

TEMA 5.- AJUSTS

1.- AJUST PER MÍNIMS QUADRATS.

- Anem a resoldre el problema de trobar la **relació funcional** entre dues magnitud x i y .

⇒ Suposarem que la relació entre les dues variables és de tipus lineal

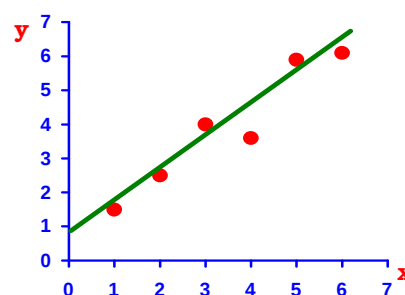
$$y = ax + b$$

⇒ Volem determinar els paràmetres **a** i **b** tot utilitzant **n mesures y_i** corresponents als **n valors x_i** . Suposarem que l'error en les x_i és menyspreable i que les **y_i són fluctuants**, és a dir, venen afectades per errors aleatoris.

⇒ Imaginem que disposem dels següents valors:

x_i	1	2	3	4	5	6
y_i	1,5	2,5	4,0	3,6	5,9	6,1

- ◆ La forma més simple de resoldre el problema és fer una **representació gràfica en coordenades cartesianes**. Podem dibuixar a ull la recta que sembla ajustar-se millor a les dades i traure la seua equació: $y = 0,9x + 0,8$



Representació de les parelles de valors x_i, y_i de un experiment

⇒ Ara bé, **el mètode utilitzat és molt subjectiu** i no serveix quan els errors són grans o les relacions no són lineals. A més a més, **no ens permet fer un càlcul d'errors dels paràmetres**.

1.1.- Mètode de màxima versemblança.

- Convé, per tant, utilitzar un **mètode objectiu** per tal d'obtenir els paràmetres de la relació que busquem.
- Si no sabem res sobre els errors dels valors **y_i** suposarem que tots ells provenen de poblacions normals, amb la mateixa desviació típica **σ** .

* Segons aquesta hipòtesi, el valor **y_i** , procedeix d'un univers amb densitat de probabilitat:

$$p(y_i) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} e^{-(y_i - ax_i - b)^2 / 2\sigma^2} \quad \left\{ \begin{array}{l} y_i \rightarrow \text{v. experimental} \\ f(x_i) = ax_i + b \rightarrow \text{v. teòric} \\ \Delta y_i = y_i - f(x_i) \end{array} \right.$$

$$= \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} e^{-(\Delta y_i)^2 / 2\sigma^2}$$

on **a** i **b** són els **vertaders valors** de la relació **lineal** entre **x** i **y** , **f** és l'equació de la corba que es vol ajustar.

* La **densitat de probabilitat** dels valors **$y_1, y_2, \dots, y_n$** serà:

$$p(y_1, y_2, \dots, y_n) = \frac{1}{\sigma^n (\sqrt{2\pi})^{n/2}} e^{-\chi^2 / 2}$$

on hem introduït la funció **chi-quadrat**

$$\chi^2 = \sum_i \left(\frac{y_i - f(x_i)}{\sigma_i} \right)^2 \Rightarrow \chi^2 = \frac{1}{\sigma^2} \sum_{i=1}^n (y_i - ax_i - b)^2$$

- Apliquem el principi de màxima versemblança i acceptem que els valors més probables dels paràmetres **a** i **b** són aquells que fan màxima la densitat de probabilitat, o el que és el mateix mínima la funció chi-quadrat.

- Aquest mètode es coneix com el dels **mínims quadrats**.

$$\left. \begin{aligned} \frac{\partial \chi^2}{\partial a} &= 0 \\ \frac{\partial \chi^2}{\partial b} &= 0 \end{aligned} \right\} \Leftrightarrow \begin{cases} a \sum_{i=1}^n x_i^2 + b \sum_{i=1}^n x_i = \sum_{i=1}^n x_i y_i \\ a \sum_{i=1}^n x_i + b n = \sum_{i=1}^n y_i \end{cases}$$

- Les equacions anteriors són les equacions normals per a la determinació dels paràmetres a i b i tenen per solució:

$$a = \frac{n \sum_{i=1}^n x_i y_i - \sum_{i=1}^n x_i \sum_{i=1}^n y_i}{n \sum_{i=1}^n x_i^2 - \left(\sum_{i=1}^n x_i \right)^2} = \frac{NS - PQ}{NR - P^2}$$

$$b = \frac{\sum_{i=1}^n y_i - a \sum_{i=1}^n x_i}{n} = \frac{RQ - PS}{NR - P^2}$$

- Aquestes equacions, aplicades a l'exemple donen com resultat: $y = 0,94x + 0,65$.

1.2.- Relacions reduïbles a línies rectes.

- Són moltes les relacions funcionals que poden ésser reduïdes a l'equació de la recta:

a) $y = ae^{bx}$

$$\ln y = \ln a + bx \rightarrow \{\xi = \ln y\} \rightarrow \xi = \ln a + bx$$

b) $y = ab^x$

$$\ln y = \ln a + x \ln b \rightarrow \{\xi = \ln y\} \rightarrow \xi = \ln a + x \ln b$$

c) $y = \frac{1}{a + bx}$

$$\frac{1}{y} = a + bx \rightarrow \{\xi = 1/y\} \rightarrow \xi = a + bx$$

- Cal aclarir que si bé hem suposat que totes les $\sigma(y_i)$ eren les mateixes, les desviacions típiques per a les variables ξ_i no seran totes iguals i per tant caldrà fer una propagació d'errors i minimitzar la funció chi-quadrat més general.

1.3.- Ajust de paràboles.

- El mètode d'ajust per mínims quadrats és, en principi, aplicable a qualsevol relació $y=f(x)$.

$\Rightarrow$ Siga la relació quadràtica: $y = ax^2 + bx + c$, on suposem que totes les $\sigma(y_i)$ són les mateixes.

$\Rightarrow$ Tindrem que minimitzar la funció chi-quadrat

$$\chi^2 = \frac{1}{\sigma^2} \sum_{i=1}^n (y_i - ax_i^2 - bx_i - c)^2$$

amb les condicions de mínim

$$\left. \begin{aligned} \frac{\partial \chi^2}{\partial a} &= 0 \\ \frac{\partial \chi^2}{\partial b} &= 0 \\ \frac{\partial \chi^2}{\partial c} &= 0 \end{aligned} \right\} \Leftrightarrow \begin{cases} a \sum x^4 + b \sum x^3 + c \sum x^2 = \sum x^2 y \\ a \sum x^3 + b \sum x^2 + c \sum x = \sum xy \\ a \sum x^2 + b \sum x + nc = \sum y \end{cases}$$

2.- ERRORS DELS PARÀMETRES.

- Els paràmetres que s'obtenen pel mètode dels mínims quadrats són inexactes, han segut determinats mitjançant n parelles de dades.
- L'error dels paràmetres es calcularà per la regla de propagació de desviacions típiques tot partint de les desviacions típiques $\sigma(\mathbf{y}_i)$, que hem suposat iguals a σ .

⇒ Volem calcular les desviacions típiques $\sigma(a)$, $\sigma(b)$, dels paràmetres de la relació $y=ax+b$.

⇒ Com les desviacions típiques no depenen d'on es prenga l'origen, farem una translació dels valors x_i , prenent ara l'origen en el valor $\bar{x}$.

$$\bar{x} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x_i = 0 \quad \Rightarrow \quad x_i \rightarrow x_i' = x_i - \bar{x}$$

⇒ Les equacions normals es redueixen a

$$a \sum_{i=1}^n x_i'^2 = \sum_{i=1}^n x_i' y_i \quad \Rightarrow \quad a = \frac{\sum_{i=1}^n x_i' y_i}{\sum_{i=1}^n x_i'^2} = \frac{1}{k} \sum_{i=1}^n x_i' y_i$$

$$bn = \sum_{i=1}^n y_i \quad \Rightarrow \quad b = \frac{\sum_{i=1}^n y_i}{n} = \bar{y}$$

- El càlcul dels errors serà diferent segons siguin o no coneguts els errors de les ordenades.

2.1.- Coneguts els errors de les ordenades.

- Coneguda la **desviació típica poblacional $\sigma(y)$** , la regla de propagació i la fórmula de la desviació típica de la mitja permeten escriure

$$\sigma^2(a) = \sum_{i=1}^n \frac{x_i'^2}{k^2} \sigma^2(y) = \frac{\sigma^2(y)}{k} \quad \text{on } k = \sum_{i=1}^n x_i'^2 = \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2$$

$$\sigma^2(b) = \sigma^2(\bar{y}) = \frac{\sigma^2(y)}{n}$$

- En el ajust que es va fer en el primer tema **x_i** i **y_i** venien afectades d'error. És més correcte treballar no més amb errors de **y_i** , acumulant els errors de **x_i** als errors de les ordenades.

- ♦ Suposem que les determinacions de **(x_i, y_i)** venen afectades d'errors:

$$x_i \pm \varepsilon(x_i) \quad y_i \pm \varepsilon(y_i)$$

- ♦ Una vegada **obtinguts els paràmetres de l'ajust $y=ax+b$** , i suposant que els seus errors no tenen una gran influència, **podem incloure l'error de x_i dins l'error de y_i** i considerar que les **x_i** no estan afectades d'error.

$$\varepsilon_2(y_i) = \frac{\partial y}{\partial x_i} \varepsilon(x_i) = a \varepsilon(x_i) \Rightarrow \varepsilon(y_i) = \sqrt{\varepsilon_1^2(y_i) + \varepsilon_2^2(y_i)}$$

* Quan es fa un ajust amb errors coneguts, és convenient efectuar el càlcul del **χ^2** i analitzar l'ajust amb la prova del **χ^2** , determinant quin és el nivell de confiança de l'ajust.

2.2.- Desconeguts els errors de les ordenades.

- En general, la desviació típica poblacional $\sigma(y)$ és desconeguda i cal estimar-la mitjançant les dades $y_1, y_2, \dots, y_n$.
- Si els paràmetres a i b foren exactes, l'estimació es podria fer utilitzant la varianza mostral

$$s^2(y) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (y_i - ax_i - b)^2$$

però els paràmetres es calculen mitjançant els n valors y_i , el millor estimador de $\sigma^2(y)$ és

$$s^2(y) = \frac{1}{n-2} \sum_{i=1}^n (y_i - ax_i - b)^2$$

perquè són $n-2$ els graus de llibertat. *Fixats $n-2$ valors de y_i , els dos que falten queden determinats per a i b .*

- ♦ En física cal conèixer els errors, però si són desconeguts es poden avaluar suposant que tots procedeixen de la mateixa distribució.
- Una vegada estimada la varianza $s^2(y)$:

$$s^2(a) = \frac{s^2(y)}{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2}, \quad s^2(b) = \frac{s^2(y)}{n}$$

- Podem aplicar aquestes fórmules a l'exemple del primer apartat, tot obtenint

$$\left. \begin{array}{l} s^2(y) = 0.322 \\ s^2(a) = 0.0189 \\ s^2(b) = 0.054 \end{array} \right\} \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} s(a) = 0.14 \\ s(b) = 0.23 \end{array} \right\} \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} a = 0.94 \pm 0.14 \\ b = 0.65 \pm 0.23 \end{array} \right.$$

- Per al cas de la **relació quadràtica** $y = ax^2 + bx + c$, **caldria estimar la variança** com

$$s^2(y) = \frac{1}{n-3} \sum_{i=1}^n (y_i - ax_i^2 - bx_i - c)^2$$

ja que ara són **3** els paràmetres, i **avaluar $s^2(a)$, $s^2(b)$, $s^2(c)$** , utilitzant la regla de propagació de desviacions típiques.

2.3.- Ajust amb pesos estadístics.

- Si les fluctuacions de les dades són degudes a errors instrumentals, però no són iguals per a totes les **y_i** , cal introduir les desviacions típiques en les equacions. Per al cas de la recta:

$$\chi^2 = \sum_{i=1}^n \frac{(y_i - ax_i - b)^2}{\sigma_i^2}$$

$$\left. \begin{array}{l} \frac{\partial \chi^2}{\partial a} = 0 \\ \frac{\partial \chi^2}{\partial b} = 0 \end{array} \right\} \Leftrightarrow \left\{ \begin{array}{l} a \sum_{i=1}^n \frac{x_i^2}{\sigma_i^2} + b \sum_{i=1}^n \frac{x_i}{\sigma_i^2} = \sum_{i=1}^n \frac{x_i y_i}{\sigma_i^2} \\ a \sum_{i=1}^n \frac{x_i}{\sigma_i^2} + b \sum_{i=1}^n \frac{1}{\sigma_i^2} = \sum_{i=1}^n \frac{y_i}{\sigma_i^2} \end{array} \right.$$

- Les equacions són similars a les equacions normals per a la determinació dels valors a i b que ja havíem vist, però ara un poc més complicades, les solucions són:

$$a = \frac{1}{\Delta} \left(\sum_{i=1}^n \frac{1}{\sigma_i^2} \sum_{i=1}^n \frac{x_i y_i}{\sigma_i^2} - \sum_{i=1}^n \frac{x_i}{\sigma_i^2} \sum_{i=1}^n \frac{y_i}{\sigma_i^2} \right)$$

$$b = \frac{1}{\Delta} \left(\sum_{i=1}^n \frac{x_i^2}{\sigma_i^2} \sum_{i=1}^n \frac{y_i}{\sigma_i^2} - \sum_{i=1}^n \frac{x_i}{\sigma_i^2} \sum_{i=1}^n \frac{x_i y_i}{\sigma_i^2} \right)$$

on

$$\Delta = \begin{vmatrix} \sum_{i=1}^n \frac{1}{\sigma_i^2} & \sum_{i=1}^n \frac{x_i}{\sigma_i^2} \\ \sum_{i=1}^n \frac{x_i}{\sigma_i^2} & \sum_{i=1}^n \frac{x_i^2}{\sigma_i^2} \end{vmatrix} = \sum_{i=1}^n \frac{1}{\sigma_i^2} \sum_{i=1}^n \frac{x_i^2}{\sigma_i^2} - \left(\sum_{i=1}^n \frac{x_i}{\sigma_i^2} \right)^2$$

- Fent propagació d'errors podem avaluar les desviacions típiques per als paràmetres a i b

$$\sigma_a^2 \cong \frac{1}{\Delta} \sum_{i=1}^n \frac{1}{\sigma_i^2} \quad , \quad \sigma_b^2 \cong \frac{1}{\Delta} \sum_{i=1}^n \frac{x_i^2}{\sigma_i^2}$$

- De forma similar, si les incerteses són degudes a fluctuacions estadístiques, l'error que hem d'associar a les mesures individuals és $\sqrt{y_i}$, fent aquest canvi en les expressions anteriors tindrem

$$\sigma_a^2 \cong \frac{1}{\Delta} \sum_{i=1}^n \frac{1}{y_i} \quad , \quad \sigma_b^2 \cong \frac{1}{\Delta} \sum_{i=1}^n \frac{x_i^2}{y_i} \quad , \quad \Delta = \sum_{i=1}^n \frac{1}{y_i} \sum_{i=1}^n \frac{x_i^2}{y_i} - \left(\sum_{i=1}^n \frac{x_i}{y_i} \right)^2$$

- **Resumint**, tenim les següents possibilitats:

a) **Errors desconeguts**

$$\sigma^2(y) = s^2(y) = \frac{1}{n-2} \sum_{i=1}^n (y_i - ax_i - b)^2$$

b) **Errors instrumentals coneguts**

* les dades venen pesades per: $w_i = \frac{1}{\sigma_i^2}$

c) **Errors estadístics**

* els pesos són ara: $w_i = \left(\frac{1}{\sqrt{y_i}} \right)^2 = \frac{1}{y_i}$