MÉTODO DOS MÍNIMOS QUADRADOS

I - INTRODUÇÃO

O processo de medida constitui uma parte essencial na metodologia científica e também é fundamental para o desenvolvimento e aplicação da própria ciência. No decorrer do seu curso de Física Básica, a parte experimental ressalta o processo de medida.
Até este ponto você tem empregado diversos conceitos como valor mais provável de uma grandeza, desvio, etc., fazendo apelos a noções intuitivas a cada novo conceito. Ou seja, sem a preocupação de apresentar uma axiomática partindo de princípios gerais.
Um primeiro passo nesta direção está no que se chama de Princípio dos Mínimos Quadrados. Este processo de sistematização da teoria da medida permite, como veremos, obter bons resultados no ajuste de curvas. **Embora possa ser utilizado no ajuste de outras curvas, vamos apresentar este método e seu uso para o ajuste de retas**, por ser no momento nosso principal objetivo.

II - PRINCÍPIO DOS MÍNIMOS QUADRADOS

Enunciado do **Princípio dos Mínimos Quadrados:** *Suponha que seja realizado um conjunto de medidas de uma mesma quantidade física. Se essas medidas estão sujeitas apenas a erros aleatórios, então o valor mais provável da quantidade medida é aquele que torna a soma dos quadrados dos erros um mínimo.*

Este princípio pode ser aplicado em várias situações. Como exemplo, vamos utilizá-lo para obter a melhor estimativa (valor mais provável) para uma grandeza medida várias vezes.
Suponha que efetuamos o seguinte conjunto

$$M = \{x_1, x_2, ...x_n\}$$

de medidas de uma quantidade física cujo valor verdadeiro é x. Então os erros nas medidas são:

$$\begin{aligned} \varepsilon_1 &= x_1 - x \quad , \\ \varepsilon_2 &= x_2 - x \quad , \\ &\vdots \\ \varepsilon_n &= x_n - x \quad , \end{aligned}$$

e a soma de seus quadrados é:

$$\begin{aligned} E(x) &= \varepsilon_1^2 + \varepsilon_2^2 + ... + \varepsilon_n^2 \\ E(x) &= \sum_k \varepsilon_k^2 \\ E(x) &= \sum_k (x_k - x)^2 \qquad \text{(A)} \end{aligned}$$

O valor verdadeiro, x, é uma quantidade desconhecida que o experimento visa determinar. Dentre todos os possíveis valores que x possa assumir, o Princípio dos Mínimos Quadrados estabelece que a melhor escolha é a daquele valor que torna $E = E(x)$ um mínimo. Ou seja, devemos resolver a seguinte equação para x

$$\frac{\partial}{\partial x} E(x) = 0 \ . \qquad \text{(B)}$$

A solução desta equação, a ser denotada por $x = \tilde{x}$, será a melhor escolha para x. Substituindo (A) em (B) temos

$$\frac{\partial}{\partial x}\left[\sum_i (x_i - x)^2\right] = 0 \quad .$$

Então teremos,

$$\frac{\partial}{\partial x}(x_1 - x)^2 + \frac{\partial}{\partial x}(x_2 - x)^2 + ... + \frac{\partial}{\partial x}(x_n - x)^2 = 0 \quad ,$$

$$-2(x_1 - x) - 2(x_2 - x) - ... - 2(x_n - x) = 0 \quad ,$$

ou

$$\left[\sum_i x_i\right] - nx = 0 \quad .$$

A solução desta equação do 1°. grau é

$$x = \tilde{x} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} x_i \equiv \bar{x} \, ,$$

que é a média aritmética $(\bar{x})$ das medidas. Esta é a quantidade que você usou (intuitivamente) como o valor mais provável de uma grandeza. Aqui, este conceito foi deduzido do Princípio dos Mínimos Quadrados.

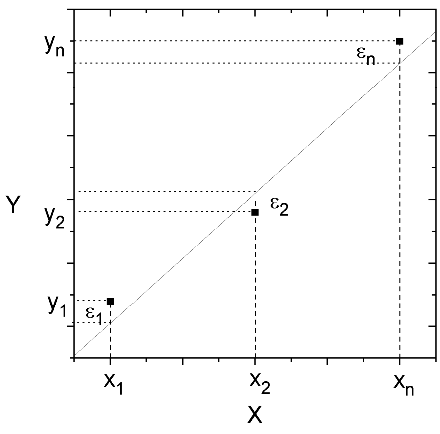
III - A MELHOR RETA

Em diversas situações num laboratório nos deparamos com quantidades que se relacionam entre si. Por exemplo, a pressão de uma determinada massa de gás depende da sua temperatura e do seu volume; a distensão de uma mola depende da força aplicada. Deseja-se, freqüentemente, expressar essa relação sob forma matemática, por meio de uma equação que ligue as variáveis.
Para auxiliar a determinação de uma equação que relacione as variáveis, um primeiro passo consiste em colecionar dados que indiquem os valores correspondentes das variáveis consideradas. Por exemplo, seja x o deslocamento de uma mola causado por uma força aplicada y para os quais temos o conjunto de n medidas

$$M = \{(x_1, y_1), (x_2, y_2), ..., (x_n, y_n)\} \quad . \qquad (1)$$

Em seguida locam-se estes pontos num plano cartesiano. O conjunto de pontos resultante é denominado **diagrama de dispersão** (vide Figura). Neste diagrama é possível, freqüentemente, visualizar uma curva regular que se aproxime dos pontos dados. Esta curva é denominada de **ajustamento**. A questão central para se determinar a equação da curva é encontrar a melhor curva regular de ajuste dos dados. Pode-se usar um critério individual para traçar uma curva de ajustamento que se adapte a um conjunto de dados (este critério você provavelmente já utilizou). Quando é conhecido o tipo de equação dessa curva é possível obter suas constantes, mediante a escolha de tantos pontos da curva quantas sejam as constantes da equação. Assim, por exemplo, se a equação é uma reta,

$$y = ax + b \quad , \qquad (2)$$



são necessários dois pontos, (x_α, y_α) e (x_β, y_β), escolhidos da curva (reta) de ajuste para se determinar a e b. Se a equação é de uma parábola, $y = ax^2 + bx + c$, serão necessários três pontos. A desvantagem deste método é que observadores diferentes podem obter curvas e equações diferentes, já que a escolha dos pontos é arbitrária.

Para evitar o critério individual de curvas de ajustamento que se adaptem a um conjunto de dados, podemos utilizar o **Método dos Mínimos Quadrados** que, por se tratar de um método analítico, indicará uma, e somente uma curva, que melhor representa um determinado conjunto de pontos. Nos deteremos ao ajuste somente de retas, embora o método possa ser também aplicado a outros tipos de curvas.

Suponhamos que as grandezas x, y, cujas medidas são dadas por (1), se relacionem linearmente. Assim, a eq. (2) será a melhor reta que se ajusta aos pontos (1) a qual deseja-se determinar. Devido a erros de medida, os valores (x_i, y_i) não satisfazem exatamente à eq. (2), isto é,

$$y_i \cong ax_i + b.$$

Para que esta expressão se transforme numa igualdade, deveremos levar em conta os erros ε cometidos na medida. Assim,

$$y_i = (ax_i + b) + \varepsilon_i. \tag{3}$$

Portanto,

$$\varepsilon_i(a,b) = y_i - (ax_i + b), \tag{4}$$

onde ε_i é a **discrepância** ou erro cometido na medida de y. A soma dos quadrados das discrepâncias é dada por

$$\begin{aligned} E(a,b) &= [y_1 - ax_1 - b]^2 + [y_2 - ax_2 - b]^2 + ... + [y_n - ax_n - b]^2 \\ &= \sum_{i=1}^{n} [y_i - ax_i - b]^2 . \end{aligned} \tag{5}$$

Aplicando-se o Método dos Mínimos Quadrados, tem-se que os melhores valores para a e b (e portanto a melhor reta) são aqueles que minimizam $E(a,b)$. Como E é uma função de duas quantidades $(a$ e $b)$, escrevemos esta condição de mínimo como

$$\frac{\partial}{\partial a} E(a,b) = 0 \quad \text{e} \quad \frac{\partial}{\partial b} E(a,b) = 0 \ , \tag{6}$$

ou seja,

$$\frac{\partial}{\partial a} E(a,b) = -2 \sum_{i=1}^{n} (x_i y_i - ax_i^2 - bx_i) = 0 \ , \tag{7}$$

$$\frac{\partial}{\partial b} E(a,b) = -2 \sum_{i=1}^{n} (y_i - ax_i - b) = 0 \tag{8}$$

Dessas equações (7) e (8) obtemos as chamadas equações normais,

$$\sum_i x_i y_i = \sum_i (bx_i + ax_i^2) \tag{9}$$

$$\sum_i y_i = \sum_i (ax_i + b) \tag{10}$$

Resolvendo (9) e (10) simultaneamente para *a* e *b* encontramos

$$a = \frac{\left[\sum_i x_i\right]\left[\sum_i y_i\right] - n\left[\sum_i x_i y_i\right]}{\left[\sum_i x_i\right]^2 - n\left[\sum_i x_i^2\right]} \tag{11}$$

$$b = \frac{\left[\sum_i x_i y_i\right]\left[\sum_i x_i\right] - \left[\sum_i (x_i^2)\right]\left[\sum_i y_i\right]}{\left[\sum_i x_i\right]^2 - n\left[\sum_i x_i^2\right]} \tag{12}$$

Como uma aplicação do Método dos Mínimos Quadrados, apresentamos a seguir **o ajuste de uma reta**. Seja o conjunto de pontos que desejamos ajustar.

x_i	1	3	4	6	8	9	11	14
y_i	1	2	4	4	5	7	8	9

De acordo com as equações (11) e (12), n = 8; devemos agora calcular as somas de *x, y, x.y e* x^2

x_i	1	3	4	6	8	9	11	14	$\Sigma_i x_i = 56$
y_i	1	2	4	4	5	7	8	9	$\Sigma_i y_i = 40$
$x_i.y_i$	1	6	16	24	40	63	88	126	$\Sigma_i x_i y_i = 364$
x_i^2	1	9	16	36	64	81	121	196	$\Sigma_i x_i^2 = 524$

Logo, pelas eqs. (11) e (12), teremos:

$$a = 0{,}64, \qquad b = 0{,}55$$

$$y = 0{,}64\,x + 0{,}55$$

Esta equação define uma reta que passa pelos seguintes pontos corrigidos:

x_i	1	3	4	6	8	9	11	14
y_i	1,2	2,5	3,1	4,4	5,6	6,3	7,5	9,4

Como dito na introdução, o método pode ser utilizado no ajuste de outras curvas, por exemplo, um caso de um polinômio de grau superior a um, para isso basta resolver um sistema parecido ao sistema (6) com numero superior de equações a depender do grau do polinômio e desta mesma forma se procede para outros tipos de curva. No entanto, muitas vezes antes de aplicar o método ainda é possível linearizar as curvas em outras escalas e, deste modo, pode-se continuar utilizado o ajuste linear para diferentes curvas como os exemplos a seguir:

i) Ajuste a uma curva exponencial do tipo $y=\alpha_1\alpha_2^x$

Para justar uma tabela de pontos que obedecem a tal curva basta fazer a seguinte transformação:

$$y' = \ln y = \underbrace{\ln\alpha_1}_{b} + x\underbrace{\ln\alpha_2}_{a} = b + ax$$

Observa-se que o ajuste deverá ser feito em uma escala mono-log.

ii) Ajuste a uma curva geométrica $y=\alpha_1 x^{\alpha 2}$

Para justar uma tabela de pontos que obedecem a tal curva basta fazer a seguinte transformação:

$$y' = \ln y = \underbrace{\ln \alpha_1}_{b} + \underbrace{\alpha_2}_{a} \underbrace{\ln x}_{x'} = b + ax'$$

Observa-se que o ajuste deverá ser feito em uma escala log-log.

iii) Ajuste a uma hipérbole $y = \frac{1}{ax+b}$

Para justar uma tabela de pontos que obedecem a tal curva basta fazer a seguinte transformação:

$$y' = \frac{1}{y} = ax + b$$

IV - EXERCÍCIOS

Exercício 1 – A partir das equações (9) e (10) demonstre as equações (11) e (12).

Exercício 2 - Ajuste uma reta ao seguinte conjunto de pontos:

x_i	0.30	0.75	0.90	0.98	1.23	1.50	1.77
y_i	-5.031	-4.9275	-4.893	-4.8746	-4.8171	-4.755	-4.6929

Exercício 3 - Mostre que o ajuste de n pontos (x_i,y_i) a uma reta passando pela origem, $y = \gamma x$ implica em

$$\gamma = \Sigma_i(x_i y_i) / \Sigma_i(x_i)^2.$$

Exercício 5 - A observação e as medidas de um fenômeno de decaimento radioativo levaram aos seguintes resultados para a taxa de contagem radioativa (ou atividade) no tempo:

Tempo (h)	0	0,5	1	1,5	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
Taxa eventos /min	..	9500	8200	7200	6540	5000	3200	2500	2000	1440	900	750	560	401	320

De posse destes dados, determine a dependência funcional da atividade radioativa *A(t)* da substância com o tempo t. Para tanto, trace o gráfico de *A(t) x t* e observe o comportamento da curva obtida. Você verifica que a dependência da atividade com o tempo não é linear; ou seja, a curva obtida não é uma reta.

Trace então um gráfico num papel log-log e , em seguida, um outro no papel semi-log.

Recordando o que foi introduzido na disciplina Física Geral e Experimental I, o papel de gráfico log-log é aquele que tem marcado em ambos os eixos uma escala logarítmica e o papel semi-log (ou lin-log ou mono-log) é aquele que tem marcado no eixo da abcissa uma escala linear e no eixo da ordenada uma escala logarítmica.

Assim, use o eixo da abcissa para representar a variável independente do fenômeno e o eixo da ordenada para representar a atividade.

Como você descreve os resultados dos gráficos log-log e semi-log?

Determine, pelo Método dos Mínimos Quadrados, a melhor reta que representa o fenômeno no papel semi-log. Compare esses resultados com os resultados obtidos diretamente do gráfico.

Obtenha a lei que relaciona a atividade com o tempo, considerando a relação entre o logaritmo neperiano (ln) e o logaritmo na base 10.

Os exercícios mostram o uso de diferentes tipos de papel-gráfico (diferentes escalas) e como são obtidas as leis que regem os fenômenos observados. Das análises dos dados experimentais, procura-se a dependência funcional entre as variáveis observadas, que permite extrair uma lei física.

O uso da informática tem possibilitado o tratamento de dados de maneira mais rápida e eficiente. Em um microcomputador dotado de um aplicativo com capacidade de tratar dados e gerar gráficos - EXCEL, LOTUS 123, ORIGIN, etc. - é possível repetir os procedimentos dos exercícios deste experimento. Tente trabalhar com eles e obter as relações e gráficos aqui mostrados.

V – PROCEDIMENTO

PÊNDULO

Utilize um pêndulo para efetuar cinco medidas do período (T) variando a distância entre o centro de massa do objeto e o ponto de sustentação (L), regulando para isto o comprimento do fio do pêndulo. Essa distância deve variar em torno de 5,00 cm até 150 cm, para que os resultados sejam satisfatórios. O objetivo é aplicar o método dos mínimos quadrados para encontrar a relação de dependência entre o período de oscilação do pêndulo e de suas características.

1. Para cada distância (L) meça o tempo de 10 oscilações e divida o tempo por 10, obtendo assim o período de uma oscilação. Qual a vantagem em utilizar 10 oscilações ao invés de uma para medir o período?
2. Faça a primeira medida com o menor tamanho possível do fio.
3. Agora varie o tamanho do fio de 10,0 em 10,0 centímetros até completar o comprimento máximo de 150 cm.

VI – MATERIAL NECESSÁRIO

1. Barbante
2. Objeto cilindrico
3. Cronômetro ou relógio
4. Trena, régua
5. Bases, garras

VII – TRATAMENTO DOS DADOS

1. Com os valores determinados, construa em papel milimetrado o gráfico $T \times L$.
2. Represente os mesmos dados no papel log-log. Que relação parece existir entre T e L?
3. Ajuste os seus dados pelo método dos mínimos quadrados aplicado aos logaritmos das grandezas T e L.
4. Por que não é indicado aplicar as expressões (11) e (12), obtidas pelo Método dos Mínimos Quadrados, diretamente às grandezas T e L?