Experimento 4
Mínimos Quadrados

Jorge Diego Marconi e Varlei Rodrigues

Vamos supor que temos um conjunto de N dados $(x_i,\ y_i)$, onde cada valor y_i tem um erro associado que chamamos de σ_i, ou seja $(y_i \pm \sigma_i)$ (os σ_i não têm que ser iguais entre si). Vamos supor que os dados representam certo fenômeno físico que segue uma lei descrita por uma função f.
Usando a descrição gaussiana de erros, a probabilidade P_i de ocorrer a medida $(x_i,\ y_i,\ \sigma_i)$ é dada por:

$$P_i = \frac{C}{\sigma_i} exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{(y_i - \overline{y_i})}{\sigma_i}\right)^2\right] \tag{1}$$

onde $\overline{y_i}$ é o valor médio de y_i e C é uma constante de normalização. Portanto, a probabilidade P de ocorrer o conjunto das N medidas será:

$$\begin{aligned} P &= P_1\ P_2\ ...\ P_N \\ &= \frac{C}{\sigma_1} exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{(y_1 - \overline{y_1})}{\sigma_1}\right)^2\right]\ ...\ \frac{C}{\sigma_N} exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{(y_N - \overline{y_N})}{\sigma_N}\right)^2\right] \\ &= \frac{C^N}{\sigma_1\ \sigma_2\ ...\ \sigma_N} exp\left[-\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N}\left(\frac{(y_i - \overline{y_i})}{\sigma_i}\right)^2\right] \end{aligned} \tag{2}$$

Como $\overline{y_i}$ seria o valor que se aproxima do valor ”verdadeiro” de y_i e supondo um modelo físico para nossas medidas que segue uma lei descrita por uma função f, podemos escrever que:

$$\overline{y_i} = f(x_i, a_1, a_2, ..., a_n) \tag{3}$$

onde $a_1,\ a_2,\ ...\ a_n$ são os parâmetros do modelo. Definindo:

$$\chi^2 = \sum_{i=1}^{n}\left(\frac{(y_i - f(x_i, a_1, a_2, ..., a_n))}{\sigma_i}\right)^2 \tag{4}$$

podemos reescrever a equação (2) como:

$$P = \frac{C^n}{\prod_{i=1}^{n}\sigma_i} exp\left[-\frac{1}{2}\chi^2\right] \tag{5}$$

Neste caso, para que a função f seja a mais adequada para nossas medidas, ou seja, para que P seja máximo, χ^2 deve ser mínimo.

O método dos mínimos quadrados consiste em ajustar os parâmetros $a_1,\ a_2,\ ...\ a_n$ de tal forma que χ^2 seja mínimo, ou seja, procuramos resolver o sistema abaixo:

$$\frac{\partial \chi^2}{\partial a_1} = 0 \qquad \frac{\partial \chi^2}{\partial a_2} = 0 \quad ... \quad \frac{\partial \chi^2}{\partial a_n} = 0 \tag{6}$$

Ajuste de uma função linear: Regressão Linear

Supondo um conjunto de dados e que a função que descreve o nosso sistema seja linear.

$$f(x_i) = ax_i + b \tag{7}$$

A sua representação gráfica típica seria:

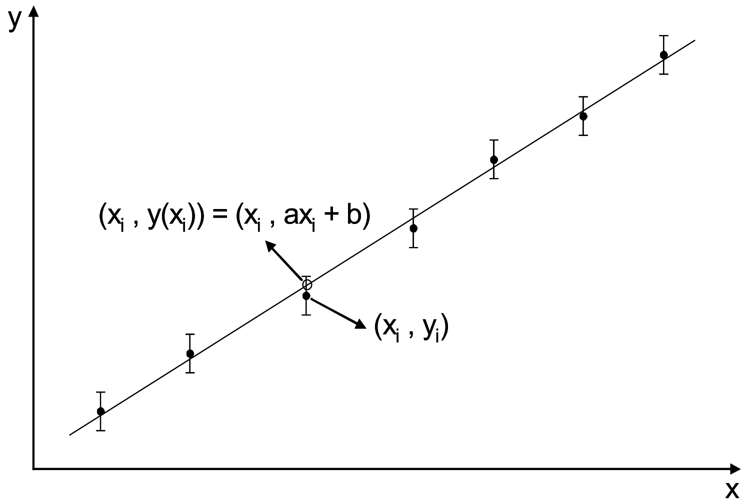

Figura 1: Gráfico obtido com dados experimentais no caso particular em que o ajuste é linear.

Definindo $w_i = 1/\sigma_i^2$, podemos escrever χ^2 como:

$$\chi^2 = \sum_{i=1}^{n} w_i (y_i - ax_i - b)^2 \tag{8}$$

Aplicando o método dos mínimos quadrados para obter os parâmetros a e b:

$$\frac{\partial \chi^2}{\partial a} = 2 \sum_{i=1}^{n} w_i (y_i - ax_i - b)(-x_i) = 0 \tag{9}$$

$$\frac{\partial \chi^2}{\partial b} = 2 \sum_{i=1}^{n} w_i (y_i - ax_i - b)(-1) = 0 \tag{10}$$

Obtemos então um sistema de duas equações e duas incógnitas. Para simplificar a escrita vamos omitir os índices nas somatórias.

$$\left(\sum wx^2 \right) a \ + \ \left(\sum wx \right) b \ = \ \left(\sum wyx \right) \tag{11}$$

$$\left(\sum wx \right) a \ + \ \left(\sum w \right) b \ = \ \left(\sum wy \right) \tag{12}$$

Resolvendo o sistema, os valores de a e b são:

$$a = \frac{\left(\sum w \right) \left(\sum wyx \right) \ - \ \left(\sum wy \right) \left(\sum wx \right)}{\Delta} \tag{13}$$

$$b = \frac{\left(\sum wy \right) \left(\sum wx^2 \right) \ - \ \left(\sum wyx \right) \left(\sum wx \right)}{\Delta} \tag{14}$$

E os erros associados:

$$\sigma_a^2 = \frac{\left(\sum w \right)}{\Delta} \qquad\qquad \sigma_b^2 = \frac{\left(\sum wx^2 \right)}{\Delta} \tag{15}$$

onde

$$\Delta = \left(\sum w \right) \left(\sum wx^2 \right) \ - \ \left(\sum wx \right)^2 \tag{16}$$

As equações (13), (14), (15) e (16) são gerais e valem para o caso onde cada σ_i seja diferente dos outros. No caso de termos $\sigma_i = constante = \sigma$ (ou seja o mesmo valor para todo i) as expressões de a, b, σ_a^2 e σ_b^2 podem ser simplificadas:

$$a = \frac{N \left(\sum yx \right) \ - \left(\sum x \right) \left(\sum y \right)}{\Delta} \tag{17}$$

$$b = \frac{\left(\sum y \right) \left(\sum x^2 \right) \ - \ \left(\sum yx \right) \left(\sum x \right)}{\Delta} \tag{18}$$

$$\sigma_a^2 = \frac{N}{\Delta} \, \sigma^2 \qquad\qquad \sigma_b^2 = \frac{\left(\sum x^2 \right)}{\Delta} \, \sigma^2 \tag{19}$$

$$\Delta = N \left(\sum x^2 \right) \ - \ \left(\sum x \right)^2 \tag{20}$$

Estas equações são exatas e em princípio são as que usam os programas comerciais. Porém, sempre é recomendável verificar que as equações sejam as dadas nesta apostila, especialmente quando temos um conjunto de dados onde os erros são diferentes em cada ponto.

Referência Bibliográfica: José Henrique Vuolo, *Fundamentos da Teoria de Erros* (Editora Edgard Blücher Ltda, São Paulo, 1992).