ANEXO IV

MÉTODO DOS MÍNIMOS QUADRADOS

Se um certo número de medidas é realizado de uma mesma quantidade física e se estas medidas estão sujeitas a erros aleatórios apenas, então a teoria dos mínimos quadrados estabelece que o valor mais provável da quantidade medida é aquele que faz a soma dos quadrados dos erros um mínimo.

Este teorema pode ser aplicado ao caso particular em que se pretende ajustar uma linha reta a um conjunto de pares experimentais.

Suponha que são realizadas várias medidas das grandezas x e y, obtendo-se um conjunto de pontos x_1y_1, x_2y_2, x_3y_3,......., x_ny_n , sendo y uma variável aleatória relacionada a x pela equação de uma reta.

$$y = a \cdot x + b \qquad (1)$$

A equação acima representa o valor esperado (ou valor mais provável) para a variável y, ver figura 1.

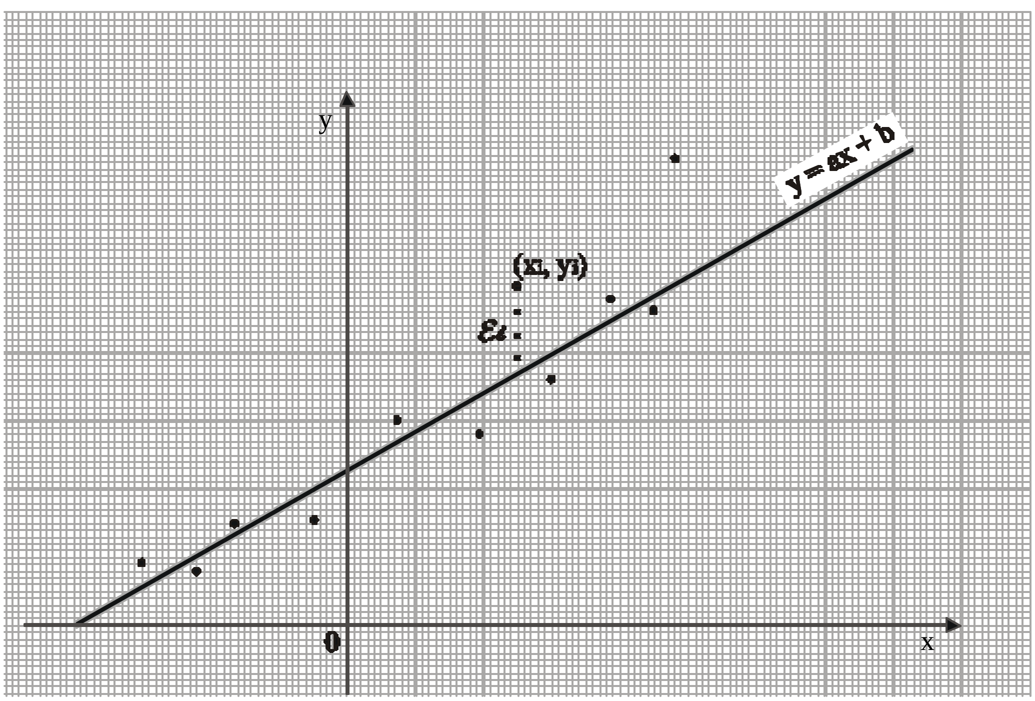

Fig. 1

As estimativas de mínimos quadrados das constantes **a** e **b** são então aqueles valores de a e b que tornam mínima a expressão.

$$\sum_{1}^{n} \mathbf{e}_i^2 = \sum_{i}^{n} \left(y_i - (a \cdot x_i + b) \right)^2 \qquad (2)$$

Pode-se notar facilmente que a expressão acima representa a soma dos quadrados das discrepâncias (ou diferenças) entre o valor observado y_i e o valor esperado para $y = a \cdot x + b$, ver figura 1.

Os melhores valores para as constantes **a** e **b** podem então ser encontrados diferenciando-se a equação 2 com respeito a **a** e **b**, respectivamente, e igualando-se os resultados a zero (condição de mínimo).

$$\frac{\partial \sum \mathbf{e}_i^2}{\partial a} = \sum_{i}^{n} \frac{\partial \left[y_i - (a \cdot x_i + b) \right]^2}{\partial a} = -2 \sum_{i}^{n} \left[x_i \cdot y_i - a \cdot x_i^2 - b \cdot x_i \right] = 0 \qquad (3)$$

$$\frac{\partial \sum \mathbf{e}_i^2}{\partial b} = \sum_{i}^{n} \frac{\partial \left[y_i - (a \cdot x_i + b) \right]^2}{\partial b} = -2 \sum_{i}^{n} \left[y_i - a \cdot x_i^2 - b \right] = 0 \qquad (4)$$

Das equações 3 e 4 obtemos então as equações normais:

$$\sum_{i}^{n} x_i \, . \, y_i = b \sum_{i}^{n} x_i + a \sum_{i}^{n} x_i^2 \qquad (5)$$

$$\sum_{i}^{n} y_i = b \sum_{i}^{n} x_i + a \sum_{i}^{n} x_i \qquad (6)$$

Pela resolução simultânea das equações 5 e 6 para **a** e **b** obtemos:

$$a = \frac{\sum x_i \sum y_i - n \sum (x_i \cdot y_i)}{(\sum x_i)^2 - n \sum x_i^2} \qquad (7)$$

$$b = \frac{\sum (x_i \cdot y_i) \sum x_i - \sum x_i^2 \sum y_i}{(\sum x_i)^2 - n \sum x_i^2} \qquad (8)$$

Define-se ainda um coeficiente da determinação r^2 que assume valores entre 0 e 1 que indica o quão a equação determinada se ajusta aos pontos dados. Quanto mais próximo da unidade, tanto melhor o ajuste.

$$r^2 = \frac{\left(\sum x_i \cdot y_i - \sum x_i \sum \frac{y_i}{n}\right)^2}{\left(\sum x_i^2 - \frac{(\sum x_i)^2}{n}\right)\left(\sum y_i^2 - \frac{(\sum y_i)^2}{n}\right)} \qquad (9)$$

UM EXEMPLO:

Vamos ajustar um segmento retilíneo a um conjunto de oito pontos experimentais.

x	10	20	30	40	50	60	70	80
y	2	5	6	7	10	13	14	15

Solução:

Equação da reta a ser ajustada:

$$y = a \cdot x + b$$

Equação 2, dos quadrados das diferenças, temos:

$$\sum_i^8 \varepsilon_i^2 = \sum_i^8 \left(y_i - (a \,.\, x_i + b)\right)^2$$

Equações 5 e 6, normais temos:

$$\sum_i^8 x_i . y_i = b \sum_i^8 x_i + a \sum_i^n x_i^2$$

$$\sum_i^8 y_i = 8 \cdot b + a \sum_i^8 x_i$$

Resolvendo o sistema de equações anteriores obtemos para a e b

$a = 0{,}191$ e $b = 0{,}428$

A equação ajustada será:

$$y = 0{,}191 \cdot x + 0{,}428$$

e o coeficiente de determinação:

r^2=0,98

Gráfico:

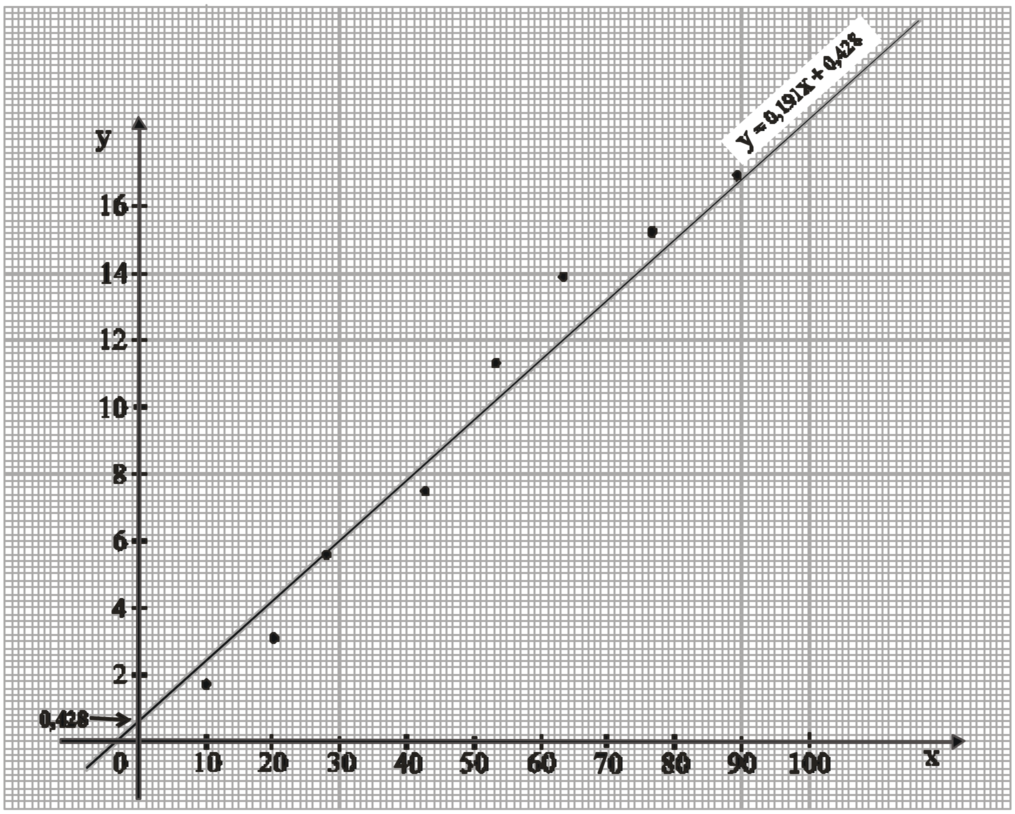

Fig. 2