Geração de Incertezas de Funções Redutíveis ao Primeiro Grau Ajustadas pelo Método dos Mínimos Quadrados

(Uncertainty generation of fitted functions that can be reduced to a first order representation through the application of

Least Square Method)

Wilton P. Silva, Cleide M. D. P. S. e Silva,
Cleiton D. P. S. e Silva*, e Humberto José Gama da Silva**

**DF/CCT/UFPB 58109-970, Campina Grande, PB, Brasil

**Aluno do Curso de Engenharia Eletrônica (ITA)

***Aluno do Curso de Especialização em Física (DF/CCT/UFPB)

wilton@openline.com.br

Recebido em 14 de junho, 1998

Em um experimento, um sistema físico em geral pode ser estudado modificando-se uma das variáveis que o define, e observando-se a resposta do sistema à modificação. Para um dado estudo em particular, isso pode gerar um conjunto de pontos (x_i, y_i) cuja representação gráfica e argumentos teóricos indicam a função geral $y(x, a_1, a_2, ..., a_n)$ que descreve tal sistema. A determinação dos parâmetros $a_1, a_2, ..., a_n$ é feita de forma que o conjunto de pontos tenha a máxima probabilidade de pertencer a essa função. Em geral, isso é feito através do Método dos Mínimos Quadrados. Entretanto, um valor y(x) obtido através da função ajustada, que será denotado por $y(x)_m$, é apenas o melhor valor e, neste artigo, é proposta a determinação da sua incerteza $\sigma_{y(x)m}$. Fórmulas para a determinação das incertezas são derivadas a partir da flutuação dos pontos experimentais em torno de y(x), para funções redutíveis ao primeiro grau. A aplicação dessas fórmulas a dois conjuntos de dados experimentais mostram resultados satisfatórios: a função passa a ser dada na forma $y(x)=y(x)_m\pm\sigma_{y(x)m}$ ou $y(x)=y(x)_m\pm3\sigma_{y(x)m}$, com uma probabilidade de 68,3% ou 99,7%, caso pudermos associar uma função de distribuição normal às flutuações. A representação gráfica passa a ser dada por 3 linhas, e a largura entre os limites superior e inferior dá uma indicação da precisão experimental. Os limites permitem, também, uma visualização de pontos fora da faixa de largura $6\sigma_{y(x)m}$, o que pode indicar erros grosseiros na medição de tais pontos.

A physical system can be studied carrying out an experiment, in which one of its variables is modified and the resulting output of the system is observed and measured. For a given study, this kind of experiment can generate a set of pair of coordinate points (x_i, y_i) , which can have a graphical representation or be represented by a given function $y(x, a_1, a_2, ..., a_n)$ that is obtained from a curve fit procedure. The determination of the parameters $a_1, a_2, ..., a_n$ is done in such a way that the points (x_i, y_i) have the maximum likelyhood to belong to the fitted function. In general, such procedure is attained from the aplication of the Least Square Method. On the other hand, the simulation of the attained mathematical model generates a point, denoted herein by y(x)m, which has some uncertainty associated with it. This paper proposes to determine the uncertainties associated with models, which can be reduced to a first order representation, in terms of the central second moments $\sigma_{y(x)m}$ that are attained from the statistical properties of the experimental points around y(x). Equations to determine the uncertainties are obtained for such models and applied to two sets of experimental data. The attained results can be considered good. When the fluctuations can be represented by a normal distribuition, the fitted function can be given in the following form: $y(x) = y(x)_m \pm \sigma_{y(x)m}$ or $y(x) = y(x)_m \pm 3\sigma_{y(x)m}$, with a probability of 68.3% and 99.7%, respectively. Herein, the graphical representation is given in terms of three lines, and the size between the upper and lower limits gives an indication of the experimental precision. Moreover, the visualization of the points outside those limits allows one to verify the existence of outliers during the measuring procedure of the variables when performing the experiment.

I Introdução

No desenvolvimento de uma experiência, em geral estamos envolvidos com medidas. Na análise dos dados obtidos, às vezes se faz necessário descrever o comportamento de uma grandeza (efeito) em relação a uma outra (causa). Para tal, suponha que tenhamos obtido uma série de N pontos experimentais $(x_i; y_i)$ de incertezas desconhecidas que dão o comportamento de um sistema. Suponha ainda, que queiramos descrever tal sistema através de uma função. A escolha da função geral pode ser feita pelo conhecimento prévio do sistema, com o auxílio de um gráfico y versus xtraçado em papel milimetrado. Se o gráfico resultar em uma reta, devemos ter y = ax + b; caso tenhamos uma parábola com vértice na origem (ou mesmo uma hipérbole), podemos pensar em algo do tipo $y = ax^b$, e assim por diante. O nosso problema, a partir daí, consiste em determinar os parâmetros da função geral, de forma que a função específica obtida seja aquela que tenha a máxima probabilidade de conter os N pontos $(x_i; y_i)$. Uma das maneiras de se fazer isso é através da determinação gráfica dos parâmetros da função, via linearização, reduzindo-a ao modelo y(x) = ax + b. Entretanto, a utilização do método gráfico fica subordinada a um erro inerente a esse método já que, por um único conjunto de pontos, pessoas distintas em geral traçam retas distintas. Além disso, cada ponto a ser marcado poderia ter um peso estatístico próprio e isso não seria completamente possível de ser considerado através do método gráfico. As melhores opções para a determinação dos parâmetros são os métodos analíticos, e dentre eles destaca-se o Método dos Mínimos Quadrados. Vários softwares já foram desenvolvidos utilizando esse método para um grande número de funções, dentre elas aquelas redutíveis ao modelo y(x) = ax + b. Neste artigo, utilizaremos as flutuações dos pontos experimentais $(x_i; y_i)$ em torno da função ajustada, que simbolizaremos por $y(x)_m$, para determinar a incerteza dessa função para um x qualquer, a ser simbolizada por $\sigma_{y(x)m}$. Assim, a função ajustada será dada de forma completa por $y(x) = y(x)_m \pm \sigma_{y(x)m}$, onde $y(x)_m$ é uma função redutível ao primeiro grau, cujos parâmetros são determinados pelo Método dos Mínimos Quadrados, e a incerteza $\sigma_{y(x)m}$ será determinada nesse estudo.

II O método dos mínimos quadrados para pontos de incertezas desconhecidas

Antes de estudarmos como determinar a incerteza de uma função redutível ao primeiro grau, ajustada pelo Método dos Mínimos Quadrados, façamos uma revisão

¹ Por exemplo: Curve Expert, Graph Pad Prism, Curvefit, Origin e Ajuste

deste método.

II.1 Leituras de uma mesma quantidade

Suponha que tenhamos efetuado N leituras de uma quantidade da grandeza y, representadas na Fig. 1. Suponha ainda que N seja suficientemente grande, e que os erros sistemáticos das leituras sejam desprezíveis.

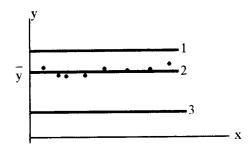


Figura 1: Leituras de uma mesma quantidade.

Intuitivamente sabemos que o melhor valor para a grandeza é o valor médio \bar{y} representado pela linha 2 da Fig. 1 è dado por

$$\bar{y} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} y_i.$$
 (1)

O desvio da i-ésima leitura efetuada é definido como

$$\delta y_i = y_i - \bar{y},\tag{2}$$

e a medida da dispersão das leituras em torno do valor médio \bar{y} é dada pela variância da amostra

$$\sigma_y^2 = \frac{1}{(N-1)} \sum_{i=1}^{N} (\delta y_i)^2$$

ou

$$\sigma_y^2 = \frac{1}{(N-1)} \sum_{i=1}^N (y_i - \bar{y})^2.$$
 (3)

Devemos observar que o melhor valor para a grandeza, dado na Eq. (1), pode ser obtido impondo-se a condição de que a variância do conjunto de leituras tenha o menor valor possível. Dito de outra forma: das três linhas dadas na Fig. 1, a que melhor representa o valor para as leituras de y é a linha 2, mais verossímil, e que implica na menor variância para o conjunto:

$$\frac{d\sigma_y^2}{d\bar{u}} = 0. (4)$$

Substituindo a Eq. (3) na Eq. (4) e derivando, teremos:

$$\frac{1}{(N-1)} \sum_{i=1}^{N} 2(y_i - \bar{y}) \cdot (-1) = 0,$$

ou

$$\bar{y} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} y_i,$$
 (5)

que é um resultado idêntico ao da Eq. (1). Por outro lado, a incerteza do valor médio, que denotaremos por σ_{ym} , pode ser obtida por propagação de erros de medidas independentes:

$$\sigma_{ym} = \sqrt{\sum_{i=1}^{N} \left(\frac{\partial \bar{y}}{\partial y_i} \sigma_{yi}\right)^2}.$$
 (6)

Como estamos analisando os casos em que as incertezas das leituras não são conhecidas, podemos fazêlas iguais à raiz quadrada da variância das leituras, ao que denominamos desvio padrão das leituras: $\sigma_{yi} = \sqrt{\sigma_y^2} = \sigma_y$. Isso é razoável porque a variância dá uma medida das flutuações das leituras em torno do valor médio. Dessa forma, lembrando que

$$\frac{\partial \bar{y}}{\partial y_i} = \frac{1}{N},$$

a Eq. (6) dá o seguinte resultado:

$$\sigma_{ym} = \frac{\sigma_y}{\sqrt{N}}. (7)$$

Com isso, podemos extrair o resultado final para a medida:

$$y = \bar{y} \pm \sigma_{ym},\tag{8}$$

onde \bar{y} é obtido através da Eq. (5) e σ_{ym} é o desvio padrão do valor médio das leituras, e é calculado pela Eq. (7). Ao expressar o resultado final da medida com a incerteza dada pelo desvio padrão do valor médio, estamos implicitamente admitindo que os erros sistemáticos no processo de medição possam ser desprezados.

II.2 Quantidades distintas: o método dos mínimos quadrados

Imagine, agora, que tenhamos N pontos distintos $(x_i; y_i)$. Imagine também que esses pontos se adequem a uma reta y(x) = ax + b, mostrada na Fig. 2.

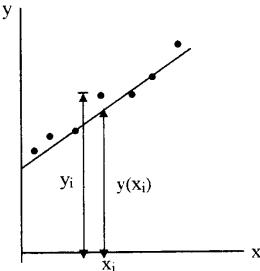


Figura 2. Reta ajustada a pontos experimentais.

Aqui, o desvio da i-ésima ordenada é dado através da seguinte expressão:

$$\delta y_i = y_i - y(x_i)$$
 ou $\delta y_i = y_i - ax_i - b$. (9)

Então, da mesma forma que fizemos para as leituras de uma mesma quantidade, podemos definir uma "variância associada ao ajuste de y = ax + b" [1], [7]

$$\sigma_{y(x)}^2 = \frac{1}{(N-2)} = \sum_{i=1}^{N} (y_i - ax_i - b)^2.$$
 (10)

Naturalmente o número 2 do denominador referese aos dois parâmetros a serem determinados. Para os pontos em estudo, a melhor função específica é aquela cujos valores dos parâmetros a e b fazem o valor da variância $\sigma_{y(x)}^2$ ser o menor possível. Podemos, então, determinar <u>a</u> e <u>b</u> de forma que $\sigma_{y(x)}^2$ seja mínimo, o que requer:

$$\frac{\partial \sigma_{y(x)}^2}{\partial a} = 0 \quad e \quad \frac{\partial \sigma_{y(x)}^2}{\partial b} = 0. \tag{11}$$

Substituindo a Eq. (10) nas duas equações dadas em (11), teremos um sistema de duas equações e duas incógnitas que, resolvido, nos dá:

$$a = \frac{1}{D} \left[N \sum_{i=1}^{N} x_i y_i - \left(\sum_{i=1}^{N} y_i \right) \sum_{i=1}^{N} x_i \right]$$
 (12a)

$$b = \frac{1}{D} \left[\left(\sum_{i=1}^{N} y_i \right) \sum_{i=1}^{N} x_i^2 - \left(\sum_{i=1}^{N} x_i y_i \right) \sum_{i=1}^{N} x_i \right]$$
 (12b)

onde

$$D = N \sum_{i=1}^{N} x_i^2 - \left(\sum_{i=1}^{N} x_i\right)^2.$$
 (13)

 $\mathbf{X}_{\mathbf{i}}$

II.3 Geração de incertezas para os parâmetros

Tendo determinado os parâmetros a e b, cabe-nos determinar quais são as incertezas destes parâmetros para, posteriormente, associar uma incerteza para o valor médio da função ajustada, $y(x)_m$. Lembremos, então, que os parâmetros a e b são funções das medidas x_i e y_i . Assim, as incertezas desses parâmetros dependem das incertezas dessas medidas, que denotaremos por σ_{xi} e σ_{yi} . Entretanto, em muitas experiências, as incertezas σ_{xi} e σ_{yi} não são conhecidas, como no caso que estamos estudando. Então, vamos admitir, arbitrariamente, que σ_{xi} seja igual a zero para todos os pontos, isto é, as medidas de x são isentas de erros. Vamos admitir também que a incerteza de cada y_i seja igual à raiz quadrada da variância do ajuste [2]:

$$\sigma_{yi} = \sqrt{\sigma_{y(x)}^2}$$
 ou $\sigma_{yi} = \sigma_{y(x)}$. (14)

Veja que essa consideração é bastante razoável já que $\sigma_{y(x)}$ dá uma medida das flutuações dos y_i em torno de $y(x)_m$. Com essas considerações, podemos facilmente determinar as incertezas dos parâmetros a e b, que denotaremos por σ_a e σ_b , e isso será feito por propagação de erros. Determinemos, inicialmente, uma expressão para σ_a , lembrando que estamos considerando x_i isento de erros:

$$\sigma_a = \sqrt{\sum_{i=1}^{N} \left(\frac{\partial a}{\partial y_i} \sigma_{yi}\right)^2}.$$
 (15)

Como estamos considerando $\sigma_{yi} = \sigma_{y(x)}$, podemos reescrever a Eq. (15) como

$$\sigma_a = \sigma_{y(x)} \sqrt{\sum_{i=1}^{N} \left(\frac{\partial a}{\partial y_i}\right)^2}.$$
 (16)

O parâmetro a foi obtido na Eq. (12a), de forma que podemos escrever:

$$\frac{\partial a}{\partial y_i} = \frac{1}{D} \left(Nx_i - \sum_{i=1}^{N} x_i \right)$$

ou ainda

$$\sum_{i=1}^{N} \left(\frac{\partial a}{\partial y_i} \right)^2 = \frac{N}{D}. \tag{17}$$

Substituindo o resultado dado pela Eq. (17) na Eq. (16), teremos:

$$\sigma_a = \sigma_{y(x)} \sqrt{\frac{N}{D}}.$$
 (18a)

Com um raciocínio análogo podemos obter

$$\sigma_b = \sigma_{y(x)} \sqrt{\frac{1}{D} \sum_{i=1}^{N} x_i^2}.$$
 (18b)

Embora o cálculo dos parâmetros a e b nos permita escrever a expressão do valor médio $y(x)_m$ da função ajustada, o cálculo dos parâmetros σ_a e σ_b não nos permite, por si só, determinar a incerteza $\sigma_{y(x)m}$ desse valor médio para um x qualquer. Isso ocorre porque, ao tentarmos determinar uma expressão para essa incerteza, por propagação de erros, deveremos considerar a covariância entre a e b já que, em geral, esses parâmetros não são independentes entre si por serem, ambos, funções de x_i e y_i . Vamos, então, determinar uma expressão para essa covariância para, em seguida, determinar a incerteza $\sigma_{y(x)m}$ do valor médio da função ajustada.

III Covariância entre duas funções

Para compreendermos melhor como determinar a covariância entre os parâmetros a e b, que simbolizaremos por cov(a,b), façamos um estudo resumido do conceito de covariância, que é um parâmetro que quantifica a influência da dependência entre duas variáveis na propagação de erros.

III.1 Covariância entre duas variáveis

Suponha que tenhamos duas variáveis, x_1 e x_2 , cada uma lida N vezes, de forma que o i-ésimo par possa ser dado por $x_{1i} = \bar{x}_1 + \delta x_{1i}$ e $x_{2i} = \bar{x}_2 + \delta x_{2i}$. A maioria dos textos que abordam o problema do tratamento estatístico de dados definem a covariância [3,4] entre x_1 e x_2 , através da seguinte expressão:

$$cov(x_1, x_2) = \frac{1}{(N-1)} \sum_{i=1}^{N} (\delta x_{1i}) (\delta x_{2i}).$$
 (19)

Da definição, é interessante observar que a variância de uma variável x é um caso particular da covariância entre a variável x e ela mesmo.

III.2 Covariância entre duas funções de várias variáveis

Vamos admitir que f e g sejam funções de n variáveis independentes dadas por $x_1, x_2, ..., x_n$. Neste caso, feitas N leituras de cada variável independente, uma leitura i de uma variável k pode ser escrita assim:

$$x_{ki} = \bar{x}_k + \delta x_{ki}.$$

Expandindo f e g, e desprezando os termos a partir da segunda ordem, ao final podemos escrever

$$\delta f_i = \frac{\partial f}{\partial x_1} \delta x_{1i} + \frac{\partial f}{\partial x_2} \delta x_{2i} + \dots + \frac{\partial f}{\partial x_n} \delta x_{ni} \qquad (20a)$$

$$\delta g_i = \frac{\partial g}{\partial x_1} \delta x_{1i} + \frac{\partial g}{\partial x_2} \delta x_{2i} + \dots + \frac{\partial g}{\partial x_n} \delta x_{ni}, \quad (20b)$$

onde as derivadas são calculadas para $x_1 = \bar{x}_1; x_2 = \bar{x}_2, ..., x_n = \bar{x}_n$. Então, de acordo com a definição de covariância dada pela Eq. (19), podemos escrever

$$\operatorname{cov}(f,g) = \frac{1}{(N-1)} \sum_{i=1}^{N} (\delta f_i \cdot \delta g_i). \tag{21}$$

Com as expressões de δf_i e δg_i dadas em (20a) e (20b), a Eq. (21) pode ser reescrita da seguinte forma:

$$cov(f,g) = \sum_{j=1}^{N} \sum_{k=1}^{n} \frac{\partial f}{\partial x_{j}} \frac{\partial g}{\partial x_{K}} cov(x_{j}, x_{K}), \qquad (22)$$

sendo $cov(x_j, x_k)$ definido na Eq. (19) para o caso particular das variáveis x_1 e x_2 .

Caso as variáveis independentes da função sejam independentes entre si, teremos $cov(x_j, x_k) = 0$ para $j \neq k$. Nesse caso, a Eq. (22) deve ser reescrita da seguinte forma [2],[5]:

$$cov(f,g) = \sum_{i=1}^{N} \frac{\partial f}{\partial x_j} \frac{\partial g}{\partial x_j} \sigma_{xj}^2, \qquad (23)$$

onde $\sigma_{x_j}^2$ é a variância de x_j .

III.3 Expressão para a covariância entre os parâmetros ajustados

Com o objetivo de obter uma expressão para cov(a,b) através da Eq. (23), devemos observar as expressões para os parâmetros a e b dadas em (12a) e (12b). Então, podemos determinar as derivadas parciais desses parâmetros lembrando que as variáveis independentes x_j , no caso, são as ordenadas y_i dos pontos experimentais: $x_j \equiv y_i$. Assim, encontramos

$$\frac{\partial a}{\partial y_i} = \frac{1}{D} \left(Nx_i - \sum_{i=1}^N x_i \right) \tag{24}$$

е

$$\frac{\partial b}{\partial y_i} = \frac{1}{D} \left(\sum_{i=1}^N x_i^2 - x_i \sum_{i=1}^N x_i \right). \tag{25}$$

Como estamos admitindo $\sigma_{yi} = \sigma_{y(x)}$, substituindo as expressões (24) e (25) na Eq. (23) e fazendo as simplificações devidas, ao final teremos

$$cov(a,b) = -\frac{\sigma_{y(x)}^2}{D} \sum_{i=1}^{N} x_i,$$
 (26)

onde D foi definido na Eq. (13).

IV Erro propagado na função ajustada

Suponha que tenhamos uma função $f(z_1, z_2, ..., z_n)$ e que o conjunto das n variáveis independentes tenha sido lido por N vezes. A incerteza em f devido às incertezas das variáveis independentes é obtida pela fórmula geral de propagação de erros[6]:

$$\sigma_{fm} = \sqrt{\sum_{j=1}^{N} \sum_{k=1}^{n} \frac{\partial f}{\partial z_{j}} \cdot \frac{\partial f}{\partial z_{k}} \operatorname{cov}(\bar{z}_{j}, \bar{z}_{k})}, \qquad (27)$$

onde

$$\operatorname{cov}(\bar{z}_j, \bar{z}_k) = \frac{1}{N(N-1)} \sum_{i=1}^{N} \delta z_{ji} \cdot \delta z_{ki}.$$

É interessante observar que, para j = k, teremos

$$cov(\bar{z}_k, \bar{z}_k) = \frac{1}{N(N-1)} \sum_{i=1}^{N} (\delta z_{ki})^2 = \sigma_{zkm}^2.$$
 (28)

Por outro lado, caso as variáveis independentes da função sejam independentes entre si, teremos $\operatorname{cov}(\bar{z}_j,\bar{z}_k)=0$ para $j\neq k$, e a Eq. (27) reduz-se à Eq. (6), sendo que a variável $z_k(=z_j)$ daqui é a variável y_i de lá. As n variáveis distintas correspondem às N leituras efetuadas.

V Determinação da incerteza da função ajustada

O propósito deste artigo é aplicar a teoria discutida anteriormente ao ajuste de funções redutíveis ao primeiro grau, determinando não só do valor médio da função $y(x)_m$, como também associando uma incerteza $\sigma_{y(x)m}$ a esse valor médio. No apêndice D da referência [6] isso foi feito para um ponto específico de uma reta definida por pontos $(x_i; y_i; \sigma_{yi})$, sendo que a covariância entre os parâmetros foi obtida diretamente da matriz das covariâncias. Aqui vamos generalizar o raciocínio para um ponto qualquer de uma função do primeiro grau definida por pontos $(x_i; y_i)$ e estender tal raciocínio para as funções potência e exponencial.

V.1 Incerteza para a função do primeiro grau

Tendo sido determinados os parâmetros a e b através das Eq. (12a) e (12b), as incertezas σ_a e σ_b (Eq. (18a) e (18b)) e a covariância cov(a,b) (Eq.(22)), podemos determinar $\sigma_{u(x)m}$ reescrevendo a Eq. (27) para o nosso

problema específico, em que y(x)=ax+b. Para um dado $x,\,\sigma_{y(x)m}$ será dado por

$$\sigma_{y(x)m} = \sqrt{\left(\frac{\partial y}{\partial a}\sigma_a\right)^2 + \left(\frac{\partial y}{\partial b}\sigma_b\right)^2 + 2\frac{\partial y}{\partial a}\frac{\partial y}{\partial b}\operatorname{cov}(a,b)}.$$
(29)

Como $\frac{\partial y}{\partial a} = x$ e $\frac{\partial y}{\partial b} = 1$, escrevemos

$$\sigma_{y(x)_m} = \sqrt{(x\sigma_a)^2 + \sigma_b^2 + 2x\operatorname{cov}(a, b)}.$$
 (30)

V.2 Incerteza para a função potência

Dada a função potência

$$y(x) = ax^b, (31)$$

podemos obter uma outra função linear nos parâmetros aplicando o logaritmo:

$$\ln y = b \ln x + \ln a.$$

Fazendo $Y = \ln y$, $X = \ln x$ e $C = \ln a$, escrevemos

$$Y = bX + C. (32)$$

Assim, os parâmetros b e C podem ser obtidos através das Eq. (12-a) e (12-b), as incertezas σ_b e σ_C são determinadas através das Eq. (18-a) e (18-b) e a covariância cov(b,C) é calculada utilizando a Eq. (26). Isso feito, podemos relembrar que $Y = \ln y$ e que $X = \ln x$ e reescrever a Eq. (32) da seguinte forma

$$\ln y = b \ln x + C,$$

o que nos dá

$$y(x) = e^{b \ln x + C}. (33)$$

Com isso, a incerteza $\sigma_{y(x)m}$ pode ser obtida pela fórmula de propagação de erros dada na Eq. (27). Como

$$\frac{\partial y}{\partial b} = (\ln x)e^{b\ln x + C}$$

е

$$\frac{\partial y}{\partial C} = e^{b \ln x + C}$$

escrevemos

$$\sigma_{y(x)m} = \sqrt{[(\ln x)e^{b\ln x + C} \cdot \sigma_b]^2 + [e^{b\ln x + C} \cdot \sigma_C]^2 + 2(\ln x)e^{2(b\ln x + C)} \cdot \text{cov}(b, C)}.$$
 (34)

V.3 Incerteza para a função exponencial

Dada a função exponencial

$$y(x) = ae^{bx}. (35)$$

podemos obter uma outra função linear nos parâmetros aplicando o logaritmo

$$\ln y = bx + \ln a$$
.

Fazendo $Y = \ln y \in C = \ln a$, escrevemos

$$Y = bx + C. (36)$$

Novamente, os parâmetros $b \in C$ são determinados através das Eq. (12a) e (12b), as incertezas σ_b e σ_C são obtidas através das Eq. (18a) e (18b) enquanto que a covariância cov(b, C) é calculada pela Eq. (26). Isso feito, podemos relembrar que $Y = \ln y$, e reescrever a Eq. (36) da seguinte forma

$$\ln y = bx + C, \text{ o que nos dá } y(x) = e^{bx+C}.$$
 (37)

Como $\frac{\partial y}{\partial b}=xe^{bx+C}$ e $\frac{\partial y}{\partial C}=e^{bx+C}$, a incerteza $\sigma_{y(x)m}$ será obtida através da Eq. (27), o que resulta em

$$\sigma_{y(x)m} = \sqrt{(xe^{bx+C} \cdot \sigma_b)^2 + (e^{bx+C} \cdot \sigma_C)^2 + 2xe^{2(bx+C)}\operatorname{cov}(b, C)}.$$
(38)

VI Aplicações

Com o objetivo de testar as soluções propostas para a determinação das incertezas de funções ajustadas, vamos aplicá-las a duas experiências.

VI.1 Corrente versus tempo de carga num circuito RC

Como este é um experimento comum na maioria dos laboratórios de ensino de Física, tornam-se desnecessários maiores comentários sobre o arranjo experimental, procedimentos, etc. Feitas as medições, obtive-

mos a seguinte Tabela I

TABELA I

	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
t(s)	10,0	20,0	30,0	40,0	50,0	60,0	70,0	80,0	90,0	100,0
i(µA)	45,8	41,4	37,7	34,1	30,9	28,9	25,5	23,1	21,0	19,2

Argumentos teóricos e uma inspeção gráfica de i versus t sugerem que o melhor modelo matemático para descrever o fenômeno observado é

$$i(t) = ae^{bt}. (39)$$

Com os pontos experimentais (linearizados) e as Eqs.

(12a), (12b), (39), (18a), (18b), (26) e (38), obtemos a $= 50.40 \pm 0.33$; $b = -0.00967 \pm 0.00011$ (o que dá RC = (103.4 ± 1.2) s); $cov(b, ln a) = -6.1 \times 10^{-7}$; sendo $\sigma_{\ln i} = 0,0096$, o que dá $\sigma_i = 0,44 \ \mu \text{A}$. Estes parâmetros nos levam à construir a Tabela II relativa ao ajuste

TABELA II

		1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
1	t (s)	10,0	20,0	30,0	40,0	50,0	60,0	70,0	80,0	90,0	100,0
	i(t) (μA)	45,75	41,53	37,70	34,23	31,07	28,21	25,60	23,24	21,10	19,15
	$\sigma_{i(t)m}(\mu A)$	0,26	0,20	0,15	0,12	0,10	0,09	0,09	0,09	0,10	0,11

Então, podemos traçar o gráfico mostrado na Fig. 3, de $i(t) = i(t)_m \pm 3\sigma_{i(t)m}$, obtendo não só a curva ajustada, como também os seus limites inferior e superior. Assim, nós criamos uma faixa onde os valores de y(x)devem estar contidos, com uma probabilidade de 99.7% caso as flutuações tenham uma função de distribuição normal.

VI.2 Comprimento de um pêndulo simples versus o seu período

Este também é um experimento comum em laboratórios de ensino de Física, o que dispensa maiores comentários sobre o arranjo experimental, procedimentos, etc. Apenas ressaltamos que, na coleta de dados, foi utilizado o KEM - Kit para Experiências de Mecânica, com mais de 70 experimentos já desenvolvidos a níveis de 2º e 3º graus. O KEM foi desenvolvido e patenteado por professores do DF/CCT/UFPB e é utilizado em seus laboratórios de Física Experimental I. Passemos aos dados obtidos e anotados na Tabela III

IADELA	7 111	
	1	2

TADELA III

		1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
I	T (s)	0,637	0,880	1,082	1,250	1,407	1,534	1,667	1,773	1,894	1,971
į	L (cm)	10,0	20,0	30,0	40,0	50,0	60,0	70,0	80,0	90,0	100,0

Argumentos teóricos e uma inspeção gráfica sugerem que o melhor modelo matemático para descrever o fenômeno observado é

$$L(T) = aT^b, (40)$$

onde estamos considerando o período como a variável independente.

Com os pontos experimentais e as Eq. (12-a), (12b), (40), (18-a), (18-b), (26) e (34), obtemos a = $25,31\pm0,15$ (o que dá $g=(999\pm6)$ cm/s²); $b=2,011\pm$ 0.013; $cov(b, \ln a) = -0.000050$, sendo $\sigma_{\ln L} = 0.014$, o que dá $\sigma_L = 0,14$ cm. Estes parâmetros nos levam a construir a Tabela IV relativa ao ajuste

TABELA IV

	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
T(s)	0,637	0,880	1,082	1,250	1,407	1,534	1,667	1,773	1,894	1,971
L(T) (cm)	10,22	19,57	29,66	39,64	50,29	59,84	70,72	80,06	91,42	99,05
$\sigma_{L(T)m}(cm)$	0,11	0,14	0,16	0,18	0,23	0,29	0,38	0,47	0,59	0,67

Então, podemos traçar o gráfico de $L(T) = L(T)_m \pm 3\sigma_{L(T)m}$ (veja a Fig. 4), obtendo não só a função ajustada como também os seus limites inferior e superior.

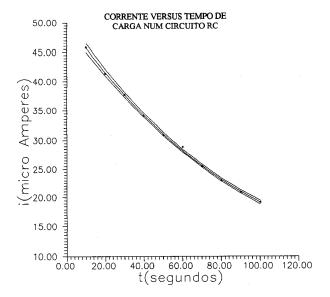


Figura 3: Gráfico da corrente versus o tempo de carga num circuito RC.

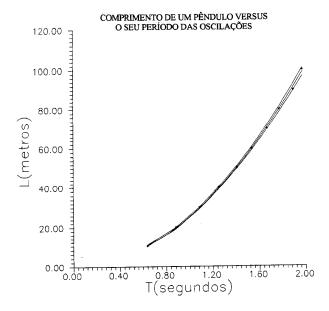


Figura 4: Gráfico do comprimento versus o período de um pêndulo simples.

VII Conclusões

Como já sabemos, a Eq. (8) nos permite extrair um resultado final de um conjunto de leituras de uma mesma quantidade: o valor médio e a incerteza do valor médio. Caso as flutuações das leituras em torno

do valor médio obedeçam a uma função de distribuição normal, há uma probabilidade de 68,3% do valor verdadeiro de y estar contido no intervalo definido pela Eq. (8): $y = \bar{y} \pm \sigma_{ym}$. Caso queiramos definir um intervalo com 99,7% de probabilidade, devemos indicar o valor verdadeiro através de um intervalo de amplitude igual a $6\sigma_{ym}: y = \bar{y} \pm 3\sigma_{ym}$. Naturalmente, essas considerações pressupõem que os erros sistemáticos das leituras sejam desprezíveis e que o número de dados seja suficientemente grande (maior que 20).

No caso de ajuste de curvas, a maioria dos softwares disponíveis fazem o ajuste de várias funçes a pontos experimentais, o que significa determinar os parâmetros da função, de forma que tal função tenha a máxima probabilidade de conter tais pontos. Assim, para um dado x, podemos determinar o valor médio de y(x), que simbolizamos por $y(x)_m$. Por analogia com o tratamento de leituras de uma mesma quantidade, restaria, a nós, determinar uma incerteza para o valor médio da função ajustada $y(x)_m$. Nesse artigo, discutimos e acrescentamos essa importante informação para as funções redutíveis ao primeiro grau. Com isso, pudemos não só escrever a função na forma $y(x) = y(x)_m \pm \sigma_{y(x)m}$ (ou $y(x) = y(x)_m \pm 3\sigma_{y(x)m}$, como também traçar o gráfico de y(x) através de três linhas: a linha relativa ao valor médio da função e as linhas relativas aos limites inferior e superior do valor médio $y(x)_m$ que podemos denominar de linhas de incerteza. Isso nos permite, por exemplo, investigar se houve algum erro grosseiro na obtenção de pontos experimentais, como deve ter sido o caso do 6º ponto da tabela I, fora dos limites, o que pode ser observado na Fig. 3. Já no ajuste LxT, a Fig. 4 nos indica que não devem ter havido erros grosseiros consideráveis. Além disso, a largura da faixa definida pelos limites inferior e superior nos dá uma idéia da flutuação dos pontos em torno da curva média, o que é um indicador da precisão experimental.

Podemos, então, considerar como bastante positivo e desejável a inclusão da incerteza $\sigma_{y(x)m}$ no estudo do ajuste de curvas, o que permite determinar a precisão relativa de $y(x)_m$ para um x qualquer. Há que se considerar, entretanto, que foram feitas linearizações com o uso de logaritmos, e a as incertezas das ordenadas $Y_i = \ln y_i$ foram consideradas iguais para todos os pontos obtidos com a linearização: $\sigma_{yi} = \sigma_{y(x)}$. Entretanto, é mais razoável considerar que as ordenadas originais (y_i) tenham a mesma incerteza, ainda que desconhecidas, posto que devem ter sido lidas em condições similares, e foi suposto erros sistemáticos desprezíveis. Assim, a inclusão de correções nas equações deduzidas, visando levar em conta essas considerações, devem produzir resultados ainda melhores.

Agradecimentos

Agradecemos aos professores Dr. Wilson F. Curi e Dr. Jürgen W. Precker, do DF/CCT da Universidade Federal da Paraíba, pela leitura crítica da versão original deste artigo.

References

- Silva, Wilton P. e outros, Tratamento de Dados Experimentais, 1^a Ed., UFPB/Editora Universitária (1995) pag. 168.
- [2] Vuolo, José H., Fundamentos da Teoria de Erros, 1a Ed., Editora Edgard Blücher (1992) pag. 193 e 215 (Apêndice D).
- [3] Silveira, Fernando L., Validação de Testes de Papel e Lápis, Instituto de Física, UFRS (1993).

- [4] Bussab, Wilton O. e Morettin, Pedro A., Estatística Básica (Métodos Quantitativos) 3ª Ed., Atual Editora Ltda. (1995) pag. 168.
- [5] Silva, Wilton P. e Silva, Cleide M. D. P. S., Tratamento de Dados Experimentais, 2ª Ed. (Revisada e Ampliada), UFPB/Editora Universitária (1998) pag. 108.
- [6] Helene, Otaviano A. M. e Vanin, Vitor R., Tratamento Estatísticos de Dados em Física Experimental, Ed. Edgar Blücher LTDA (1981), pag. 54 e 100.
- [7] Press, William H. Press, Saul A. Teukolsky, William T. Vetterling e Brian P. Flannery, Numerical Recipes in Pascal: The Art of Scientific Computing, Cambridge University Press (1989), pag. 551.