

IDENTIFICAÇÃO DE PARÂMETROS BIOMECÂNICOS DO TRÍCEPS SURAL ATRAVÉS DO MÉTODO DE MONTE CARLO VIA CADEIA DE MARKOV

Cláudio B. Heine, Programa de Engenharia Biomédica / Coppe / UFRJ, claudioheine@yahoo.com
Luciano L. Menegaldo, Programa de Engenharia Biomédica / Coppe / UFRJ, lmeneg@peb.ufrj.br

Resumo. Uma das aplicações mais comuns de modelos musculoesqueléticos é a determinação de forças musculares, que não podem ser medidas diretamente de maneira não invasiva. As entradas do modelo utilizado por nosso grupo são a excitação neural e a velocidade do atuador músculo-tendíneo. Nesses modelos, utilizam-se parâmetros biomecânicos considerados como conhecidos. Entretanto, tais parâmetros variam com o tempo e indivíduo considerado. Este trabalho tem como objetivo propor uma formulação para identificação do comprimento do tendão relaxado (L_{st}) e do ângulo de penação nos três músculos do tríceps sural, em sujeitos específicos, como um problema inverso, a partir de testes experimentais num dinamômetro isocinético. Neste trabalho, o torque será simulado através da integração numérica do modelo com parâmetros conhecidos, que serão identificados, visando à validação do método. As curvas de torque articular medidas pelo dinamômetro apresentam erros e incertezas. Por isso, para a simulação dos dados experimentais utilizou-se uma distribuição normal de torque, com média dada pela solução determinística do modelo calculado com os parâmetros conhecidos e desvio padrão de 2,5 Nm. Foi testado o método de Monte Carlo via Cadeia de Markov (MCMC) para solução do problema inverso, identificando os parâmetros musculares. O algoritmo utilizado foi o de Metropolis-Hastings e a convergência da cadeia de Markov foi verificada pelo método de Gelman-Rubin. Das cadeias de Markov geradas, o período de aquecimento foi descontado. Todas as cadeias foram combinadas em uma única, de onde se calculou o parâmetro desejado. O histograma do ângulo de penação se aproxima de uma distribuição uniforme, indicando a baixa sensibilidade do parâmetro. Já o histograma de L_{st} o caracteriza como parâmetro com sensibilidade alta. O método apresentou menores diferenças percentuais para parâmetros mais sensíveis e maiores para aqueles com menor sensibilidade, fato que reforça a sua viabilidade, uma vez que se deseja um menor erro num parâmetro mais sensível.

Palavras chave: monte carlo, cadeia de markov, problema inverso, identificação de parâmetros, biomecânica muscular

1. INTRODUÇÃO

Forças musculares, em geral, não podem ser medidas diretamente de maneira não-invasiva. Para tanto, é comum utilizar modelos matemáticos da mecânica muscular com entradas de eletromiografia (EMG) medidos experimentalmente. O modelo dinâmico não-linear tipo-Hill da mecânica muscular, utilizado no PEB/Coppe/UFRJ para se calcular o torque (T) nas articulações do corpo humano, a partir da entrada de sinais de EMG, é definido por 4 equações diferenciais ordinárias, Eqs. (1) a (4). Possui, ainda, duas entradas, a excitação neural (u) e a velocidade do atuador músculo-tendíneo. Cada músculo é definido por 4 equações de estado e o torque final é o somatório dos torques individuais. Serão identificados dois parâmetros, o comprimento do tendão relaxado (L_{st}) e o ângulo de penação (α) perfazendo um total de 12 equações diferenciais ordinárias e 6 parâmetros a serem identificados.

$$\dot{\alpha} = (u - a)(k_1 u + k_2) \quad (1)$$

$$\dot{\tilde{F}}_T = \tilde{k}_T (\tilde{v}_{MT} - \tilde{v}_M \cos \alpha) \quad (2)$$

$$\dot{\tilde{L}}_M = \tilde{v}_M \quad (3)$$

$$\dot{\tilde{L}}_{MT} = \tilde{v}_{MT} \quad (4)$$

Nas equações de estado acima, “a” representa a ativação neural; “ F_T ” a força no tendão, “ L_M ” o comprimento do elemento contrátil (músculo) e “ L_{MT} ” o comprimento da unidade músculo-tendão. O objetivo deste trabalho é criar um protocolo a ser utilizado na individualização de alguns parâmetros do modelo biomecânico, em função do torque fornecido por um dinamômetro em ensaio com voluntários. Apesar de ser considerado um padrão-ouro para medição de torques articulares, o dinamômetro apresenta erros e incertezas, conforme Herzog (1988), Kaufman *et al.* (1995) e Tsaopoulos *et al.* (2006).

Uma possível técnica para tal identificação de parâmetros individuais baseia-se na otimização de uma função de custo entre a integral da diferença entre os torques medidos e estimados. Diversos autores tratam o problema como

otimização, podendo ser citados Van Campen *et al.* (2014) e Manal and Buchanan (2004). Porém, conforme demonstrado em Menegaldo (2013) e Heine e Menegaldo (2014), o modelo é facilmente otimizável (redução da função de custo), mas apresenta diferenças percentuais grandes para alguns parâmetros (3,28% para o comprimento do tendão relaxado do gastrocnêmio medial e 34,63% para a força isométrica máxima – F_{om} - do gastrocnêmio lateral). O presente trabalho irá tratar essa situação como um problema inverso, quando se tem a entrada (EMG e comprimentos musculotendíneos) e a saída do sistema (torques medidos pelo dinamômetro), e o que se procura são seus parâmetros. Tem-se o efeito e busca-se a causa.

Enquanto na otimização obtém-se um valor único para cada parâmetro, em uma análise Bayesiana considera-se que o parâmetro procurado é uma variável aleatória com sua própria função de distribuição de probabilidade (pdf), conceito coerente com as características dos parâmetros biomecânicos, que variam com o indivíduo considerado e eventualmente com o tempo. Para a solução do problema foi utilizado o método de Monte Carlo via Cadeia de Markov – MCMC (Orlande *et al.*, 2011).

2. MATERIAIS E MÉTODOS

O movimento estudado foi a flexão plantar tornozelo, em contração concêntrica e excêntrica, tendo cada porção do tríceps sural (gastrocnêmio medial, gastrocnêmio lateral e sóleus) modelada individualmente. Os braços de momento variáveis foram obtidos de suas geometrias (Menegaldo *et al.*, 2004). O torque final na articulação do tornozelo foi o somatório dos torques individuais de cada músculo.

Considerou-se que a excitação neural medida pela eletromiografia (EMG) foi de 100%, ou seja, com o voluntário realizando contração máxima (MVC). Como valores iniciais da ativação e da força no tendão foram utilizados, respectivamente, 1 e $1 \cdot \cos(\alpha)$, sendo α o ângulo de penação. Para os valores do comprimento do músculo (L_m), o comprimento do tendão relaxado (L_{st}), a força isométrica máxima (F_{om}) e ângulo de penação (α) foram considerados aqueles informados no programa de domínio público OpenSim (Delp *et al.*, 2007). Os comprimentos da unidade músculo-tendão foram calculados em função do ângulo da articulação (Menegaldo *et al.*, 2004). Para os parâmetros a serem identificados, analisou-se sua sensibilidade no modelo e também a existência de dependência linear entre eles.

Considerou-se que o dinamômetro apresenta erros e incertezas de medição modelados como uma distribuição de probabilidade de valores do torque supostamente medido (T_{exp}), e não um único valor fixo e determinado. Para a simulação desses torques utilizou-se uma distribuição normal (Gaussiana) de torque com média dada pela solução determinística do modelo (solução das equações diferenciais ordinárias 1-4) com os parâmetros conhecidos (T) e desvio padrão $\sigma = 2,5$ Nm (Drouin *et al.*, 2004), conforme Eq. (5) e Fig (1).

$$T_{exp} \sim N [T, \sigma^2] \quad (5)$$

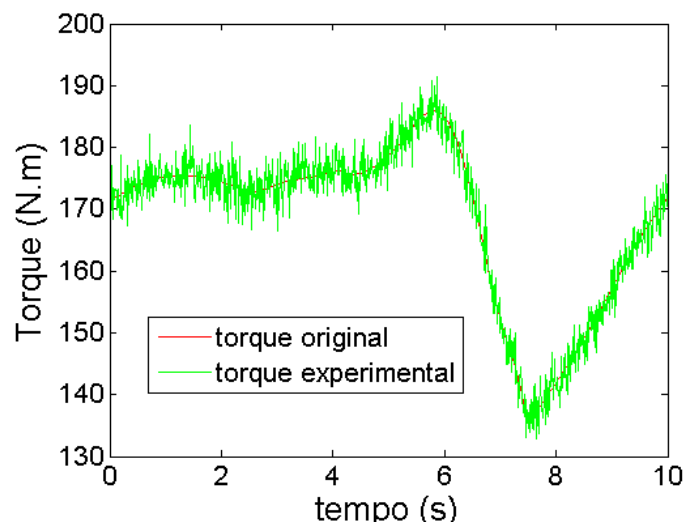


Figura 1. Torque exato calculado pelo modelo com os parâmetros originais (determinístico), linha vermelha, e o torque simulado conforme a distribuição normal, linha verde

Pela análise Bayesiana, para se solucionar um problema inverso deve-se chegar na função de densidade de probabilidade (pdf) dos parâmetros a serem identificados (θ) dadas as observações X *a posteriori* – $P(\theta|X)$, sendo X o vetor de torques supostamente medidos (T_{exp}).

$$p(\theta|X) \propto p(X|\theta)p(\theta) \quad (6)$$

Considerando-se que os valores do torque são independentes e identicamente distribuídos (i.i.d), chega-se a

$$p(X|\theta) = \frac{1}{(2\pi\sigma_T^2)^{\frac{n}{2}}} \exp\left\{-\frac{(X-F(\theta))^T (X-F(\theta))}{2\sigma_T^2}\right\} \quad (7)$$

sendo $F(\theta)$ o torque calculado com os parâmetros a serem estimados, X o torque medido, que no presente caso é o simulado com a distribuição normal da Eq. (5).

Adotou-se a distribuição *a priori* $p(\theta)$ como sendo uniforme em seus intervalos determinados, conforme Menegaldo (2013) e Heine e Menegaldo (2014), a saber: L_{st} original $\pm 5\%$ e α original $\pm 15\%$.

Para se estudar os espaços de estados *a posteriori* $p(\theta|X)$ utilizou-se o Método de Monte Carlo via Cadeia de Markov (MCMC). A simulação de Monte Carlo explora o espaço de estados *a posteriori* e aproxima a esperança da função $f(\theta)$ pela média da amostra. Já a cadeia de Markov varre o espaço de θ , simulando um passeio aleatório, buscando uma convergência para uma distribuição estacionária, que é a procurada.

Uma cadeia de Markov é definida pela sua probabilidade de transição de um estado i para outro j em um único passo, sem que haja qualquer influência de estados anteriores a i . A geração da cadeia de Markov foi feita com o algoritmo de Metropolis-Hastings. Esse algoritmo gera valores candidatos de uma função densidade de probabilidade auxiliar $q(\theta^*/\theta)$, onde θ^* é o novo valor do parâmetro (novo estado) e θ o estado atual. O novo estado θ^* é aceito com a probabilidade dada pela Razão de Hastings (R):

$$R(\theta, \theta^*) = \min\left[1, \frac{p(\theta^*|X) q(\theta^*|\theta)}{p(\theta|X) q(\theta|\theta^*)}\right] \quad (8)$$

sendo $p(\theta|X)$ a distribuição *a posteriori* de interesse.

Para verificar a convergência da cadeia de Markov utilizou-se o método de Gelman e Rubin (Gelman e Rubin, 1992), que analisa diversas cadeias e identifica a convergência quando o fator de redução de escala potencial se aproxima de 1. Ainda seguindo esse método, o período de aquecimento de cada cadeia foi descartado, formando novas cadeias, que foram combinadas em uma única, de onde se calculou o respectivo parâmetro. O valor inicial de cada cadeia foi escolhido pseudo-aleatoriamente pelo código em MATLAB®.

3. RESULTADOS

Os valores iniciais da cadeia de Markov (o chamado período de aquecimento - *burn in*) têm pouca importância, pois depois de certo número de iterações ela tende para um valor estável. A Figura (2) mostra a cadeia de Markov do parâmetro α do sóleo, onde toda a faixa de valores permitidos ao parâmetro foi ocupada. Na Figura (3) tem-se o histograma de frequência *a posteriori* dos valores, mostrando uma tendência para a distribuição uniforme. Para o L_{st} , a cadeia de Markov está mostrada na Fig (4), convergindo para poucos valores específicos, e o seu histograma na Fig (5).

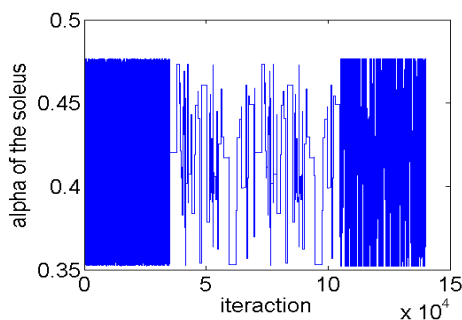


Figura 2. Cadeia de Markov de α do sóleo, mostrando que o valor do parâmetro ocupa praticamente toda a faixa de valores permitidos

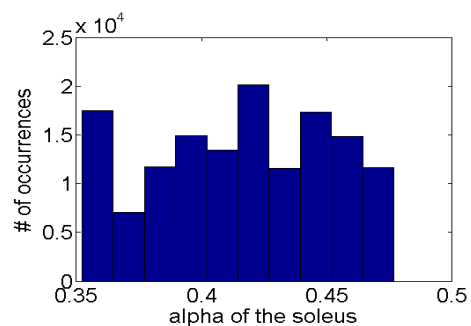


Figura 3. Histograma de frequência da *posteriori* de α do sóleo, com tendência para uma distribuição uniforme

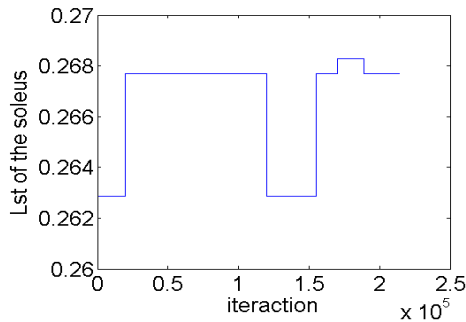


Figure 4. Cadeia de Markov do Lst do sóleo, mostrando convergência para poucos valores permitidos

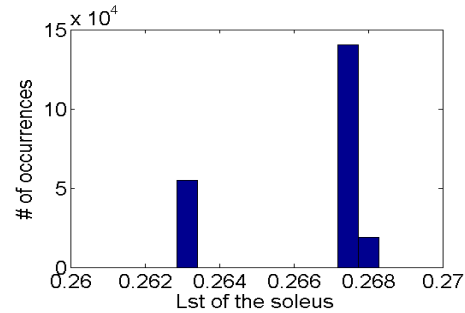


Figure 5. Histograma de frequência da *posteriori* dos valores de Lst do sóleo, mostrando convergência para poucos valores permitidos

Na Tabela (1) são mostrados os valores conhecidos de cada parâmetro para comparação com o valor encontrado através do MCMC, com o intervalo de confiança de 95% e a diferença percentual absoluta entre o valor exato e o calculado pelo método.

Tabela1. Parâmetros biomecânicos: (s) sóleo, (mg) gastrocnêmio medial e (lg) gastrocnêmio lateral. α é medido em radianos e Lst em metros

	Parâmetro Biomecânico					
	α (s)	α (mg)	α (lg)	L_{ST} (s)	L_{ST} (mg)	L_{ST} (lg)
Original	0,4363	0,2967	0,1396	0,2680	0,4080	0,3850
Identificado	0,4225	0,2713	0,1624	0,2665	0,4134	0,3861
CI (95%)	---	---	---	[0,2622;0,2708]	[0,4078;0,4190]	[0,3841;0,3881]
Diferença (%)	3,16	8,54	16,36	0,56	1,31	0,28

4. DISCUSSÃO

O histograma do parâmetro α aproxima-se de uma distribuição uniforme, indicando a baixa sensibilidade do parâmetro, enquanto que o histograma do L_{st} o caracteriza como parâmetro com alta sensibilidade (Keenan e Valero-Cuevas, 2007), uma vez que poucos valores são aceitos.

O método apresentou menores erros para parâmetros mais sensíveis e maiores erros para aqueles com menor sensibilidade, conforme Tab (1), fato que reforça a viabilidade do método, vez que se deseja um menor erro num parâmetro mais sensível.

5. CONCLUSÃO

A identificação de parâmetros foi tratada sob o ponto de vista Bayesiano, como uma função de distribuição de probabilidades. Mesmo utilizando dados experimentais que apresentam erros e incertezas, o método chegou a valores importantes e com pequenas diferenças percentuais, comparadas com o valor original dos parâmetros. Essas diferenças foram menores para parâmetros mais sensíveis. O custo computacional de algoritmos estocásticos ainda é alto, não sendo viável sua utilização em casos onde se necessitam de respostas rápidas. O método mostrou-se viável e robusto para o fim a que se destina, sendo pouco utilizado em biomecânica.

6. REFERÊNCIAS

- Delp, S., Anderson, F., Arnold, A., Loan, P., Habib, A., John, C., Guendelman, E., Thelen, D., 2007. OpenSim: Open-source Software to Create and Analyze Dynamic Simulations of Movement. IEEE Transactions on Biomedical Engineering
- Drouin, J.M., Valovich-mcLeod, T.C., Shultz, S.J., Gansneder, B.M., Perrin, D.H., 2004. Reliability and validity of the Biodex system 3 pro isokinetic dynamometer velocity, torque and position measurements. Eur. J. Appl. Physiol. 91, 22–29. doi:10.1007/s00421-003-0933-0
- Gelman, A., Rubin, D.B., 1992. Inference from Iterative Simulation Using Multiple Sequences. Stat. Sci. 7, 457–472
- Heine, C.B., Menegaldo, L.L., 2014. Identification of Subject-Specific Parameters of a Biomechanical Model of the Triceps Surae, in: Congresso Brasileiro de Engenharia Biomecânica. Uberlândia, MG, Brasil.

- Herzog, W., 1988. The relation between the resultant moments at a joint and the moments measured by an isokinetic dynamometer. *J. Biomech.* 21, 5–12. doi:10.1016/0021-9290(88)90185-6
- Kaufman, K.R., An, K.-N., Chao, E.Y.S., 1995. A comparison of intersegmental joint dynamics to isokinetic dynamometer measurements. *J. Biomech.* 28, 1243–1256. doi:10.1016/0021-9290(94)00176-5
- Keenan, K.G., Valero-Cuevas, F.J., 2007. Experimentally valid predictions of muscle force and EMG in models of motor-unit function are most sensitive to neural properties. *J. Neurophysiol.* 98, 1581–1590. doi:10.1152/jn.00577.2007
- Manal, K., Buchanan, T.S., 2004. Subject-Specific Estimates of Tendon Slack Length: A Numerical Method. *J. Appl. Biomech.* 20, 195–203.
- Menegaldo, L., 2013. Quadriceps Dynamic Model Tuning from Isokinetic Knee Torque using Optimization: a Numerical Simulation Study, in: *Congress on Numerical Methods in Engineering*, Bilbao, Spain.
- Menegaldo, L., Fleury, A., Weber, H., 2004. Moment arms and musculotendon lengths estimation for a three-dimensional lower-limb model. *J. Biomech.* 37, 1447–1453. doi:10.1016/j.jbiomech.2003.12.017
- Orlande, H.R.B., Colaço, M.J., Cotta, C.P.N., Guimarães, G., Borges, V.L., 2011. Problemas Inversos em Transferência de Calor. *SBMAC Notas Em Matemática Apl.* 51, 113.
- Tsaopoulos, D.E., Baltzopoulos, V., Maganaris, C.N., Richards, P., 2006. Errors in the measurement of knee joint moment during isokinetic and isometric tests. *J. Biomech.*, Abstracts of the 5th World Congress of Biomechanics 39, Supplement 1, S38. doi:10.1016/S0021-9290(06)83025-3
- Van Campen, A., Pipeleers, G., De Groot, F., Jonkers, I., De Schutter, J., 2014. A new method for estimating subject-specific muscle-tendon parameters of the knee joint actuators: a simulation study: Estimating Subject-Specific Musculotendon Parameters. *International Journal for Numerical Methods in Biomedical Engineering* doi:10.1002/cnm.2639

7. AGRADECIMENTOS

Os autores agradecem ao CNPq, à CAPES, à FAPERJ e à FINEP pelo apoio financeiro.

8. ABSTRACT

One of the most common applications of musculoskeletal models is the determination of muscle forces that cannot be non-invasively directly measured. In our formulation of a Hill-type muscle model the inputs are the neural excitation and the velocity of the musculotendon actuator. The dynamic states are the activation, the tendon force, the muscle length and the length of the musculotendon actuator. Biomechanical parameters used in these models are frequently obtained from literature, what can lead to large estimation errors for specific subjects with a different value of parameters set.

This work aims to propose a formulation to estimate subject-specific tendon slack length and the pennation angle of the three muscles of the triceps surae, treated as an inverse problem, from experimental joint torque obtained from an isokinetic dynamometer. In this work, the torque is simulated by numerical integration of the model with known parameters, which will be identified, in order to validate the method.

The joint torques measured by the dynamometer have errors and uncertainties. Therefore, to simulate the experimental data we used a normal torque distribution with the mean value given by the deterministic solution of the model, with known parameters, and with a standard deviation of 2.5 N m.

We tested the Markov Chain Monte Carlo method (MCMC) to solve the inverse problem and identify the muscle parameters. The Metropolis-Hastings algorithm was used and the convergence of the Markov chain was verified by the Gelman-Rubin method. From the generated Markov chains, the burn in period was discarded. All chains were combined into one, from which we calculated the desired parameters.

The histogram of the pennation angle approaches a uniform distribution, indicating a low sensitivity parameter, and the histogram of the tendon slack length characterizes it as a parameter with high sensitivity.

The method presented smaller percentage differences for more sensitive parameters and greater ones for those with lower sensitivity, what reinforces its viability, since smaller differences in a more sensitive parameter is desirable. It proved to be feasible and robust for the purpose it was intended to.

9. RESPONSABILIDADE PELAS INFORMAÇÕES

Os autores são os únicos responsáveis pelas informações incluídas neste trabalho.