FÍSICA NUCLEAR

TRATAMENTO ESTATÍSTICO DOS RESULTADOS EXPERIMENTAIS

por

F. Bragança Gil

1977

Universidade de Lisboa

Laboratório de Física da Faculdade de Ciências

F Í S I C A N U C L E A R

TRATAMENTO ESTATÍSTICO DOS RESULTADOS EXPERIMENTAIS

F. Bragança Gil

1977

1 - Introdução

Qualquer determinação experimental, repetida em condições supostas idênticas, dá origem a resultados diferentes. A análise estatística das variações observadas pode conduzir a certas conclusões que nos permitem decidir se as medidas obtidas constituem, ou não, um conjunto coerente e reprodutível.

A maior parte das determinações experimentais em Física Nuclear são baseadas na contagem de certos acontecimentos: desintegração de núcleos radiactivos, difusão de partículas, realização de reacções nucleares, etc. Quando se produz a desintegração de um núcleo instável, não há qualquer interdependência com a desintegração de outros núcleos presentes no núclido em estudo; designando por τ a vida - média deste, a probabilidade que um núcleo tem de se desintegrar num intervalo de tempo dt é, assim

$$dP = \frac{1}{\tau} dt = \lambda \, dt$$

em que λ é a constante de desintegração do núclido. O número de núcleos, N(t), ainda existentes ao fim de um intervalo de tempo t, de um conjunto de N_0 núcleos presentes no instante inicial é, então, dado por

$$N(t) = N_0 \, e^{-\lambda t};$$

a probabilidade para que um núcleo se não desintegre durante o intervalo de um tempo t é, portanto:

$$\frac{N(t)}{N_0} = e^{-\lambda t}$$

As determinações experimentais em Física Nuclear são, assim, de tipo estatístico como, aliás, sucede com quaisquer outras que respeitem a fenómenos microfícos. Mas além das flutuações estatísticas que se observam devido à natureza intrínseca do fenómeno estudado, outras existem que são inerentes a qualquer processo de medição experimental, havendo que incluir nestes as eventuais imperfeições ou mau funcionamento dos instrumentos utilizados. É, pois, necessário dispor de métodos e critérios que nos permitam aceitar ou regeitar um dado valor para uma determinação experimental, bem como avaliar o erro cometido, com uma certa margem de precisão.

O problema que, em primeiro lugar se põe ao experimentador consiste em conhecer a probabilidade, $P(x)$, para que o resultado de uma medição sobre uma dada grandeza X tenha o valor x. Para isso, é necessário conhecer a lei de probabilidade da variável aleatória X.

2 - Algumas definições:

Quando um conjunto de dados que se pretende tratar estatisticamente é dividido em grupos convenientemente caracterizados, diz-se que os dados foram distribuídos em classes, designando-se por frequência o número de dados em cada classe. Os valores inferior e superior que caracterizam a classe tem o nome de limites da classe, sendo a largura da classe definida como a diferença entre os primeiros valores que caracterizam, respectivamente, uma dada classe e a seguinte.

Sendo $x_1, x_2, \ldots, x_n$ os valores médios das variáveis em cada classe e $f_1, f_2, \ldots, f_n$ as respectivas frequências, o valor médio do conjunto de dados é

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

Definindo o desvio d_i, de um resultado x_i em relação à média $\bar{x}$ por $d_i = x_i - \bar{x}$, a variância σ^2 é dada por

$$\sigma^2 = \frac{\sum_{i=1}^{n} d_i^{\,2}}{n}$$

sendo o desvio padrao definido por:

$$\sigma = \left[\frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} d_i^{\,2}\right]^{1/2}$$

Se os resultados $x_1, x_2, \ldots, x_i, \ldots x_n$ têm frequências $f_1, f_2, \ldots, f_i, \ldots f_n$, respectivamente, então vem para σ^2 a expressão

$$\sigma^2 = \frac{\sum_{i=1}^{n} f_i\, d_i^2}{\sum_{i=1}^{n} f_i} = \frac{\sum_{i=1}^{n} f_i (x_i - \bar{x})^2}{\sum_{i=1}^{n} f_i}$$

Quando as frequências são conhecidas para todos os valores da variável x, num domínio contínuo (a,b), σ^2 é então dado por:

$$\sigma^2 = \frac{\int_a^b f.(x - \bar{x})^2 dx}{\int_a^b f\, dx}$$

3 - Curva de frequências

Dispondo-se de um grande número de resultados agrupados em classes de pequena largura, o comportamento do histograma construído com esses resultados agrupados aproxima-se de uma curva contínua designada por curva de frequências.

Supõe-se que um número finito de observações constitui uma amostra de um conjunto infinito cujos valores obtidos para as observações se distribuem em acordo com a curva de frequências. Assim, o histograma correspondente à amostra é uma aproximação da curva de frequências, dependendo o grau de aproximação do número de observações e da largura das classes.

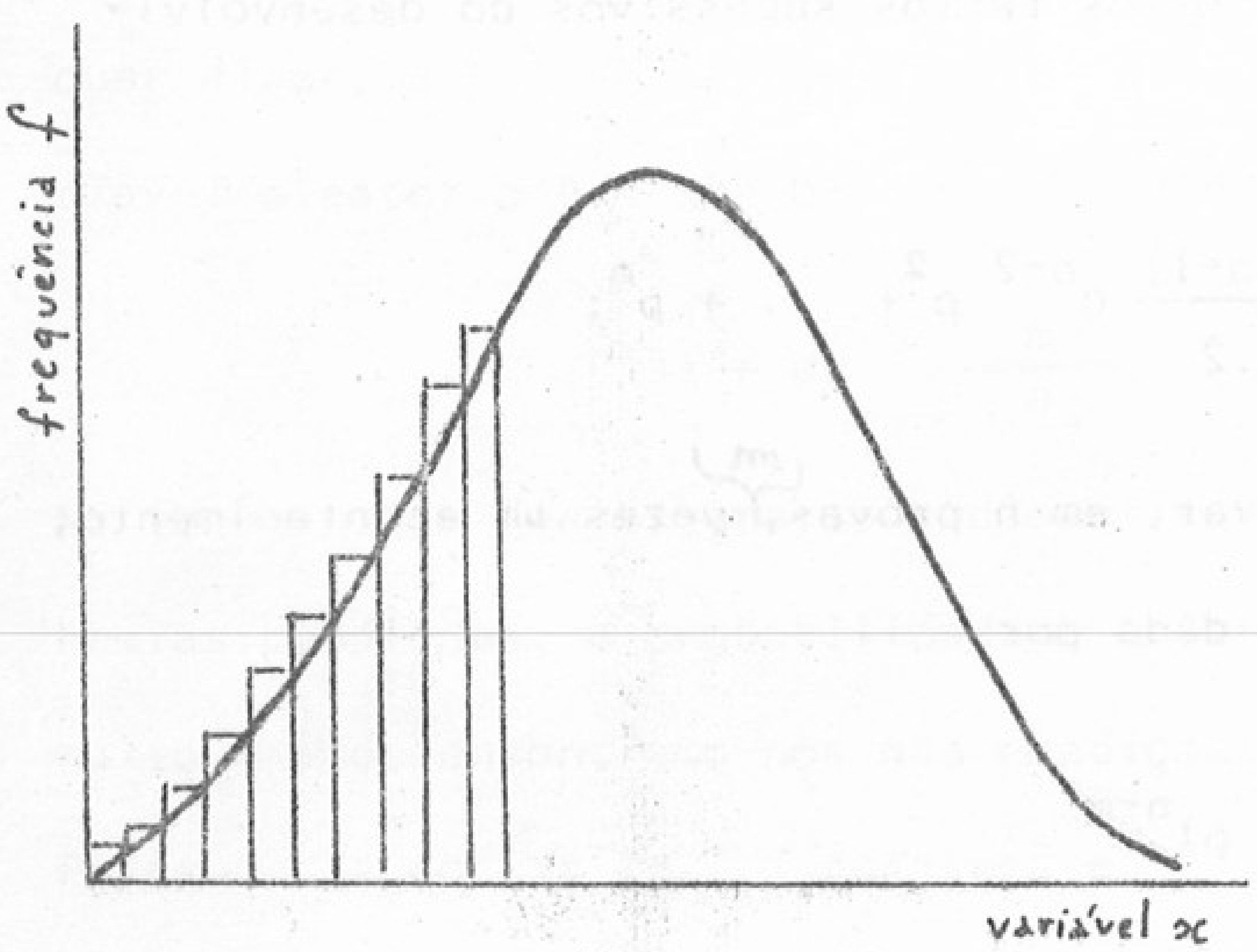


Fig.1

A avaliaçao da probabilidade P(x) para que o resultado de uma medição sobre uma dada grandeza $\bar{X}$ tenha o valor x, referida em 1), depende do conhecimento da função f(x) que traduz a dependência da frequência f em relação à variável x.

Quando esta equação é conhecida, vem para o valor médio da variável x:

$$\bar{x} = \frac{\int_a^b x.\ f(x)\ dx}{\int_a^b f(x)\ dx}$$

4 - Determinadas distribuições de frequências

Entre as diversas formas que pode apresentar a função f(x), que traduz a frequência em função da variável, têm especial importância as que são conhecidas por distribuições binomial, de Poisson e normal. Na realidade, a maior parte dos resultados obtidos na observação experimental aproximam-se de uma daquelas distribuições.

4.1 - Distribuiçao binomial

Seja p a probabilidade de ocorrência de um acontecimento e q a probabilidade para que ele não se dê; ter-se-á, evidentemente, p + q = 1. As probabilidades para que, em n provas, o acontecimento se observe 0,1,2,..., n vezes são dadas, como foi mostrado por J. Bernoulli pelos termos sucessivos do desenvolvimento

$$(q + p)^n = q^n + nq^{n-1}.\ p + \frac{n(n-1)}{1.2}\ q^{n-2}\ p^2 + \ldots + p^n;$$

quer dizer, a probabilidade de se observar, em n provas, m vezes um acontecimento, cuja probabilidade de ocorrência é p, é dada por

$$P(m) = \frac{n!}{(n-m)!\ m!} \cdot p^m \cdot (1 - p)^{n-m}$$

Uma distribuição deste tipo designa-se por distribuição binomial. Mostra-se que nesta distribuição o valor médio é $\bar{m} = n.p$ e o desvio padrão é dado por $(npq)^{1/2}$.

Suponhamos que temos uma fonte radioactiva em que se encontram presentes, num instante considerado como inicial, N_0 núcleos do núclido em estudo. Como a probabilidade de um núcleo não se desintegrar, dentro de um intervalo de tempo t. é $e^{-\lambda t}$, a probabilidade para que se tenham desintegrado, ao fim desse tempo, m núcleos, é, em acordo com a lei binomial, dada por:

$$P(m) = \frac{N_0!}{(N_0 - m)!\, m!} \; (1 - e^{-\lambda t})^m \, . \, (e^{-\lambda t})^{N_0 - m}$$

O número médio de núcleos desintegrados, nesse intervalo de tempo é então

$\bar{m} = np = N_0(1 - e^{-\lambda t})$.

4.2 - Distribuição de Poisson

A forma da distribuição binomial depende fortemente dos valores de p e n. Um caso particular importante ocorre quando p é muito pequeno mas n é suficientemente grande para que o valor médio $\bar{m} = n.p$ tenha um valor apreciável. Mostra-se que, nestas condições, o desenvolvimento binomial $(q + p)^n$ aproxima-se do desenvolvimento

$$e^{-\bar{m}} \left(1 + \frac{\bar{m}}{1!} + \frac{\bar{m}^2}{2!} + \ldots + \frac{\bar{m}^n}{n!} \right) ;$$

quer dizer, a probabilidade P(a) para que, nas condições apresentadas, uma variável eleatória A tenha o valor a é dada por

$$P(a) = e^{-\bar{m}} \frac{\bar{m}^a}{a!}$$

No fenómeno da desintegração radioactiva verifica-se, em geral, que $\lambda t << 1$ e, nestas condições, a probabilidade $p = 1 - e^{-\lambda t}$ é muito pequena; como $n = N_0$ é muito grande encontramo-nos nas condições em que é válida a distribuição de Poisson. Sendo $\lambda t << 1$, ter-se-á $e^{-\lambda t} \simeq 1 - \lambda t$ e $p \simeq \lambda t$. Vem, assim, para valor médio, $\bar{m}$, a quantidade:

$$\bar{m} = N_0 \lambda t.$$

A probabilidade P(a) para que a átomos radioactivos se desintegrem dentro de um intervalo de tempo t é, então, dada por

$$P(a) = e^{-N_0\lambda t} \frac{(N_0\lambda t)^a}{a!}$$

4.3 - Distribuição normal

A distribuição normal, também designada por distribuição de Gauss é uma aproximação da distribuição binomial quando o valor de n é muito grande. A equação que traduz aquela distribuição é da forma

$$y = A\,e^{-h^2(x-m)^2}$$

em que A, h e m são constantes; ela encontra-se representada na figura 2, com $h^2 = 1/2\sigma^2$.

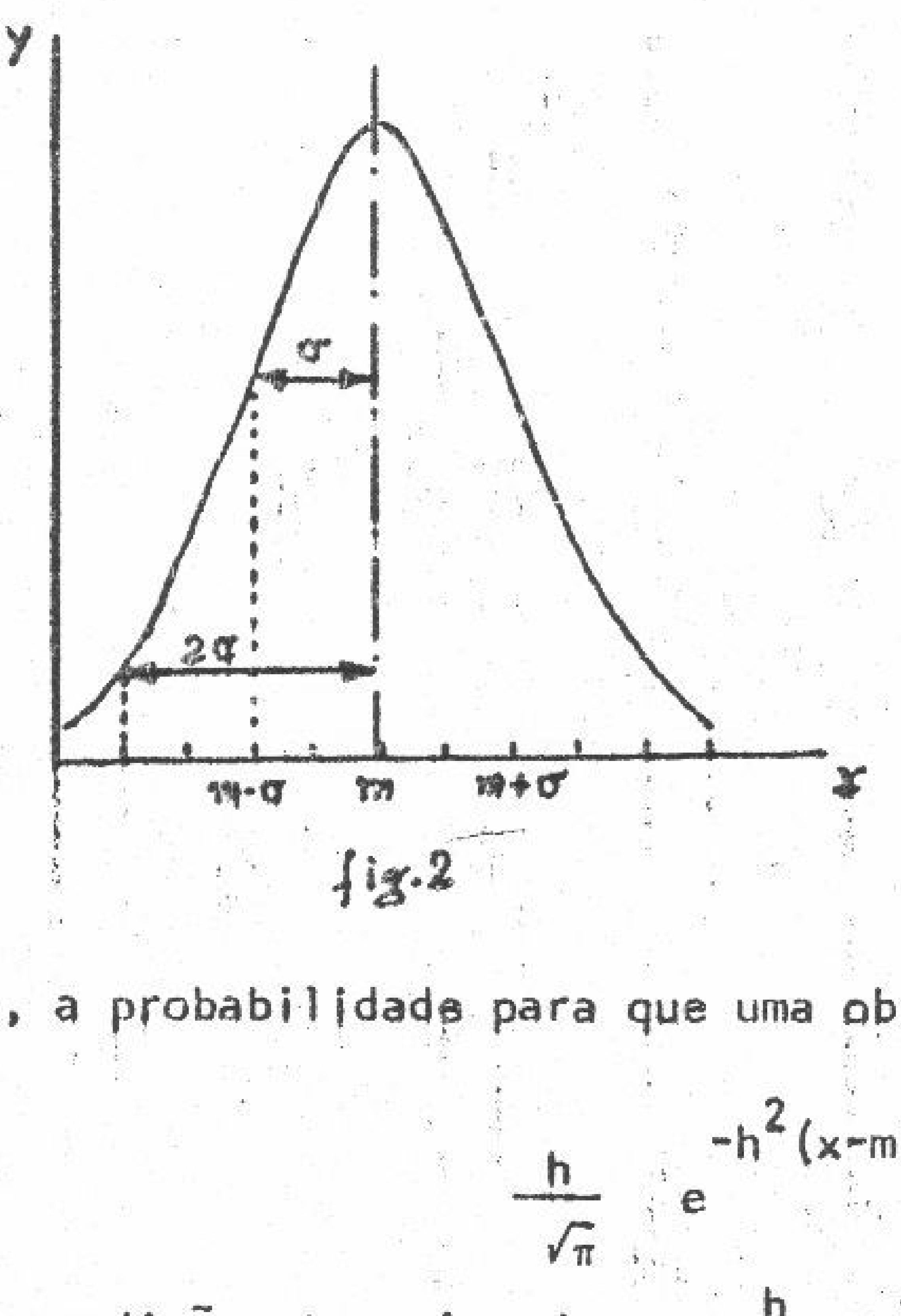


fig.2

A área total sob a curva é dada por

$$\int_{-\infty}^{+\infty} A e^{-h^2(x-m)^2}\,dx = \frac{A\sqrt{\pi}}{h}\ .$$

Fazendo $A = \frac{h}{\sqrt{\pi}}$, a área é, então, igual à unidade. Quer dizer, para uma distribuição normal, a probabilidade para que uma observação esteja situada entre x e x + δx é

$$\frac{h}{\sqrt{\pi}}\ e^{-h^2(x-m)^2}\ \delta x$$

Nestas condições, o valor de $y = \frac{h}{\sqrt{\pi}}\ e^{-h^2(x-m)^2}$ é a densidade de probabilidade ou densidade de frequência relativa da distribuição.

Ao contrário das distribuições binomial e de Poisson, que dependem apenas de um parâmetro, a distribuição normal é determinada por dois parâmetros, designados aqui por h e m. Este último identifica-se com o valor médio da distribuição, $\bar{x}$, e h está relacionado com o desvio padrão, pela relação, acima escrita $h^2 = 1/2\sigma^2$. A distribuição normal com um valor médio $\bar{x}$ e um desvio padrão σ é então traduzida por:

$$y = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}}\, e^{-\frac{(x-\bar{x})^2}{2\sigma^2}}$$

Esta expressão traduz também a chamada lei gaussiana dos erros, pois estabelece que as medidas de uma certa quantidade sujeitas a erros fortuitos distribuem-se em acordo com ela, em torno da média das observações.

Viu-se anteriormente que

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}}\, e^{-\frac{(x-\bar{x})^2}{2\sigma^2}}\, dx = 1 \;;$$

A probabilidade para que uma observação esteja situada entre x_1 e x_2 é, então, dada pela área sob a curva normal entre duas abcissas, isto é:

$$\frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \int_{x_1}^{x_2} e^{-\frac{(x-\bar{x})^2}{2\sigma^2}}\, dx.$$

Introduzindo a variável $t = \frac{x-\bar{x}}{\sigma}$, o integral anterior transforma-se em:

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{t_1}^{t_2} e^{-t^2/2}\, dt$$

A probabilidade para que uma observação esteja situada entre $t_1 = \frac{x_1-\bar{x}}{\sigma}$ e $t_2 = \frac{x_2-\bar{x}}{\sigma}$ pode então ser obtida pela diferença entre dois integrais do tipo

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_0^T e^{-t^2/2}\,dt$$

Mas

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_0^T e^{-t^2/2}\,dt = \frac{1}{\sqrt{\pi}}\int_0^{T\sqrt{2}} e^{-t^2}\,dt = \frac{1}{2\sqrt{\pi}}\int_{-T\sqrt{2}}^{T\sqrt{2}} e^{-t^2}\,dt$$

O integral $\frac{1}{\sqrt{\pi}}\int_{-T}^{T} e^{-t^2}\,dt$ é designado por <u>função de erro</u>. A probabilidade para que uma determinação esteja situada entre 0 e T é, então, igual ao valor do integral

$$\frac{1}{2\sqrt{\pi}}\int_{-T\sqrt{2}}^{T\sqrt{2}} e^{-t^2/2}\,dt$$

e, portanto, a probabilidade para que uma determinação se situe entre -T e +T, ou seja entre $-\left(\frac{x-\bar{x}}{\sigma}\right)$ e $+\left(\frac{x-\bar{x}}{\sigma}\right)$ é

$$\frac{1}{\sqrt{\pi}}\int_{-T\sqrt{2}}^{T\sqrt{2}} e^{-t^2/2}\,dt.$$

A tabela I contém os valores deste integral para diversos valores de T.

<u>TABELA I</u>

Probabilidade para que uma determinação se situe

entre -T e +T; $\left(T = \frac{x-\bar{x}}{\sigma}\right)$

T	0,0000	0,6745	1,0000	1,6449	1,9600	2,0000	2,5758	3,0000	∞
Probabilidade	0,0000	0,5000	0,6827	0,9000	0,9500	0,9545	0,9900	0,9973	1

Por esta tabela conclui-se que existe uma probabilidade de 50% para que o resultado apresente um desvio inferior a $0{,}6745\sigma$ da média (desvio provável); analogamente, um desvio inferior a $\pm\,\sigma$ tem uma probabilidade de 68,27% (desvio padrão);

os desvios designados por 9/10, 95/100 e 99/100 são, respectivamente iguais a $1{,}6449.\sigma$, $1{,}96.\sigma$ e $2{,}5758.\sigma$.

5. AMOSTRAGEM. ERRO PADRÃO DA MÉDIA

Ao invés das distribuições binomial e de Poisson - em que as variáveia tomam apenas valores inteiros - numa distribuição normal a variável varia continuamente de $-\infty$ + $+\infty$, o que implica uma quantidade de observações (isto é, uma população) infinita. Contudo, o número de determinações experimentais que se observam é sempre limitado, sendo, assim, necessário saber se uma dada amostra finita se aproxima de uma distribuição normal e encontrar os parâmetros desta que melhor se ajustam às observações efectuadas.

Um número n, finito, de observações obedece a uma distribuição normal se a frequência das observações, situadas entre $x + \delta x$, é dada por

$$n \frac{h}{\sqrt{\pi}} e^{-h^2(x-m)^2} \delta x;$$

viu-se anteriormente que, para uma população infinita, $m = \bar{x}$ e $h^2 = 1/2\sigma^2$, em que $\bar{x}$ é o valor médio dessa distribuição infinita e σ é o desvio padrão. Mostra-se que se uma população finita se enquadra numa distribuição normal, então m é igual à média das observações e $h^2 = 1/2s^2$, em que s é o desvio padrão.

Escolhendo, ao acaso, uma amostra de n observações numa população normal infinita, é óbvio que, em geral, a média obtida com essa amostra não será igual à média de toda a população; contudo, aquela média aproximar-se-á tanto mais desta, quanto maior for o valor de n. Analisando desta forma várias amostras, obter-se-ão vários valores para a média: mostra-se que a distribuição das diferentes médias é, também, uma distribuição normal. A média das médias obtidas com as diferentes amostras constitui a verdadeira média de toda a população com um desvio - padrão igual a $\sigma/\sqrt{n}$ em que n é o número de observações da amostra e σ é o desvio - padrão de toda a população.

Ao tratar com um conjunto de dados é, assim, usual determinar a média $\bar{x}$ e escrever o resultado sob a forma $\bar{x} \pm \alpha$, em que $\alpha = \frac{\sigma}{\sqrt{n}}$ é designado dpor <u>erro - padrão</u> da média.

De modo análogo, o <u>erro - padrão</u> do desvio - padrão é dado por $\sigma / \sqrt{2n}$, de modo que o desvio - padrão pode ser escrito sob a forma $\sigma(1 \pm \frac{1}{\sqrt{2n}})$

<u>Exemplo:</u> Um conjunto de 400 resultados de uma medição tem uma média de 3,93. Determinar se este valor pode ser considerado como uma amostra aleatória retirada de uma população normal cpm a média 3,63 e um desvio - padrão igual a 1,86.

O erro - padrão da média de uma amostra aleatória da distribuição normal considerada seria $1{,}86/\sqrt{400} = 0{,}093$. A diferença entre as duas médias é, contudo, 0,30: ela é, assim, superior ao erro - padrão que corresponderia à amostra ensaiada e, nestas condições, ela não pode ser considerada como uma amostra aleatoria daquela população normal.

6. <u>FÓRMULA DE BESSEL</u>

Até o presente ainda não se indicou como o desvio - padrão, σ , de uma populaçao infinita pode ser obtido a partir do desvio - padrão s de uma amostra de n dados. Mostra-se que o melhor valor estimado para σ^2 é dado por

$$\sigma^2 = \frac{n}{n-1} s^2$$

Assim, para uma amostra $x_1, x_2, \ldots, x_n$, o melhor valor estimado para σ^2 é, então:

$$\sigma^2 = \frac{n}{n-1} s^2 = \frac{n}{n-1} \sum_{i=1}^{n} \frac{(x_i-\bar{x})^2}{n} = \frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^{n} d_i^2$$

em que $\bar{x}$ é a média da amostra e $d_i = x_i - \bar{x}$. Esta expressão para o cálculo de σ^2 difere da anteriormente apresentada no facto de n-1 ter substituído n, o que é conhecido por correcçao de Bessel. O erro - padrão da média é $\sigma/\sqrt{n}$

e o erro - padrão do desvio padrão é $\sigma/\sqrt{2(n-1)}$.

7 - EQUAÇÃO DA CURVA NORMAL

A partir do valor médio, $\bar{x}$, e do desvio - padrão, σ , de uma distribuição de frequências, pode-se determinar a equação da curva normal, dada por

$$y = \frac{N}{\sigma\sqrt{2\pi}} \; e^{-\frac{(x-\bar{x})^2}{2\sigma^2}}$$

que melhor traduz essa distribuição. A área total limitada por esta curva é N, que é igual ao número total de dados, isto é, à soma das frequências. Para verificar o acordo, é útil calcular os valores de $y\delta x$, em que δx é a largura das classes em que os dados foram agrupados e x é o valor que se encontra a meio de cada classe. O acordo é tanto melhor quanto maior for o número de observações. Como exemplo[(1)], consideremos os resultados de uma determinação experimental, em que se fizeram 400 observações, tendo sido obtido um valor médio $\bar{x}$ = 3,57 e um desvio - padrão σ = 1,82. Os resultados obtidos e as respectivas frequências são as seguintes:

x	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
f(observado)	10	40	72	85	78	55	32	18	7	2	1

Calculando as frequências por meio da equação

$$y.\delta x = \frac{400}{1,82\sqrt{2\pi}} \cdot e^{-\frac{(x-3,57)^2}{6,62}}$$

obteve-se o seguinte quadro de frequências:

f(calculado)	13	33	60	84	85	65	36	15	5	1	0

---

(1) Extraído da obra citada em (1) na bibliografia

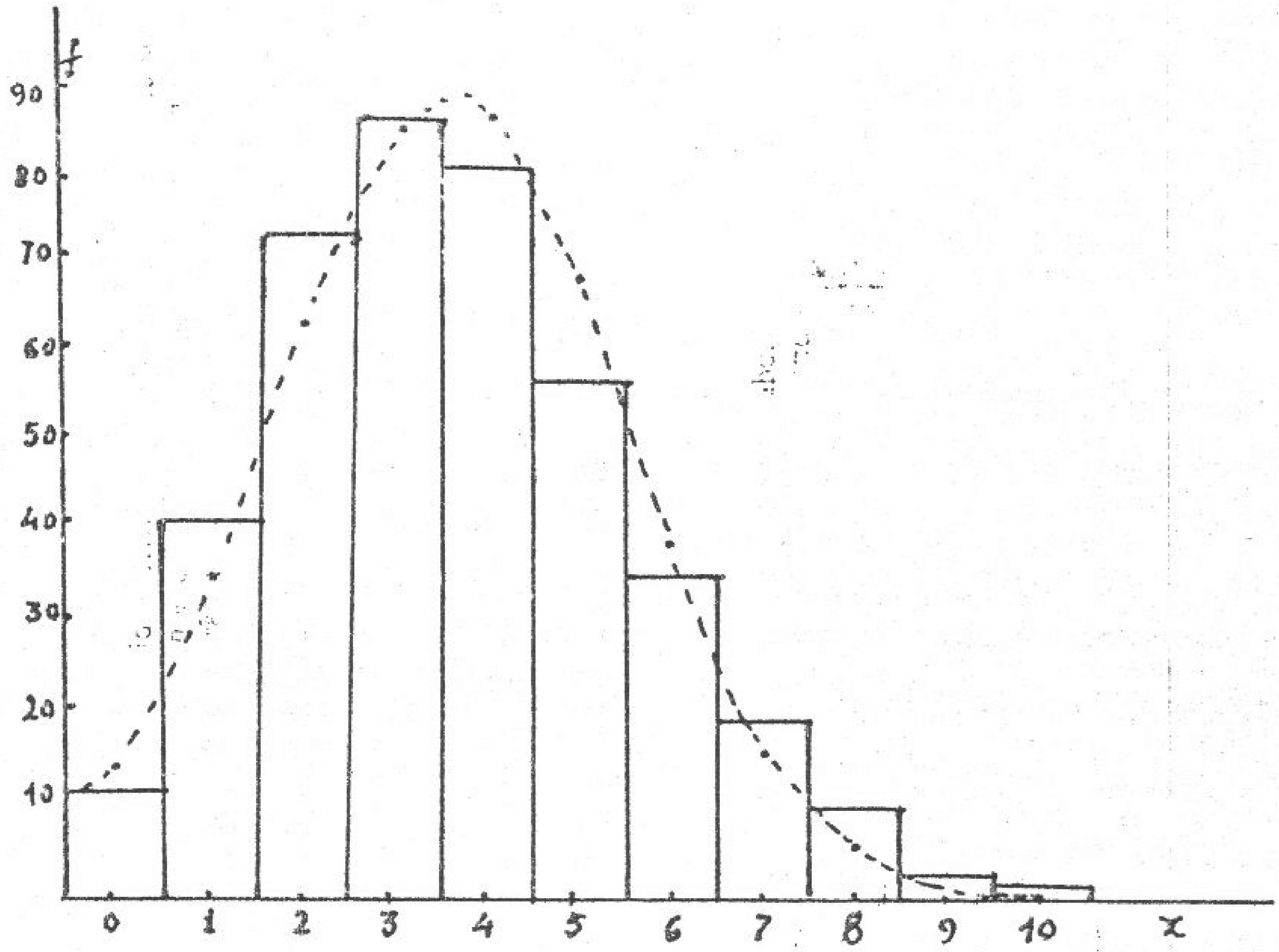


fig.3

Os resultados encontram-se representados na figura 3, podendo o acordo considerar-se razoável. Poder-se-á fazer um ensaio mais rigoroso de acordo entre a distribuição obtida experimentalmente e uma dada distribuição teórica, utilizando o método do χ^2, estudado mais adiante.

8. - A DISTRIBUIÇÃO NORMAL COMO APROXIMAÇÃO DA DISTRIBUIÇÃO DE POISSON

A distribuição de Poisson descreve uma grande parte das observações experimentais em Física Nuclear. Como se viu anteriormente, ela é dada por

$$P(a) = e^{-\bar{m}} \frac{\bar{m}^{a}}{a!}$$

em que P(a) é a probabilidade de observar a acontecimentos quando a média, para um grande número de ensaios, for de $\bar{m}$ acontecimentos; a e $\bar{m}$ são valores inteiros. Se m for suficientemente grande, seja $\bar{m} \gg 100$, a distribuição de Poisson é convenientemente descrita, com boa aproximação, pela distribuição normal dada por

$$dP = \frac{1}{\sqrt{2\pi \bar{m}}}\, e^{-\frac{(a-\bar{m})^2}{2\bar{m}}}\, da$$

Comparando com a expressão que nos dá a distribuição normal, conclui-se que, neste caso, o desvio - padrão é dado por

$$s = \sqrt{\bar{m}}$$

O desvio - padrão de uma distribuição normal que se aproxima de uma distribuição de Poisson é, portanto, conhecido desde que se conheça o valor de $\bar{m}$, ao contrário do que sucede no caso geral daquelas distribuições, em que o desvio - -padrão pode ter um valor qualquer para um determinado valor de $\bar{m}$.

Quando uma distribuição de Poisson pode ser representada por uma distribuição normal particular, poder-se-á utilizar para aquela a tabela I para a determinação da probabilidade de ocorrência dos diferentes desvios.

8.1 - Exemplos de aplicação

8.1.1 - Para uma determinação de actividade de uma certa amostra radioactiva contaram-se 150 impulsos. Em acordo com a tabela I o "erro 9/10" (isto é, aquele que tem 90% de probabilidades de não ser excedido), é dado por $1,6449 . \sqrt{150} = 20,1458$. O erro relativo correspondente é 20/150 = 0,135 ou seja 13,5%. Constitui prática corrente apresentar como erro de uma determinação experimental o desvio - padrão, neste caso dado por $\sqrt{150} = 12,2$. O resultado da determinação seria então escrito como

$$150 \pm 12 \text{ (desvio - padrão)}$$

8.1.2 - A actividade de uma amostra radioactiva é expressa em taxas de contagem, isto é, em número de impulsos, contados por unidade de tempo. Suponhamos que se observaram n impulsos em t minutos. A taxa de contagem da amostra - nas condições experimentais utilizadas é entao dada por $N = n/t \ min^{-1}$. Os erros estimados para essa determinação são, então dados por $T\sqrt{n}$, em que $\pm$ T representam

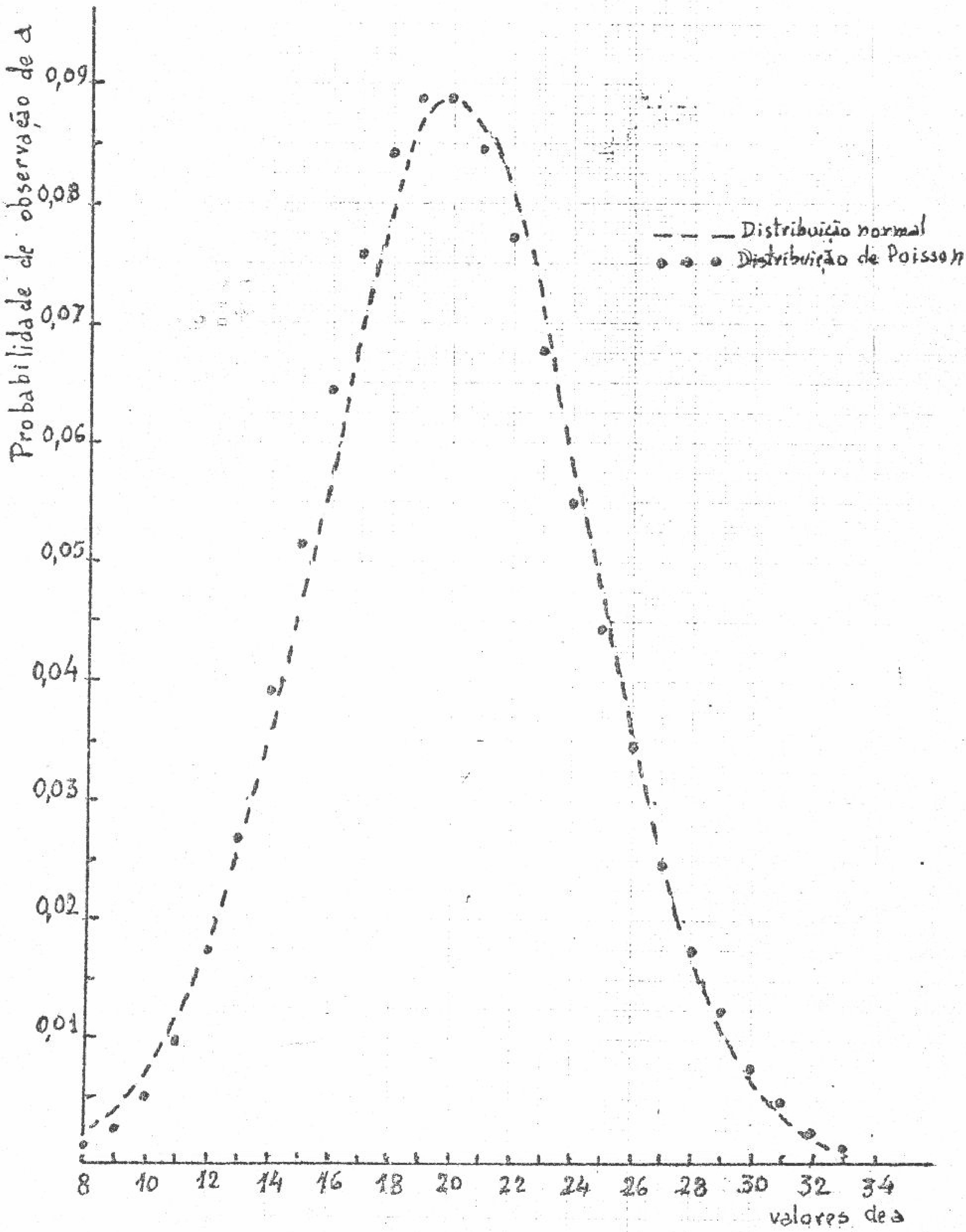


Fig. 4 : A distribuição normal como aproximação da distribuição de Poisson para $\overline{m} = 20$

os limites para os desvios a que corresponde uma determinada probabilidade, tomando como unidade o desvio - padrão (cf. Tabela I).

Os erros para a taxa de contagem são dados por

$$\frac{T\sqrt{n}}{t} = T\sqrt{\frac{N}{t}}$$

Assim, suponhamos que para uma determinada amostra radioactiva se mediu uma taxa de contagem igual a 1250 min^{-1} após se ter realizado a medição durante 8 minutos. Qual é o desvio - padrão e o "erro - 99/100"?

Desvio - padrão (T = 1) : $\sqrt{\frac{1250}{8}} = 12,5$

"Erro - 99/100" (T = 2,5758) : 2,58 x 12,5 = 32,2

8.2 - Controlo estatístico de uma instalação experimental de determinação de actividade

As boas condições de funcionamento de uma instalação de contagem de impulsos podem ser avaliadas, em primeira aproximação, por meio do ensaio, que consiste nas operações a seguir indicadas.

a) Efectuar um mínimo de 50 determinações do número de impulsos obtido com uma fonte radioactiva - sempre na mesma posição - cujo período de semi-desintegração seja muito longo quando comparado com a duração da experiência; seja x o valor de cada determinação. O intervalo de tempo utilizado em cada medição deve ser tal que se obtenham um mínimo de 10 000 contagnes.

b) Calcular o valor médio, $\bar{x}$.

c) Calcular os desvios de cada determinação, $\Delta = x - \bar{x}$

d) Calcular o quadrado dos desvios, $\Delta^2 = (x - \bar{x})^2$

e) Calcular o desvio - padrão, $\sigma = \sqrt{\frac{\Sigma\ (x-\bar{x})^2}{n - 1}}$,

em que n é o número de determinações efectuadas.

f) Calcular o erro - padrão da média, $\sigma_{\bar{x}} = \frac{\sigma}{\sqrt{n}}$

g) Calcular a raiz quadrada do valor médio, $\sqrt{\bar{x}}$

h) Determinar, utilizando a tabela I, a frequência com que o valor absoluto dos desvios está compreendido entre

h_1) 0 e σ ;

h_2) σ e 2σ ;

h_3) superior a 2σ .

i) Fazer a comparação com os resultados experimentais obtidos e construir com estes um histograma; comparar com a curva de Gauss.

j) Comparar a raiz quadrada do valor médio com o desvio - padrão.

Estas comparações dão uma ideia se a instalação se encontra funcionando em condições aceitáveis. Em caso afirmativo, o resultado da determinação é expresso como

$$\bar{x} \pm \sigma_{\bar{x}}$$

9 - O TESTE χ^2

Por meio do teste χ^2 de Pearson pode-se determinar se num dado conjunto de determinações de actividade de uma mesma amostra, elas apresentam, ou não, uma dispersão atribuível apenas ao carácter aleatório do processo de desintegração radioactiva. Este teste é particularmente útil para avaliar o comportamento de uma instalação de contagem, quando vinte ou mais determinações são realizadas nas mesmas condições. Descrevemos aqui apenas esta aplicação particular deste teste. O estudo completo dele, bem como das suas numerosas aplicações, em outros domínios pode ser encontrado em qualquer obra da estatística, em particular a de Fisher, citada na bibliografia.

A quantidade χ^2 é, de um modo geral definida por:

$$\chi^2 = \sum_i \frac{\left[(\text{Valor observado})_i - (\text{valor esperado})_i\right]^2}{(\text{valor esperado})_i}$$

Nas aplicações que aqui nos interessam, isto é, em determinações de actividade em Física Nuclear, toma-se como valor esperado o valor - médio das contagens observadas. Nestas condições se se efectuaram $x_1, x_2 \ldots x_n$ determinações, cada uma delas num intervalo de tempo t, o valor de χ^2 vem dado por

$$\chi^2 = \frac{\sum_{i=1}^{n} (x_i - \bar{x})^2}{\bar{x}} ;$$

ou designando por $A_i = \frac{x_i}{t}$ e por $\bar{A} = \frac{\bar{x}}{t}$,

respectivamente a actividade medida em cada determinação e a actividade média, vem:

$$\chi^2 = \frac{\sum_{i=1}^{n} (A_i - \bar{A})^2}{(\bar{A}/t)}$$

Tendo calculado este valor, correspondente a um certo número de determinações, é possível determinar a probabilidade para que a distribuição observada esteja em razoável acordo com a esperada (distribuição de Poisson), se as variações forem apenas devidas ao carácter aleatório do processo de desintegração radioactiva. Esta probabilidade foi calculada em função dos valores de χ^2 e do número de determinações, encontrando-se os valores dela na Tabela II.

TABELA II

Valores de χ^2

Nº de Determinações	Probabilidades				
	0,95	0,90	0,50	0,10	0,05
2	0,00393	0,0158	0,455	2,706	3,841
3	0,103	0,211	1,386	4,605	5,991
4	0,352	0,584	2,336	6,251	7,815
5	0,712	1,064	3,357	7,779	9,488
6	1,145	1,610	4,351	9,236	11,070
7	1,635	2,204	5,348	10,645	12,592
8	2,167	2,833	6,346	12,017	14,067
9	2,733	3,490	7,344	13,362	15,507
10	3,325	4,168	8,343	14,684	16,919
11	3,940	4,865	9,342	15,987	18,307
12	4,575	5,578	10,341	17,275	19,675
13	5,226	6,304	11,340	18,549	21,026
14	5,892	7,042	12,340	19,812	22,362
15	6,571	7,790	13,339	21,064	23,685
16	7,261	8,547	14,339	22,307	24,996
17	7,962	9,312	15,338	23,542	26,296
18	8,672	10,085	16,338	24,769	27,587
19	9,390	10,865	17,338	25,989	28,869
20	10,117	11,651	18,338	27,204	30,144
21	10,851	12,443	19,337	28,412	31,410
22	11,591	13,240	20,337	29,615	32,671
23	12,338	14,041	21,337	30,813	33,924
24	13,091	14,848	22,337	32,007	35,172
25	13,848	15,659	23,337	33,196	36,415
26	14,611	16,473	24,337	34,382	37,382
27	15,379	17,293	25,336	35,563	38,885
28	16,151	18,114	26,336	36,741	40,113
29	16,928	18,939	27,336	37,916	41,337
30	17,708	19,768	28,336	39,087	42,557

Uma vez determinado o valor de χ^2, a tabela anterior permite determinar entre que limites se situa a probabilidade correspondente às observações efectuadas. Um valor de P = 0,5 indica que as flutuações observadas são as mesmas que as da distribuição suposta; um valor de P superior a este mostra que as flutuações obtidas são superiores às esperadas com essa distribuição. Considera-se geralmente que a distribuição de que se partiu está de acordo com a observada se o valor de P se situa entre 0,1 e 0,9.

Note-se que uma demasiada coerência dos resultados obtidos (grande valor de p) constitui - do mesmo modo que uma demasiada incoerência (pequeno valor de P) - um motivo de desconfiança em relação à instalação experimental utilizada. Na realidade, uma demasiada coerência de resultados pode significar, por exemplo, que impulsos parasitas, produzidos a um ritmo constante, se encontram sobrepostos aos impulsos provenientes da fonte radioactiva utilizada no teste. Uma demasiada incoerência, por outro lado, significa geralmente instabilidade de algum componente da instalação experimental.

Exemplo de aplicação

Efectuaram-se dez determinações de actividade, com uma certa preparação radioactiva, tendo-se usado um intervalo de tempo de 4 minutos em cada determinação. As taxas de contagem obtidas, expressas em min^{-1}, foram as seguintes:

12128	11998	11990	12040	12016
12036	12106	12156	12118	12088

A média destes valores é 12068; nestas condições o valor de χ^2 é dado por

$$\chi^2_{(n=10)} = \frac{31184}{(12068/4)} = 10,34$$

Utilizando a tabela II, obtém-se que este valor de χ^2, para 10 observações, corresponde a uma probabilidade situada entre 0,50 e 0,10; pode, pois, concluir-se qüe aquela distribuição se encontra dentro dos limites em que se pode admitir que se trata de uma distribuição de Poisson.

10 - REJEIÇÃO DE OBSERVAÇÕES SUSPEITAS

Ao realizar uma série de medidas em idênticas condições obtém-se, por vezes, uma leitura que se desvia francamente da média das restantes observações. Um critério estabelecido por Chauvenet (*) diz que uma tal medida deve ser rejeitada se o desvio que apresenta em relação à média for superior ao correspondente ao limite de probabilidade 1/2n (o que corresponde a um erro $1 - \frac{1}{2n}$), em que n é o número de determinações. Assim, por exemplo, numa série de 10 leituras aquele limite é 1/20 = 0,05, o que corresponde ao "erro - 95%"; em acordo com o critério de Chauvenet, uma determinação será rejeitada se a diferença entre o seu valor e o valor - médio exceder 1,96σ , em que σ é o desvio - padrão (cf. Tabela II).

A Tabela III indica os limites das razões aceitáveis entre um desvio observado e o desvio - padrão para vários valores de n, de acordo com o critério de Chauvenet.

TABELA III

Critério de Chauvenet

n - número de determinações

r - razao entre o máximo desvio aceitável e o desvio - padrão

n	r	n	r	n	r	n	r	n	r
2	1,15	7	1,80	15	2,13	40	2,50	250	3,09
3	1,38	8	1,86	20	2,24	50	2,58	300	3,14
4	1,54	9	1,91	25	2,33	75	2,71	400	3,23
5	1,65	10	1,96	30	2,40	100	2,81	500	3,29
6	1,73	12	2,04	35	2,45	200	3,02	1000	3,48

(*) cf., por exemplo as obras de Jarrett ou de Price citadas na bibliografia

Quando num conjunto de medidas um ou mais valores são rejeitados, o valor médio da determinação deve ser calculado de novo, excluindo-se aqueles valores.

11. - PROPAGAÇÃO DOS ERROS

Se uma quantidade X é uma função de n quantidades,

$$\bar{X} = f(A_1, A_2 \ldots A_n),$$

em que A_1, A_2, ... A_n foram obtidas experimentalmente, respectivamente com os erros - padrão α_1, α_2, ... α_n, então o erro - padrão de $\bar{X}$ obtém-se recorrendo ao desenvolvimento em série de Taylor, sendo então dado por:

$$\alpha_{\bar{X}}^2 = \left(\frac{\partial f}{\partial A_1}\right)^2 \alpha_1^2 + \left(\frac{\partial f}{\partial A_2}\right)^2 \alpha_2^2 + \ldots + \left(\frac{\partial f}{\partial A_n}\right)^2 \alpha_n^2$$

Desta expressão geral, obtém-se imediatamente as fórmulas para a determinação dos erros nos casos particulares seguintes:

a) $\bar{X} = A \pm B$ $\qquad \alpha_{\bar{X}} = \sqrt{\alpha_A^2 + \alpha_B^2}$

b) $\bar{X} = K.A$ (K constante) $\qquad \alpha_{\bar{X}} = K\alpha_A$

c) $\bar{X} = A \times B$ $\qquad \alpha_{\bar{X}} = \sqrt{\alpha_A^2 B^2 + \alpha_B^2 A^2}$

d) $\bar{X} = A^2$ $\qquad \alpha_{\bar{X}} = 2\alpha_A A$

e) $\bar{X} = A^n$ $\qquad \alpha_{\bar{X}} = nA^{n-1}\alpha_A$

f) $\bar{X} = \sqrt{A}$ $\qquad \bar{X} = \dfrac{\alpha_A}{2\sqrt{A}}$

g) $\bar{X} = \dfrac{A}{B}$ $\qquad \alpha_{\bar{X}} = \dfrac{A}{B}\sqrt{\dfrac{\alpha_A^2}{A^2} + \dfrac{\alpha_B^2}{B^2}}$

h) $\bar{X} = \log A$ $\qquad \alpha_{\bar{X}} = \dfrac{\alpha_A}{A}$

i) $\bar{X} = \log (A + B)$ $\qquad \alpha_{\bar{X}} = \dfrac{\sqrt{\alpha_A^2 + \alpha_B^2}}{A + B}$

j) $\bar{X} = \log \dfrac{A}{B}$ $\qquad \alpha_{\bar{X}} = \sqrt{\dfrac{\alpha_A^2}{A^2} + \dfrac{\alpha_B^2}{B^2}}$

k) $\bar{X} = e^A$ $\qquad \alpha_{\bar{X}} = \alpha_A\, e^A$

II.1 - Determinação de uma taxa de contagem

Sempre que se determina uma taxa de contagem é necessário descontar-lhe os impulsos devidos à radioactividade ambiente bem como ao "ruído" do equipamento electrónico utilizado na medição, que se designa habitualmente por "contagem de fundo" ou, simplesmente, "fundo".

Sejam n_s e n_b, respectivamente, o número de contagens obtido com a fonte, incluindo o fundo, e apenas com o fundo; sejam t_s e t_b os intervalos de tempo, expressos em minutos, utilizados em cada uma daquelas contagens.

As taxas respectivas são, então, $N_s = \dfrac{n_s}{t_s}$ e $N_b = \dfrac{n_b}{t_b}$. A taxa de contagem devida à amostra será N min^{-1}, dada por:

$$N = N_s - N_b \ ,$$

com o erro - padrão $\alpha_N = \sqrt{\alpha_{Ns}^2 + \alpha_{Nb}^2}$;

mas

$$\alpha_{Ns} = \frac{\alpha_{ns}}{t_s} = \frac{\sqrt{n_s}}{t_s}$$

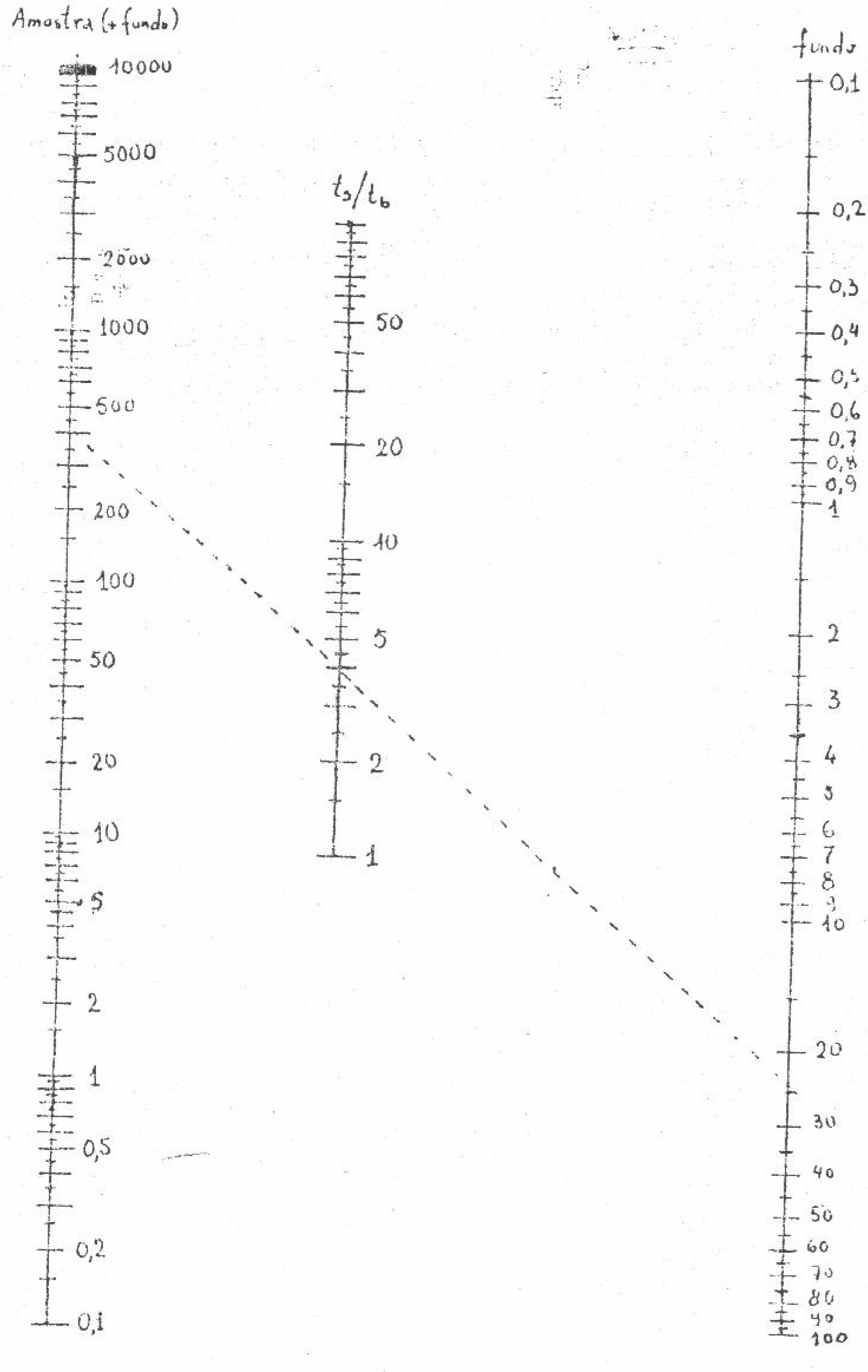
e

$$N_b = \frac{\alpha_{nb}}{t_b} = \frac{\sqrt{n_b}}{t_b}$$

Vem, então, para α_N :

$$\alpha_N = \sqrt{\frac{n_s}{t_s^2} + \frac{n_b}{t_b^2}} = \sqrt{\frac{N_s}{t_s} + \frac{N_b}{t_b}} \ .$$

Os intervalos de tempo em que se devem contar os impulsos correspondentes a uma amostra radioactiva (adicionados dos que correspondem ao "fundo") e os que respeitam apenas ao "fundo", respectivamente, não são, em geral iguais, se se pretender minimizar o erro obtido na determinação. Na realidade, considerações estatísticas permitiram construir o monograma da figura 5, extraído do trabalho de A.Jarrett indicado na bibliografia. Neste monograma as colunas da esquerda e da direita indicam, respectivamente, as taxas de contagem da amostra e do "fundo", determinadas aproximadamente num ensaio prévio. A razão entre os intervalos de tempo em que se devem contar a amostra e o fundo (t_s/t_b) é determinada pela intercepção, com a coluna interior, de um segmento de recta que una as taxas de contagens aproximadas da amostra e do "fundo". Assim, se a taxa de contagem aproximada da amostra é 400 min^{-1} e a do "fundo" é 25 min^{-1} a fonte deve ser contada durante um intervalo de tempo 4 vezes superior ao do "fundo". Se se dispuser de 20 minutos para toda a determinação, a fonte deveria ser contada durante 16 minutos e o fundo durante 4 minutos, de modo a obter o menor erro.



Nomograma para a determinação da razão entre os tempos de contagem da amostra e do fundo

12 - MÉTODO DOS MÍNIMOS QUADRADOS

12.1 - Valor mais provável de uma quantidade

O princípio do método dos mínimos quadrados formulado pela primeira vez por Legendre, pode ser expresso do seguinte modo:

O valor mais provável de uma quantidade observada é tal que a soma dos quadrados dos desvios entre esse valor e o das observações é mínimo.

Assim, sendo $x_1, x_2, \ldots, x_n$ os valores observados de uma certa quantidade, o valor mais provável, $\underline{\bar{X}}$ é tal que

$$\sum_{i=1}^{n} (x_i - \underline{\bar{X}})^2$$

é mínimo.

Sendo $\bar{x}$ a média de $x_1, x_2, \ldots, x_n$, temos que $\sum_i x_i = n\bar{x}$ e $\sum_i (x_i - \bar{x}) = 0$; nestas condições vem:

$$\sum_i (x_i - X)^2 = \sum_i \left[(x_i - \bar{x}) + (\bar{x} - \underline{\bar{X}})\right]^2$$

$$= \sum_i (x_i - \bar{x}) + n(\bar{x} - \underline{\bar{X}})^2$$

Esta quantidade é, evidentemente, mínima quando $\underline{\bar{X}} = \bar{x}$. O método dos minimos quadrados vem confirmar que o valor mais provável de uma quantidade medida a partir de n observações é a média aritmética dessas observações.

12.2 - Média pesada

A probabilidade de ocorrência de uma observação x_1 é dada por

$\frac{h}{\sqrt{\pi}} \cdot e^{-h^2 (x_i - x)^2}$, em que x é a grandeza da quantidade medida. Então, a probabilidade de ocorrência das observações $x_1, x_2, \ldots, x_n$, sendo o produto das probabilidades individuais, é dado por:

$$\left(\frac{h}{\sqrt{\pi}}\right)^n . \; e^{-h^2 \sum_i (x_i - x)^2}$$

no caso de todas as observações pertencerem à mesma população normal definida pela constante de precisão h. Nestas condições, a probabilidade é máxima se $\sum_i (x_i - \bar{x})^2$ for um mínimo, em acordo com o principio dos minimos quadrados.

Contudo, pode acontecer que as medidas x_1, $x_2, \ldots, x_n$, tenham diferentes precisões, o que significa que pertencem a populações normais distintas.

A probabilidade de observação de um determinado valor, x_i é agora dada por $\frac{h_i}{\sqrt{\pi}} \; e^{-h_i^2 (x_i - x)^2}$ e, então, a probabilidade de ocorrência de todas as observações $x_1, x_2, \ldots, x_n$ será:

$$\frac{h_1 . h_2 . \ldots h_n}{(\sqrt{\pi})^n} \; e^{-\sum_i h_i^2 (x_i - x)^2}$$

O valor máximo desta probabilidade obtém-se quando $\sum_i h_i^2 (x_i - x)^2$ é um mínimo, o que acontece quando x é dado pela <u>média pesada</u>

$$\bar{x} = \frac{\sum_i h_i^2 x_i}{\sum_i h_i^2} .$$

Escrevendo, como anteriormente, $h_i^2 = \frac{1}{2\sigma_i^2}$, vem então para valor mais provável de uma quantidade medida, a partir das observações $x_1, x_2, \ldots, x_n$:

$$x = \frac{\sum_i x_i / \sigma_i^2}{\sum_i 1/\sigma_i^2}$$

Quando as observações $x_1, x_2, \ldots, x_n$ ocorrem com frequências $f_1, f_2, \ldots, f_n$, ou se x_i é a medida de f_i observações, então o valor mais provável da quantidade medida é:

$$x = \frac{\sum_i h_i f_i x_i}{\sum_i h_i^2 f_i} = \frac{\sum_i f_i x_i/\sigma_i^2}{\sum_i f_i/\sigma_i^2} = \frac{\sum_i x_i/\alpha_i^2}{\sum_i 1/\alpha_i^2}$$

em que $\alpha_i = \frac{\sigma_i}{\sqrt{f_i}}$ representa o erro - padrão da média correspondente às observações x_i. Assim, a cada observação x_i pode ser dado um peso, w_i, proporcional ao inverso do quadrado do seu erro - padrão.

12.3 - Erro - padrão da média pesada

Quando um conjunto de observações, x_1, $x_2, \dots, x_n$ são obtidas com os pesos w_1, $w_2, \dots, w_n$, respectivamente, a média pesada desse conjunto é dada por

$$\bar{x} = \frac{\sum_i w_i\, x_i}{\Sigma w_i} \;;$$

A variância da média pesada, σ^2 , é dada por

$$\sigma^2 = \frac{\sum_{i=1}^{n} w_i (x_i - \bar{x})^2}{n - 1}$$

Sendo o erro - padrão da média igual a $\dfrac{\sigma}{(\sum_i w_i)^{1/2}}$,

ou seja

$$\alpha = \sqrt{\frac{\sum_i w_i (x_i - \bar{x})^2}{(n-1) \sum_i w_i}}$$

Se os pesos das determinações são iguais, esta expressão reduz-se, evidentemente, à anteriormente obtida para erro - padrão da média, isto é,

$$\alpha = \sqrt{\frac{\sum_i (x_i - \bar{x})^2}{n(n-1)}}$$

Exemplo de aplicação

Considere-se o conjunto de seis medidas e respectivos pesos indicados no quadro junto. Determinar o valor mais provável da grandeza medida e o respectivo erro - padrão.

i	1	2	3	4	5	6
x_i	6,43	6,24	6,33	6,31	6,40	6,27
w_i	1	1	4	3	3	2

O valor mais provável da grandeza medida - a média pesada,- é dada por

$$\bar{x} = \frac{\sum_i w_i x_i}{\sum_i w_i} = 6,333$$

O erro - padrão da média pesada é dado por

$$\alpha = \sqrt{\frac{\sum_i w_i (x_i - \bar{x})^2}{(n-1) \sum_i w_i}} = \sqrt{\frac{0,0411}{5 \times 14}} = 0,024$$

Atendendo ao reduzido número de observações o resultado deverá ser apresentado sob a forma

$$6,333 \pm 0,024 \quad \text{(6 observações)}$$

ou:

$$6,33 \pm 0,02$$

12.4 - Consistência interna e externa

Como anteriormente se viu (§ 12.2) pode ser dado, a cada observação, um peso, w_i, proporcional ao inverso do quadrado do seu erro - padrão. Designando, como anteriormente por α_i o erro - padrão da medida x_i, o erro - padrão, α , da média pesada, $\bar{x}$, é então dado por

$$\alpha_e^2 = \frac{\sum_i \frac{1}{\alpha_i^2} (x_i - \bar{x})^2}{(n-1) \sum_i \frac{1}{\alpha_i^2}}$$

O erro - padrão, calculado deste modo, depende dos erros - padrões das observações e, também, das diferenças entre as observações. Ele reflecte um comportamento global da medição efectuada que se designa por <u>consistência externa das observações</u>.

Por outro lado, admitindo que um desvio pode ser obtido como uma função linear de desvios independentes, prova-se que o erro - padrão da média é dado por:

$$\alpha_j^2 = \frac{1}{\sum_i \frac{1}{\alpha_i^2}}$$

Sob esta última forma, o erro - padrão da média depende exclusivamente dos erros - padrões das observações separadas. Ele reflecte aquilo que se designa por <u>consistência interna das observações</u>.

Para uma população normal infinita, mostra-se que $\alpha_e/\alpha_j = 1$. Esta razão é dada por

$$R = \frac{\alpha_e}{\alpha_j} = \left[\frac{\sum_{i=1}^{n} \frac{1}{\alpha_i^2} (x_i - \bar{x})^2}{n - 1} \right]^{1/2}$$

Se esta razão não se afasta significativamente da unidade, as observações podem considerar-se consistentes, sendo então mais seguro tomar para erro - padrão o maior dos valores α_e e α_j. Se, pelo contrário, α_e/α_j difere da unidade para além do que deve ser esperado com base em flutuações estatísticas, deverá concluir-se que existem erros sistemáticos. Nestas condiçoes deverá substituir-se os pesos baseados nos erros - padrão por outros, cuja escolha deverá ser feita através de critérios que tenham em consideração as condições experimentais.

12.5 - <u>Outras aplicações do método dos mínimos quadrados</u>

12.5.1 - <u>Solução de equações lineares</u>

Sejam n equações lineares do tipo

$$a_i x + b_i y = k_i,$$

em que a_i, b_i e k_i representam constantes. Supondo $n > 2$, é sempre possível encontrar valores de x e y que satisfaçam a um par qualquer daquelas equações; contudo, esses valores não satisfazem, em geral, a todas as equações do conjunto. Pode, no entanto procurar-se determinar os valores de x e y que, tanto quanto possível, se aproximem dos valores que satisfazem a todas as equações. A solução deste problema pode ser obtida através do método dos mínimos quadrados.

Com efeito, escrevendo as equações sob a forma

$$a_i x + b_i y - k_i = \lambda_i ,$$

determinam-se os valores de x e y tais que a soma dos quadrados dos desvios, λ_i, seja mínima; isto é,

$$\sum_{i=1}^{n} (a_i x + b_i y - k_i)^2$$

deve ser um mínimo. Calculando as derivadas parciais em relação a x e a y, obtemos as condições necessárias a esse mínimo:

$$\sum_i a_i (a_i x + b_i y - k_i) = 0$$

$$\sum_i b_i (a_i x + b_i y - k_i) = 0$$

Os valores de x e y obtidos a partir destas duas equações serão, então, os valores mais prováveis das variáveis.

Estas equações são normalmente escritas sob a seguinte forma:

$$\begin{cases} [aa]\ x + [ab]\ y - [ak] = 0 \\ [ab]\ x + [bb]\ y - [bk] = 0 \end{cases}$$

em que $[ab] = \sum_{i=1}^{n} a_i b_i$. O sistema é, então, designado por sistema de equações normais. Podemos ainda escrevê-lo sob a forma de determinantes:

$$\frac{x}{\begin{vmatrix} [ak] & [ab] \\ [bk] & [bb] \end{vmatrix}} = \frac{y}{\begin{vmatrix} [aa] & [ak] \\ [ab] & [bk] \end{vmatrix}} = \frac{1}{\begin{vmatrix} [aa] & [ab] \\ [ab] & [bb] \end{vmatrix}}$$

Quando a cada equação se pode atribuir um peso, w_i, as equações normais escrevem-se:

$$\begin{cases} [waa]\ x + [wab]\ y - [wak] = 0 \\ [wab]\ x + [wbb]\ y - [wbk] = 0 \end{cases}$$

Exemplo de aplicação [1]

Determinar os valores mais prováveis de x e y que satisfazem às equações $2x + y = 5,1$; $x - y = 1,1$; $4x - y = 7,2$, atribuindo-lhes os pesos 1,3 e 2, respectivamente.

Construa-se a seguinte tabela:

w_i	a_i	b_i	k_i	wa_ia_i	wa_ib_i	wb_ib_i	wa_ik_i	wb_ik_i
1	2	1	5,1	4	2	1	10,2	5,1
3	1	-1	1,1	3	-3	3	3,3	-3,3
2	4	-1	7,2	32	-8	2	57,6	-14,4
TOTAIS				39	-9	6	71,1	-12,6

Teremos, então:

$$[waa] = \sum_i wa_ia_i = 39 \qquad [wab] = \sum_i wa_ib_i = -9$$

$$[wbb] = \sum_i wb_ib_i = 6 \qquad [wak] = \sum_i wa_ik_i = 71,1$$

$$[wbk] = \sum_i wb_ik_i = -12,6$$

O Sistema de equaçoes normais é, assim:

$$39x - 9y = 71,1$$

$$-9x + 6y = 12,6$$

cuja solução é $x = 2,05$ e $y = 0,97$ que são os valores mais prováveis das grandezas x e y.

12.5.2 - Solução de equações lineares envolvendo quantidades observadas

Seja agora o caso em que as constantes a_i e b_i são conhecidas com exactidão mas a constante k_i está afectada de erros acidentais de observação.

Supondo que as equações foram multiplicadas pelas raízes quadradas dos seus pesos (com o que se consegue que elas sejam tratadas como tendo pesos iguais à unidade), os valores mais prováveis das grandezas x e y serão dados, como anteriormente,

---

Extraído do trabalho (3) da bibliografia

$$\begin{cases} [aa]\,x + [ab]\,y = [ak] \\ [ab]\,x + [bb]\,y = [bk] \end{cases}$$

Sejam $d_1, d_2, \ldots, d_n$ os resíduos que se obtêm, respectivamente, com cada equação quando nelas se substitui x e y pelos valores mais prováveis x_0 e y_0; d_i é então dado por

$$d_i = a_i x_0 + b_i y_0 - k_i .$$

Prova-se que o erro padrão, α , em qualquer expressão do tipo $a_i x_0 + b_i y_0 + \ldots - k_i$ é dado por

$$\alpha^2 = \frac{[dd]}{n - m} ,$$

em que $[dd] = \sum_{i=1}^{n} d_i^2$; n é o número de expressões; m é o número de incógnitas.

Sendo α_x e α_y os erros - padrão de x_0 e y_0, respectivamente, tem-se:

$$\frac{\alpha_x^2}{[bb]} = \frac{\alpha_y^2}{[aa]} = \frac{\alpha^2}{\Delta}$$

em que Δ é o determinante $\begin{vmatrix} [aa] & [ab] \\ [ab] & [bb] \end{vmatrix}$

<u>Exemplo 1</u>[(1)]

Considerem-se as equações:

$2x + y = 5,1;$ $\quad x - y = 1,1;$ $\quad 4x - y = 7,2;$ $\quad x + 4y = 5,9.$

Determinar os erros que afectam x e y.

De acordo com o método anterior obtêm-se as equações normais

$$\begin{cases} 22x + y = 46,0 \\ x + 19y = 20,4 \end{cases}$$

cujas soluções são $x = 2,05$; $y = 0,97$

Os resíduos são:

-0,03; -0,02; 0,03; 0,03, de onde se obtem:

$$[dd] = \sum_i d_i^2 = 0,0031$$

$$\alpha^2 = \frac{dd}{n - m} = \frac{0,0031}{4 - 2} = 0,00155$$

vem então para α_x e α_y:

$$\frac{\alpha_x^2}{19} = \frac{\alpha_y^2}{22} = \frac{0,00155}{\Delta}$$

como $\Delta = \begin{vmatrix} 22 & 1 \\ 1 & 19 \end{vmatrix} = 417$, tem-se:

$$\alpha_x = 0,008; \quad \alpha_y = 0,009$$

O resultado da medição seria então:

$$x = 2,05 \pm 0,01 \; ; \quad y = 0,97 \pm 0,01$$

Exemplo 2[1]

Sejam duas determinações directas independentes que originaram os seguintes resultados:

$$x = 1,00 \pm 0,10; \quad y = 0,90 \pm 0,07.$$

Uma terceira observação conduziu à seguinte interdependência de x e y:

$$x + 2y = 3,00 \pm 0,07.$$

Pretende-se conhecer os valores mais prováveis de x e y.

Comecemos por atribuir, a cada equação, um peso inversamente proporcional aos quadrados dos seus erros padrões, isto é, $\underbrace{\frac{1}{0,01}}_{= 100}$ e $\frac{1}{0,0049} = 200.$

Multiplicando as equações por 1, $\sqrt{2}$ e $\sqrt{2}$, respectivamente obteremos equações de igual peso:

$$x = 1,00 \;; \qquad y.\sqrt{2} = 0,90\,\sqrt{2} \;; \qquad x.\sqrt{2} + 2y.\sqrt{2} = 3,00.\sqrt{2} \;.$$

O quadro correspondente a estas equações é, assim:

a_i	b_i	k_i	$a_i a_i$	$b_i b_i$	$a_i b_i$	$a_i k_i$	$b_i k_i$
1	0	1,00	1	0	0	1,00	0
0	2	$0,9\sqrt{2}$	0	2	0	0	1,80
$\sqrt{2}$	$2\sqrt{2}$	$3,00\sqrt{2}$	2	8	4	6,00	12,00
TOTAIS			3	10	4	7,00	13,80

O sistema de equações normais é:

$$\begin{cases} 3x + 4y = 7,00 \\ 4x + 10y = 13,80 \end{cases}$$

cujas soluções são: $x = 1,057$; $\qquad y = 0,957$.

Usando $x = 1,06$ e $y = 0,96$ obtém-se para soma dos quadrados dos resíduos:

$$[dd] = (0,06)^2 + (0,06)^2 \times (\sqrt{2}\,)^2 + (0,02)^2 \times (\sqrt{2}\,)^2 = 0,0116.$$

Como: $\dfrac{\alpha_x^{\,2}}{[bb]} = \dfrac{\alpha_y^{\,2}}{[aa]} = \dfrac{\alpha^2}{\Delta}$

e: $\alpha^2 = \dfrac{[dd]}{3-2}$; $\qquad \Delta = \begin{vmatrix} [aa] & [ab] \\ [ab] & [bb] \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} 3 & 4 \\ 4 & 10 \end{vmatrix} = 14$

vem: $\qquad \dfrac{\alpha_x^{\,2}}{10} = \dfrac{\alpha_y^{\,2}}{3} = \dfrac{0,0116}{14}$

ou seja: $\quad \alpha_x = 0,09; \quad \alpha_y = 0,05$

Os valores das variáveis x e y são assim:

$$x = 1,06 \pm 0,09 \;; \qquad y = 0,96 \pm 0,05$$

12.5.3 - Ajuste de pontos experimentais a uma recta

Este tipo de problemas constitui uma das aplicações importantes do método dos mínimos quadrados à análise de resultados experimentais.

Sejam $y_1, y_2, \ldots, y_n$ os valores de uma quantidade medida, designada por grandeza y, correspondentes a valores $x_1, x_2, \ldots, x_n$ de outra quantidade, designada por grandeza x. Supõe-se que as quantidades y_i são afectadas de erros experimentais mas que os erros das quantidades x_i são desprezáveis.

Existindo uma relação linear entre as grandezas x e y,

$$y = ax + b,$$

a substituição de x por x_i não conduz, em geral a y_i, determinando-se um resíduo dado por

$$d_i = ax_i + b - y_i.$$

Em acordo com o método dos mínimos quadrados, a melhor relação linear que ajusta os valores experimentais é aquela em que os coeficientes dão origem a um mínimo para a soma dos quadrados daqueles resíduos; isto é, $\sum_i (ax_i + b - y_i)^2$.

A partir das derivadas parciais em relação a a e a b, obtém-se como condições de mínimo as seguintes equações:

$$\begin{cases} \sum_i x_i \ (ax_i + b - y_i) = 0 \\ \sum_i (ax_i + b - y_i) = 0 \end{cases}$$

que, sob a forma de equações normais se escrevem:

$$\begin{cases} a\,[xx] + b\,[x] = [xy] \\ a\,[x] + bn = [y] \end{cases}$$

em que n o número de relações lineares existentes, ou seja, o número de determinações experimentais. Do sistema de equações normais obtém-se para valores dos coeficientes

$$a = \frac{n[xy] - [x]\cdot[y]}{n.[xx] - [x]^2} \quad ; \quad b = \frac{[y].[xx]-[x].[xy]}{n[xx] - [x]^2}$$

Quando os valores observados, x_i e y_i, são afectados de pesos, w_i, as equações normais escrevem-se:

$$a\,[wxx] + b[wx] = [wxy]$$

$$a\,[wx] + b\,[w] = [wy]$$

de onde se obtém para valores dos coeficientes a e b:

$$a = \frac{[w]\cdot[wxy] - [wx][wy]}{[w]\cdot[wxx] - [wx]^2} \quad ; \quad b = \frac{[wy].[wxx] - [wx].[wxy]}{[w].[wxx] - [wx]^2}$$

Exemplo de aplicação(1)

Determinar a lei linear a que melhor obedecem os valores x e y abaixo indicados, supondo que os valores de x são exactos.

	x	y	x.y	x.x
	0	4,6	0	0
	1	7,1	7,1	1
	2	9,5	19	4
	3	11,5	34,5	9
	4	13,7	54,8	16
	5	15,9	79,5	25
	6	18,6	111,6	36
	7	20,9	146,3	49
	8	23,5	188,0	64
	9	25,4	228,6	81
TOTAIS	45	150,7	869,4	285

Ter-se-á, assim:

$$a = \frac{10 \times 869,4 - 45 \times 150,7}{10 \times 285 - 45^2} = 2,32$$

$$b = \frac{150,7 \times 285 - 45 \times 869,4}{10 \times 285 - 45^2} = 4,64$$

A relação linear é, portanto, neste exemplo:

$$y = 2,32x + 4,64.$$

12.5.3.1 - Recta de regressão

Da segunda das equações normais anteriores obtém-se

$$a \frac{[x]}{n} + b = \frac{[y]}{n},$$

o que indica que a recta que traduz a relação linear passa pelo ponto $(\bar{x},\bar{y})$, em que

$$\bar{x} = \frac{[x]}{n} \quad e \quad \bar{y} = \frac{[y]}{n},$$

são os valores médios das variáveis x e y;

fazendo a substituição $x = \bar{x} + X$ e $y = \bar{y} + Y$

vem para a relação linear $a\bar{x} + b = \bar{y}$:

$$a(x - X) + b = y - Y;$$

como $y = ax + b$, fica $Y = a X$

Das equações normais vem, para $b = 0$:

$$a = \frac{[XY]}{[XX]};$$

a relação entre x e y pode, então, escrever-se:

$$Y = \frac{[XY]}{[XX]} X, \quad \text{ou seja} \quad y - \bar{y} = \frac{[XY]}{[XX]} (x - \bar{x}).$$

Como $\sigma_X{}^2 = \frac{[XX]}{n}$ e $\sigma_Y{}^2 = \frac{[YY]}{n}$, podemos escrever, introduzindo um coeficiente r tal que

$$r^2 = \frac{[XY]^2}{[XX].[YY]} :$$

$$\frac{y - \bar{y}}{\sigma_Y} = r \frac{x - \bar{x}}{\sigma_X} ,$$

o que constitui a recta de regressão de y em x. O coeficiente r é designado por <u>coeficiente de correlação</u> e mostra-se que $r^2 \leqslant 1$.

Considere-se agora o caso em que ambas as quantidades x e y sejam afectadas de erros experimentais. É, então, necessário determinar, além da regressão de y em x, anteriormente obtida, a regressão de x em y. Esta última é da forma

$$\frac{x - \bar{x}}{\sigma_X} = r \frac{y - \bar{y}}{\sigma_Y}$$

As equações que dão ambas as regressões são iguais para r = 1; em geral, isto não acontece e, assim, as rectas não são coincidentes: escolhe-se, então, a bissectriz do ângulo agudo entre elas, como a recta que melhor satisfaz os valores experimentais obtidos. Como é evidente, a correlação entre x e y é tanto melhor quanto mais próximo da unidade for o valor de r.

Exemplo: (1)

Considerem-se os valores experimentais do exemplo anterior. Determinar o coeficiente de correlação entre as variáveis x e y bem como, a partir dele, a relação linear entre essas variáveis.

Construa-se, de novo, o quadro dos valores das variáveis x e y bem como dos valores de $X = x - \bar{x}$, $Y = y - \bar{y}$, XX, YY e XY, obtidos a partir dos valores médios, $\bar{x}$ e $\bar{y}$ das variáveis x e y.

Teremos, assim, do cálculo anterior:

$$\bar{x} = \frac{[xx]}{n} = \frac{45}{10} = 4,5 \ ; \quad \bar{y} = \frac{[yy]}{n} = \frac{150,7}{10} = 15,1$$

	x	X	X X	y	Y	YY	XY
	0	-4,5	20,25	4,6	-10,5	110,25	47,25
	1	-3,5	12,25	7,1	-8,0	64,00	28,00
	2	-2,5	6,25	9,5	-5,6	31,36	14,00
	3	-1,5	2,25	11,5	-3,6	12,96	5,40
	4	-0,5	0,25	13,7	-1,4	1,96	0,70
	5	+0,5	0,25	15,9	0,8	0,64	0,40
	6	+1,5	2,25	18,6	3,5	12,25	5,25
	7	+2,5	6,25	20,9	5,8	33,64	14,50
	8	+3,5	12,25	23,5	8,4	70,54	29,40
	9	+4,5	20,25	25,4	10,3	106,09	46,35
TOTAIS	45	0	82,50	150,7	-0,3	443,71	191,25

Deste quadro obtém-se:

$$r = \frac{[XY]}{\sqrt{[XX] \cdot [YY]}} = \frac{191,25}{\sqrt{82,50 \times 443,71}} = 0,999$$

Como

$$y - \bar{y} = \frac{[XY]}{[XX]} (x - \bar{x}), \text{ vem:}$$

$$y - 15,1 = \frac{191,25}{82,50} (x - 4,5)$$

ou seja:

$$y = 2,32x + 4,66,$$

em bom acordo com a expressão anteriormente obtida.

12.5.3.2 - Precisão dos coeficientes

Ao obter uma relação linear entre duas variáveis é importante conhecer a precisão dos coeficientes a e b determinados. Com esse fim, calculam-se os resíduos $d_i = ax_i + b - y_i$ e aplica-se o método anterior, tomando a e b como variáveis. O erro quadrático médio, α^2 na expressão de d_i é dado por

$$\alpha^2 = \frac{[dd]}{n-2}$$

Designando por α_a e α_b os erros dos parâmetros a e b teremos, como imediatamente se verifica por comparação com o que anteriormente se viu:

$$\frac{\alpha_a^2}{n} = \frac{\alpha_b^2}{[xx]} = \frac{\alpha^2}{\Delta}.$$

em que $\Delta = \begin{vmatrix} [xx] & [x] \\ [x] & n \end{vmatrix} = n\,[xx] - [x]^2$

Assim, com os valores anteriores de x e y e a relação linear obtida, $y = 2{,}32x + 4{,}64$, pode-se determinar os desvios e construir o quadro seguinte:

	x	y	d	dd
	0	4,6	0,04	0,0016
	1	7,1	-0,14	0,0196
	2	9,5	-0,22	0,0484
	3	11,5	0,10	0,0100
	4	13,7	0,22	0,0484
	5	15,9	0,34	0,1156
	6	18,6	-0,04	0,0016
	7	20,9	-0,02	0,0004
	8	23,5	-0,30	0,0900
	9	25,4	0,12	0,0144
TOTAIS	45	150,7		0,3500

$$\alpha^2 = \frac{[dd]}{n-2} = \frac{0,3500}{8} \; ; \; \Delta = n.[xx] - [x]^2 = 10 \times 285 - 45^2 = 825$$

$$\alpha_a^{\,2} = n\frac{\alpha^2}{\Delta} = 10 \times \frac{0,3500}{8} \times \frac{1}{825} = 5,3 \times 10^{-4}$$

$$\alpha_a = 2,3 \times 10^{-2}$$

$$\alpha_b^{\,2} = [xx]\frac{\alpha^2}{\Delta} = 285\,\frac{0,3500}{8} \cdot \frac{1}{825} = 1,51 \times 10^{-2}$$

$$\alpha_b = 12,3 \times 10^{-2}$$

A relação linear determinada é assim, finalmente:

$$y = (2,32 \pm 0,02)x + (4,64 \pm 0,12)$$

Quando os valores das variáveis x_i e y_i são afectados de pesos, w_i, os erros-padrão dos coeficientes a e b são dados por:

$$\frac{\alpha_a^{\,2}}{[w]} = \frac{\alpha_b^{\,2}}{[wxx]} = \frac{\alpha^2}{[w]\cdot[wxx] - [wx]^2}$$

em que

$$\alpha^2 = \frac{[wdd]}{n-2}$$

12.5.4 - Ajuste a outras curvas

Surge, com frequência o problema de procurar uma relação não linear entre duas variáveis x e y.

A relação procurada é, em geral, da forma

$$y = a_0 + a_1x + a_2x^2 + \ldots + a_mx^m$$

envolvendo m + 1 constantes.

Conhecendo n pares de valores x_i, y_i, com $n > m + 1$, pode-se escolher os valores das constantes $a_0, a_1, \ldots, a_m$, de modo que a soma dos quadrados dos desvios, dada por

$$\sum_{i=1}^{n} (y_i - a_0 - a_1x_i - a_2x_i^2 - \ldots - a_mx_i^m)^2$$

seja mínima.

No caso particular de m = 2, devemos encontrar o mínimo de

$$\sum_{i=1}^{n} (y_i - a_0 - a_1x_i - a_2x_i^2)^2$$

Calculando as derivadas parciais em ordem a a_0, a_1 e a_2 obtém-se:

$$\sum_i (y_i - a_0 - a_1x_i - a_2x_i^2) = 0$$

$$\sum_i x_i(y_i - a_0 - a_1x_i - a_2x_i^2) = 0$$

$$\sum_i x_i^2(y_i - a_0 - a_1x_i - a_2x_i^2) = 0$$

As operações normais são, assim:

$$\begin{cases} [y] - na_0 - [x]\, a_i - [x^2]\, a_2 = 0 \\ [xy] - [x]\, a_0 - [x^2]\, a_1 - [x^3]\, a_2 = 0 \\ [x^2y] - [x^2]a_0 - [x^3]a_1 - [x^4]a_2 = 0 \end{cases}$$

A solução deste sistema permite determinar os valores mais prováveis de a_0, a_1 e a_2. Supondo que os valores de x_i são exactos e os valores de y_i estão sujeitos a erros experimentais, os erros - padrão que afectam os parâmetros a_0, a_1 e a_2 são estimados pelo método anteriormente descrito. Representando por α_0, α_1 e α_2 os erros - padrão de a_0, a_1 e a_2, respectivamente, vem:

$$\frac{\alpha_0^2}{\begin{vmatrix} [x^2] & [x^3] \\ [x^3] & [x^4] \end{vmatrix}} = \frac{\alpha_1^2}{\begin{vmatrix} n & [x^2] \\ [x^2] & [x^4] \end{vmatrix}} = \frac{\alpha_2^2}{\begin{vmatrix} n & [x] \\ [x] & [x^2] \end{vmatrix}} = \frac{\alpha^2}{\begin{vmatrix} n & [x] & [x^2] \\ [x] & [x^2] & [x^3] \\ [x^2] & [x^3] & [x^4] \end{vmatrix}}$$

$$\text{com } \alpha^2 = \frac{[d^2]}{n-3}$$

em que $[d^2]$ é a soma dos quadrados dos desvios.

Exemplo(1):

Ajustar a uma curva parabólica os seguintes resultados experimentais (n = 7):

x	0	0,2	0,4	0,6	0,8	1,0	1,2
y	1,0	2,4	6,6	14,2	25,7	40,1	57,5

Supondo que existe entre a variável x e y uma lei da forma

$$y = a_0 + a_1 x + a_2 x^2,$$

construamos o quadro seguinte:

x	y	x^2	x^3	x^4	xy	x^2y	y (calculado)	d	d^2
0	1,0	0	0	0	0	0	1,05	-0,05	0,0025
0,2	2,4	0,04	0,008	0,0016	0,48	0,096	2,22	0,18	0,0324
0,4	6,6	0,16	0,064	0,0256	2,64	1,056	6,69	-0,09	0,0081
0,6	14,2	0,36	0,216	0,1296	8,52	5,112	14,47	-0,27	0,0729
0,8	25,7	0,64	0,512	0,4096	20,56	16,448	25,55	0,15	0,0225
1,0	40,1	1	1	1	40,1	40,1	39,93	0,17	0,0289
1,2	57,5	1,44	1,728	2,0736	69,0	82,8	57,62	-0,12	0,0144
4,2	147,5	3,64	3,528	3,64	141,3	145,612			0,1817

TOTAIS

As equações são:

$$\begin{cases} 147,5 - 7a_0 - 4,2a_1 - 3,64a_2 = 0 \\ 141,3 - 4,2a_0 - 3,64a_1 - 3,528a_2 = 0 \\ 145,612 - 3,64a_0 - 3,528a_1 - 3,64a_2 = 0 \end{cases}$$

de onde se obtém:

$a_0 = 1,05$; $a_1 = -2,42$; $a_2 = 41,3$

$$\left[d^2\right] = 0{,}1817; \quad \alpha^2 = \frac{\left[d^2\right]}{n-3} = \frac{0{,}1817}{4} = 0{,}0454$$

Os erros - padrão α_0, α_1 e α_2 são dados por:

$$\frac{\alpha_0^{\,2}}{\begin{vmatrix} 3{,}64 & 3{,}528 \\ 3{,}528 & 3{,}64 \end{vmatrix}} = \frac{\alpha_1^{\,2}}{\begin{vmatrix} 7 & 3{,}64 \\ 3{,}64 & 3{,}64 \end{vmatrix}} = \frac{\alpha_2^{\,2}}{\begin{vmatrix} 7 & 4{,}3 \\ 4{,}2 & 3{,}64 \end{vmatrix}} = \frac{0{,}0454}{\begin{vmatrix} 7 & 4{,}2 & 3{,}64 \\ 4{,}2 & 3{,}64 & 3{,}528 \\ 3{,}64 & 3{,}528 & 3{,}64 \end{vmatrix}}$$

ou seja

$$\alpha_0 = 0{,}19; \qquad \alpha_1 = 0{,}73; \qquad \alpha_2 = 0{,}58$$

A relação parabólica entre as variáveis x e y escreve-se, assim:

$$y = (1{,}05 \pm 0{,}19) - (2{,}42 \pm 0{,}73)x + (41{,}3 \pm 0{,}58)x^2.$$

B I B L I O G R A F I A

1 - A. A. Jarrett - "Statistical Methods Used in the Measurement of Radioactivity with Some Useful Graphs and Nomographs" [Technical Information Service, Oak Ridge, Tennessee, W 44371, 1946]

2 - M. Duquesne, R. Grégoire e M. Lefort - "Travaux Pratiques de Physique Nucléaire et de Radiochimie" [Masson et C^{ie}, Paris, 1960]

3 - J. Topping - "Errors of Observation and Their Treatment" [The Institute of Physics, London, 1966]

4 - H. J. Braddick - "Te Physics of Experimental Method" [Chapman & Hall, L.^{td} London, 1956]