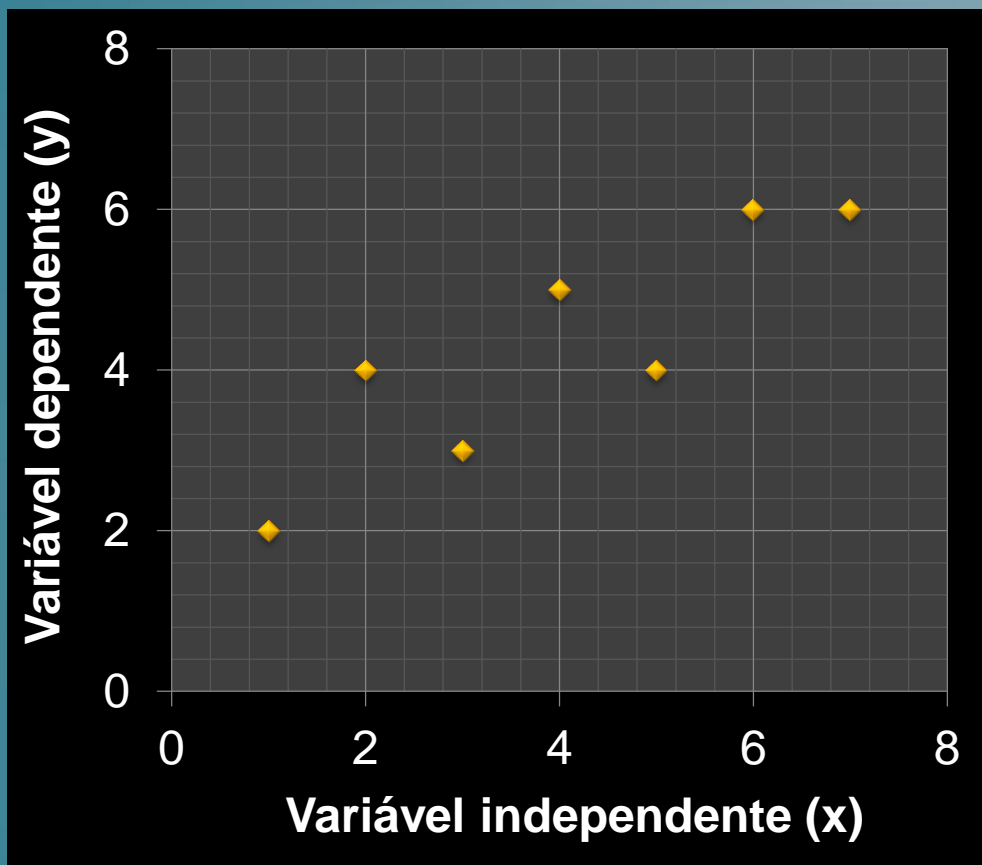


# Método dos Mínimos Quadrados

Física Experimental I  
Bacharelado em Química

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 Linearizar de uma curva não linear.

# Introdução

## Na prática anterior aprendemos:

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

## Na aula de hoje aprenderemos:

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

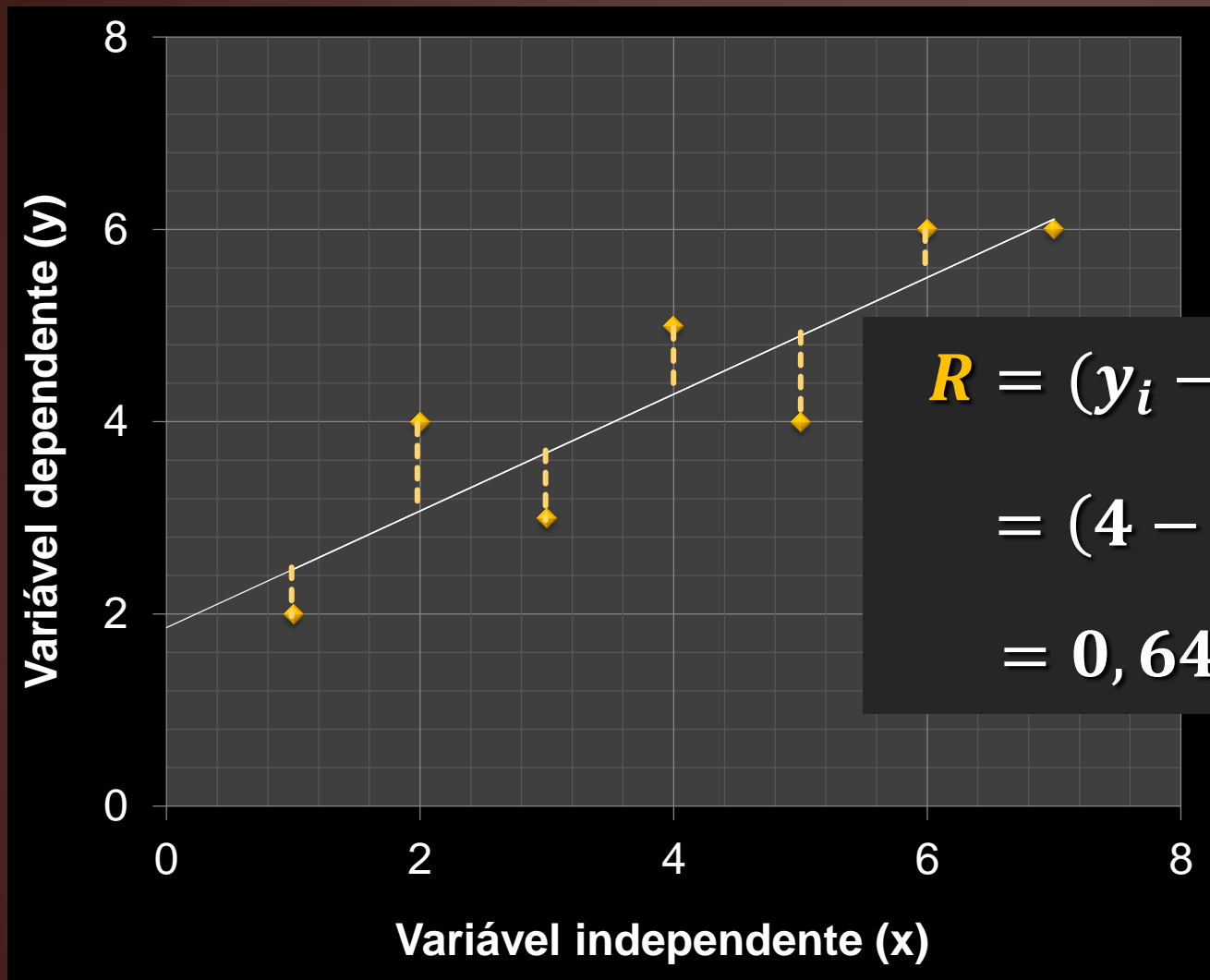
# O método dos mínimos quadrados (MMQ)

- 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)



$$\begin{aligned} R &= (y_i - f(x_i))^2 \\ &= (4 - 4,8)^2 \\ &= 0,64 \end{aligned}$$



- Propriedade dos mínimos quadrados:
  - A soma dos quadros dos resíduos deverá ser a menor possível.

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

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

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

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

# Desenvolvimento do MMQ

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

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

- Aplicaremos para comportamento linear:

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

# Desenvolvimento do MMQ

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

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

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  $b$ :

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

# Desenvolvimento do MMQ

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

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

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

# Desenvolvimento do MMQ

Ponto crítico de  $SRQ = SQR(a, b)$ :

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



# Desenvolvimento do MMQ

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

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

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

# Desenvolvimento do MMQ

Realizando operações algébricas:

$$a =$$

$$b =$$

# Desenvolvimento do MMQ

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

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

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

- Suprimindo-se os índices:

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

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

***n***: número de pares amostrais.

# Desenvolvimento do MMQ

Coeficiente de determinação:  $r^2$

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

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

Quanto mais próximo de 1 o  $r^2$  melhor o ajuste.

# Requisitos da regressão linear

- As variáveis emparelhadas  $(x, y)$  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;

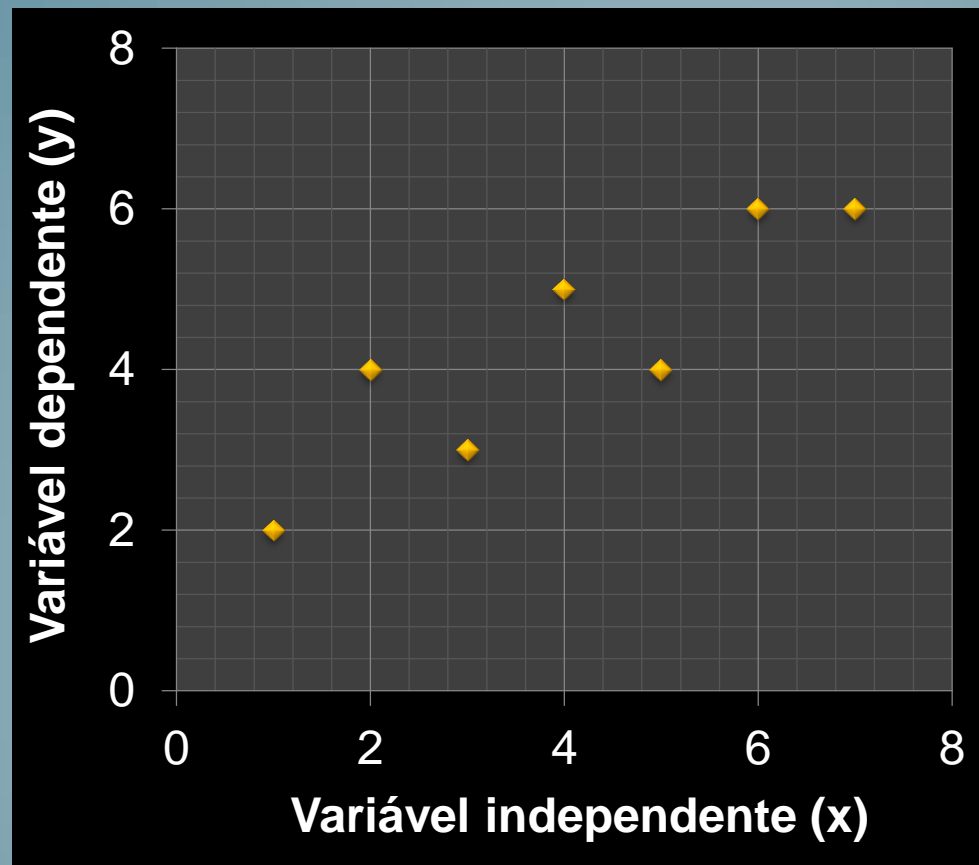
# Passos para análise de regressão

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.**

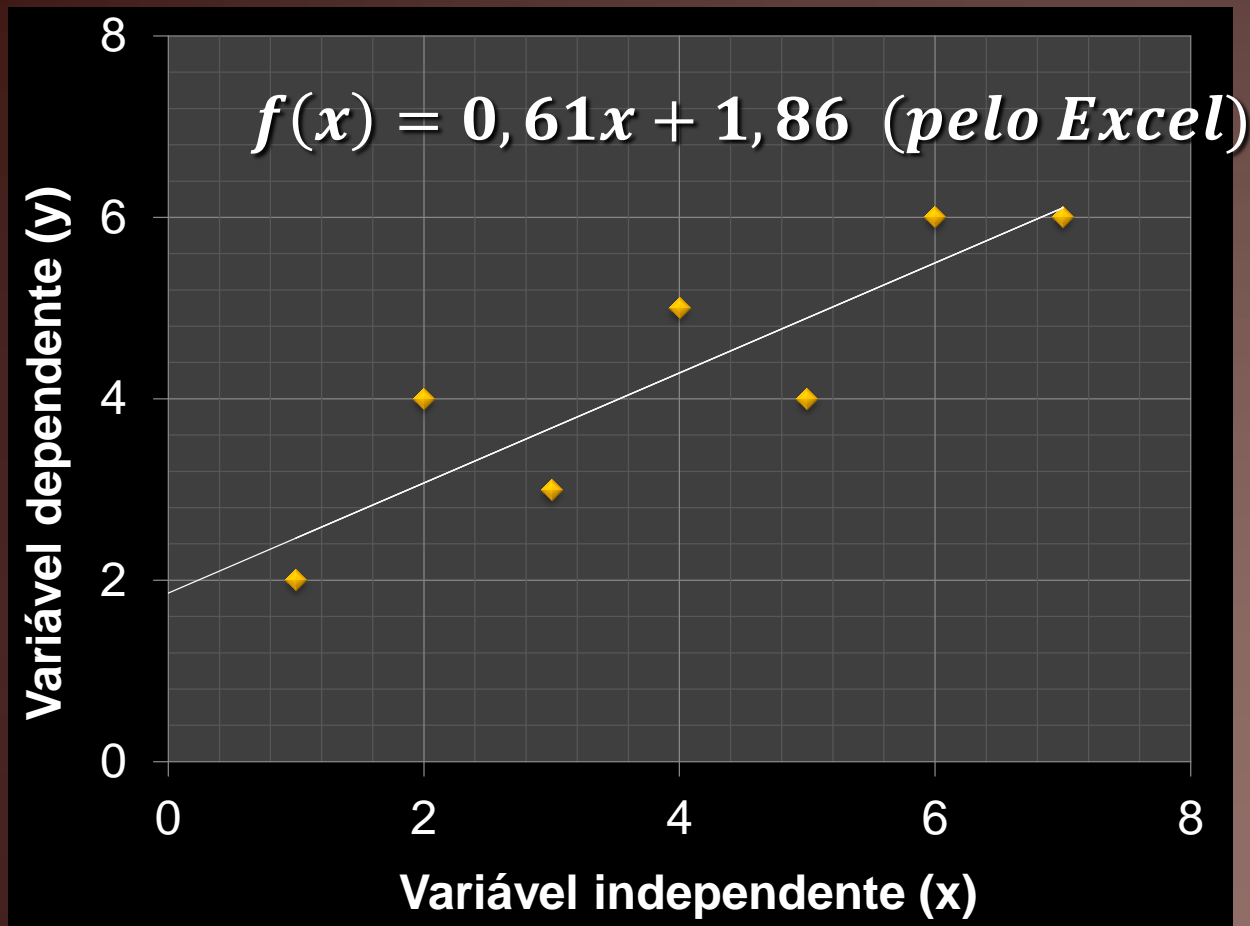
- Coeficientes da reta de regressão.

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

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

$$Y = 1,86 + 0,61x$$

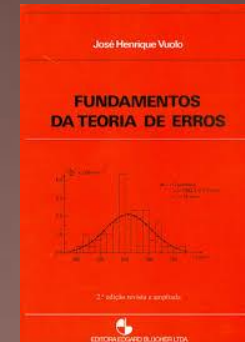
- Construimos o reta de regressão:



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

# Bibliografia

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



2. INSTITUTO DE QUÍMICA. Física Experimental I. Araraquara: Unesp, 2019.



# Contatos e material de apoio

[profhenriquefaria.com](http://profhenriquefaria.com)

henrique.faria@unesp.br