Fundamentos de Probabilidade

1. Motivação

Grosso modo, pode-se dizer que a noção de probabilidade é central no âmbito do aprendizado de máquina porque informação tem a ver com incerteza. Num mundo de certezas plenamente cognoscíveis, de que forma poderia haver comunicação ou aprendizado?

Cabe a nós, portanto, recordar alguns conceitos fundamentais da teoria de probabilidade. Também analisaremos uma construção dela derivada, a chamada teoria da informação (IT, do inglês *information theory*).

1.1. Alguns Conceitos

Consideremos um *experimento aleatório*, ou seja, um experimento cujo resultado não pode ser determinado *a priori* com certeza absoluta. Ocupemo-nos de algumas definições:

- O *i-ésimo resultado (outcome*) de um experimento será denotado por ξ_i. Por exemplo, no lançamento de uma moeda, podemos ter ξ₁ = 'cara' e ξ₂ = 'coroa'.
 No lançamento de um dado, podemos ter ξ₁ = 'face com um ponto', ξ₂ = 'face com dois pontos' etc.
- Um **evento** E é um conjunto de resultados de um experimento. Considerando o exemplo da moeda do item anterior, um evento possível seria $E = \{\xi_1\}$. Esse seria um *evento simples*, formado por um único resultado. No exemplo do dado do item anterior, um evento possível seria $E = \{\xi_1, \xi_3, \xi_5\}$. Nesse caso, podemos associar o evento à seguinte ideia: o valor associado à face corresponde a

um número ímpar. Também se pode definir o evento impossível como sendo $E = \emptyset$ (conjunto vazio).

• O conjunto formado por todos os possíveis resultados de um experimento é chamado de **espaço amostral**.

A partir dessas definições, podemos enunciar a base axiomática da teoria (KOLMOGOROV, 2018). Faremos isso segundo uma estrutura de três axiomas:

- Seja A um evento. Necessariamente temos $P(A) \ge 0$, sendo P(A) a probabilidade a ele associada.
- Seja S o espaço amostral, acima definido. Temos P(S) = 1.
- Sejam A e B dois eventos disjuntos $(A \cap B = \emptyset)$. Nesse caso, $P(A \cup B) = P(A) + P(B)$.

Algumas consequências desses axiomas são relativamente diretas (KAY, 2006): Seja A^C o complemento de A (com respeito a S).

Por definição, $A^C \cap A = \emptyset$ e $A^C \cup A = S$. Usando o terceiro axioma, temos que $P(A^C \cup A) = P(A) + P(A^C) = 1$. Portanto: $P(A^C) = 1 - P(A)$.

Se tratarmos \emptyset e S como complementares, usando o resultado que deduzimos, temos que $P(\emptyset) = 1 - P(S) = 0$.

Para dois eventos quaisquer A e B: $P(A \cup B) = P(A) + P(B) - P(A \cap B)$.

1.2. Probabilidade Condicional e Independência Estatística

O conceito de probabilidade condicional será muito importante para nós. Estabeleçamos uma definição básica:

$$P(A|B) = \frac{P(A \cap B)}{P(B)}$$

Costuma-se dizer que P(A|B) é a probabilidade condicional de A dado B. Por uma questão de simplicidade, podemos escrever, numa veia booleana, $P(A \cap B)$ como P(AB). Naturalmente, vale também:

$$P(B|A) = \frac{P(AB)}{P(A)}$$

Usando essas duas equações e notando que P(AB) é igual em ambas, temos:

$$P(B|A) = \frac{P(A|B)P(B)}{P(A)}$$

Esse resultado é conhecido como regra (ou teorema) de Bayes.

Parece válido que tomemos um pouco de ar antes de seguir em frente. Primeiro, reflitamos sobre a probabilidade condicional. Condicionar um evento à ocorrência de outro permite que se identifique algum tipo de dependência entre ambos. Por exemplo, consideremos qual seria a probabilidade de uma pessoa qualquer do planeta falar português. Agora, consideremos qual seria a probabilidade de uma

pessoa falar português dado que ela nasceu no Brasil. Claramente, espera-se que haja uma diferença significativa. Isso se explica pelo fato de que há uma dependência entre "falar português" e "nascer no Brasil" (o local de nascimento influencia o eventual domínio de um idioma).

Numa perspectiva mais matemática, consideremos o lançamento de um dado honesto. O espaço amostral é composto por seis eventos elementares: S = {um, dois, três, quatro, cinco, seis}, e a probabilidade de ocorrência de qualquer um deles é 1/6. Suponha que consideremos a seguinte questão: qual é a probabilidade de o dado mostrar a face "dois"? A resposta é 1/6. Agora, suponha que consideremos qual seria a probabilidade de o dado mostrar a face "dois" sabendo que o resultado do lançamento corresponde a um número par. Nesse caso, podemos pensar: se é par, tem de ser "dois", "quatro" ou "seis". Como esses casos são equiprováveis, a resposta deve ser 1/3.

Associemos, então, o evento A à ocorrência de "dois" e B à ocorrência de "um número par". Temos que P(AB) = 1/6 e P(B) = 1/2. Portanto,

$$P(A|B) = 1/6 \div 1/2 = 1/3.$$

Uma situação importante surge quando P(A|B) = P(A). Isso significa que a ocorrência do evento B não afeta a probabilidade de ocorrência do evento A. Usando a definição de probabilidade condicional, nesse caso, percebemos que:

$$P(AB) = P(A)P(B)$$

Quando isso ocorre, os eventos A e B são ditos independentes.

1.3. Variáveis Aleatórias

Em muitos casos de interesse, a ocorrência de fenômenos aleatórios se dá no contexto de valores numéricos. Consideremos, a título de exemplo, levantamentos

estatísticos, junto a uma população, de grandezas como idade, renda, altura, peso etc. Pense ainda em noções como "renda média" ou "pirâmide etária".

O formalismo para lidar com valores numéricos em probabilidade dá destaque ao conceito de **variável aleatória**. Uma variável aleatória *X* é, basicamente, uma função que mapeia resultados de um experimento aleatório em valores numéricos. Caso a imagem de *X* seja finita ou contável, tem-se uma variável aleatória **discreta**. Caso a imagem de *X* seja o conjunto dos reais, tem-se uma variável aleatória **contínua**.

Com o mapeamento acima descrito, os valores numéricos passam a se vincular a uma medida de probabilidade. Uma primeira forma de apresentar essa conexão é através da função de distribuição cumulativa (CDF, do inglês *cumulative distribution function*) $F_X(x)$:

$$F_X(x) = P(X \le x)$$

Em outras palavras, a CDF nos informa a probabilidade de uma variável aleatória *X* assumir valores menores que um determinado *x*. Se considerarmos o lançamento de um dado honesto e atribuirmos números naturais às suas faces, temos:

$$F_X(1) = 1/6$$
; $F_X(2) = 2/6 = 1/3$; $F_X(3) = 3/6 = 1/2$; $F_X(4) = 4/6 = 2/3$; $F_X(5) = 5/6$; $F_X(6) = 6/6 = 1$; $F_X(7) = 6/6 = 1$ etc.

Os valores-limite da CDF são 0 ("em" $-\infty$) e 1 ("em" $+\infty$). A CDF nunca decresce, uma vez que sempre "acumula probabilidade".

Quando se lida com variáveis aleatórias discretas, é possível atribuir diretamente valores de probabilidade aos valores numéricos. Nesse caso, define-se uma função de massa de probabilidade (PMF, do inglês *probability mass function*):

$$P_X(x) = P(X = x)$$

Voltando ao nosso exemplo do dado honesto, essa função teria a forma da Fig. 1.

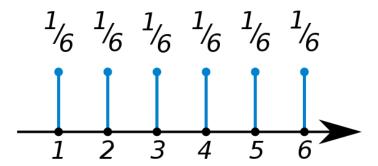


Figura 1 – Função de Massa de Probabilidade (Dado).

A CDF tem uma relação direta com a função de massa de probabilidade. Matematicamente, temos:

$$F_X(x) = \sum_{k=-\infty}^{x} P_X(k)$$

A equação nada mais é que uma descrição eloquente da ideia de acumulação de probabilidade.

No caso de variáveis contínuas, o formalismo é um pouco mais complexo. Uma vez que as possibilidades estão definidas num *continuum*, não é possível mais falar na atribuição direta de massa de probabilidade a cada valor. Fala-se na definição de

uma densidade de probabilidade $f_X(x)$. A relação com a CDF é natural (também uma acumulação):

$$F_X(x) = \int_{-\infty}^x f_X(\xi) d\xi$$

A relação inversa também é válida:

$$f_X(x) = \frac{dF_X(x)}{dx}$$

Se desejarmos conhecer $P(a \le X \le b)$, podemos fazer:

$$P(a \le X \le b) = \int_a^b f_X(x) dx = F_X(b) - F_X(a)$$

Uma condição crucial "de normalização" é:

$$\int_{-\infty}^{\infty} f_X(x) dx = 1$$

Um primeiro exemplo de densidade de probabilidade é a densidade gaussiana, talvez a mais célebre de todas. Sua expressão é:

$$f_X(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} exp\left[-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}\right]$$

O valor μ é a média e σ^2 é a variância (as definições virão mais adiante). A forma dessa densidade é mostrada na Fig. 2. A forma da CDF associada é mostrada na Fig. 3.

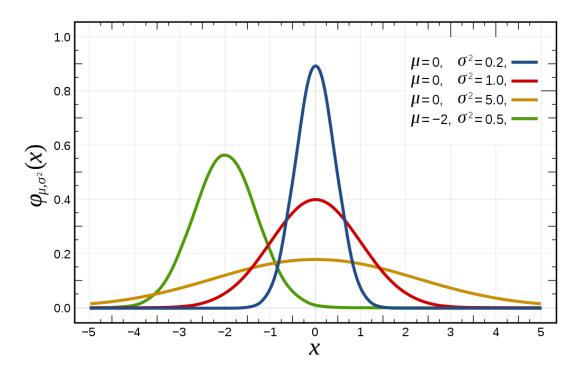


Figura 2 – Exemplos de Densidades Gaussianas.

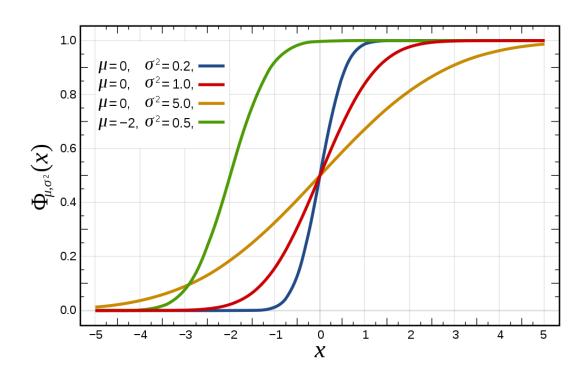


Figura 3 – Exemplos de CDFs Gaussianas.

Outra densidade muito importante é a densidade uniforme (entre dois valores, a e b). Sua definição matemática é:

$$f_X(x) = \begin{cases} 1/(b-a), & a \le x \le b \\ 0, & \text{caso contrário} \end{cases}$$

As Figs. 4 e 5 trazem a densidade e a função cumulativa associada.

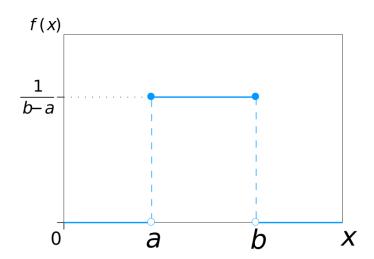


Figura 4 – Densidade Uniforme.

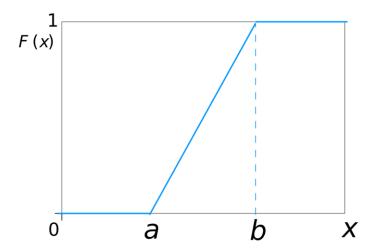


Figura 5 – Função Cumulativa Associada.

1.3.1. Valor Esperado (Esperança Matemática)

O valor esperado de uma variável aleatória é uma "média estatística". Não é uma média obtida de certo número de amostras, mas sim uma média "ideal", "platônica". Essa "idealidade" advém do conhecimento da estrutura probabilística subjacente.

Para variáveis discretas, o valor esperado, denotado pelo operador $E[\cdot]$, é:

$$E[X] = \sum_{k} x_k P_X(x_k)$$

Para variáveis contínuas, temos:

$$E[X] = \int_{-\infty}^{\infty} x f_X(x) dx$$

O valor esperado de uma função g(X) pode ser obtido de forma direta:

$$E[g(X)] = \sum_{k} g(x_k) P_X(x_k)$$

$$E[g(X)] = \int_{-\infty}^{\infty} g(x) f_X(x) dx$$

1.3.2. Momentos

O *n*-ésimo momento de uma variável aleatória é definido como:

$$m_n = E[X^n]$$

O primeiro momento (n = 1) é o valor esperado da variável, conhecido como média (μ).

Para avaliar a excursão da variável em torno da média, lança-se mão dos *momentos centrais*. O *n*-ésimo momento central é:

$$c_n = E[(X - \mu)^n]$$

O segundo momento central (n = 2) é conhecido como *variância* (σ^2). O *desvio padrão* é a raiz quadrada da variância (σ).

Os momentos são importantes para a caracterização parcial da estrutura probabilística de uma variável aleatória, e terão papel central nos próximos capítulos do curso.

1.4. Várias Variáveis Aleatórias

Em muitos casos, as variáveis aleatórias devem ser consideradas conjuntamente. A razão é que elas podem apresentar dependência estatística, ou seja, ser mutuamente informativas. Apresentaremos de maneira explícita o caso de duas variáveis aleatórias, mas a extensão para um número superior é direta.

Define-se a função cumulativa da seguinte forma:

$$F_{XY}(x,y) = P(X \le x, Y \le y)$$

No caso de variáveis discretas, essa função se relaciona com a função conjunta de massa de probabilidade $P_{XY}(x,y)$ da seguinte forma:

$$F_{XY}(x,y) = \sum_{k=-\infty}^{x} \sum_{m=-\infty}^{y} P_{XY}(k,m)$$

No caso de variáveis contínuas, a relação é análoga:

$$F_{XY}(x,y) = \int_{-\infty}^{x} \int_{-\infty}^{y} f_{XY}(\xi, \upsilon) d\xi d\upsilon$$

Essa relação significa que:

$$f_{XY}(x,y) = \frac{\partial^2 F_{XY}(x,y)}{\partial x \partial y}$$

Para obter as probabilidades associadas a cada variável, é preciso "realizar uma soma" sobre as demais. No caso de variáveis discretas, um exemplo seria:

$$P_X(x) = \sum_{y} P_{XY}(x, y)$$

Para variáveis contínuas, o exemplo seria:

$$f_X(x) = \int_{-\infty}^{\infty} f_{XY}(x, y) dy$$

Também é possível definir funções de massa e de densidade condicionais:

$$P_{Y|X}(Y = y|X = x) = \frac{P_{XY}(x, y)}{P_X(x)}$$

$$f_{Y|X}(y|x) = \frac{f_{XY}(x, y)}{f_X(x)}$$

Da mesma forma que antes, se $P_{XY}(x,y) = P_X(x)P_Y(y)$ ou $f_{XY}(x,y) = f_X(x)f_Y(y)$, as variáveis são estatisticamente independentes.

É importante definir ainda dois momentos, a correlação e a covariância. Ambos indicam uma relação entre variáveis aleatórias, embora esta seja menos contundente que a dependência estatística. A correlação entre variáveis *X* e *Y* é:

$$corr(X,Y) = E[XY].$$

Já a covariância é um momento conjunto central:

$$cov(X,Y) = E[(X - \mu_X)(Y - \mu_Y)]$$

Se corr(X,Y) = 0, as variáveis são ortogonais. Se cov(X,Y) = 0, as variáveis são descorrelacionadas. Sempre que duas variáveis são independentes, elas também são descorrelacionadas. A implicação oposta só vale para variáveis gaussianas.

Por fim, é importante apresentar a forma matemática da densidade gaussiana multivariada:

$$p(\mathbf{x}) = \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^k |\Sigma|}} exp\left[-\frac{1}{2}(\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu})^T \boldsymbol{\Sigma}^{-1} (\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu})\right]$$

Na equação, $\mathbf{x} = [x_1 \ ... \ x_k]^T$ é o vetor de variáveis aleatórias, $\boldsymbol{\mu}$ é o vetor de média e $\boldsymbol{\Sigma}$ é a matriz de covariância, na qual cada elemento σ_{ij} dessa matriz é dado por $\text{cov}(x_i, x_i)$. O termo $|\boldsymbol{\Sigma}|$ corresponde ao determinante da matriz $\boldsymbol{\Sigma}$.

Exemplos:

•
$$k = 2$$
, $\boldsymbol{\mu} = \begin{bmatrix} 1 & 1 \end{bmatrix}^{\mathrm{T}} e \boldsymbol{\Sigma} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$.

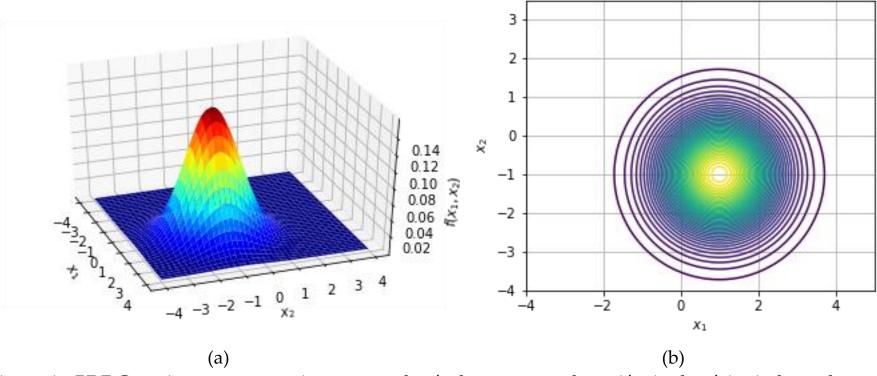


Figura 6 – PDF Gaussiana e as respectivas curvas de nível para o caso de variáveis aleatórias independentes e de mesma variância.

•
$$k = 2$$
, $\boldsymbol{\mu} = \begin{bmatrix} 1 & 1 \end{bmatrix}^{\mathrm{T}} e \boldsymbol{\Sigma} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 2 \end{bmatrix}$.

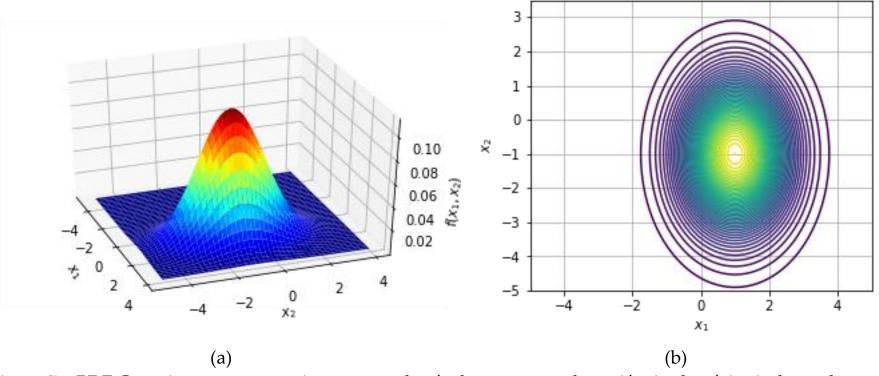


Figura 7 – PDF Gaussiana e as respectivas curvas de nível para o caso de variáveis aleatórias independentes e com variâncias diferentes.

•
$$k = 2$$
, $\mu = [1 - 1]^{\mathrm{T}} e \Sigma = \begin{bmatrix} 1 & 0.5 \\ 0.5 & 1.5 \end{bmatrix}$.

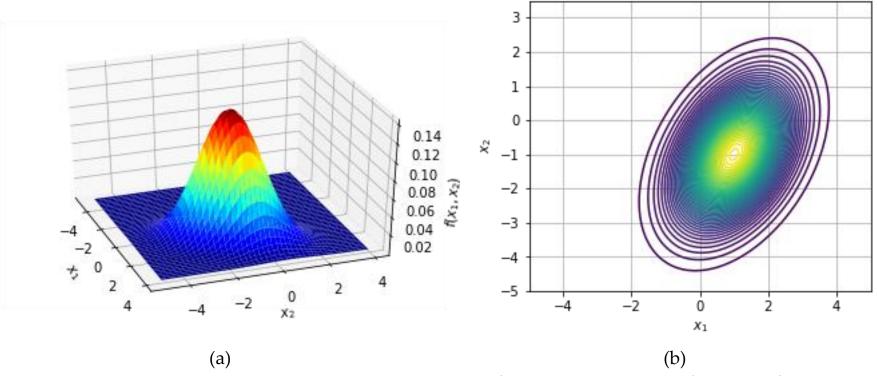


Figura 8 – PDF Gaussiana e as respectivas curvas de nível para o caso de variáveis aleatórias correlacionadas.

2. Referências bibliográficas

KAY, S., Intuitive Probability and Random Processes Using MATLAB, Springer, 2006.

KOLMOGOROV, A. N., Foundations of the Theory of Probability, Dover, 2018.

SHYNK, J. J., Probability, Random Variables and Random Processes, Wiley, 2013.