

**UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
ESCOLA DE ENGENHARIA DE SÃO CARLOS**

Vitor Bruno de Oliveira Barth

**Um método Bayesiano orientado a dados para o
aprendizado estrutural de Redes Bayesianas**

São Carlos

2023

Vitor Bruno de Oliveira Barth

**Um método Bayesiano orientado a dados para o
aprendizado estrutural de Redes Bayesianas**

Dissertação apresentada à Escola de Engenharia de São Carlos da Universidade de São Paulo, como requisito obrigatório para obtenção do título de Mestre em Ciências - Programa de Pós-Graduação em Engenharia Elétrica.

Área de concentração: Sistemas Dinâmicos

Orientador: Prof. Dr. Carlos Dias Maciel

Trata-se da versão corrigida da dissertação. A versão original se encontra disponível na EESC/USP que aloja o Programa de Pós-Graduação de Engenharia Elétrica.

São Carlos

2023

FOLHA DE JULGAMENTO

Candidato: Bacharel **VITOR BRUNO DE OLIVEIRA BARTH.**

Título da dissertação: "Um método Bayesiano orientado a dados para o aprendizado estrutural de Redes Bayesianas".

Data da defesa: 06/02/2023.

Comissão Julgadora

Resultado

Prof. Associado **Carlos Dias Maciel**

(Orientador)

(Escola de Engenharia de São Carlos – EESC/USP)

APROVADO

Prof. Dr. **Luiz Fernando Costa Nascimento**

(Universidade de Taubaté/UNITAU)

APROVADO

Prof. Associado **Ricardo Zorzetto Nicoliello Vencio**

(Faculdade de Filosofia, Ciências e Letras de Ribeirão Preto/FFCLRP-USP)

APROVADO

Coordenador do Programa de Pós-Graduação em Engenharia Elétrica:

Prof. Dr. **João Bosco Augusto London Junior**

Presidente da Comissão de Pós-Graduação:

Prof. Titular **Murilo Araujo Romero**

AUTORIZO A REPRODUÇÃO TOTAL OU PARCIAL DESTE TRABALHO,
POR QUALQUER MEIO CONVENCIONAL OU ELETRÔNICO, PARA FINS
DE ESTUDO E PESQUISA, DESDE QUE CITADA A FONTE.

Ficha catalográfica elaborada pela Biblioteca Prof. Dr. Sérgio Rodrigues Fontes da
EESC/USP com os dados inseridos pelo(a) autor(a).

B284u Barth, Vitor Bruno de Oliveira
Um método Bayesiano orientado a dados para o
aprendizado estrutural de Redes Bayesianas / Vitor
Bruno de Oliveira Barth; orientador Carlos Dias Maciel.
São Carlos, 2023.

Dissertação (Mestrado) - Programa de
Pós-Graduação em Engenharia Elétrica e Área de
Concentração em Sistemas Dinâmicos -- Escola de
Engenharia de São Carlos da Universidade de São Paulo,
2023.

1. Redes Bayesianas. 2. Aprendizado Estrutural. 3.
Monte Carlo via Cadeias de Markov. I. Título.

AGRADECIMENTOS

Ao Prof. Dr. Carlos Dias Maciel pelos ensinamentos e paciência durante a orientação deste trabalho.

Às minhas amigas Amanda, Naiara e Rosa pelo incentivo, conselhos e acolhimento sempre que precisei.

Aos meus pais e irmão por sempre terem sempre me ajudado durante este percurso acadêmico, com muita compreensão e amor.

Aos funcionários do Departamento de Engenharia Elétrica e de Computação, pelo auxílio nas questões de procedimentos acadêmicos.

Ao Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq) pelo financiamento parcial desta pesquisa.

RESUMO

BARTH, V. B. O **Um método Bayesiano orientado a dados para o aprendizado estrutural de Redes Bayesianas**. 2023. 59p. Dissertação (Mestrado) - Escola de Engenharia de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2023.

A transparência em algoritmos de Inteligência Artificial é o foco de um novo ramo de pesquisa, chamado Inteligência Artificial Explicável, o qual sugere que especialistas devam ser capazes de replicar os resultados encontrados pelo modelo, bem como atualizá-los quando os resultados não estão de acordo com seus conhecimentos prévios a respeito do domínio analisado. Redes Bayesianas são um tipo de modelo explicável construídos sobre o formalismo de teoria da probabilidade, capazes de executar com transparência tarefas de previsão, classificação e descobertas de sistemas baseadas em dados. No entanto, o aprendizado de Redes Bayesianas baseado em dados não é observável, dificultando a seleção de modelos quando não se há conhecimentos prévios do sistema. Este trabalho apresenta uma nova metodologia de aprendizado de Redes Bayesianas baseado em Monte Carlo via Cadeias de Markov, que fornece informações da credibilidade do modelo ao final do processo de aprendizado. A avaliação desta nova metodologia mostrou ser equivalentes a algoritmos tradicionais de aprendizagem de Redes Bayesianas, mas com maior observabilidade do modelo obtido e com benefícios no aprendizado com poucos dados.

Palavras-chave: Redes Bayesianas. Aprendizado Estrutural. Monte Carlo via Cadeias de Markov.

ABSTRACT

BARTH, V. B. O **A data-driven Bayesian methodology for Bayesian Network structure learning**. 2023. 59f. - Escola de Engenharia de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2023.

Transparency in Artificial Intelligence algorithms is the focus of a new branch of research, called Explainable Artificial Intelligence, which suggests that specialists must be capable of replicating the results found by models, and also updating it when the results are not in agreement with their previous knowledge of the analyzed domain. Bayesian Networks are a type of explainable models built upon the formalism of probability theory, capable of executing in a transparent manner tasks of data-driven forecasting, classification and systems identification. However, data-driven Bayesian Networks learning is not observable, which makes it difficult to select models in cases when there is not previous knowledge available of the system. This work presents a new Bayesian Networks learning methodology based in Markov chain Monte Carlo, which provides model credibility at the end of the learning process. The evaluation of this new methodology showed it is equivalent to traditional Bayesian Networks learning algorithms, but with greater observability of the obtained model and with improvement in the learning with less data.

Keywords: Bayesian Networks. Structure learning. Markov chain Monte Carlo.

LISTA DE FIGURAS

- Figura 1 – O ciclo de interpretabilidade entre analistas e modelos de aprendizagem de máquina. Adaptado de Vellido (2020) 21
- Figura 2 – Rede Lucas0 com Algoritmo Hill Climb. No canto superior esquerdo, está a rede aprendida com conjunto de dados contendo 10^6 amostras. No canto superior direito, com 10^5 amostras. Canto inferior esquerdo, 10^4 amostras. Canto inferior direito, 10^3 amostras. Arestas em preto são aquelas que possuem a mesma direção que no modelo original. Arestas em amarelo estão com direção invertida em relação ao modelo original. Em vermelho, estão arestas inexistentes no modelo original. 36
- Figura 3 – Rede Lucas0 com Algoritmo utilizando MCMC, e 10^6 amostras. À esquerda está o modelo estrutural. Arestas em preto são aquelas que possuem a mesma direção que no modelo original. Arestas em amarelo estão com direção invertida em relação ao modelo original. Em vermelho, estão arestas inexistentes no modelo original. À direita estão os intervalos de credibilidade de algumas arestas relevantes. 37
- Figura 4 – Rede Lucas0 com Algoritmo utilizando MCMC, e 10^5 amostras. À esquerda está o modelo estrutural. Arestas em preto são aquelas que possuem a mesma direção que no modelo original. Arestas em amarelo estão com direção invertida em relação ao modelo original. Em vermelho, estão arestas inexistentes no modelo original. Em cinza estão arestas do modelo original, mas ausentes nos modelos aprendidos. À direita estão os intervalos de credibilidade de algumas arestas relevantes. 38
- Figura 5 – Rede Lucas0 com Algoritmo utilizando MCMC, e 10^4 amostras. À esquerda está o modelo estrutural. Arestas em preto são aquelas que possuem a mesma direção que no modelo original. Arestas em amarelo estão com direção invertida em relação ao modelo original. Em vermelho, estão arestas inexistentes no modelo original. Em cinza estão arestas do modelo original, mas ausentes nos modelos aprendidos. À direita estão os intervalos de credibilidade de algumas arestas relevantes. 38
- Figura 6 – Rede Lucas0 com Algoritmo utilizando MCMC, e 10^3 amostras. À esquerda está o modelo estrutural. Arestas em preto são aquelas que possuem a mesma direção que no modelo original. Arestas em amarelo estão com direção invertida em relação ao modelo original. Em vermelho, estão arestas inexistentes no modelo original. Em cinza estão arestas do modelo original, mas ausentes nos modelos aprendidos. À direita estão os intervalos de credibilidade de algumas arestas relevantes. 39

Figura 7 – Sinal de EMG antes do pré-processamento, produzido pelo músculo <i>Vastus Medialis</i> , do Indivíduo 9 do <i>Conjunto de Dados 2</i> , durante os três primeiros segundos da sessão. A primeira ativação está delimitada por marcadores vermelhos. Durante a ativação é perceptível picos positivos e negativos, simétricos em torno do eixo X. Elaborado pelo autor.	40
Figura 8 – Diagrama mostrando os passos de pré-processamento dos sinais de EMG, e os resultados de cada fase, utilizando a primeira ativação do músculo <i>Vastus Medialis</i> , do Indivíduo 9 do <i>Conjunto de Dados 2</i> . Elaborado pelo autor.	41
Figura 9 – Exemplo de sinais cinemáticos do Indivíduo 9, do <i>Conjunto de Dados 2</i> . Os sinais cinemáticos são <i>quasi-periódicos</i> , e possuem frequência mais baixa que sinais de EMG. Cada marcador (ponto) sobre o gráfico indica um evento do ciclo da marcha. IC: Contato Inicial; M-ST: Acomodação Intermediária; TO: Impulso; M-SW: Oscilação Intermediária. Gráfico esquerdo superior: ângulo do joelho. Direito superior: ângulo do calcanhar. Esquerdo inferior: ângulo do quadril. Direito inferior: obliquidade da pelve. Todos os sinais são do plano sagital. Elaborado pelo autor.	42
Figura 10 – Diagrama completo do pré-processamento dos dados experimentais. Primeiramente, os sinais de EMG são processados, e então combinados aos sinais cinemáticos (KIN). Finalmente, os dados combinados são utilizados para aprender uma DBN. Elaborado pelo autor.	43
Figura 11 – Comparação visual entre as ativações musculares do músculo <i>Gastrocnemius</i> e o ângulo do joelho no plano sagital. Ambos os sinais estão normalizados, e provenientes do Indivíduo 9, do <i>Conjunto de Dados 2</i> durante os três primeiros segundos da marcha. Elaborado pelo autor.	44
Figura 12 – Informação Mútua Atrasada Normalizada entre as ativações mioelétricas e cinemáticas de um indivíduo saudável (Indivíduo 1 em (a) e (c); Indivíduo 22 em (b) e (d)). (a) e (b) <i>Vastus medialis</i> (VM) e ângulo do joelho sobre o plano sagital; (c) e (d) <i>Vastus lateralis</i> (VL) e ângulo do tornozelo sobre o plano sagital. Elaborado pelo autor.	45
Figura 13 – Informação Mútua Atrasada Normalizada entre sinais mioelétricos e entre sinais cinemáticos de um indivíduo saudável (Indivíduo 1 em (a) e (c); Indivíduo 22 em (b) e (d)). (a) e (b) <i>Rectus femoris</i> (RF) e <i>Gluteus medius</i> (GMED); (c) e (d) Posição do Calcanhar no plano transversal e rotação da pelve no plano transversal. Elaborado pelo autor.	46

Figura 14 – Informação Mútua Condicional Normalizada entre as ativações mioelétricas do <i>Tibial anterior</i> (TA) e <i>Glúteo máximo</i> (GMAX) dado o Ângulo do Joelho no plano Sagital, para indivíduos saudáveis. Cores mais escuras indicam um CMI mais baixo e cores mais claras mostram um CMI mais alto. Escalas ajustadas para melhor visualização. (a) Indivíduo 1; (b) Indivíduo 22; (c) Indivíduo 19; (d) Indivíduo 36. Elaborado pelo autor.	47
Figura 15 – Informação Mútua Condicional Normalizada entre as ativações mioelétricas do <i>Tibial anterior</i> (TA) e <i>Glúteo máximo</i> (GMAX) dado o Ângulo do Joelho no plano Sagital, para indivíduos com Síndrome da Dor Patelofemoral. Cores mais escuras indicam uma NCMI mais baixa e cores mais claras mostram uma NCMI mais alta. Escalas ajustadas para melhor visualização. (a) Indivíduo 51; (b) Indivíduo 57; (c) Indivíduo 61; (d) Indivíduo 64. Elaborado pelo autor.	48
Figura 16 – Redes Bayesianas com relações de EMG em indivíduos saudáveis (a) e indivíduos com PFP (b). Cores: (a) Vermelho: Indivíduo 1; Azul: Indivíduo 4; Verde: Indivíduo 10; Magenta: Indivíduo 40. (b) Vermelho: Indivíduo 49; Azul: Indivíduo 53; Verde: Indivíduo 61; Magenta: Indivíduo 64. Elaborado pelo autor.	50
Figura 17 – Redes Bayesianas combinadas com relações de EMG. (a) Indivíduos saudáveis; (b) Indivíduos com dor patelofemoral. Elaborado pelo autor.	51
Figura 18 – Redes Bayesianas Dinâmicas combinadas de relações cinemáticas. (a) Indivíduos saudáveis; (b) Indivíduos com dor patelofemoral. Elaborado pelo autor.	52
Figura 19 – Redes bayesianas combinadas de relações cinemáticas. (a) Indivíduos saudáveis; (b) Indivíduos com dor patelofemoral. Elaborado pelo autor.	53

LISTA DE TABELAS

- Tabela 1 – Comparação do erro de inferência entre estruturas aprendidas utilizando o algoritmo de Hill Climb. TP = Positivos Verdadeiros; TN = Negativos Verdadeiros; FP = Falsos Positivos (Erro de Tipo I); FN = Falsos Negativos (Erro de Tipo II). 35
- Tabela 2 – Comparação do erro de inferência entre estruturas aprendidas utilizando o algoritmo com MCMC. TP = Positivos Verdadeiros; TN = Negativos Verdadeiros; FP = Falsos Positivos (Erro de Tipo I); FN = Falsos Negativos (Erro de Tipo II). 39

LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

AI	Inteligência Artificial
BN	Rede Bayesiana
CI	Independência Condicional
CPD	Distribuição de Probabilidade Condicional
DAG	Grafo Direcionado Acíclico
DMI	Informação Mútua Atrasada
EMG	Eletromiografia
GM	Modelo Gráfico
JPD	Distribuição de Probabilidade Conjunta
imEMG	Eletromiografia Intramuscular
ML	Aprendizagem de Máquina
NMI	Informação Mútua Normalizada
PPF	Dor Patelofemoral
SD	Desvio Padrão
sEMG	Eletromiografia de Superfície
XAI	Inteligência Artificial Explicável

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	21
1.1	Objetivos	23
1.1.1	Geral	23
1.1.2	Específicos	24
1.2	Organização do Trabalho	24
2	REFERENCIAL TEÓRICO	25
3	MATERIAIS E MÉTODOS	29
3.1	Fase 1 - Geração dos Subconjuntos de Dados	29
3.2	Fase 2 - Aprendizado das Distribuições por Aresta	30
3.3	Dados Simulados	30
3.4	Dados Experimentais	32
3.4.1	Aprendizado Estrutural	33
4	RESULTADOS E DISCUSSÃO	35
4.1	Avaliação do algoritmo de aprendizado de Redes Bayesianas utilizando MCMC	35
4.2	Preprocessamento dos Dados Experimentais	39
4.2.1	Modelagem da Interação EMG-Cinemática	43
4.3	Análise Exploratória dos Dados Experimentais	45
4.3.1	Análise utilizando Teoria da Informação	45
4.3.2	Análise utilizando Redes Bayesianas	49
4.3.3	Dificuldades da Análise Exploratória	54
5	CONCLUSÃO	55
5.1	Publicações	55
	REFERÊNCIAS	57

1 INTRODUÇÃO

A discussão a respeito de transparência em algoritmos de aprendizagem de máquina é o foco de um novo ramo da pesquisa em Inteligência Artificial (AI), chamado AI Explicável (XAI). A XAI busca desenvolver algoritmos de aprendizagem de máquina que permitem a humanos recriar as soluções por eles encontradas, diferentes de "modelos caixa-preta", como Redes Neurais Artificiais (ANN), a qual mesmo os desenvolvedores do modelo não possuem formas de explicar como uma AI obteve seus resultados (AMANN *et al.*, 2020; PEARL; MACKENZIE, 2018). Este é um desafio para, por exemplo, aplicações de AI em saúde, em que uma falha na compreensão do processo de diagnóstico, utilizando aprendizagem de máquina, pode levar a conflitos entre profissionais da saúde e pacientes, que comumente solicitam a motivação do diagnóstico, algo que algoritmos não-transparentes não são capazes de proporcionar (AMANN *et al.*, 2020).

Alguns trabalhos discutem a existência de uma compensação entre acurácia e explicabilidade de algoritmos de aprendizagem de máquina, o que justificaria o uso de modelos não-explicáveis em áreas críticas (AMANN *et al.*, 2020; VELLIDO, 2020), mas avanços na área de Modelos Probabilísticos têm alterado esta noção (PEARL; MACKENZIE, 2018). Modelos Probabilísticos são explicáveis, vista sua base sobre o rígido formalismo da teoria de probabilidade (KOLLER; FRIEDMAN, 2009), e eficientes para tarefas de inferência estatística, como previsão e classificação (VIEGAS *et al.*, 2018; ALEXIOU *et al.*, 2017; LEE; YANG; CHO, 2015), e tarefas de descoberta de sistemas baseadas em dados (GROSS *et al.*, 2018).

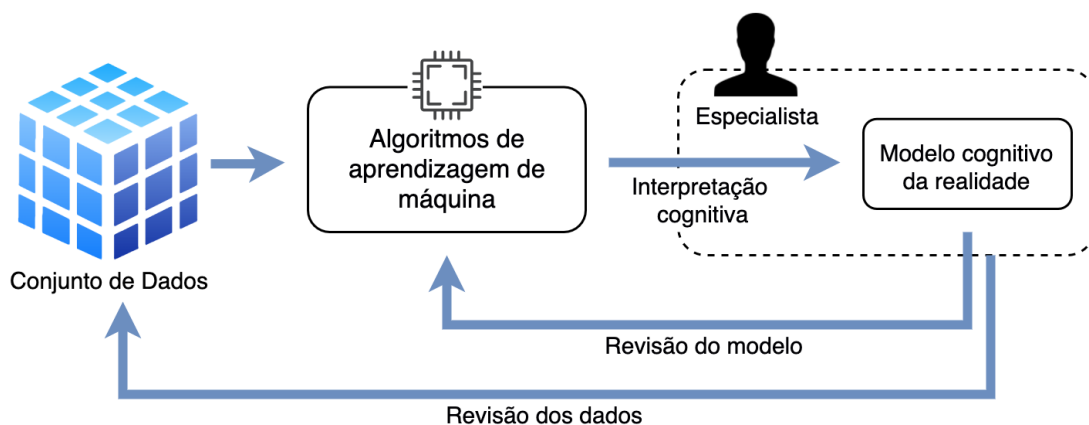


Figura 1 – O ciclo de interpretabilidade entre analistas e modelos de aprendizagem de máquina. Adaptado de Vellido (2020)

Este trabalho busca desenvolver uma metodologia capaz de melhorar o aprendizado e a explicabilidade de um Modelo Probabilístico Gráfico cuja estrutura é formada por

Grafos Direcionados Acíclicos (DAGs) e um conjunto de parâmetros formados por tabelas de probabilidade condicional, chamado Rede Bayesiana (BN). (PEARL; GLYMOUR; JEWELL, 2016; KOLLER; FRIEDMAN, 2009; NEAPOLITAN, 2003). BNs codificam dependências probabilísticas entre variáveis na forma de arestas de um grafo, sendo os nós representações das variáveis em si. A intensidade das relações probabilísticas em uma BN são armazenadas na forma de Distribuições de Probabilidade Conjuntas (JPD), o que fornece transparência ao modelo e pode capturar relações de causa-efeito (PEARL; GLYMOUR; JEWELL, 2016).

Ainda que computacionalmente intensivo, dado o crescimento superexponencial do espaço de busca de DAGs em relação a quantidade de variáveis analisadas (ROBINSON, 1977), ambas as estrutura da rede e a JPD podem ser aprendidas a partir dos dados (KOLLER; FRIEDMAN, 2009; NEAPOLITAN, 2003). Quando a BN está completamente construída, o Teorema de Bayes permite que as crenças (probabilidades) sejam atualizadas conforme novas observações são feitas ou ter sua estrutura alterada para refletir o conhecimento do especialista (KOLLER; FRIEDMAN, 2009; NEAPOLITAN, 2003). A interpretabilidade e capacidade de atualização fazem com que BNs atendam completamente ao ciclo de interpretabilidade sugeridos por Vellido (2020) e Hong, Hullman e Bertini (2020), previamente apresentado na Figura 1.

A abordagem mais comum para a descoberta da estrutura de BNs é por meio da seleção de modelos utilizando pontuação (KOLLER; FRIEDMAN, 2009). Em domínios com poucas variáveis e quantidade abundante de dados é possível encontrar modelos com pontuações muito maiores que de todos os outros (HECKERMAN; MEEK; COOPER, 1997), mas tais domínios são a exceção.

Esta pesquisa foi inicialmente concebida como uma análise de dados experimentais de corredores, com o objetivo de identificar, por meio de BNs, a diferença entre sinais de movimento e ativações musculares de indivíduos saudáveis e com síndrome da dor patelo-femoral. Durante as análises exploratórias foi possível a identificação de diferenças nas ativações musculares entre indivíduos saudáveis e patológicos, mas durante o aprendizado de Redes Bayesianas tais relações não eram identificadas.

A ocorrência de dados faltantes ou insuficientes é considerada um problema comum – e geralmente inevitável – no processo de análise de dados (MA; CHEN, 2018). Ignorar dados faltantes ou lidar com eles inadequadamente pode levar a adição de vies (*bias*) nas análises, assim como aumentar a quantidade ou qualidade de dados por meio da reprodução dos experimentos é, ocasionalmente, impraticável (MA; CHEN, 2018). É, portanto, necessário utilizar técnicas capazes de evidenciar as características buscadas.

Metodologias Bayesianas permitem lidar de maneira natural com a incerteza proveniente de dados faltantes quando realizada a inferência (DANIELS; LINERO, 2015). Neste contexto, dados incompletos são considerados variáveis aleatórias, cujas distribuição *a pos-*

teriori pode ser obtida por meio da especificação de parâmetros das distribuições *a priori* não-informativas. As distribuições das variáveis faltantes podem ser, então, aprendidas utilizando MCMC e posteriormente feita a inferência, mantendo a coerência do modelo (MA; CHEN, 2018).

Apesar de ser conhecida por *Bayesiana* em seu nome, o processo de aprendizado típico de BNs utiliza métodos da estatística clássica, seja em algoritmos de busca por pontuação, como *Hill-climb* (KOLLER; FRIEDMAN, 2009), algoritmos baseados em restrições, como PC e FCI (GLYMOUR; ZHANG; SPIRITES, 2019a), ou mesmo algoritmos híbridos como o de aprendizado por média (GROSS *et al.*, 2019; BROOM; DO; SUBRAMANIAN, 2012).

Esta falta de um algoritmo totalmente Bayesiano de aprendizado de redes Bayesianas é notada há décadas (FRIEDMAN; KOLLER, 2003; HECKERMAN; MEEK; COOPER, 1997), entretanto a disponibilidade de recursos computacionais na época fez necessária a aplicação de diversas restrições, como a implementação de um amostrador específico para BNs, a limitação do grau máximo das redes, e a pouca quantidade de nós. Ainda que não totalmente Bayesiano, visto que é realizada uma seleção dos modelos por meio de média, o trabalho de Gross *et al.* (2019) reviveu esta metodologia, aplicando perturbação de dados para o aprendizado estrutural de BNs.

Como uma evolução do trabalho de Gross *et al.* (2019), esta dissertação apresenta uma metodologia para o aprendizado de Redes Bayesianas (PEARL; GLYMOUR; JEWELL, 2016; KOLLER; FRIEDMAN, 2009; NEAPOLITAN, 2003) por meio do cálculo da distribuição de probabilidade das relações entre arestas, utilizando Monte Carlo via Cadeias de Markov (MCMC). Buscou-se desenvolver um método simples e completamente Bayesiano de aprendizado estrutural de BNs, assim melhorando o aprendizado destes modelos com poucos dados e aumentando a qualidade das discussões sobre a qualidade dos modelos, por meio da avaliação da credibilidade do aprendizado. Com isso, espera-se facilitar o aprendizado de modelos com Redes Bayesianas, e consequentemente incentivando uso de modelos explicáveis em domínios críticos.

1.1 Objetivos

1.1.1 Geral

Apresentar uma metodologia completamente Bayesiana para o aprendizado das Redes Bayesianas, como forma de melhorar a explicabilidade deste tipo de modelos, e melhorar a qualidade do aprendizado de BNs com poucos dados e o desempenho do aprendizado com grande quantidades de variáveis.

1.1.2 Específicos

- Propor uma metodologia que utiliza MCMC para gerar uma distribuição *a posteriori* sobre as arestas de uma Rede Bayesiana;
- Permitir a avaliação da credibilidade de uma Rede Bayesiana aprendida a partir de um conjunto de dados.

1.2 Organização do Trabalho

Este trabalho é dividido em 5 capítulos, incluindo esta introdução. No Capítulo 2 (Referencial Teórico) é apresentada a formulação matemática de Redes Bayesianas, e uma breve revisão bibliográfica sobre metodologias de aprendizagem de BNs utilizando média e MCMC. No Capítulo 3 (Materiais e Métodos) são descritos os objetivos deste trabalho, detalhado o método desenvolvido para aprendizado de BNs por meio da avaliação das distribuições de probabilidade de arestas, calculadas via MCMC, bem como os dados utilizados durante o desenvolvimento e avaliação do método. Os resultados da análise exploratória dos dados e da avaliação do algoritmo desenvolvido são expostos no Capítulo 4 (Resultados e Discussão). Finalmente, o Capítulo 5 (Conclusões) contém as considerações sobre o método apresentado e próximos passos.

2 REFERENCIAL TEÓRICO

Nesta seção será conduzida uma breve introdução às Redes Bayesianas, mostrando a definição matemática que as tornam uma ferramenta computacional notável para modelagem e inferência estatística, bem como os desafios encontrados para se realizar o aprendizado estrutural destes modelos. Em seguida, será apresentada a metodologia de aprendizado de BNs por meio da média de redes, e como é possível ser realizada a aprendizagem de distribuições de probabilidade utilizando Monte Carlo via Cadeias de Markov, as duas principais técnicas que servem de base para o método apresentado nesta dissertação.

Redes Bayesianas são uma classe de Modelos Gráficos (GMs). Assim como para todos os GMs, o objetivo das BNs é representar em forma de grafo uma distribuição de probabilidades conjuntas (JPD), partindo de suposições a respeito das Independências Condicionais entre as variáveis analisadas (MURPHY, 2012; KOLLER; FRIEDMAN, 2009; NEAPOLITAN, 2003). Estruturalmente, os nós dos grafos representam Variáveis Aleatórias e a presença ou ausência de arestas indicam as relações estatísticas entre as variáveis (NEAPOLITAN, 2003).

O que separa BNs dos outros GMs é o uso de Grafos Direcionados Acíclicos (DAGs), definidos com objetivo de obedecer a Condição de Markov, a qual postula que os nós do grafo, quando ordenados, serão sempre posicionados após os seus pais, o que será forçado pela não-existência de ciclos no grafo formador da BN (MURPHY, 2012). Esta característica é vista como uma generalização da condição de Markov de primeira ordem de cadeias para DAGs (MURPHY, 2012; NEAPOLITAN, 2003), e se um grafo atende à Condição de Markov, cada um dos nós só será dependente dos seus pais imediatos, sendo independente de todos os seus predecessores. Ao atender tais condições, é possível simplificar a inferência do modelo conforme descrito abaixo.

Dado um DAG $\mathbb{G} = (V, E)$ e uma CPD Θ , é dito que o modelo $M(\mathbb{G}, \Theta)$ satisfaz a Condição de Markov se para cada variável $x \in V$, x é condicionalmente independente de seus não-descendentes ($ND(x)$), dado o conjunto dos seus pais ($Pa(x)$),

$$I_p(x, ND(x) | Pa(x)) \quad (2.1)$$

podendo só então M ser classificado como uma Rede Bayesiana.

O uso de DAGs, e a subsequente observância à Condição de Markov, apresentada na Equação 2.1, permite grande simplificação do processo de cálculo das JPDs, visto que estas podem ser obtidas pelo produto simples de todas as funções individuais em Θ :

$$p(x_1, x_2, \dots, x_n) = \prod_{k=1}^n p(x_k | Pa(x_k)) \quad (2.2)$$

sendo $Pa(x)$ o conjunto de pais de x .

O aprendizado de uma BN ocorre em duas etapas, primeiro sendo realizado o aprendizado da *estrutura* (\mathbb{G}), seguido pelo cálculo *parâmetros* (Θ) ajustados à estrutura (NEAPOLITAN, 2003). Este processo pode ser estabelecido como um problema de otimização: dado um conjunto de dados D com N amostras obtidas de uma JPD $p(x_1, x_2, \dots, x_n)$, o par ótimo $B^* = (\mathbb{G}^*, \Theta^*)$, que maximiza a probabilidade *a posteriori* de $B|D$, deve ser encontrada. Formalmente (BROOM; DO; SUBRAMANIAN, 2012):

$$B^* = \underset{\mathbb{G}, \Theta}{\operatorname{argmax}} P(D|\mathbb{G}, \Theta)P(\Theta|\mathbb{G})P(\mathbb{G}) \quad (2.3)$$

Existem duas abordagens principais para a busca do par ótimo B^* : o aprendizado estrutural *baseado em restrições*, e o aprendizado estrutural *baseado em pontuações* (KOLLER; FRIEDMAN, 2009). No primeiro, as relações entre as variáveis são definidas por meio de testes de independências, sendo o Algoritmo PC o principal exemplo de um método baseado em restrições (GLYMOUR; ZHANG; SPIRITES, 2019b). Esta abordagem, no entanto, é extremamente sensível a qualidade dos dados, e um erro no cálculo das independências – causada, por exemplo, por dados faltantes ou ruído – pode alterar completamente o resultado do procedimento de construção da estrutura da rede (KOLLER; FRIEDMAN, 2009).

O aprendizado baseado em pontuações é uma forma de se tentar melhorar o resultado do aprendizado estrutural, tratando o problema de seleção do modelo como uma busca por B^* no espaço de DAGs (KOLLER; FRIEDMAN, 2009). Nesta abordagem, um conjunto de possíveis modelos é formado, e uma função de pontuação é aplicada sobre cada um, medindo o quanto cada modelo se adapta aos dados apresentados (KOLLER; FRIEDMAN, 2009; NEAPOLITAN, 2003). Devido à complexidade superexponencial do espaço de DAGs (complexidade computacional $2^{O(n^2 \log n)}$ para n variáveis), pode-se demorar anos para ser realizada uma busca completa em um espaço de DAGs com quantidade de variáveis superior a 8.

Buscas locais baseadas em meta-heurísticas são a forma mais comum de se aprender estruturas de BNs utilizando pontuações, mas são incapazes de garantir que o resultado encontrado seja ótimo, ou mesmo informar a credibilidade do resultado (KOLLER; FRIEDMAN, 2009). O trabalho de Friedman e Koller (2003) foi o passo inicial para o desenvolvimento de abordagens híbridas entre o aprendizado estrutural *baseado em restrições* e o aprendizado estrutural *baseado em pontuações*, e informar a credibilidade que se têm no modelo selecionado.

Uma modelagem simplificada do problema de aprendizado de Redes Bayesianas é a busca pela probabilidade *a posteriori* de alguma característica (f) da rede – a existência e direção de uma aresta – sobre o espaço de todos os possíveis grafos \mathbb{G} (FRIEDMAN; KOLLER, 2003):

$$P(f|D) = \sum_{\mathbb{G}} f(\mathbb{G})P(\mathbb{G}|D) \quad (2.4)$$

O problema de exploração do espaço de buscas com complexidade superexponencial, no entanto, persiste.

Pode-se reduzir o espaço de busca por meio de restrições à estrutura *a posteriori*, como por exemplo a limitação do número de pais (k) de cada nó, a qual diminui o grau máximo da rede. Mesmo com esta restrição o espaço é superexponencial – em torno de $2^{O(kn \log n)}$ para n variáveis (FRIEDMAN; KOLLER, 2003).

Uma possível solução proposta por Heckerman, Meek e Cooper (1997) é aproximar a busca exaustiva por meio do cálculo de um conjunto \mathcal{G} de estruturas promissoras, e estimar a massa de probabilidade das estruturas em \mathcal{G} que contém f :

$$P(f|D) \approx \frac{\sum_{\mathbb{G} \in \mathcal{G}} f(\mathbb{G})P(\mathbb{G}|D)}{\sum_{\mathbb{G} \in \mathcal{G}} P(\mathbb{G}|D)} \quad (2.5)$$

Existem diversas abordagens para a construção de \mathcal{G} . A mais simples é analisar todas as estruturas avaliadas durante a busca local, armazenando as com melhor pontuação.

Outra possível abordagem é o aprendizado de Redes Bayesianas utilizando média, o qual pressupõe que, ao possuímos um conjunto de redes geradas a partir de múltiplos subconjuntos de dados, independentes e identicamente distribuídos, amostrados de uma mesma origem, vai possuir comportamento assintótico conforme a quantidade de dados aumenta (GROSS *et al.*, 2019). Garantir o comportamento assintótico, no entanto, pode ser computacionalmente impraticável devido à complexidade superexponencial do espaço de DAGs em relação à quantidade de variáveis inclusas no modelo.

Como forma de melhoria das abordagens baseadas em média, as metodologias Bayesianas permitem aproximar a média verdadeira dos modelos ao amostrar a distribuição *a posteriori* sobre o conjunto de redes aprendidas. Já existem amostradores específicos para a modelagem de distribuições de arestas, com destaque ao trabalho de Friedman e Koller (2003), mas limitado à capacidade computacional da época e sem enfoque à explicabilidade. É então proposto neste trabalho combinar as metodologias de Friedman e Koller (2003) e de Gross *et al.* (2019), assim aumentando a explicabilidade e melhorando o aprendizado com poucos dados.

A estrutura de uma Rede Bayesiana armazena relações de dependências probabilísticas dois-a-dois entre as variáveis observadas, podendo então as redes serem analisadas aresta por aresta. Deve ser notado que isto só pode ser possível caso o aprendizado utilize métodos que permitam decomposição, ou seja:

$$Score(G|D) = \sum_{i \in nodes(G)} Score(X_i|Pa(X_i), D) \quad (2.6)$$

Esta abordagem permite ganhos computacionais significativos, visto que a pontuação de um mesmo Markov Blanket será sempre a mesma, e permite comparar a pontuação entre arestas.

Em muitos problemas de modelagem estatística pode ser bastante difícil, ou mesmo impossível, encontrar uma densidade de probabilidade que seja simultaneamente uma boa aproximação da *posteriori* e fácil de ser amostrada.

Os métodos de Monte Carlo via cadeias de Markov (MCMC) são uma alternativa aos métodos determinísticos para a modelagem de distribuições de probabilidade. A ideia principal é amostrar a distribuição *a posteriori* e calcular estimativas amostrais de características desta distribuição. Para isso, são utilizadas técnicas iterativas, baseadas em cadeias de Markov, gerando valores que não serão independentes.

O uso de métodos de MCMC é desejável para problemas que não se conhece a distribuição geradora dos dados, visto que retorna uma aproximação de uma distribuição *a posteriori*. Outro benefício do MCMC é que, por ser baseado na teoria Bayesiana, este funciona bem com dados faltantes ou com poucos dados. O diagnóstico do modelo, seleção do modelo e normalização por meio de seleção de variáveis podem ser obtidas com uma única execução do amostrador. Métodos de MCMC, todavia, são computacionalmente caros, especialmente para grandes conjuntos de dados.

Amostradores MCMC permitem a modelagem de distribuições de probabilidade a partir dos dados, inclusive com dados incompletos – o que é um requisito para a seleção de modelos de Redes Bayesianas, visto que não é possível explorar de maneira exaustiva o espaço de busca para conjuntos de dados com mais de 8 variáveis.

3 MATERIAIS E MÉTODOS

Nesta seção será detalhado o método desenvolvido para aprendizado Bayesiano de BNs, assim como os conjuntos de dados utilizados. Todos os algoritmos foram implementados utilizando a linguagem Python v3.9.15 (ROSSUM; DRAKE, 2009), e foram executados em um computador Macbook M1 Pro com 16GB de RAM, e sistema operacional MacOS 13 "Ventura".

3.1 Fase 1 - Geração dos Subconjuntos de Dados

A primeira fase da metodologia consiste em dividir o conjunto de dados original \mathcal{D} em múltiplos subconjuntos de dados $D = \{d_1, d_2, \dots, d_k\}$. Estes conjuntos de dados podem conter perturbações, conforme proposto por Gross *et al.* (2019), serem dados de diversos indivíduos – como, por exemplo, o conjunto de dados experimentais apresentados na Seção 3.4 – ou simplesmente reamostrar o \mathcal{D} produzindo subconjuntos com amostras independentes e identicamente distribuídas. Após a divisão do conjunto de dados original, para cada subconjunto D é realizado o aprendizado estrutural de uma Rede Bayesiana de maneira independente, gerando assim um conjunto de redes $B = \{b_1, b_2, \dots, b_k\}$.

Algoritmo 1: Geração do Conjunto de Redes Bayesianas

Inputs : \mathcal{D} : Conjunto de Dados

n : Número de Amostras por Subconjunto de Dados

k : Número de Subconjunto de Dados

Output : $B = [b_1, b_2, \dots, b_k]$: Redes Bayesianas

```

 $B \leftarrow [\emptyset];$ 
for  $i$  in range( $k$ ) do
     $d \leftarrow \text{sample}(\mathcal{D}, n, \text{seed} = i);$ 
     $b \leftarrow \text{learn\_bn}(d);$ 
     $B[i] \leftarrow b;$ 
     $i \leftarrow i + 1;$ 
end

```

Para garantir o comportamento assintótico, é necessário que B seja completo, ou seja, contenha todas as redes Bayesianas possíveis de modelar os dados – o que é computacionalmente impraticável dada a complexidade do espaço de busca. Portanto, a saída da execução do Algoritmo 1 serve de entrada para o Algoritmo 2, o qual executa o MCMC e, assim, realiza a aproximação da média de forma Bayesiana.

3.2 Fase 2 - Aprendizado das Distribuições por Aresta

O objetivo do Algoritmo 2 é organizar as estruturas em B para servir de entrada aos métodos MCMC.

É gerado um conjunto de todas as combinações de arestas possíveis para \mathcal{D} , armazenada em *possible_edges*. Em sequência, garantida a decomposibilidade da rede, é realizada a contagem das arestas (presença e direção) por todas as redes presentes em \mathcal{B} , armazenadas em \mathcal{L} , utilizando a seguinte codificação para cada par de variáveis (X_1, X_2) :

- Estado 1: $X_1 \rightarrow X_2$
- Estado 2: $X_1 \approx X_2$
- Estado 3: $X_1 \leftarrow X_2$

Por fim, para cada par de variáveis (X_1, X_2) é aprendida uma distribuição Multinomial $\theta_{(X_1, X_2)}$, contendo as distribuições de probabilidade para cada um dos três estados descritos acima. A distribuição de Dirichlet é uma *priori* conjugada da distribuição Multinomial, como desconhecemos os parâmetros, foi utilizada *Dirichlet*($\alpha = [1/3, 1/3, 1/3]$) como *priori* não informativa.

Com as distribuições de todas as arestas presentes em Θ , cada uma delas pode ser individualmente analisada para avaliação da intensidade das relações, ou podendo ser construído um grafo obtendo o estado mais provável de cada aresta selecionado. Nota-se que o resultado não necessariamente é uma DAG, visto que não existem restrições que impeçam a formação de ciclos.

3.3 Dados Simulados

LUCAS (*LUnG CAncer Simple set*) é um conjunto de dados gerados artificialmente por Redes Bayesianas causais com variáveis binárias. O modelo é gerado por um processo de Markov, então o estado de cada um dos nós-filhos é determinado pelo estado dos pais. Ele possui 12 variáveis:

1. *Smoking*
2. *Yellow_Fingers*
3. *Anxiety*
4. *Peer_Pressure*
5. *Genetics*

Algoritmo 2: Execução do MCMC

Inputs : \mathcal{B} : Redes Bayesianas

 n : Número de Amostras do MCMC

Output : $\Theta = [\theta_1, \theta_2, \dots, \theta_n] \sim \text{DirMult}(n, [\alpha_l, \alpha_\emptyset, \alpha_r])$: Amostras do MCMC

```

possible_edges ← combinations( $\mathcal{B}.nodes, 2$ );
 $\mathcal{L} \leftarrow [\emptyset]$ ;
for  $b \in \mathcal{B}$  do
   $l \leftarrow [\emptyset]$ ;
  for  $e \in possible\_edges$  do
    if  $e \in b$  then
      |  $push(l, 1)$ ;
    else if  $inverse(e) \in b$  then
      |  $push(l, -1)$ ;
    else
      |  $push(l, 0)$ ;
    end
  end
   $push(\mathcal{L}, l)$ ;
end
 $\Theta \leftarrow [\emptyset]$ ;
for  $e \in possible\_edges$  do
  |  $s_1 \leftarrow count(e \in \mathcal{L})$ ;
  |  $s_2 \leftarrow count(e \notin \mathcal{L})$ ;
  |  $s_3 \leftarrow count(inverse(e) \in \mathcal{L})$ ;
  |  $frac \leftarrow Dirichlet(\alpha = [1/3, 1/3, 1/3])$ ;
  |  $model \leftarrow Multinomial(frac, observed = [s_1, s_2, s_3])$ ;
  |  $\theta_e \leftarrow mcmc.sample(model, n\_samples = n)$ ;
  |  $push(\Theta, \theta)$ ;
end

```

6. *Attention_Disorder*
7. *Born_an_Even_Day*
8. *Car_Accident*
9. *Fatigue*
10. *Allergy*
11. *Coughing*
12. *Lung_Cancer*

Notavelmente, a variável *Born_an_Even_Day* é completamente independente de todas as outras – com probabilidade 0.5 para cada um dos estados – e *Lung_Cancer*

é a variável de objetivo. Este modelo não possui nenhum sentido biológico, sendo completamente simulado.

Os dados são obtidos a partir de tabelas de probabilidade predeterminadas. Utilizando estas informações, foram gerados conjuntos de dados para avaliação com 10^3 , 10^4 , 10^5 e 10^6 amostras, sendo todos eles avaliados sobre um outro conjunto de dados gerado de maneira independente com 10^3 exemplos.

3.4 Dados Experimentais

Dados experimentais foram obtidos de dois conjuntos de dados, coletados pelo Laboratório de Avaliação e Intervenção em Ortopedia e Traumatologia (LAIOT) da Universidade Federal de São Carlos, em São Carlos, Brasil.

O *Conjunto de Dados 1* contém dados cinemáticos e de eletromiografia de 20 indivíduos saudáveis. O *Conjunto de Dados 2* contém dados cinemáticos e de eletromiografia de 31 indivíduos com síndrome da dor patelofemoral (SANTOS *et al.*, 2016).

Para o *Conjunto de Dados 1* vinte corredores recreacionais foram incluídos no estudo (9 homens, 11 mulheres). Para serem incluídos no estudo, os participantes deveriam apresentar padrão de aterrissagem iniciado com o retropé durante a corrida habitual, correr no mínimo 20 km por semana há pelo menos 3 meses, não ter apresentado nenhuma lesão musculoesquelética nos membros inferiores nos últimos 3 meses precedentes à avaliação e não relatar qualquer histórico de cirurgia ortopédica nos membros inferiores. Todos os participantes assinaram um termo de consentimento livre e esclarecido o qual foi aprovado pelo Comitê de Ética em Pesquisa com Seres Humanos da Universidade Federal de São Carlos (735.596). O estudo também foi aprovado pelo Registro Brasileiro de Ensaio Clínico (RBR-5q5nz4) (SANTOS *et al.*, 2016).

Para o *Conjunto de Dados 2* participaram do estudo 31 corredores recreacionais, 20 homens e 11 mulheres, recrutados através da divulgação do estudo no campus da Universidade, clubes, grupos de corrida e parques da cidade de São Carlos. Para inclusão no estudo, os voluntários deveriam apresentar padrão de aterrissagem iniciado pelo retropé (PAR) durante a corrida habitual, experiência prévia com corrida em esteira ergométrica, volume de treino superior a 20 km/semana há no mínimo 3 meses prévios ao estudo. Foram excluídos todos aqueles que apresentavam histórico de lesões musculoesqueléticas nos últimos 3 meses, intervenções cirúrgicas no membro inferior ou utilizavam-se de órteses que poderiam interferir no padrão da corrida durante a avaliação. Após a avaliação física criteriosa realizada por um fisioterapeuta licenciado, os voluntários incluídos no estudo assinaram um termo de consentimento aprovado pelo Comitê de Ética em Pesquisa em Seres Humanos da Universidade Federal de São Carlos (Parecer no 112.511) (SANTOS *et al.*, 2016).

Ambos os conjuntos de dados foram coletados durante uma marcha de 30 segundos, sob a mesma metodologia. Os sinais de cinemática tridimensional das articulações do tronco, quadril, perna e pelve foram coletados a 240 Hz, e filtrados a 6 Hz com um filtro *Butterworth* de quarta ordem (WILLSON; DAVIS, 2008), e os ângulos de Euler foram coletados por meio do sistema de coordenadas de articulações recomendado pela Sociedade Internacional de Biomecânica (VAUGHAN; DAVIS; O'CONNOR, 1992). Os sinais de eletromiografia foram coletados a 2.400 Hz, unilateralmente, em uma banda de 20 Hz a 500 Hz.

Cada indivíduo teve, ao total, 28 sinais coletados: 20 cinemáticos – os ângulos do tronco, pelve, quadril, perna e calcanhar nos planos sagital, frontal e transversal, a posição do pé e do calcanhar no plano transversal, a velocidade do pé no plano frontal e transversal, e a velocidade do calcanhar no plano transversal – e 8 mioelétricos – as ativações dos músculos *Biceps femoris*, *Gastrocnemius*, *Gluteus maximus*, *Gluteus medius*, *Rectus femoris*, *Tibialis anterior*, *Vastus medialis* e *Vastus lateralis*.

3.4.1 Aprendizado Estrutural

O aprendizado estrutural de Redes Bayesianas foi obtido por meio do algoritmo de *Hill-Climb* implementado por Ankan e Panda (2015). Primeiramente, Redes Bayesianas utilizando somente sinais Cinemáticos ou de EMG foram aprendidas utilizando os conjuntos de dados antes da separação dos eventos do ciclo da marcha. Este modelo, combinado à análise de Informação Mútua, permitiu a detecção de interação entre os eventos musculares e cinemáticos num mesmo instante de tempo, em todas as fases da marcha.

Em sequência, outro grupo de Redes Bayesianas foi aprendido utilizando somente dados cinemáticos, agora com conjuntos de dados separados pela fase de marcha. Este modelo permite a descoberta de relações que ocorrem somente em determinada fase da marcha. Por fim, uma Rede Bayesiana Dinâmica foi aprendida utilizando um conjunto de dados de EMG, com objetivo de detectar sinergias entre cada parte do ciclo da marcha.

O aprendizado estrutural de Redes Bayesianas e Redes Bayesianas Dinâmicas foi conduzido, inicialmente, de maneira separada para cada indivíduo. Para se gerar o modelo final contendo as arestas mais relevantes foi aplicado o algoritmo de combinação de Redes Bayesianas por meio de MCMC.

4 RESULTADOS E DISCUSSÃO

Nesta seção são apresentados os resultados encontrados usando a metodologia descrita na seção anterior. Primeiramente, são apresentados os resultados da análise com dados simulados, buscando comprovar o funcionamento do algoritmo proposto de aprendizado de Redes Bayesianas utilizando MCMC. Em sequência, as análises com dados experimentais são expostas, inicialmente em forma de análise exploratória utilizando teoria da informação, e em sequência diversas análises utilizando Redes Bayesianas e Redes Bayesianas Dinâmicas, as quais ao final são combinadas com o algoritmo de aprendizado Bayesiano de Redes Bayesianas proposto neste trabalho.

4.1 Avaliação do algoritmo de aprendizado de Redes Bayesianas utilizando MCMC

Para ser avaliada a capacidade do algoritmo de realizar o aprendizado estrutural de Redes Bayesianas com poucos dados, foi utilizada uma rede com estrutura conhecida e conjuntos de dados com quantidade de amostras entre 10^3 e 10^6 . Foi então comparado o tempo de aprendizado e a qualidade da inferência da metodologia proposta com o algoritmo clássico de Hill Climb.

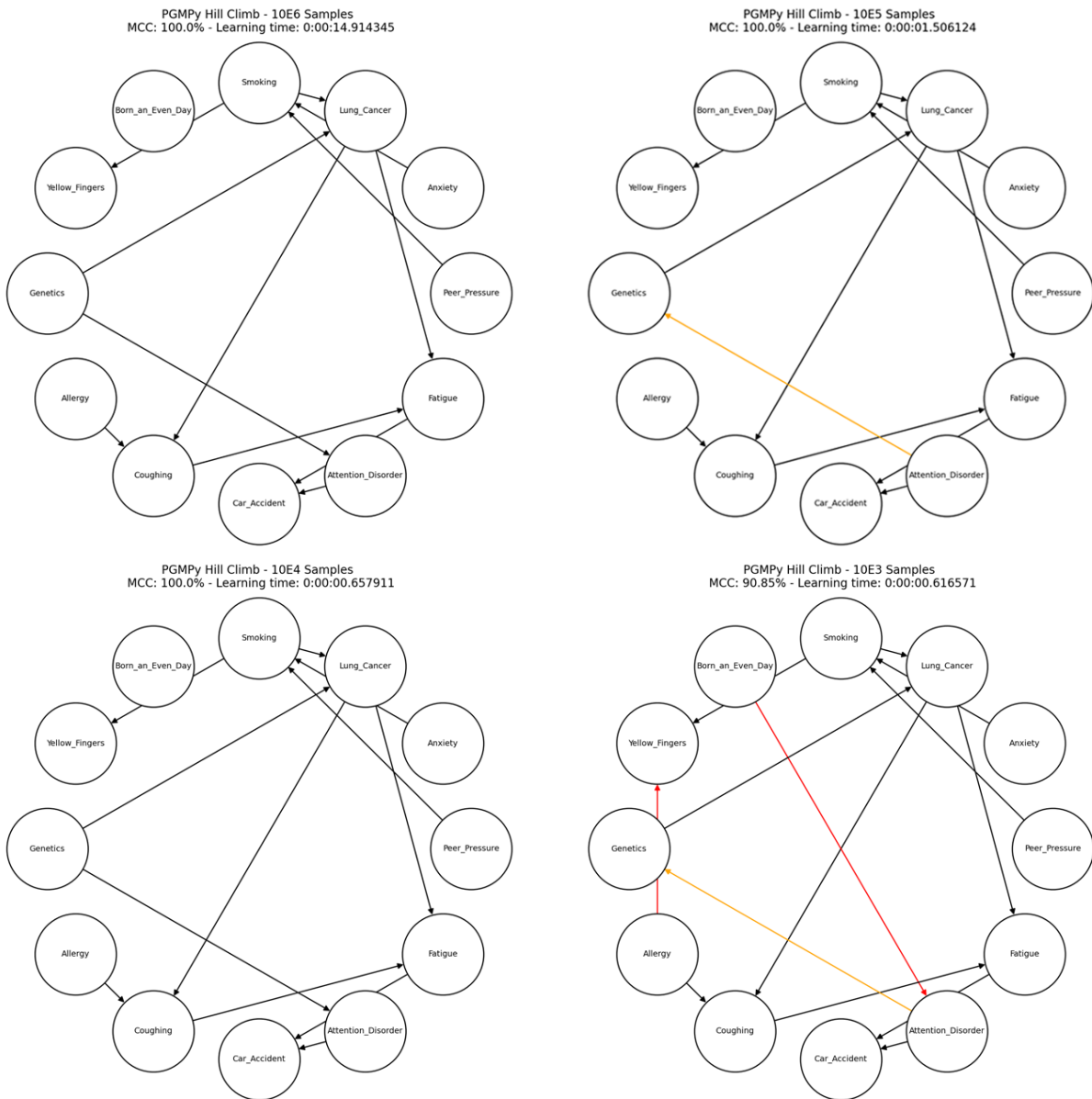
Na Figura 2 estão dispostas as Redes Bayesianas aprendidas por meio do algoritmo Hill Climb. Nota-se que utilizando 10^6 e 10^4 amostras, o modelo encontrado é idêntico ao original. O mesmo não acontece com 10^5 amostras, que possui uma aresta em direção contrária a esperada. Já com 10^3 amostras, foi encontrada a mesma aresta com direção inverta presente na avaliação com 10^5 amostras, e uma aresta espúria.

Esta relação entre a quantidade de amostras e a qualidade do modelo é um problema conhecido no aprendizado estrutural de Redes Bayesianas, pois o modelo é aprendido de acordo com as relações contidas nos dados. Dessa forma, o conjunto de dados com 10^4 amostras continha todas as relações necessárias para aprender o modelo idêntico ao original, já com 10^5 e 10^3 amostras isto não ocorreu.

Nº de Amostras	TP	TN	FP	FN
10^6	65%	21%	7%	7%
10^5	65%	21%	7%	7%
10^4	65%	21%	7%	7%
10^3	69%	17%	11%	3%

Tabela 1 – Comparação do erro de inferência entre estruturas aprendidas utilizando o algoritmo de Hill Climb. TP = Positivos Verdadeiros; TN = Negativos Verdadeiros; FP = Falsos Positivos (Erro de Tipo I); FN = Falsos Negativos (Erro de Tipo II).

Figura 2 – Rede Lucas0 com Algoritmo Hill Climb. No canto superior esquerdo, está a rede aprendida com conjunto de dados contendo 10^6 amostras. No canto superior direito, com 10^5 amostras. Canto inferior esquerdo, 10^4 amostras. Canto inferior direito, 10^3 amostras. Arestas em preto são aquelas que possuem a mesma direção que no modelo original. Arestas em amarelo estão com direção invertida em relação ao modelo original. Em vermelho, estão arestas inexistentes no modelo original.



Outra forma de se avaliar a qualidade do modelo, além da comparação do modelo estrutural, é por meio da qualidade da inferência. Para tal, foi separado um conjunto de dados de validação, não utilizado para o treinamento, contendo 10^3 amostras, e foram medidas a quantidade de previsões corretas para a variável-objetivo (*lung_cancer*), bem como os erros de Tipo I e Tipo II. Estas informações estão expostas na Tabela 1.

Diferentemente do que ocorreu no modelo estrutural, em que houve diferenças entre quase todos os modelos aprendidos, a qualidade da inferência é semelhante entre todos os modelos, sendo que os modelos aprendidos com 10^6 , 10^5 e 10^4 possuem desempenho idêntico e com 10^3 amostras, um desempenho levemente inferior.

O tempo de aprendizado utilizando Hill Climb é pequeno, demorando no máximo 15 segundos para o conjunto de dados com 10^6 amostras, e aproximadamente 1 segundo para todos os outros casos. Em contrapartida, caso não tenhamos o modelo de referência torna-se impossível avaliar a qualidade do modelo pois não há nenhuma medida de credibilidade fornecida pelo algoritmo Hill Climb.

Em sequência, foi realizada a mesma avaliação, utilizando o algoritmo com MCMC proposto neste trabalho. As análises do modelo estrutural estão nas Figuras 3, 4, 5 e 6, e a avaliação da inferência está na Tabela 2.

Figura 3 – Rede Lucas0 com Algoritmo utilizando MCMC, e 10^6 amostras. À esquerda está o modelo estrutural. Arestas em preto são aquelas que possuem a mesma direção que no modelo original. Arestas em amarelo estão com direção invertida em relação ao modelo original. Em vermelho, estão arestas inexistentes no modelo original. À direita estão os intervalos de credibilidade de algumas arestas relevantes.

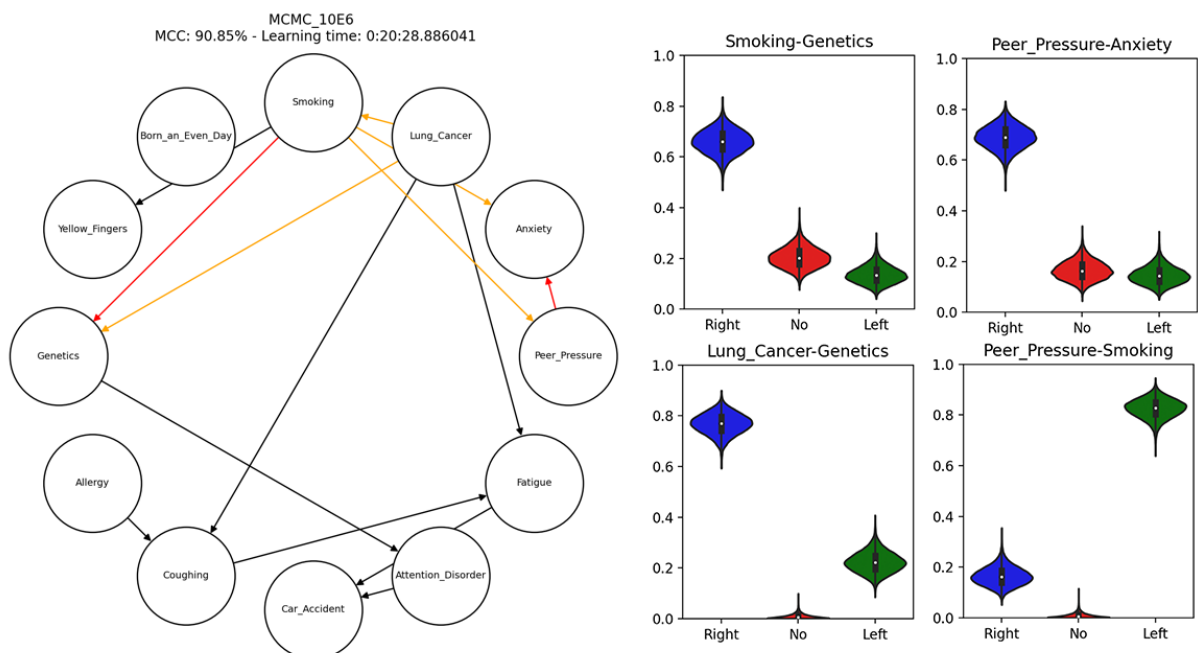


Figura 4 – Rede Lucas0 com Algoritmo utilizando MCMC, e 10^5 amostras. À esquerda está o modelo estrutural. Arestas em preto são aquelas que possuem a mesma direção que no modelo original. Arestas em amarelo estão com direção invertida em relação ao modelo original. Em vermelho, estão arestas inexistentes no modelo original. Em cinza estão arestas do modelo original, mas ausentes nos modelos aprendidos. À direita estão os intervalos de credibilidade de algumas arestas relevantes.

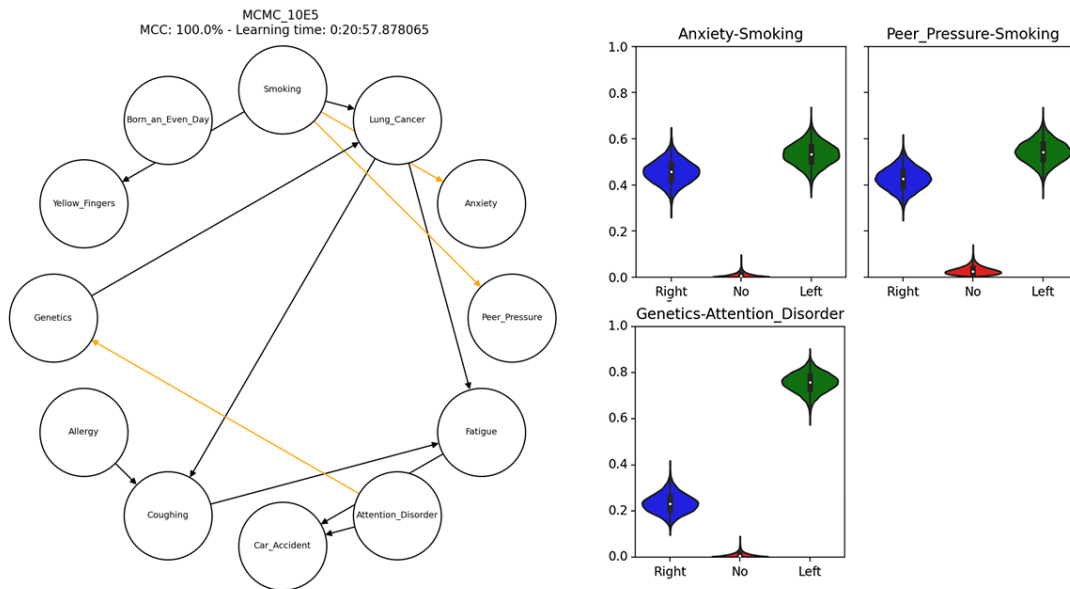


Figura 5 – Rede Lucas0 com Algoritmo utilizando MCMC, e 10^4 amostras. À esquerda está o modelo estrutural. Arestas em preto são aquelas que possuem a mesma direção que no modelo original. Arestas em amarelo estão com direção invertida em relação ao modelo original. Em vermelho, estão arestas inexistentes no modelo original. Em cinza estão arestas do modelo original, mas ausentes nos modelos aprendidos. À direita estão os intervalos de credibilidade de algumas arestas relevantes.

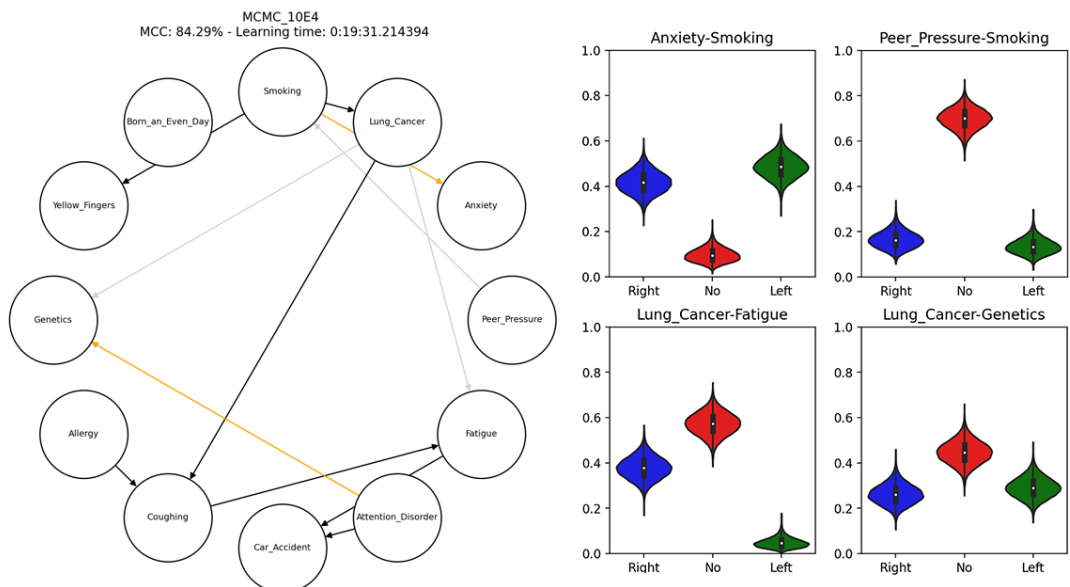
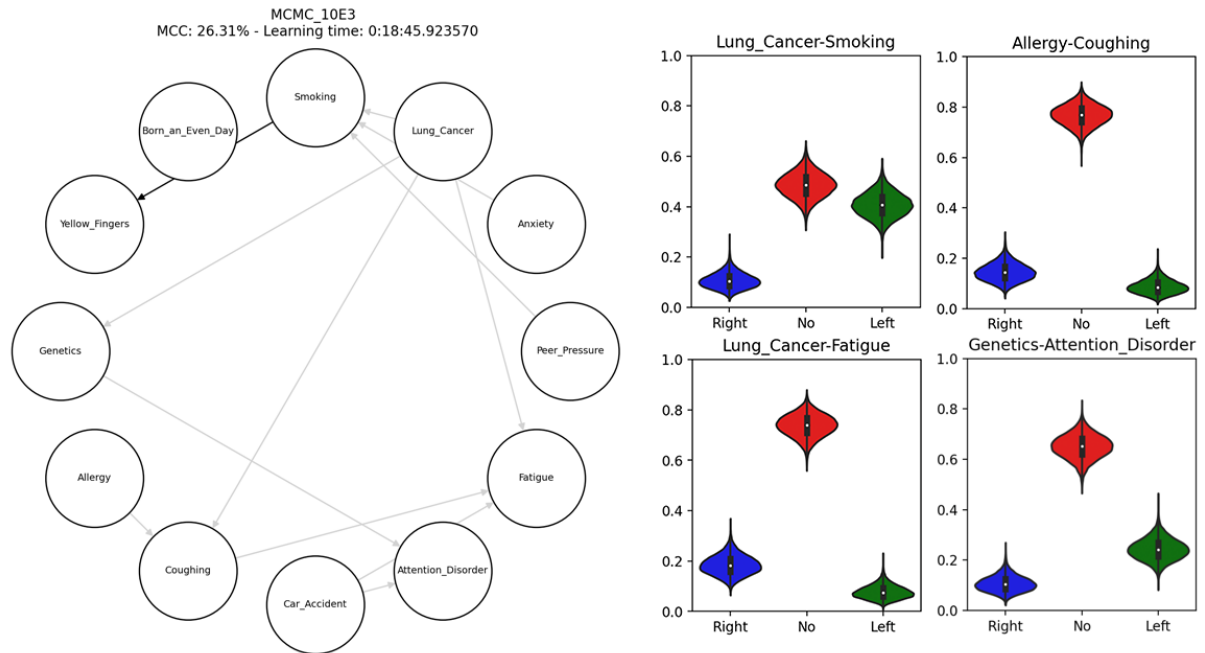


Figura 6 – Rede Lucas0 com Algoritmo utilizando MCMC, e 10^3 amostras. À esquerda está o modelo estrutural. Arestas em preto são aquelas que possuem a mesma direção que no modelo original. Arestas em amarelo estão com direção invertida em relação ao modelo original. Em vermelho, estão arestas inexistentes no modelo original. Em cinza estão arestas do modelo original, mas ausentes nos modelos aprendidos. À direita estão os intervalos de credibilidade de algumas arestas relevantes.



Num. of Samples	TP	TN	FP	FN
10^6	65%	21%	7%	7%
10^5	65%	21%	7%	7%
10^4	68%	17%	10%	5%
10^3	72%	0%	28%	0%

Tabela 2 – Comparação do erro de inferência entre estruturas aprendidas utilizando o algoritmo com MCMC. TP = Positivos Verdadeiros; TN = Negativos Verdadeiros; FP = Falsos Positivos (Erro de Tipo I); FN = Falsos Negativos (Erro de Tipo II).

4.2 Preprocessamento dos Dados Experimentais

Sinais de eletromiografia de superfície são formados por uma série de impulsos de alta frequência obtidos da atividade elétrica produzido pelos músculos. Um exemplo é apresentado na Figura 7. A amplitude dos sinais de EMG reflete a ativação conjunta de diversos neurônios, contudo compreender a relação entre eles não é simples. Dessa forma, é indicado o uso de metodologias de preprocessamento dos sinais objetivando realçar as características que se desejam analisar (TURPIN; URIAC; DALLEAU, 2021).

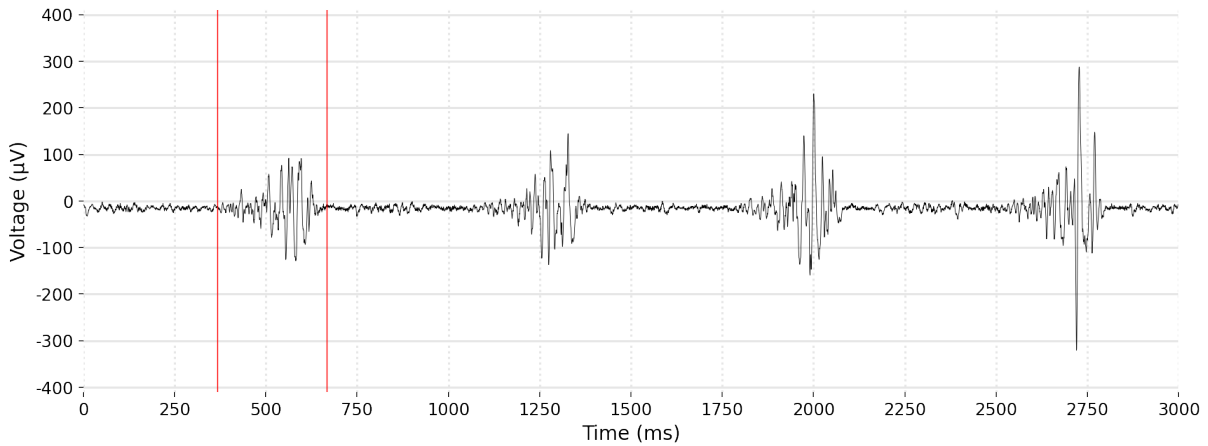


Figura 7 – Sinal de EMG antes do pré-processamento, produzido pelo músculo *Vastus Medialis*, do Indivíduo 9 do *Conjunto de Dados 2*, durante os três primeiros segundos da sessão. A primeira ativação está delimitada por marcadores vermelhos. Durante a ativação é perceptível picos positivos e negativos, simétricos em torno do eixo X. Elaborado pelo autor.

Durante a coleta, os sinais de EMG foram filtrados por um Filtro *Butterworth*. O primeiro passo do pré-processamento, buscando realçar os momentos da ativação, foi o cálculo da envoltória por meio da Transformada de Hilbert. Esta transformada não afeta componentes DC, e gera um atraso de 90° na fase. Formalmente, a transformada de Hilbert $H\{u\}$ de um sinal u pode ser expressa em termos de uma transformada de Fourier $F\{u\}$ como (PURVES, 2014):

$$F\{H\{u\}\}(\omega) = \sigma_H(\omega) \cdot F(u)(\omega) \quad (4.1)$$

onde,

$$\sigma_H = \begin{cases} i & \text{para } \omega < 0 \\ 0 & \text{para } \omega = 0 \\ -i & \text{para } \omega > 0 \end{cases} \quad (4.2)$$

sendo $i = \sqrt{-1}$. Portanto, aplicamos a Transformada de Hilbert ao multiplicar todas as frequências negativas por i e as frequências positivas por $-i$, deixando quaisquer componentes DC inalteradas.

Ainda que a envoltória tenha diminuído a frequência do sinal, ele ainda pode possuir componentes de alta frequência que, no segundo passo do pré-processamento, serão removidas com um Filtro de Savitzky-Golay (S-G). O filtro S-G é um filtro digital de média-móvel, capaz de suavizar sinais sem distorcer sua tendência (ACHARYA *et al.*,

2016). Dado um conjunto de pontos $\{x_j, y_j\}$, $j = 1, \dots, n$, onde x_j é uma variável independente e y_j é o valor observado, o sinal de saída de um filtro S-G Y_j é (ACHARYA *et al.*, 2016):

$$Y_j = \sum_{i=\frac{1-m}{2}}^{\frac{m-1}{2}} C_i y_{j+i}, \quad \frac{m-1}{2} \leq j \leq n - \frac{m-1}{2} \quad (4.3)$$

onde C_i , $i = 1, \dots, m$ é o conjunto de coeficientes de convolução que podem ser encontrados em tabelas ou calculados analiticamente (ACHARYA *et al.*, 2016). Neste trabalho, foi utilizado $m = 7$.

Por fim, todos os sinais de EMG foram reamostrados a uma taxa de 240 Hz utilizando um filtro FIR polifásico para o qual os coeficientes foram calculados por meio de uma Janela de Kaiser. Um diagrama contendo todos os passos de tratamento dos sinais de EMG é apresentado na Figura 8.

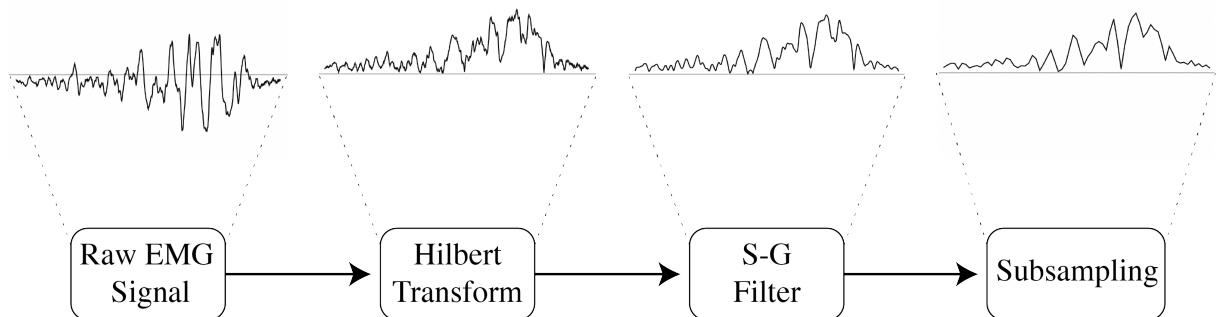


Figura 8 – Diagrama mostrando os passos de pré-processamento dos sinais de EMG, e os resultados de cada fase, utilizando a primeira ativação do músculo *Vastus Medialis*, do Indivíduo 9 do *Conjunto de Dados 2*. Elaborado pelo autor.

Depois que os sinais de EMG foram pré-processados e a taxa de amostragem entre os sinais de EMG e cinemática foram equalizados, todos os sinais de um mesmo indivíduo puderam ser combinados em uma mesma estrutura de dados. Por fim, todos eles tiveram suas componentes DC removidas e amplitudes normalizadas.

Os modelos desenvolvidos foram baseados no ciclo da marcha do indivíduo. Por meio do algoritmo de detecção de picos desenvolvido por Negri e Vestri (2017) e os algoritmos propostos por Zeni, Richards e Higginson (2008) e Fellin, Manal e Davis (2010) foi possível determinar os seguintes eventos da marcha:

- O *contato inicial* foi identificado pela extensão máxima do joelho;
- A *acomodação intermediária* foi identificada pela máxima flexão do joelho após o contato inicial;

- O *impulso* foi determinado pelo segundo pico de extensão do joelho;
- A *oscilação intermediária* foi determinada pela máxima extensão do joelho após o impulso.

Um exemplo dos sinais de cinemática, com cada evento da marcha identificados, é exibido na Figura 9.

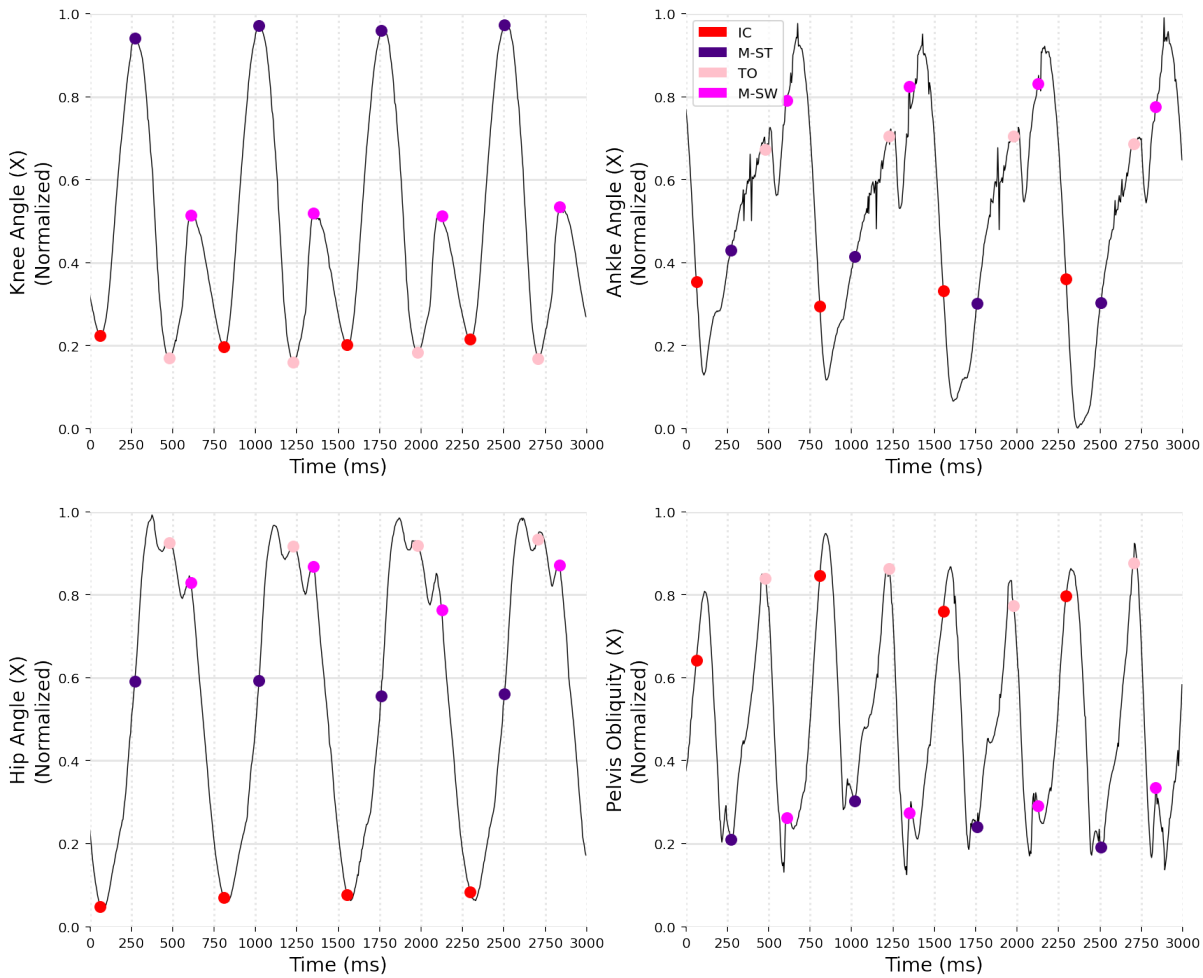


Figura 9 – Exemplo de sinais cinemáticos do Indivíduo 9, do *Conjunto de Dados 2*. Os sinais cinemáticos são *quasi-periódicos*, e possuem frequência mais baixa que sinais de EMG. Cada marcador (ponto) sobre o gráfico indica um evento do ciclo da marcha. IC: Contato Inicial; M-ST: Acomodação Intermediária; TO: Impulso; M-SW: Oscilação Intermediária. Gráfico esquerdo superior: ângulo do joelho. Direito superior: ângulo do calcanhar. Esquerdo inferior: ângulo do quadril. Direito inferior: obliquidade da pelve. Todos os sinais são do plano sagital. Elaborado pelo autor.

Após a detecção dos eventos do ciclo da marcha, o passo final para o aprendizado de Redes Bayesianas Dinâmicas é dividir os sinais em quatro partes, cada uma contendo os dados entre dois eventos sequenciais. Por exemplo, a primeira parte contém os dados

entre o Contato Inicial e a Acomodação Intermediária, para todos os ciclos. Desta forma, cada indivíduo possui agora 4 conjuntos de dados, cada um contendo 29 colunas (28 sinais e a fase da marcha). Um diagrama completo do pré-processamento é exibido na Figura 10.

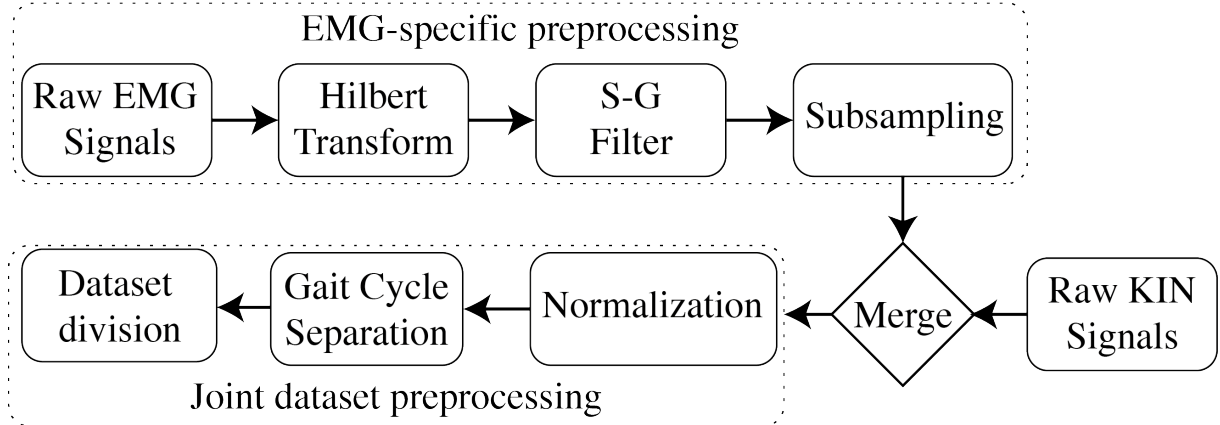


Figura 10 – Diagrama completo do pré-processamento dos dados experimentais. Primeiramente, os sinais de EMG são processados, e então combinados aos sinais cinemáticos (KIN). Finalmente, os dados combinados são utilizados para aprender uma DBN. Elaborado pelo autor.

4.2.1 Modelagem da Interação EMG-Cinemática

Ambos os sinais de EMG e Cinemática possuem comportamentos *quasi-periódico*, com período similar, que pode ser inspecionado visualmente na Figura 11. Ambos os sinais estão normalizados pela média e variância, podendo ser comparados na mesma escala. A primeira análise de interação conduzida foi a avaliação das dependências por meio de Informação Mútua (MI). Ao contrário da correlação, MI pode identificar relações lineares e não-lineares entre sinais (COVER; THOMAS, 1991).

A Informação Mútua entre dois sinais X e Y é dada por

$$MI(X; Y) = \sum_Y \sum_X p(x, y) \ln \frac{p(x, y)}{p(x)p(y)} \quad (4.4)$$

Entretanto, como a MI calcula a informação compartilhada entre duas variáveis, o valor é relativo à informação total contida nestas variáveis, consequentemente impedindo que MI possa ser comparada entre sinais diferentes. A solução para tal problema é o uso da Informação Mútua Normalizada (NMI), que é limitada e comparável entre conjunto de dados (BINGHAM *et al.*, 2017):

$$NMI(X; Y) = \frac{MI(X; Y)}{\min(H(X), H(Y))} \quad (4.5)$$

sendo $H(X)$ a entropia de X , calculada por

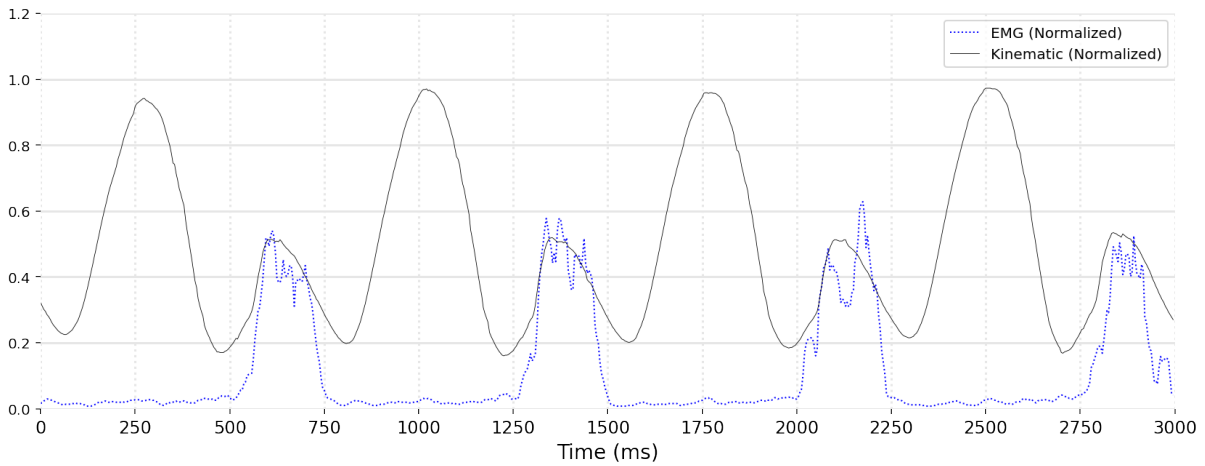


Figura 11 – Comparação visual entre as ativações musculares do músculo *Gastrocnemius* e o ângulo do joelho no plano sagital. Ambos os sinais estão normalizados, e provenientes do Indivíduo 9, do *Conjunto de Dados 2* durante os três primeiros segundos da marcha. Elaborado pelo autor.

$$H(X) = \sum_X p(x) \ln(p(x)) \quad (4.6)$$

A interação entre ativações musculares e as respostas cinemáticas podem ser vistas como causais, dado que os impulsos mioelétricos são biologicamente responsáveis pelo movimento. Desta forma, uma interação atrasada entre EMG e Cinemática é esperada. A informação mútua aplicada a sinais com atraso, conhecida como Informação Mútua Atrasada (DMI) é útil para quantificar tais atrasos. A DMI entre X e Y , com um atraso arbitrário k sobre Y , é calculada por:

$$DMI(X; Y, k) = NMI(X; Y_{t-k}) \quad (4.7)$$

O atraso k^* para a interação $Y \xrightarrow{k^*} X$ pode ser encontrado ao avaliar o k que produz DMI máxima em:

$$k^* = \operatorname{argmax}_k DMI(X; Y, k) \quad (4.8)$$

Por meio deste arcabouço de Teoria da Informação, é possível detectar relações de sinais dois-a-dois entre eletromiografia e cinemática. Estas medidas permitem verificar se relações detectadas – ou não – pelo aprendizado estrutural de Redes Bayesianas estão efetivamente presentes nos sinais.

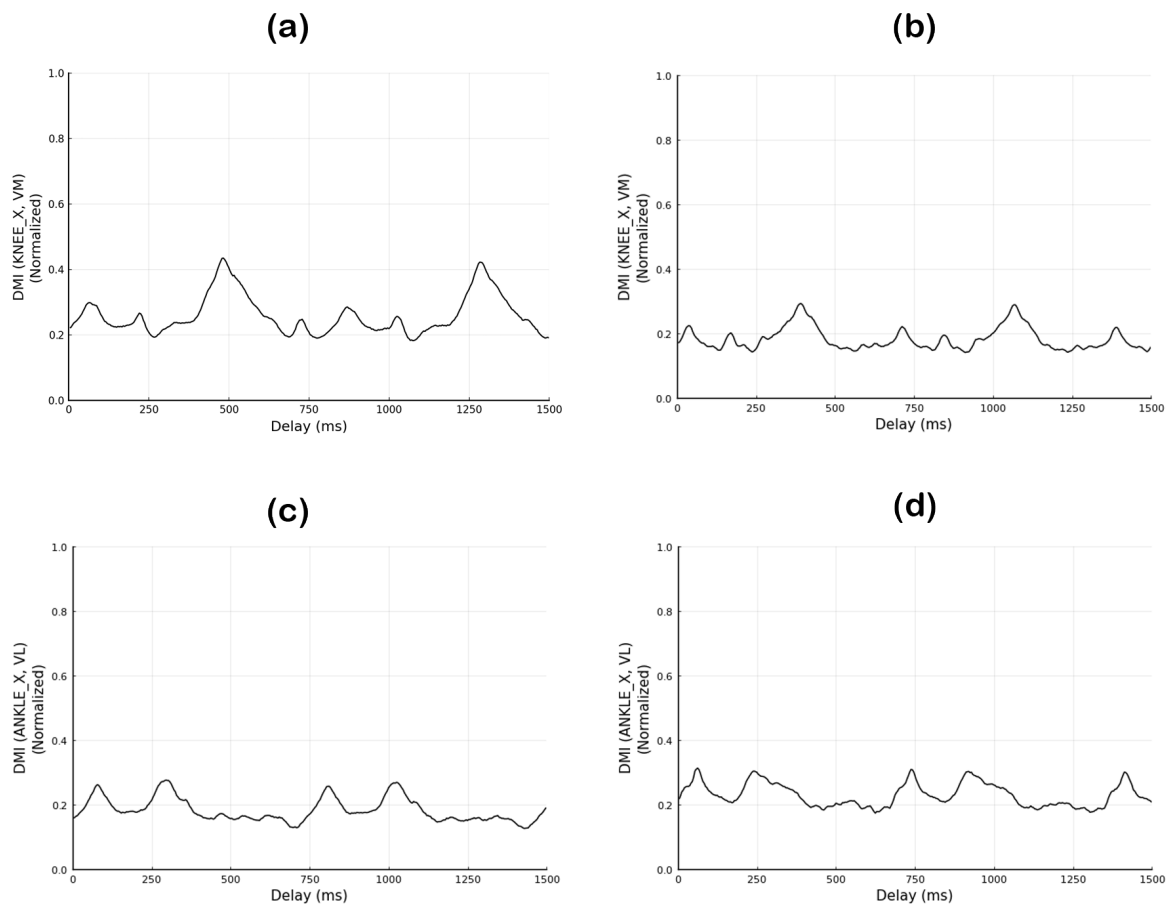


Figura 12 – Informação Mútua Atrasada Normalizada entre as ativações mioelétricas e cinemáticas de um indivíduo saudável (Indivíduo 1 em (a) e (c); Indivíduo 22 em (b) e (d)). (a) e (b) *Vastus medialis* (VM) e ângulo do joelho sobre o plano sagital; (c) e (d) *Vastus lateralis* (VL) e ângulo do tornozelo sobre o plano sagital. Elaborado pelo autor.

4.3 Análise Exploratória dos Dados Experimentais

4.3.1 Análise utilizando Teoria da Informação

Depois que os dados EMG e Cinemáticos foram devidamente preprocessados, a primeira análise realizada foi a DMI Normalizada entre sinais cinemáticos e de EMG, com o objetivo de detectar a interação atrasada entre a ativação muscular e o movimento causado por ela. A figura 12 contém quatro dessas medidas amostradas de dois indivíduos saudáveis: os gráficos na primeira linha são as informações mútuas atrasadas entre o *Vastus medialis* (VM) e o ângulo do joelho sobre o plano sagital (KNEE_X) e os da segunda linha são o DMI entre *Vastus lateralis* (VL) e o ângulo do tornozelo sobre o plano sagital (ANKLE_X).

O padrão do DMI em cada uma das linhas é semelhante. Ambos 12.(a) e 12.(b)

têm um pico de MI com pequenos picos precedendo-os, e 12.(c) e 12.(d) possuem dois picos próximos um do outro e um período de estabilidade após eles. Tais padrões foram encontrados em outros indivíduos e em outros pares de sinais cinemáticos e eletromiográficos. Tais semelhanças nas interações entre a cinemática e a eletromiografia em diferentes indivíduos são uma pista de que, embora haja alguma variabilidade entre os indivíduos, pode haver semelhanças detectáveis nos padrões de ativação muscular entre os indivíduos.

Outro objetivo da análise DMI foi descobrir sinergias entre sinais mioelétricos e cinemáticos. Portanto, um DMI normalizado entre pares de sinais EMG (Figura 13.(a) e 13.(b)) e entre pares de sinais cinemáticos (Figura 13.(c) e 13.(d)) foi calculado.

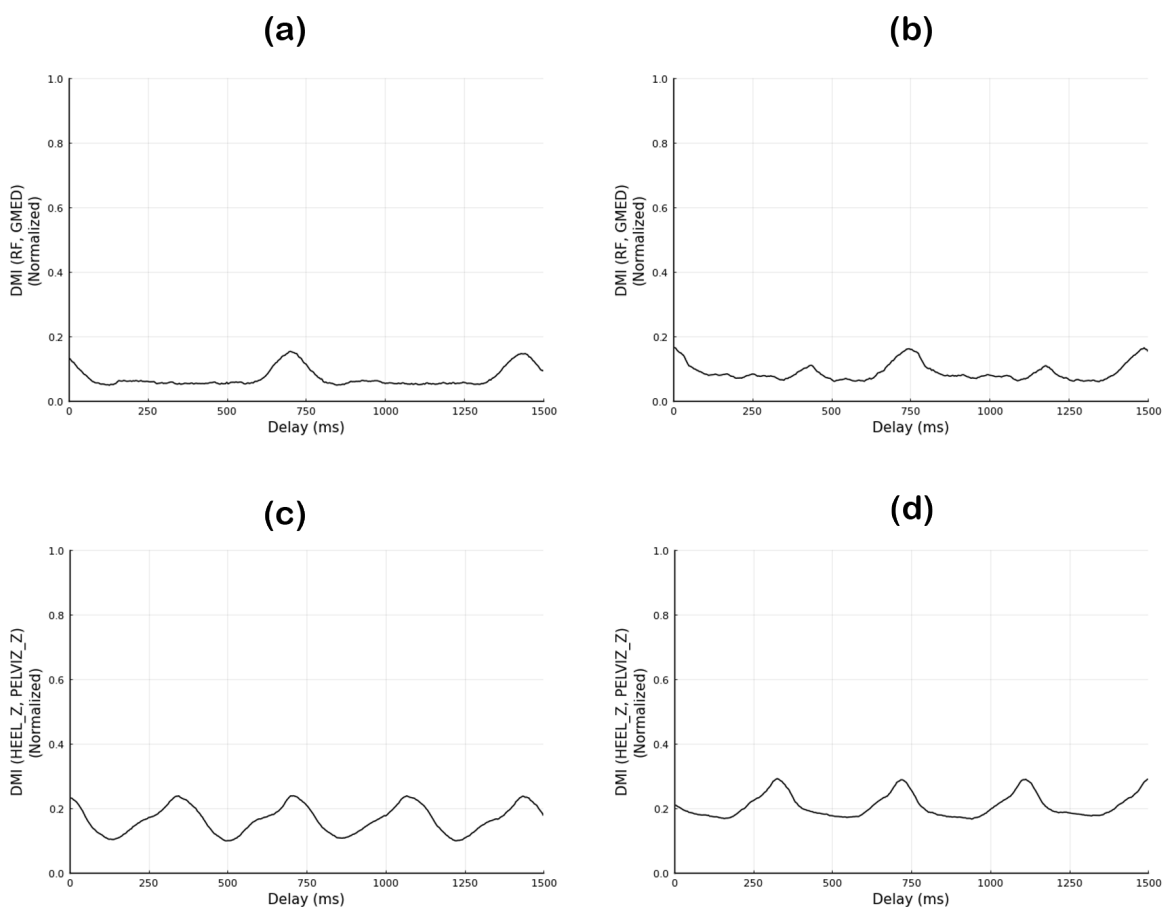


Figura 13 – Informação Mútua Atrasada Normalizada entre sinais mioelétricos e entre sinais cinemáticos de um indivíduo saudável (Indivíduo 1 em (a) e (c); Indivíduo 22 em (b) e (d)). (a) e (b) *Rectus femoris* (RF) e *Gluteus medius* (GMED); (c) e (d) Posição do Calcânhar no plano transversal e rotação da pelve no plano transversal. Elaborado pelo autor.

Na análise entre sinais do mesmo tipo, os padrões de Informação Mútua continuam a ocorrer. As ativações do *Rectus femoris* (RF) e do *Gluteus medius* (GMED), apresentadas na Figura 13.(a) e 13.(b), perdem a informação mútua quando atrasados, mas cerca

de 750ms depois apresentam outro pico de MI, ambos com período semelhante. A DMI dos ângulos do joelho e da pelve no plano transverso, para os mesmos indivíduos, também tem comportamento *quasi-periódico* semelhante.

Embora as DMIs sejam um bom indicador da interação dos sinais EMG e cinemáticos entre si, elas são uma medição em pares. Portanto, após tais resultados, Informações Mútuas Condicionais Atrasadas (DCMI) normalizadas foram obtidas entre alguns conjuntos de três sinais. Um exemplo dessas medidas, obtido de quatro indivíduos saudáveis diferentes, é exibido na Figura 14. Agora, como estamos extraindo a interação conjunta de três sinais, a representação é em 2D, onde cada um dos eixos X e Y representa um atraso aplicado a um dos sinais enquanto o terceiro permanece estacionário.

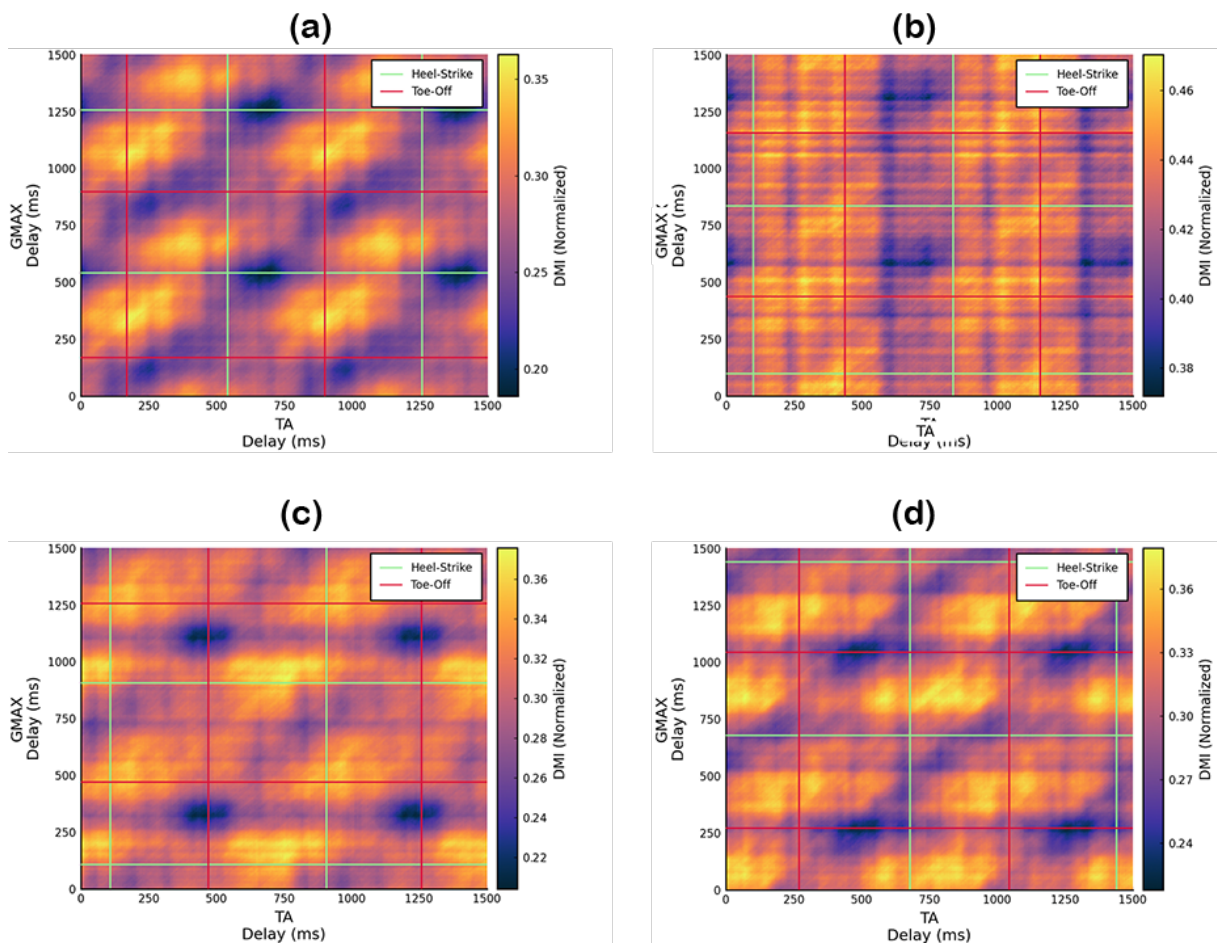


Figura 14 – Informação Mútua Condicional Normalizada entre as ativações mioelétricas do *Tibial anterior* (TA) e *Glúteo máximo* (GMAX) dado o Ângulo do Joelho no plano Sagital, para indivíduos saudáveis. Cores mais escuras indicam um CMI mais baixo e cores mais claras mostram um CMI mais alto. Escalas ajustadas para melhor visualização. (a) Indivíduo 1; (b) Indivíduo 22; (c) Indivíduo 19; (d) Indivíduo 36. Elaborado pelo autor.

O exemplo mostrado na Figura 14 é a DCMI entre dois EMGs – *Gluteus maximus*

(GMAX) e *Tibialis anterior* (TA) – dado o ângulo do joelho no plano sagital. Do ponto de vista biomecânico, ambos os músculos têm efeito sobre a posição do joelho, mas ainda não se sabe ao certo em que ponto da marcha cada um é ativado.

Todos os quatro indivíduos mostraram um mapa de CMI semelhante, com uma CMI baixo perto da antidiagonal e um padrão repetitivo de duas áreas de CMI mais altas próximas uma da outra. Ter uma CMI baixo perto da antidiagonal indica que eles compartilham poucas informações sobre o ângulo do joelho no mesmo tempo, mas quando um ou ambos os sinais são atrasados com tempos diferentes, a CMI aumenta, indicando que eles compartilham informações sobre a posição do joelho em conjunto o plano sagital. Isso provavelmente indica um padrão de ativação alternado entre tais músculos, conforme também indicado por [Vaughan, Davis e O'Connor \(1992\)](#).

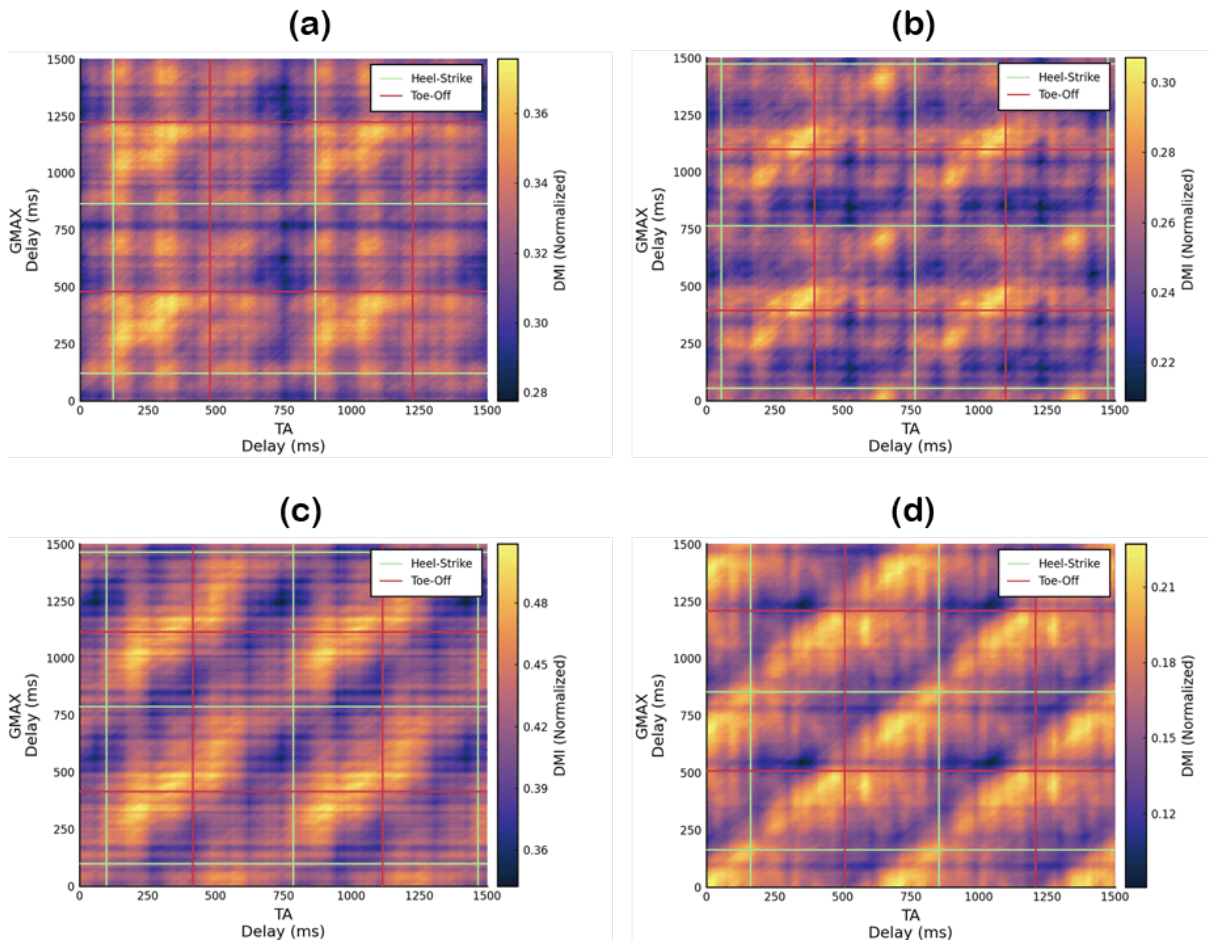


Figura 15 – Informação Mútua Condicional Normalizada entre as ativações mioelétricas do *Tibial anterior* (TA) e *Glúteo máximo* (GMAX) dado o Ângulo do Joelho no plano Sagital, para indivíduos com Síndrome da Dor Patelofemoral. Cores mais escuras indicam uma NCMi mais baixa e cores mais claras mostram uma NCMi mais alta. Escalas ajustadas para melhor visualização. (a) Indivíduo 51; (b) Indivíduo 57; (c) Indivíduo 61; (d) Indivíduo 64. Elaborado pelo autor.

A mesma análise realizada anteriormente também foi feita em sinais de indivíduos com síndrome da dor patelofemoral (PFP), a fim de procurar diferenças nas interações EMG-cinemática em indivíduos não saudáveis. A figura 15 mostra a análise DCMI entre GMAX e TA dado o ângulo do joelho no plano sagital para indivíduos com PFP.

Assim como a análise anterior, os quatro mapas de CMI na Figura 15 eram semelhantes entre si, mas com características diferentes daqueles baseados em indivíduos saudáveis. Já as antidiagonais são uma das áreas com maior CMI, indicando que ambos os músculos possuem informação do ângulo do joelho dentro do mesmo instante de tempo, e quando são aplicados atrasos, essa informação compartilhada diminui.

4.3.2 Análise utilizando Redes Bayesianas

A análise de informação mútua foi um bom indicativo de que existem algumas relações subjacentes entre dados cinemáticos e eletromiográficos que podem ser insensíveis à variabilidade entre indivíduos, e que também podem permitir a classificação de indivíduos saudáveis e não saudáveis. No entanto, a MI é limitada a uma descoberta de interação em pares sem direção, e a CMI só pode verificar interações de, no máximo, três variáveis.

Para criar uma representação visual de dependências multivariadas, uma estrutura de Rede Bayesiana foi aprendida com base nos dados EMG de indivíduos saudáveis, usando um algoritmo de Hill-Climb para a seleção do modelo. Quatro BNs aprendidas de dados de EMG de indivíduos saudáveis são mostradas juntas na Figura 16.(a).

As setas em uma Rede Bayesiana indicam as dependências probabilísticas entre as variáveis no mesmo instante de tempo, portanto a direção da seta não indica dependências causais. Desta forma, pode-se dizer que a relação entre VL e VM é consistente em todas essas BNs, embora a direção do indivíduo 4 (azul) seja oposta às demais. Duas outras dependências aparecem em todos os quatro BNs na Figura 16: GASTRO \leftrightarrow TA e VL \leftrightarrow GMED.

Outra característica comum em todas essas redes é a existência de nós cluster, ou seja, nós são pais de muitos outros, como VL, VM e GASTRO. Por outro lado, nodos como TA, BF, RF, GMED e GMAX possuem no máximo um descendente.

Mais BNs foram então aprendidos para dados EMG coletados de indivíduos com PFP, sendo quatro dessas redes exibidas na Figura 16.(b). Ao inspecionar as dependências nos gráficos e comparar com indivíduos saudáveis, espera-se detectar diferenças e semelhanças entre as sinergias musculares em PFP e indivíduos saudáveis.

Semelhante às BNs em indivíduos saudáveis, o nó VM atua como um cluster, possuindo pelo menos três dependências em todas as redes. TA, RF, BF e GMED também apresentam pouca interação com outros nós. No entanto, no indivíduo 64 (magenta), o GMAX atua como um cluster, que não pode ser visto em nenhuma das outras BNs.

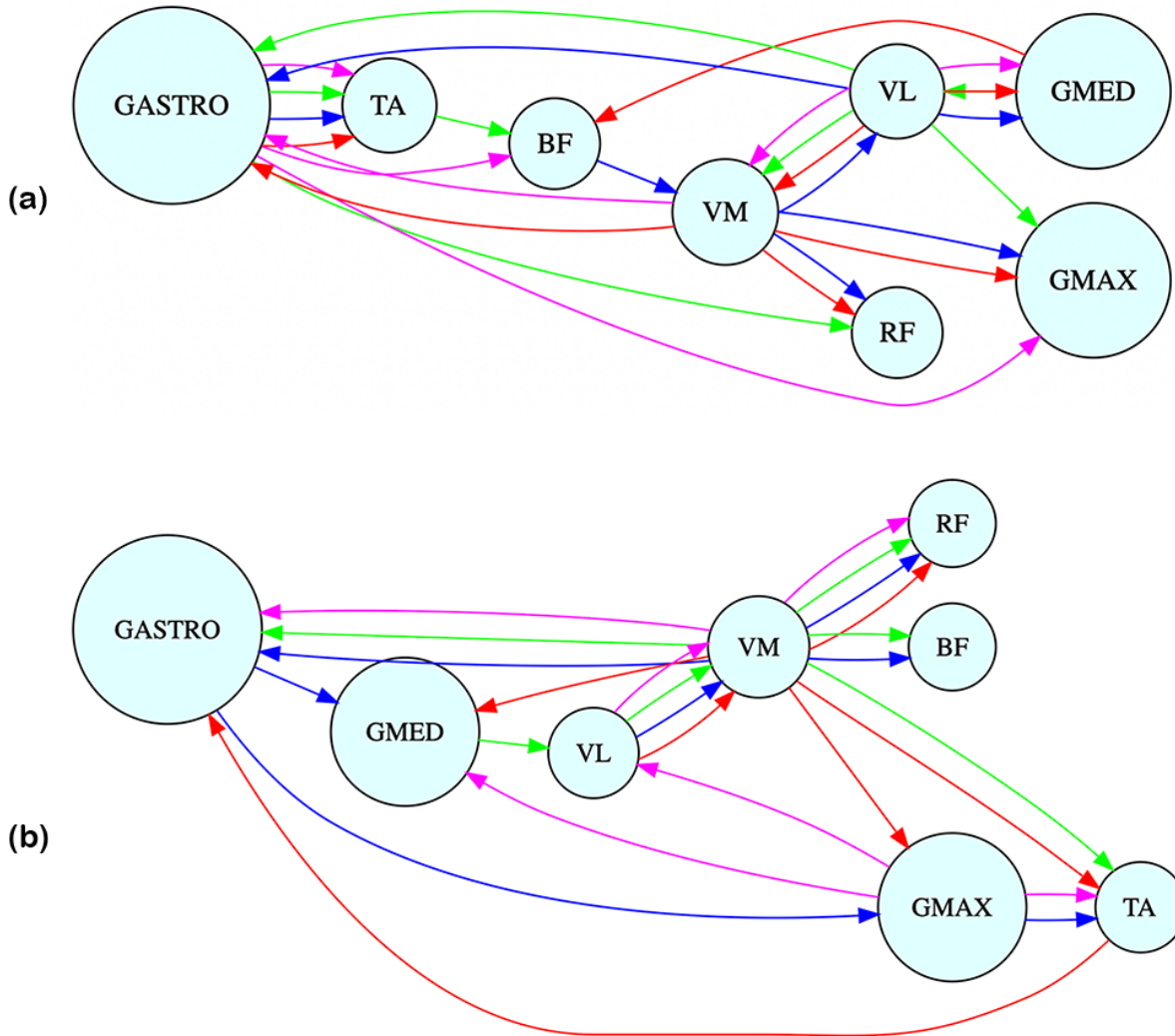


Figura 16 – Redes Bayesianas com relações de EMG em indivíduos saudáveis (a) e indivíduos com PFP (b). Cores: (a) Vermelho: Indivíduo 1; Azul: Indivíduo 4; Verde: Indivíduo 10; Magenta: Indivíduo 40. (b) Vermelho: Indivíduo 49; Azul: Indivíduo 53; Verde: Indivíduo 61; Magenta: Indivíduo 64. Elaborado pelo autor.

A fim de unificar todas as Redes Bayesianas aprendidas para cada um dos indivíduos saudáveis e não saudáveis, a probabilidade de ocorrência de cada uma das arestas foi calculada e as arestas mais comuns foram selecionadas de acordo com um limiar proposto por [Gross et al. \(2019\)](#). As BNs unificadas para indivíduos saudáveis e não saudáveis são mostradas, respectivamente, nas Figuras 17.(a) e 17.(b).

A diferença mais notável entre as duas redes é a quantidade de arestas, que é menor na de indivíduos não saudáveis. Isso pode ser explicado pelo limiar, que é inversamente proporcional ao número de redes que estão sendo combinadas: como o número de indivíduos não saudáveis é 25% menor, o limite aplicado para combinar essas redes é aproximadamente 12,5% maior. O menor número de indivíduos não saudáveis também

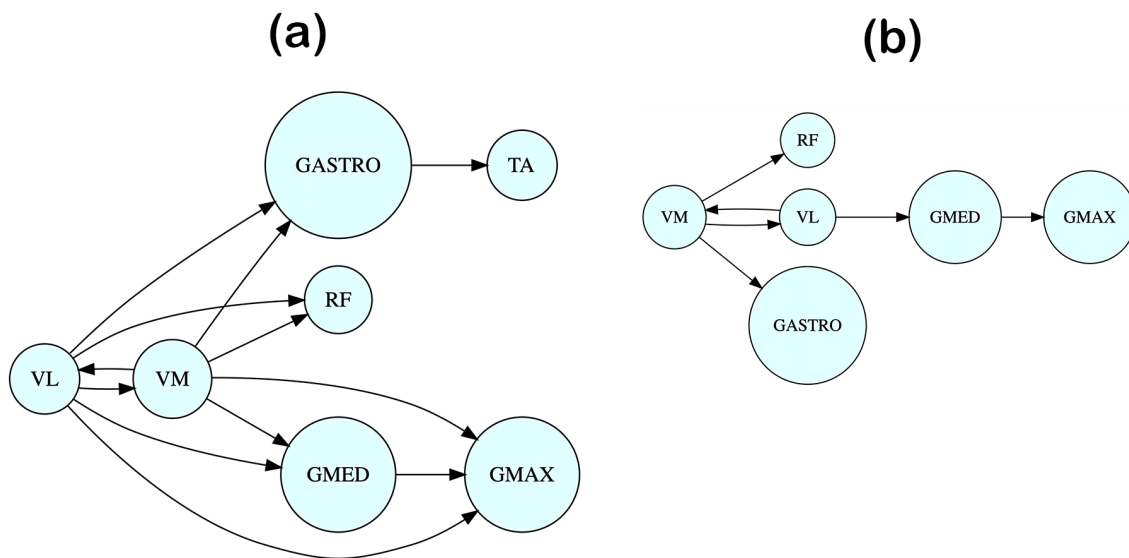


Figura 17 – Redes Bayesianas combinadas com relações de EMG. (a) Indivíduos saudáveis; (b) Indivíduos com dor patelofemoral. Elaborado pelo autor.

diminui a variabilidade entre as estruturas aprendidas, o que contribui para essa diferença no número de arestas.

Além da diferença no número de arestas, ambas as estruturas possuem relações semelhantes, de forma que todas as dependências encontradas em indivíduos não saudáveis também foram encontradas em indivíduos saudáveis. Isso pode indicar que, pelo menos durante o mesmo instante de tempo, a interação entre os músculos não é um bom classificador entre indivíduos saudáveis e com PFP.

Por fim, foram aprendidas duas Redes Bayesianas Dinâmicas com base nos dados de indivíduos saudáveis e não saudáveis, respectivamente mostrados nas Figuras 18.(a) e 18.(b). Agora, as relações entre os músculos foram analisadas em quatro fases da marcha separadamente, a fim de descobrir como os músculos agem em cada fase da marcha e ao longo das fases.

As arestas em DBNs podem indicar relacionamentos contemporâneos e não contemporâneos, que foram representados com setas preenchidas e tracejadas, respectivamente. Também as relações não contemporâneas podem ser consigo mesmas ou com outras variáveis, e foram diferenciadas, respectivamente, pelo uso de linhas retas ou curvas. As DBNs não podem apresentar relações não causais, portanto, se durante a fusão das DBNs a direção de algumas relações não contemporâneas era do futuro para o passado, a direção foi invertida.

As DBNs para indivíduos saudáveis e com PFP não compartilham arestas comuns, provavelmente devido ao aumento do número de variáveis que levam a um crescimento

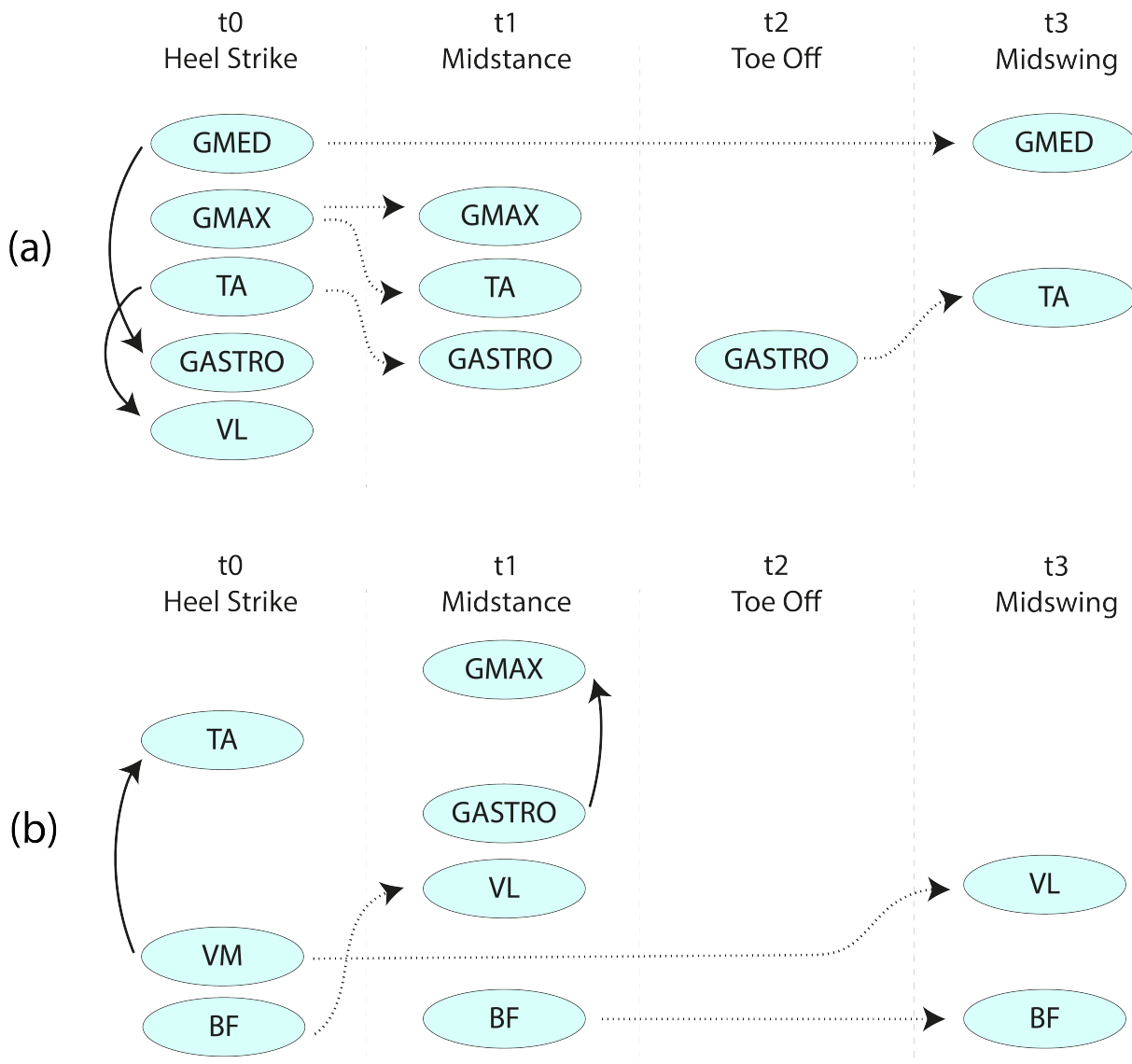


Figura 18 – Redes Bayesianas Dinâmicas combinadas de relações cinemáticas. (a) Indivíduos saudáveis; (b) Indivíduos com dor patelofemoral. Elaborado pelo autor.

superexponencial do número de DAGs possíveis. Entretanto, uma relação interessante pode ser notada em 18.(a): há um padrão alternado na interação $GASTRO \leftrightarrow TA$, em t_0 a t_1 , e t_2 a t_3 , que já foi citado pela literatura (GIULIO *et al.*, 2009) como um papel importante para a manutenção do equilíbrio.

As interações entre t_0 e t_3 devem ser vistas com cautela: a marcha é cíclica e a direção dessa interação pode ser do balanço médio para o impacto do calcanhar. Existem dois exemplos de tais relações: $GMED \leftrightarrow GMED$ em 18.(a) e $VM \leftrightarrow VL$ em 18.(b).

Com a camada DBN de Eletromiografia aprendida, o próximo passo foi criar um mapa de dependência das relações cinemáticas contemporâneas. O mesmo procedimento

para a construção da camada EMG foi seguido, e as Redes Bayesianas combinadas aprendidas a partir dos dados cinemáticos de indivíduos saudáveis e PFP são exibidas na Figura 19.

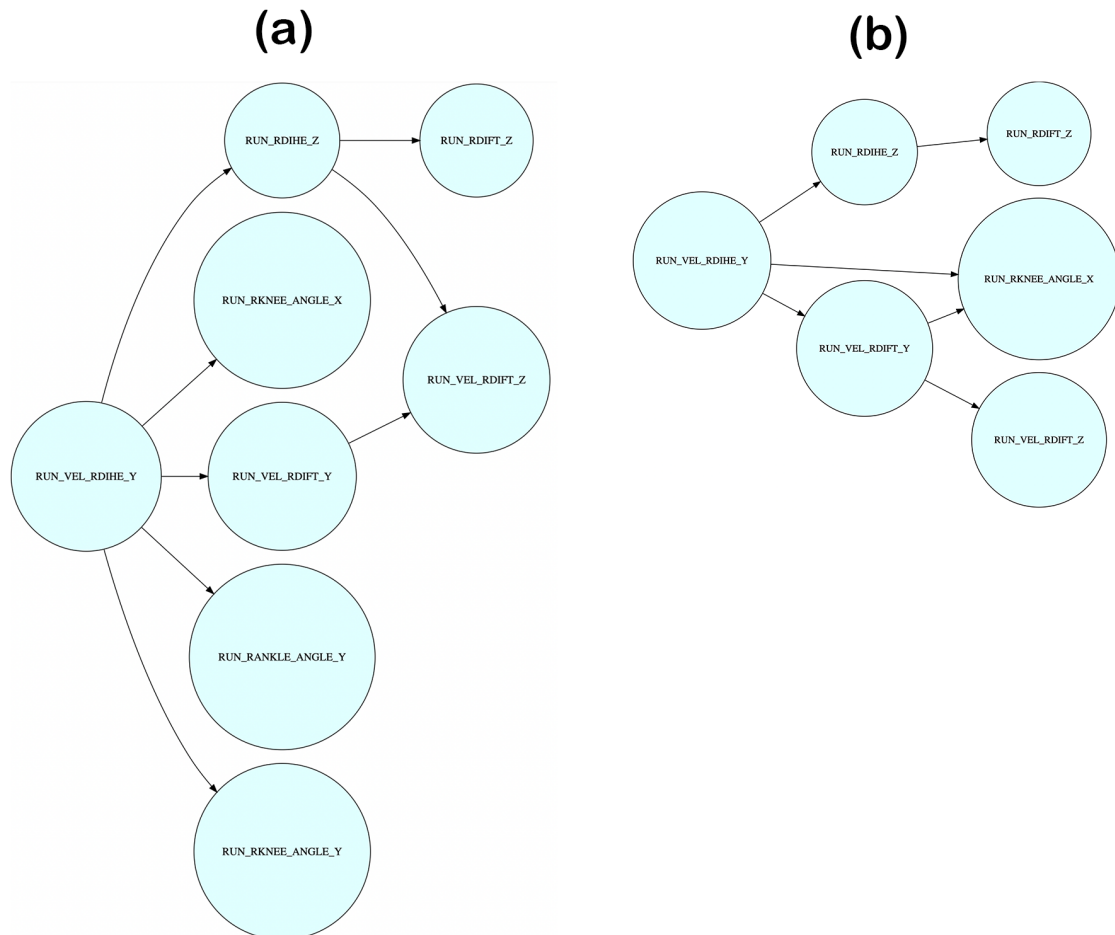


Figura 19 – Redes bayesianas combinadas de relações cinemáticas. (a) Indivíduos saudáveis; (b) Indivíduos com dor patelofemoral. Elaborado pelo autor.

O número de nós nas BNs com dados cinemáticos (20 nós) está mais próximo do número de nós na DBN com dados EMG (32 nós) do que da BN com dados de EMG (8 nós). Surgem então os mesmos problemas de aprendizagem da DBN EMG com dados DBN, mas em menor escala: das 20 variáveis do conjunto de dados, apenas 8 tiveram relações na BN de indivíduos saudáveis e 6 na BN de indivíduos PFP.

Comparando visualmente ambas as estruturas aprendidas, muitas semelhanças são percebidas: quase todas as dependências da rede de indivíduos com PFP estão presentes na de indivíduos saudáveis, sendo a $VEL_RDIFT_Y \rightarrow RKNEE_ANGLE_X$ a única exceção. Ambos têm o mesmo cluster, VEL_RDIHE_Y , que não é descendente de todos os outros nós.

4.3.3 Dificuldades da Análise Exploratória

A detecção de um padrão na função de Informação Mútua Atrasada entre os indivíduos, especialmente entre sinais cinemáticos e EMG, é uma pista de que esses sinais estão relacionados entre si e tal relação pode ser modelada de maneira explicável. Esta informação será crucial para o desenvolvimento de conexões entre ambos em uma arquitetura multicamada.

Tais diferenças entre a Informação Mútua Condicional sobre indivíduos saudáveis e indivíduos com PFP são um indicador de que existem diferenças no acoplamento Cinemático-EMG entre indivíduos saudáveis e indivíduos com Dor Patelofemoral. As relações encontradas na CMI também refletem o entendimento biomecânico de que os músculos *tibial anterior* e *glúteo máximo* estão ambos relacionados ao movimento do joelho, reforçando que o desenvolvimento do modelo de acoplamento EMG-cinemático é possível apesar de variabilidade entre indivíduos.

O aprendizado de BNs e DBNs forneceu mais informações sobre a interação anteriormente revelada pela análise DMI e DCMI sobre as sinergias de eletromiografia que são suportadas por [Vaughan, Davis e O'Connor \(1992\)](#). Os exemplos mais notáveis são a ativação conjunta de VM, VL, BF, RF, GMED e GMAX, e a interação antagonista entre GASTRO e TA ([GIULIO *et al.*, 2009](#)).

A metodologia proposta por [Gross *et al.* \(2019\)](#) para combinar DAGs é útil para gerar um modelo explicável baseado em BNs de diferentes indivíduos, mas os pequenos conjuntos de dados usados atualmente são um desafio para o aprendizado de redes mais robustas. O pequeno número de sujeitos também dificulta a combinação de DBNs, pois todas as variáveis são multiplicadas por 4, diminuindo assim a probabilidade de arestas.

O conjunto de dados cinemáticos precisa ser reduzido para permitir o aprendizado de dependências mais robustas e um DBN, portanto, o próximo objetivo é reduzir o número de variáveis cinemáticas. Isso pode ser obtido com uma análise de informação mútua para detectar e selecionar variáveis cinemáticas que compartilham mais informações com sinais EMG.

Espera-se que usando melhores técnicas de aprendizado de estrutura e perturbação de dados ([GROSS *et al.*, 2019](#)) para aumentar a variabilidade DAG, e reduzindo o número de variáveis na camada cinemática, seja possível aprender redes com relacionamentos mais robustos e explicáveis.

5 CONCLUSÃO

Esta pesquisa apresenta uma abordagem para o aprendizado estrutural de redes Bayesianas utilizando MCMC. Com esta metodologia é possível aprender Redes Bayesianas com menor quantidade de dados, além de fornecer mais informações a respeito da credibilidade do modelo.

A análise com dados sintéticos apresentou desempenho de inferência semelhante a algoritmos de Hill Climb, mas com maior explicabilidade do modelo. Com os resultados atingidos na análise exploratória dos dados experimentais, foi possível detectar relações contemporâneas entre sinais de Eletromiografia e Cinemática, e certas sinergias musculares no tempo. Também foi possível detectar similaridades e diferenças na interação muscular entre indivíduos saudáveis e indivíduos com síndrome da dor patelofemoral.

A pouca quantidade de indivíduos e o pouco tempo de corrida por indivíduo foi um fator limitante para o aprendizado dos modelos com dados experimentais, em especial quando incluídos os efeitos de relações não contemporâneas. Ainda assim, visto o resultado obtido com dados sintéticos, espera-se que esta metodologia possa ser utilizada para o aprendizado de modelos de Redes Bayesianas em conjuntos de dados não homogêneos e para a análise da qualidade do modelo em situações com poucos dados.

5.1 Publicações

Foram realizadas as seguintes publicações durante o desenvolvimento deste trabalho:

1. BARTH, Vitor; OLIVEIRA JR, Jordão; TSUKAHARA, Victor; SERRÃO, Flávio; SANTOS, Ana; MACIEL, Carlos. Information theoretic analysis of EMG and kinematic data among runners with patellofemoral pain. Congresso Brasileiro de Automática, 2022.
2. TSUKAHARA, Victor; OLIVEIRA JR, Jordão; BARTH, Vitor; OLIVEIRA, Jasiara; COTA, Vinícius; MACIEL, Carlos. Data-Driven Network Dynamical Model of Rat Brains During Acute Ictogenesis. *Frontiers in Neural Circuits*, v. 16, p. 1-13, 2022.

REFERÊNCIAS

- ACHARYA, D. *et al.* Application of adaptive savitzky–golay filter for eeg signal processing. **Perspectives in Science**, v. 8, p. 677–679, 2016. ISSN 2213-0209. Recent Trends in Engineering and Material Sciences. Disponível em: <<https://doi.org/10.1016/j.pisc.2016.06.056>>.
- ALEXIOU, A. *et al.* A bayesian model for the prediction and early diagnosis of alzheimer’s disease. **Frontiers in Aging Neuroscience**, v. 9, p. 77, 2017. ISSN 1663-4365. Disponível em: <<https://www.frontiersin.org/article/10.3389/fnagi.2017.00077>>.
- AMANN, J. *et al.* Explainability for artificial intelligence in healthcare: a multidisciplinary perspective. **BMC Medical Informatics and Decision Making volume**, v. 20, n. 310, 2020. Disponível em: <<https://doi.org/10.1186/s12911-020-01332-6>>.
- ANKAN, A.; PANDA, A. pgmpy: Probabilistic graphical models using python. *In: CITESEER. Proceedings of the 14th Python in Science Conference (SCIPY 2015)*. [S.l.: s.n.], 2015.
- BINGHAM, A. *et al.* Normalised mutual information of high-density surface electromyography during muscle fatigue. **Entropy**, v. 19, n. 12, 2017. ISSN 1099-4300.
- BROOM, B. M.; DO, K.-A.; SUBRAMANIAN, D. Model averaging strategies for structure learning in bayesian networks with limited data. **BMC Bioinformatics**, v. 13, n. S10, 2012. Disponível em: <<https://doi.org/10.1186/1471-2105-13-S13-S10>>.
- COVER, T.; THOMAS, J. **Elements of Information Theory**. Wiley, 1991. (Online access: EBSCO Computers & Applied Sciences Complete). ISBN 9780471062592. Disponível em: <<https://books.google.com.br/books?id=CX9QAAAAMAAJ>>.
- DANIELS, M. J.; LINERO, A. R. Bayesian nonparametrics for missing data in longitudinal clinical trials. *In: Nonparametric Bayesian Inference in Biostatistics*. Springer International Publishing, 2015. p. 423–446. Disponível em: <https://doi.org/10.1007/978-3-319-19518-6_21>.
- FELLIN, R. E.; MANAL, K.; DAVIS, I. S. Comparison of lower extremity kinematic curves during overground and treadmill running. **Journal of Applied Biomechanics**, Human Kinetics, Inc., Champaign IL, USA, v. 26, n. 4, p. 407 – 414, 2010. Disponível em: <<https://doi.org/10.1123/jab.26.4.407>>.
- FRIEDMAN, N.; KOLLER, D. Being bayesian about network structure. a bayesian approach to structure discovery in bayesian networks. **Machine Learning**, Springer Science and Business Media LLC, v. 50, n. 1/2, p. 95–125, 2003. Disponível em: <<https://doi.org/10.1023/a:1020249912095>>.
- GIULIO, I. D. *et al.* The proprioceptive and agonist roles of gastrocnemius, soleus and tibialis anterior muscles in maintaining human upright posture. **The Journal of Physiology**, v. 587, n. 10, p. 2399–2416, 2009. Disponível em: <<https://doi.org/10.1113/jphysiol.2009.168690>>.

GLYMOUR, C.; ZHANG, K.; SPIRTEs, P. Review of causal discovery methods based on graphical models. **Frontiers in Genetics**, Frontiers Media SA, v. 10, jun. 2019. Disponível em: <<https://doi.org/10.3389/fgene.2019.00524>>.

GLYMOUR, C.; ZHANG, K.; SPIRTEs, P. Review of causal discovery methods based on graphical models. **Frontiers in Genetics**, v. 10, p. 524, 2019. ISSN 1664-8021. Disponível em: <<https://doi.org/10.3389/fgene.2019.00524>>.

GROSS, T. J. *et al.* Dependence between cognitive impairment and metabolic syndrome applied to a brazilian elderly dataset. **Artificial Intelligence in Medicine**, v. 90, p. 53–60, 2018. ISSN 0933-3657. Disponível em: <<https://doi.org/10.1016/j.artmed.2018.07.003>>.

GROSS, T. J. *et al.* An analytical threshold for combining bayesian networks. **Knowledge-Based Systems**, v. 175, p. 36–49, 2019. ISSN 0950-7051. Disponível em: <<https://doi.org/10.1016/j.knosys.2019.03.014>>.

HECKERMAN, D.; MEEK, C.; COOPER, G. A bayesian approach to causal discovery. *In: Innovations in Machine Learning*. Springer-Verlag, 1997. p. 1–28. Disponível em: <https://doi.org/10.1007/3-540-33486-6_1>.

HONG, S. R.; HULLMAN, J.; BERTINI, E. Human factors in model interpretability: Industry practices, challenges, and needs. **Proc. ACM Hum.-Comput. Interact.**, Association for Computing Machinery, New York, NY, USA, v. 4, n. CSCW1, maio 2020. Disponível em: <<https://doi.org/10.1145/3392878>>.

KOLLER, D.; FRIEDMAN, N. **Probabilistic Graphical Models: Principles and Techniques**. MIT Press, 2009. (Adaptive computation and machine learning). ISBN 9780262013192. Disponível em: <<https://books.google.com.br/books?id=7dzpHCHzNQ4C>>.

LEE, S.-H.; YANG, K.-M.; CHO, S.-B. Integrated modular bayesian networks with selective inference for context-aware decision making. **Neurocomputing**, v. 163, p. 38–46, 2015. ISSN 0925-2312. Recent Advancements in Hybrid Artificial Intelligence Systems and its Application to Real-World Problems Progress in Intelligent Systems Mining Humanistic Data. Disponível em: <<https://doi.org/10.1016/j.neucom.2014.08.089>>.

MA, Z.; CHEN, G. Bayesian methods for dealing with missing data problems. **Journal of the Korean Statistical Society**, Springer Science and Business Media LLC, v. 47, n. 3, p. 297–313, set. 2018. Disponível em: <<https://doi.org/10.1016/j.jkss.2018.03.002>>.

MURPHY, K. P. **Machine Learning: A Probabilistic Perspective**. [*S.l.: s.n.*]: MIT Press, 2012. (Adaptive Computation and Machine Learning series). ISBN 9780262018029.

NEAPOLITAN, R. E. **Learning Bayesian Networks**. USA: Prentice-Hall, Inc., 2003. ISBN 0130125342.

NEGRI, L. H.; VESTRI, C. **lucashn/peakutils: v1.1.0**. Zenodo, 2017. Disponível em: <<https://doi.org/10.5281/zenodo.887917>>.

PEARL, J.; GLYMOUR, M.; JEWELL, N. **Causal Inference in Statistics: A Primer**. Wiley, 2016. ISBN 9781119186854. Disponível em: <<https://books.google.com.br/books?id=IqCECwAAQBAJ>>.

-
- PEARL, J.; MACKENZIE, D. **The book of why: the new science of cause and effect**. [*S.l.: s.n.*]: Basic Books, 2018.
- PURVES, S. Phase and the hilbert transform. **The leading edge**, Society of Exploration Geophysicists, v. 33, n. 10, p. 1164–1166, 2014.
- ROBINSON, R. W. Counting unlabeled acyclic digraphs. *In*: LITTLE, C. H. C. (ed.). **Combinatorial Mathematics V**. Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg, 1977. p. 28–43. ISBN 978-3-540-37020-8. Disponível em: <<https://doi.org/10.1007/BFb0069178>>.
- ROSSUM, G. V.; DRAKE, F. L. **Python 3 Reference Manual**. Scotts Valley, CA: CreateSpace, 2009. ISBN 1441412697.
- SANTOS, A. F. dos *et al.* The effects of forefoot striking, increasing step rate, and forward trunk lean running on trunk and lower limb kinematics and comfort. **International journal of sports medicine**, © Georg Thieme Verlag KG, v. 37, n. 05, p. 369–373, 2016.
- TURPIN, N. A.; URIAC, S.; DALLEAU, G. How to improve the muscle synergy analysis methodology? **European Journal of Applied Physiology**, v. 121, p. 1009–1025, 2021. Disponível em: <<https://doi.org/10.1007/s00421-021-04604-9>>.
- VAUGHAN, C. L.; DAVIS, B.; O'CONNOR, J. C. **Dynamics of human gait**. [*S.l.: s.n.*], 1992.
- VELLIDO, A. The importance of interpretability and visualization in machine learning for applications in medicine and health care. **Neural Computing and Applications**, v. 32, p. 18069–18083, 2020. Disponível em: <<https://doi.org/10.1007/s00521-019-04051-w>>.
- VIEGAS, F. *et al.* Exploiting efficient and effective lazy semi-bayesian strategies for text classification. **Neurocomputing**, v. 307, p. 153–171, 2018. ISSN 0925-2312. Disponível em: <<https://doi.org/10.1016/j.neucom.2018.04.033>>.
- WILLSON, J. D.; DAVIS, I. S. Lower extremity mechanics of females with and without patellofemoral pain across activities with progressively greater task demands. **Clinical Biomechanics**, v. 23, n. 2, p. 203–211, 2008. ISSN 0268-0033. Disponível em: <<https://doi.org/10.1016/j.clinbiomech.2007.08.025>>.
- ZENI, J.; RICHARDS, J.; HIGGINSON, J. Two simple methods for determining gait events during treadmill and overground walking using kinematic data. **Gait and Posture**, v. 27, n. 4, p. 710–714, 2008. ISSN 0966-6362. Disponível em: <<https://doi.org/10.1016/j.gaitpost.2007.07.007>>.