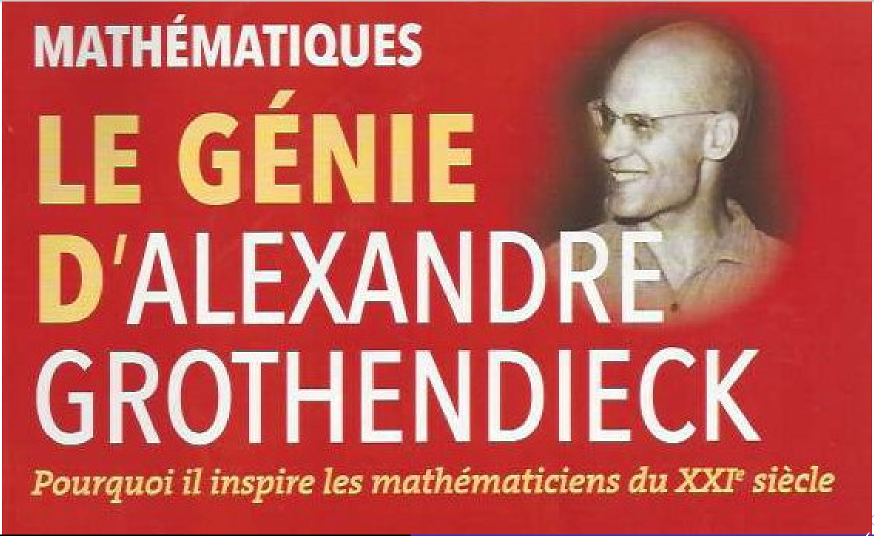
Departamento de Física Experimental

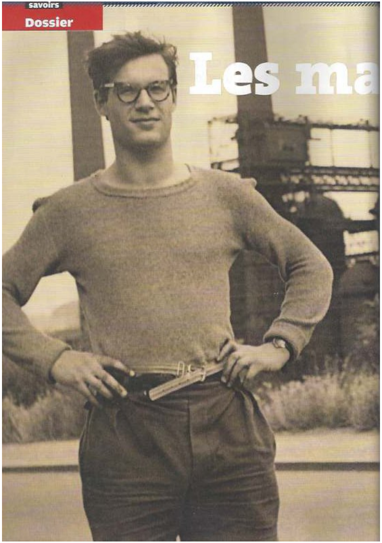
Máxima Verossimilhança
Método dos Mínimos Quadrados
(Alexandre Grothendieck)

20-21 de maio de 2014

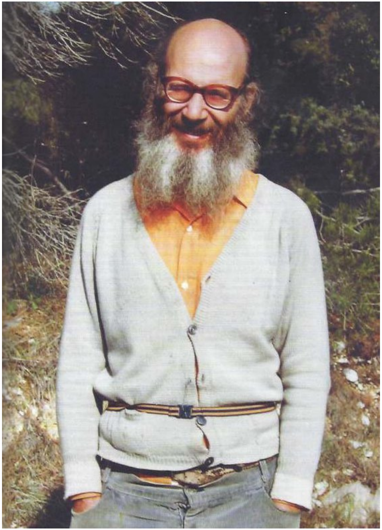
Paulo R. Pascholati

Alexandre Grothendieck - 1928 –
Recherche, 486 (2014) 26-41.





1951



1991?

Prólogo

Nesta apresentação são tratados o Método da Máxima Verossimilhança sua aplicação ao Método dos Mínimos Quadrados e a dedução das expressões deste para funções simples.

Alexandre Grothendieck, 1928 – , matemático nascido alemão, apátrida até 1972 e então francês, ganhou a medalha Fields em 1966 e o prêmio Crafoord em 1998.

Capa da revista La Recherche 486 (2014) *O gênio Alexandre Grothendieck – Porque ele inspira os matemáticos do século XXI.*

Dia do Físico – 2014

CÂMARA MUNICIPAL DE
SÃO PAULO
PRESIDÊNCIA

O Presidente da Câmara Municipal de São Paulo, Vereador José Américo, tem a honra de convidar para a Sessão Solene em Comemoração ao DIA DO FÍSICO, por iniciativa do Vereador Eliseu Gabriel.

Dia 28 de maio de 2014, às 11 horas

Instituto de Física da Universidade de São Paulo
Rua do Matão Travessa R, 187
Cidade Universitária São Paulo/USP – SP

Solução para um problema sem solução - Helene 2013

Suponha que se pretenda determina o valor de três grandezas, a_0, b_0 e c_0 desconhecidas, a partir de medições independentemente e de forma combinada obtendo as equações

$$
\begin{aligned}
a_0 &\approx -0,5 \\
a_0 + b_0 &\approx 4,5 \\
b_0 + c_0 &\approx 4,5 \\
c_0 &\approx 4,0
\end{aligned}
$$

O símbolo $\approx$ é utilizado para enfatizar que os resultados experimentais possuem erro.
Esse sistema de quatro equações a três incógnitas formam um sistema inconsitente e, portanto, não tem solução.

Solução para um problema sem solução - Helene 2013

Suponha que se pretenda determina o valor de três grandezas, a_0, b_0 e c_0 desconhecidas, a partir de medições independentemente e de forma combinada obtendo as equações

$$\begin{aligned} a_0 &\approx -0,5 \\ a_0 + b_0 &\approx 4,5 \\ b_0 + c_0 &\approx 4,5 \\ c_0 &\approx 4,0 \end{aligned}$$

O símbolo $\approx$ é utilizado para enfatizar que os resultados experimentais possuem erro.
Esse sistema de quatro equações a três incógnitas formam um sistema inconsitente e, portanto, não tem solução.

O que fazer para encontrar estimativas para os parâmetros a_0, b_0 e c_0?

Solução para um problema sem solução - Helene 2013

Uma solução é encontrar os valores $\tilde{a}$, $\tilde{b}$ e $\tilde{c}$ que minimizem a soma quadrática das diferenças entre os lados das equações

$$Q^2(a,b,c) = (a+0,5)^2 + (a+b-4,5)^2 + (b+c-4,5)^2 + (c-4,0)^2$$

$$\frac{\partial Q^2}{\partial a}\Big|_{\tilde{a},\tilde{b},\tilde{c}} = 0$$
$$\frac{\partial Q^2}{\partial b}\Big|_{\tilde{a},\tilde{b},\tilde{c}} = 0$$
$$\frac{\partial Q^2}{\partial c}\Big|_{\tilde{a},\tilde{b},\tilde{c}} = 0$$

A solução dessa equações levam ao sistemaq de equações

$$2\tilde{a} + \tilde{b} = 4$$
$$\tilde{a} + 2\tilde{b} + \tilde{c} = 9$$
$$2\tilde{b} + 4\tilde{c} = 17$$

A soluções são $\tilde{a} = 0,625$, $\tilde{b} = 2,750$ e $\tilde{c} = 2,875$.

Método da Máxima Verossimilhança - Segundo Vuolo

Num processo de medição de duas variáveis x e y, os resultados são chamados de *pontos experimentais*, porque cada par de resultados x e y pode ser representado como um ponto no gráfico $y \times x$.
Os resultados de N medições de x e y podem ser representados como o conjunto de pontos experimentais:

$$\{x_1, y_1, s_1\}, \{x_2, y_2, s_2\}, \cdots, \{x_i, y_i, s_i\}, \cdots \{x_N, y_N, s_N\},$$

com x_i e y_i são os resultados da i-ésima medição e s_i é a incerteza estatística combinada de x_i e y_i.

Método da Máxima Verossimilhança - Segundo Vuolo

A melhor função $f(x)$ para descrever um conjunto de pontos experimentais é tal que esse conjunto de pontos é o mais verossímil possível se a função $f(x)$ é admitida como função verdadeira.

Método dos Mínimos Quadrados
Dedução do Método

O método de mínimos quadrados para ajuste de uma função $f(x)$ a um conjunto de pontos experimentais pode ser deduzido do método da máxima verossimilhança, quando as seguintes condições são satisfeitas:

- as distribuições de erros são gaussianas; e
- a melhor função $f(x)$ deve ser determinada a partir de uma função geral $f(x; a_1, a_2, \cdots, a_p)$

A probabilidade $P(x_i)$ de se obter um resultado qualquer $\{x_i, y_i, s_i\}$ é proporcional à função densidade de probabilidade

$$P_i = \frac{C}{s_i} e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{y_i-\mu_i}{s_i}\right)^2}$$

onde μ_i é o valor médio verdadeiro correspondente a y_i e C uma constante de proporcionalidade necessária para que a função densidade de probabilidade seja normalizada.

Método dos Mínimos Quadrados
Dedução do Método

A probabilidade P de que ocorra o conjunto de resultados $\{x_i, y_i, s_i\}$ é o produto das probabilidades de cada resultado:

$$P_{1,2,\ \ldots,N} = P_1 P_2 \cdots P_N = \prod_{1 \leq i \leq N} \frac{C}{s_i} e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{y_i - \mu_i}{s_i}\right)^2}$$

$$= \frac{C^N}{s_1 s_2 \cdots s_N} e^{-\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N}\left(\frac{y_i - \mu_i}{s_i}\right)^2} \qquad (1)$$

colocando no lugar de μ_i a função $f(x; a_1, a_2, \cdots, a_p)$

$$P_{1,2,\ \ldots,N} = \frac{C^n}{s_1 s_2 \cdots s_N} e^{-\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N}\left(\frac{y_i - f(x; a_1, a_2, \cdots, a_p)}{s_i}\right)^2} \qquad (2)$$

Método dos Mínimos Quadrados
Dedução do Método

$$P_{1,2,\ \ldots,N} = \frac{C^N}{s_1 s_2 \cdots s_N} e^{-\frac{1}{2}Q^2} \tag{3}$$

com

$$Q^2 = \sum_{i=1}^{N} \left(\frac{y_i - f(x; a_1, a_2, \cdots, a_p)}{s_i} \right)^2 . \tag{4}$$

Os parâmetros $a_1, a_2, \ldots, a_p$ devem ser tais para que a probabilidade $P_{1,2,\ \ldots,N}$ seja máxima. Uma vez que $P_{1,2,\ \ldots,N}$ é uma função decrescente de Q^2, um máximo de $P_{1,2,\ \ldots,N}$ ocorre quando Q^2 é mínimo.

Em resumo, se $f(x; a_1, a_2, \cdots, a_p)$ é uma função previamente escolhida, os parâmetros $a_1, a_2, \ldots, a_p$ devem ser tais que minimizem a soma dos quadrados da expressão acima.

Método dos Mínimos Quadrados

Dedução do Método

$$\left.\frac{\partial Q^2}{\partial a_j}\right|_{\tilde{a}_1,\tilde{a}_2,\ldots,\tilde{a}_p} = \frac{\partial}{\partial a_j}\sum_{i=1}^{N}\left(\frac{y_i - f(x; a_1, a_2, \cdots, a_p)}{s_i}\right)^2\Bigg|_{\tilde{a}_1,\tilde{a}_2,\ldots,\tilde{a}_p} = 0 \tag{5}$$

para cada j, $\{j \mid 1 \leq j \leq p\}$. Isso conduz a um conjunto de p equações a p incógnitas que deve ser resolvido para encontrar os valores $\tilde{a}_j$ que minimizem Q^2.

Mínimos Quadrados

Ajuste de Constante com Incertezas Iguais

$$Q^2 = \sum_{i=1}^{N} (x_i - a)^2 \tag{6}$$

$$\frac{dQ^2}{da}\Big|_{\tilde{a}} = 0 \tag{7}$$

$$\frac{dQ^2}{da} = \frac{d}{da}\sum_{i=1}^{N}(x_i - a)^2 = \sum_{i=1}^{N}\frac{d}{da}(x_i - a)^2 \tag{8}$$

$$= \sum_{i=1}^{N} 2(x_i - a)\frac{d}{da}(x_i - a) = \sum_{i=1}^{N} 2(x_i - a)(-1) \tag{9}$$

$$= \sum_{i=1}^{N} x_i - \sum_{i=1}^{N} a = \sum_{i=1}^{N} x_i - a\sum_{i=1}^{N} 1 = \sum_{i=1}^{N} x_i - Na \tag{10}$$

Método dos Mínimos Quadrados

Ajuste de Constante com Incertezas Iguais

$$\frac{d}{da}\left(\sum_{i=1}^{N} x_i - a\sum_{i=1}^{N} 1\right)\Big|_{\tilde{a}} = 0$$

$$\sum_{i=1}^{N} x_i = N\tilde{a}$$

$$\tilde{a} = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} x_i$$

Lembrando que:

$$\sigma^2 = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}(x_i - \mu)^2 \quad \text{desvio padrão da população}$$

$$s^2 = \frac{1}{N-1}\sum_{i=1}^{N}(x_i - \tilde{a})^2 \quad \text{desvio padrão da amostra}$$

Método dos Mínimos Quadrados

Ajuste de Constante com Incertezas Diferentes

$$Q^2 = \sum_{i=1}^{N} \left(\frac{x_i - a}{s_i} \right)^2$$

$$\left. \frac{dQ^2}{da} \right|_{\tilde{a}} = 0$$

$$\frac{dQ^2}{da} = \frac{d}{da} \sum_{i=1}^{N} \left(\frac{x_i - a}{s_i} \right)^2$$

$$= \sum_{i=1}^{N} \frac{d}{da} \left(\frac{x_i - a}{s_i} \right)^2 = \sum_{i=1}^{N} 2 \left(\frac{x_i - a}{s_i} \right) \frac{-1}{s_i}$$

$$\frac{dQ^2}{da} = \sum_{i=1}^{N} \frac{x_i}{s_i^2} - \sum_{i=1}^{N} \frac{a}{s_i^2}$$

Método dos Mínimos Quadrados

Ajuste de Constante com Incertezas Diferentes

$$\frac{d}{da}\left(\sum_{i=1}^{N}\frac{x_i}{s_i^2} - a\sum_{i=1}^{N}\frac{1}{s_i^2}\right)\Big|_{\tilde{a}} = 0 \quad \rightarrow \quad \sum_{i=1}^{N}\frac{x_i}{s_i^2} - \tilde{a}\sum_{i=1}^{N}\frac{1}{s_i^2} = 0$$

$$\tilde{a} = \frac{\left(\sum_{i=1}^{N}\frac{x_i}{s_i^2}\right)}{\sum_{i=1}^{N}\frac{1}{s_i^2}}$$

$$s_m^2 = \frac{1}{\sum_{i=1}^{N}\frac{1}{s_i^2}}$$

Método dos Mínimos Quadrados

Ajuste de Constante com Incertezas Diferentes

$$\frac{d}{da}\left(\sum_{i=1}^{N}\frac{x_i}{s_i^2} - a\sum_{i=1}^{N}\frac{1}{s_i^2}\right)\Bigg|_{\tilde{a}} = 0 \quad \rightarrow \quad \sum_{i=1}^{N}\frac{x_i}{s_i^2} - \tilde{a}\sum_{i=1}^{N}\frac{1}{s_i^2} = 0$$

$$\tilde{a} = \frac{\left(\sum_{i=1}^{N}\frac{x_i}{s_i^2}\right)}{\sum_{i=1}^{N}\frac{1}{s_i^2}}$$

$$s_m^2 = \frac{1}{\sum_{i=1}^{N}\frac{1}{s_i^2}}$$

se $s_1 = s_2 = \cdots = s_N$

$$s_m^2 = \frac{1}{\sum_{i=1}^{N}\frac{1}{s^2}} = \frac{1}{\frac{1}{s^2}\sum_{i=1}^{N}1}$$

$$s_m^2 = \frac{s^2}{N} \Longrightarrow s_m = \frac{s}{\sqrt{N}}$$

Método dos Mínimos Quadrados
Ajuste de Reta - Dedução

$$Q^2 = \sum_{i=1}^{N} \left(\frac{y_i - (ax_i + b)}{s_i} \right)^2 \Longrightarrow \text{mínimo}$$

$$\left. \frac{\partial Q^2}{\partial a} \right|_{\tilde{a},\tilde{b}} = 0 \qquad\qquad \left. \frac{\partial Q^2}{\partial b} \right|_{\tilde{a},\tilde{b}} = 0$$

$$\frac{\partial Q^2}{\partial a} = \frac{\partial}{\partial a} \sum_{i=1}^{N} \left(\frac{y_i - (ax_i + b)}{s_i} \right)^2 = \sum_{i=1}^{N} \frac{\partial}{\partial a} \left(\frac{y_i - (ax_i + b)}{s_i} \right)^2$$

$$= \sum_{i=1}^{N} 2 \left(\frac{y_i - (ax_i + b)}{s_i} \right) \frac{\partial}{\partial a} \left(\frac{y_i - (ax_i + b)}{s_i} \right)$$

$$= \sum_{i=1}^{N} 2 \left(\frac{y_i - (ax_i + b)}{s_i} \right) \frac{\partial}{\partial a} \left(\frac{-(ax_i + b)}{s_i} \right)$$

Método dos Mínimos Quadrados

Ajuste de Reta - Dedução

$$= \sum_{i=1}^{N} 2\left(\frac{y_i - (ax_i + b)}{s_i}\right)\frac{\partial}{\partial a}\left(\frac{-(ax_i + b)}{s_i}\right)$$

$$= \sum_{i=1}^{N} 2\left(\frac{y_i - (ax_i + b)}{s_i}\right)\left(\frac{(-x_i)}{s_i}\right)$$

$$\sum_{i=1}^{N}\left(\frac{y_i - (ax_i + b)}{s_i}\right)\left(\frac{x_i}{s_i}\right)$$

$$= \sum_{i=1}^{N}\left(\frac{y_i x_i - ax_i^2 - bx_i}{s_i^2}\right)$$

$$= \sum_{i=1}^{N}\left(\frac{y_i x_i}{s_i^2}\right) + \sum_{i=1}^{N}\left(\frac{-ax_i^2}{s_i^2}\right) + \sum_{i=1}^{N}\left(\frac{-bx_i}{s_i^2}\right)$$

Método dos Mínimos Quadrados

Ajuste de Reta - Dedução

$$\left.\frac{\partial Q^2}{\partial a}\right|_{\tilde{a},\tilde{b}} = \sum_{i=1}^{N}\left(\frac{y_i x_i}{s_i^2}\right) + \sum_{i=1}^{N}\left(\frac{-\tilde{a}x_i^2}{s_i^2}\right) + \sum_{i=1}^{N}\left(\frac{-\tilde{b}x_i}{s_i^2}\right) = 0$$

$$\sum_{i=1}^{N}\left(\frac{\tilde{a}x_i^2}{s_i^2}\right) + \sum_{i=1}^{N}\left(\frac{\tilde{b}x_i}{s_i^2}\right) = \sum_{i=1}^{N}\left(\frac{y_i x_i}{s_i^2}\right)$$

$$\tilde{a}\sum_{i=1}^{N}\left(\frac{x_i^2}{s_i^2}\right) + \tilde{b}\sum_{i=1}^{N}\left(\frac{x_i}{s_i^2}\right) = \sum_{i=1}^{N}\left(\frac{y_i x_i}{s_i^2}\right)$$

$$\tilde{a}s_{x^2} + \tilde{b}s_x = s_{yx}$$

Método dos Mínimos Quadrados

Ajuste de Reta - Dedução

$$\left.\frac{\partial Q^2}{\partial b}\right|_{\tilde{a},\tilde{b}} = 0$$

$$\frac{\partial Q^2}{\partial b} = \frac{\partial}{\partial b}\sum_{i=1}^{N}\left(\frac{y_i - (ax_i + b)}{s_i}\right)^2 = \sum_{i=1}^{N}\frac{\partial}{\partial b}\left(\frac{y_i - (ax_i + b)}{s_i}\right)^2$$

$$= \sum_{i=1}^{N} 2\left(\frac{y_i - (ax_i + b)}{s_i}\right)\frac{\partial}{\partial b}\left(\frac{y_i - (ax_i + b)}{s_i}\right)$$

$$= \sum_{i=1}^{N} 2\left(\frac{y_i - (ax_i + b)}{s_i}\right)\frac{\partial}{\partial b}\left(\frac{-(ax_i + b)}{s_i}\right)$$

$$= \sum_{i=1}^{N} 2\left(\frac{y_i - (ax_i + b)}{s_i}\right)\left(\frac{-1}{s_i}\right)$$

Método dos Mínimos Quadrados

Ajuste de Reta - Dedução

$$\frac{\partial Q^2}{\partial b} = \sum_{i=1}^{N} \left(\frac{y_i - (ax_i + b)}{s_i} \right) \left(\frac{1}{s_i} \right) = \sum_{i=1}^{N} \left(\frac{y_i - ax_i - b}{s_i^2} \right)$$

$$\left.\frac{\partial Q^2}{\partial b}\right|_{\tilde{a},\tilde{b}} = \left(\sum_{i=1}^{N} \left(\frac{y_i}{s_i^2} \right) + \sum_{i=1}^{N} \left(\frac{-ax_i}{s_i^2} \right) + \sum_{i=1}^{N} \left(\frac{-b}{s_i^2} \right) \right) \Bigg|_{\tilde{a},\tilde{b}} = 0$$

$$\sum_{i=1}^{N} \left(\frac{\tilde{a}x_i}{s_i^2} \right) + \sum_{i=1}^{N} \left(\frac{\tilde{b}}{s_i^2} \right) = \sum_{i=1}^{N} \left(\frac{y_i}{s_i^2} \right)$$

$$\tilde{a} \sum_{i=1}^{N} \left(\frac{x_i}{s_i^2} \right) + \tilde{b} \sum_{i=1}^{N} \left(\frac{1}{s_i^2} \right) = \sum_{i=1}^{N} \left(\frac{y_i}{s_i^2} \right)$$

$$\tilde{a} s_x + \tilde{b} s_s = s_y$$

Método dos Mínimos Quadrados

Ajuste de Reta - Dedução

$$\tilde{a}s_{x^2} + \tilde{b}s_x = s_{yx}$$
$$\tilde{a}s_x + \tilde{b}s_s = s_y$$

$$\tilde{a} = \frac{\begin{vmatrix} s_{yx} & s_x \\ s_y & s_s \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} s_{x^2} & s_x \\ s_x & s_s \end{vmatrix}} = \frac{s_{yx}s_s - s_y s_x}{s_{x^2}s_s - s_x s_x} \quad \text{com} \quad s_{\tilde{a}}^2 = \frac{s_s}{s_{x^2}s_s - s_x s_x}$$

$$\tilde{b} = \frac{\begin{vmatrix} s_{x^2} & s_{yx} \\ s_x & s_y \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} s_{x^2} & s_x \\ s_x & s_s \end{vmatrix}} = \frac{s_{x^2}s_y - s_x s_{yx}}{s_{x^2}s_s - s_x s_x} \quad \text{com} \quad s_{\tilde{b}}^2 = \frac{s_{x^2}}{s_{x^2}s_s - s_x s_x}$$

Método dos Mínimos Quadrados

Ajute de Polinômio de Grau k

$$Q^2 = \sum_{i=1}^{N} \left[\frac{1}{s_i} \left(y_i - \sum_{j=1}^{k} a_j f_j(x_i) \right) \right]^2 \Longrightarrow \text{mínimo}$$

no caso de polinômio de grau $m-1$ temos $f_1(x_i) = 1,\ f_2(x_i) = x_i,$ $\cdots\ , f_k(x_i) = x_i^{-1}$ haverá k equações como

$$\frac{\partial Q^2}{\partial a_l} = \frac{\partial}{\partial a_l} \sum_{i=1}^{N} \left[\frac{1}{s_i} \left(y_i - \sum_{j=1}^{k} a_j f_j(x_i) \right) \right]^2$$

$$= \sum_{i=1}^{N} \frac{\partial}{\partial a_l} \left[\frac{1}{s_i} \left(y_i - \sum_{j=1}^{k} a_i f_j(x_i) \right) \right]^2$$

$$= \sum_{i=1}^{N} 2 \left\{ \left[\frac{1}{s_i} \left(y_i - \sum_{j=1}^{k} a_j f_j(x_i) \right) \right] \frac{\partial}{\partial a_l} \left[\frac{1}{s_i} \left(y_i - \sum_{j=1}^{k} a_j f_j(x_i) \right) \right] \right\}$$

Método dos Mínimos Quadrados
Ajute de Polinômio de Grau k

$$= \sum_{i=1}^{N} 2\left\{\left[\frac{1}{s_i}\left(y_i - \sum_{j=1}^{k} a_j f_j(x_i)\right)\right]\left(-\frac{1}{s_i}\frac{\partial}{\partial a_l}\sum_{j=1}^{k} a_j f_j(x_i)\right)\right\}$$

$$= -2\sum_{i=1}^{N}\left\{\left[\frac{1}{s_i}\left(y_i - \sum_{j=1}^{k} a_j f_j(x_i)\right)\right]\left(\frac{1}{s_i}\sum_{j=1}^{k}\frac{\partial}{\partial a_l} a_j f_j(x_i)\right)\right\}$$

$$= -2\sum_{i=1}^{N}\left\{\left[\frac{1}{s_i}\left(y_i - \sum_{j=1}^{k} a_j f_j(x_i)\right)\right]\left(\frac{1}{s_i}\sum_{j=1}^{k}\delta_{lj} f_j(x_i)\right)\right\}$$

$$= -2\sum_{i=1}^{N}\left\{\left[\frac{1}{s_i^2}\left(y_i - \sum_{j=1}^{k} a_j f_j(x_i)\right)\right](f_l(x_i))\right\}$$

Método dos Mínimos Quadrados

Ajuste de Polinômio de Grau k

$$\left.\frac{\partial Q^2}{\partial a_l}\right|_{\tilde{a}_l} = -2\sum_{i=1}^{N}\left[\frac{f_l(x_i)}{s_i^2}\left(y_i - \sum_{j=1}^{k}\tilde{a}_j f_j(x_i)\right)\right] = 0$$

$$\sum_{j=1}^{k}\tilde{a}_j \sum_{i=1}^{N}\frac{f_j(x_i)f_l(x_i)}{s_i^2} = \sum_{i=1}^{N}\frac{y_i f_l(x_i)}{s_i^2}$$

no caso de polinômio $f_k(x_i) = x_i^{k-1}$

$$\sum_{j=1}^{k}\tilde{a}_j \sum_{i=1}^{N}\frac{x_i^{j-1}x_i^{l-1}}{s_i^2} = \sum_{i=1}^{N}\frac{y_i x_i^{l-1}}{s_i^2} \quad \text{com} \quad 1 \leq l \leq k$$

Método dos Mínimos Quadrados

Método dos Mínimos Quadrados com Formalismo Matricial - Helene

$$Y = X \cdot A + e \tag{11}$$

onde

$$\begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \\ \vdots \\ y_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x_{1,1} & x_{1,2} & \cdots & x_{1,j} \\ x_{2,1} & x_{2,2} & \cdots & x_{2,j} \\ x_{1,1} & x_{1,2} & \cdots & x_{3,j} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ x_{n,1} & x_{n,2} & \cdots & x_{n,j} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \\ \vdots \\ a_j \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} e_1 \\ e_2 \\ e_3 \\ \vdots \\ e_n \end{bmatrix} \tag{12}$$

com

$$x_{ij} = \frac{\partial y_i}{\partial a_j} \cdot \tag{13}$$

Método dos Mínimos Quadrados

Método dos Mínimos Quadrados com Formalismo Matricial - Helene

O valor $Q^2(A)$ pode ser escrito como:

$$Q^2(A) = (Y - X \cdot A)^t \cdot V^{-1} \cdot (Y - X \cdot A) \tag{14}$$

com V a matriz de covariância dos dados experimentais.

Da minimização de $Q^2(A)$ se obtem a solução para os parâmetros a_j,

$$\tilde{A} = (X^t \cdot V^{-1} \cdot X)^{-1} \cdot X^t \cdot V^{-1} \cdot Y \tag{15}$$

A matriz de covariância dos parâmetros $a's$ é obtida por propagação

$$V_{\tilde{A}} = (X^t \cdot V^{-1} \cdot X)^{-1} \tag{16}$$

Método dos Mínimos Quadrados

Método dos Mínimos Quadrados com Formalismo Matricial - Helene

O valor $Q^2(\tilde{A}) = \chi$ pode ser escrito como:

$$\chi = (Y - X \cdot \tilde{A})^t \cdot V^{-1} \cdot (Y - X \cdot \tilde{A}) \tag{17}$$

com V a matriz de covariância dos dados experimentais, $V_{i,j} = s^2_{i,j}$.

$$\begin{bmatrix} V_{1,1} & V_{1,2} & \cdots & V_{1,i} \\ V_{2,1} & V_{2,2} & \cdots & V_{2,i} \\ V_{3,1} & V_{3,2} & \cdots & V_{3,i} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ V_{i,1} & V_{i,2} & \cdots & V_{i,i} \end{bmatrix} \tag{18}$$

Método dos Mínimos Quadrados

Método dos Mínimos Quadrados com Formalismo Matricial - Helene - Caso Reta

$$Y = X \cdot A + e \tag{19}$$

onde

$$\begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x_1 & 1 \\ x_2 & 1 \\ \vdots & \vdots \\ x_n & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} e_1 \\ e_2 \\ \vdots \\ e_n \end{bmatrix} \tag{20}$$

supondo que não haja covariância entre os resultados das medições

$$\begin{bmatrix} s_1^2 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & s_2^2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & s_n^2 \end{bmatrix} \tag{21}$$

Método dos Mínimos Quadrados

Método dos Mínimos Quadrados com Formalismo Matricial - Helene - Polinômio Grau 2

$$Y = X \cdot A + e \tag{22}$$

onde

$$\begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \\ \vdots \\ y_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x_1^2 & x_1 & 1 \\ x_2^2 & x_2 & 1 \\ x_3^2 & x_3 & 1 \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ x_n^2 & x_n & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} e_1 \\ e_2 \\ e_3 \\ \vdots \\ e_n \end{bmatrix} \tag{23}$$

a matriz de covariância, V, é a mesma do caso da reta.

Exercício: Ajuste de Reta a Dados

Considere os dados experimentais $\{x_i, y_i, s_i\}$ com s_i a incerteza combinada de x_i e y_i. Encontre os parâmetros da equação $y = ax + b$ que representa a função verdadeira dos dados.

x	y	s
1	4,9	0,9
3	14,2	1,4
5	26,2	1,7
7	34,6	2,0
9	44,7	2,1

Exercício: Ajuste de Reta a Dados

$$\tilde{a}s_{x^2} + \tilde{b}s_x = s_{yx}$$
$$\tilde{a}s_x + \tilde{b}s_s = s_y$$

$$\tilde{a} = \frac{\begin{vmatrix} s_{yx} & s_x \\ s_y & s_s \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} s_{x^2} & s_x \\ s_x & s_s \end{vmatrix}} = \frac{s_{yx}s_s - s_y s_x}{s_{x^2}s_s - s_x s_x} \quad \text{com} \quad s_{\tilde{a}}^2 = \frac{s_s}{s_{x^2}s_s - s_x s_x}$$

$$\tilde{b} = \frac{\begin{vmatrix} s_{x^2} & s_{yx} \\ s_x & s_y \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} s_{x^2} & s_x \\ s_x & s_s \end{vmatrix}} = \frac{s_{x^2}s_y - s_x s_{yx}}{s_{x^2}s_s - s_x s_x} \quad \text{com} \quad s_{\tilde{b}}^2 = \frac{s_{x^2}}{s_{x^2}s_s - s_x s_x}$$

Exercício: Ajuste de Reta a Dados

$$s_s = \sum_{i=1}^{5} \frac{1}{s_i} = \frac{1}{0,9^2} + \frac{1}{1,4^2} + \frac{1}{1,7^2} + \frac{1}{2,0^2} + \frac{1}{2,1^2}$$

$$s_x = \sum_{i=1}^{5} \frac{x_i}{s_i} = \frac{1}{0,9^2} + \frac{3}{1,4^2} + \frac{5}{1,7^2} + \frac{7}{2,0^2} + \frac{9}{2,1^2}$$

$$s_{x^2} = \sum_{i=1}^{5} \frac{x_i^2}{s_i} = \frac{1^2}{0,9^2} + \frac{3^2}{1,4^2} + \frac{5^2}{1,7^2} + \frac{7^2}{2,0^2} + \frac{9^2}{2,1^2}$$

$$s_{xy} = \sum_{i=1}^{5} \frac{x_i}{s_i} = \frac{1 \cdot 4,9}{0,9^2} + \frac{3 \cdot 14,2}{1,4^2} + \frac{5 \cdot 26,2}{1,7^2} + \frac{7 \cdot 34,6}{2,0^2} + \frac{9 \cdot 44,7}{2,1^2}$$

Exemplo de Ajuste Não Linear - Helene-Vanin 1981

Considere o conjunto de valores experimentais $\{x_i, y_i, s_i\}$ que seguem o modelo representado pela função não linear nos parâmetros $(a \cdot b)$

$$y = a + bx + abx^2$$

Pode-se proceder da seguinte forma: escolher valores iniciais adequados, a_0 e b_0, de tal que

$$a = a_0 + \delta a$$
$$b = b_0 + \delta b$$

onde δa e δb são correções a a e b.
Substituindo na equação para y

$$\begin{aligned} y &= (a_0 + \delta a) + (b_0 + \delta b)x + (a_0 + \delta a)(b_0 + \delta b)x^2 \\ &= a_0 + b_0 x + a_0 b_0 x^2 + (1 + b_0 x^2)\delta a + (x + a_0 x^2)\delta b + \delta a \delta b\ x^2 \end{aligned}$$

Exemplo de Ajuste Não Linear - Helene-Vanin 1981

Tomando

$$y' = y - a_0 - b_0\ x - a_0 b_0\ x^2$$
$$x' = 1 + b_0\ x^2$$
$$x'' = x + a_0\ x^2$$

Pode-se escrever que

$$y' = \delta a\ x' + \delta b\ x'' + \delta a \delta b\ x^2$$

Se os valores escolhidos a_0 e b_0 escolhidos são próximos dos valores que maximizam a probalidade de ter sido obtido esse conjunto de valores, as correções δa e δb são pequenas e então o produto $\delta a \delta b$ pode ser desprezado. A equação se torna

$$y' = \delta a\ x' + \delta b\ x''$$

Exemplo de Ajuste Não Linear - Helene-Vanin 1981

Agora basta minimizar a função

$$Q^2 = \sum_{i=1}^{N} \frac{(y' - (\delta a \ x' + \delta b \ x''))^2}{s_{y_i}^2}$$