Método dos mínimos quadrados

No que se segue, apresentamos a obtenção dos coeficientes lineares e angulares de uma reta, através do método dos mínimos quadrados. Esta descrição foi baseada nos trabalhos apresentados em Silva et al. (1999) e Vuolo (1996).

Como não sabemos qual a melhor função para representar os dados, vamos considerar a seguinte função genérica:

$$f(x) = \beta_0 g_0(x) + \beta_1 g_1(x) + \cdots + \beta_m g_m(x) \tag{1}$$

onde β_i são os coeficientes (a serem determinados) e g_i funções contínuas no intervalo considerado. O que queremos é aproximar esta função *f(x)* aos valores determinados experimentalmente, ajustado às funções g e aos coeficientes β acima.

Quando temos é uma série de medidas, x_i, gerando uma série de pontos y_i, é necessário determinarmos uma função que melhor represente estes dados experimentais. Uma forma de fazê-lo é utilizando o conceito (já conhecido) de desvio: $d_i = y_i - f(x_i)$. Nesta equação, d_i é o desvio, y_i o ponto experimental e $f(x_i)$ a função de x_i dada pela eq. (1). Uma boa maneira de obter a função que melhor ajusta aos dados é fazer com que o desvio seja mínimo para todos os pontos = 1, 2, 3, … , n. Logo, definindo:

$$D(\beta_0, \beta_1, \ldots, \beta_m) = \sum_{i=1}^{n} d_i^2 = \sum_{i=1}^{n} [y_i - f(x_i)]^2 =$$

$$= \sum_{i=1}^{n} [y_i - \beta_0 g_0(x) - \beta_1 g_1(x) - \cdots - \beta_n g_n(x)]^2 \tag{2}$$

O método dos mínimos quadrados consiste em derivar parcialmente a função $D(\beta_0, \beta_1, \ldots, \beta_m)$ acima em relação aos coeficientes β_i e igualar estas derivadas a zero (encontrando os pontos de mínimo). Desta forma, encontrase um sistema linear de equações, determinando-se assim os coeficientes β*'s*. Embora este procedimento seja geral e se possa fazê-lo para um número n qualquer, vamos aqui calcular o caso de n= 2. Vamos assumir também $g_0 = 1$ e $g_1 = x$, logo:

$$f(x) = \beta_0 + \beta_1 x$$

Podemos também usar a nomenclatura que já conhecemos:

$$y = b + ax \tag{3}$$

que é a equação de uma reta. Encontrando *b* e *a* estamos encontrando o coeficiente linear e o coeficiente angular, respectivamente. Usando a eq. (2), teremos:

$$D(b, a) = \sum [y_i - b - ax_i]^2 \tag{4}$$

onde suprimimos os índices do somatório para simplificar a notação. Derivando com relação a *b* e *a*, temos:

$$\frac{\partial D}{\partial b} = (-2)\sum[y_i - b - ax_i] \tag{5}$$

$$\frac{\partial D}{\partial a} = (-2x_i)\sum[y_i - b - ax_i] \tag{6}$$

Igualando as derivadas a zero (pontos de mínimo) e rearranjando os termos, obtemos:

$$bn + a\sum x_i = \sum y_i$$

$$b\sum x_i + a\left(\sum x_i\right)^2 = \sum x_i y_i$$

É fácil provar agora que os coeficientes *b* e *a* são dados, respectivamente, por:

$$a = \frac{N\sum x_i y_i - \sum x_i \sum y_i}{N\sum x_i^2 - (\sum x_i)^2} \tag{7}$$

$$b = \frac{\sum x_i^2 \sum y_i - \sum x_i \sum x_i y_i}{N\sum x_i^2 - (\sum x_i)^2} \tag{8}$$

O coeficiente *b* também pode ser calculado utilizando uma forma mais simples, eq. (9), quando já tem-se o coeficiente *a* calculado.

$$b = \frac{\sum y_i - a\sum x_i}{N} \tag{9}$$

Os desvios associados a estas constantes serão dados por:

$$\sigma_b = \sqrt{\frac{D}{N-2}\left[\frac{\sum x_i^2}{N\sum x_i^2 - (\sum x_i)^2}\right]} \tag{10}$$

$$\sigma_a = \sqrt{\frac{D}{N-2}\left[\frac{1}{N\sum x_i^2 - (\sum x_i)^2}\right]} \tag{11}$$

onde, nesta equação, *D* é a soma quadrática dos resíduos, dada pela eq. (4).

Referências:

Silva, M. F. da e colaboradores, Mecânica Física I Experimental, (Roteiro das Experiências do Instituto de Física da UERJ, 1999)

Vuolo, J. H. Fundamentos da Teoria de Erros, Ed. Edgard Blücher LTDA., São Paulo, Segunda Edição (1996).