underline{\mathbf{x}}(i)\underline{\mathbf{x}}^T(i) \right)^{-1} \left(\sum_{i=0}^n \lambda^{n-i} x(i)\underline{\mathbf{x}}(i) \right). \quad (\text{B.10})$$

B.4 ESTATÍSTICA DE $\hat{\mathbf{a}}(n)$

Com a fórmula de $\hat{\mathbf{a}}(n)$ devidamente determinada, passamos a analisar seu comportamento estatístico. Para tanto, primeiramente definimos a matriz de autocorrelação no instante n como sendo

$$R(n) = \sum_{i=0}^{N-1} w(n-i)\underline{\mathbf{x}}(i)\underline{\mathbf{x}}(i)^T, \quad (\text{B.11})$$

de modo que se possa escrever

$$\hat{\mathbf{a}}(n) = \left(R(n) \right)^{-1} \left(\sum_{i=0}^{N-1} w(n-i)x(i)\underline{\mathbf{x}}(i) \right). \quad (\text{B.12})$$

Com a hipótese de que $\underline{\mathbf{x}}(i)\underline{\mathbf{x}}(i)^T$ é aproximadamente constante para valores de i contidos em pequenos intervalos, como é o caso quando se usa janelas de ponderação $w(i)$, temos

$$R(n) \simeq \sum_{i=0}^{N-1} w(n-i)\Phi_0 = \left(\sum_{i=0}^n w(i) \right) \Phi_0 = k_n \Phi_0, \quad (\text{B.13})$$

em que $\Phi_0 = \underline{\mathbf{x}}(i)\underline{\mathbf{x}}(i)^T$.

Em seguida, definimos um novo estimador dos coeficientes $\mathbf{a}(n)$,

$$\check{\mathbf{a}}(n) = \frac{1}{k_n} \Phi_0^{-1} \left(\sum_{i=0}^{N-1} w(n-i)x(i)\underline{\mathbf{x}}(i) \right), \quad (\text{B.14})$$

cujos comportamento estatístico determinamos e assumimos como igual ao de $\hat{\mathbf{a}}(n)$. O valor esperado de $\check{\mathbf{a}}(n)$ é

$$\mathbb{E}[\check{\mathbf{a}}(n)] = \frac{1}{k_n} \Phi_0^{-1} \sum_{i=0}^{N-1} w(n-i)\mathbb{E}[x(i)\underline{\mathbf{x}}(i)], \quad (\text{B.15})$$

mas lembrando que

$$x(i) = \mathbf{a}(i)^T \underline{\mathbf{x}}(i) + u(i),$$

tem-se

$$\mathbb{E}[x(i)\underline{\mathbf{x}}(i)] = \mathbb{E}\left[\underline{\mathbf{x}}(i)\left(\mathbf{a}(i)^T \underline{\mathbf{x}}(i) + u(i)\right)\right], \quad (\text{B.16})$$

$$= \mathbb{E}\left[\underline{\mathbf{x}}(i)u(i)\right] + \mathbb{E}\left[\underline{\mathbf{x}}(i)\underline{\mathbf{x}}(i)^T\right]\mathbf{a}(i) = \Phi_0\mathbf{a}(i), \quad (\text{B.17})$$

portanto,

$$\mathbb{E}[\check{\mathbf{a}}(n)] = \frac{1}{k_n} \Phi_0^{-1} \left(\sum_{i=0}^{N-1} w(i) \right) \Phi_0 \mathbf{a}(n) = \mathbf{a}(n), \quad (\text{B.18})$$

o que significa que $\check{\mathbf{a}}(n)$ é um estimador sem viés.

Para a covariância de $\check{\mathbf{a}}(n)$, tem-se

$$\text{Cov}(\check{\mathbf{a}}(n)) = \text{Cov}\left(\frac{1}{k_n} \Phi_0^{-1} \left(\sum_{i=0}^{N-1} w(n-i)x(i)\underline{\mathbf{x}}(i) \right)\right), \quad (\text{B.19})$$

e, portanto,

$$\text{Cov}(\check{\mathbf{a}}(n)) = \frac{1}{k_n^2} \Phi_0^{-1} \text{Cov}\left(\sum_{i=0}^{N-1} w(n-i)x(i)\underline{\mathbf{x}}(i)\right) \Phi_0^{-1}. \quad (\text{B.20})$$

A covariância do termo central é determinada abrindo a expressão de $x(i)$ em

$$x(i) = \underline{\mathbf{x}}(i)^T \mathbf{a}(i) + u(i),$$

e escrevendo

$$\text{Cov} \left(\sum_{i=0}^{N-1} w(n-i)x(i)\underline{\mathbf{x}}(i) \right) = \text{Cov} \left(\sum_{i=0}^{N-1} \underline{\mathbf{x}}(i) \left[\underline{\mathbf{x}}(i)^T \mathbf{a}(i) + u(i) \right] w(n-i) \right). \quad (\text{B.21})$$

Como $u(i)$ é um processo de inovações e $\underline{\mathbf{x}}(i)\underline{\mathbf{x}}(i)^T$ é aproximadamente constante e igual a Φ_0 ,

$$\text{Cov} \left(\sum_{i=0}^{N-1} w(n-i)x(i)\underline{\mathbf{x}}(i) \right) \simeq \text{Cov} \left(\sum_{i=0}^{N-1} \underline{\mathbf{x}}(i)u(i)w(n-i) \right). \quad (\text{B.22})$$

Para calcular esta covariância, escrevemos

$$\begin{aligned} \text{Cov} \left(\sum_{i=0}^{N-1} \underline{\mathbf{x}}(i)u(i)w(n-i) \right) &= \mathbb{E} \left[\sum_{i=0}^{N-1} \sum_{j=0}^{N-1} w(n-i)w(n-j)u(i)u(j)\underline{\mathbf{x}}(i)\underline{\mathbf{x}}(j)^T \right] \\ &= \mathbb{E} \left[\sum_{\substack{i=0 \\ j < i}}^{N-1} w(n-i)w(n-j)u(i)u(j)\underline{\mathbf{x}}(i)\underline{\mathbf{x}}(j)^T \right] + \\ &\dots + \mathbb{E} \left[\sum_{\substack{i=0 \\ j > i}}^{N-1} w(n-i)w(n-j)u(i)u(j)\underline{\mathbf{x}}(i)\underline{\mathbf{x}}(j)^T \right] + \\ &\dots + \mathbb{E} \left[\sum_{\substack{i=0 \\ j=i}}^{N-1} w(n-i)w(n-j)u(i)u(j)\underline{\mathbf{x}}(i)\underline{\mathbf{x}}(j)^T \right] \end{aligned}$$

em que o duplo somatório foi dividido em três parcelas mais simples, das quais apenas a terceira não se anula. Para ver isso, note que quando $i > j$,

$$\mathbb{E} \left[\sum_{\substack{i=0 \\ j < i}}^{N-1} w(n-i)w(n-j)u(i)u(j)\underline{\mathbf{x}}(i)\underline{\mathbf{x}}(j)^T \right] = \sum_{\substack{i=0 \\ j < i}}^{N-1} w(n-i)w(n-j)\mathbb{E} \left[u(j)\underline{\mathbf{x}}(i)\underline{\mathbf{x}}(j)^T \right] \mathbb{E} \left[u(i) \right] = 0, \quad (\text{B.23})$$

pois $u(i)$ é independente de $u(j)$, $\underline{\mathbf{x}}(i)$ e $\underline{\mathbf{x}}(j)$ e tem média nula. O mesmo resultado é obtido de forma análoga para $j > i$. Já no caso com $i = j$, temos

$$\mathbb{E} \left[\sum_{\substack{i=0 \\ j=i}}^{N-1} w(n-i)w(n-j)u(i)u(j)\underline{\mathbf{x}}(i)\underline{\mathbf{x}}(j)^T \right] = \sum_{i=0}^{N-1} w(n-i)^2 \mathbb{E} \left[\underline{\mathbf{x}}(i)\underline{\mathbf{x}}(i)^T \right] \mathbb{E} \left[u^2(n-i) \right], \quad (\text{B.24})$$

ou seja,

$$\text{Cov} \left(\sum_{i=0}^{N-1} w(n-i)x(i)\underline{\mathbf{x}}(i) \right) \simeq \sigma_u^2 \left(\sum_{i=0}^n w(i)^2 \right) \Phi_0. \quad (\text{B.25})$$

Juntando tudo, conclui-se

$$\text{Cov}(\check{\mathbf{a}}(n)) \simeq \frac{1}{k_n^2} \left(\sum_{i=0}^n w(i)^2 \right) \Phi_0^{-1} \sigma_u^2, \quad (\text{B.26})$$

em que o fator

$$l_w = k_n^2 \left(\sum_{i=0}^n w(i)^2 \right)^{-1}$$

é chamado de tamanho efetivo da janela $w(i)$ por Niedzwiecki e pode ser usado para determinar equivalências entre estimativas usando janelas diferentes.

Por exemplo, suponha que temos uma janela retangular $w_1(i)$ de tamanho L , então seu tamanho efetivo é

$$l_{w,1} = \left(\sum_{i=0}^{L-1} 1 \right)^2 \cdot \left(\sum_{i=0}^L 1 \right)^{-1} = L^2 \cdot \frac{1}{L} = L, \quad (\text{B.27})$$

o que não é muito surpreendente.

Suponha agora uma outra janela $w_2(i)$ que é exponencial com um fator de esquecimento λ . Nesse caso,

$$l_{w,2} = \left(\sum_{i=0}^n \lambda^i \right)^2 \cdot \left(\sum_{i=0}^n \lambda^{2i} \right)^{-1} = \left(\frac{1 - \lambda^{n+1}}{1 - \lambda} \right)^2 \cdot \left(\frac{1 - \lambda^2}{1 - \lambda^{2n+2}} \right). \quad (\text{B.28})$$

Supondo $n \rightarrow \infty$, que é quando as estimativas são feitas em regime, temos

$$l_{w,2} \simeq \frac{1 - \lambda^2}{(1 - \lambda)^2} = \frac{1 + \lambda}{1 - \lambda}. \quad (\text{B.29})$$

A partir desses resultados é possível determinar um fator de esquecimento λ_L que garanta um tamanho efetivo equivalente ao de uma janela retangular de tamanho L , bastando escrever

$$\lambda_L = \frac{L - 1}{L + 1}. \quad (\text{B.30})$$

Com isso, as estimativas de $\mathbf{a}(n)$ com qualquer uma das janelas terão comportamento estatístico semelhantes. Vale ressaltar que no caso do trabalho de Moller em (MOLLER et al., 2001) o fator de esquecimento usado é $C = 1 - \lambda$, de modo que

$$C_L = 1 - \frac{L - 1}{L + 1} = \frac{2}{L + 1}. \quad (\text{B.31})$$

B.5 EXEMPLOS ILUSTRATIVOS

Consideremos a seguir dois exemplos de processos auto-regressivos com coeficientes que mudam ao longo do tempo. O primeiro exemplo é univariado, em que mostramos como a Equação (B.31) nos auxilia a determinar valores de L e C com resultados equivalentes na estimação de $\mathbf{a}(n)$. O segundo exemplo é um processo multivariado com dois canais conectados via um coeficiente $a_{21}(1)$ cujo valor muda ao longo do tempo.

B.5.1 Exemplo 1

Consideremos o processo auto-regressivo univariado descrito pela seguinte equação

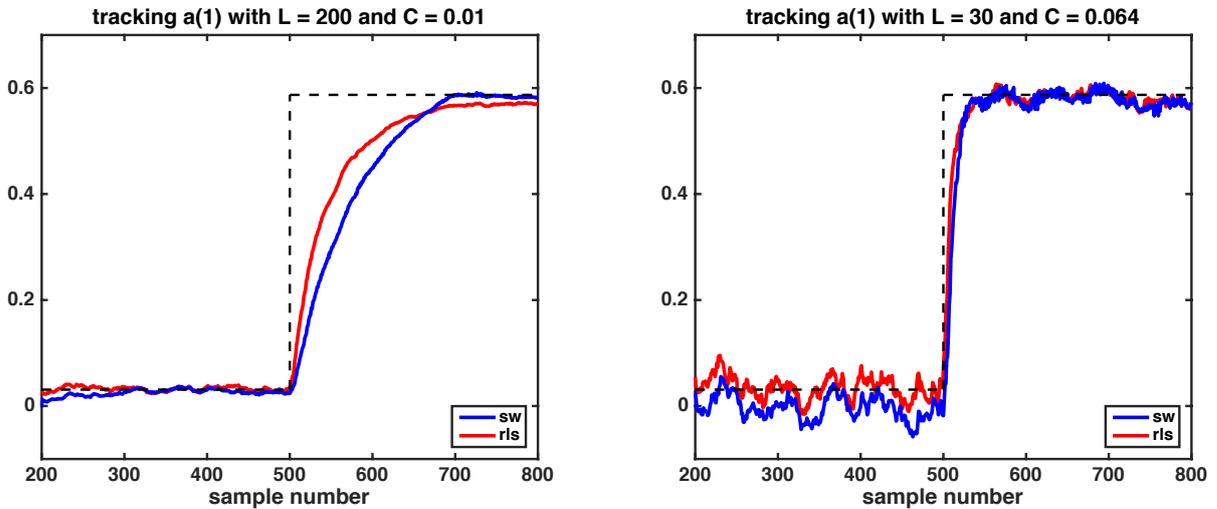
$$x(n) = a(1, n)x(n - 1) + a(2, n)x(n - 2) + u(n), \quad (\text{B.32})$$

em que $u(n)$ é um processo de inovações Gaussiano com média nula e variância σ_u^2 , e os coeficientes do modelo são:

$$\begin{cases} a(1, n) = 0.0309 & a(2, n) = -0.0025 & \text{para } n < 500 \\ a(1, n) = 0.5871 & a(2, n) = -0.9025 & \text{para } n \geq 500 \end{cases} \quad (\text{B.33})$$

Os resultados da estimação dos coeficientes $a(1, n)$ e $a(2, n)$ usando os algoritmos de janela deslizante e RLS com valores de L e C compatíveis segundo (B.31) estão disponíveis na Figura 62.

Figura 62 – Resultados da estimação dos coeficientes $a(1, n)$ e $a(2, n)$ usando o algoritmo de janela deslizante e RLS. Os valores de L e C foram escolhidos de modo garantirem resultados semelhantes. Em **vermelho** os resultados com RLS e em **azul** com a janela deslizante.



Fonte: autoria próxima

B.5.2 Exemplo 2

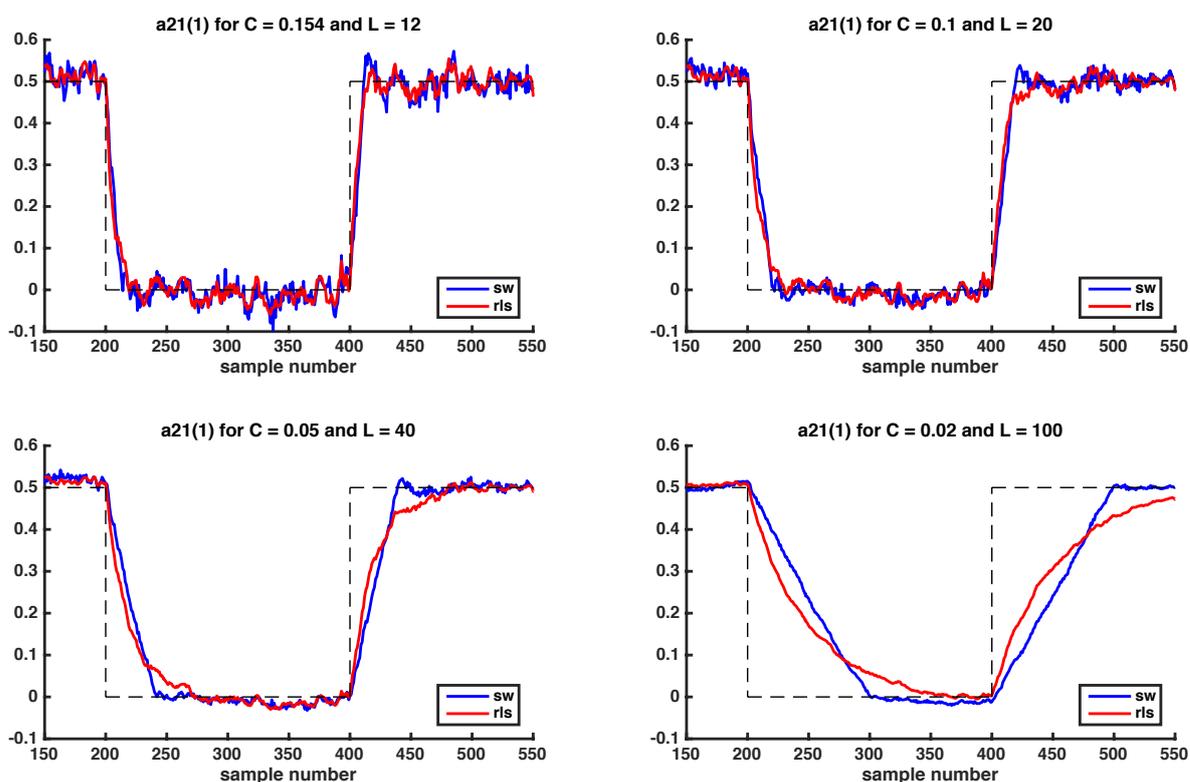
Considere agora o exemplo multivariado com

$$\begin{bmatrix} x_1(n) \\ x_2(n) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0.5562 & 0 \\ a_{21}(1, n) & -1.058 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1(n - 1) \\ x_2(n - 1) \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} -0.81 & 0 \\ 0 & -0.81 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1(n - 2) \\ x_2(n - 2) \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} u_1(n) \\ u_2(n) \end{bmatrix},$$

em que $u_1(n)$ e $u_2(n)$ são processos de inovação Gaussianos e independentes entre si com média nula e variância σ_u^2 e $a_{21}(1, n) = 0$ para $200 < n < 400$ e $a_{21}(1, n) = 0.5$ para todo

o resto. Os resultados da estimação com RLS e janela deslizante estão disponíveis na Figura 63.

Figura 63 – Resultados da estimação do coeficiente $a_{21}(1, n)$ usando o algoritmo de janela deslizante e RLS. Os valores de L e C foram escolhidos de modo a garantir resultados semelhantes. Em **vermelho** os resultados com RLS e em **azul** com a janela deslizante.



Fonte: autoria próxima

ANEXOS

Estão disponíveis a seguir as duas publicações associadas a esta dissertação.

- RODRIGUES, P. L. C.; BACCALÁ, L. A. Statistically significant time-varying neural connectivity estimation using Generalized Partial Directed Coherence. In: *INTERNATIONAL CONFERENCE OF THE IEEE ENGINEERING IN MEDICINE AND BIOLOGY SOCIETY, EMBC'16, Conference...* Orlando, US: IEEE, 2016. (aguardando publicação).
- RODRIGUES, P. L. C.; BACCALÁ, L. A. A new algorithm for neural connectivity estimation of EEG event related potentials. In: *INTERNATIONAL CONFERENCE OF THE IEEE ENGINEERING IN MEDICINE AND BIOLOGY SOCIETY, EMBC'15, Conference...* Milan, Italy: IEEE, 2015. p. 3787–3790.

Statistically Significant Time-varying Neural Connectivity Estimation using Generalized Partial Directed Coherence

Pedro L. C. Rodrigues and Luiz A. Baccalá

Abstract—This paper illustrates the effectiveness of generalized partial directed coherence (gPDC) in characterizing time-varying neural connectivity by properly extrapolating its single trial asymptotic statistical results to a multi trial setting. Time-varying estimation is performed with a sliding-window procedure based on the proposal in [1], whereby a time-frequency map of the connectivity between channels is built. The technique is validated on a non-linear toy model generating simulated EEG and then applied to a publicly available real EEG dataset for benchmarking purposes.

Index Terms—Neural connectivity, Generalized PDC, Time-varying estimation.

I. INTRODUCTION

The focus of neural connectivity studies is starting to shift from determining the brain’s quiescent link structure towards describing how its connectivity evolves during cognitive tasks [2], [3], [4]. These works share a means of estimating connectivity allied to time tracking quantifier procedures. For example, in the EEG processing context, Granger causality estimators have become popular in association with time-varying features that are usually tracked via alternative approaches: either through sliding-window [5] estimation or via recursive least-squares (RLS) algorithm [6] and its extension to Kalman filtering [7].

Here, we stress the sliding-window time-varying approach to generalized partial directed coherence (gPDC) [8] presented in [1] by modifying gPDC’s single trial asymptotic statistical significance criteria from [9] to a multi trial setting. In addition to demonstrating the plausibility of the corrected criteria, we further show its usefulness when describing a system comprising of a pair of interacting neural mass models. Finally, to further illustrate the practical usefulness of the approach, we apply it to a publicly available dataset, and contrast it to the results in [4] that employ the same data.

After a brief presentation of the technical details of our estimation procedure (Sec. II-A), we overview how to assess its statistical significance (Sec. II-B) that are next applied to simulated EEG signals followed by consideration of a real dataset (Sec. III). After a brief discussion (Sec. IV), some final comments are left to Sec. V.

II. MATERIAL AND METHODS

After a brief recap of gPDC, we follow with a description of the adopted statistical testing methodology. Next, we examine the neural mass model used for numerical performance

The authors are with the Telecommunications and Control Department of Escola Politécnica, University of São Paulo, São Paulo, Brazil, 05508-900 prodrigues@usp.br baccala@lcs.poli.usp.br

illustration. Finally, we provide additional details about the real EEG dataset.

A. Time-varying connectivity estimation

Simultaneous recordings from m channels (viz. electrodes) are represented by a multivariate time series

$$\mathbf{x}(n) = \begin{bmatrix} x_1(n) \\ \vdots \\ x_m(n) \end{bmatrix}.$$

A multivariate autoregressive model (MVAR) for this process is

$$\mathbf{x}(n) = \sum_{l=1}^p \mathbf{A}(l)\mathbf{x}(n-l) + \mathbf{w}(n), \quad (1)$$

where p is the model order, $\mathbf{w}(n)$ stands for a zero mean Gaussian stationary innovation process with covariance matrix $\Sigma_{\mathbf{w}}$, and the $\mathbf{A}(\cdot)$ coefficients are $m \times m$ matrices.

Adequate fitting of (1) usually calls for sufficiently long quasi-stationary time series to be available. When this usual premise is not met, it is, however, possible to by-pass this demand and study time-varying connectivity if multiple data evolution trials that describe the same phenomenon are available. The underlying presumption is that, collectively, the N_t trial series represent the evolution of the same system so as to allow the construction of a single joint representative summary model (see [1] for more details).

Causal relations between channels i and j can then be described in the frequency domain via gPDC:

$$g\pi_{ij}(f) = \frac{\frac{1}{\sigma_{ii}} \bar{A}_{ij}(f)}{\sqrt{\sum_{k=1}^m \frac{1}{\sigma_{kk}^2} |\bar{A}_{kj}(f)|^2}} = \frac{\frac{1}{\sigma_{ii}} \bar{A}_{ij}(f)}{g\pi_d(f)}, \quad (2)$$

where σ_{ii}^2 is the i th element in $\Sigma_{\mathbf{w}}$ ’s main diagonal,

$$\bar{A}_{ij}(f) = \begin{cases} 1 - \sum_{l=1}^p a_{ij}(l)e^{-j2\pi fl}, & \text{if } i = j \\ -\sum_{l=1}^p a_{ij}(l)e^{-j2\pi fl}, & \text{otherwise} \end{cases}, \quad (3)$$

with $\mathbf{j} = \sqrt{-1}$, and $a_{ij}(l)$ corresponds to position (i, j) of matrix $\mathbf{A}(l)$ in Equation 1. Nullity of $g\pi_{ij}(f)$ indicates absence of Granger causality from time series $x_j(n)$ to $x_i(n)$ at the normalized frequency f .

To gauge gPDC’s temporal dynamics, we use the procedure presented in [1] and employ a rectangular L point long

sliding window to estimate a joint MVAR model along N_t trials associated to each time instant n , i.e. each joint model refers to the $(n-L+1, n)$ time interval. Let ${}_g\pi_{ij}(f, n)$ denote the corresponding g PDC time-frequency representation.

In the examples that follow, a single model order p was selected for all windows using Akaike's Information Criterion [10] based on the examination of its maximum value in a random subset of record windows.

B. Extension of g PDC's statistical theory to the short segment case

Under the null hypothesis $\mathcal{H}_0 : {}_g\pi_{ij}(f) = 0$, one can show [9] that

$$n_s {}_g\pi_d(f) (|\widehat{{}_g\pi_{ij}}(f)|^2 - |{}_g\pi_{ij}(f)|^2) \xrightarrow{d} \sum_{k=1}^2 l_k(f) \chi_1^2 \quad (4)$$

holds asymptotically for $n_s \rightarrow +\infty$, wherefrom proper decision thresholds can be computed at the desired level of α significance. The $l_k(f)$ are defined in [9] and χ_1^2 denotes a chi-squared distributed random variable of one degree of freedom.

To use (4) in the context of short segments, one must replace n_s by an appropriate quantity. Through extensive simulations, our empirical investigation has shown that the desired Type I error rate can be attained by taking $n_s = N_t \times (L - p)$, which corresponds to the effective number of samples used to estimate the autoregressive model. A similar substitution holds when determining confidence intervals if \mathcal{H}_0 can be rejected [9]. To provide the reader with some sense of the effectiveness of this correction under the best possible circumstances, we emulate [11] by simulating the system in Figure 1 and gauging its g PDC performance as function of the strength of the $1 \rightarrow 2$ connection.

C. Neural mass models

First proposed as means for studying EEG alpha-rhythm generation in the thalamus [12], neural mass models consist of non-linear equations that are physiologically inspired by the interaction between pyramidal cells and interneurons (excitatory and inhibitory) over cortical columns.

In our simulations, we employed an adapted version of [12]'s proposal that models the connection between different cortical columns together with the generation of evoked potentials [13]. We specifically implemented [14]'s suggestions as to how to model for cortical columns that oscillate at frequencies other than the alpha band.

D. Real EEG data

To provide a practical real context where this approach might be profitably used, we selected the publicly available EEG recordings¹ collected, analyzed, and described by [15] whose dataset consists of multichannel recordings obtained during whisker stimulation of p21 Wistar rats at a sampling frequency of 2kHz, and consisting of 50 trials for each rat

¹<http://www.fbmlab.com/data/>

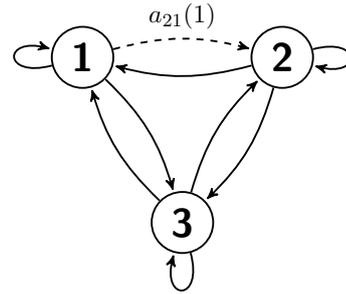


Fig. 1: Diagram depicting the network structure corresponding to the multivariate autoregressive model given by:

$$\begin{cases} x_1(n) = 0.2x_1(n-1) - 0.4x_2(n-1) \\ \quad - 0.2x_2(n-2) + 0.3x_3(n-1) + w_1(n) \\ x_2(n) = \mathbf{a}_{21}(1)x_1(n-1) + 0.8x_2(n-1) \\ \quad - 0.1x_2(n-2) + 0.4x_3(n-1) + w_2(n) \\ x_3(n) = 0.5x_1(n-2) - 0.1x_2(n-1) + 0.2x_2(n-2) \\ \quad + 0.4x_3(n-1) + 0.1x_3(n-2) + w_3(n) \end{cases}$$

where $\mathbf{a}_{21}(1) \in \{0, 0.05, 0.10, 0.15, 0.20, 0.50\}$.

		Percentage of rejection (%)					
		$L = 12, N_t = 50$		$L = 12, N_t = 50$		$L = 600, N_t = 1$	
$\mathbf{a}_{21}(1)$	$ {}_g\pi_{21}(0.3) ^2$	$\alpha = 5\%$	$\alpha = 1\%$	$\alpha = 5\%$	$\alpha = 1\%$	$\alpha = 5\%$	$\alpha = 1\%$
0.00	0	8.56	2.91	5.86	1.63	5.19	1.06
0.05	0.0018	21.06	9.23	16.01	5.96	16.84	6.21
0.10	0.0070	56.15	35.17	47.90	26.05	53.98	30.03
0.15	0.0157	88.69	73.41	84.33	64.38	89.01	72.02
0.20	0.0275	99.03	95.66	98.16	92.07	99.23	95.82
0.50	0.1503	100.0	100.0	100.0	100.0	100.0	100.0
		Not corrected		Corrected			

TABLE I: Percentage (under 10000 Monte-Carlo trials) of $\mathcal{H}_0 : |{}_g\pi_{21}(f = 0.3)|^2 = 0$ with and without correct of the effective segment length n_s against the single-trial gold-standard case as a function of \mathbf{a}_{21} . All models were estimated with order $P = 2$.

and each stimulus type (right or left whisker). Figure 6(A) sums up rat electrode scalp positions.

Under this protocol, whisker stimulus leads to a somatosensory evoked potential (SEP) on the rat's contralateral primary sensory cortex (cS1) after 5ms, with its activity lasting for approximately 20ms and later spreading to other cortical areas [15].

III. RESULTS

A. Empirical investigation

\mathcal{H}_0 's rejection rate in Table I is a function of \mathbf{a}_{21} with (Sec. II-B) and without ($n_s = L \times N_t$) correction to an effective number of data points compared to a single-trial record of the same total number of points used as a gold standard.

B. Simulated NMM

To further validate the present approach, we simulated EEG signals derived from a pair of interacting neural mass models (see Figure 2) whose link is suddenly severed and then switched back on again. Using a maximally overlapping

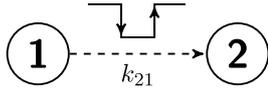


Fig. 2: Diagram of the connection between two neural mass models, NMM_1 and NMM_2 , oscillating respectively around the gamma (channel 1 \simeq 41 Hz) and beta bands (channel 2 \simeq 22 Hz) and directionally linked via k_{21} , which is turned off for 500 ms and then toggled back to its original value. Sampling frequency is 1000 Hz.

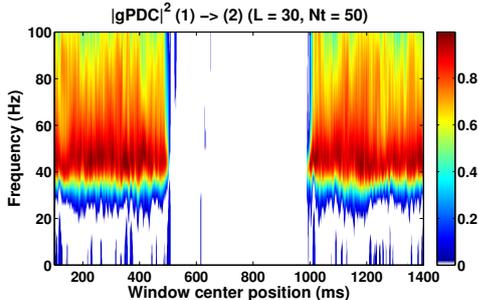


Fig. 3: The time-frequency representation of $|g\pi_{21}|^2$ under the conditions of Figure 2 is shown against a white background that represents regions for which \mathcal{H}_0 cannot be rejected at $\alpha = 1\%$.

sliding-window with $L = 30$ points and $p = 12$ leads to the estimated $gPDC$ time-frequency evolution shown on Figure 5. A detailed comparative picture of $gPDC$ between the “ON” and the “OFF” state can be appreciated in Figure 3.

Connectivity evolution details at 41.18 Hz are shown on Figure 5 for two window widths with their respective thresholds.

C. Real EEG data

Figure 6 shows the results of processing real EEG neural activity from cS1 (electrode 4) for rat left whisker stimulation. To guarantee better estimates, only a subset of the 15 available channels (channels 2, 3, 4, 5, 6) was used, with a sliding window of $L = 30$ points (~ 15 ms) and $p = 6$ chosen throughout the record.

IV. DISCUSSION

These results show that our sliding-window algorithm manages to track connectivity changes in the context of both neural mass models and real EEG data.

Despite its practical importance, prior work on the statistics of time-varying connectivity estimators has resorted to resampling techniques [5] [16] [17], whose computer intensive nature does not take advantage of estimator’s mathematical structure. Here we provide a computationally inexpensive tool for assessing the statistical significance of $g\pi_{ij}(f, n)$ ’s estimates.

It is quite remarkable that, although the simulated EEG was generated with a non-linear set of equations, linear MVAR model estimation managed to capture the main signal interaction features that include the frequency activity

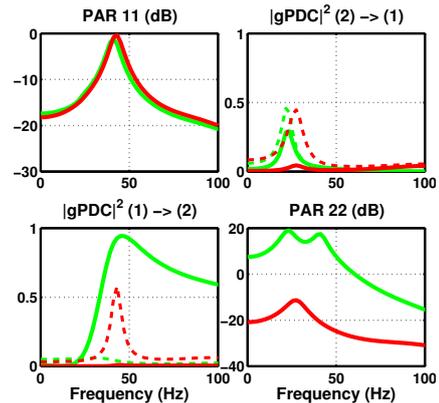


Fig. 4: Plot of $|g\pi_{21}|^2$ and the estimated autospectrum (P_{AR}) of each channel when the connection between neural mass models is ON (green) and OFF (red). The dashed lines represent threshold values for the null hypothesis of no connection at a 1% significance value. The dataset has $N_t = 50$ realizations and estimations were performed in windows of size $L = 30$.

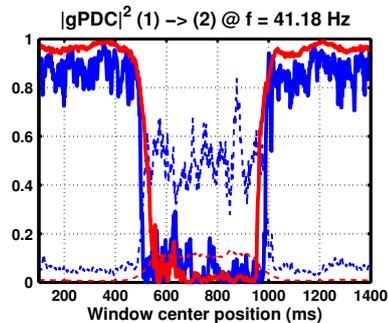


Fig. 5: Time evolution of $|g\pi_{21}(f, n)|^2$ at frequency $f = 41.18$ Hz. The curve in blue portrays the results for estimations using $L = 30$ and in red for $L = 100$. Dashed lines represent null hypothesis rejection threshold values at $\alpha = 1\%$.

peaks in each cortical column’s spectrum (beta and gamma bands), and the direction of the connectivity between them. Furthermore, the thresholds of Figure 4 indicate that $g\pi_{12}$ ’s peak during the ON state does not correspond to a causal influence from channel 2 toward channel 1.

One can readily notice the high variability of $gPDC$ from NMM_1 to NMM_2 (Figure 5) which is nonetheless closely matched by decision thresholds and thereby allows correct inference within the prescribed confidence level.

The analysis of the real EEG dataset was carried out so as to allow comparing results and methodology with those in [4]. Our sliding-window procedure differs from [4] who employ the RLS algorithm followed by averaging over trials. Whereas our connectivity inference employed just the $gPDC$ between channels (with its immediate interpretation [18]), [4] opted for an alternative PDC version that is not only row-normalized, but which is also weighted by the values of a non-parametric estimate of each channel’s power spectral

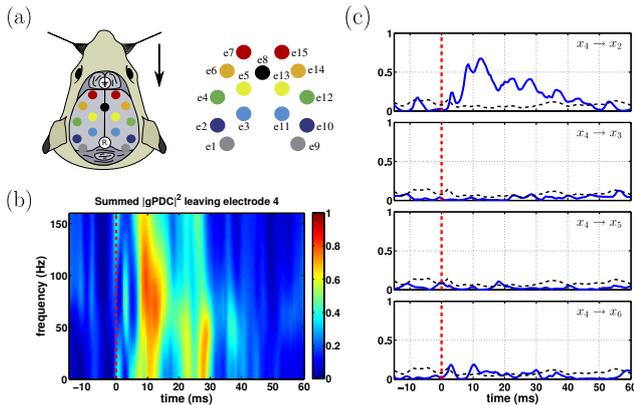


Fig. 6: Real EEG data estimation results using subject RN060616A [15]: (a) EEG electrode scalp positions. (b) Time-frequency representation of the summed $gPDC$ leaving electrode 4 (cS1), i.e. $\sum_i |g\pi_{i4}|^2$. (c) $gPDC$ from electrode 4 towards electrodes 2, 3, 5 and 6 at frequency $f = 66.3$ Hz. Dashed **red** lines indicate the moment of whisker stimulus, whereas **black** ones represent threshold values at $\alpha = 5\%$.

density (PSD) [19].

Despite differences in methodology, our results agree quite well with those in [4], even though we employ a somewhat simpler and well established neural connectivity estimator. Figures 6(B) and 6(C) show a peak in cS1's outward neural connectivity 10 ms after stimulus that fades out after approximately 25 ms, something that is compatible with what one would expect in this kind of experimental setup [15]. The present approach has the added advantage that it supplies a well defined set of tools for the statistical characterization of the response.

One should note that [4]'s choice of connectivity estimator is heavily influenced by the characteristics of its MVAR model estimation method, which adopts a very small forgetting factor (equivalent to a large exponential sliding-window) which therefore leads to poor PDC time resolution in the time-frequency plane. The use of the non-parametric multiplicative PSD has the role of improving the time resolution at the expense of introducing a new measure whose statistical uncertainty has not yet been fully worked out. By contrast, the existing asymptotic statistics [9] for $gPDC$ allowed introducing a method for $g\pi_{ij}(f, n)$'s statistical significance assesment.

V. FINAL COMMENTS

Here we proposed a new form of assessing the statistical significance of time-varying neural connectivity estimates under a multiple trial setting by properly modifying existing rigorous single trial asymptotic results.

Finally, we thank [4]'s laudable EEG dataset availability in the best spirit of reproducible science efforts.

ACKNOWLEDGMENTS

P.L.C.R gratefully acknowledges the support from the CNPq 130765/2014-7 grant and L. A. B. to the CNPq

307163/2013-0 grant.

REFERENCES

- [1] P. L. C. Rodrigues and L. A. Baccalá, "A new algorithm for neural connectivity estimation of EEG event related potentials," in *International Conference of the IEEE Engineering in Medicine and Biology Society, EMBC'15*, no. 6, 2015, pp. 3787–3790.
- [2] M. Siegel, T. J. Buschman, and E. K. Miller, "Cortical information flow during flexible sensorimotor decisions," *Science*, vol. 348, no. 6241, pp. 1352–1355, 2015.
- [3] M. G. Preti, F. I. Karahanoglu, N. Leonardi, F. Grouiller, M. Genetti, M. Seeck, S. Vulliemoz, and D. V. D. Ville, "Epileptic network activity revealed by dynamic functional connectivity in simultaneous EEG-fMRI," in *IEEE 11th International Symposium on Biomedical Imaging (ISBI)*, 2014, pp. 9–12.
- [4] G. Plomp, C. Quairiaux, C. M. Michel, and L. Astolfi, "The physiological plausibility of time-varying Granger-causal modeling: Normalization and weighting by spectral power," *NeuroImage*, vol. 97, pp. 206–216, 2014.
- [5] M. Ding, S. L. Bressler, W. Yang, and H. Liang, "Short-window spectral analysis of cortical event-related potentials by adaptive multivariate autoregressive modeling: data preprocessing, model validation, and variability assessment," *Biological cybernetics*, vol. 83, no. 1, pp. 35–45, 2000.
- [6] E. Moller, B. Schack, M. Arnold, and H. Witte, "Instantaneous multivariate EEG coherence analysis by means of adaptive high-dimensional autoregressive models," *Journal of neuroscience methods*, vol. 105, no. 2, pp. 143–158, 2001.
- [7] T. Milde, L. Leistriz, L. Astolfi, W. H. R. Miltner, T. Weiss, F. Babiloni, and H. Witte, "A new Kalman filter approach for the estimation of high-dimensional time-variant multivariate AR models and its application in analysis of laser-evoked brain potentials," *NeuroImage*, vol. 50, no. 3, pp. 960–969, 2010.
- [8] L. A. Baccalá and K. Sameshima, "Generalized partial directed coherence," in *Digital Signal Processing, 2007 15th International Conference on*. IEEE, 2007, pp. 163–166.
- [9] L. A. Baccalá, C. S. N. de Brito, D. Y. Takahashi, and K. Sameshima, "Unified asymptotic theory for all partial directed coherence forms," *Philosophical Transactions of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, vol. 371, no. 1997, pp. 20 120 158–20 120 158, Jul. 2013.
- [10] H. Akaike, "A new look at the statistical model identification," *IEEE Transactions on Automatic Control*, vol. 19, pp. 716–723, 1974.
- [11] D. Y. Takahashi, L. A. Baccalá, and K. Sameshima, "Connectivity inference between neural structures via partial directed coherence," *J. Appl. Stat.*, vol. 34, no. 10, pp. 1259–1273, 2007.
- [12] F. H. Lopes da Silva, a. Hoeks, H. Smits, and L. H. Zetterberg, "Model of brain rhythmic activity - The alpha-rhythm of the thalamus," *Kybernetik*, vol. 15, no. 1, pp. 27–37, 1974.
- [13] B. H. Jansen and V. G. Rit, "Electroencephalogram and visual evoked potential generation in a mathematical model of coupled cortical columns," *Biological cybernetics*, vol. 73, no. 4, pp. 357–366, 1995.
- [14] O. David and K. J. Friston, "A neural mass model for MEG/EEG," *NeuroImage*, vol. 20, no. 3, pp. 1743–1755, Nov. 2003.
- [15] C. Quairiaux, P. Mégevand, J. Z. Kiss, and C. M. Michel, "Functional development of large-scale sensorimotor cortical networks in the brain," *The Journal of neuroscience : the official journal of the Society for Neuroscience*, vol. 31, no. 26, pp. 9574–9584, 2011.
- [16] P. J. Durka, J. Zygierevicz, H. Klekowicz, J. Ginter, and K. J. Blinowska, "On the Statistical Significance of Event-Related EEG Desynchronization and Synchronization in the Time-Frequency Plane," *IEEE Transactions in Biomedical Engineering*, vol. 51, no. 7, 2004.
- [17] A. Korzeniewska, C. M. Crainiceanu, R. Kuś, P. J. Franaszczuk, and N. E. Crone, "Dynamics of event-related causality in brain electrical activity," *Human Brain Mapping*, vol. 29, no. 10, pp. 1170–1192, 2008.
- [18] L. A. Baccalá and K. Sameshima, "Partial directed coherence," in *Methods in Brain Connectivity Inference through Multivariate Time-Series Analysis*, K. Sameshima and L. A. Baccalá, Eds. CRC Press, 2014, pp. 57–73.
- [19] R. G. Stockwell, L. Mansinha, and R. P. Lowe, "Localization of the complex spectrum: The s transform," *IEEE Transactions on Signal Processing*, vol. 44, no. 4, pp. 998–1001, 1996.

A new algorithm for neural connectivity estimation of EEG event related potentials

Pedro L. C. Rodrigues and Luiz A. Baccalá

Abstract— We propose a new algorithm for estimating neural connectivity during event related potentials (ERP) in EEG. It is composed of two steps: the estimation of a time-varying multivariate-autoregressive (MVAR) model and the calculation of the generalized partial directed coherence (gPDC) for assessing the connectivities between channels where MVAR estimation is done via an adapted version of the Nuttall-Strand algorithm, a multivariate generalization of Burg’s spectral estimation algorithm. Successful algorithm validation was performed through simulations using toys model with physiologically ERP inspired features.

I. INTRODUCTION

Characterizing neural connectivity has become central to understanding the brain and its status under different stimulus and/or behavioural conditions [1]. So much so that it has been the focus of an almost endless number of approaches [2] with different levels of rigour, specially for the asymptotic case of multivariate single trial time series data, see [3]’s rigorous approach. Amidst the diversity of currently available approaches, those based on modeling stationary multivariate time series, such as [4], [5], [6], remain the most popular ones thanks to the wide availability of off-the-shelf linear modeling routines [7] and decades of practical experience.

This scenario contrasts markedly with the important case of protocols for event related data [8] which comes in the form of many repeated short lived responses rather than a single sufficiently long lasting data record for which rigorous asymptotic criteria are available. Attempts to address this issue were pioneered by [9] whose approach consisted of solving Yule-Walker equations using response averaged autocorrelation estimates. Other approaches are often described as applying the usual algorithms to ‘stacked’ event data whereas other ideas rely on averaging model parameters.

Our aim here is to present a multivariate autoregressive generalization of the univariate proposal in [10] (Sec. II) and examine its performance under a simulated event related scenario that induces connectivity structure switches (Sec. III). After a brief discussion (Sec. IV), some comments finish the paper (Sec. V).

II. MATERIAL AND METHODS

After a brief of recap algorithm terminology (Sec. II-A) we describe details of the new algorithm and test it via simulated models that incorporate level triggered connectivity switches. Qualitative algorithm success is displayed via gPDC computation [11].

The authors are with the Telecommunications and Control Department of Escola Politécnica, University of São Paulo, São Paulo, Brazil, 05508-900 prodrigues@usp.br baccala@lcs.poli.usp.br

A. Estimation of a MVAR model

Linear multivariate autoregressive modeling of simultaneously observed data $\mathbf{x}(n) = [x_1(n) \ x_2(n) \ \dots \ x_K(n)]^T$ observed over $n = 1, \dots, N$ instants consists of finding the $\mathbf{A}(l)$ coefficient matrices in

$$\mathbf{x}(n) = \sum_{l=1}^P \mathbf{A}(l)\mathbf{x}(n-l) + \mathbf{w}(n), \quad (1)$$

where P is the model order and $\mathbf{w}(n)$ stands for a zero mean Gaussian stationary innovation process with covariance matrix $\Sigma_{\mathbf{w}}$ that cannot be predicted based on past observations.

Among the many approaches [7], [12], order recursive algorithms like the Levinson-Wiggins-Robinson (LWR), Vieira-Morf (VM) and Nuttall-Strand (NS) algorithms are particularly attractive due to their reduced computational complexity and observedly robust numerical stability (mostly for VM and NS) compared to direct solutions of (1) by recasting it in terms of Yule-Walker equations [7].

In common, LWR, VM and NS, take advantage of signal stationarity to break the estimation into forward and backward prediction steps, i.e. for a given order step $p \in \{1, \dots, P\}$

$$\hat{\mathbf{x}}_p^f(n) = \sum_{l=1}^p \mathbf{A}_p(l)\mathbf{x}(n-l), \quad \hat{\mathbf{x}}_p^b(n) = \sum_{l=1}^p \mathbf{B}_p(l)\mathbf{x}(n+l), \quad (2)$$

are respectively the best predictors that minimize the mean squared forward $\mathbf{e}_p^f(n) = \mathbf{x}(n) - \hat{\mathbf{x}}_p^f(n)$ and backward $\mathbf{e}_p^b(n) = \mathbf{x}(n) - \hat{\mathbf{x}}_p^b(n)$ prediction errors.

What distinguishes the latter algorithms is how they update coefficient matrices in going from one order to the next. In LWR, this update proceeds through

$$\mathbf{A}_p(k) = \mathbf{A}_{p-1}(k) - \mathbf{A}_p(p)\mathbf{B}_{p-1}(p-k), \quad (3)$$

$$\mathbf{B}_p(k) = \mathbf{B}_{p-1}(k) - \mathbf{B}_p(p)\mathbf{A}_{p-1}(p-k), \quad (4)$$

for $k = 1$ to $k = p-1$ where $\mathbf{A}_p(p)$ and $\mathbf{B}_p(p)$ are termed the forward and backward reflection coefficient matrices of order p which must be computed at each algorithm order step.

In the NS algorithm, one assumes that the reflection coefficient matrices can be factored as

$$\mathbf{A}_p(p) = \Delta_p \left(\Sigma_{p-1}^b \right)^{-1}, \quad (5)$$

$$\mathbf{B}_p(p) = \Delta_p^H \left(\Sigma_{p-1}^f \right)^{-1}, \quad (6)$$

where Σ_p^f and Σ_p^b are the forward and backward error covariance matrices obtained from the results in step $p - 1$

$$\Sigma_{p-1}^f = \mathbb{E}[\mathbf{e}_{p-1}^f(n)(\mathbf{e}_{p-1}^f(n))^H], \quad (7)$$

$$\Sigma_{p-1}^b = \mathbb{E}[\mathbf{e}_{p-1}^b(n)(\mathbf{e}_{p-1}^b(n))^H], \quad (8)$$

but where Δ_p is estimated by minimizing a weighted version of the total prediction error

$$\text{trace} \left(\left(\Sigma_{p-1}^f \right)^{-1} \hat{\Sigma}_p^f + \left(\Sigma_{p-1}^b \right)^{-1} \hat{\Sigma}_p^b \right), \quad (9)$$

which is equivalent to solving the following Lyapunov matrix equation:

$$\hat{\Sigma}_{p-1}^f \left(\Sigma_{p-1}^f \right)^{-1} \hat{\Delta}_p + \hat{\Delta}_p \left(\Sigma_{p-1}^b \right)^{-1} \hat{\Sigma}_{p-1}^b = 2\hat{\Sigma}_{p-1}^{fb}, \quad (10)$$

where $\hat{\Sigma}_{p-1}^{fb}$ is an estimate of the cross-correlation matrix between the forward and backward prediction residuals,

$$\Sigma_{p-1}^{fb} = \mathbb{E}[\mathbf{e}_{p-1}^f(n)(\mathbf{e}_{p-1}^b(n-p+1))^H]. \quad (11)$$

Next we consider how to adapt the NS algorithm for having several realizations of short records rather than a single long process realization.

B. Segment Nuttall-Strand Algorithm (SegNS)

Consider the data structure $\mathbf{x}(n, s)$, comprised of N_T segments, each lasting N_s time samples and assumed to obey the same model (1). The core of the algorithm consists of replacing the error covariances eqs. (7), (8) and (11) by their average over the available segments:

$$\langle \hat{\Sigma}_p^{(\cdot)} \rangle = \frac{1}{N_T} \sum_{s=1}^{N_T} \hat{\Sigma}_p^{(\cdot)}(s), \quad (12)$$

where the $\hat{\Sigma}_p^{(\cdot)}(s)$ matrices are calculated using the forward ($\mathbf{e}_p^f(n, s)$) and backward ($\mathbf{e}_p^b(n, s)$) prediction errors of each segment, as in:

$$\begin{aligned} \hat{\Sigma}_p^f(s) &= \frac{1}{N_s - p - 1} \sum_{n=p+1}^{N_s} \mathbf{e}_p^f(n, s) \left(\mathbf{e}_p^f(n, s) \right)^T, \\ \hat{\Sigma}_p^b(s) &= \frac{1}{N_s - p} \sum_{n=1}^{N_s-p} \mathbf{e}_p^b(n, s) \left(\mathbf{e}_p^b(n, s) \right)^T, \\ \hat{\Sigma}_p^{fb}(s) &= \frac{1}{N_s - p - 1} \sum_{n=p+2}^{N_s} \mathbf{e}_p^f(n, s) \left(\mathbf{e}_p^b(n - (p + 1), s) \right)^T. \end{aligned} \quad (13)$$

Note that as long as segments obey the same (1) model, their lengths N_s need not even be equal, though equality is assumed here due to the nature of ERP data.

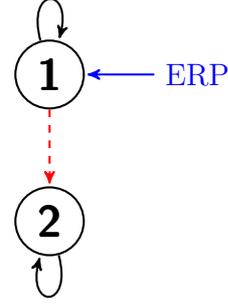


Fig. 1: Diagram depicting the network structure corresponding to the multivariate autoregressive model given by:

$$\begin{cases} x_1(n) = 0.95\sqrt{2}x_1(n-1) - 0.9025x_1(n-2) + w_1(n) \\ x_2(n) = 0.95\sqrt{2}x_2(n-1) - 0.9025x_2(n-2) \\ \quad + \mathbf{0.75}x_1(n-1) + w_2(n) \end{cases}$$

where the boldface coefficient goes to zero in the presence of the ERP.

C. ERP dynamics

In actual ERP analysis situations, a number of issues need to be considered, such as model order and window size, in a tradeoff between size and goodness of fit of the MVAR model estimated with it. We adopt the guidelines presented in [9] to allow future comparison.

Assuming N_T observed events are available, each lasting N_s time samples, also for compatibility with [9], we subtract from each event its time mean. From each resulting record, each time data sample has its average value over events subtracted. It is the resulting data structure that is subject to SegNS processing, over $L < N_s$ long sliding windows, assuming an AIC model order choice criterion leading to models whose connectivity is portrayed via gPDC. Unlike [9], no time-variance or ensemble-variance normalization is performed.

III. NUMERICAL ILLUSTRATIONS

To numerically illustrate algorithm performance, we selected two toy models. In the first one, shown in Fig. 1, the connection from x_1 towards x_2 is turned off (the coupling value a_{21} goes from 0.75 to 0) depending on x_1 's value, something ensured by a realistic ERP event [13] added to x_1 .

The time evolution of gPDC, assuming a sampling frequency of 200 Hz, is shown on Fig. 2, where $L = 12$ samples (60 ms) and SegNS is performed over 250 ERP trials.

The second toy model, shown in Fig. 3, has the connection from x_2 towards x_4 turned off (a_{42} goes from 0.95 to 0) when x_2 reaches a threshold value, due to an ERP event starting from x_3 . The original network connections are re-established after $t_{\text{off}} = 250$ ms. The gPDC time-frequency plot in Fig. 4 shows the algorithm's ability to capture connectivity change whereas a glimpse of estimation improvement with N_T can be appreciated in Fig. 5.

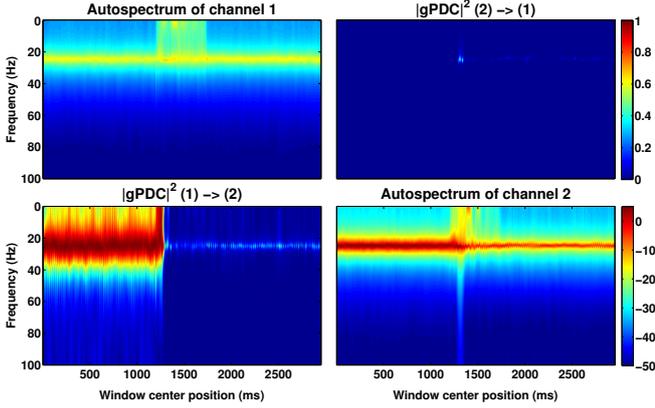


Fig. 2: Time-frequency plot of the autospectrum of each channel on the diagonals (in dB). The off-diagonals show the estimated gPDC over time.

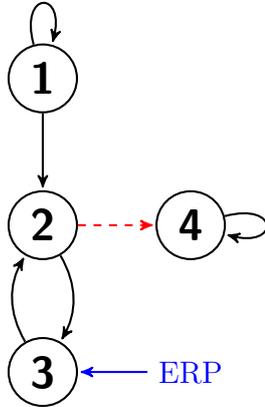


Fig. 3: Diagram depicting the network structure corresponding to the multivariate autoregressive model given by:

$$\begin{cases} x_1(n) = 0.95\sqrt{2}x_1(n-1) - 0.9025x_1(n-2) + w_1(n) \\ x_2(n) = +0.6875\sqrt{2}x_3(n-1) - 0.9x_1(n-2) \\ \quad - 0.4x_1(n-3) + w_2(n) \\ x_3(n) = -0.6875\sqrt{2}x_2(n-1) + w_3(n) \\ x_4(n) = 0.95\sqrt{2}x_4(n-1) - 0.9025x_4(n-2) \\ \quad + \mathbf{0.95}x_2(n-1) + w_4(n) \end{cases}$$

where the boldface coefficient is zeroed upon an ERP trigger returning to its former value $t_{\text{off}} = 250$ ms later.

A. Correctly dealing with segments

One often reads treatments in the literature that propose tackling the availability of many short time records of data following the same model by constructing a single record composed of all records stacked one after the other. Then, the estimation is done using algorithms for single continuous records. Confirming [10], who warns of the danger of such procedures for the univariate case, we show that NS (red), as opposed to SegNS (blue), fails to capture the existing connection from x_2 to x_4 in the pre-ERP period. The figure also contains the theoretical results (black) with the main diagonal showing the rather biased NS (flattened) auto-

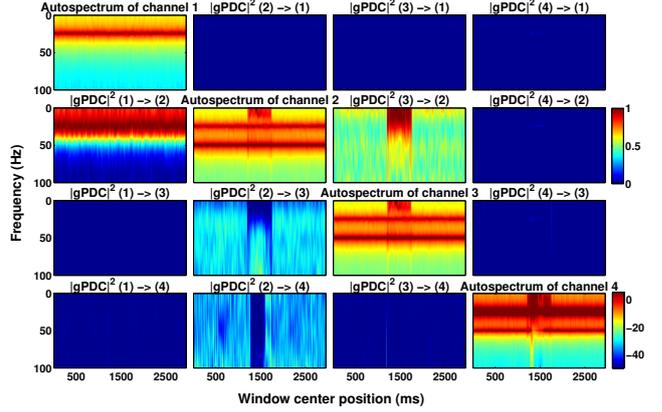


Fig. 4: Time-frequency plot of the autospectrum of each channel on the diagonals (in dB). In the off-diagonals lie the estimated gPDC over time.

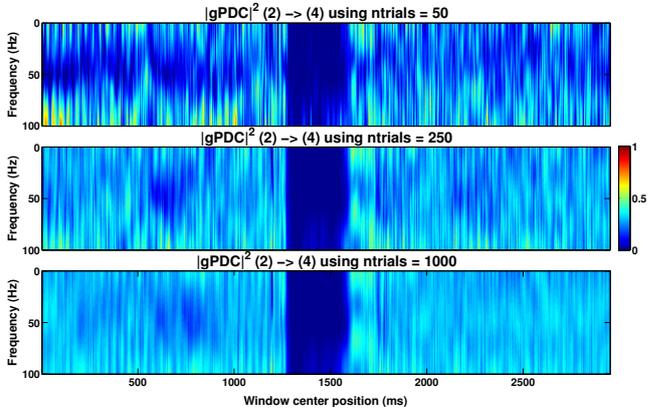


Fig. 5: Time-frequency plots of gPDC for increasing numbers of available trials during MVAR estimation.

spectra results.

IV. DISCUSSION

We have chosen to adapt the Nuttall-Strand algorithm because it is a generalization of Burg's algorithm for spectral estimation [7] that has proven to be very efficient for autoregressive estimation in the univariate case, and because [14] has shown that the NS algorithm often outperforms LS and VM in multichannel autoregressive estimation when long records are available. Using the same considerations for the SegNS, implementing Vieira-Morf algorithm for segments (SegVM) is immediate.

Algorithm validation was based on testing two toy models. Care was taken so that the models would follow realistic ERP behaviour [13]. This kind of concern is of crucial importance and yet absent from related works in the literature.

ERPs generated via [13]'s model have an intrinsic variability in amplitude and time delays so that network structure change happen at slightly different times. Additionally, some simulated trials randomly failed to trigger network switch thereby adding a realistic feature to our simulations. This

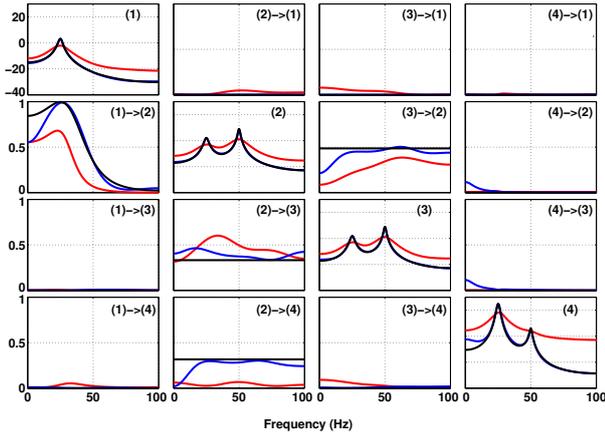


Fig. 6: Plots of the gPDC and the autospectrum (in dB) when using the coefficients estimated with two kinds of algorithm: NS for segments in **blue** and NS stacked in **red**. The results using the true values of $A_p(\cdot)$ are in **black**.

rate of ERP failure impacted MVAR estimation, since connectivity trial subpopulations coexist whereas a single estimated model is being used for both. It is the subpopulation proportions that decide whether the results point towards one network structure or another. For the examples here, the rate of switch failure was of approximately 20%, and the residual post-ERP gPDC seen in Fig. 2 is due to this fact.

The results obtained in this work show that our algorithm is a viable option for studying the influence of an ERP signal on a network of neural structures. However, one should be aware that parameters like model order and window size must be appropriately tuned before performing any estimation. The results of Fig. 5 show that an increase in the number of available trials induces a decrease in gPDC's time variability.

V. FINAL COMMENTS

We have presented a new alternative for estimating time-varying neural connectivity, using an algorithm based on the Nuttall-Strand algorithm for MVAR estimation. Simulations used physiologically-inspired toy models, portraying the intrinsic viability of our algorithm in this kind of application.

Further work is now concentrated on the statistically based comparison between the algorithms proposed here to alternatives like [15] and [9], using simulations on toy models and real EEG data. Furthermore, we intend to extend the results in [3] to the short segment case.

ACKNOWLEDGMENT

P.L.C.R gratefully acknowledges the support from the CNPq 130765/2014-7 grant and L. A. B. to the CNPq 307163/2013-0 grant.

REFERENCES

- [1] O. Sporns, *Networks of the Brain*. The MIT Press, 2010.
- [2] L. A. Baccalá and K. Sameshima, *Methods in Brain Connectivity Inference through Multivariate Time Series Analysis*. CRC Press, 2014, ch. Brain Connectivity, pp. 1–9.

- [3] L. A. Baccala, C. S. N. de Brito, D. Y. Takahashi, and K. Sameshima, "Unified asymptotic theory for all partial directed coherence forms," *Philosophical Transactions of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, vol. 371, no. 1997, pp. 20 120 158–20 120 158, Jul. 2013.
- [4] L. A. Baccala and K. Sameshima, "Partial directed coherence: a new concept in neural structure determination," *Biological cybernetics*, vol. 84, no. 6, pp. 463–474, 2001.
- [5] M. J. Kaminski and K. J. Blinowska, "A new method of the description of the information flow in the brain structures," *Biological cybernetics*, vol. 65, no. 3, pp. 203–210, 1991.
- [6] L. Barnett and A. K. Seth, "The MVGC multivariate Granger causality toolbox: A new approach to Granger-causal inference," *Journal of Neuroscience Methods*, vol. 223, pp. 50–68, 2014.
- [7] S. L. Marple, *Digital Spectral Analysis: With Applications (Prentice-Hall Series in Signal Processing)*. Prentice Hall, 1987.
- [8] S. J. Luck, *An Introduction to the Event-Related Potential Technique (Cognitive Neuroscience)*. MIT Press, 2005.
- [9] M. Ding, S. L. Bressler, W. Yang, and H. Liang, "Short-window spectral analysis of cortical event-related potentials by adaptive multivariate autoregressive modeling: data preprocessing, model validation, and variability assessment," *Biological cybernetics*, vol. 83, no. 1, pp. 35–45, 2000.
- [10] S. De Waele and P. M. Broersen, "The burg algorithm for segments," *Signal Processing, IEEE Transactions on*, vol. 48, no. 10, pp. 2876–2880, 2000.
- [11] L. A. Baccala and K. Sameshima, "Generalized partial directed coherence," in *Digital Signal Processing, 2007 15th International Conference on*. IEEE, 2007, pp. 163–166.
- [12] H. Lutkepohl, *New Introduction to Multiple Time Series Analysis*. Springer, 2007.
- [13] B. H. Jansen and V. G. Rit, "Electroencephalogram and visual evoked potential generation in a mathematical model of coupled cortical columns," *Biological cybernetics*, vol. 73, no. 4, pp. 357–366, 1995.
- [14] L. S. Marple and A. H. Nuttall, "Experimental comparison of three multichannel linear prediction spectral estimators," in *IEE Proceedings F (Communications, Radar and Signal Processing)*, vol. 130. IET, 1983, pp. 218–229.
- [15] E. Moller, B. Schack, M. Arnold, and H. Witte, "Instantaneous multivariate EEG coherence analysis by means of adaptive high-dimensional autoregressive models," *Journal of neuroscience methods*, vol. 105, no. 2, pp. 143–158, 2001.