

# 04\_2-Caderno-InfEst-parte2

2024-04-07

## Cálculo Diferencial e Integral

### Problemas convencionais em ciência de dados

- Problemas convencionais em ciência de dados
- Previsão ou predição → O que vai acontecer?
- Classificação → Qual o tipo de um determinado objeto?
- Agrupamento → Qual a melhor forma de agregar objetos?
- Prescrição → O que devo fazer?
- Como resolvê-los?
- Em geral usamos algum tipo de modelo.
- O que é um modelo?
- Representação simplificada da realidade.
- Qual o objetivo de um modelo?
- Representar como o cientista imagina ou supõe que a realidade está sendo gerada e refletida por meio dos dados.
- Características de um bom modelo
- Deve representar os principais aspectos do fenômeno sendo avaliado.
- Pode conter uma ou mais quantidades desconhecidas (parâmetros).
- Deve permitir generalizações.
- Deve fornecer um resumo rápido e interpretável do fenômeno em estudo.
- Deve ser matematicamente preciso e coerente.

### Funções

- Definição: uma função escrita como  $y = f(x)$  associa um número  $y$  a cada valor de  $x$ .
- $x$  é chamada de variável independente.
- Domínio de  $f(x)$  é a faixa de valores que  $x$  pode assumir.
- $y$  é chamada de variável dependente.
- Imagem de  $f(x)$  é a faixa de valores que  $y$  pode assumir.
- Resumindo temos,

$$\frac{x \in \text{Dominio}}{\text{Independente}} \longrightarrow f(x) \longrightarrow \frac{x \in \text{Imagem}}{\text{Dependente}}$$

- O domínio e imagem de uma função são intervalos.
- Tipos de intervalos:
  - Intervalo aberto não contém as extremidades: Notação  $(a,b)$ .
  - Intervalo fechado contém as extremidades: Notação  $[a,b]$ .

- O que entra e o que sai de uma função?
  - Naturais:  $\mathbb{N} = \{0, 1, 2, 3, \dots\}$
  - Inteiros:  $\mathbb{Z} = \dots, -3, -2, -1, 0, 1, 2, 3, \dots$
  - Racionais  $Q = \frac{a}{b} | a, b \in \mathbb{Z}, b \neq 0$
  - Irracionais: Conjunto de números que não são racionais.
  - Reais: União de todos os números mencionados acima, notação  $\mathbb{R}$ .
- Distinção importante  $R$  (double) e  $Z$  (integer).
- Considere a função  $y = x^2$ .
- Em R temos

```
minha_funcao <- function(x) {
  y <- x^2
  return(y)
}
```

- Avaliando a função em alguns pontos.

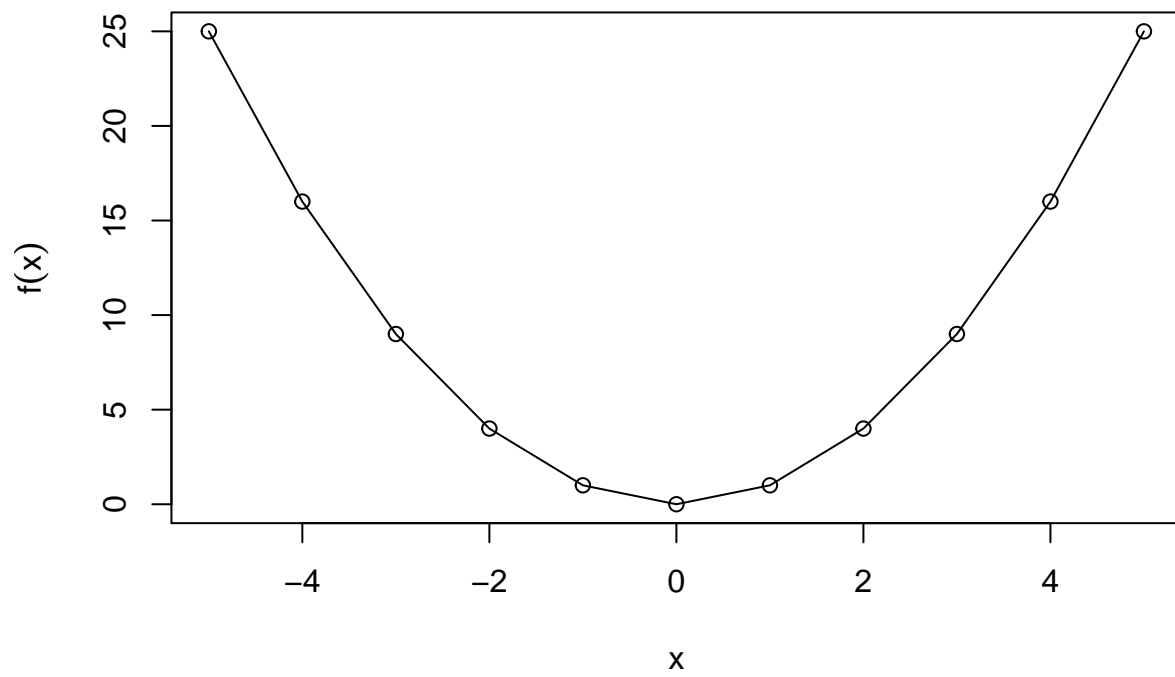
```
x_vec <- c(-5, -4, -3, -2, -1,
0, 1, 2, 3, 4, 5) #concatenação
minha_funcao(x = x_vec) #automaticamente vetorizado
```

```
## [1] 25 16 9 4 1 0 1 4 9 16 25
```

## Funções unidimensionais

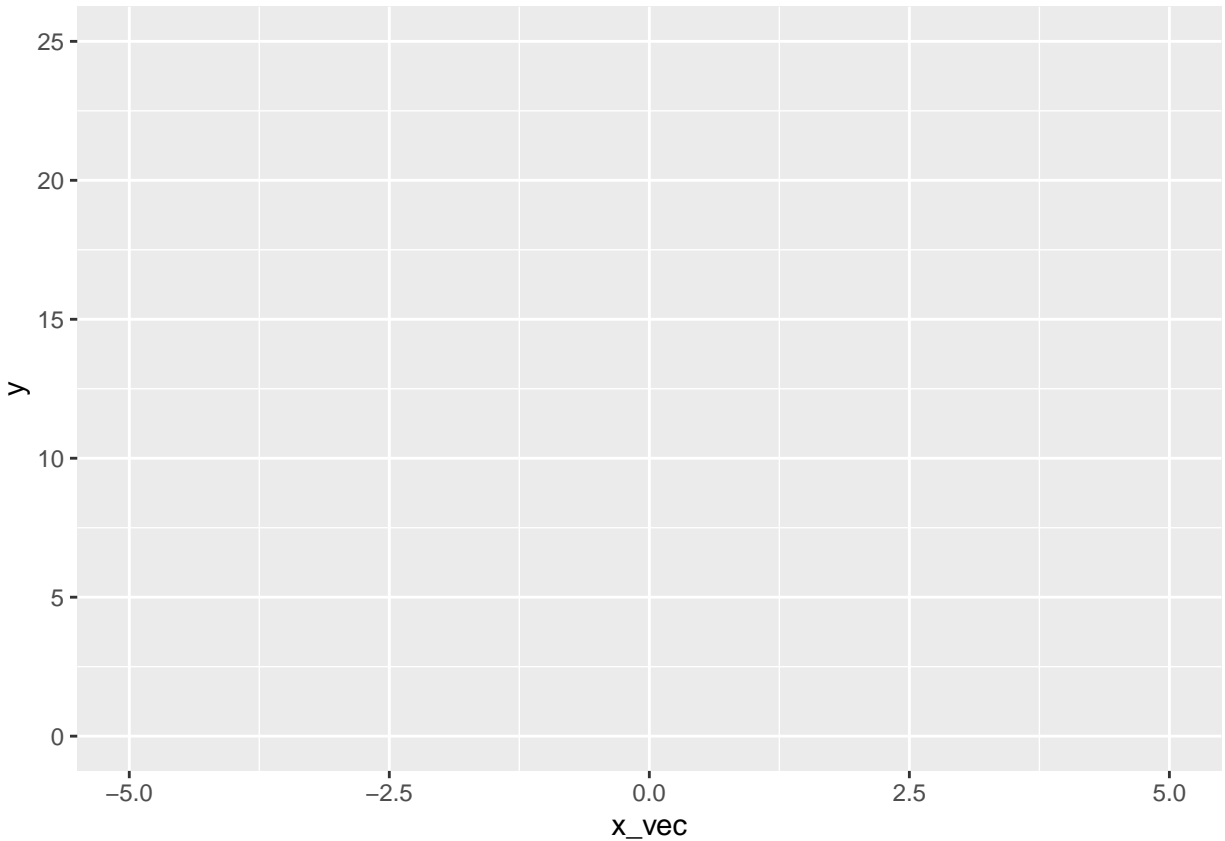
- Uma função  $y = f(x)$  é dita ser de apenas uma variável (unidimensional). Ou seja, só uma entrada
- Pode ser desenhada em um espaço bidimensional, o chamado  $R_2$ . Gráfico de  $x$  e  $y$
- O espaço  $R_2$  é formado por todas as duplas ordenadas de valores reais.
- A variável dependente  $y$  é representada no eixo vertical.
- A variável independente  $x$  é representada no eixo horizontal.

```
## Avaliando a função
y <- minha_funcao(x = x_vec)
## Gráfico da função
plot(y ~ x_vec, xlab = "x", type = "l",
ylab = expression(y = f(x)))
points(x_vec, y)
```



```
## ou com GGLOT
```

```
ggplot(mapping = aes(x_vec,y))
```



## Funções parametrizadas

- Definição - parâmetro é uma quantidade conhecida que indexa ou parametriza uma determinada função.
- Os parâmetros mudam o comportamento da função e descrevem quantidades/características de interesse.
- Notação:  $y = f(x - \theta)$ , onde  $\theta$  denota o parâmetro.
- O conjunto de valores que  $\theta$  (theta minúsculo) pode assumir é chamado de espaço paramétrico (theta maiúsculo).
- Notação

$$\theta \in \Theta$$

- Exemplo:  $y = (x - \theta)^2$ . Theta joga o gráfico mais para direita ou esquerda
- Computacionalmente:

```
fx <- function(x, theta) {  
  out <- (x - theta)^2  
  return(out)  
}
```

```
## Criar grafico
```

## Funções com vários parâmetros

- Em geral uma função pode ter vários parâmetros.

- O ideal é que cada parâmetro controle um aspecto da função.
- Exemplo:  $y = f(x; \theta)$ , onde  $\theta$  é um vetor de parâmetros.
- Função com dois parâmetros:

$$y = \frac{(x - \theta_1)^2}{\theta_2}$$

```
## Criar grafico
```

## Declividade

- A declividade mede a variação “delta maiusculo” no valor de y dividido pela variação no valor de x, ou seja, declividade é

$$\frac{\Delta y}{\Delta x}$$

(quanto varia y quando mudamos x).

- A declividade do desenho de uma função pode ser constante (A), positiva (B) ou negativa (C).

```
## Criar grafico
```

Figura 4. Exemplos de declividade.

- O intercepto vertical é o ponto no qual o gráfico cruza o eixo vertical e é obtido quando  $x = 0$ .

## Funções com duas ou mais variáveis independentes

Funções com duas ou mais variáveis independentes - Definição - uma função escrita como  $y = f(x)$  associa um número  $y$  a cada vetor de entrada  $x$ . (**Atenção:**  $x$  é um vetor nesse caso!) -  $x = (x_1, \dots, x_p)^T$  denota um vetor linha transposto (vetor coluna). - Exemplo: considere a função de duas variáveis  $x_1$  e  $x_2$  definida por

$$f(x_1, x_2) = \sqrt{25 - x_1^2 - x_2^2}$$

,avale a função nos pontos  $x = (0, 0)^T$ ,  $x = (3, 0)^T$  e desenhe seu gráfico. - Avaliando nos pontos

[[ARRUMAR]]  $y = \sqrt{25 - 0^2 - 0^2} = 5$  e  $y = \sqrt{25 - 3^2 - 0^2} = 4$

Computacionalmente - Implementação computacional

```
fx1x2 <- function(x) {
  y = sqrt(25 - x[1]^2 - x[2]^2)
  return(y)
}
entrada1 <- c(0, 0)
entrada2 <- c(3, 0)
fx1x2(x = entrada1)
```

```
## [1] 5
```

```
## [1] 5
fx1x2(x = entrada2)
```

```
## [1] 4
```

```
## [1] 4
```

- Avaliando uma função bidimensional.

```
entrada <- matrix(c(entrada1, entrada2),  
                  ncol = 2, nrow = 2,  
                  byrow = TRUE)  
entrada
```

```
##      [,1] [,2]  
## [1,]    0    0  
## [2,]    3    0
```

```
## [,1] [,2]  
## [1,] 0  0  
## [2,] 3  0
```

```
saida <- c()  
for(i in 1:2) {  
  saida[i] <- fx1x2(entrada[i,])  
}  
saida
```

```
## [1] 5 4
```

```
## [1] 5 4
```

- O gráfico da função é o conjunto das triplas ordenadas  $(y, x_1, x_2)$  que satisfazem a função.

## Passo-a-passo para desenhar funções bidimensionais

- Neste caso estamos no espaço  $R_3$ .
- (A) Montar uma grade de valores combinando valores para  $x_1$  com valores para  $x_2$ .
- (B) Avaliar a função em cada um dos pontos criados.
- (C) Representar o valor da função no gráfico. Neste caso usando uma paleta de cores. (poderia ser uma topografia, seria uma hemi-esfera)

```
## Fazer grafico
```

Figura 5. Passo-a-passo para desenhar uma função de duas variáveis independentes.

Gráficos bidimensionais - Em geral usamos uma grade mais precisa.

```
# Fazer grafico
```

Figura 6. Ilustração do gráfico de uma função de duas variáveis de entrada.(curva de nível ou iso-linha)

## Funções multidimensionais

- Definição - uma função escrita como  $y = f(x; \theta)$  associa um número  $y$  a cada vetor de entrada  $x$  e  $\theta$  denota um vetor de parâmetros conhecidos.
- Para funções com mais de duas variáveis de entrada não temos uma forma simples de representação gráfica.
- Em termos práticos as funções vão representar ou modelar situações reais.
- Precisamos de funções flexíveis para representar fenômenos complexos.

## Funções polinômiais

- Funções polinômiais são funções do tipo

$$y = \beta_0 + \beta_1 x + \beta_2 x^2 + \dots + \beta_p x^p$$

- Exemplo: funções polinômiais de grau até três.

- Função linear:

$$y = \beta_0 + \beta_1 x$$

- Função quadrática:

$$y = \beta_0 + \beta_1 x + \beta_2 x^2$$

- Função cúbica:

$$y = \beta_0 + \beta_1 x + \beta_2 x^2 + \beta_3 x^3$$

- O gráfico de uma função quadrática é uma parábola aberta para cima se  $\beta_2 > 0$  ou para baixo se  $\beta_2 < 0$
- Graficamente:

*# Fazer grafico*

Figura 8. Exemplos de gráficos de funções polinômiais.

Funções do tipo potência - Funções do tipo potência são funções da forma

$$y = x^a$$

em que  $a$  é um expoente constante. - Por definição,  $x^0 = 1$  e note que um número sem expoente está elevado a 1. 1.

$$x(xc) = xa + c;$$

2.

$$(xa)c = xac;$$

3.

$$3.(xz)a = xa(za);$$

4.

$$4.(xz)c = xczc;$$

5.

$$5.1xa = x - a;$$

6.

$$6.xaxc = xa - c;$$

7.

$$7.\sqrt{x} = \frac{x^1}{2};$$

8.

$$8.a\sqrt{x} = x^{1/a};$$

9.

$$9.c\sqrt{xa} = \frac{xa}{c}.$$

## Funções exponenciais

- Funções exponenciais são funções do tipo  $y = a^x$  onde  $a$  é maior que zero e diferente de 1 e  $x$  é o expoente.
- Funções exponenciais naturais são funções exponenciais que tem como base

$$\lim_{n \rightarrow \infty} (1 + \frac{1}{n})^n = 2.718281828$$

- Propriedades importantes:

1.

$$e^0 = 1.$$

2.

$$e^1 = e = 2.71828$$

3.

$$e(eb) = ea + b.$$

4.

$$(ea)b = eab$$

5.

$$eacb = ea - b.$$

## Funções logarítmicas

- Funções logarítmicas ou logaritmo é a potência à qual uma dada base deve ser elevada para se obter um particular número.
- Logaritmos comuns utilizam a base 10 e são escritos  $\log_{10}$ .
- Por exemplo, uma vez que  $10^2 = 100$ , 2 é o log de 100.
- Para qualquer função exponencial  $y = a^x$ , onde  $a$  é a base e  $x$  o expoente,  $a$  potência à qual  $a$  deve ser elevado, para obter-se  $y$ .

[[ARRUMAR]]  $\log_a y = x$  x é

## Relações entre funções logarítmicas e exponenciais.

- Se  $\log_{10}(y) = 2x$ , então  $y = 10^{2x}$ .
- Se  $\log_a(y) = xz$ , então  $y = a^{xz}$ .
- Se  $\ln(y) = 5t$ , então  $y = e^{5t}$ .
- Se  $y = a^{3x}$ , então  $\log_a(y) = 3x$ .
- Se  $y = 10^{6x}$ , então  $\log_{10}(y) = 6x$ .
- Se  $y = e^{t+1}$ , então  $\ln(y) = t + 1$  **Observação:**  $e = 2.718281828459045 =$  número de Euler.



## Outras funções de interesse

- Sigmóide ou logística:  $y = 1 / (1 + e^{-x})$
- Tangente hiperbólica:  $y = (e^x - e^{-x}) / (e^x + e^{-x})$
- Linear retificada (ReLU):  $y = \max(0, x)$ . (maximo entre 0 e  $x$ ?. Vale 0 até o 0 e depois “sobe”)
- Leaky ReLU:  $y = \max(\alpha x, x)$ , onde  $\alpha$  é uma parâmetro conhecido.

##Desenho do gráfico das funções

*#desenho aqui*

## Normal

$$y = (x - \theta_1)^2 / \theta_2$$

$$\exp(-(x - \theta_1)^2 / \theta_2)$$

## fazer grafico

[[ARRUMAR]] .....normal

## Limites e continuidade

Limite de uma função - Definição - se uma função  $f(x)$  se aproxima de um número  $L$  conforme  $x$  tende a um número  $a$  vindo da direita ou da esquerda, dizemos que o limite de  $f(x)$  tende a  $L$  quando  $x$  tende a  $a$ .

- Notação

$$\lim_{x \rightarrow a} f(x) = f(a) = L$$

- O limite pode não existir.
- Se o limite de uma função existe ele é único.
- Considere o limite

$$\lim_{x \rightarrow 1} x + 1 = 2$$

- Exemplo:

– Considere o limite

$$\lim_{x \rightarrow 1} x^2$$

[[ARRUMAR]]

- Computacionalmente

```
fx <- function(x) {  
  out <- (x^2 - 1)/(x - 1)  
  return(out)  
}  
fx(x = 1)
```

## [1] NaN

## [1] NaN

## Figura 11. Desenho do gráfico da função

Exemplo - Note que

[[ARRUMAR]]

- Definição intuitiva: o limite de uma função é o valor que achamos natural para ela em um determinado ponto.
- Essa função não é contínua (no ponto)

## Continuidade de uma função

- Definição - dizemos que uma função é contínua em  $x = a$  se três condições forem satisfeitas:
  - $f(a)$  existe,
  - $\lim_{x \rightarrow a} f(x)$  existe e
  - $\lim_{x \rightarrow a} f(x) = f(a)$ .
- Continuidade significa que pequenas variações na variável independente levam a pequenas variações na variável dependente. (mudanças suaves, ou não abruptas)
- Teorema do valor intermediário: se a função  $f(x)$  é contínua no intervalo fechado  $[a, b]$ , então existe pelo menos um número  $c$  em  $[a, b]$  tal que  $f(c) = M$
- Implicação: se  $f(x)$  é contínua seu gráfico não contém salto vertical.
- Em geral podemos pensar em funções contínuas como sendo funções suaves.

## Função não contínua

- Considere a função não contínua em 0.

$$\lim_{x \rightarrow 0} \frac{|x|}{x} = \begin{cases} -1 & x < 0 \\ 1 & x > 0 \end{cases}$$

## Figura 12. Função descontínua.

Propriedades de limites - Se

$$\lim_{x \rightarrow p} f(x) = L_1$$

e

$$\lim_{x \rightarrow p} g(x) = L_2$$

então

$$\lim_{x \rightarrow p} [f(x) + g(x)] = L_1 + L_2$$

$$\lim_{x \rightarrow p} k f(x) = k$$

$$\lim_{x \rightarrow p} f(x) = kL_1$$

$$\lim_{x \rightarrow p} f(x)g(x) = \lim_{x \rightarrow p} f(x) * \lim_{x \rightarrow p} g(x) = L_1 * L_2$$

$$\lim_{x \rightarrow p} f(x)g(x) = L_1 * L_2$$

, desde que  $L_2 \neq 0$ .

## Derivadas

- Definição - derivada ordinária, derivada primeira, ou simplesmente, derivada de uma função  $y = f(x)$  em um ponto  $x = a$  no domínio de  $f$  é representada por

$$\frac{dy}{dx}$$

ou

$$y'$$

ou

$$\frac{df}{dx}$$

ou

$$f'(a)$$

é o valor

$$\frac{dy}{dx}|_{x=a} = f'(a)$$

[[ARRUMAR]]

$$\lim_{h \rightarrow 0} = \frac{f(a+h) - f(a)}{h}$$

- Interpretação da derivada
- Taxa de mudança instantânea.
- No limite quando  $x \rightarrow a$  a derivada é a reta tangente ao ponto  $(a, f(a))$ .
- Equação da **reta tangente** ao ponto  $a$ :  $y - f(a) = f'(a)(x - a)$ . (coeficiente angular é  $\beta_1$  -  $y = \beta_0 + \beta_1 * x$ ) [[ARRUMAR]]

## Exemplo

Obtenha a derivada de  $f(x) = -x^2$

$$\begin{aligned} f'(x) &= \lim_{h \rightarrow 0} \frac{f(x+h) - f(x)}{h} \\ &= \lim_{h \rightarrow 0} \frac{-(x+h)^2 - (-x^2)}{h} \\ &= \lim_{h \rightarrow 0} \frac{-(x^2 + 2xh + h^2) + x^2}{h} \\ &= \lim_{h \rightarrow 0} \frac{-x^2 - 2xh - h^2 + x^2}{h} \end{aligned}$$

$$= \lim_{h \rightarrow 0} \frac{-2xh - h^2}{h}$$

$$= \lim_{h \rightarrow 0} -2x - h = -2x$$

$$= f'(x) = -2x$$

[[CONFERIR]]

Obtenha a reta tangente a  $f(x)$  nos pontos  $x = 2$  e  $x = -2$ . - Temos:

$$f(x = 2) = -4$$

$$f'(x = 2) = -4$$

assim

$$y - f(x = 2) = f'(x = 2)(x - 2)$$

$$y - (-4) = -4(x - 2)$$

$$y + 4 = -4x + 8$$

$$y = 4 - 4x$$

- Computacionalmente -  $f(x)$  e  $f'(x)$ .

```
fx <- function(x) {
  out <- - x^2
  return(out)
}
f_prime <- function(x) {
  out <- -2*x
  return(out)
}
```

- Equação da reta  $y = a + b * x$ .

```
intercept = (fx(x = 2) - f_prime(x = 2)*2)
slope <- f_prime(x = 2)
c(intercept, slope)
```

```
## [1] 4 -4
```

```
## [1] 4 -4
```

```
## Figura 14. Desenho de uma função e retas tangentes.
```

## Regras de derivação

- Seja  $n \neq 0$  um natural. São válidas as fórmulas de derivação:

1. Se  $f(x) = c$  então  $f'(x) = 0$ .
2. Se  $f(x) = xn$  então  $f'(x) = n * n^{-1}$
3. Se  $f(x) = x - n$  então  $f'(x) = -n * -n^{-1}$

4. Se  $f(x) = \frac{x_1}{n}$  então  $f'(x) = \frac{1}{n} * \frac{x_1}{n} - 1$

- Derivada de funções especiais

5. Se  $f(x) = \exp(x)$  então  $f'(x) = \exp(x)$ .

6. Se  $f(x) = \ln(x)$  então  $f'(x) = 1/x, x > 0$

- Sendo,  $f(x)$  e  $g(x)$  deriváveis em  $x$  e  $c$  uma constante.

7.  $(f + g)' = f'(x) + g'(x)$ .

8.  $(cf)'(x) = cf'(x)$ .

9.  $(f * g)'(x) = f'(x)g(x) + f(x)g'(x)$ .

10.  $(fg)'(x) = f'(x)g(x) + f(x)g'(x)$ .

- Exemplo: obtenha a derivada de  $f(x) = 2 + 3x$
- Solução:  $f'(x) = 3$
- Computacionalmente

```
D(expression(2 + 3*x), name = "x")
```

```
## [1] 3
```

```
## [1] 3
```

## Regra da cadeia

- “Uma função dentro da outra”
- Sejam  $y = f(x)$  e  $x = g(t)$  duas funções deriváveis, com  $I \in Df$ . A função composta  $h(t) = f(g(t))$  é derivável, sendo  $h'(t) = f'(g(t))g'(t), t \in Dg$ .
- Existe uma infinidade de fórmulas de derivação.
- Na prática é comum usar um software de matemática simbólica como o wxMaxima.
- Em R as funções `deriv()` e `deriv3()`

## Exemplo regra da cadeia

- Obtenha a derivada de  $\sin(2x^3 - 4x)$ .

1. Note que temos uma função composta (derivada de  $\sin$  e  $\cos$ )

$$\sin(g(x))$$

, onde

$$g(x) = 2x^3 - 4x$$

2. Usando a regra da cadeia temos:

$$f'(g(x)) = \cos(2x^3 - 4x)$$

and

$$g'(x) = 6x^2 - 4.$$

3. Assim, a derivada fica dada por

$$\cos(2x^3 - 4x) * (6x^2 - 4).$$

4. Computacionalmente

```
D(expression( sin(2*x^3 - 4*x)), name = "x")
```

```
## cos(2 * x^3 - 4 * x) * (2 * (3 * x^2) - 4)
```

```
## cos(2 * x^3 - 4 * x) * (2 * (3 * x^2) - 4)
## ou cos(2x^3 - 4x) * (6x^2) - 4)
```

```
D(D(expression( sin(2*x^3 - 4*x)), name = "x"), name = "x")
```

```
## cos(2 * x^3 - 4 * x) * (2 * (3 * (2 * x))) - sin(2 * x^3 - 4 *
##      x) * (2 * (3 * x^2) - 4) * (2 * (3 * x^2) - 4)
```

```
## cos(2 * x^3 - 4 * x) * (2 * (3 * (2 * x))) - sin(2 * x^3 - 4 * x) * (2 * (3 * x^2) - 4) * (2 * (3 * x^2) - 4)
```

## Derivadas de ordem superior

- A derivada  $f'(x)$  é também chamada de derivada de primeira ordem e mede a variação da função original ou primitiva.
- A derivada de segunda ordem denotada por  $f''(x)$  mede a taxa de variação da primeira derivada.
- A derivada de terceira ordem  $f'''(x)$  mede a taxa de variação da segunda derivada e assim por diante até a  $n$ -ésima derivada.
- Notação comum:  $\frac{d^n y}{dx^n}$  que é interpretada como a  $n$ -ésima derivada de  $y$  em relação a  $x$
- Exemplo: obtenha as derivadas até a ordem 5 da função  $y = 2x^4 + 5x^3 + 2x^2$   $dy = 2x^4 + 5x^3 + 2x^2$   
 $dx = 8x^3 + 15x^2 + 4x$   $d^2y/dx^2 = 24x^2 + 30x + 4$   $d^3y/dx^3 = 48x + 30$   $d^4y/dx^4 = 48$  e  $d^5y/dx^5 = 0$  daqui em diante é zero

## Máximos e mínimos

- Dizemos que um ponto  $c$  é um valor máximo relativo de  $f(x)$  se existir um intervalo aberto contendo  $c$ , no qual  $f(x)$  esteja definida, tal que  $f(c) \geq f(x)$  para todo  $x$  neste intervalo.
- Dizemos que um ponto  $c$  é um valor mínimo relativo de  $f(x)$  se existir um intervalo aberto contendo  $c$ , no qual  $f(x)$  esteja definida, tal que  $f(c) \leq f(x)$  para todo  $x$  neste intervalo. (maximo e minimo dentro de um trecho de grafico)

## Figura 15. Ilustração de máximo/mínimo relativos.

- Multiplicando a função por -1 invertemos a sua concavidade.

## Pontos extremos (pico do morro ou fundo do vale)

- Se  $f(x)$  existe para todos os valores de  $x$  no intervalo aberto  $(a, b)$ , e se  $f(x)$  tem um extremo relativo em  $c$ , em que  $a < c < b$ , então  $f'(c)$  existe e  $f'(c) = 0$
- Implicação - Sendo  $f(x)$  diferenciável os pontos extremos de  $f(x)$  vão ocorrer quando  $f'(x) = 0$
- $f'(x)$  pode ser igual a zero mesmo não sendo um extremo relativo.

## Figura 16. Ilustração de uma função onde derivada zero não é ponto extremo.

## Máximos e mínimos

Seja  $c$  um ponto extremo de uma função  $f(x)$  no qual  $f'(c) = 0$ , e suponha que  $f'(x)$  exista para todos os valores de  $x$  em um intervalo aberto contendo  $c$ . Se  $f''(c)$  existe, então - Se  $f''(c) < 0$ , então  $f(x)$  tem um máximo relativo em  $c$ . - Se  $f''(c) > 0$ , então  $f(x)$  tem um mínimo relativo em  $c$ . ## Concavidade - Se  $f''(c) > 0$  o gráfico de  $f(x)$  é côncavo para cima em  $(c, f(c))$ ; - Se  $f''(c) < 0$  o gráfico de  $f(x)$  é côncavo para baixo em  $(c, f(c))$ .

Por que derivadas são importantes? - Obtenção de máximo ou mínimo (relativo).

## Fazer figura

Figura 17. Ilustração de uma função com a reta tangente.ponto extremo tem inclinação zero (a3 na figura)

## Redução de dados

Você já trabalha com dados? Se sim, - Por qual razão você usa a média ou a mediana como uma medida resumo? - Você acha que existe algum procedimento mais geral que leva a obtenção destas medidas resumo? - Se sim, como este procedimento está relacionado com o que vimos em relação a funções e seu comportamento?

- Suponha que temos um conjunto de observações  $y_i$  para  $i = 1, \dots, n$ .
- Objetivo: resumir a informação contida em  $y_i$  em um único número, digamos  $\mu$ .
- Problema: como encontrar  $\mu$ ?
- Solução: encontrar o valor  $\mu$ , tal que  $f(\mu) = \sum_{i=1}^n (y_i - \mu)^2$  (soma de quadrados da diferença de cada valor para media, ou seja o quanto eu perdi ao trocar os  $y$  por  $\mu$ ), seja a menor possível.
- Uma vez que temos os números observados  $y_i$  a única quantidade desconhecida é  $\mu$ .
- Note que  $\mu$  é o parâmetro da nossa função.
- A função  $f(\mu)$  mede o quanto perdemos em representar  $y_i$  apenas usando  $\mu$ .
- Funções perda muito populares são a perda quadrática, perda absoluta, minmax e a cross entropia.
- derivar e igualar a 0.

Funções em R.

```
y <- c(8,9,14,10,10,15,11,5,4,13)
fmu <- function(mu, y) {
  out <- sum((y - mu)^2)
  return(out)
}
fmu <- Vectorize(fmu, "mu")
fmu(mu = c(10, 12, 0, 8), y = y)
```

```
## [1] 117 161 1097 153
```

```
## [1] 117 161
f_prime <- function(mu, y) {
  out <- -2*sum(y-mu)
  return(out)
}
```

Graficamente

- Note que o melhor resumo dos dados de um número, corresponde ao ponto de mínimo da função

$$f(y) = \sum_{i=1}^n (y_i - \mu)^2$$

- Como o mínimo está relacionado com a derivada de  $f(\mu)$ ?

### Exemplo: redução de dados

- No ponto de mínimo/máximo a inclinação da reta tangente a  $f(\mu)$  é zero.
- Denote por  $\hat{\mu}$  o ponto de mínimo/máximo de  $f(\mu)$ , então  $f'(\hat{\mu}) = 0$
- Assim, temos (regra da cadeia!!)

$$f(y) = \sum_{i=1}^n (y_i - \mu)^2$$

$$\varepsilon_i = y_i - \mu$$

$$f'(\mu) = \sum_{i=1}^n (\varepsilon_i)^2$$

$$f'(\mu) = 2 \sum_{i=1}^n (y_i - \mu) \frac{d}{d\mu} (y_i - \mu)$$

$$f'(\mu) = 2 \sum_{i=1}^n (y_i - \mu)(-1)$$

$$f'(\mu) = -2 \sum_{i=1}^n (y_i - \mu)$$

Exemplo: redução de dados - Agora precisamos achar o ponto  $\hat{\mu}$  tal que  $f'(\hat{\mu}) = 0$ .

$$f'(\hat{\mu}) = 0$$

$$-2 \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{\mu}) = 0$$

$$-\sum_{i=1}^n (y_i - n\hat{\mu}) = 0$$

$$n\hat{\mu} = \sum_{i=1}^n y_i$$

$$\hat{\mu} = \frac{\sum_{i=1}^n y_i}{n}$$

OU SEJA MÉDIA!!!

Comentários - Por qual razão você usa a média ou a mediana como uma medida resumo? - Minimiza a perda quadrática. - Medida ótima no sentido de perda quadrática. - Você acha que existe algum procedimento mais geral que leva a obtenção destas medidas resumo? - Especificação do modelo. - Escolha da função perda. - Treinamento (otimização). - Se sim, como este procedimento está relacionado com o que vimos em relação a funções e seu comportamento? - Estudar o comportamento de funções.



## Derivadas parciais

- Uma função pode ter mais do que uma variável independente.
- A derivada parcial mede a taxa de variação instantânea da variável dependente ( $y$ ) com relação a variável independente  $x_1$ , quando a outra variável independente  $x_2$  é mantida constante.
- Como obter a derivada parcial?
- A derivada parcial em relação a  $x_1$  é obtida derivando  $f(x_1, x_2)$  “fingindo” que  $x_2$  é uma constante.
- A derivada parcial de  $f(x_1, x_2)$  em relação a  $x_2$  é obtida derivando  $f(x_1, x_2)$  mantendo  $x_1$  constante.
- A diferenciação parcial segue as mesmas regras da diferenciação ordinária.

Exemplo: Obtenha as derivadas parciais em relação a  $x_1$  e  $x_2$  de  $y = 5x_1^3 + 3x_1x_2 + 4x_2^2$

$$\frac{\partial y}{\partial x_1} = 15x_1^2 + 3x_2$$

ou

```
D(expression( 5 * x^3 + 3 * x * c + 4 * c^2 ), name = "x")
```

```
## 5 * (3 * x^2) + 3 * c
```

$$\frac{\partial y}{\partial x_2} = 3x_1 + 8x_2$$

```
D(expression( 5 * x^3 + 3 * x * c + 4 * c^2 ), name = "c")
```

```
## 3 * x + 4 * (2 * c)
```

Derivadas parciais de ordem superior - Derivadas parciais de segunda ordem

$$\partial^2 f(x_1, x_2)$$

$$\partial x_{21}$$

e

$$\partial^2 f(x_1, x_2)$$

$$\partial x_{22}$$

indica que a função foi diferenciada parcialmente em relação a  $x_1$  ou  $x_2$  duas vezes. - Derivada parcial cruzada (ou mista)

$$\partial^2 f(x_1, x_2)$$

$$\partial x_1 \partial x_2$$

indica que primeiro derivamos em  $x_1$  e depois em  $x_2$ . - A ordem da derivada cruzada não importa (se ambas contínuas), ou seja

$$\partial^2 f(x_1, x_2)$$

$$\partial x_1 \partial x_2$$

$$\partial^2 f(x_1, x_2)$$

$$\partial x_2 \partial x_1$$

Exemplo: derivadas parciais de segunda ordem - Obtenha as derivadas parciais de até segunda ordem em relação a  $x_1$  e  $x_2$  de  $y = 7x_1^3 + 9x_1x_2 + 2x_2^2$

- Derivadas parciais de primeira ordem

$$\frac{\partial y}{\partial x_1} = 21x_1 + 9x_2, \partial y \partial x_2 = 9x_1 + 10x_2$$

- Derivadas parciais de segunda ordem (segunda derivadas direta) [[ARRUMAR]]
- Derivadas parciais de segunda ordem (termos cruzados) [[ARRUMAR]]
- As cruzadas dão sempre iguais.

## Máximos e mínimos funções multidimensionais

- Pontos críticos: as derivadas parciais de primeira ordem devem ser iguais a zero **simultaneamente**.
- Derivadas parciais **principais** de segunda ordem no ponto crítico forem ambas **positivas** -> **ponto de mínimo**.
- Derivadas parciais de segunda ordem no ponto crítico forem ambas **negativas** -> **ponto de máximo**.
- Outras situações ver material suplementar.

## Exemplo

Considere a função  $y = 6x_1^2 - 9x_1 - 3x_1x_2 - 7x_2 + 5x_2^2$

Encontre os pontos críticos e determine se são de máximo ou mínimo. - Graficamente

- Calcular as derivadas parciais de primeira ordem da função [[ARRUMAR]]
- Derivando em  $x_1$ , temos [[ARRUMAR]]
- Derivando em  $x_2$ , temos [[ARRUMAR]]
- Resolver o sistema de equações  $12x_1 - 9 - 3x_2 = 0$   $-3x_1 - 7 + 10x_2 = 0$
- Solução:  $x_1 = 1$  e  $x_2 = 1$ . ## USA NA PROXIMA
- Verificar se o ponto encontrado é de mínimo calculando a segunda derivada parcial principal e avaliando o seu sinal.

[[ARRUMAR]]

- Calcular as derivadas cruzadas e verificar se o produto das derivadas principais é maior que o produto das cruzadas

[[ARRUMAR]]

Assim, temos que [[ARRUMAR]]

- A função está em um ponto de mínimo quando examinada de todas as direções.

## Gradiente e Hessiano

### Gradiente

- Derivadas de primeira e segunda ordem aparecem com tanta frequência que receberam nomes especiais.
- O vetor gradiente de uma função  $f(x_1, x_2)$  é o **vetor composto pelas derivadas primeira** de  $f(x_1, x_2)$  em relação a  $[[ARRUMAR]]$
- A definição estende-se naturalmente para funções multidimensionais.
- Sendo,  $f(x)$  onde  $x$  é um vetor  $p \times 1$  de variáveis independentes o vetor gradiente de  $f(x)$  é dado por  $[[ARRUMAR]]$

### Hessiano

- A matriz hessiana de uma função  $f(x_1, x_2)$  é a matriz composta pelas **derivadas de segunda ordem** de  $f(x_1, x_2)$ , na seguinte estrutura  $[[ARRUMAR]]$
- E para o caso multidimensional  $[[ARRUMAR]]$

### Séries de Taylor

- Suponha que uma função  $f(x)$  é derivável  $(n + 1)$  vezes em um intervalo contendo  $x = x_0$ .
- Expansão em Série de Taylor de  $f(x)$  em torno de  $x = x_0$  consiste em reescrever  $f(x)$  da seguinte forma:  $[[ARRUMAR]]$

onde o termo  $R_n(x)$  é chamado de resíduo ou erro, e dado por  $[[ARRUMAR]]$

sendo  $E$  um valor entre  $x$  e  $x_0$ .

### Exemplo

- Seja  $f(x) = \exp(x)$ . Determine a expansão de Taylor de ordens 1 e 2, de  $f(x)$  ao redor de  $x_0 = 0$ .
- Aproximação de primeira ordem  $[[ARRUMAR]]$
- Aproximação de segunda ordem  $[[ARRUMAR]]$

### Gráficos

- Quanto mais se afasta de zero pior fica a aproximação.
- A Taylor em  $n+1$  graus é igual a original

### Regressão linear simples

- Regressão linear é uma das técnicas mais populares em ciência de dados.
- Objetivo: descrever o comportamento de uma variável dependente  $y$  por meio do conhecimento de outra variável independente  $x$ .
- Predizer  $y$  dado um valor de  $x$ .
- Descrever a relação entre  $y$  e  $x$ .
- Exemplo

- Como o tamanho (em metros quadrados) de um apartamento está associado ao seu preço (em reais)?
- Suponha que um conjunto de 20 apartamentos foi medido e avaliado.

Grafico

Regressão linear simples - Ideia simples! → O preço deve ser uma função do tamanho do apartamento. - Formalização matemática: - Denote por  $y_i$  para  $i = 1, \dots, n$  o preço do apartamento  $i$  e neste caso  $n = 20$ . - Denote por  $x_i$  o tamanho do apartamento  $i$  em metros quadrados. - Função relacionando preço ~ tamanho

$$Preço = f(\text{metroquadrado})$$

$$y_i = f^*(x_i)$$

- Qual é a função  $f^*(x_i)$ ?
- Não conhecemos e em geral nunca vamos conhecer  $f^*(x_i)$ .
- Aproximar  $f^*(x_i)$  por outra função  $f(x_i)$  conhecida.
- Problema: qual  $f(x_i)$  e como fazer a aproximação!
- Uma opção é usar a expansão em série de Taylor para obter uma aproximação.
- Aproximação em série de Taylor de primeira ordem

$$f^*(x) = f^*(x_0) + (x - x_0)f^{*'}(x_0) + R_n(x)$$

- Ignorando o termo residual  $R_n(x)$  [[ARRUMAR]]
- Rearranjando os termos obtemos [[ARRUMAR]]
- De forma equivalente, temos

$$y_i = \beta_0 + \beta_1 x_i + R_n(x_i),$$

em que o termo  $R_n(x_i)$  é o erro cometido em aproximar  $y_i$  por  $\beta_0 + \beta_1 x_i$

- Notação usual  $E_i = y_i - (\beta_0 + \beta_1 x_i)$ .
- Note que o erro é uma função dos parâmetros desconhecidos  $\beta_0$  e  $\beta_1$
- Objetivo: minimizar a soma de quadrados dos erros ou resíduos [[ARRUMAR]]
- Obter o vetor gradiente [[ARRUMAR]]
- Encontrar  $\hat{\beta}_0$  e  $\hat{\beta}_1$  tal que [[ARRUMAR]]

1. Chame  $y_i - (\beta_0 + \beta_1 x_i) = erro_i$ .
2. Chame  $\beta_0 + \beta_1 x_i = \mu_i$
3. Assim, [[ARRUMAR]]

Vetor gradiente - Portanto, [[ARRUMAR]]

- Resolver o sistema de equações simultâneas (derivadas de beta 0 e beta 1) [[ARRUMAR]]
- Solução [[ARRUMAR]]

```
## Carregando a base de dados
dados <- read.table("Data_files/reglinear.csv",
                    header = TRUE)
dados
```

```
##      y  x
## 1 207317.7 55
## 2 250845.7 69
## 3 165755.0 46
## 4 219816.7 61
## 5 268582.2 73
## 6 229059.7 63
## 7 179098.1 50
## 8 168301.8 46
## 9 250917.7 69
## 10 230990.3 62
## 11 229818.7 63
## 12 221484.1 60
## 13 187977.0 55
## 14 251526.9 70
## 15 242289.5 66
## 16 211007.7 59
## 17 197455.5 53
## 18 192100.8 51
## 19 208762.3 57
## 20 204593.1 54
```

```
## Obtendo beta1
beta1 <- (sum(dados$y*dados$x) -
          mean(dados$y)*sum(dados$x))/
          (sum(dados$x^2) - mean(dados$x)*sum(dados$x))
# Obtendo beta0
beta0 <- mean(dados$y) - beta1*mean(dados$x)
c(beta0, beta1)
```

```
## [1] 2622.752 3608.499
```

```
## [1] 2622.752 3608.499
## Verificando
```

```
coef(lm(y ~ x, data = dados))
```

```
## (Intercept)      x
## 2622.752    3608.499
```

```
## (Intercept) x
## 2622.752 3608.499
```

Modelo:  $\hat{y} = 2622.752 + 3608.499 \cdot \text{metrosquadrados}$

## Discussão

- Derivadas são essenciais em estatística.
- Maximizar/minimizar funções perda/objetivo.
- O cálculo é por vezes difícil e tedioso.
- Solução de sistemas lineares é tedioso quando possível.
- Álgebra linear ajuda a generalizar as soluções.
- Em situações mais gerais expressões analíticas não serão possíveis de obter.
- Métodos numéricos para resolução de sistemas lineares.
- Métodos numéricos para resolução de sistemas não-lineares.
- Métodos de otimização numérica.

## Aula 2024-04-06

### Integrais

Anti-derivada

#### Integral indefinida

- Chamamos de integral indefinida o oposto ou o inverso da derivada, também chamada de antiderivada.
- A integral indefinida da função  $f(x)$  é expressa por

$$\int f(x)dx = F(x) + c.$$

- Exemplo,

$$\int x dx = x^2$$

+ c, uma vez que se derivarmos  $x^2$  encontramos  $x$

[[COMPLETAR]]

#### Soma de Riemann

```
soma_riemann <- function(n, a, b, fx, ...) {  
  intervalos <- seq(a, b, length = n)  
  ci <- c()  
  soma <- c()  
  for(i in 1:c(n-1)) {  
    Deltai <- (intervalos[i+1] - intervalos[i]) # Tamanho do intervalo  
    ci[i] <- (intervalos[i+1] + intervalos[i])/2 # Ponto central do intervalo  
    soma[i] <- fx(ci[i])*Deltai # Cada elemento da soma  
  }  
  return(sum(soma))  
}  
soma_riemann <- Vectorize(soma_riemann, "n")  
  
soma_riemann(n = 2, a = 1, b = 2, fx = function(x) x^2)
```

```
## [1] 2.25
```

```
soma_riemann(n = 10, a = 1, b = 2, fx = function(x) x^2)
```

```
## [1] 2.332305
```

```
soma_riemann(n = 50, a = 1, b = 2, fx = function(x) x^2)
```

```
## [1] 2.333299
```

```
soma_riemann(n = 100, a = 1, b = 2, fx = function(x) x^2)
```

```
## [1] 2.333325
```

```
soma_riemann(n = 1000, a = 1, b = 2, fx = function(x) x^2)
```

```
## [1] 2.333333
```

## Integração numérica em R

- O R tem uma função nativa para o cálculo de integrais ?integrate.
- Exemplo:

```
fx <- function(x) x^2  
integrate(fx, lower = 1, upper = 2)
```

```
## 2.333333 with absolute error < 2.6e-14
```

```
## 2.333333 with absolute error < 2.6e-14
```

- Outros tipos de integrais
  - Integrais multidimensionais.
  - Integrais impróprias.

## Discussão

- Integrais são extremamente úteis para obter alguns resultados teóricos em probabilidade.
- Permitem o cálculo de probabilidades para variáveis aleatórias contínuas.
- Técnicas (básicas) de modelagem estatística e machine learning não usam integrais diretamente.
- Em geral integrais são mais difíceis de calcular do que derivadas.
- É possível estender a ideia de integrais para funções com duas ou mais variáveis de forma análoga feita para derivadas.
- Integrais em alta dimensão são extremamente difíceis de calcular e/ou aproximar numericamente.