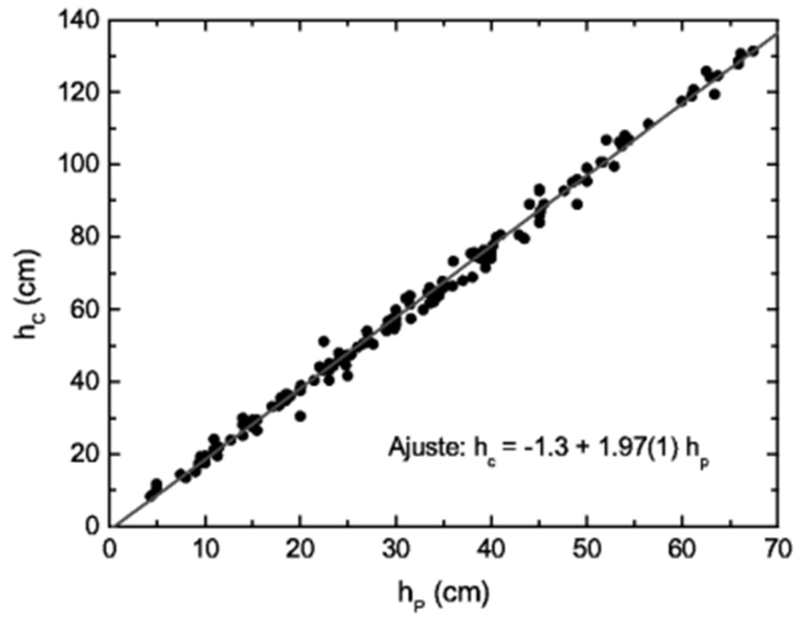
Método dos Mínimos Quadrados (MMQ)

Por que fazemos ajustes?

- Relação funcional que melhor descreve os dados experimentais dentro de um limite de validade.
- Representa o "comportamento médio" dos dados.



Ajuste visual vs. MMQ

- Depende de quem analisa
- É difícil de ponderar dados com incertezas diferentes
- Não é otimizado
- Bom para estimativas

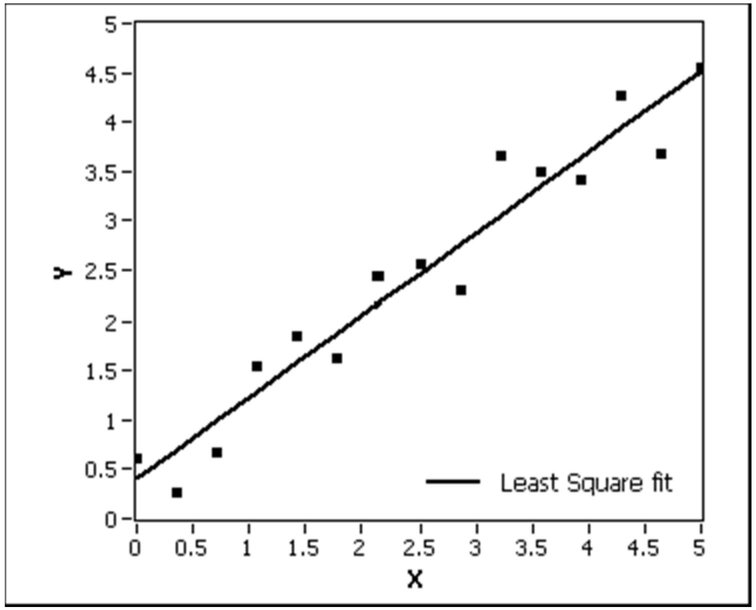
- Independe de quem analisa
- A incerteza dos dados é ponderada
- É o ajuste que mais se aproxima dos dados
- Mais cálculos (PC)

MMQ e os resíduos

- Qual é o ajuste que mais se aproxima dos dados?
  - Menor distância entre os pontos exp. e os dados

$$a_i = y_i - f(x_i)$$

  - Mas e a incerteza?



$$P_i = C_i \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{y_i - \bar{y}}{s_i}\right)^2\right]$$

$$P = P_1 P_2 \bullet\bullet\bullet P_n = C \exp\left[-\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{n}\left(\frac{y_i - \bar{y}}{s_i}\right)^2\right] = Ce^{-\frac{1}{2}\chi^2}$$

$$r_i = \frac{y_i - f(x_i)}{s_i}$$

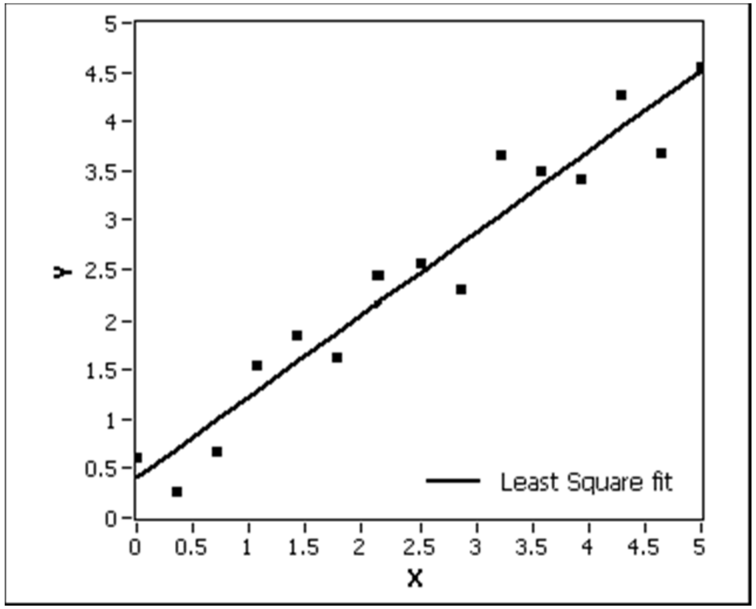
MMQ e os resíduos

- Vários pontos, como fazer?

$$\sum_i r_i = \sum_i \frac{y_i - f(x_i)}{s_i} = 0$$

?

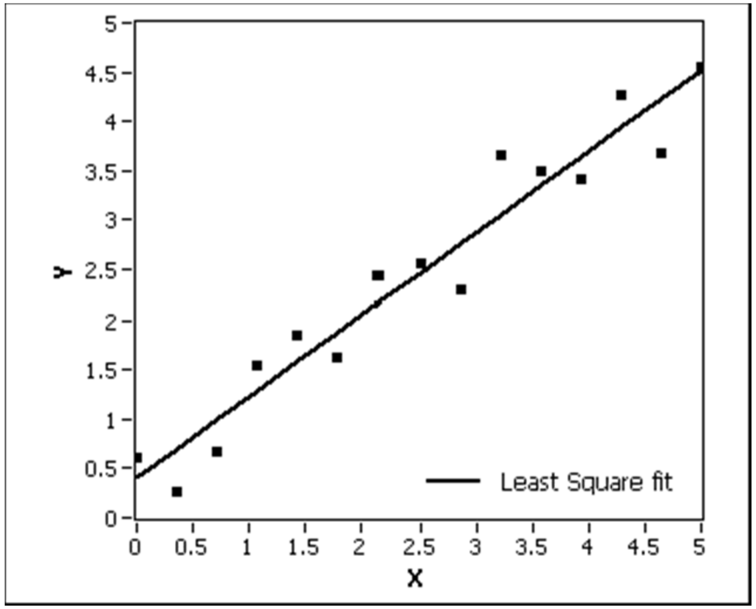
- E se tiver com pontos acima e abaixo da reta?



$$\sum_i (r_i)^2 = \sum_i \left(\frac{y_i - f(x_i)}{s_i} \right)^2 = \chi^2$$

MMQ e os resíduos

- Qual então é a melhor reta?
  - Lembrando o que foi discutido quanto as distâncias!!

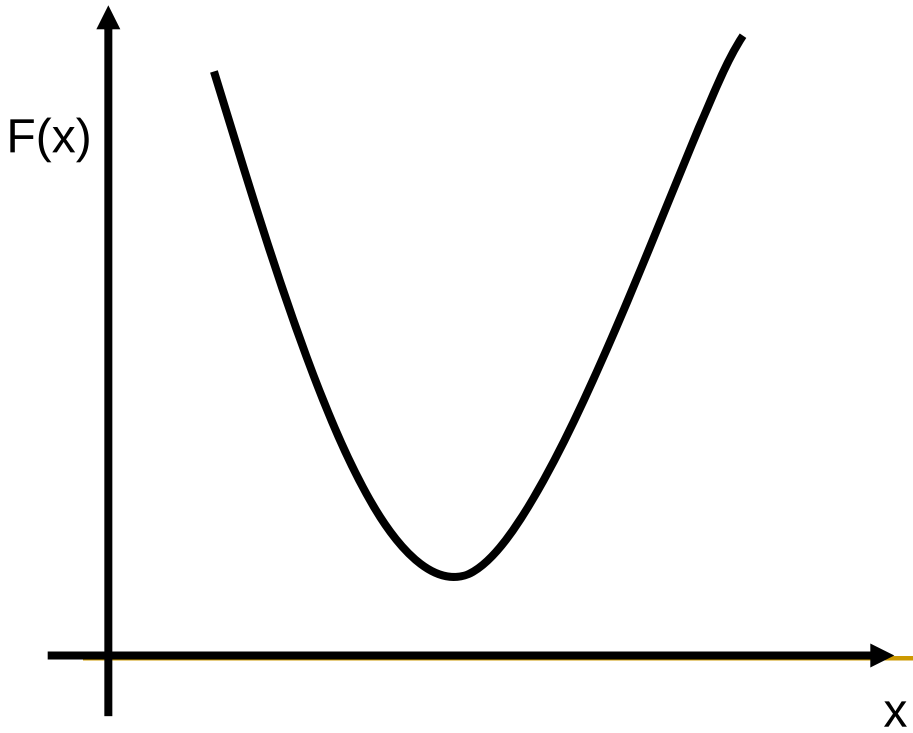


$$\chi^2 = \sum_i \left(\frac{y_i - f(x_i)}{s_i} \right)^2 \longrightarrow \text{Mínimo}$$

Como minimizar?

- Chi^2 é uma função!!!
- Como achar o mínimo de uma função?

$$\chi^2 = \sum_i \left(\frac{y_i - f(x_i)}{s_i} \right)^2$$



Caso 1: Ajuste de uma constante

$$\chi^2 = \sum_i \left(\frac{y_i - f(x_i)}{s_i} \right)^2 \qquad f(x_i) = a$$

- Como achar o mínimo de uma função?
  - Quais os parâmetros a?

$$\chi^2 = \sum_i \left[\frac{y_i - a}{s_i} \right]^2$$

Minimizando

$$\frac{\partial \chi^2}{\partial a} = \sum_i 2.\left[\frac{y_i - a}{s_i} \right]^{(2-1)} .\left(\frac{-1}{s_i} \right) = 0$$

Caso 1: Ajuste de uma constante

$$\frac{\partial \chi^2}{\partial a} = \sum_{i=1}^{N} 2.\left[\frac{y_i - a}{s_i}\right].\left(\frac{-1}{s_i}\right) = 0$$

$$\sum_{i}\left[\frac{y_i - a}{s_i}\right].\frac{1}{s_i} = 0$$

$$\sum_{i=1}^{N}\left[\frac{y_i}{s_i}\right].\frac{1}{s_i} - \sum\left[\frac{a}{s_i}\right].\frac{1}{s_i} = 0$$

$$\sum_{i=1}^{N}\left[\frac{y_i}{s_i{}^2}\right] = a.\sum_{i=1}^{N}\left[\frac{1}{s_i{}^2}\right]$$

$$\boxed{a = \frac{\sum_{i=1}^{N}\left[\frac{y_i}{s_i{}^2}\right]}{\sum_{i=1}^{N}\left[\frac{1}{s_i{}^2}\right]}}$$

É a média ponderada!!!

Caso 2: Ajuste de uma Reta

- Nosso Caso!

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

$$\chi^2 = \sum_i \left(\frac{y_i - f(x_i)}{s_i} \right)^2$$

$$\downarrow$$

$$\chi^2 = \sum_i \left(\frac{y_i - (ax_i + b)}{s_i} \right)^2$$

- Como achar o mínimo de uma função?
  - Quais os parâmetros a e b que minimizam?

Caso 2: Ajuste de uma Reta

Minimizando a ...

$$\frac{\partial \chi^2}{\partial a} = \sum_i 2.\left[\frac{y_i - (a.x_i + b)}{s_i}\right]^{(2-1)} . \left(\frac{-x_i}{s_i}\right) = 0$$

$$\sum_i \left[\frac{y_i - (a.x_i + b)}{s_i}\right] . \left(\frac{x_i}{s_i}\right) = 0$$

$$\boxed{\sum_{i=1}^{N} \frac{y_i x_i}{s_i^2} = a \sum_{i=1}^{N} \frac{x_i^2}{s_i^2} + b \sum_{i=1}^{N} \frac{x_i}{s_i^2}}$$

Caso 2: Ajuste de uma Reta

Minimizando b...

$$\frac{\partial \chi^2}{\partial b} = \sum_i 2.\left[\frac{y_i - (a.x_i + b)}{s_i}\right]^{(2-1)} .\left(\frac{-1}{s_i}\right)$$

$$\boxed{\sum_{i=1}^{N} \frac{y_i}{s_i^2} = a\sum_{i=1}^{N}\frac{x_i}{s_i^2} + b\sum_{i=1}^{N}\frac{1}{s_i^2}}$$

Definindo: $$S_{qqcoisa} = \sum_{i=1}^{N} \frac{qqcoisa_i}{\sigma_i^{\,2}}$$

$$\boxed{\sum_{i=1}^{N} \frac{y_i x_i}{s_i^{\,2}} = a \sum_{i=1}^{N} \frac{x_i^{\,2}}{s_i^{\,2}} + b \sum_{i=1}^{N} \frac{x_i}{s_i^{\,2}}}$$

$$S_{yx} = a \,.\, S_{x^2} + b \,.\, S_x$$

$$\boxed{\sum_{i=1}^{N} \frac{y_i}{s_i^{\,2}} = a \sum_{i=1}^{N} \frac{x_i}{s_i^{\,2}} + b \sum_{i=1}^{N} \frac{1}{s_i^{\,2}}}$$

$$S_y = a \,.\, S_x + b \,.\, S_1$$

Sistema de duas equações e duas incógnitas:

$$\begin{cases} S_y = a \,.\, S_x + b \,.\, S_1 \\ S_{yx} = a \,.\, S_{x^2} + b \,.\, S_x \end{cases}$$

$$a = \frac{S_{yx}S_1 - S_y S_x}{\Delta} \qquad b = \frac{S_y S_{x^2} - S_{yx} S_x}{\Delta}$$

Onde: $$\Delta = S_{x^2} . S_1 - (S_x)^2$$

Propagando as incertezas

$$s_a = \sqrt{\frac{S_1}{\Delta}} \qquad s_b = \sqrt{\frac{S_{x^2}}{\Delta}}$$

Para Mais detalhes vide:
Tratamento Estatístico de Dados em física Experimental, O. Helene, V. Vanin

$$f(x) = ax + b$$

Melhor reta que descreve o conjunto de pontos experimentais, ou seja foi ajustada uma reta aos pontos experimentais