Universidade de São Paulo

Instituto de Ciências Matemáticas e de Computação

Fundamentos de Probabilidade e Estatística para Ciência de Dados

Resumo das aulas do Prof. Dr. Francisco Rodrigues

Bruna Zamith Santos

Agosto de 2025

Sumário

1 Teoria dos Conjuntos

Sejam os conjuntos:

$$A = \{1, 2, 4, 9\}, \quad B = \{3, 7, 9\}$$

- União: $A \cup B = \{1, 2, 3, 4, 7, 9\}$
- Interseção: $A \cap B = \{7, 9\}$
- Complementar de B: $B^C = \{1, 2, 4\}$
- Complementar de A: $A^C = \{3, 7\}$
- Espaço amostral (Ω): É o conjunto de todos os resultados possíveis de um experimento aleatório. Exemplo: $\Omega = \{1, 2, 3, 4, 5, 6\}$, ao lançar um dado.
- Evento (A): É um subconjunto do espaço amostral. Exemplo: $A = \{2, 4, 6\}$
- Evento impossível ($\emptyset$): É um evento que nunca ocorre.
- Evento certo (Ω): É o evento que sempre ocorre.
- $A \cup B$: É o evento que ocorre se A ou B (ou ambos) ocorrerem.
- $A \cap B$: É o evento que ocorre se A e B ocorrerem ao mesmo tempo.
- A^C: É o evento que ocorre se A não ocorre.
- Eventos mutuamente exclusivos: Quando $A \cap B = \emptyset$.

2 Experimento Aleatório

Um experimento aleatório é um experimento que pode ser repetido inúmeras vezes sob as mesmas condições, sendo o seu resultado incerto.

3 Conceitos de Probabilidade

Sejam Ω o espaço amostral e A um evento em Ω. Então, uma função $P(\cdot)$ é denominada probabilidade se satisfaz:

- $0 \leq P(A) \leq 1$, $\forall A \in \Omega$
- $P(\Omega) = 1$
- Se $A_1, A_2, \ldots$ forem eventos mutuamente exclusivos, isto é, $A_i \cap A_j = \emptyset$, $\forall i \neq j$, então:

$$P\left(\bigcup_{i=1}^{\infty} A_i\right) = \sum_{i=1}^{\infty} P(A_i)$$

Se um experimento aleatório tiver $n(\Omega)$ resultados mutuamente exclusivos e igualmente possíveis, e se um evento A conter $n(A)$ desses resultados, a probabilidade de ocorrência desse evento é definida por:

$$P(A) = \frac{n(A)}{n(\Omega)} = \frac{|A|}{|\Omega|}$$

Sejam A e B eventos em um mesmo espaço amostral, então:

- $P(\emptyset) = 0$
- $P(A) = 1 - P(A^C)$
- Se $A \subseteq B$, então $P(A) \leq P(B)$

3.1 Probabilidade Frequentista

A probabilidade de um evento é igual à sua frequência de ocorrência em um grande número de experimentos:

$$P(A) = \lim_{n \to \infty} \frac{n_A}{n}$$

, onde n_A é o número de vezes que o evento A ocorre em n experimentos.

3.2 Probabilidade de União de Dois Eventos

Para dois eventos A e B em um mesmo espaço amostral:

$$P(A \cup B) = P(A) + P(B) - P(A \cap B)$$

3.3 Probabilidade Condicional

Sejam dois eventos A e B em um mesmo espaço amostral Ω. A probabilidade condicional de A dado que B ocorreu é definida por:

$$P(A \mid B) = \frac{P(A \cap B)}{P(B)}, \quad \text{com } P(B) > 0$$

Assim, A e B são eventos independentes se, e somente se:

$$P(A \cap B) = P(A) \cdot P(B)$$

Ou equivalentemente:

$$P(A \mid B) = P(A) \quad \text{e} \quad P(B \mid A) = P(B)$$

3.4 Partições do Espaço Amostral

Os eventos $B_1, B_2, \ldots, B_n$ formam uma partição do espaço amostral Ω se:

- $B_i \cap B_j = \emptyset$, para $i \neq j$, com $i, j = 1, \ldots, n$
- $\bigcup_{i=1}^{n} B_i = \Omega$
- $P(B_i) \geq 0$, para $i = 1, \ldots, n$

Seja A um evento no espaço amostral Ω e seja $B_1, \ldots, B_n$ uma partição amostral de Ω. Podemos escrever A considerando tal partição:

$$A = \bigcup_{i=1}^{n} (A \cap B_i)$$

$$P(A) = P\left(\bigcup_{i=1}^{n} A \cap B_i\right) = \sum_{i=1}^{n} P(A \cap B_i)$$

4 Lei da Probabilidade Total

Sejam $B_1, B_2, \ldots, B_n$ uma partição do espaço amostral Ω. Então, qualquer evento $A \subseteq \Omega$ pode ser escrito como:

$$P(A) = \sum_{i=1}^{n} P(A \mid B_i) \cdot P(B_i)$$

5 Teorema de Bayes

Sejam $B_1, B_2, \ldots, B_n$ uma partição do espaço amostral Ω, e A um evento com $P(A) > 0$, então:

$$P(B_i \mid A) = \frac{P(A \mid B_i) \cdot P(B_i)}{\sum_{j=1}^{n} P(A \mid B_j) \cdot P(B_j)}$$

E assim podemos definir:

$$P(A \mid B) = \frac{P(B \mid A) \cdot P(A)}{P(B)}$$

6 Variáveis Aleatórias

Suponha que lancemos dois dados. O espaço amostral associado ao experimento, sendo os eventos C: "sai uma cara" e R: "sai uma coroa", é dado por:

$$\Omega = \{CC, CR, RC, RR\}$$

Uma possível variável aleatória associada ao experimento é definida por:

$$X = \text{"número de caras obtido no experimento"}$$

- Representamos variáveis aleatórias por letras maiúsculas (X, Y, Z), enquanto usamos letras minúsculas para indicar os valores das variáveis (x, y, z).
- Se o número de valores possíveis de uma variável aleatória for finito ou infinito enumerável, dizemos que é uma variável aleatória discreta.
- Caso contrário, é uma variável aleatória contínua.

A função que atribui a cada valor da variável aleatória sua respectiva probabilidade é chamada de distribuição de probabilidade:

$$P(X = x_i) = p(x_i) = p_i, \quad i = 1, 2, 3$$

A distribuição de probabilidade também é chamada de função massa de probabilidade. E temos que:

$$\sum_{i=1}^{n} P(X = x_i) = 1$$

Dizemos que X é uma variável aleatória contínua se existir uma função f denominada função densidade de probabilidade (fdp) que satisfaz:

- $f(x) \geq 0, \quad \forall x \in \mathbb{R}$
- $\int_{-\infty}^{\infty} f(x)\, dx = 1$

- $P(a \leq X \leq b) = \int_a^b f(x)\,dx$, $-\infty < a < b < \infty$
- $f(x)$ é uma função com valores positivos e área unitária.

Seja X uma variável aleatória discreta ou contínua. A probabilidade condicional de que $X \in S$ dado que $X \in V$ é:

$$P(X \in S \mid X \in V) = \frac{P(X \in S \cap V)}{P(X \in V)}$$

, onde S e V são subconjuntos do espaço da variável.

7 Função de Distribuição

A função distribuição acumulada ou simplesmente função de distribuição de uma variável aleatória X é definida por:

$$F(x) = P(X \leq x)$$

Se discreta:

$$F(x) = \sum_{x_i \leq x} P(X = x_i)$$

Se contínua:

$$F(x) = \int_{-\infty}^{x} f(t)\,dt$$

Propriedades da função de distribuição:

- $0 \leq F(x) \leq 1, \quad F(x)$ é não decrescente,
- $\lim_{x \to -\infty} F(x) = 0, \quad \lim_{x \to +\infty} F(x) = 1$
- Caso discreto: $P(a < X \leq b) = F(b) - F(a)$
- Caso contínuo: $f(x) = \frac{dF(x)}{dx}$

8 Esperança

8.1 Variável Aleatória Discreta

Seja X uma variável aleatória discreta com distribuição de probabilidade $P(X = x_i)$. O valor esperado (ou esperança matemática) é:

$$E[X] = \sum_{i=1}^{n} x_i \cdot P(X = x_i)$$

8.2 Variável Aleatória Contínua

Seja X uma variável aleatória contínua com função densidade de probabilidade $f(x)$, então:

$$E[X] = \int_{-\infty}^{+\infty} x \cdot f(x)\,dx$$

8.3 Função de uma Variável Aleatória

Seja $g(X)$ uma função de uma variável aleatória discreta X. Então:

$$E[g(X)] = \sum_{i=1}^{n} g(x_i) \cdot P(X = x_i)$$

Seja $g(X)$ uma função de variável contínua com densidade $f(x)$. Então:

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

8.4 Propriedades

- Se $X = c$, onde c é constante, então: $E[X] = E[c] = c$
- Se c é constante: $E[cX] = c \cdot E[X]$
- Então: $E[aX + b] = a \cdot E[X] + b$

9 Momento

9.1 Momento Estatístico

Seja X uma variável aleatória discreta com valores $x_1, x_2, \ldots, x_k$. O momento de ordem n de X é:

$$E[X^n] = \sum_{i=1}^{k} x_i^n \cdot P(X = x_i)$$

Se X for contínua:

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

9.2 Momento Central

Seja X uma variável aleatória.

- Se X é discreta, o momento central de ordem n ($n > 0$) de X é:

$$\mu_n = E\left[(X - E[X])^n\right] = \sum_{x_i} (x_i - E[X])^n \cdot P(X = x_i)$$

- Se X é contínua, então:

$$\mu_n = E\left[(X - E[X])^n\right] = \int_{-\infty}^{\infty} (x - E[X])^n \cdot f(x)\, dx$$

10 Variância

A variância de uma variável aleatória X é definida por:

$$V(X) = \sigma^2 = E\left[(X - E(X))^2\right]$$

O desvio padrão é igual à raiz quadrada da variância:

$$\sigma = \sqrt{V(X)}$$

Temos a propriedade de que:

$$V(X) = E[X^2] - (E[X])^2$$

Seja $g(X)$ uma função da variável aleatória X. Então,

$$V[g(X)] = E[g(X)^2] - (E[g(X)])^2$$

Seja X uma variável aleatória e a e b constantes. Então,

$$V(aX + b) = a^2 \cdot V(X)$$

11 Modelos Probabilísticos (Estocásticos) Discretos

- Os resultados de cada experimento parecem imprevisíveis, mas quando um grande número de experimentos é analisado, surge um padrão.
- Não podemos determinar o valor exato do resultado de um experimento, mas sim as probabilidades de cada resultado possível.

11.1 Distribuição Uniforme Discreta

Seja X uma variável aleatória discreta assumindo os n valores $\{a, a+c, a+2c, \ldots, b-c, b\}$, com $a, b \in \mathbb{R}$, $c \in \mathbb{R}_{>0}$ e $a < b$.

Dizemos que X segue o modelo uniforme discreto se atribuímos a mesma probabilidade $1/n$ a cada um desses valores. Isto é, sua distribuição de probabilidade é dada por:

$$P(X = x) = \frac{1}{n}, \quad x = a, a + c, a + 2c, \ldots, b$$

onde:

$$n = 1 + \frac{b - a}{c}$$

Então,

$$E[X] = \frac{a + b}{2},$$

$$V(X) = \frac{c^2(n^2 - 1)}{12}$$

A Figura 1 apresenta um exemplo de Distribuição Uniforme discreta.

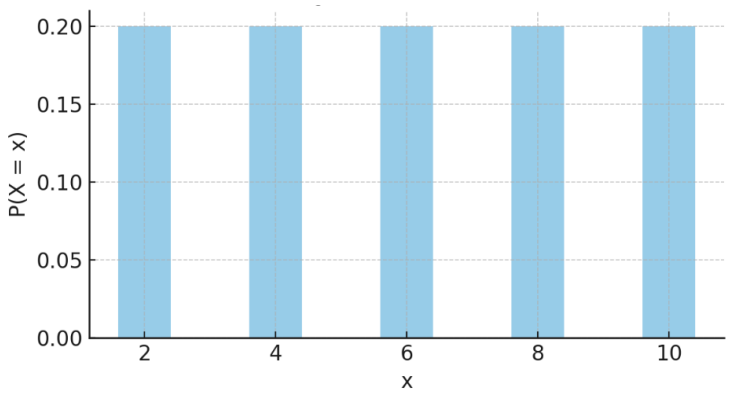


Figura 1: Distribuição Uniforme discreta.

11.2 Distribuição de Bernoulli

Dizemos que a variável aleatória X segue o modelo de Bernoulli se atribuímos 0 à ocorrência de um fracasso ou 1 à ocorrência de um sucesso, com p representando a probabilidade de sucesso, $0 \leq p \leq 1$, e $1 - p$ a probabilidade de fracasso.

A distribuição de probabilidade é dada por:

$$P(X = k) = p^k (1 - p)^{1-k}, \quad k = 0, 1$$

X	0	1
$P(X = k)$	$1 - p$	p

Então,

$$E[X] = p,$$

$$V(X) = p \cdot (1 - p)$$

A Figura 2 apresenta um exemplo de Distribuição de Bernoulli.

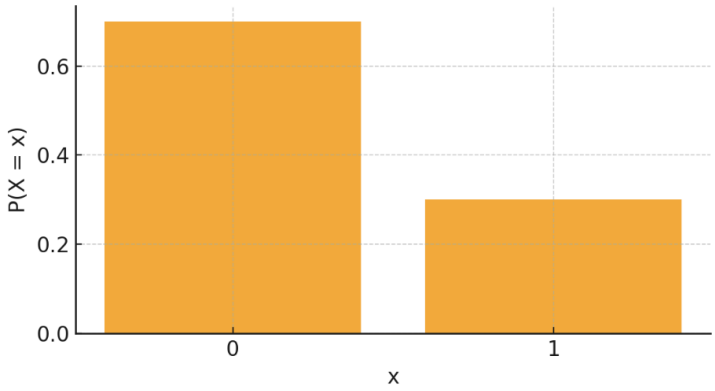


Figura 2: Distribuição de Bernoulli.

11.3 Distribuição Binomial

O processo estocástico de Bernoulli possui as seguintes propriedades:

- O experimento consiste de n tentativas repetidas;
- Cada tentativa gera um resultado que pode ser classificado como sucesso ou falha;
- A probabilidade de sucesso p se mantém constante de tentativa para tentativa;
- As tentativas são feitas de forma independente uma da outra.

Seja X uma variável aleatória baseada em n repetições de um processo de Bernoulli. Então a probabilidade de obtermos k sucessos em n repetições é dada por:

$$P(X = k) = \binom{n}{k} p^k (1 - p)^{n-k}, \quad k = 0, 1, 2, \ldots, n$$

, onde:

$$C_n^k = \binom{n}{k} = \frac{n!}{(n - k)!\, k!}$$

é uma combinação de n elementos tomados de k em k.

Então,

$$E[X] = n \cdot p,$$

$$V(X) = n \cdot p \cdot (1 - p)$$

A Figura 3 apresenta um exemplo de Distribuição Binomial.

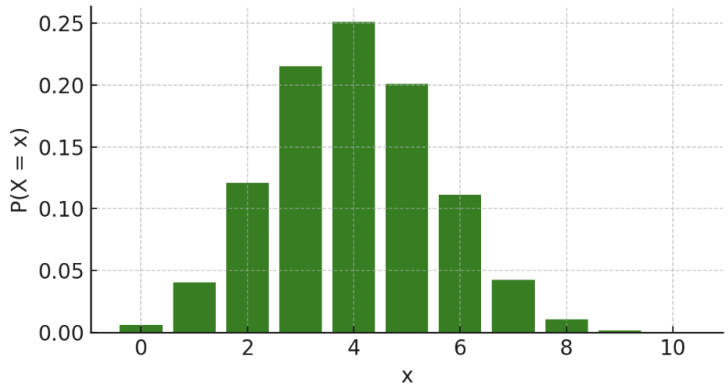


Figura 3: Distribuição Binomial.

A seguir, apresentamos um exemplo de problema que pode ser modelado por meio da Distribuição Binomial:

> "Uma urna tem 20 bolas pretas e 30 brancas. Retiram-se 25 bolas com reposição. Qual a probabilidade de que 2 sejam pretas?"

11.4 Distribuição de Poisson

O processo estocástico de Poisson possui as seguintes propriedades:

- O processo modela a ocorrência de eventos ao longo do tempo ou espaço contínuo;
- Existe uma taxa média constante $\lambda > 0$, que representa o número esperado de eventos por unidade de tempo (ou espaço);
- Os eventos ocorrem de forma independente em intervalos disjuntos;
- A probabilidade acumulada de ocorrência de eventos aumenta com o tempo.

Uma variável aleatória discreta X segue o modelo de Poisson com taxa $\lambda > 0$ se:

$$P(X = k) = \frac{e^{-\lambda}\lambda^k}{k!}, \quad k = 0, 1, 2, \ldots$$

Então,

$$E[X] = \lambda,$$

$$V(X) = \lambda$$

A Figura 4 apresenta um exemplo de Distribuição de Poisson.

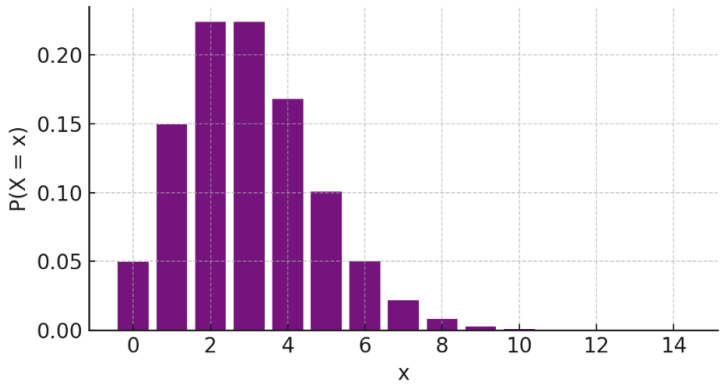


Figura 4: Distribuição de Poisson.

A seguir, apresentamos um exemplo de problema que pode ser modelado por meio da Distribuição de Poisson:

> "Numa estrada há 2 acidentes para cada 100 km. Qual a probabilidade de que em 250 km ocorram pelo menos 3 acidentes?"

11.5 Lei dos Eventos Raros

Seja X uma variável aleatória com Distribuição Binomial e p a probabilidade de sucesso. Então,

$$\lim_{n\to\infty} \binom{n}{k} p^k (1-p)^{n-k} = \frac{e^{-\lambda}\lambda^k}{k!}, \quad k = 0, 1, 2, \ldots,$$

onde $\lambda = np$ é constante.

11.6 Distribuição Geométrica

A Distribuição Geométrica modela o número de tentativas necessárias até a ocorrência do primeiro sucesso em uma sequência de experimentos de Bernoulli independentes. Suas principais características são:

- Cada tentativa resulta em um sucesso (com probabilidade p) ou uma falha (com probabilidade $1-p$);
- As tentativas são independentes entre si;
- A variável aleatória X representa o número de tentativas até o primeiro sucesso (inclusive o sucesso), ou, equivalentemente, o número de falhas antes do primeiro sucesso.

Dizemos que a variável aleatória discreta X segue uma Distribuição Geométrica se:

$$P(X = k) = p(1-p)^{k-1}, \quad k = 1, 2, \ldots$$

Então,

$$E[X] = \frac{1}{p},$$

$$V(X) = \frac{1-p}{p^2}$$

A Figura 5 apresenta um exemplo de Distribuição Geométrica.

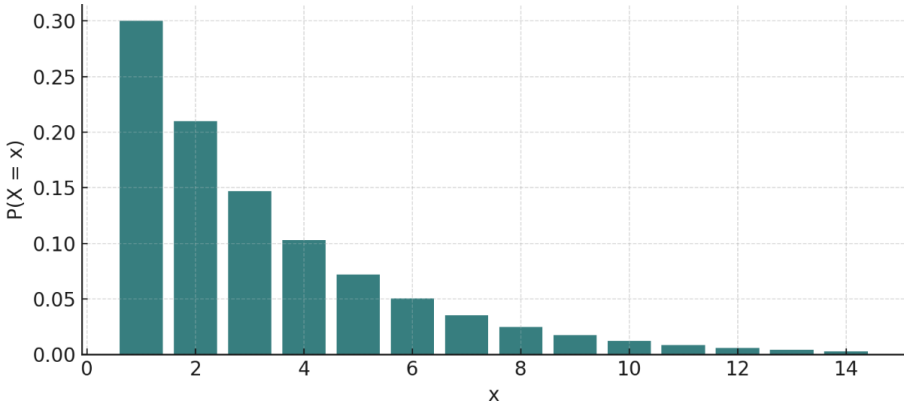


Figura 5: Distribuição Geométrica.

A seguir, apresentamos um exemplo de problema que pode ser modelado por meio da Distribuição Geométrica:

> "Suponha que temos uma urna com 36 bolas, sendo 27 bolas brancas e 9 pretas. Bolas são retiradas até que uma bola preta apareça. Qual é a probabilidade de que precisaremos de mais de 6 retiradas para sortear a primeira bola preta?"

11.7 Distribuição Binomial Negativa

A Distribuição Binomial Negativa é apropriada para modelar situações em que se deseja saber a probabilidade de que um número fixo de sucessos ocorra na k-ésima tentativa, ou seja, quantas falhas ocorrem antes de alcançar um número pré-determinado de sucessos.

- Os experimentos são independentes e possuem apenas dois resultados possíveis: sucesso ou falha;
- A probabilidade de sucesso p é constante em cada tentativa;
- O processo continua até que um número fixo de sucessos seja alcançado.

Seja X o número de repetições necessárias a fim de que ocorram exatamente r sucessos, de modo que o r-ésimo sucesso ocorra na k-ésima tentativa. Então,

$$P(X = k) = \binom{k-1}{r-1} p^r (1-p)^{k-r}, \quad k = r, r+1, \ldots$$

A Figura 6 apresenta um exemplo de Distribuição Binomial Negativa.

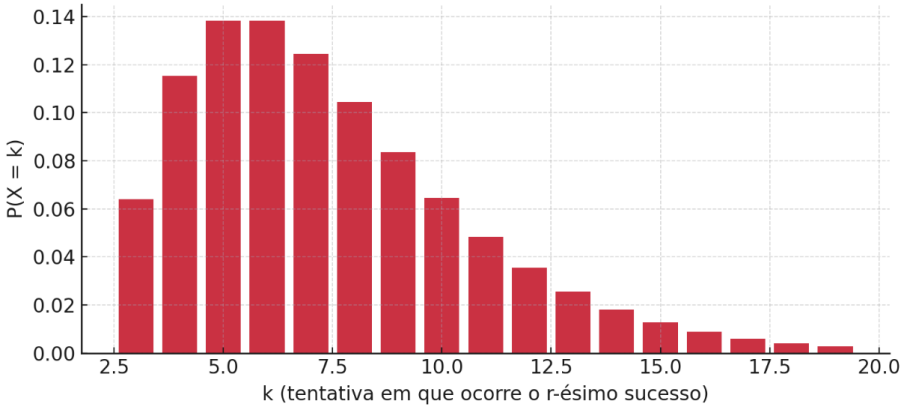


Figura 6: Distribuição Binomial Negativa.

A seguir, apresentamos um exemplo de problema que pode ser modelado por meio da Distribuição Binomial Negativa:

> "Em uma série da liga de futebol amador de uma cidade, o time que ganhar quatro jogos em sete será o vencedor. Suponha que o time A tenha probabilidade $p = 0,6$ de ganhar do time B. Qual é a probabilidade de que A vença a série em seis jogos?"

11.8 Distribuição Hipergeométrica

A Distribuição Hipergeométrica é semelhante à Distribuição Binomial, porém com uma diferença essencial: as retiradas são feitas sem reposição. Enquanto a Distribuição Binomial assume que cada tentativa é independente e a probabilidade de sucesso permanece constante (devido à reposição), a Distribuição Hipergeométrica modela situações em que a probabilidade de sucesso varia a cada retirada, pois os elementos não são devolvidos ao conjunto.

Considere um conjunto de N objetos, dos quais N_1 são do tipo 1 e $N_2 = N - N_1$ são do tipo 2. Para um sorteio de n objetos ($n < N$), sem reposição, seja X a variável aleatória que define o número de objetos do tipo 1 sorteados. Então, a probabilidade de sortearmos k objetos do tipo 1 é:

$$P(X = k) = \frac{\binom{N_1}{k}\binom{N-N_1}{n-k}}{\binom{N}{n}}, \quad k = 0, 1, \ldots, n$$

A Figura 7 apresenta um exemplo de Distribuição Hipergeométrica.

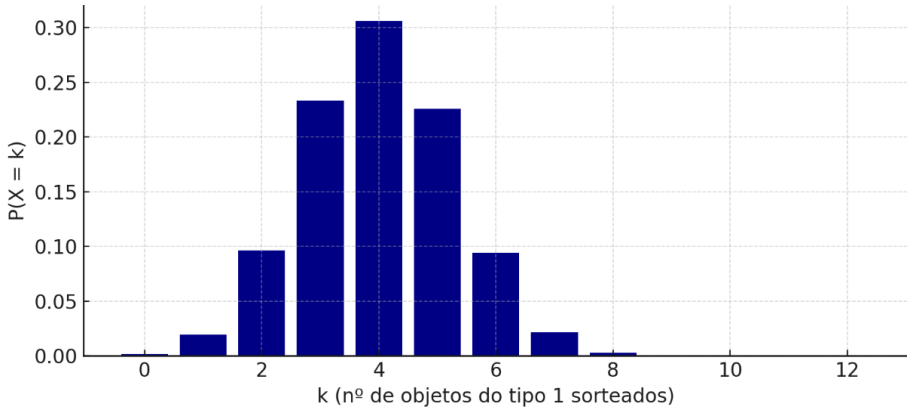


Figura 7: Distribuição Hipergeométrica.

A seguir, apresentamos um exemplo de problema que pode ser modelado por meio da Distribuição Hipergeométrica:

> "Numa urna há 40 bolas brancas e 60 pretas. Retiram-se 20 bolas. Qual a probabilidade de que ocorram no mínimo 2 bolas brancas, considerando extrações sem reposição?"

12 Modelos Probabilísticos Contínuos

12.1 Distribuição Uniforme Contínua

Uma variável aleatória contínua X segue uma Distribuição Uniforme se sua função densidade de probabilidade é dada por:

$$f(x) = \begin{cases} \frac{1}{b-a}, & x \in [a, b] \\ 0, & x \notin [a, b] \end{cases}$$

Então,

$$E[X] = \frac{a+b}{2},$$

$$V(X) = \frac{(b-a)^2}{12}$$

A Figura 8 apresenta um exemplo de Distribuição Uniforme contínua.

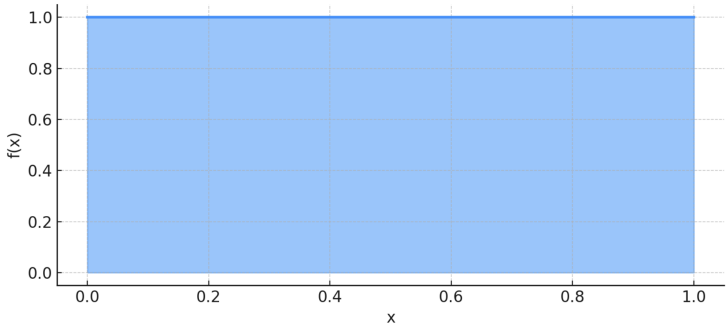


Figura 8: Distribuição Uniforme contínua.

12.2 Distribuição Normal

Uma variável aleatória contínua X que tome todos os valores na reta real segue a Distribuição Normal (ou Gaussiana) se sua função densidade de probabilidade é definida por:

$$f(x) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{x-\mu}{\sigma}\right)^2\right], \quad -\infty < x < \infty$$

onde $\mu = E[X]$ e $\sigma^2 = V(X) > 0$.

A Distribuição Normal apresenta as seguintes propriedades:

- $f(x)$ é simétrica em relação à μ.
- $f(x) \to 0$ quando $x \to \pm\infty$.
- O valor máximo de $f(x)$ ocorre em $x = \mu$.

Se X é uma variável aleatória contínua com Distribuição Normal, $X \sim \mathcal{N}(\mu, \sigma^2)$, e se $Y = aX + b$, com a e b constantes, então

$$Y \sim \mathcal{N}(a\mu + b, a^2\sigma^2).$$

Seja $X \sim \mathcal{N}(\mu, \sigma^2)$. Se

$$Z = \frac{X-\mu}{\sigma},$$

então $Z \sim \mathcal{N}(0, 1)$.

Assim,

$$\begin{aligned} P(a \leq X \leq b) &= P\left(\frac{a-\mu}{\sigma} \leq \frac{X-\mu}{\sigma} \leq \frac{b-\mu}{\sigma}\right) \\ &= P\left(\frac{a-\mu}{\sigma} \leq Z \leq \frac{b-\mu}{\sigma}\right) \\ &= P(X \leq b) - P(X \leq a). \end{aligned}$$

A tabela Normal pode ser acessada através do link `https://en.wikipedia.org/wiki/Standard_normal_table#Table_examples`.

A Figura 9 apresenta um exemplo de Distribuição Normal. Note que μ define o centro da curva e σ a abertura.

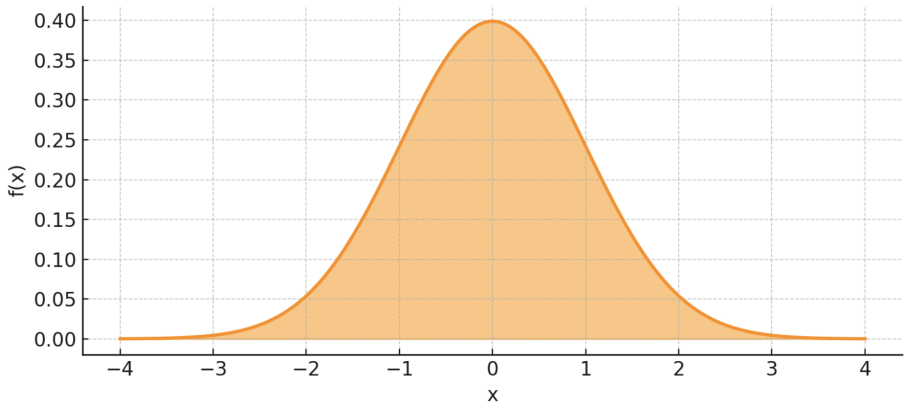


Figura 9: Distribuição Normal.

12.3 Distribuição Exponencial

Uma variável aleatória contínua X segue o modelo exponencial se sua função densidade de probabilidade é dada por:

$$f(x) = \begin{cases} \lambda e^{-\lambda x}, & x \geq 0 \\ 0, & x < 0 \end{cases}$$

onde $\lambda > 0$ e $-\infty < x < \infty$.

Então,

$$E[X] = \frac{1}{\lambda},$$

$$V(X) = \frac{1}{\lambda^2}$$

E a função de distribuição acumulada é dada por:

$$F(x) = \begin{cases} 1 - e^{-\lambda x}, & x \geq 0 \\ 0, & x < 0 \end{cases}$$

A Distribuição Exponencial é derivada a partir de um processo de Poisson (cadeia de Markov de tempo contínuo). Ela apresenta a propriedade de "ausência de memória", isto é:

$$P(X \geq t + s \mid X \geq s) = P(X \geq t)$$

A Figura 10 apresenta um exemplo de Distribuição Exponencial. Note que λ é onde começa o decaimento no eixo y.

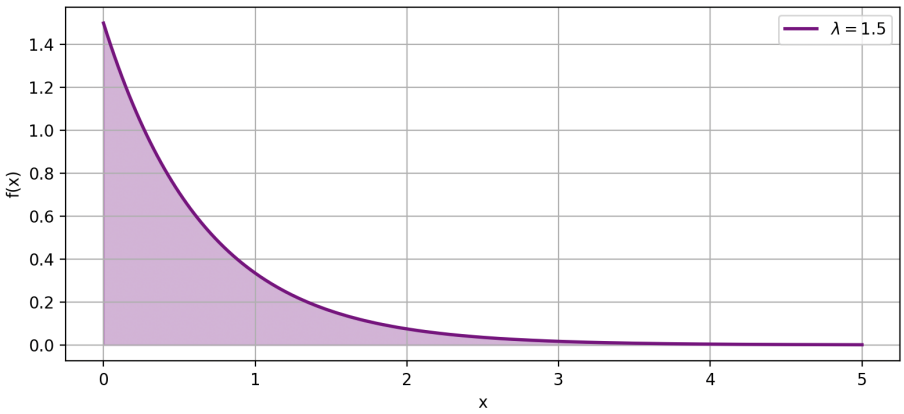


Figura 10: Distribuição Exponencial.

12.4 Distribuição Gama

Uma variável aleatória contínua X tem Distribuição Gama com parâmetros $\lambda > 0$ e $\alpha > 0$, se sua função densidade de probabilidade é dada por:

$$f(x) = \begin{cases} \frac{\lambda^\alpha}{\Gamma(\alpha)} x^{\alpha-1} e^{-\lambda x}, & x \geq 0, \\ 0, & x < 0, \end{cases}$$

onde Γ é a função gama:

$$\Gamma(\alpha) = \int_0^\infty t^{\alpha-1} e^{-t}\, dt.$$

Então,

$$E[X] = \frac{\alpha}{\lambda},$$

$$V(X) = \frac{\alpha}{\lambda^2}$$

Se α for um número inteiro positivo, a distribuição representará uma Distribuição Erlang, ou seja, a soma de α variáveis aleatórias independentes distribuídas exponencialmente, cada uma delas com uma média $\theta = 1/\lambda$.

A Distribuição Exponencial é um caso especial da Distribuição Gama onde $\alpha = 1$.

A Figura 11 apresenta um exemplo de Distribuição Gama.

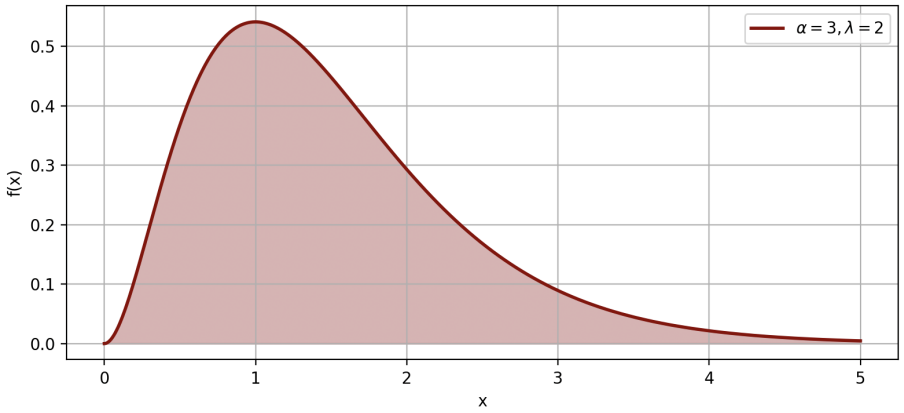


Figura 11: Distribuição Gama.

12.5 Distribuição Qui-Quadrado

A variável aleatória contínua X segue a Distribuição Qui-Quadrado (denominada χ^2) se sua função densidade de probabilidade é dada por:

$$f(x) = \begin{cases} \frac{x^{k/2-1}e^{-x/2}}{2^{k/2}\Gamma(k/2)}, & x > 0, \\ 0, & x \leq 0, \end{cases}$$

A Distribuição Qui-Quadrado é definida pela soma de k distribuições normais padronizadas e independentes. Ou seja, X tem Distribuição Qui-Quadrado com k graus de liberdade se

$$X = \sum_{i=1}^{k} Z_i^2,$$

onde $Z_1, Z_2, \ldots, Z_k$ são variáveis aleatórias com Distribuição Normal padronizada,

$$Z_i \sim \mathcal{N}(\mu = 0, \sigma^2 = 1), \quad i = 1, \ldots, k.$$

Para denominar que X segue uma Distribuição Qui-Quadrado, usamos $X \sim \chi^2(k)$ ou $X \sim \chi^2_k$.

A Figura 12 apresenta um exemplo de Distribuição Qui-Quadrado.

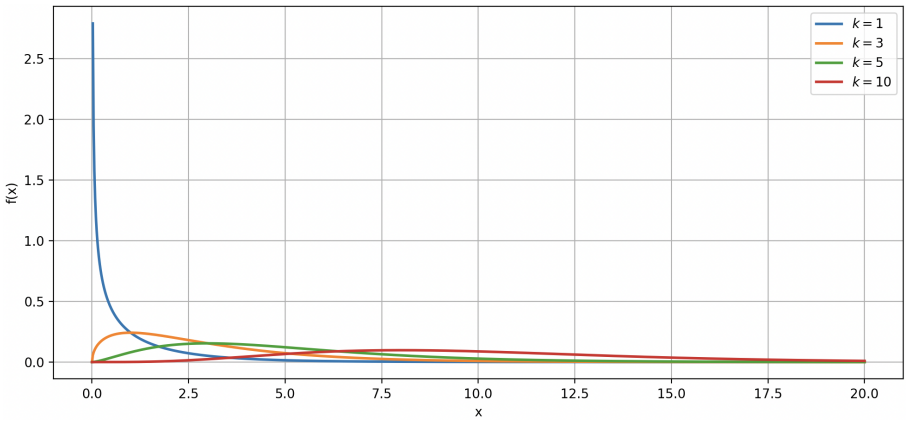


Figura 12: Distribuição Qui-Quadrado.

12.6 Distribuição Beta

Seja X uma variável aleatória contínua limitada em $[0, 1]$. Dizemos que X segue uma Distribuição Beta se sua função densidade de probabilidade é dada por:

$$f(x) = \begin{cases} \frac{1}{B(\alpha,\beta)} x^{\alpha-1}(1-x)^{\beta-1}, & 0 < x < 1, \\ 0, & \text{caso contrário}, \end{cases}$$

onde $\alpha, \beta > 0$ e

$$B(\alpha, \beta) = \int_0^1 x^{\alpha-1}(1-u)^{\beta-1}\, du,$$

é a função beta, que atua como uma constante de normalização para que a área da função densidade de probabilidade seja igual a um.

A Figura 13 apresenta um exemplo de Distribuição Beta. Note que o limite onde ela é definida no eixo x é de 0 a 1.

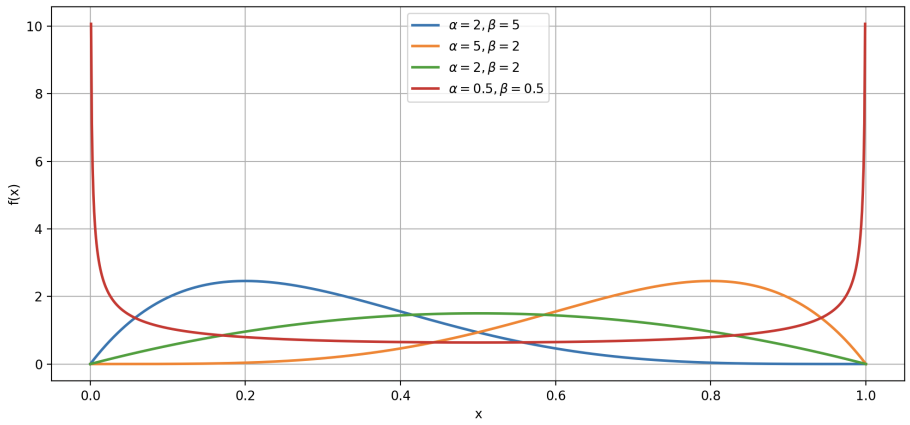


Figura 13: Distribuição Beta.

12.7 Distribuição t de Student

A variável aleatória X tem Distribuição t de Student com ν graus de liberdade se sua função densidade de probabilidade é dada por:

$$f(x) = \frac{\Gamma\left(\frac{\nu+1}{2}\right)}{\sqrt{\nu\pi}\,\Gamma\left(\frac{\nu}{2}\right)}\left(1+\frac{x^2}{\nu}\right)^{-\frac{\nu+1}{2}}, \quad -\infty < x < \infty$$

onde Γ é a função gama:

$$\Gamma(\alpha) = \int_0^\infty t^{\alpha-1}e^{-t}\,dt$$

Quando aumentamos ν, a distribuição se aproxima da Distribuição Normal.

A Figura 14 apresenta um exemplo de Distribuição t de Student.

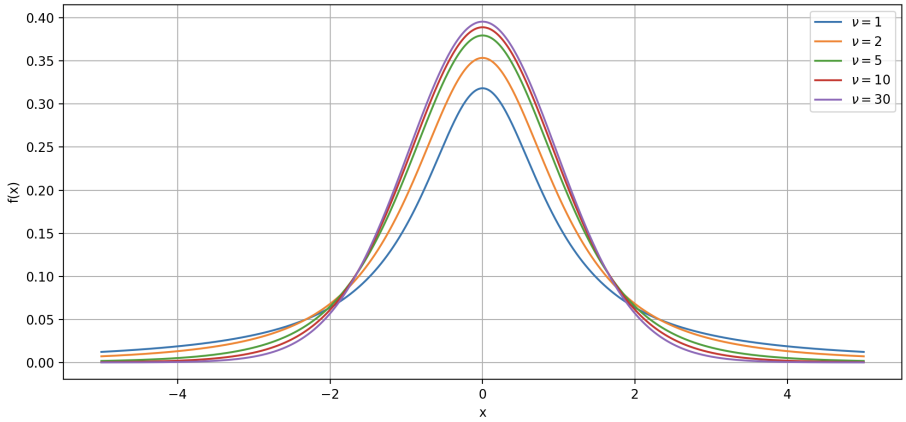


Figura 14: Distribuição t de Student.

12.8 Distribuição Weibull

Dizemos que a variável aleatória contínua X segue a Distribuição Weibull se:

$$f(x;\lambda,k) = \begin{cases} \frac{k}{\lambda}\left(\frac{x}{\lambda}\right)^{k-1} e^{-(x/\lambda)^k}, & x \geq 0, \\ 0, & x < 0, \end{cases}$$

Então,

$$E[X] = \lambda\,\Gamma\left(1+\frac{1}{k}\right),$$

$$\text{var}[X] = \lambda^2\left[\Gamma\left(1+\frac{2}{k}\right) - \left(\Gamma\left(1+\frac{1}{k}\right)\right)^2\right]$$

A Distribuição Exponencial é um caso especial da Distribuição de Weibull onde $k = 1$.

A Figura 15 apresenta um exemplo de Distribuição Weibull.

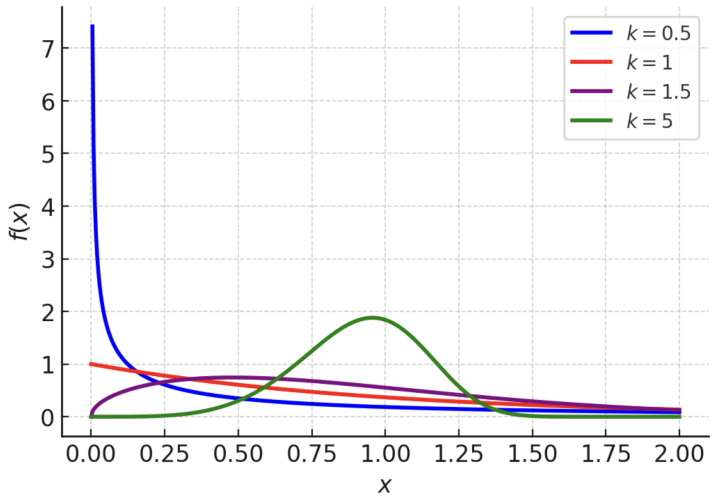


Figura 15: Distribuição Weibull.

13 Variáveis Aleatórias Multidimensionais

13.1 Discretas

Seja ϵ um experimento aleatório associado a um espaço amostral Ω. Sejam $X_1 = X_1(\omega), X_2 = X_2(\omega), \ldots$, funções que associam um número real a cada resultado $\omega \in \Omega$. Denominamos vetor aleatório o conjunto $\mathbf{X} = [X_1, X_2, \ldots]$.

Sejam X e Y variáveis aleatórias associadas a um espaço amostral Ω. O par (X, Y) será uma variável aleatória discreta bidimensional se os valores possíveis forem finitos ou infinitos enumeráveis. A cada resultado possível (x_i, y_j), $i, j = 1, 2, \ldots$, associamos um número

$$p(x_i, y_j) = P(X = x_i, Y = y_j)$$

satisfazendo:

- $0 \leq P(X = x_i, Y = y_j) \leq 1 \quad \forall\,(x_i, y_j),\ i, j = 1, 2, \ldots$
- $\sum_{i=1}^{\infty}\sum_{j=1}^{\infty} P(X = x_i, Y = y_j) = 1$

13.2 Contínuas

Sejam X e Y variáveis aleatórias associadas a um espaço amostral Ω. O par (X, Y) será uma variável aleatória contínua bidimensional se (X, Y) tomar todos os valores em algum conjunto não enumerável do $\mathbb{R}^2$. A esse par, associamos uma função densidade de probabilidade conjunta que satisfaz:

- $f(x,y) \geq 0 \quad \forall (x,y) \in \mathbb{R}^2$
- $\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} f(x,y)\, dx\, dy = 1$

13.3 Distribuição de Probabilidade Marginal

Seja (X, Y) uma variável aleatória discreta bidimensional. Então, a distribuição de probabilidade marginal de X é definida por:

$$P(X = x_i) = \sum_{j=1}^{\infty} P(X = x_i, Y = y_j) \tag{1}$$

e a de Y:

$$P(Y = y_j) = \sum_{i=1}^{\infty} P(X = x_i, Y = y_j) \tag{2}$$

Então a função de densidade de probabilidade marginal é dada por: As funções densidade de probabilidade marginais são dadas por:

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

$$f_Y(y) = \int_{-\infty}^{\infty} f(x,y)\, dx$$

Então:

$$P(a \leq x \leq b) = \int_a^b f_X(x)\, dx$$

$$P(c \leq y \leq d) = \int_c^d f_Y(y)\, dy$$

13.4 Probabilidade Condicional Discreta

Seja o vetor aleatório bidimensional (X, Y). A probabilidade condicional de $X = x$ dado que $Y = y$ foi observada é dada por:

$$P(X = x \mid Y = y) = \frac{P(X = x,\, Y = y)}{P(Y = y)}, \quad P(Y = y) > 0.$$

13.5 Probabilidade Condicional Contínua

Seja (X, Y) um vetor aleatório bidimensional contínuo com função densidade de probabilidade conjunta $f(x, y)$. Sejam $f_X(x)$ e $f_Y(y)$ as funções densidade de probabilidade marginais de X e Y, respectivamente. Então, a função densidade de probabilidade condicional de X dado que $Y = y$ é definida por:

$$f_{X|Y}(x|y) = \frac{f(x,y)}{f_Y(y)}, \quad f_Y(y) > 0$$

e a função densidade de probabilidade condicional de Y dado que $X = x$,

$$f_{Y|X}(y|x) = \frac{f(x,y)}{f_X(x)}, \quad f_X(x) > 0$$

13.6 Independência

Dizemos que as variáveis aleatórias X e Y são independentes se, e somente se:

- Caso discreto:

$$P(X = x_i, Y = y_j) = P(X = x_i)P(Y = y_j), \quad \forall i \neq j$$

- Caso contínuo:

$$f(x,y) = f_X(x) f_Y(y), \quad \forall (x,y) \in \mathbb{R}^2.$$

14 Esperança Multidimensional

Sejam X e Y variáveis aleatórias e $g(X,Y)$ uma função de X e Y. Então, a esperança de $g(X,Y)$ é definida por:

- Caso discreto:

$$E[g(X,Y)] = \sum_{i=1}^{\infty} \sum_{j=1}^{\infty} g(x_i, y_j) \Pr(X = x_i,\, Y = y_j)$$

- Caso contínuo:

$$E[g(X,Y)] = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} g(x,y)\, f_{X,Y}(x,y)\, dx\, dy$$

Se as variáveis aleatórias X e Y forem independentes, então:

$$E[XY] = E[X]\, E[Y]$$

15 Variância Multidimensional

Sejam X e Y variáveis aleatórias e $g(X,Y)$ uma função de X e Y. Então, a variância de $g(X,Y)$ é definida por:

$$V[g(X,Y)] = E\left[g(X,Y)^2\right] - \left(E[g(X,Y)]\right)^2$$

Se as variáveis aleatórias X e Y forem independentes, então:

$$V(X+Y) = V(X) + V(Y)$$

16 Esperança Condicional

A esperança condicional para as variáveis aleatórias X e Y é definida por:

- Caso discreto:

$$E[X \mid Y = y] = \sum_{i=1}^{n} x_i\, P(X = x_i \mid Y = y)$$

$$E[Y \mid X = x] = \sum_{j=1}^{m} y_j\, P(Y = y_j \mid X = x)$$

- Caso contínuo:

$$E[X \mid Y = y] = \int_{-\infty}^{\infty} x\, f_{X|Y}(x \mid y)\, dx$$

$$E[Y \mid X = x] = \int_{-\infty}^{\infty} y\, f_{Y|X}(y \mid x)\, dy$$

17 Variância Condicional

A variância condicional para as variáveis aleatórias X e Y é definida por:

$$V(X \mid Y) = E[X^2 \mid Y] - \{E[X \mid Y]\}^2$$

18 Lei da Esperança Total

Sejam X e Y duas variáveis aleatórias. Então:

$$E(X) = E\left[E(X \mid Y)\right]$$

Assim,

$$E[X] = \sum_y E[X \mid Y = y]\, P(Y = y),$$

$$E[Y] = \sum_x E[Y \mid X = x]\, P(X = x).$$

19 Covariância

Sejam X e Y variáveis aleatórias. A covariância de X e Y é definida por:

$$\mathrm{Cov}(X, Y) = E\left[(X - E\left[X\right])(Y - E\left[Y\right])\right]$$

Portanto,

$$\mathrm{Cov}(X, Y) = E\left[XY\right] - E\left[X\right] E(Y)$$

Note que:

$$\mathrm{Cov}(X, X) = E\left[(X - E\left[X\right])^2\right] = V(X)$$

20 Correlação de Pearson

Sejam X e Y duas variáveis aleatórias. A correlação de X e Y é definida por:

$$\rho_{X,Y} = \frac{E[(X - E[X])(Y - E[Y])]}{\sqrt{V(X)V(Y)}} = \frac{\mathrm{cov}(X, Y)}{\sigma_X \sigma_Y}$$

onde $V(X)$ e $V(Y)$ são as variâncias de X e Y, respectivamente.

A correlação de Pearson nada mais é que a covariância normalizada (limitada entre -1 e 1).

O coeficiente de Pearson pode ser definido para uma amostra de dados, onde, nesse caso, usamos os estimadores da covariância e variância. Assim, o coeficiente de Pearson para uma amostra é dado por:

$$r = \frac{\sum_{i=1}^{n}(x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y})}{\sqrt{\sum_{i=1}^{n}(x_i - \bar{x})^2}\,\sqrt{\sum_{i=1}^{n}(y_i - \bar{y})^2}},$$

onde $-1 \leq r \leq 1$ e x_i, y_i, $i = 1, 2, \ldots, n$, são os valores observados.

Quando a correlação de Pearson é igual a 0, não implica que não tem uma correlação, mas sim que essa correlação não é linear.

21 Modelos Probabilísticos Multidimensionais

21.1 Distribuição Normal Multidimensional

O vetor aleatório $\mathbf{X}$ segue a Distribuição Normal multidimensional se sua função densidade de probabilidade conjunta é dada por:

$$f(x;\mu,\Sigma) = \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^{d/2}|\Sigma|^{1/2}}} \exp\left(-\frac{1}{2}(x-\mu)^\top \Sigma^{-1}(x-\mu)\right),$$

onde μ é o vetor que armazena a média e Σ é a matriz de covariância. $|\Sigma|$ e Σ^{-1} são o determinante e a inversa de Σ, respectivamente.

A matriz de covariância é uma matriz quadrada cujas entradas são iguais à covariância de cada par de entradas do vetor aleatório. No caso bidimensional, temos

$$\Sigma = \begin{bmatrix} \sigma_{11}^2 & \sigma_{12} \\ \sigma_{12} & \sigma_{22}^2 \end{bmatrix}$$

onde

$$\sigma_{ii}^2 = V(X_i) = E\left[(X_i - E[X_i])^2\right], \quad i = 1, 2,$$

é a variância de X_i; e

$$\sigma_{ij} = \text{cov}(X_i, X_j) = E\left[(X_i - E[X_i])(X_j - E[X_j])\right], \quad i \neq j,$$

é a covariância entre X_i e X_j.

22 Simulação de Monte Carlo

Um dos métodos mais populares para simular processos probabilísticos foi proposto por na década de 40 por Stanislaw Ulam, que estava trabalhando no desenvolvimento da bomba atômica, no Los Alamos National Laboratory, nos Estados Unidos. Uma método parecido havia sido proposto por Enrico Fermi no estudo de difusão de neutrons, mas ele não publicou a ideia. A patir do trabalho de Ulam, John von Neumann adaptou o método e programou o ENIAC (Electronic Numerical Integrator and Computer), que foi o primeiro computador programável, de forma geral, da história. John von Neumann chamou o método de Método de Monte Carlo, que, basicamente, é usado para gerar números aleatórios a partir de uma certa distribuição de probabilidades. O nome se deve à cidade de Monte Carlo, no principado de Mônaco, que possui diversos cassinos. O método de Monte Carlo possui as mais diversas aplicações que vão desde o estudo de emissões nucleares até inferência Bayesiana, sendo, nesse caso, é usada uma adaptação do método chamada Markov Chain Monte Carlo (MCMC).

22.1 Geração de Números Aleatórios

O primeiro passo na simulação de processos estocásticos é a geração de números aleatórios, ou seja, gerar números no intervalo $[0, 1]$ onde todos os valores tem a mesma chance de ocorrerem (Distribuição Uniforme).

No método chamada Linear Congruential Generator, nós geramos uma sequência de números pseudo-aleatórios através da relação de recorrência:

$$X_{n+1} = (aX_n + c) \mod m$$

onde X_0 é a semente, m, a e c são inteiros maiores do que zero, e $\mod$ é o resto da divisão. A sequência obtida satisfaz $0 \leq X_i \leq m$. Para gerar o número no intervalo [0,1], usamos

$$U_n = X_n/m.$$

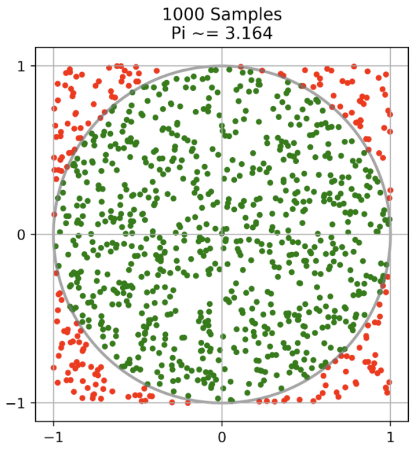
Porém, esse método gera sequências periódicas. Ou seja, não temos um bom gerador de números aleatórios, pois podemos prever o próximo número se descobrir a sequência.

O gerador pseudo-aleatório linear produz uma sequência aperiódica se as seguintes condições forem sastisfeitas:

- $X_{n+1} = (aX_n + c) \mod m, \quad U_n = X_n/m;$
- Se q é um número primo que divide m, então ele divide $b = a - 1$;
- Se m é múltiplo de 4, então $b = a - 1$ deve ser múltiplo de 4;
- O único inteiro que divide exatamente m e c é valor um.

22.2 Cálculo de π

$$P\big((X,Y) \in \text{círculo}\big) = P\big(X^2 + Y^2 \leq R^2\big),$$



$$P(X^2 + Y^2 \leq R^2) = \frac{\text{Área do círculo}}{\text{Área do quadrado}} = \frac{\pi R^2}{(2R)^2} = \frac{\pi}{4}.$$

22.3 Cálculo de Integral

Seja a integral:

$$\theta = \int_0^1 g(u)\, du.$$

Vamos considerar a Distribuição Uniforme em $[a, b]$,

$$f(u) = \begin{cases} \dfrac{1}{b-a}, & a \leq u \leq b, \\ 0, & \text{caso contrário.} \end{cases}$$

Se $a = 0$ e $b = 1$, temos a Distribuição Uniforme em $[0, 1]$,

$$f(u) = \begin{cases} 1, & 0 \leq u \leq 1, \\ 0, & \text{caso contrário.} \end{cases}$$

Assim, podemos escrever θ como:

$$\theta = \int_0^1 1 \cdot g(u)\, du = \int_0^1 f(u)\, g(u)\, du = E[g(U)],$$

onde U é uma variável aleatória com Distribuição Uniforme em $[0, 1]$.

22.3.1 Integrais Impróprias

Podemos ainda usar números aleatórios para calcular integrais impróprias, cujos limites de integração são definidos em $[0, \infty)$, isto é,

$$\theta = \int_0^\infty g(x)\, dx.$$

Fazendo uma mudança de variáveis,

$$y = \frac{1}{x+1} \implies dy = -\left(\frac{1}{x+1}\right)^2 dx = -y^2 dx \implies dx = \frac{dy}{y^2}.$$

Note que:

$$\lim_{x\to 0} \frac{1}{x+1} = 1, \quad \lim_{x\to\infty} \frac{1}{x+1} = 0.$$

Assim,

$$\theta = \int_0^\infty g(x)\, dx = \int_1^0 g\left(\frac{1}{y} - 1\right) \frac{dy}{y^2} = \int_0^1 h(y)\, dy,$$

onde

$$h(y) = \frac{g\left(\frac{1}{y} - 1\right)}{y^2}.$$

22.3.2 Integrais Múltiplas

$$\theta = \int_a^b \int_c^d g(x, y)\, dy\, dx,$$

Fazemos as transformações:

$$z = \frac{x-a}{b-a} \implies x = z(b-a) + a \implies dx = (b-a)\, dz,$$

$$w = \frac{y-c}{d-c} \implies y = w(d-c) + c \implies dy = (d-c)\, dw.$$

Assim, temos:

$$\theta = \int_0^1 \int_0^1 h(z, w)\, dz\, dw,$$

onde

$$h(z, w) = (b-a)(d-c)\; g\big(z(b-a) + a,\; w(d-c) + c\big).$$

Assim:

$$\theta = E[h(Z, W)]\,,$$

com $Z, W \sim U(0, 1)$ independentes.

22.4 Simulação de Variáveis Aleatórias

X é uma variável aleatória com função de distribuição $F_X(x) = P(X \leq x)$. Como F_X é estritamente não-decrescente, então:

$$u \leq F_X(x) \iff F_X^{-1}(u) \leq x,$$

onde assumimos que a inversa F_X^{-1} da função F_X existe.

Vamos encontrar a variável aleatória $Y = F_X^{-1}(U)$ que tem a mesma distribuição de X, onde U tem Distribuição Uniforme em $[0, 1]$. Assim, se $F_X(x) = u$, temos:

$$P(U \leq u) = P(U \leq F_X(x)) = P(F_X^{-1}(U) \leq F_X^{-1}(F_X(x))) = P(F_X^{-1}(U) \leq x) = P(Y \leq x) = F_X(x).$$

Essa igualdade ocorre apenas se $Y = F_X^{-1}(U)$ tem a mesma distribuição de X.

Portanto, para simularmos a variável aleatória X, geramos n valores $u_1, u_2, \ldots, u_n$, onde $u_i \sim U(0, 1)$, $i = 1, 2, \ldots, n$, e calculamos $x_i = F_X^{-1}(u_i)$, onde $F_X(x) = P(X \leq x)$ é a função de distribuição de X. O algoritmo geral é dado por:

- Gere um valor u_i a partir da Distribuição Uniforme em $[0, 1]$.
- Calcule $x_i = F_X^{-1}(u_i)$, onde $F_X(x) = P(X \leq x)$ é a distribuição acumulada de X.
- Repita o processo n vezes para simular n valores de X.

23 Análise Exploratória de Dados

23.1 Visualização

- Uma das maneiras mais simples de visualizar a distribuição dos dados é através de gráficos de frequência e histogramas;
- No caso do histograma, a área sob a curva deve ser igual a 1 e ele é uma aproximação da função densidade de probabilidade;
- No caso de variáveis nominais, podemos usar gráficos de barra ou gráficos de setores. Nesse caso, o valor no eixo das abscissas (x) é arbitrário e não deve ser levando em conta;
- Outro gráfico importante é o scatterplot, usado quando queremos verificar a relação entre duas variáveis;
- Quando temos três variáveis, uma maneira de visualizarmos os dados é considerar um gráfico de calor, sendo que a escala de cores define a terceira variável.
- Referência: `https://python-graph-gallery.com/`

23.2 Medidas de Posição

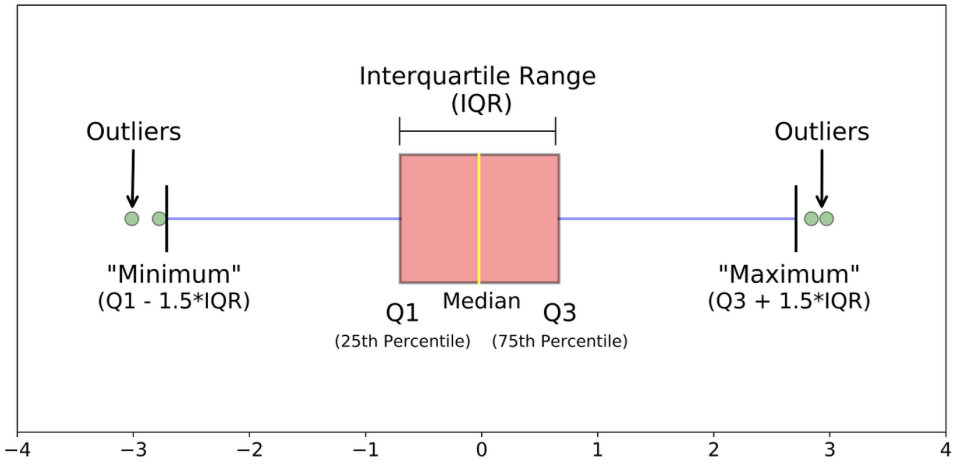
- **Moda**: Uma medida importante de tendência central é a moda, que retorna o elemento mais comum em um conjunto de dados. Geralmente, essa medida é usada para atributos nominais;
- **Média e Mediana**: São medidas de tendência central usadas para dados quantitativos. Assim, a média:

$$\bar{X} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} x_i$$

A média é altamente sensível a valores extremos, enquanto que a mediana é mais robusta. A média é similar à mediana se a distribuição é praticamente simétrica em relação à média. Caso a distribuição não seja simétrica, o mais adequado é usar a mediana como medida central.

- **Percentil**: O percentil é uma medida estatística que indica a posição relativa de um valor dentro de um conjunto de dados, dividindo-o em 100 partes iguais. Ele expressa a porcentagem de valores no conjunto que estão abaixo de um determinado valor.
  - Percentil 25 (ou primeiro quartil): 25% dos valores do conjunto são menores ou iguais a este valor;
  - Percentil 50 (ou mediana): 50% dos valores estão abaixo ou no mesmo nível (é o valor central);
  - Percentil 75 (ou terceiro quartil): 75% dos valores estão abaixo.

  Para visualizar os quantis, podemos usar o boxplot:



23.3 Medidas de Dispersão

- As medidas de dispersão mais usadas são a variância e o desvio padrão;
- A distância interquantil (IQR) também é bastante usada e quantifica a diferença entre o terceiro e primeiro quantil;
- Já a amplitude simplesmente mede a diferença entre os valores máximo e mínimo.

23.4 Correlação

- A medida de correlação é importante para analisar a relação entre as variáveis. Se duas variáveis são altamente correlacionadas, é adequado remover uma delas, de modo a reduzir informação redundante nos dados.
- **Correlação de Pearson**: Como apresentado na Seção 20;
- **Correlação de Spearman**: A correlação de Spearman mede a associação monotônica entre duas variáveis usando seus ranks em vez dos valores brutos (diferente da de Pearson, que mede relação linear), e sua fórmula é:

$$\rho = 1 - \frac{6 \sum d_i^2}{n(n^2 - 1)}$$

  O coeficiente de Spearman nada mais é do que o coeficiente de Pearson aplicado à ordem dos valores.

23.5 Análise dos Componentes Principais

- **Objetivo**: Reduzir a dimensionalidade dos dados mantendo o máximo possível da variabilidade (informação) original;
- **Centralização dos dados**: Subtrai-se a média de cada variável para que tenham média zero;
- **Cálculo da matriz de covariância (ou de correlação)**: Para entender como as variáveis variam juntas.
- **Autovalores e Autovetores**: Extrai-se os autovetores (direções principais) e autovalores (quantidade de variância explicada) da matriz de covariância;
- **Ordenação**: Classifica-se os autovetores pelo autovalor correspondente, do maior para o menor.
- **Seleção de Componentes**: Escolhe-se os primeiros k autovetores que explicam a maior parte da variância;
- **Projeção dos Dados**: Transforma-se os dados originais para o novo espaço definido pelos k componentes principais.
- Para estimarmos o número de componentes para projetarmos os dados, podemos analisar como a variância muda de acordo com o número de componentes.

24 Estimação Pontual

Definições:

1. Um parâmetro é uma medida para descrever uma característica da população;
2. Uma amostra aleatória é uma coleção de variáveis aleatórias $X_1, X_2, \ldots, X_n$ independentes e identicamente distribuídas;
3. Seja uma amostra aleatória $X_1, X_2, \ldots, X_n$ de uma população. Uma estatística é uma função de $X_1, X_2, \ldots, X_n$;
4. Um estimador é uma estatística usada para estimar um parâmetro da população.

24.1 Função de Verossimilhança

Seja $X_1, X_2, \ldots, X_n$ uma amostra aleatória obtida de uma distribuição de probabilidade com parâmetros $\theta_1, \ldots, \theta_k$. Suponha que observamos $X_1 = x_1, X_2 = x_2, \ldots, X_n = x_n$. Então, se as variáveis $X_1, X_2, \ldots, X_n$ são discretas, a função de verossimilhança é definida por:

$$L(\theta; \mathbf{x}) = L(\theta_1, \theta_2, \ldots, \theta_k; x_1, \ldots, x_n) = \prod_{i=1}^{n} P(X_i = x_i; \theta_1, \theta_2, \ldots, \theta_k).$$

Por outro lado, se as variáveis aleatórias são contínuas, então a função de verossimilhança é dada por:

$$L(\theta; \mathbf{x}) = L(\theta_1, \theta_2, \ldots, \theta_k; x_1, \ldots, x_n) = \prod_{i=1}^{n} f(x_i; \theta_1, \theta_2, \ldots, \theta_k).$$

24.2 Estimador de Máxima Verossimilhança

Para realizarmos a maximização da função de verossimilhança, precisamos derivar essa função com relação aos parâmetros θ e igualar o resultado a zero.

No entanto, como essa função é definida em termos de um produtório, para facilitar os cálculos, podemos usar a função logaritmo, de forma a transformar os produtos em somas. Assim,

$$\ell(\theta; \mathbf{x}) = \log\left(L(\theta; \mathbf{x})\right).$$

Estamos usando a base e ($\log(x) = \ln(x)$), mas outras bases também podem ser usadas.

O estimador de máxima verossimilhança $\hat{\theta}$ é definido por:

$$\hat{\theta} = \arg\max_{\theta \in \Theta} \ell(\theta; \mathbf{x}),$$

onde Θ é o espaço dos parâmetros.

Definições:

- Um estimador $\hat{\theta}$ para o parâmetro populacional θ é não viesado (ou não viciado) se:

$$E[\hat{\theta}] = \theta.$$

- Um estimador $\hat{\theta}_n = \hat{\theta}_n(X_1, \ldots, X_n)$ é assintoticamente não viesado se

$$\lim_{n\to\infty} E[\hat{\theta}_n] = \theta.$$

- Uma sequência de estimadores $\hat{\theta}_n = \hat{\theta}_n(X_1, \ldots, X_n)$ é consistente se

$$\lim_{n\to\infty} P\{|\hat{\theta}_n - \theta| > \varepsilon\} = 0, \quad \text{para todo } \varepsilon > 0.$$

  Em outras palavras, uma sequência de estimadores é consistente se:

$$\begin{cases} \lim_{n\to\infty} E[\hat{\theta}_n] = \theta \\ \lim_{n\to\infty} V[\hat{\theta}_n] = 0 \end{cases}$$

Propriedades:

- O estimador de máxima verossimilhança é assintoticamente consistente, de modo que ele converge em probabilidade para a quantidade que está sendo estimada, isto é,

$$\lim_{n\to\infty} P\{|\hat{\theta}_n - \theta| > \varepsilon\} = 0,$$

  onde $\hat{\theta}_n$ é o estimador obtido para uma amostra de tamanho n. Portanto, quando aumentamos o tamanho da amostra, a probabilidade do estimador de estar próximo do parâmetro de população aumenta.

- O estimador de máxima verossimilhança é assintoticamente não viesado, isto é,

$$\lim_{n\to\infty} E[\hat{\theta}] = \theta.$$

- O estimador de máxima verossimilhança é equivarante, ou seja, se $\hat{\theta}$ é o estimador de θ, então $g(\hat{\theta})$ é o estimador de $g(\theta)$
- O estimador é assintoticamente normal, isto é,

$$\frac{\hat{\theta} - \theta}{\hat{se}} \sim \mathcal{N}(0, 1),$$

onde

$$\hat{se} = \sqrt{V(\hat{\theta})},$$

é o erro padrão.

- O estimador de máxima verossimilhança é assintoticamente ótimo e eficiente, sendo, para amostras grandes, o estimador que apresenta menor variância dentre todos os estimadores possíveis.

24.2.1 Estimador de Máxima Verossimilhança da Distribuição Normal

Assim, o Estimador de Máxima Verossimilhança para o modelo normal:

- Média μ:

$$\hat{\mu} = \frac{\sum_{i=1}^{n} X_i}{n} = \bar{X}.$$

- Variância (σ^2):

$$\hat{\sigma}^2 = \frac{\sum_{i=1}^{n} (X_i - \bar{X})^2}{n}.$$

24.2.2 Estimador de Máxima Verossimilhança da Distribuição Binomial

O estimador de verossimilhança do parâmetro θ para uma Distribuição Binomial com parâmetro m (número de experimentos) e θ (probabilidade de sucesso) é dado por:

$$\hat{\theta} = \frac{1}{nm} \sum_{i=1}^{n} X_i.$$

24.2.3 Estimador de Máxima Verossimilhança da Distribuição Exponencial

O estimador de máxima verossimilhança de uma população que segue o modelo exponencial é dado por:

$$\hat{\theta} = \frac{n}{\sum_{i=1}^{n} x_i}.$$

25 Teorema Central do Limite

Seja X uma variável aleatória com esperança $E[X] = \mu$ e variância $V(X) = \sigma^2$. Seja $\bar{X}$ a média amostral calculada a partir de n amostras independentes e identicamente distribuídas de X, $X_1, X_2, \ldots, X_n$, onde $E[X_i] = \mu$ e $V(X_i) = \sigma^2$, $i = 1, 2, \ldots, n$.

A distribuição amostral de $\bar{X}$ aproxima-se, para n grande, de uma Distribuição Normal com:

$$E[\bar{X}] = \mu,$$

$$V(\bar{X}) = \frac{\sigma^2}{n}.$$

Definição equivalente de Lindeberg-Lévy: Suponha que $\{X_1, X_2, \ldots, X_n\}$ é uma sequência de variáveis aleatórias independentes e identicamente distribuídas com média $E[X_i] = \mu$ e variância

$V(X_i) = \sigma^2 < \infty$. Então, quando $n \to \infty$, as variáveis aleatórias $\sqrt{n}(\bar{X}_n - \mu)$ convergem para uma Distribuição Normal $\mathcal{N}(0, \sigma^2)$.

$$\sqrt{n}(\bar{X}_n - \mu) \xrightarrow{d} \mathcal{N}(0, \sigma^2)$$

Corolário: Seja $\{X_1, X_2, \ldots, X_n\}$ uma amostra de uma população X com média μ e variância $\sigma^2 < \infty$. Então,

$$Z = \frac{\bar{X} - \mu}{\sigma/\sqrt{n}} \sim \mathcal{N}(\mu = 0, \sigma^2 = 1)$$

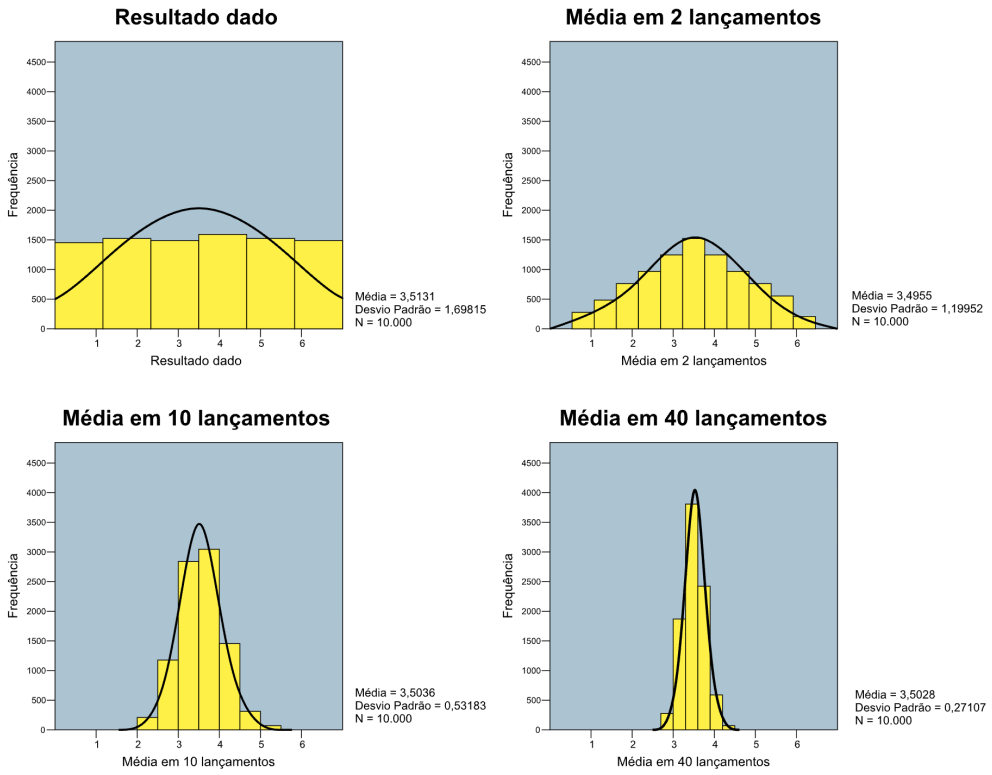


Figura 16: Teorema Central do Limite.

No caso em que a variável aleatória é binária, o Teorema Central do Limite pode ser adaptado para o caso de proporções. Seja $\{X_1, X_2, \ldots, X_n\}$ uma amostra aleatória independente e identicamente distribuída onde:

$$\begin{cases} P(X_i = 1) = p \\ P(X_i = 0) = 1 - p. \end{cases}$$

O número de sucessos é dado pela soma das variáveis aleatórias,

$$S_n = \sum_{i=1}^{n} X_i$$

Assim, temos que $\bar{X} = S_n/n$. Com isso, usando os resultados anteriores, obtemos:

$$Z = \frac{\bar{X} - \mu}{\sigma/\sqrt{n}} \sim \mathcal{N}(\mu = 0, \sigma^2 = 1),$$

onde $\mu = p$ e $\sigma^2 = p(1-p)$ são a esperança e variância da Distribuição de Bernoulli, respectivamente.

Portanto,

$$Z = \frac{\bar{X} - p}{\sqrt{p(1-p)/n}} \sim \mathcal{N}(\mu = 0, \sigma^2 = 1)$$

26 Lei dos Grandes Números

No século XVI, em seu livro sobre jogos de azar, Gerolamo Cardano (1501-1576) afirmou que a acurácia de experimentos estatísticos tende a aumentar com o número de tentativas. Por exemplo, se lançamos uma moeda justa e calculamos a probabilidade de sair cara, essa probabilidade deve ser aproximar cada vez mais do valor 0.5 na medida em que aumentarmos o número de lançamentos.

Lei Fraca dos Grandes Números

Sejam $X_1, X_2, \ldots, X_n$ variáveis aleatórias independentes e identicamente distribuídas com esperança $E[X_i] = \mu < \infty$, $i = 1, 2, \ldots, n$. Seja $\epsilon > 0$. Então,

$$\lim_{n\to\infty} P(|\bar{X} - \mu| \geq \epsilon) = 0,$$

onde $\bar{X} = \sum_{i=1}^{n} X_i/n$ é a média amostral.

Ou seja:

$$\lim_{n\to\infty} \sum_{i=1}^{n} \frac{X_i}{n} = \mu = E[X].$$

Lei Forte dos Grandes Números

Seja $S_n = \sum_{i=1}^{n} X_i$ a soma de n variáveis aleatórias independentes e identicamente distribuídas, cada uma com média $E[X_i] = \mu$, $i = 1, 2, \ldots, n$. Seja ainda $\bar{X} = S_n/n$. Então,

$$P\left(\lim_{n\to\infty} \bar{X} = \mu\right) = 1.$$

Em resumo, podemos dizer que na Lei Fraca dos Grandes Números, há uma alta probabilidade de que $\bar{X}_n$ se aproxime de $E[X] = \mu$ quando n cresce. Essa propriedade é chamada de convergência fraca. Já no caso da Lei Forte dos Grandes Números, pode-se afirmar, com certeza, que a média amostral convergirá para a média μ quando $n \to \infty$. Esse tipo de convergência é chamada de "convergência quase certa".

27 Desigualdade de Markov

Seja X uma variável aleatória com valores não-negativos. Então, para $\delta > 0$, temos:

$$P(X \geq \delta) \leq \frac{E[X]}{\delta}, \quad E[X] < \infty.$$

28 Desigualdade de Chebyshev

Seja X uma variável aleatória com esperança $E[X] = \mu$ variância $V(X) = \sigma^2$. Então, para todo $\delta > 0$,

$$P(|X - \mu| \geq \delta) \leq \frac{\sigma^2}{\delta^2}$$

29 Desigualdade de Jensen

Seja $g(X)$ uma função convexa de uma variável aleatória X. Então,

$$E[g(X)] \geq g(E[X])$$

30 Função Geratriz de Momentos

Seja X uma variável aleatória discreta ou contínua. A função geratriz de momentos de X é definida por:

$$M_X(t) = E[e^{tX}].$$

Seja $M_X(t)$ a função geratriz de momentos da variável aleatória X. Então:

$$\frac{d^n}{dt^n} M_X(t)\bigg|_{t=0} = E[X^n].$$

Sejam X e Y variáveis aleatórias independentes. Então:

$$M_{X+Y}(t) = M_X(t) M_Y(t)$$

Sejam $X_1, X_2, \ldots, X_n$ variáveis aleatórias independentes. Então:

$$M_{X_1+X_2+\ldots+X_n}(t) = M_{X_1}(t) M_{X_2}(t) \ldots M_{X_n}(t)$$

31 Intervalos de Confiança

- Como ocorre flutuação estatística de uma amostra para outra, para caracterizarmos um estimador, é mais adequado definirmos um intervalo de confiança do que usar um único valor estimado.
- O intervalo de confiança é construído levando-se em consideração a variabilidade dos dados amostrais e o tamanho da amostra. Ele fornece uma faixa de valores plausíveis para o parâmetro populacional com base na amostra coletada.

O intervalo de confiança de $\gamma = (1-\alpha)100\%$ para a média populacional μ de uma população com variância conhecida σ^2 é dado por:

$$IC(\mu; 1-\alpha) = \left[\bar{X}_n - z_{\alpha/2}\frac{\sigma}{\sqrt{n}};\ \bar{X}_n + z_{\alpha/2}\frac{\sigma}{\sqrt{n}}\right].$$

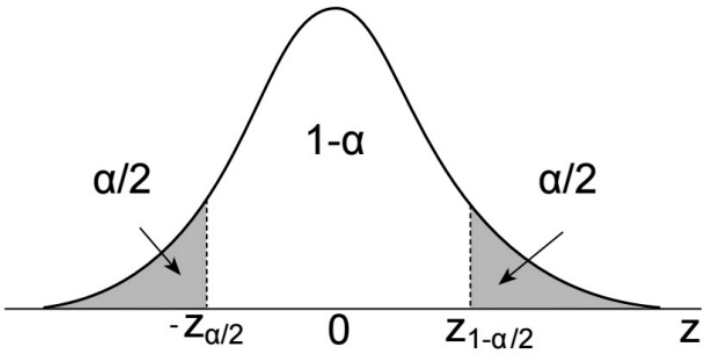


Figura 17: Intervalo de Confiança.

Notem que o nível de confiança, o tamanho da amostra e a variância da população influenciam no comprimento do intervalo. Para um nível de confiança fixo, o comprimento do intervalo diminui de acordo com o tamanho da amostra n. Em outras palavras, quanto maior a amostra, menor o comprimento do intervalo, o que reduz a incerteza nos resultados.

Observem que para calcular o intervalo de confiança, precisamos conhecer o desvio padrão da população. No entanto, na maioria dos problemas de inferência estatística, não temos acesso ao valor desse parâmetro, o que é esperado, já que também não conhecemos a média. Nessas situações, devemos considerar o desvio padrão amostral, que é um estimador não viesado e consistente para o desvio padrão da população. O desvio padrão amostral é definido por:

$$S_n = \sqrt{\frac{1}{n-1}\sum_{i=1}^{n}(X_i - \bar{X}_n)^2}$$

Para calcularmos o intervalo de confiança, substituímos o desvio padrão populacional pelo amostral e usamos o teorema a seguir.

A estatística

$$T = \frac{\bar{X}_n - \mu}{S_n/\sqrt{n}}$$

possui Distribuição t de Student com $n-1$ graus de liberdade. Similar ao Z, mas usado quando $n \leq 50$.

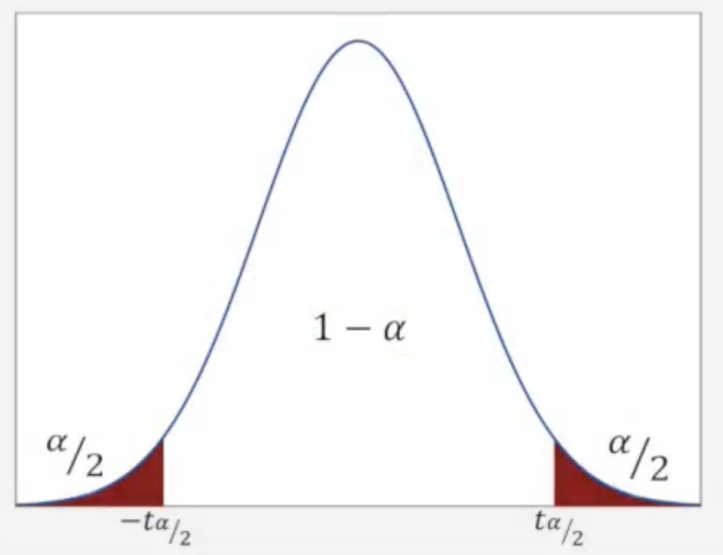


Figura 18: Intervalo de Confiança com t de Student.

O intervalo de confiança de $\gamma = (1-\alpha)100\%$ para a média populacional μ, de uma população com variância desconhecida, é dado por:

$$IC(\mu; 1-\alpha) = \left[\bar{X}_n - t_{\alpha/2,n-1}\frac{S_n}{\sqrt{n}}; \bar{X}_n + t_{\alpha/2,n-1}\frac{S_n}{\sqrt{n}}\right]$$

Se o tamanho da população n for grande (usualmente maior do que 50), devemos usar a Distribuição Normal padronizada e, nesse caso,

$$IC(\mu; 1-\alpha) = \left[\bar{X}_n - z_{\alpha/2}\frac{S_n}{\sqrt{n}}; \bar{X}_n + z_{\alpha/2}\frac{S_n}{\sqrt{n}}\right]$$

A tabela Normal pode ser acessada através do link `https://en.wikipedia.org/wiki/Student%27s_t-distribution#Table_of_selected_values`.

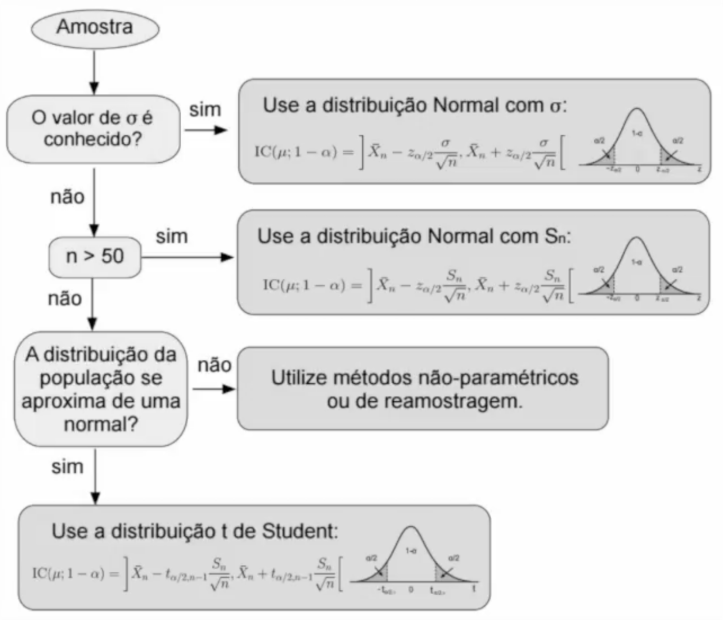


Figura 19: Fluxograma para cálculo do Intervalo de Confiança.

Além da média populacional, podemos calcular o intervalo de confiança para uma proporção. Nesse caso, vimos que pelo Teorema Central do Limite, que a variável aleatória Z é definida por:

$$Z = \frac{\hat{p} - p}{\sqrt{p(1-p)/n}} \sim \mathcal{N}(0,1),$$

onde p é a proporção de elementos da população que possuem uma certa característica. Seja a variável aleatória $X_i = 1$ se a observação i, extraída dessa população, possui uma certa característica, ou $X_i = 0$, caso contrário. Assim, temos que a proporção amostral, para uma amostra de tamanho n, é dada por:

$$\hat{p} = \frac{Y_n}{n},$$

onde $Y_n = X_1 + X_2 + \cdots + X_n$ é o número de observações que possuem a característica na amostra. Notem que Y_n tem Distribuição Binomial.

O intervalo de confiança de $\gamma = (1-\alpha)100\%$ para a proporção populacional p é dado por:

$$IC(p; 1-\alpha) = \left[\hat{p} - z_{\alpha/2}\frac{\sqrt{\hat{p}(1-\hat{p})}}{\sqrt{n}} \; ; \; \hat{p} + z_{\alpha/2}\frac{\sqrt{\hat{p}(1-\hat{p})}}{\sqrt{n}} \right].$$

Uma outra opção para calcularmos o intervalo de confiança para a proporção populacional, é usar o fato de que $p(1-p) \leq 1/4$. Ou seja,

$$\frac{p(1-p)}{n} \leq \frac{1}{4n}.$$

$$\frac{\sqrt{p(1-p)}}{\sqrt{n}} \leq \frac{\sqrt{1}}{\sqrt{4n}} = \frac{1}{\sqrt{4n}}.$$

Substituindo esse resultado na definição anterior, podemos calcular o intervalo, chamado conservador, conforme definido a seguir.

Definição: (IC conservador) O intervalo de confiança de $\gamma = (1-\alpha)100\%$ para a proporção populacional p é dado por:

$$IC(p; 1-\alpha) = \left[\hat{p} - \frac{z_{\alpha/2}}{\sqrt{4n}} \; ; \; \hat{p} + \frac{z_{\alpha/2}}{\sqrt{4n}} \right].$$

31.1 *Bootstraping*

- No caso em que a população não se aproxima de uma Distribuição Normal, precisamos usar métodos de reamostragem ou não paramétricos.
- Um método de reamostragem importante é chamado *bootstrapping*, que foi proposto por Bradley Efron em 1979, usa reamostragem dos dados.
- A partir dessas amostras, calculamos o intervalo de confiança, que pode ser obtido de diversas maneiras. Se temos n observações coletadas, amostramos n elementos desses dados com reposição.
- Para cada amostra obtida, calculamos um estimador $\hat{\theta}$, como a média ou desvio padrão amostral. Considerando várias amostras, podemos construir a distribuição de probabilidade do estimador e, assim, estimar o intervalo de confiança para o parâmetro de interesse.

Assim, de maneira geral, para calculamos o intervalo de confiança com o método *bootstrapping* usamos os seguintes passos:

- Temos uma amostra aleatória X de tamanho n e objetivamos criar um intervalo de confiança para o estimador $\hat{\theta}$.
- Repetimos para 10^4 ou mais vezes:
  - Selecione n elementos de X com reposição.
  - Calcule e armazene o valor de $\hat{\theta}$.
- A partir dos dados armazenados, construa um histograma para $\hat{\theta}$.
- Se a distribuição obtida é aproximadamente simétrica, construa o intervalo de confiança de $(1-\alpha)100\%$ encontrando os percentis, de modo que a proporção de observações entre os percentis seja $1-\alpha$.

32 Testes de Hipótese

- Imaginem que um acusado será julgado em um tribunal. Inicialmente, antes de coletarmos as evidências, assumimos que o acusado é inocente, sendo essa a hipótese nula, que chamamos de H_0.
- Para provar que o mesmo é culpado, precisamos coletar provas, de modo a rejeitar H_0. Essa hipótese alternativa, ou seja, o acusado é culpado, chamamos de H_1 (ou H_a), que é a hipótese alternativa, contrária à H_0. Assim, no teste de hipóteses desse exemplo, vamos ter duas hipóteses:
  - Hipótese nula (H_0): o acusado é inocente.
  - Hipótese alternativa (H_1): o acusado é culpado.
- Nosso objetivo é sempre rejeitar ou aceitar (na verdade, deixar de rejeitar) a hipótese nula H_0, com base nos dados coletados.
- De uma maneira geral, dizemos que a falha na rejeição da hipótese nula implica a sua aceitação.
- No entanto, essa afirmação não implica que H_0 é verdadeira, mas que há evidência para aceitar essa hipótese com um dado nível de significância.
- Notem que o teste é baseado apenas na amostra coletada, de modo que se coletarmos outra amostra, talvez o resultado do teste mude.

- Em inferência estatística, uma hipótese é feita com relação a um parâmetro da população.
- Para testar uma hipótese, extraímos amostras independentes e identicamente distribuídas.
- Analisando essa amostra, podendo chegar a duas possíveis decisões:
  - Falhar na rejeição da hipótese nula (aceitar H_0).
  - Rejeitar a hipótese nula.
- No teste de hipóteses podemos cometer os erros dos tipos I e II, conforme indicado na tabela.

	H_0 é verdadeira	H_0 é falsa
Rejeitar H_0	Erro do tipo I (α)	Sem erro
Aceitar H_0	Sem erro	Erro do tipo II (β)

- Assim, podemos definir as probabilidades de cometer os erros no teste de hipóteses:

$$P(\text{“Erro do tipo I”}) = P(\text{Rejeitar } H_0 | H_0 \text{ é verdadeira}) = \alpha$$

$$P(\text{“Erro do tipo II”}) = P(\text{Aceitar } H_0 | H_0 \text{ é falsa}) = \beta$$

- Para formular o teste de hipóteses, geralmente definimos H_0 em termos de um parâmetro da população. Ou seja, representamos:

$$H_0 : \theta = \theta_0,$$

onde afirmamos que o parâmetro θ da população é θ_0. A hipótese alternativa H_1, também representada por H_a, pode ter uma das seguintes formas:

$$H_1 : \theta > \theta_0,$$

$$H_1 : \theta < \theta_0,$$

$$H_1 : \theta \neq \theta_0.$$

Em qualquer uma dessas decisões, podemos cometer erros.

Em resumo, podemos realizar o teste de hipóteses considerando os seguintes passos:

1. Estabelecemos a hipótese nula e a alternativa:

$$H_0 : \theta = \theta_0$$

$$H_1 : \begin{cases} \theta < \theta_0 \\ \theta > \theta_0 \\ \theta \neq \theta_0. \end{cases}$$

2. Definimos a região crítica com base na hipótese alternativa.
3. Fixamos o nível de significância α e encontramos a região crítica.
4. Obtemos a estimativa $\hat{\theta}_{obs}$ baseada nas observações disponíveis.
5. Concluímos o teste com base na estimativa e na região crítica.

Esse procedimento vale para qualquer parâmetro da população, tais como a média ou proporção.

Podemos ainda realizar o teste de hipóteses no caso de variáveis aleatórias binárias. Seja $X_i = 1$ se a observação i possui uma certa característica, ou $X_i = 0$, caso contrário. As probabilidades são dadas por $P(X_i = 1) = p$ e $P(X_i = 0) = 1 - p$, isto é, X_i tem Distribuição de Bernoulli. Definimos

$$Y_n = X_1 + X_2 + \ldots + X_n,$$

que representa o número de observações que possuem a característica. Então, a proporção de observações com a característica é dada por

$$\hat{p} = \frac{Y_n}{n}.$$

Usando o Teorema Central do Limite, temos que

$$Z = \frac{p - \hat{p}}{\sqrt{p(1-p)/n}} \sim \mathcal{N}(0, 1).$$

32.1 Valor p

Se variamos α continuamente, conforme mostramos na Figura 20 abaixo, notamos que a região de aceitação da hipótese nula vai mudando de acordo com α. Para $\alpha = 0.23$ passamos a rejeitar H_0. Esse valor é chamado valor p.

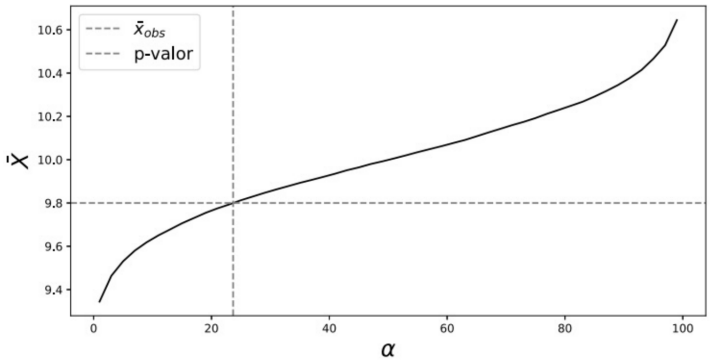


Figura 20: Valor p.

O valor p é o menor nível de significância α no qual é possível rejeitar a hipótese nula. Podemos ainda interpretar esse valor como a probabilidade de observar os dados se a hipótese nula for verdadeira:

$$\alpha = P(\text{dados} \mid H_0 \text{ é verdadeira}).$$

Para $p = 0.01$, temos que, em média, em apenas um dentre 100 experimentos, a hipótese nula será aceita. Se $p = 0.1$, em 10 de 100 experimentos, e assim sucessivamente. Ou seja, quanto menor o valor p, maior é a evidência contra a aceitação de H_0. Geralmente, rejeitamos H_0 quando o valor p é menor ou igual a 0.05 ($p \leq 0.05$).

33 Teste Qui-Quadrado

- O teste qui-quadrado foi proposto pelo matemático inglês Karl Pearson (1857-1936) em 1900.
- Nesse teste, podemos comparar distribuições e verificar se valores obtidos estão de acordo com o esperado.

- Por exemplo, podemos verificar se a saída de um dado, após um grande número de lançamentos, corresponde à saída de um dado justo.

- Para realizar o teste qui-quadrado, precisamos calcular a seguinte métrica:

$$\chi^2 = \sum_{i=1}^{s} \frac{(O_i - E_i)^2}{E_i},$$

onde O_i é o valor observado e E_i é o valor esperado.

34 Testes Pareados

O teste de hipóteses pode ser usado para comparar a média de duas populações.

Suponha que temos n pacientes que vão ser submetidos a um tratamento para diminuir o nível de colesterol. Inicialmente, medimos o colesterol antes do tratamento. Após tomar a medicação, esperamos um dado período de tempo e fazemos a medição novamente. Usando o teste de hipóteses, podemos comparar o colesterol médio, considerando todos os pacientes, antes e depois do tratamento. Desse modo, podemos verificar se a medicação é efetiva.

Nesse caso, notem que as amostras antes e depois do tratamento são dependentes. Ou seja, as medidas são tomadas em um único indivíduo em dois pontos distintos no tempo. Quando temos esse tipo de dado, o teste de hipóteses é chamado teste pareado. Notem que se as medidas são feitas em um mesmo indivíduo, uma certa variabilidade biológica é eliminada, uma vez que não temos que nos preocupar com o fato de um indivíduo ser homem ou mulher ou mesmo ser mais jovem do que outro. Com o emparelhamento, podemos fazer uma comparação mais precisa.

35 Teste de Kolmogorov-Smirnov

O teste de Kolmogorov-Smirnov (KS) foi proposto por Andrey Kolmogorov (1903-1987) em 1933 e por Nikolai Smirnov (1900-1966) em 1939, de forma independente.

Sendo um teste estatístico não paramétrico, ele é utilizado para verificar se uma amostra de dados segue uma distribuição teórica conhecida, como a Distribuição Normal, Exponencial ou Uniforme, por exemplo.

O teste consiste em calcular a estatística de Kolmogorov-Smirnov (KS), que é a maior diferença absoluta entre as funções de distribuição acumulada empírica e teórica. Isto é,

$$D_n = \max_x |F(x) - F_{\text{obs}}(x)|,$$

onde

$$F(x) = P(X \leq x)$$

é a distribuição acumulada do modelo teórico, enquanto que

$$F_{\text{obs}}(x)$$

é calculada a partir do conjunto de dados, sendo dada pela fração de observações menores do que x.

Se ordenarmos as observações, de modo que

$$x_{(1)} < x_{(2)} < \ldots < x_{(n)},$$

então:

$$F_{\text{obs}}(x_{(i)}) = \frac{i}{n}.$$

O termo $x_{(i)}$ representa a i-ésima estatística de ordem, ou seja, o i-ésimo valor mais baixo em um conjunto de dados ordenados. Em outras palavras, é o i-ésimo menor valor em uma amostra de dados, onde i varia de 1 a n, sendo n o tamanho da amostra.

Por exemplo, se tivermos o conjunto de dados

$$\{8, 3, 7, 5, 9, 11, 10\},$$

a primeira estatística de ordem seria

$$x_{(1)} = 3,$$

a segunda estatística de ordem seria

$$x_{(2)} = 5,$$

e assim por diante, até a sétima estatística de ordem, que seria

$$x_{(7)} = 11.$$

Nosso objetivo no teste KS é comparar a distribuição dos dados com a distribuição associada à hipótese nula. Assim, a hipótese nula do teste afirma que a amostra segue a distribuição teórica, enquanto a hipótese alternativa diz que a amostra não segue essa distribuição. Ou seja,

- H_0: os dados vieram da distribuição teórica.
- H_1: os dados não vieram da distribuição teórica.

Para realizar esse teste de hipótese, precisamos calcular o valor p, que pode ser obtido através de simulações de Monte Carlo.

O processo de simulação consiste em gerar diversas amostras aleatórias com o mesmo tamanho da amostra original a partir da distribuição teórica assumida na hipótese nula. Em seguida, é calculada a estatística KS para cada uma dessas amostras geradas. O valor p é então estimado como a proporção de vezes que a estatística KS simulada é maior ou igual à estatística observada na amostra original. Quanto maior o valor p, mais favorável será a hipótese nula, ou seja, os dados provavelmente vieram do modelo assumido.

36 Método dos Mínimos Quadrados

Para ajustarmos o modelo de regressão usando o método dos mínimos quadrados, consideramos os dados coletados, que constituem os pares $[(x_i, y_i),\ i = 1, 2, \ldots, n]$, sendo que y_i depende de x_i através de uma relação linear.

O nosso objetivo é estimar a reta que melhor se ajusta aos dados. Esse ajuste é dado por:

$$\hat{y}_i = \hat{\theta}_0 + \hat{\theta}_1 x_i \quad i = 1, 2, \ldots, n,$$

sendo $\hat{y}_i$ o valor predito e $\hat{\theta}_0$ e $\hat{\theta}_1$ os valores a serem ajustados a partir dos dados.

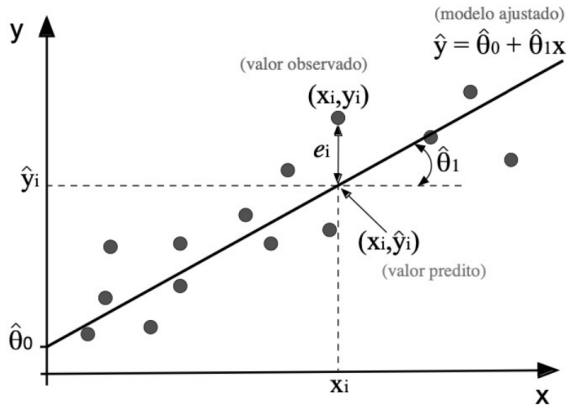


Figura 21: Método dos Mínimos Quadrados.

Para encontrar $\hat{\theta}_0$ e $\hat{\theta}_1$, precisamos definir um critério que quantifique o quão preciso é um ajuste. Para isso, vamos considerar um conceito importante chamado resíduo, que é igual à diferença entre o valor observado (y_i) e o predito ($\hat{y}_i$), isto é

$$e_i = y_i - \hat{y}_i, \quad i = 1, 2, \ldots, n.$$

O método dos mínimos quadrados objetiva minimizar a soma dos quadrados dos resíduos, ou seja, determinar a reta que melhor se aproxima dos dados. Portanto, o conceito de "melhor ajuste" se traduz em encontrar a reta que produz o menor erro, quantificado pelo resíduo. A soma dos quadrados dos resíduos (*residual sum of squares* (RSS), em inglês) é dada por:

$$RSS = \sum_{i=1}^{n} e_i^2 = \sum_{i=1}^{n} (y_i - \hat{y}_i)^2 = \sum_{i=1}^{n} (y_i - \hat{\theta}_0 - \hat{\theta}_1 x_j)^2.$$

Para minimizar esse erro, ou seja, encontrar o mínimo de RSS, derivamos essa equação com relação a $\hat{\theta}_0$ e $\hat{\theta}_1$ e igualamos os resultados a zero. Assim,

$$\begin{cases} \frac{\partial RSS}{\partial \hat{\theta}_0} = -2 \sum_{i=1}^{n} (y_i - \hat{\theta}_0 - \hat{\theta}_1 x_i) = 0, \\ \frac{\partial RSS}{\partial \hat{\theta}_1} = -2 \sum_{i=1}^{n} (y_i - \hat{\theta}_0 - \hat{\theta}_1 x_i) x_i = 0. \end{cases}$$

Resolvendo para $\hat{\theta}_0$ e $\hat{\theta}_1$, obtemos:

$$\hat{\theta}_1 = \frac{\sum_{i=1}^{n} (x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y})}{\sum_{i=1}^{n} (x_i - \bar{x})^2},$$

$$\hat{\theta}_0 = \bar{y} - \hat{\theta}_1 \bar{x}.$$

onde $\bar{y} = \sum_{i=1}^{n} y_i / n$ e $\bar{x} = \sum_{i=1}^{n} x_i / n$.

Para quantificar a qualidade do ajuste no método dos mínimos quadrados, podemos utilizar o coeficiente de determinação (R^2), que é uma medida estatística que avalia a qualidade do ajuste de um modelo de regressão linear.

$$R^2 = 1 - \frac{\sum_{i=1}^{n} (y_i - \hat{y}_i)^2}{\sum_{i=1}^{n} (y_i - \bar{y})^2},$$

onde $0 \leq R^2 \leq 1$.

37 Regressão Linear Simples

Problema:

- Variável resposta (ou dependente): Y,
- Variável preditora (ou independente): X.

Em outras palavras, buscamos entender como a variável Y se relaciona com a variável X por meio de uma equação linear. Assim, dado um conjunto de observações de X, nosso objetivo é estimar a função de regressão $f(x)$, que representa a expectativa condicional de Y dado que $X = x$:

$$f(x) = \mathbb{E}[Y \mid X = x] = \theta_0 + \theta_1 x.$$

O modelo de regressão linear simples é definido por:

$$Y_i = \theta_0 + \theta_1 x_i + \epsilon_i, \quad i = 1, 2, \ldots, n.$$

onde assumimos $\epsilon_i \sim \mathcal{N}(0, \sigma^2)$. Os parâmetros θ_1 e θ_0 são fixos e desconhecidos.

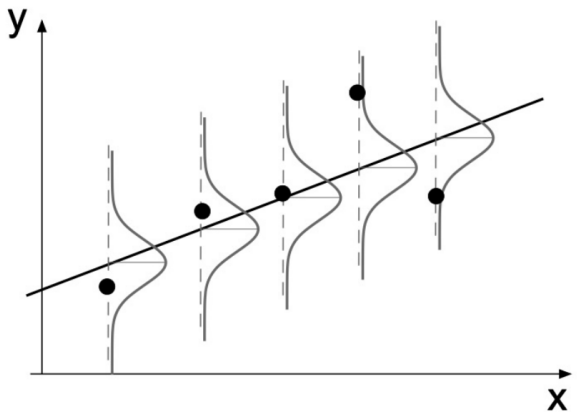


Figura 22: Regressão Linear Simples.

Como o modelo é linear e ϵ_i tem distribuição normal, então Y_i também segue o modelo normal:

$$Y_i \sim \mathcal{N}(\theta_0 + \theta_1 x_i, \sigma^2).$$

Assim,

$$p(y_i \mid x_i, \theta_0, \theta_1) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \exp\left(-\frac{1}{2\sigma^2}(\theta_0 + \theta_1 x_i - y_i)^2\right).$$

Para inferirmos os valores de θ_0 e θ_1, consideramos o problema:

$$\hat{\theta} = \arg\max_{\theta} L(\theta; \mathbf{x}),$$

onde $\theta^T = [\theta_0, \theta_1]$ e $\hat{\theta}^T = [\hat{\theta}_0, \hat{\theta}_1]$. Ou seja, precisamos encontrar os valores $\hat{\theta}_0$ e $\hat{\theta}_1$ de forma a maximizar a função de verossimilhança $L(\theta; \mathbf{x})$.

Ignorando os termos que não dependem de θ, pois não influenciam na maximização da verossimilhança, podemos escrever:

$$\hat{\theta} = \arg\max_{\theta} \log L(\theta; \mathbf{x})$$

$$= \arg\max_{\theta} \left[-\sum_{i=1}^{n} (\theta^T x_i - y_i)^2 \right]$$

$$= \arg\min_{\theta} \sum_{i=1}^{n} (\theta^T x_i - y_i)^2$$

$$= \arg\min_{\theta} \sum_{i=1}^{n} (\theta_0 + \theta_1 x_i - y_i)^2$$

Portanto, a estimação por máxima verossimilhança resulta no método dos mínimos quadrados:

$$\hat{\theta}_1 = \frac{\sum_{i=1}^{n}(x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y})}{\sum_{i=1}^{n}(x_i - \bar{x})^2},$$

$$\hat{\theta}_0 = \bar{y} - \hat{\theta}_1 \bar{x}.$$

onde

$$\bar{y} = \sum_{i=1}^{n} y_i/n \quad \text{e} \quad \bar{x} = \sum_{i=1}^{n} x_i/n.$$

Intervalo de confiança:

$$IC(\theta_0; 1-\alpha) = \hat{\theta}_0 \pm t_{\alpha/2, n-2} \frac{S_\epsilon \sqrt{\sum_{i=1}^{n} x_i^2}}{\sqrt{n \sum_{i=1}^{n}(x_i - \bar{x})^2}},$$

$$IC(\theta_1; 1-\alpha) = \hat{\theta}_0 \pm t_{\alpha/2, n-2} \frac{S_\epsilon}{\sqrt{\sum_{i=1}^{n}(x_i - \bar{x})^2}}.$$

No caso do teste de hipóteses, geralmente consideramos as seguintes hipóteses para o intercepto:

$$H_0 : \theta_0 = 0$$

$$H_1 : \theta_0 \neq 0.$$

E para o coeficiente de inclinação:

$$H_0 : \theta_1 = 0$$

$$H_1 : \theta_1 \neq 0.$$

Nesse último caso, quando a hipótese nula não é rejeitada, a conclusão é que não há uma relação linear entre Y e a variável independente X, isto é, $\theta_1 = 0$.

37.1 Regressão Multivariada

Um modelo de regressão com k variáveis preditoras $\{X_1, X_2, \ldots, X_k\}$ e apenas uma saída Y_j é definido por

$$Y_j = \theta_0 + \theta_1 x_{j1} + \theta_2 x_{j2} + \ldots + \theta_k x_{jk} + \epsilon_j, \quad j = 1, 2, \ldots, n,$$

onde a variável ϵ_j representa o erro na predição, que geralmente tem distribuição normal com média igual a zero e variância σ^2.

Notem que o modelo é linear com relação aos parâmetros $\theta_0, \ldots, \theta_k$.

Os termos de erro apresentam as seguintes propriedades:

- $E[\epsilon_j] = 0$ para $j = 1, \ldots, n$,
- $Var(\epsilon_j) = \sigma^2$ para $j = 1, \ldots, n$,

- $Cov(\epsilon_i, \epsilon_j) = 0$ para $i, j = 1, \ldots, n$ e $i \neq j$.

No método dos mínimos quadrados, a ideia é minimizar a distância quadrática entre as respostas observadas $(y_i, i = 1, 2, \ldots, n)$ e os valores estimados $(\hat{y}_i, i = 1, 2, \ldots, n)$, isto é, minimizar a soma dos quadrados dos resíduos. Assim,

$$RSS = \sum_{i=1}^{n} (y_i - \hat{y}_i)^2 = \sum_{i=1}^{n} \left(y_i - \hat{\theta}_0 - \sum_{j=1}^{k} x_{ij} \hat{\theta}_j \right)^2,$$

onde $\hat{\theta}_j$ é o estimador do parâmetro $\theta_j, j = 1, 2, \ldots, k$.

Usando notação matricial, podemos escrever essa equação como:

$$RSS = (\mathbf{y} - \mathbf{X}\hat{\boldsymbol{\theta}})^T (\mathbf{y} - \mathbf{X}\hat{\boldsymbol{\theta}}).$$

Diferenciando com relação à $\hat{\boldsymbol{\theta}} = [\hat{\theta}_0, \hat{\theta}_1, \ldots, \hat{\theta}_k]^T$, obtemos:

$$\frac{\partial}{\partial \hat{\boldsymbol{\theta}}} RSS = -2\mathbf{X}^T (\mathbf{y} - \mathbf{X}\hat{\boldsymbol{\theta}}).$$

Igualando essa derivada a zero,

$$\mathbf{X}^T (\mathbf{y} - \mathbf{X}\hat{\boldsymbol{\theta}}) = 0,$$

obtemos a solução:

$$\hat{\boldsymbol{\theta}} = (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T \mathbf{y},$$

Portanto,

$$\hat{\boldsymbol{\theta}} = [\hat{\theta}_0, \hat{\theta}_1, \ldots, \hat{\theta}_k]^T$$

é o estimador de mínimos quadrados de

$$\boldsymbol{\theta} = [\theta_0, \theta_1, \ldots, \theta_k]^T.$$

Assim, os estimadores de mínimos quadrados do modelo de regressão linear são soluções da equação normal:

$$\hat{\boldsymbol{\theta}} = (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T \mathbf{y},$$

onde

$$\hat{\boldsymbol{\theta}} = [\hat{\theta}_0, \hat{\theta}_1, \ldots, \hat{\theta}_k]^T.$$

37.2 Regressão Polinomial

De maneira similar à regressão multivariada, podemos realizar a regressão polinomial. Nesse caso, o objetivo é ajustar um polinômio ao conjunto de dados. Por exemplo, o modelo pode ser dado por:

$$Y = \theta_0 + \theta_1 x + \theta_2 x^2 + \ldots + \theta_k x^k = \sum_{j=0}^{k} \theta_j x^j.$$

Notem que se fizermos $X_j = X^j$ nessa equação, obtemos um modelo similar ao apresentado anteriormente:

$$Y_j = \theta_0 + \theta_1 x_{1j} + \theta_2 x_{2j} + \ldots + \theta_k x_{kj} + \epsilon_j, \quad j = 1, 2, \ldots, n,$$