MÉTODOS GRÁFICOS

1. INTRODUÇÃO:

Um gráfico é uma maneira conveniente de se representar uma relação entre valores experimentais (ou valores teóricos) de duas ou mais grandezas, de forma a facilitar a visualização, a interpretação e a obtenção da função matemática que exprime aquela relação. Um gráfico é composto por dois ou mais eixos perpendiculares entre si, cada um dos quais representando uma grandeza.

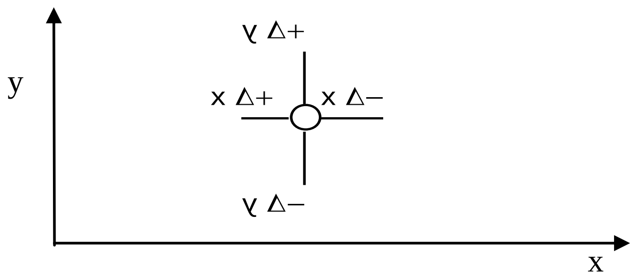
Para se construir um gráfico, deve-se estabelecer uma escala para cada eixo, de forma que todos os pontos de interesse para cada grandeza, que são as coordenadas dos eixos selecionados, possam ser representados independentemente do intervalo de variação dos valores e/ou do comprimento dos eixos.

Existem dois tipos principais de escala: milimetrada e logarítmica. Combinando-se esses dois tipos, originam-se três tipos de papel para gráfico:

1. Milimetrado: Todas as escalas milimetradas;
2. Mono-log: Uma escala milimetrada e outra logarítmica;
3. Di-log ou log-log: As duas escalas logarítmicas.

Algumas regras utilizadas na construção de um gráfico:

1. Escolher escalas convenientes para cada eixo, examinando os dados experimentais.
   Todos os dados devem ser colocados no gráfico.
2. Colocar um título para o gráfico e em cada eixo os nomes das grandezas, com suas respectivas unidades.
3. Em cada eixo devem ser colocados somente alguns números que definam as escalas utilizadas. Os valores das coordenadas dos pontos pertencentes ao gráfico não precisam ser escritos nos eixos.
4. Pode-se construir várias curvas ou gráficos num mesmo papel, bastando que se distinga cada uma com símbolos diferentes (+,*, o, Δ, □, etc.) e que se faça uma legenda para identificá-las.
5. Quando a cada ponto estiver associado um ou mais desvios, o gráfico deverá trazer esta informação, desta forma:



2. CONSTRUÇÃO DE UMA ESCALA:

a) Linear ou milimetrada:

Suponha um eixo de comprimento **L** (mm) sobre o qual se quer representar um conjunto de valores de uma grandeza **x**. Seja **X** a diferença entre o máximo e o mínimo valores de **x** presentes no conjunto de pontos. A escala a ser utilizada deve ser a seguinte:

$m = \frac{L}{X}$ mm/unidade de **x**

Na verdade, convém escolher um valor de **m** arredondado pelo menos a fim de se evitar escalas com números 3, 6, 7 e 9 mm/unidade de **x**, favorecendo 1, 2 e 5 mm/unidades de **x** que são números **compatíveis com as escalas decimais**. Com a escala definida, pode-se colocar no eixo desejado as unidades de **x**, em números inteiros.

Exemplo: **L** = 300 mm que é típica do papel milimetrado.

Tabela de pontos **x** (podem ser as suas medidas)

x
+2,8
+1,0
+0,0
-1,6
-2,4

X = 2,8 - (-2,4) = 5,2

m = 300/5,2 = 57,7 mm/unidade de **x**

Portanto escolhe-se 50 mm/unidade de **x**, um número **compatível com o sistema decimal** do papel milimetrado.

A seguir coloca-se a seqüência -3, -2, -1, 0, 1, 2, 3 em intervalos iguais de 50 mm na margem perto do eixo desejado. Assim pode-se colocar (e ler) o conjunto de pontos, facilmente identificando os algarismos decimais em unidades de **x**, **não em mm**.

b) Logarítmica:

Suponha que se tem um conjunto de pontos **x** $(x_1, x_2, \ldots, x_n)$, mas que por motivos que serão explicados mais adiante tem-se interesse em colocar num eixo, os logaritmos de **x**. Pode-se então extrair os logaritmos dos valores e colocá-los em um eixo milimetrado ou colocar os valores de **x** diretamente num papel com uma escala logarítmica.

O eixo logarítmico não permite a escolha da escala, pois esta já vem definida. A única escolha que se pode fazer é da posição de uma potência de 10, consequentemente, de todas as outras potências de 10. O eixo logarítmico se repete a cada potência de 10, o que se chama **ciclo**.

Exemplo: Construção de um ciclo da escala logarítmica para o conjunto de pontos:

x =	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
y = log(x) =	0	0,301	0,477	0,602	0,699	0,778	0,845	0,903	0,954	1

Como os valores de **y = log(x)** colocados em um eixo milimetrado, pode-se definir uma escala (**m**). Seja L (cm) o comprimento do ciclo desde **y = log(1) = 0** até **y = log(10) = 1** (portanto, **Y = 1 - 0 = 1**). Assim:

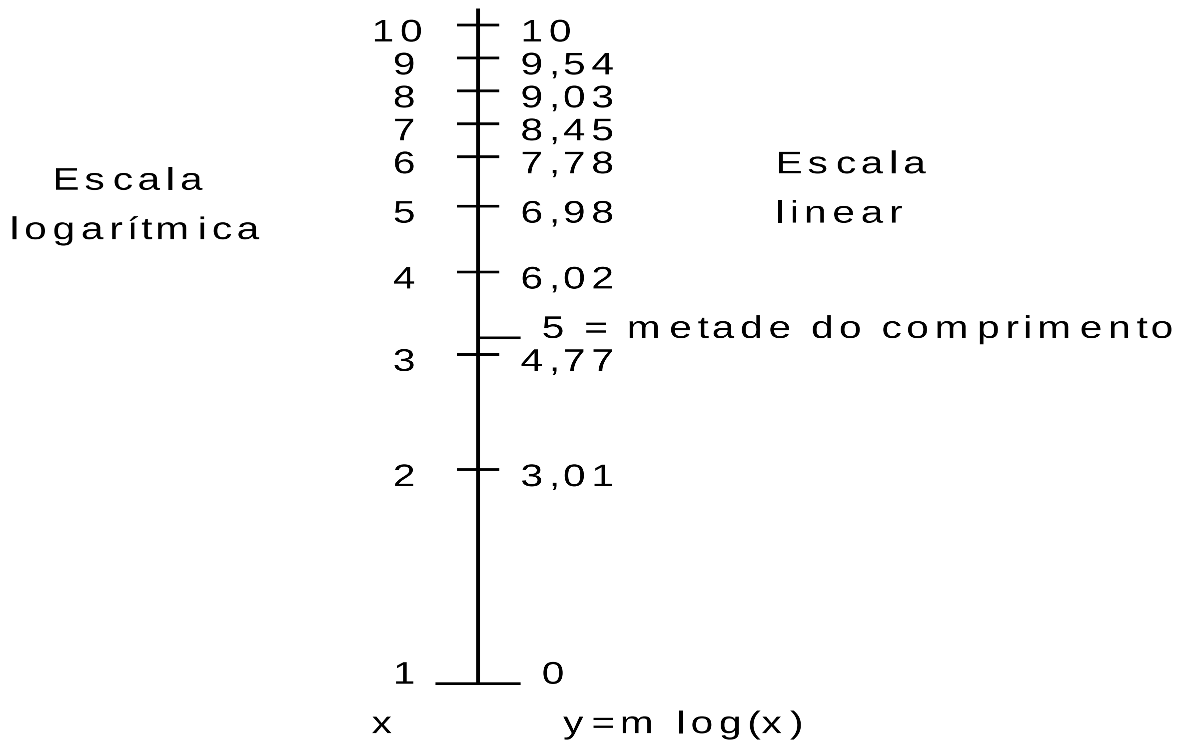


Figura 1: Construção de um ciclo de uma escala logarítmica, com **m=L=10**.

$$m = \frac{L}{Y} = L \quad \text{mm/unidade de } \mathbf{y}$$

A posição (**p**, em mm) de cada ponto **y = log(x)** na escala linear é:

$$p = m.y = L.\log(x) \ \text{mm}$$

A escala (**m = L**) define apenas o comprimento do ciclo, o qual já tem uma escala própria definida (escala logarítmica).

3. FUNÇÃO LINEAR:

Seja um conjunto de pontos experimentais (**x,y**) que pode ser representado por uma função linear:

$$y = a.x + b$$

onde **a** e **b** são constantes, que recebem os nomes de coeficiente angular e linear, respectivamente.

A partir do gráfico milimetrado de **y** em função de **x**, determinam-se as constantes **a** e **b**, obtendo-se a função linear que melhor representa os pontos experimentais.

Considerando-se dois pontos (1 e 2) do gráfico (reta), se eles pertencem à reta, pode-se escrever:

$$y_1 = ax_1 + b$$
$$y_2 = ax_2 + b$$

Subtraindo-se as equações acima, tem-se:

$$a = \frac{y_2 - y_1}{x_2 - x_1}$$

A expressão acima define o coeficiente angular como a tangente do ângulo de inclinação da reta com relação ao eixo horizontal. Note que pode ser medido o ângulo com um transferidor e calcular sua tangente ou com uma régua e fazer a razão entre $\Delta y/\Delta x$. Este procedimento pode ser feito sempre que seja respeitada a relação entre as escalas dos eixos horizontal e vertical. Outra forma, que não leva em consideração a relação de escalas, é escolher dois pontos da reta definida como melhor (e **não do conjunto de pontos experimentais**) e aplicar a equação acima.

O coeficiente linear **b** é igual ao valor da ordenada **y** correspondente à abscissa **x = 0** (na equação **y = ax+b**), isto é o valor do intercepto da reta com o eixo Y (caso a origem de x seja em 0). O valor de **b** pode ser calculado substituindo o valor de **a** e usando qualquer ponto sobre a melhor reta, assim:

$$b = y_1 - ax_1$$

4. FUNÇÃO EXPONENCIAL:

Seja um conjunto de pontos experimentais **(x,y)** que possa ser representado por uma função exponencial:

$$y = Bc^{ax}$$

onde **a, B** e **c** são constantes.

Aplicando-se o **logaritmo** em ambos os lados da equação tem-se:

$$\log y = ax \log c + \log B \Rightarrow y' = ax \log c + b$$
$$\text{onde: } y' = \log y \qquad \text{e} \qquad b = \log B$$

A função exponencial torna-se, assim, uma função linear, desde que seja feita a mudança de variável **y' = log y**. Note que a base do logaritmo pode ser escolhida a gosto, mas deve ser considerada no cálculo, observar o termo **log c**. Normalmente utiliza-se 10 ou **e** = 2.71828 (**LOG** e **LN,** respectivamente nas calculadoras).

Os coeficientes **a** e **b** podem ser obtidos da mesma forma que para a função linear, bastando que se faça o gráfico de **log(y)** em função de **x** no papel milimetrado ou de **y** em função de **x** no papel mono-log (com os valores de **y** na escala logarítmica). De ambas as formas se obtém uma reta a partir da qual se extrai os valores dos coeficientes e se obtém a função exponencial que melhor representa os pontos experimentais. Vê-se, desta maneira, que a função do papel mono-log é tornar a tarefa mais simples, evitando o cálculo dos logaritmos de todas as ordenadas **y**.

Sejam dois pontos (1 e 2) da melhor reta determinada (**não dos pontos experimentais**):

$$y'_1 = ax_1 \cdot \log c + b$$
$$y'_2 = ax_2 \cdot \log c + b$$

Subtraindo-se as expressões acima:

$$a=\frac{y'_2-y'_1}{(x_2-x_1)\cdot\log c}=\frac{\log y_2-\log y_1}{(x_2-x_1)\cdot\log c}$$

O coeficiente **b** é igual ao valor **y' = log(y)** correspondente a **x=0**, isto é o valor do intercepto da reta com o eixo Y (caso a origem de x seja em 0). O valor de **b** pode ser calculado substituindo o valor de **a** e usando qualquer ponto sobre a melhor reta, assim:

$$b=\log y_1-ax_1\cdot\log c$$

Note que os números lidos na escala logarítmica correspondem aos valores originais de **y**. Dessa forma, nos cálculos dos coeficientes **a** e **b,** deve-se extrair os logaritmos desses números, como indica a formula de **a**, **respeitando a base escolhida**.

Note também que neste caso não podemos obter **a** mediante a medida direta da inclinação no gráfico.

5. FUNÇÃO POTÊNCIA ou POLINOMIAL:

Seja a função

$$y=Bx^a$$

onde **B** e **a** são constantes.

Extraindo-se o **logaritmo** (em qualquer base) de ambos os lados da equação acima, tem-se

$$\log y=\log B+a\log x\Rightarrow y'=ax'+b$$

$$\text{onde}:\ y'=\log y$$

$$x'=\log x$$

$$b=\log B$$

A função potência torna-se, assim, uma função linear, desde que sejam feitas as mudanças de variáveis escritas acima.

Se um gráfico de **log(y)** em função de **log(x)** foi feito em papel milimetrado ou de **y** em função de **x** em papel di-log, tem-se uma reta, a partir da qual pode-se calcular os coeficientes **a** e **b** e se obter a função potência que melhor representa os pontos experimentais. A função do papel di-log é poupar trabalho de se extrair os logaritmos de todos os valores **x** e **y**.

Escolhendo-se dois pontos (1 e 2) da melhor reta determinada (**não dos pontos experimentais**):

$$y'_1=ax'_1+b$$

$$y'_2=ax'_2+b$$

Subtraindo-se uma equação da outra, tem-se

$$a=\frac{y'_2-y'_1}{x'_2-x'_1}=\frac{\log y_2-\log y_1}{\log x_2-\log x_1}$$

Uma forma mais fácil de obter o valor de **a** (sem ter que extrair nenhum logaritmo) é simplesmente fazendo a medida da inclinação da melhor reta diretamente com a régua no gráfico di-log, isto é, Δy'/Δx'; novamente respeitando a relação entre as escalas.

O coeficiente **b** é igual ao valor de **y' = log(y)** correspondente a **x' = log(x) =0**, ou seja, **x=1**. Se **x' = log(x) =0** não aparecer no gráfico, determine o valor de **b** pela substituição de qualquer par dos valores **(x, y)** da melhor reta determinada (**não dos pontos experimentais**) e do valor de **a** na equação original.

6. OUTRAS FUNÇÕES:

Existem diversas funções diferentes das apresentadas até aqui, que, apesar de não serem lineares, podem ser linearizadas através de uma ou mais mudanças de variáveis.

Como exemplo, considere a função

$$y = \sqrt[3]{a - bx^2}$$

Se as mudanças das variáveis **$y' = y^3$** e **$x' = x^2$** forem feitas, tem-se

$$y' = a - bx'$$

Tem-se, assim, uma função **linear**. O gráfico de **y^3** em função de **x^2** no papel milimetrado é uma reta cujo coeficiente angular = **-b** e o coeficiente linear = **a**.

Outras funções podem ser linearizadas, segundo o mesmo princípio, ou seja **mudanças de variáveis** adequadas.

Anexo: Regressão Linear

A tentativa de encontrar a melhor reta que se ajusta a um conjunto de pontos experimentais,

$(x_1; y_1, \sigma_1), (x_2; y_2, \sigma_2), ..., (x_i; y_i, \sigma_i)$ sen*do* σ_i *a incerteza sobre* y_i,

é geralmente chamado de regressão linear. No caso da reta expresso pela equação 1, onde y é a variável independente, diz-se regressão de y sobre x.

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

A determinação dos coeficientes a e b da reta, que melhor se ajusta aos pontos experimentais, se faz pelo método dos mínimos quadrados ou considera-se que cada ponto tenha um valor de erro aleatório distribuído sobre uma curva normal. O primeiro método pode ser facilmente derivado do segundo.

A variável x é suposta isenta de erro, sendo a sua indeterminação transferida a y.

A probabilidade de ocorrência para um conjunto de n pontos é o produto das probabilidades para cada ponto:

$$P = P_1 P_2 \ldots P_n = C^n e^{-\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{n}\left(\frac{y_i - y_{mi}}{\sigma_i}\right)^2} \qquad (2)$$

$$P = C^n e^{-\frac{1}{2}X^2} \qquad (3)$$

onde

$$X^2 = \sum_{i=1}^{n}\left(\frac{y_i - y_{mi}}{\sigma_i}\right)^2 \qquad (4)$$

sendo y_{mi} o valor calculado a partir da reta.

A solução para as constantes a e b se faz maximizando a equação 2 ou minimizando a equação 4.

Para a condição de mínimo da equação 4 pode-se escrever (expressão equivalente ao método de mínimos quadrados):

$$\frac{\partial X^2}{\partial a} = 0 = -2\sum_{i=1}^{n}\frac{y_i - a - bx_i}{\sigma_i^2} \qquad (5)$$

$$\frac{\partial X^2}{\partial b} = 0 = -2\sum_{i=1}^{n}\frac{x_i(y_i - a - bx_i)}{\sigma_i^2}$$

definindo-se as somas

$$S_\sigma = \sum_{i=1}^{n}\frac{1}{\sigma_i^2} \qquad S_x = \sum_{i=1}^{n}\frac{x_i}{\sigma_i^2} \qquad S_{x^2} = \sum_{i=1}^{n}\frac{x_i^2}{\sigma_i^2}$$

$$S_y = \sum_{i=1}^{n}\frac{y_i}{\sigma_i^2} \qquad S_{xy} = \sum_{i=1}^{n}\frac{x_i y_i}{\sigma_i^2} \qquad (6)$$

pode-se escrever para a equação 5

$$aS_\sigma + bS_x = S_y$$

$$aS_x + bS_{x^2} = S_{xy} \qquad (7)$$

e que tem como solução:

$$b = \frac{1}{\Delta}\left(S_\sigma S_{xy} - S_x S_y\right)$$

$$a = \frac{1}{\Delta}\left(S_{x^2} S_y - S_x S_{xy}\right) \qquad (8)$$

$$onde$$

$$\Delta = S_\sigma S_{x^2} - (S_x)^2$$

As incertezas de para a e b são dadas respectivamente por:

$$\sigma_a^2 = \frac{S_{x^2}}{\Delta} \quad e \quad \sigma_b^2 = \frac{S_\sigma}{\Delta} \qquad (9)$$

Quando não se conhece a incerteza σ_i associado a cada medida pode-se fazer uma estimativa através da expressão:

$$\sigma^2 = \frac{1}{n-m} \sum_{i=1}^{n} (y_i - (a + bx_i))^2$$ ou

$$\sigma^2 = \frac{1}{n-m} \sum_{i=1}^{n} (y_{i\,\exp} - y_{icalc}))^2 \qquad (10)$$ para y experimentais e calculados

onde m é o número de constantes a serem determinadas (m=2 neste caso) e (n-m) é o número de graus de liberdade do sistema.

Então

$$S_\sigma = \sum_{i=1}^{n} \frac{1}{\sigma_i^2} = \frac{n}{\sigma^2} \qquad (11)$$

O coeficiente de correlação (r) entre x e y é dado por:

$$r = \frac{\sum_{i=1}^{n} (x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y})}{\sqrt{\sum_{i=1}^{n} (x_i - \bar{x})^2 \sum_{i=1}^{n} (y_i - \bar{y})^2}} \qquad (12)$$

Um exemplo

Para o conjunto de pontos experimentais, dados à seguir, encontre a reta que melhor se ajusta aos mesmos.

X	Y
1	3
2.2	5.7
3	9
3.8	12.4
5	15
6.3	17.5
7	21
7.9	24.5
9	27
10.2	29

Considerando-se $\sigma_i = \sigma$ e substituindo-se a equação 11 em 8, seguido dos valores pertinentes, obtém-se os coeficientes angular e linear da melhor reta:

$$b = \frac{1}{\Delta\sigma^4}\left(n\sum xy - \sum x \sum y\right)$$

$$b = \frac{1}{\Delta\sigma^4}\left(10*1154.26 - 55.4*164.1\right) = 2.93574$$

$$a = \frac{1}{\Delta\sigma^4}\left(\sum y \sum x^2 - \sum x \sum xy\right) \qquad (13)$$

$$a = \frac{1}{\Delta\sigma^4}(164.1*390.42 - 55.4*1154.26) = 0.1460$$

$$onde$$

$$\Delta\sigma^4 = \left(n\sum x^2 - (\sum x)^2\right) = 10*390.42 - (55.4)^2 = 835.04$$

Substituindo-se valores nas equações 10 e 11 tem-se

$$\sigma^2 = \frac{1}{n-m}\sum_{i=1}^{n}(y_{i\exp} - y_{icalc}))^2 = \frac{6.18418}{10-2} = 0.773023 \qquad (14)$$

$$S_\sigma = \sum_{i=1}^{n}\frac{1}{\sigma_i^2} = \frac{n}{\sigma^2} = \frac{10}{0.773023} = 12.9362 \qquad (15)$$

Substituindo-se valores nas equações 9 e 12 obtém-se as incertezas dos coeficientes e o coeficiente de correlação.

$$\sigma_a^2 = \frac{\sum x^2 / \sigma^2}{\Delta} = \frac{390.42 / 0.773023}{835.04 / 0.773023^2} \Rightarrow \sigma_a = 0.60119$$

$$\sigma_b^2 = \frac{S_\sigma}{\Delta} = \frac{12.9362}{835.04 / 0.773023^2} \Rightarrow \sigma_b = 0.09621$$

$$r = \frac{245146}{\sqrt{83504 * 725869}} = 0.99573$$