Análise Combinatória e Probabilidades

Ney Lemke

Departamento de Biofísica e Farmacologia

5 de abril de 2025

Outline

Probabilidade

Seja um conjunto U com N elementos seja um subconjunto A com n_A elementos. A probabilidade de ocorrência de A é

$$p_A = \frac{n_A}{N}$$

Exemplos:

- Dados
- Cartas
- Moedas

Eventos mutuamente Exclusivos

Os eventos A e B são mutuamente exclusivos se a ocorrência de A impede a ocorrência de B e vice-versa. Ou seja se $A \cap B = \emptyset$.

Eventos Coletivamente Exaustivos

Os eventos $A_1, \ldots, A_n$ são coletivamente exaustivos se:

$$U = \cup_{i=1}^{n} A_i$$

Eventos Independentes

Os eventos A e B são independentes se:

$$p_{A \cap B} = p_a p_B$$

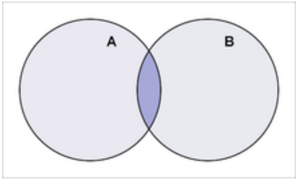
Regra da soma

$$p(A \text{ ou } B \ldots Z) = \frac{n_A + n_B + \ldots n_Z}{N} = p_A + p_B + \ldots p_Z$$

se os eventos são mutuamente exclusivos.

Teorema

$$p_{A \cup B} = p_A + p_B - p_{A \cap B}$$



Exemplo

Qual é a probabilidade de se obter um dado 1 no primeiro lançamento ou um dado 4 no segundo?

Problema

Qual é a probabilidade de se obter um 1 no primeiro lançamento de dado **OU** um 4 no segundo lançamento?

- Evento A: Obter um 1 no primeiro lançamento de dado
- Evento B: Obter um 4 no segundo lançamento de dado

Precisamos calcular $P(A \cup B)$ - a probabilidade da união.

Passo 1: Calcular as probabilidades individuais

- $P(A) = \frac{1}{6}$
  - Há 1 face com o número 1 em um dado de 6 faces
- $P(B) = \frac{1}{6}$
  - Há 1 face com o número 4 em um dado de 6 faces

Passo 2: Verificar a independência dos eventos

Estes eventos ocorrem em lançamentos diferentes!

$\Rightarrow$ Os eventos são **independentes**

Definição: Dois eventos A e B são independentes quando a ocorrência de um não influencia a probabilidade de ocorrência do outro.

Passo 3: Calcular a probabilidade da interseção

Para eventos independentes:

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

$$P(A \cap B) = \frac{1}{6} \times \frac{1}{6} = \frac{1}{36}$$

A probabilidade de obter ambos os resultados é $\frac{1}{36}$

Passo 4: Aplicar a fórmula da união

Para quaisquer eventos A e B:

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

$$P(A \cup B) = \frac{1}{6} + \frac{1}{6} - \frac{1}{36}$$

$$P(A \cup B) = \frac{6}{36} + \frac{6}{36} - \frac{1}{36}$$

$$P(A \cup B) = \frac{11}{36} \approx 0,306 \approx 30,6\%$$

Conclusão

A probabilidade de obter um 1 no primeiro lançamento OU um 4 no segundo lançamento é de:

$$\frac{11}{36} \approx 30,6\%$$

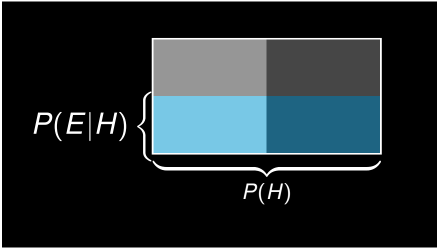
- Esta é a aplicação direta da fórmula da união de eventos
- Para eventos independentes, sempre calculamos $P(A \cap B) = P(A) \times P(B)$
- Observe que $P(A \cup B) < P(A) + P(B)$ quando os eventos não são mutuamente exclusivos

Visualização

	Espaço amostral: 36 possibilidades			
	Dado 2: 1	**Dado 2: 2**	**Dado 2: 3**	**Dado 2: 4**
Dado 1: 1	(1,1)	(1,2)	(1,3)	(1,4)
Dado 1: 2	(2,1)	(2,2)	(2,3)	(2,4)
Dado 1: 3	(3,1)	(3,2)	(3,3)	(3,4)
Dado 1: 4	(4,1)	(4,2)	(4,3)	(4,4)
Dado 1: 5	(5,1)	(5,2)	(5,3)	(5,4)
Dado 1: 6	(6,1)	(6,2)	(6,3)	(6,4)

- Vermelho: $A \cap B$ (1 caso)
- Azul: Evento B sem A (5 casos)
- Restantes em primeira linha: Evento A sem B (5 casos)
- Total: 11 casos de 36 $\Rightarrow \frac{11}{36}$

Probabilidade Condicional



Teorema de Bayes

$$P(E|H) = \frac{P(H|E) \cdot P(E)}{P(H)} \quad (1)$$

Teorema de Bayes: Fundamentos e Aplicações

Uma abordagem intuitiva do raciocínio probabilístico

O Teorema de Bayes: Definição

Fórmula do Teorema de Bayes

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

- $P(A|B)$ = Probabilidade de A dado que B ocorreu (posterior)
- $P(B|A)$ = Probabilidade de B dado que A ocorreu (verossimilhança)
- $P(A)$ = Probabilidade a priori de A
- $P(B)$ = Probabilidade total de B (evidência)

Lei da Probabilidade Total

$$P(B) = P(B|A) \times P(A) + P(B|\neg A) \times P(\neg A)$$

Interpretação Intuitiva

O Teorema de Bayes é uma forma de atualizar crenças

Antes da Evidência:

- Informação inicial ($P(A)$)
- Baseada em conhecimento prévio
- "Prior"

Depois da Evidência:

- Crença atualizada ($P(A|B)$)
- Incorpora novas informações
- "Posterior"

A atualização depende da força da evidência

Probabilidade Condicional com Dois Dados

Qual é a probabilidade condicional de termos um lançamento de dois dados com soma par, dado que sabemos que soma é maior que 9?

Espaço Amostral

- Dois dados: 6 faces cada $\Rightarrow$ 36 combinações possíveis
- Espaço amostral: pares (i, j) com $i, j \in 1, 2, \ldots, 6$

Soma Par

- Somas pares possíveis: 2, 4, 6, 8, 10, 12
- Total de combinações com soma par: **18**

Soma Par e > 9

- Somas 10 e 12:
  - 10: (4,6), (5,5), (6,4) $\Rightarrow$ 3 casos
  - 12: (6,6) $\Rightarrow$ 1 caso
- Total: **4 combinações**

Probabilidade Condicional 1

Probabilidade de Soma > 9

- Somas: 10, 11, 12
- Combinações:
  - 10: (4,6), (5,5), (6,4) $\Rightarrow$ 3
  - 11: (5,6), (6,5) $\Rightarrow$ 2
  - 12: (6,6) $\Rightarrow$ 1
- Total: **6 combinações**
- $P(\text{soma} > 9) = \frac{6}{36} = \frac{1}{6}$

Probabilidade Condicional 2

- Total com soma > 9: 6
- Desses, somas pares: 4
- Resultado: $\frac{4}{6} = \frac{2}{3}$

Teorema de Bayes

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

- A: soma par
- B: soma > 9

Substituindo:

$$P(A|B) = \frac{P(B|A) \times P(A)}{P(B)} = \frac{\frac{4}{18} \times \frac{18}{36}}{\frac{1}{6}} = \frac{2}{3}$$

Conclusão

- Probabilidade condicional pode ser resolvida diretamente ou com Bayes
- Resultados coerentes: $\frac{2}{3}$ quando condicionamos soma > 9
- Importante identificar corretamente os subconjuntos envolvidos

Exemplo 1: Teste Médico

Cenário

- Doença rara: prevalência de 1% na população
- Teste com sensibilidade de 95% (P(Teste+—Doença) = 0,95)
- Teste com especificidade de 90% (P(Teste-—Sem Doença) = 0,90)

Pergunta

Se uma pessoa testa positivo, qual a probabilidade dela realmente ter a doença?

- Queremos calcular: $P(\text{Doença}|\text{Teste+})$
- A intuição pode nos enganar: isto NÃO é igual à sensibilidade do teste!

Exemplo 1: Aplicando o Teorema de Bayes

$$P(D|T+) = \frac{P(T+|D) \times P(D)}{P(T+)}$$

$$\begin{aligned} P(T+) &= P(T+|D) \times P(D) + P(T+|\neg D) \times P(\neg D) \\ &= 0,95 \times 0,01 + 0,10 \times 0,99 \\ &= 0,0095 + 0,099 \\ &= 0,1085 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} P(D|T+) &= \frac{0,95 \times 0,01}{0,1085} \\ &= \frac{0,0095}{0,1085} \\ &\approx 0,0876 \approx 8,76\% \end{aligned}$$

Por que o resultado é tão baixo?

O paradoxo da taxa de base (Base Rate Fallacy)

Nossa intuição frequentemente ignora a prevalência (taxa de base) da condição.

- Em uma população de 1000 pessoas:
  - 10 pessoas têm a doença (1%)
  - Destas, 9 ou 10 terão teste positivo (95% de 10)
  - Das 990 pessoas sem a doença, 99 terão falso positivo (10% de 990)
  - Total de testes positivos: 9 + 99 = 108
  - Verdadeiros positivos: 9 de 108 $\approx$ 8,3%
- O baixo valor preditivo deve-se à doença ser muito rara
- Se a doença fosse comum (ex: 30%), o resultado seria muito diferente

Exemplo 2: Filtro de Spam

Cenário

- 70% dos emails são spam: $P(Spam) = 0,7$
- A palavra "oferta" aparece em 60% dos spams: $P(oferta|Spam) = 0,6$
- A palavra "oferta" aparece em 5% dos emails normais: $P(oferta|Normal) = 0,05$

Pergunta

Se um email contém a palavra "oferta", qual a probabilidade dele ser spam?

$$P(Spam|oferta) = \frac{P(oferta|Spam) \times P(Spam)}{P(oferta)}$$

Atualização Bayesiana com Múltiplas Evidências

Atualização Iterativa

O posterior de uma etapa se torna o prior da próxima etapa.

Etapa	Palavra	P(Palavra—Spam)	P(Palavra—Normal)	P(Spam)
Inicial	–	–	–	50,0%
1	oferta	60%	5%	96,6%
2	grátis	80%	10%	99,1%
3	dinheiro	70%	3%	99,9%

- Começamos com P(Spam) = 50% (probabilidade neutra)
- Cada nova palavra atualiza nossa crença
- A certeza aumenta com mais evidências

Aplicações do Teorema de Bayes

Aplicações Técnicas:

- Aprendizado de máquina
- Classificadores Naive Bayes
- Filtros de spam
- Sistemas de recomendação
- Processamento de linguagem natural
- Visão computacional

Aplicações Práticas:

- Diagnósticos médicos
- Análise de risco
- Geofísica e exploração
- Sistemas de apoio à decisão
- Inferência sobre eventos históricos
- Detecção de fraudes

O raciocínio bayesiano está presente em quase toda tecnologia de IA moderna

Conclusão: O Poder do Teorema de Bayes

- O Teorema de Bayes permite **atualizar crenças** com novas evidências
- Fornece um framework matemático para **raciocínio sob incerteza**
- Ajuda a evitar **falácias intuitivas** em probabilidade
- É **versátil** - aplicável a problemas simples e complexos
- Forma a base para **estatística bayesiana** e muitos algoritmos de IA

Mensagem principal

O Teorema de Bayes não é apenas uma fórmula matemática, mas uma forma de pensar sobre o mundo, combinando conhecimento prévio com novas observações.

Outline

Análise Combinatória

- Permutações
- Arranjos
- Arranjos com Repetição
- Combinações

Permutações

Quantas listas ordenadas contendo n elementos podemos formar a partir de uma lista com n elementos diferentes.

$$n!$$

Arranjos

Quantas listas ordenadas contendo p elementos podemos formar a partir de uma lista com n elementos diferentes.

$$\frac{n!}{(n-p)!}$$

Arranjos com repetição

Quantas listas ordenadas contendo n elementos podemos formar a partir de uma lista com n elementos, onde o elemento e_i aparece repetido r_i vezes.

$$\frac{n!}{r_1! \ldots r_n!}$$

Combinações

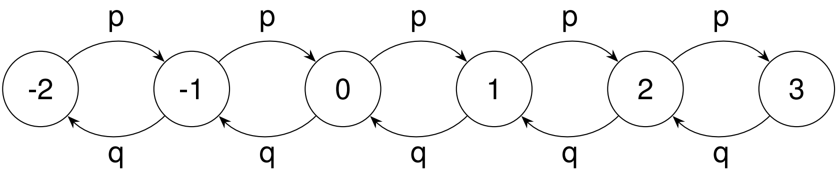
Quantos subconjuntos contendo p elementos podemos construir com os elementos de um conjunto com n elementos?

$$C_{n,p} = \frac{n!}{p!(n-p)!}$$

Outline

Caminhante Aleatório

Random Walk Unidimensional



p: probabilidade de avançar
q: probabilidade de retroceder
$p + q = 1$

Caminhante Aleatório

N Passos
N_1 Passos para a frente
N_2 Passos para trás
Probabilidade de dar N_1 passos para a frente.

$$W_N(N_1) = \frac{N!}{N_1!(N-N_1)!} p^{N_1} q^{N-N_1}$$

Equação da Difusão

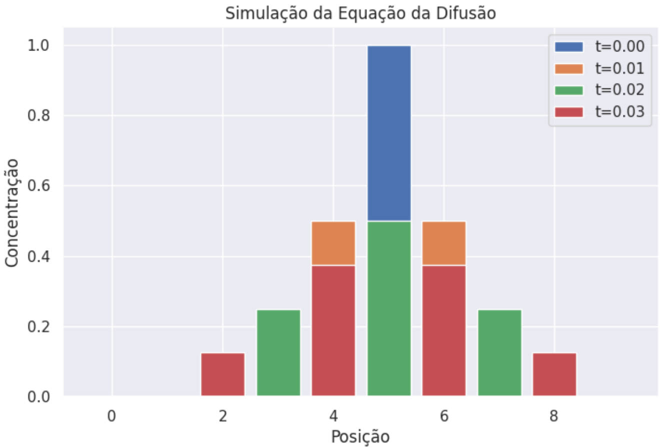
A equação da difusão descreve o espalhamento de partículas em um meio devido ao movimento aleatório. Pode ser derivada a partir de um modelo estocástico simples.

Modelo Estocástico

Considere um sistema unidimensional onde a partícula se move para a direita ou para a esquerda com probabilidades iguais:

$$P_N(m) = \frac{1}{2}P_{N-1}(m-1) + \frac{1}{2}P_{N-1}(m+1) \qquad (2)$$

Equação da Difusão



Aproximação Contínua no Tempo

$$P_N(m) - P_{N-1}(m) = \frac{1}{2}P_{N-1}(m-1) + \frac{1}{2}P_{N-1}(m+1) - P_{N-1}(m) \tag{3}$$

$$x = m \times l \quad t = N \times \tau \tag{4}$$

$$\frac{P_N - P_{N-1}}{\tau} \approx \frac{\partial P}{\partial t} \tag{5}$$

Aproximação Contínua no Espaço

$$\frac{P_N(m-1)+P_N(m+1)-2P_N(m)}{l^2} \approx \frac{\partial^2 P}{\partial x^2} \qquad (6)$$

Equação da Difusão

Combinando as aproximações temporais e espaciais:

$$\frac{\partial P}{\partial t} = D\frac{\partial^2 P}{\partial x^2} \tag{7}$$

Onde o coeficiente de difusão é dado por:

$$D = \frac{l^2}{2\tau} \tag{8}$$

Valores Médios

Seja u_j uma variável estocástica que pode assumir N valores.

$$\sum^{N} P(u_j) = 1$$

$$\langle u \rangle = \sum^{N} u_j P(u_j)$$

$$(\Delta u)^2 = (u - \langle u \rangle)^2 = \langle u^2 \rangle - \langle u \rangle^2$$

Caminhante Aleatório

$$\langle N_1 \rangle = \sum_{N_1} N_1 W_N(N_1) = \sum_{N_1} N_1 \frac{N!}{N_1!(N-N_1)!} p^{N_1} q^{N-N_1}$$

$$\langle N_1 \rangle = p\frac{\partial}{\partial p} \sum_{N_1} W_N(N_1) = \sum_{N_1} N_1 \frac{N!}{N_1!(N-N_1)!} p^{N_1} q^{N-N_1}$$

$$\langle N_1 \rangle = p\frac{\partial}{\partial p}(p+q)^N$$

$$\langle N_1 \rangle = pN(p+q)^{N-1} = pN$$

$$\langle N_2 \rangle = \langle N - N_1 \rangle = N(1-p) = Nq$$

Caminhante Aleatório

$$\langle N_1^2 \rangle = p\frac{\partial}{\partial p}p\frac{\partial}{\partial p}\sum_{N_1} W_N(N_1) = \sum_{N_1} N_1^2 \frac{N!}{N_1!(N-N_1)!}p^{N_1}q^{N-N_1}$$

$$\langle N_1^2 \rangle = p\frac{\partial}{\partial p}p\frac{\partial}{\partial p}(p+q)^N = pN + p^2N(N-1)$$

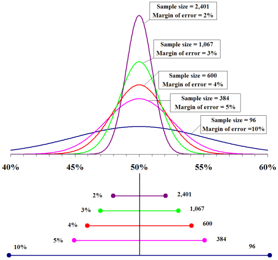
$$(\Delta N_1)^2 = \langle N_1^2 \rangle - \langle N_1 \rangle^2$$

$$(\Delta N_1)^2 = pN + p^2N(N-1) - p^2N^2 = Np(1-p) = Npq$$

$$\Delta N_1 = \sqrt{Npq}$$

Lei dos Grandes Números

$$\frac{\Delta N_1}{\langle N_1 \rangle} = \sqrt{\frac{q}{pN}}$$



Introdução à Fórmula de Stirling

- Aproximação assintótica para fatoriais:

$$N! \approx \sqrt{2\pi N}\left(\frac{N}{e}\right)^N$$

- Forma logarítmica:

$$\ln N! \approx N \ln N - N + \frac{1}{2}\ln N + \ln\sqrt{2\pi}$$

- Aplicações: termodinâmica, mecânica estatística, teoria das probabilidades.

Introdução

- Começamos com a definição:

$$\ln N! = \sum_{k=1}^{N} \ln k.$$

- Nosso objetivo é obter uma aproximação assintótica para $\ln N!$, que, ao ser exponenciada, fornecerá a famosa fórmula:

$$N! \sim \sqrt{2\pi N}\, N^N e^{-N}.$$

Aproximação pela Integral

- Uma aproximação inicial é substituir a soma por uma integral:

$$\sum_{k=1}^{N} \ln k \approx \int_1^N \ln x \, dx.$$

- Calculando a integral:

$$\int_1^N \ln x \, dx = [x \ln x - x]_1^N = N \ln N - N + 1.$$

- Assim, temos:

$$\ln N! \sim N \ln N - N.$$

Aprimoramento via Euler-Maclaurin

- Para refinar a aproximação, utilizamos a fórmula de Euler-Maclaurin:

$$\sum_{k=a}^{b} f(k) \approx \int_a^b f(x)\,dx + \frac{f(a)+f(b)}{2} + \cdots .$$

- Para $f(x) = \ln x$, obtemos:

$$\ln N! \approx \int_1^N \ln x\,dx + \frac{\ln 1 + \ln N}{2} + \cdots .$$

- Como $\ln 1 = 0$, isso se simplifica para:

$$\ln N! \approx N \ln N - N + 1 + \frac{1}{2}\ln N + \cdots .$$

Aprimoramento via Euler-Maclaurin

- Ajustando a constante (e considerando termos de ordem superior), chega-se à forma:

$$\ln N! \sim N \ln N - N + \frac{1}{2}\ln(2\pi N).$$

Fórmula de Stirling

- Exponenciando ambos os lados, obtemos:

$$N! \sim \sqrt{2\pi N}\, N^N e^{-N}.$$

- Esta é a famosa Fórmula de Stirling, amplamente utilizada em estatística, física e teoria dos números.

Método de Laplace: Intuição Geométrica

- Propósito: Avaliar integrais do tipo

$$\int_a^b e^{Mf(x)}dx \quad (M \gg 1)$$

- Ideia-chave: O integrando é dominado por uma região estreita em torno do máximo de $f(x)$.
- Passos principais:
  1. Localizar o ponto de máximo $x = c$.
  2. Expandir $f(x)$ em série de Taylor até segunda ordem.
  3. Reduzir o integral a um gaussiano.

Aplicação à Função Gama

- Representação integral do fatorial:

$$N! = \int_0^\infty x^N e^{-x} dx$$

- Reescrevendo o integrando:

$$N! = \int_0^\infty e^{N \ln x - x} dx = \int_0^\infty e^{Mf(x)} dx$$

onde $M = N$, $f(x) = \ln x - \frac{x}{N}$.

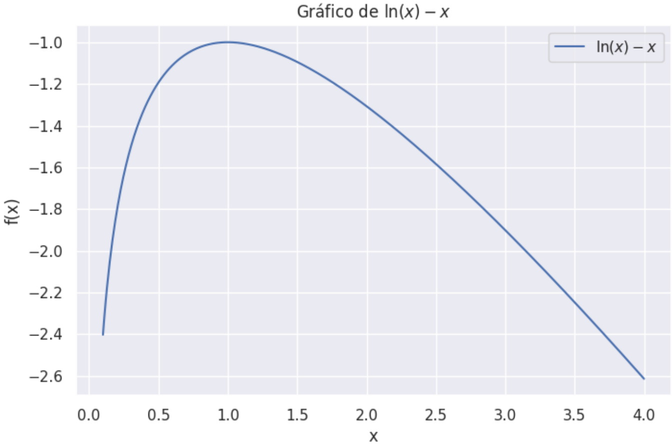


Gráfico de $\ln(x) - x$
$\ln(x) - x$
f(x)
x
−1.0
−1.2
−1.4
−1.6
−1.8
−2.0
−2.2
−2.4
−2.6
0.0
0.5
1.0
1.5
2.0
2.5
3.0
3.5
4.0

Passo 1: Encontrar o Máximo

- Derivada primeira:

$$f'(x) = \frac{1}{x} - \frac{1}{N}$$

- Ponto crítico: $x_c = N$
- Derivada segunda no máximo:

$$f''(N) = -\frac{1}{N^2} \quad (< 0 \Rightarrow \text{máximo})$$

A função tem um pico estreito em $x = N$.

Passo 2: Expansão de Taylor

- Expandir $f(x)$ em torno de $x = N$:

$$f(x) \approx f(N) + \cancelto{0}{f'(N)(x - N)} + \frac{f''(N)}{2}(x - N)^2$$

$$f(x) \approx \ln N - 1 - \frac{(x - N)^2}{2N^2}$$

- Fator exponencial dominante:

$$e^{Nf(x)} \approx e^{N(\ln N - 1)} e^{-\frac{(x-N)^2}{2N}}$$

Passo 3: Substituição de Variáveis

- Nova variável adimensional:

$$t = \frac{x - N}{\sqrt{N}} \quad \Rightarrow \quad dx = \sqrt{N} dt$$

- Limites de integração:

$$x = 0 \Rightarrow t = -\sqrt{N} \quad (\text{desprezível para } N \gg 1)$$

$$\int_0^{\infty} \to \int_{-\infty}^{\infty} \text{ para aproximação}$$

- Integral transformada:

$$N! \approx e^{N \ln N - N} \sqrt{N} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-t^2/2} dt$$

Passo 4: Integral Gaussiana

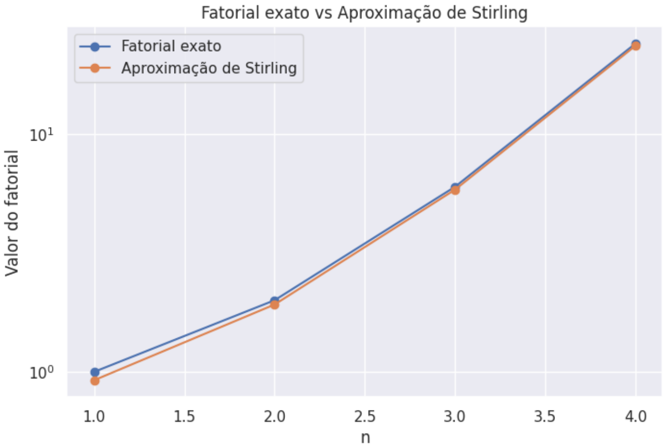
- Identidade fundamental:

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-t^2/2} dt = \sqrt{2\pi}$$

- Resultado final:

$$N! \approx e^{N \ln N - N} \sqrt{N} \cdot \sqrt{2\pi}$$

$$N! \approx \sqrt{2\pi N} \left(\frac{N}{e} \right)^N$$


Fatorial exato vs Aproximação de Stirling
Fatorial exato
Aproximação de Stirling
Valor do fatorial
10^1
10^0
1.0
1.5
2.0
2.5
3.0
3.5
4.0
n

Conclusão e Observações

- Método de Laplace captura:
  - Termo dominante $\left(\frac{N}{e}\right)^N$
  - Correção subdominante $\sqrt{2\pi N}$
- Erro relativo decai como $\mathcal{O}(1/N)$
- Generalizações:
  - Expansões de ordem superior (Wallis, Euler-Maclaurin)
  - Aplicações em sistemas com muitos graus de liberdade

Limite Gaussiano

$$f(N_1) = \ln W_N(N_1) = \ln N! - \ln N_1! - \ln N_2! + N_1 \ln p + N_2 \ln q$$

Usando a aproximação de Stirling:

$$f(N_1) = N \ln N - N_1 \ln N_1 - (N - N_1) \ln(N - N_1) + N_1 \ln p + (N - N_1) \ln q$$

Expansão em torno do máximo N_1^*:

$$f(N_1) \sim f(N_1^*) + (N_1 - N_1^*)^2 \, \frac{1}{2} \frac{\partial^2 f}{\partial N_1^2}\bigg|_{N_1 = N_1^*} + \ldots$$

Limite Gaussiano

Equação para o máximo:

$$\frac{\partial f}{\partial N_1} = 0$$

$$-\ln N_1^* + \ln(N_1 - N_1^*) + \ln p - \ln q = 0$$

$$N_1^* = Np$$

Limite Gaussiano

Também precisamos calcular:

$$\frac{\partial^2 f}{\partial N_1^2} = \frac{1}{N - N_1} - \frac{1}{N_1}$$

$$\left.\frac{\partial^2 f}{\partial N_1^2}\right|_{N_1 = N_1^*} = \frac{-1}{Npq}$$

$$f(N_1) \sim \ln W_N(N_1^*) - \frac{-(N_1 - Np)^2}{2Npq}$$

Normalizando temos que:

$$p(N_1) = \frac{1}{\sqrt{2\pi Npq}} \exp\left(\frac{-(N_1 - Np)^2}{2Npq}\right)$$