Qualidade do ajuste

por
Milton Procópio de Borba

Ajuste com incertezas diferentes:

Se σ_k for a incerteza em Y_k, então somaremos ponderadamente os quadrados das distâncias "verticais" entre a curva procurada e cada ponto $P_k(X_k, Y_k)$. Os pesos são os inversos das respectivas variâncias.

Assim, o processo se resume em minimizar a função dada por: $\chi^2 = \sum_{k=1}^{n} \left(\frac{Y_k - F(X_k)}{\sigma_k} \right)^2$

Grau de Liberdade

Para determinar os p parâmetros da função ajustadora, é usado, pelo menos n ($\geq p$) pontos $P_k(X_k, Y_k)$.
O número de pontos além do mínimo necessário é denominado grau de liberdade: $\nu = n - p$.
No caso de $\nu = 0$ ($n = p$), não teremos que otimizar nem escolher parâmetros, pois teremos uma única função cujo gráfico "passa" pelos $n = p$ pontos dados.

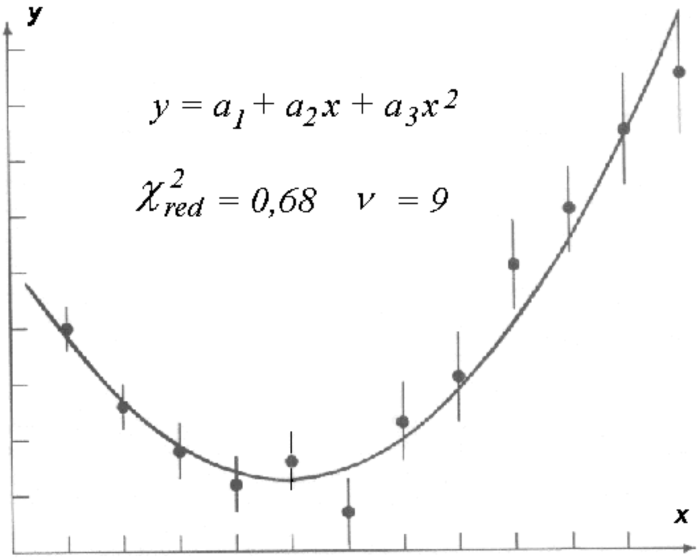
Qualidade do Ajuste

O valor de χ^2 fica fortemente afetado pelo valor de n. Isto nos impede de ter um bom referencial para o melhor χ^2.

Um referencial adequado é o $\chi^2_{red} = \chi^2/\nu$. Realmente, em cada ponto dado, além dos p necessários para definir a curva, no caso ideal, teremos uma parcela em χ^2, próxima do valor 1, totalizando para χ^2, aproximadamente ν.

Se o tipo de curva não for previamente conhecido, podemos fazer ajustes com várias curvas e optar pelo ajuste que tiver *o* χ^2_{red} mais próximo de 1.

Além disto, como temos aproximadamente *68%* de certeza que os valores de F devem estar próximos dos pontos com uma margem de segurança de $\pm\,\sigma$, um ajuste fica coerente se aproximadamente *68%* dos ν pontos, mais os p pontos estiverem a uma distância da curva menor que seu respectivo desvio.
Aproximadamente $\nu/3$ pontos devem estar mais afastado da curva (ver figura ao lado).

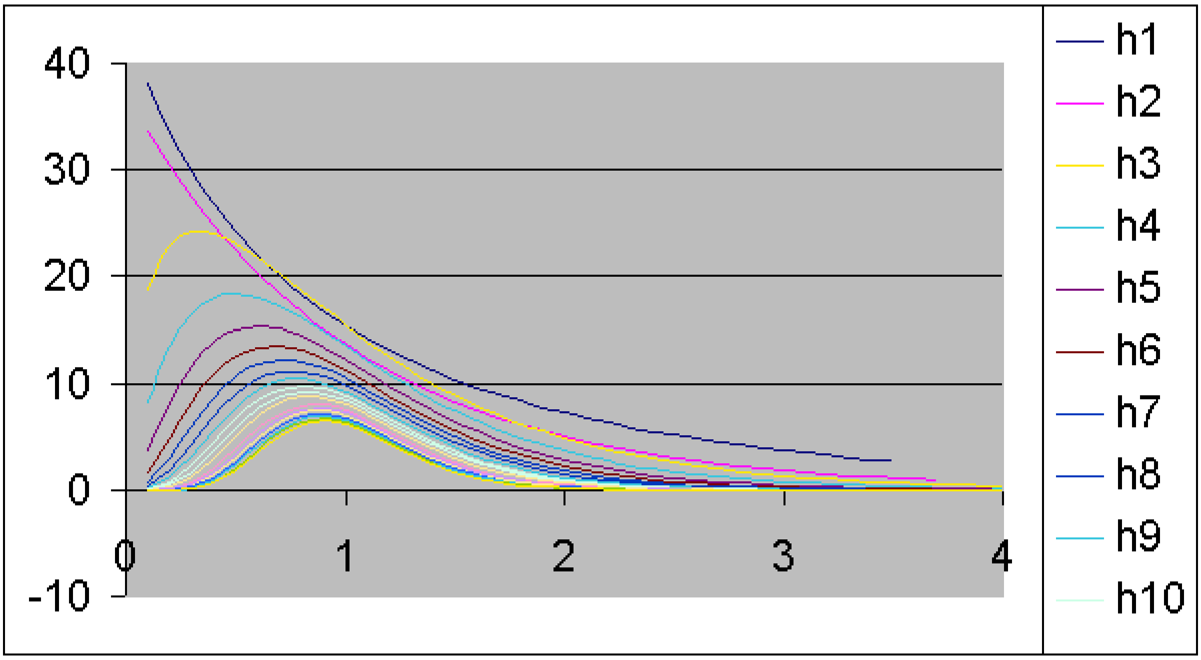


Distribuição χ^2

Como χ^2 é uma quantidade aleatória, seus valores cumprem uma determinada distribuição de probabilidades:

$$h_\nu(y) = \frac{y^{\nu/2-1}e^{-y/2}}{2^{\nu/2}\,\Gamma(\nu/2)}$$, onde Γ é a função Gama, tal que: $\Gamma(n+1) = n.\Gamma(n)$, $\Gamma(1) = 1$ e $\Gamma(1/2) = \sqrt{\pi}$.

Na verdade, esta distribuição é um caso particular da Distribuição Gama, com $\alpha = \nu/2$ e $\beta = 2$.



Para cada v, a probabilidade P_Q de acontecer um certo valor $\chi^2 > Q$ é da por

$$P_Q = \int_Q^\infty h_\nu(y)dy\,.$$

Podemos traçar, num plano, as curvas ν em função de χ^2, onde P_Q é constante.

O gráfico ao lado mostra os valores de ν e de χ^2_{red} para P_Q de *99%, 50%* e *1%* .

Em particular, para $\nu = 10$, vemos que há uma chance de $P = 98\%$ $(= 99 - 1)$ de que o valor de χ^2_{red} esteja entre ***0,26*** e ***2,32.***

Um ajuste com ***10*** pontos livres que resulta num valor de χ^2_{red} abaixo de ***0,26*** ou acima de ***2,32*** não pode ser considerado um bom ajuste.