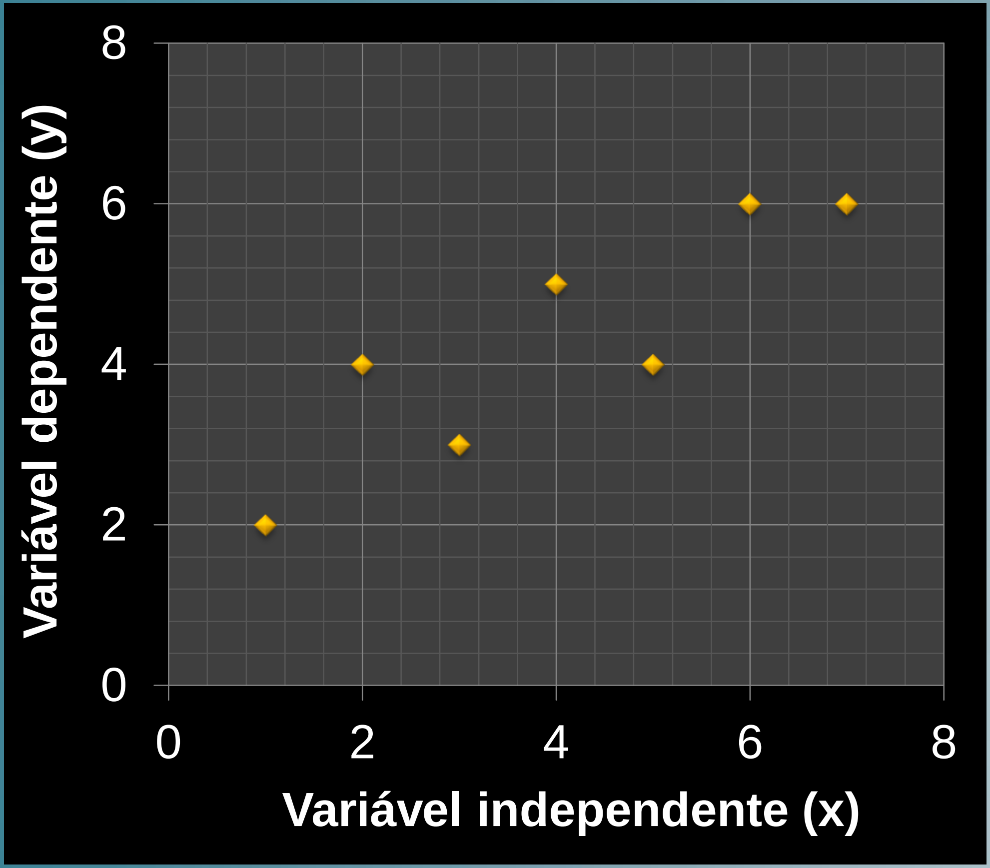
Método dos Mínimos Quadrados

Física Experimental I

Bacharelado

Prof. Henrique A. M. Faria

Exemplo de abertura



Construiu-se um gráfico de dispersão de pontos.

Qual a curva que melhor se ajusta aos pontos experimentais?

Método dos Mínimos Quadrados (MMQ)

Introdução

Na prática anterior aprendemos:

- A construção de gráficos na escala linear (r);
- A linearizarização de uma curva não linear.

Introdução

Na prática anterior aprendemos:

- A construção de gráficos na escala linear (r);
- A linearizarização de uma curva não linear.

Na aula de hoje aprenderemos:

- Construir a equação da reta de melhor ajuste aos dados experimentais.

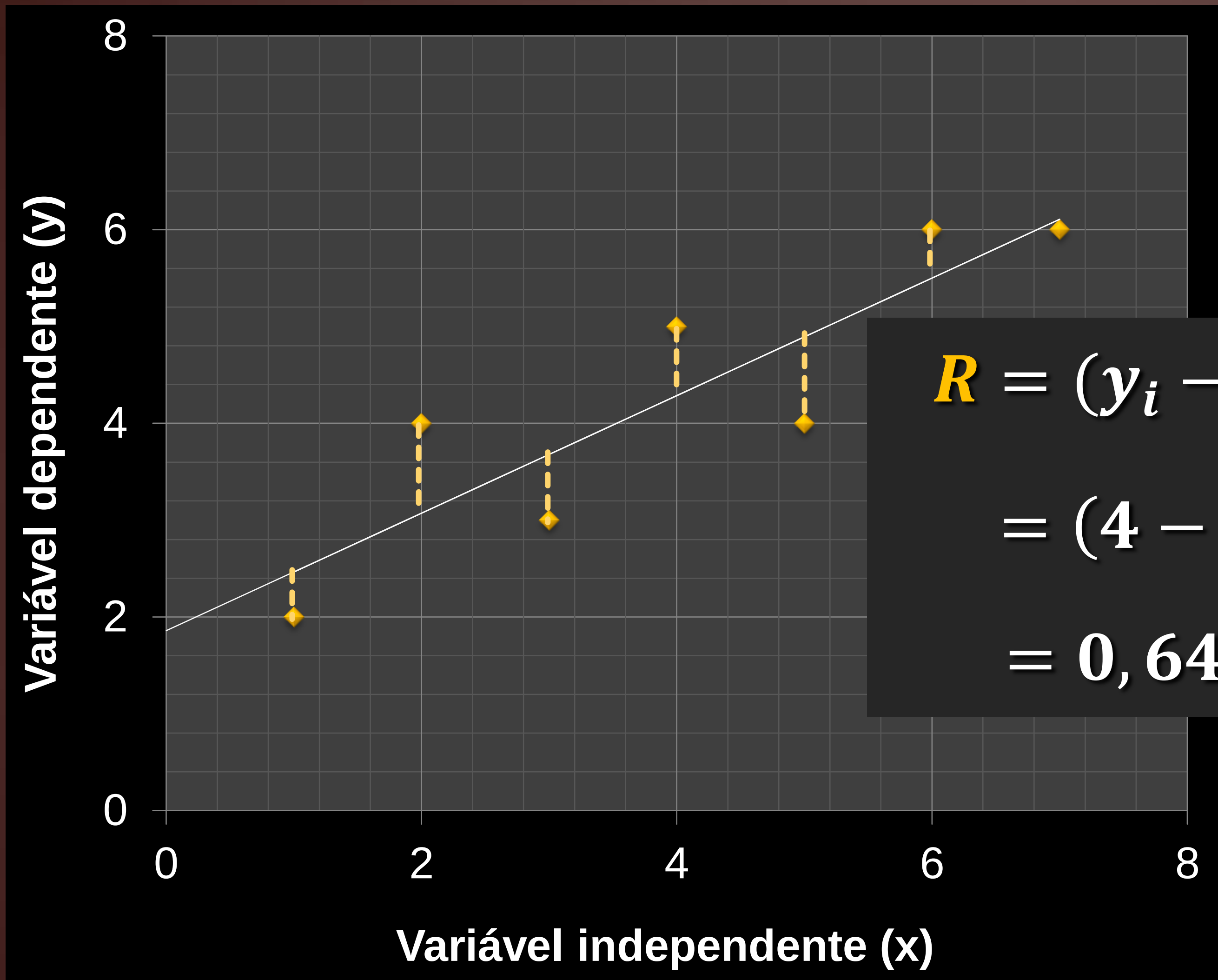
O método dos mínimos quadrados (MMQ)

- O quadrado da soma dos desvios entre a curva de ajuste e os dados será a menor possível;
- Pode ser usado para qualquer tipo de curva;
- Quando a curva de ajuste é uma reta recebe o nome de regressão linear;

Resíduos e mínimos quadrados

- A reta de regressão é a reta que melhor se ajusta aos dados;
- A distância vertical entre os pontos originais e a reta de regressão são chamados resíduos;
- O resíduo é também chamado de erro de predição (R)

Resíduo (RQ)



$$R = (y_i - f(x_i))^2$$

$$= (4 - 4,8\,)^2$$

$$= 0,64$$

- Propriedade dos mínimos quadrados:

  - A soma dos quadros dos resíduos deverá ser a menor possível.

$$SRQ = \sum_{i=1}^{n} (y_i - f(x_i))^2 = mínima$$

As equações da reta de regressão pelo MMQ já incluem essa propriedade;

Desenvolvimento do MMQ

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

Desenvolvimento do MMQ

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

$$SRQ = \sum_{i=1}^{n} \left[{y_i}^2 - 2y_i f(x_i) + f(x_i)^2 \right]$$

Desenvolvimento do MMQ

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

$$SRQ = \sum_{i=1}^{n} \left[y_i{}^2 - 2y_i f(x_i) + f(x_i)^2 \right]$$

- Aplicaremos para comportamento linear:

$$f(x_i) = ax_i + b$$

Desenvolvimento do MMQ

$$SRQ = \sum_{i=1}^{n} {y_i}^2 - 2y_i(ax_i + b\ ) + (ax_i + b\ )^2$$

$$SRQ = \sum_{i=1}^{n} {y_i}^2 - 2y_i a x_i - 2y_i b + a^2 {x_i}^2 + 2ax_i b + b^2$$

O que fazer para encontrar o mínimo de *SRQ*?

Desenvolvimento do MMQ

Se considerarmos que *SRQ* = *SQR*(a, b) é uma função de duas variáveis em a e b:

$$\boldsymbol{SRQ = \sum_{i=1}^{n}\left[y_i{}^2 - 2y_i a x_i - 2y_i b + a^2 x_i{}^2 + 2abx_i + b^2\right]}$$

Desenvolvimento do MMQ

Se considerarmos que *SRQ* = *SQR*(a, b) é uma função de duas variáveis em a e b:

$$SRQ = \sum_{i=1}^{n} \left[{y_i}^2 - 2y_i a x_i - 2y_i b + a^2 {x_i}^2 + 2abx_i + b^2 \right]$$

Do cálculo diferencial, um ponto de mínimo ou de máximo ocorre quando a derivada é nula!

Desenvolvimento do MMQ

Ponto crítico de *SRQ* = *SQR*(a, b):

$$\frac{\partial SRQ}{\partial a} = 0 \qquad e \qquad \frac{\partial SRQ}{\partial b} = 0$$

Desenvolvimento do MMQ

Pontos crítico de *SRQ* = *SQR*(a, b):

$$\frac{\partial SRQ}{\partial a} = \sum_{i=1}^{n} \left[-2y_i x_i + 2a{x_i}^2 + 2bx_i \right] = 0$$

$$\frac{\partial SRQ}{\partial b} = \sum_{i=1}^{n} \left[-2y_i + 2ax_i + 2b \right] = 0$$

Desenvolvimento do MMQ

Realizando operações algébricas:

$$\boldsymbol{a} =$$

$$\boldsymbol{b} =$$

Desenvolvimento do MMQ

A inclinação ($\boldsymbol{b}$) e o intercepto ($\boldsymbol{a}$) podem ser encontrados pelas seguintes expressões :

$$\boldsymbol{a} = \frac{n\sum_{i=1}^{n} y_i x_i - \sum_{i=1}^{n} y_i \sum_{i=1}^{n} x_i}{n\sum_{i=1}^{n} {x_i}^2 - \left(\sum_{i=1}^{n} x_i\right)^2}$$

$$\boldsymbol{b} = \frac{\sum_{i=1}^{n} y_i \sum_{i=1}^{n} {x_i}^2 - \sum_{i=1}^{n} y_i x_i \sum_{i=1}^{n} x_i}{n\sum_{i=1}^{n} {x_i}^2 - \left(\sum_{i=1}^{n} x_i\right)^2}$$

- Suprimindo-se os índices:

$$a = \frac{n(\sum xy) - (\sum x)(\sum y)}{n(\sum x^2) - (\sum x)^2}$$

$$b = \frac{(\sum y)(\sum x^2) - (\sum x)(\sum xy)}{n(\sum x^2) - (\sum x)^2}$$

$\boldsymbol{n}$: número de pares amostrais.

Desenvolvimento do MMQ

Coeficiente de determinação: $\boldsymbol{r^2}$

$$r = \frac{n\left(\sum xy\right) - \left(\sum x\right)\left(\sum y\right)}{\sqrt{n\left(\sum x^2\right) - \left(\sum x\right)^2}\sqrt{n\left(\sum y^2\right) - \left(\sum y\right)^2}}$$

O $\boldsymbol{r^2}$ Pode variar de 0 a 1 e indica o quanto o modelo se ajusta aos valores observados!

Quanto mais próximo de 1 o $\boldsymbol{r^2}$ melhor o ajuste.

Requisitos da regressão linear

- As variáveis emparelhados (x, y) compõem uma amostra aleatória de dados quantitativos;
- O diagrama de dispersão mostra que o padrão dos pontos se aproxima de uma relação linear;
- Valores atípicos devem ser removidos do conjunto de dados.

Passos para análise de regressão

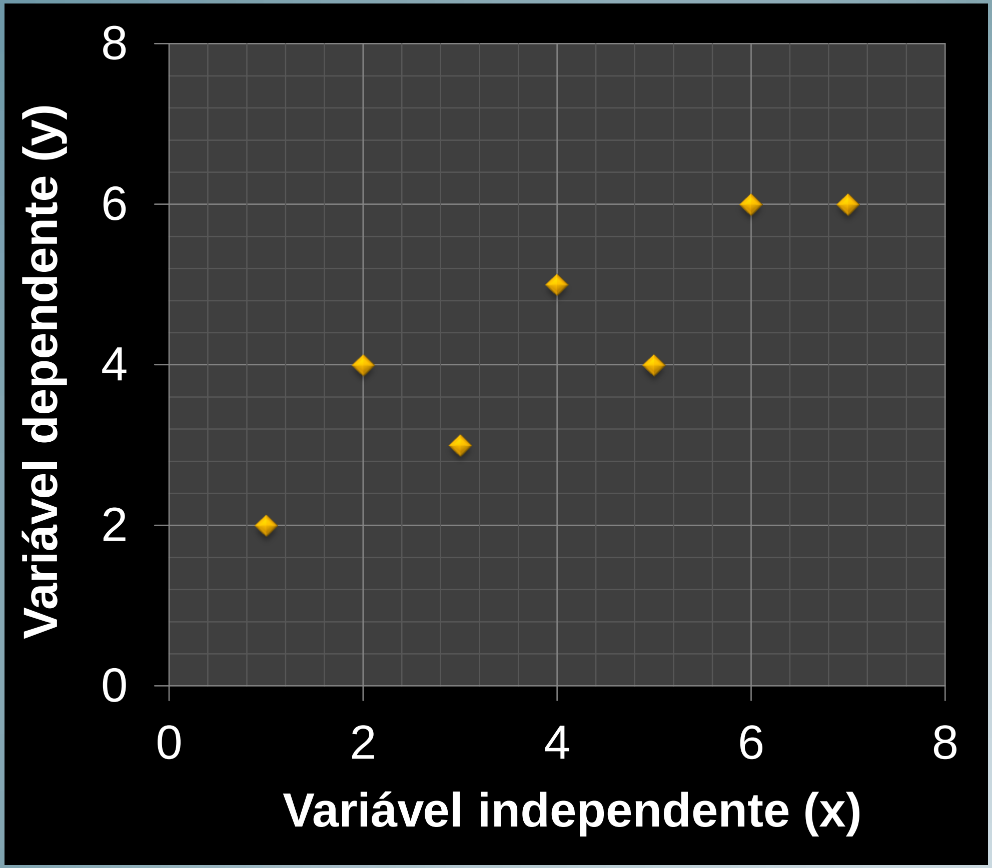
1. Construir gráfico de dispersão amostral;
2. Verificar requisitos para aplicar a regressão;
3. Se o comportamento não for linear, linearizar o gráfico;
4. Calcular o somatório dos parâmetros (x, y, x^2, y^2, xy) e construir uma tabela;

Passos para análise de regressão

5. Calcular o coeficiente de determinação e verificar se está próximo da unidade;
6. Calcular equação de regressão, ou seja, coeficientes angular e linear;
7. Construir a reta de regressão no gráfico de dispersão linearizado;

Exemplo inicial: resolução

x	f(x)
1	2
2	4
3	3
4	5
5	4
6	6
7	6



- Tabelas com cálculos intermediários:

x	y	x^2	y^2	xy
1	2	1	4	2
2	4	4	16	8
3	3	9	9	9
4	5	16	25	20
5	4	25	16	20
6	6	36	36	36
7	6	49	36	42
$\sum x=28$	$\sum y=30$	$\sum x^2=140$	$\sum y^2=142$	$\sum xy=137$
$(\sum x)^2=784$	$(\sum y)^2=900$			

- Coeficiente de correlação linear (r):

$$r = \frac{7(137) - (28)(30)}{\sqrt{7(140) - 784}\,\sqrt{7(142) - 900}}$$

$$r = 0{,}877$$

$$r^2 = 0{,}769$$

(coeficiente considerado mediano)

- A variação da correlação ou coeficiente de determinação(r^2) calculado:

$$r^2 = (0{,}877)^2 = 0{,}769 \cong 0{,}77$$

- Cerca de 77% da variação na variável x podem ser explicados pela relação linear com variável y;

- Verificamos que o conjunto de dados atende aos requisitos para uma regressão linear.

  \- amostra aleatória, com dispersão linear e sem pontos atípicos.

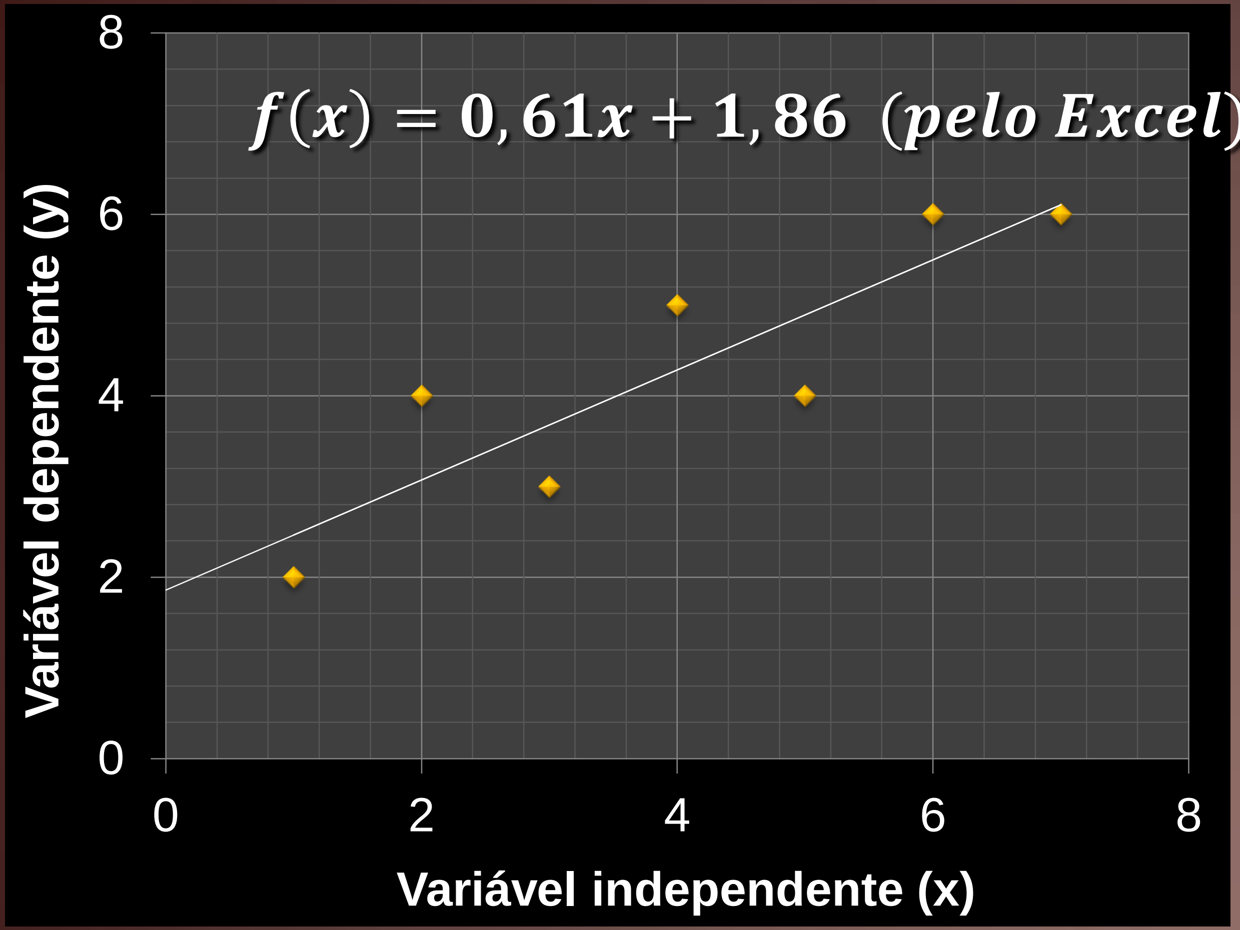
- Coeficientes da reta de regressão.

$$a = \frac{n(\sum xy) - (\sum x)(\sum y)}{n(\sum x^2) - (\sum x)^2} = 0{,}607$$

$$b = \frac{(\sum y)(\sum x^2) - (\sum x)(\sum xy)}{n(\sum x^2) - (\sum x)^2} = 1{,}86$$

$$\boldsymbol{Y = 1,86 + 0,61x}$$

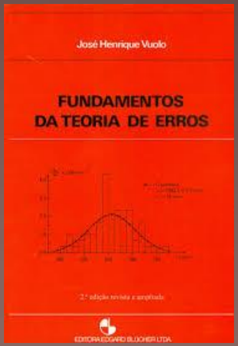
- Construímos o reta de regressão:



$$Y = 1,86 + 0,61x \quad \textbf{(calculada pelo MMQ)}$$

Bibliografia

1. VUOLO, J. H.; Fundamentos da Teoria de Erros. 2nd ed., São Paulo: Edgar Blücher Ltda., 1996.



Contatos e material de apoio

profhenriquefaria.com

henrique.faria@unesp.br