

ESTUDO DE DISTRIBUIÇÕES DE PROBABILIDADES E SUAS APLICAÇÕES NA QUÍMICA.

Juliana Cristina Gomes, Marisa Veiga Capela, Jorge Manuel Vieira Capela. – Probabilidade e Estatística – Bacharelado em Química - Departamento de Físico-Química – Instituto de Química – Campus de Araraquara.

Uma variável é aleatória quando seu valor não pode ser previsto com segurança, ou seja, em repetições do mesmo experimento aleatório nas mesmas condições ela assume valores diferentes. Uma variável aleatória pode ser “discreta”, quando seus possíveis valores formam um conjunto discreto, ou contínua, em que os possíveis valores pertencem a um conjunto contínuo.

Variável aleatória discreta é uma variável cujos valores $x_1, x_2, x_3, \dots, x_n$ ocorrem, respectivamente, com probabilidades $p(x_1), p(x_2), p(x_3), \dots, p(x_n)$ de modo que a soma dessas probabilidades seja igual a 1. Essa variável segue uma distribuição de probabilidades dada por uma fórmula, tabela ou gráfico, que corresponde a uma distribuição de frequências relativas teórica. As distribuições de Bernoulli, Binomial e Poisson são exemplos de distribuições discretas de probabilidade.

Uma variável aleatória contínua é uma variável cujos intervalos de valores ocorrem com uma certa probabilidade que é dada por uma função densidade de probabilidade $f(x)$ e seu gráfico. A distribuição Normal, Lognormal e Uniforme são exemplos de distribuições contínuas de probabilidade.

Nesse sentido, muitos fenômenos têm associados a eles variáveis aleatórias, cujos valores possíveis são descritos por uma distribuição de probabilidade. A distribuição de probabilidades de uma variável aleatória define um modelo probabilístico ou estocástico para o fenômeno em questão. Então, para entender o comportamento de uma variável aleatória precisamos definir a forma de sua distribuição de probabilidade.

O objetivo deste trabalho é estudar e compreender as distribuições de probabilidades discretas (Bernoulli, Binomial, Poisson, etc.) e contínuas (Uniforme, Exponencial, Normal ou Gaussiana, t Student, Qui-Quadrado, etc.), bem como suas propriedades e particularidades. Alguns exemplos dessas distribuições em Química são apresentados.

Uma variável aleatória discreta tem distribuição de Bernoulli quando ela representa um experimento cujo resultado pode ser um sucesso (se ocorrer o evento de interesse) ou um insucesso (o evento de interesse não ocorre). A probabilidade de sucesso é p e a de insucesso é $q = 1 - p$. Seja X o número de sucessos em uma única tentativa do experimento. X assume o valor 0 que corresponde ao fracasso, com probabilidade q , ou o valor 1, que corresponde ao sucesso, com probabilidade p . Nessas condições a variável aleatória X tem distribuição de Bernoulli, e sua função de probabilidade é dada por:

$$P(X = x) = p^x q^{1-x}.$$

Uma variável aleatória tem distribuição binomial quando representa a execução de n vezes um experimento de Bernoulli, sendo cada execução independente da outra. Se X é uma variável com distribuição Binomial, a probabilidade de X assumir um valor k é dada por:

$$P(X = k) = C_{n,k} p^k q^{n-k}.$$

A média da distribuição Binomial é $\mu = np$ e o desvio padrão é $\sigma = \sqrt{npq}$.

A distribuição mais simples para uma variável aleatória contínua é a Distribuição Uniforme. A distribuição Normal ou Gaussiana é a mais familiar das distribuições de probabilidade contínuas e também uma das mais importantes.

A equação da curva normal é especificada usando dois parâmetros: a média populacional (μ) e o desvio padrão populacional (σ). A média refere-se ao centro da distribuição e o desvio padrão ao espalhamento da curva. A distribuição normal é simétrica em torno da média, o que implica que a média, a mediana e a moda são todas coincidentes.

Uma variável aleatória X tem distribuição normal se a sua função densidade de probabilidade for:

$$f(x) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} e^{-(x-\mu)^2 / 2\sigma^2}$$

O gráfico de uma distribuição normal tem a forma de sino e a área total abaixo da curva é igual a 1. Qualquer fração da área total representa a probabilidade da variável x assumir um valor entre os extremos que definem esta área. Na figura 1, a probabilidade de um valor de x estar entre um desvio padrão antes da média e um desvio padrão depois é 0,341+0,341=0,682. Em outras palavras, 68,2% dos valores de x estão entre $\mu-\sigma$ e $\mu+\sigma$.

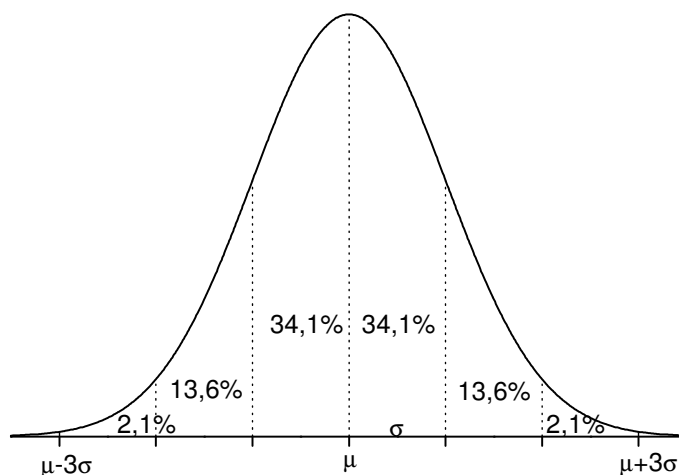


Figura 1 – Gráfico de uma distribuição Normal com média μ e desvio padrão σ

Um exemplo interessante da distribuição normal de aplicação na química foi a determinação de cloreto em um composto químico que está ilustrado nas figuras 2 e 3.

	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K	L
1	Simulação de valores de uma distribuição normal											
2												
3												
4												
5												
6												
7												
8												
9												
10	Resultados											
11												
12	No	Amostra										
13	1	51,02										
14	2	50,09										
15	3	50,76										
16	4	50,23										
17	5	48,32										
18	6	50,15										
19	7	51,08										
20	8	50,82										
21	9	49,24										
22	10	49,64										
23	11	51,54										
24	12	48,38										

Figura 2 – Planilha após a simulação de 1500 valores de uma amostra de distribuição normal de média 50,4ppm de cloreto e desvio padrão 1,5ppm.

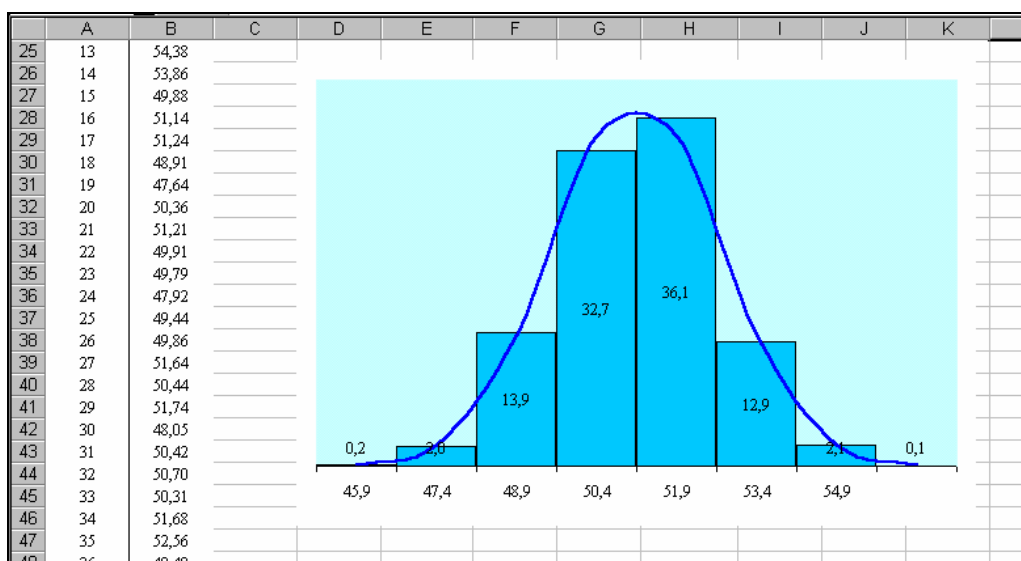


Figura 3 – Gráfico gerado com os valores simulados de uma distribuição normal da Figura 2

Outras distribuições contínuas úteis, de interesse prático, que assumem valores positivos e tendem a ter distribuições assimétricas à direita foram estudadas. É o caso da distribuição Gama e Qui-Quadrado.

O estudo das variáveis aleatórias foi útil e importante para a construção dos modelos probabilísticos de algumas situações experimentais, como por exemplo, a determinação de cloreto em um composto químico e também para a conseqüente estimação de seus parâmetros.

Referências Bibliográficas

- BUSSAB, W.O. E MORETTIN, P.A. Estatística Básica. 5^a. ed. São Paulo: Saraiva, 2004.
- LAPPONI, J.C. Estatística usando o Excel. São Paulo: Editora Lapponi, 2000.
- LEVINE, m.1., BERENSON, M.L., STEPHAN, D. Estatística: teoria e aplicações. Usando Microsoft Excel. Rio de Janeiro: Livros Técnicos e Científicos Editora S.^a, 2000.
- MEYER, P.L. Probabilidade – Aplicações à estatística. 2^a ed. Rio de Janeiro: Livros Técnicos e Científicos Editora S.^a, 2000.
- TRIOLA, M.F. Introdução à Estatística, 7ed. Livros Técnicos e Científicos Editora, 1999.