Aula Complementar

AJUSTE LINEAR

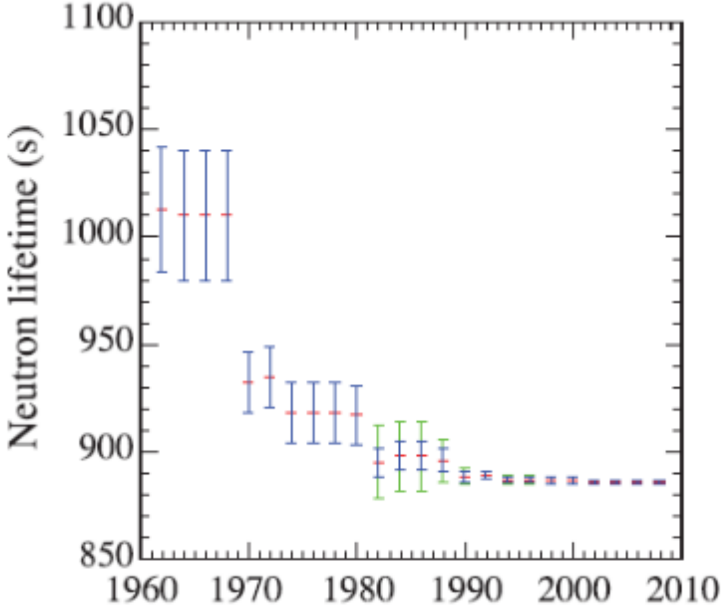
Combinação de resultados de experiências diferentes

Há experiências que são repetidas em diversos contextos experimentais.

Os erros estatísticos (e sistemáticos) são diferentes.

Os valores com erros maiores deverão ser menos significativas.

Como combinar os diferentes resultados?



Particle Data Group

Peso de cada experiência: $\omega_i = \dfrac{1}{\sigma_1^2}$

Valor médio pesado: $\mu = \dfrac{\sum \bar{x}_i/\sigma_i^2}{\sum 1/\sigma_i^2}$

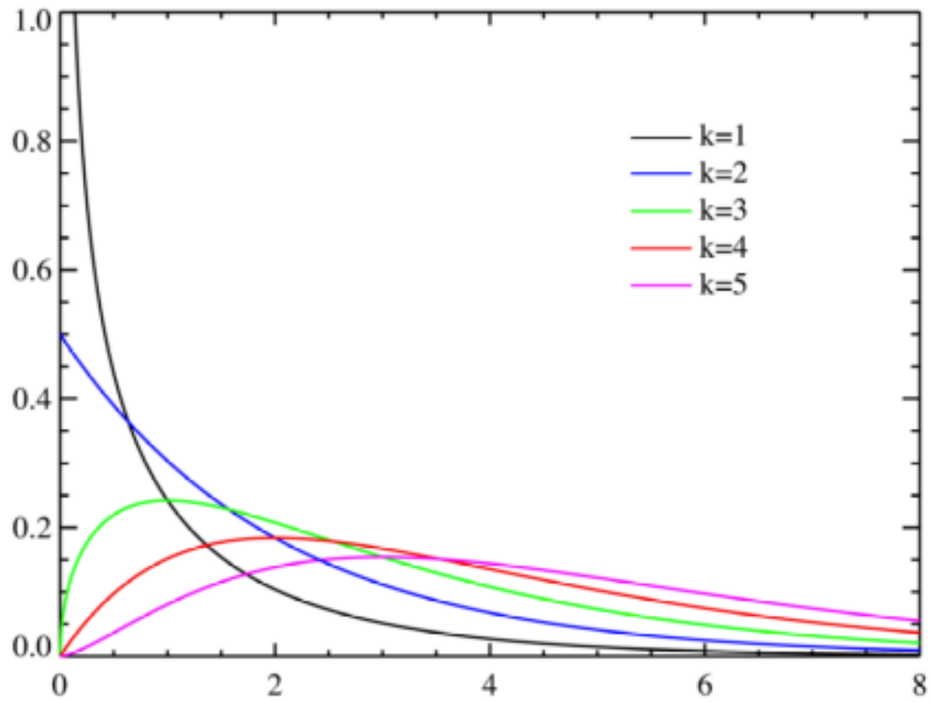
Variância pesada: $\sigma^2 = \dfrac{1}{\sum 1/\sigma_i^2}$

Ajustes de funções

Distribuição de χ^2

Se X_i são k variáveis normalmente distribuídas com média 0 e variância 1 então a variável

$$Q = \sum_{i=1}^{k} X_i^2$$



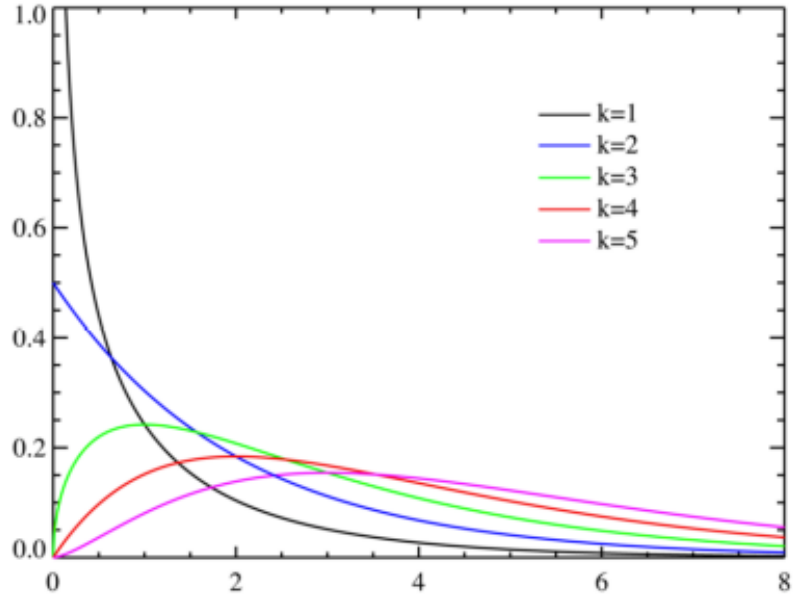
encontra-se distribuída de acordo o χ^2

com k graus de liberdade

Ajustes de funções

Distribuição de χ^2

A função densidade de probabilidade é dada por



$$\chi_k^2(x) = \frac{1}{2^{k/2}\Gamma(k/2)} x^{(k/2)-1} e^{-x/2} \qquad x>0$$

$$\Gamma(z) = \int_0^{\infty} t^{z-1} e^{-t} dt$$

é a função gama (generalização da função factorial)

valor médio μ =k

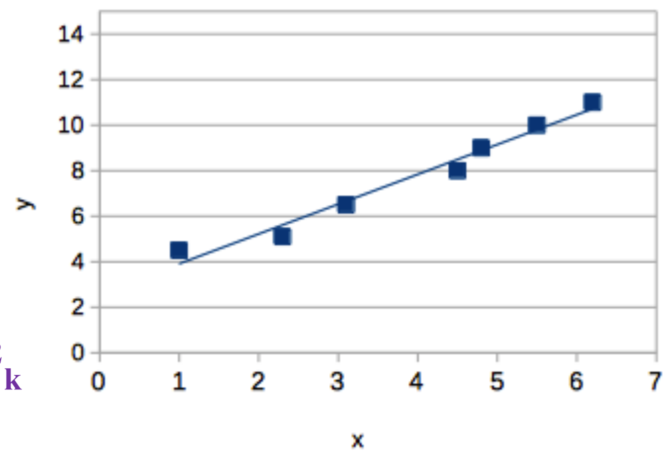
variância σ^2 =2k

Consideremos que temos a grandeza física y dependente da grandeza x e que realizamos n medidas (x_1,y_1), (x_2,y_2), ... (x_n,y_n), cada uma com um erro (estatístico) s_i.

Vamos supor que queremos testar a seguinte dependência funcional $y=f(x)$, sendo f uma função teórica de ajuste dos dados e que em geral dependerá de m parâmetros cujo valor será determinado a partir do dados

Construímos a função

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



A função Q^2 assim construída tem comportamento assimptótico da função χ^2_k

=> $k=n-m$ é o nº graus de liberdade (gl)

=> $f(x_i)-y_i$ é uma variável aleatória de distribuição normal e valor médio nulo

$$X_i = \frac{f(x_i)- y_i}{\sigma_i}$$ tem distribuição N(0,1)

Número de parâmetros e graus de liberdade

recta => gl = n-2

polinómio => gl = n-(g+1) (g = grau do polinómio)

exponencial => gl = n-2

gaussiana => gl = n-3

Para fazer um ajuste a uma recta são necessários 3 pontos! (com 2 não é um ajuste)

Se não estimarmos valores de parâmetros a partir dos dados então não são retirados esses graus de liberdade.

O ajuste da função f(x) faz-se variando os seus parâmetros livres até conseguirmos atingir o valor mínimo para Q^2.

O processo de minimização pode ser complicado quando temos mais do que um parâmetro livre.

No caso geral a minimização é feita de forma numérica

Um exemplo de minimização analítica: método dos mínimos quadrados

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

f(x) => função a ajustar dependente de m parâmetros q_j (m < n)

$$\frac{\partial \Delta^2}{\partial \theta_j} = 0 \quad j = 1, \ldots, m$$

condição de minimização

no caso de uma recta f depende dos parâmetros m e b => f(x)=mx+b

$$\frac{\partial \Delta^2}{\partial m} = 0 \qquad \frac{\partial \Delta^2}{\partial b} = 0$$

obtendo-se para os parâmetros ajustados

$$m = \frac{n \sum x_i y_i - \sum x_i \sum y_i}{n \sum x_i^2 - (\sum x_i)^2} \qquad b = \frac{\sum x_i^2 \sum y_i - \sum x_i \sum x_i y_i}{n \sum x_i^2 - (\sum x_i)^2}$$

Incertezas dos parâmetros

$$\sigma_m^2 = \frac{n\sigma^2}{n\sum x_i^2 - (\sum x_i)^2}$$

com $$\sigma^2 = \frac{\sum(y_i - mx_i - b)^2}{n-2}$$

$$\sigma_b^2 = \frac{\sigma^2(\sum x_i^2)}{n\sum x_i^2 - (\sum x_i)^2}$$

Qual o efeito de incluir as incertezas experimentais σ_i?

$$S_x = \sum \frac{x_i}{\sigma_i^2} \qquad S_y = \sum \frac{y_i}{\sigma_i^2} \qquad S_{xy} \sum \frac{x_i y_i}{\sigma_i^2}$$

$$S_{xx} = \sum \frac{x_i^2}{\sigma_i^2} \qquad S_{yy} = \sum \frac{y_i^2}{\sigma_i^2} \qquad S_{inv} = \sum 1/\sigma_i^2$$

$$\Delta = S_{inv} S_{xx} - S_x S_x$$

$$m = \frac{S_{inv} S_{xy} - S_x S_y}{\Delta} \qquad b = \frac{S_{xx} S_y - S_x S_{xy}}{\Delta}$$

$$\sigma_m = \sqrt{\frac{S_{inv}}{\Delta}} \qquad \sigma_b = \sqrt{\frac{S_{xx}}{\Delta}}$$

Ajuste com χ^2

O ajuste de uma função a pontos experimentais com erros é efectuado com a minimização do χ^2

$$\frac{\partial \chi^2}{\partial \theta_j} = 0 \qquad j = 1, \ldots, m$$

onde a função f(x) a ajustar dependente dos parâmetros q_j

No caso do ajuste de uma recta obtemos o resultado anterior

Notar que o ajuste de outras funções é equivalente ao ajuste de uma recta:

Exponencial:

$$f(x) = z = \alpha e^{\beta x}$$

$$\ln(z) = \ln(\alpha) + \beta x$$

$$\begin{cases} y_i = \ln(z_i) \\ \ln(\alpha) = b \\ \beta = m \end{cases}$$

Potência

$$f(\chi) = z = \alpha \chi^{\beta}$$

$$\ln(z) = \ln(\alpha) + \beta \ln(\chi)$$

$$\begin{cases} y_i = \ln(z_i) \\ x_i = \ln(\chi_i) \\ \ln(\alpha) = b \\ \beta = m \end{cases}$$

Qualidade do ajuste com χ^2

Define-se o χ^2 reduzido como sendo χ^2/gl

Dado que $m(\chi^2) = gl$ => $m(\chi^2/gl) = 1$

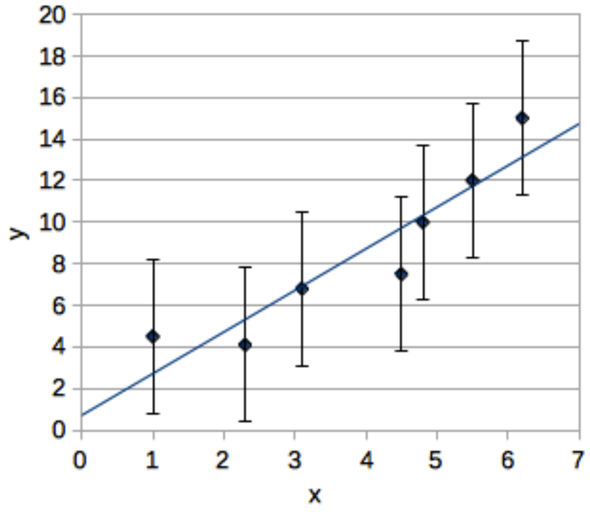
Critério de qualidade do ajuste:

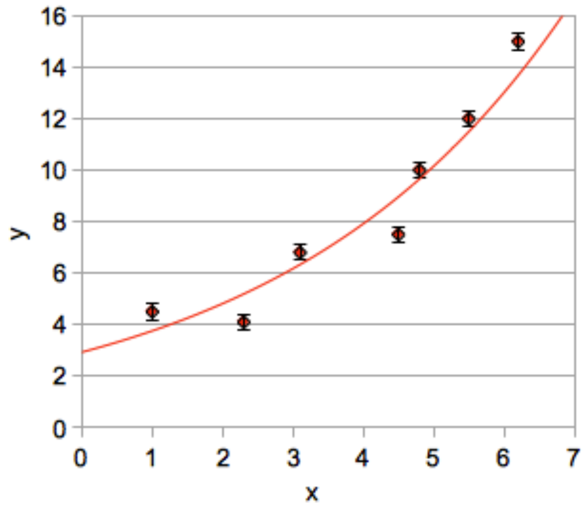
um ajuste é considerado de "bom" quando $\chi^2/gl \sim 1$

Um valor muito grande do χ^2/gl (ie χ^2/gl >> 1) ou muito pequeno (i.e. χ^2/gl << 1)

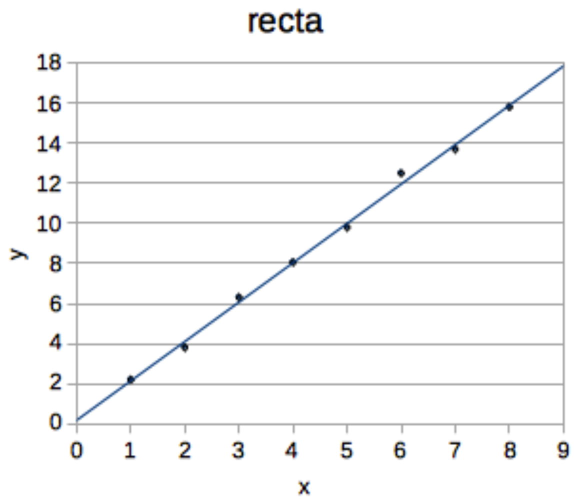
pode também dar indicação quanto comportamento dos erros experimentais

$$\chi^2 \approx \sum_{i=1}^{n} \frac{(f(x_i) - y_i)^2}{\sigma_i^2} \longrightarrow \begin{cases} \chi^2/gl \gg 1 & \text{erros subestimados ou função inadequada} \\ \chi^2/gl \ll 1 & \text{erros sobrestimados ?} \end{cases}$$





Erros muito elevados podem esconder a verdadeira dependência funcional



Se os erros são muito pequenos
um desvio pequeno de um ponto
experimental tem um "peso" elevado no χ^2