

8.6 - AJUSTE GAUSSIANO

Existem várias maneiras de se realizar o ajuste de um pico isolado de um espectro alfa ou gama, por uma curva de Gauss. O ajuste pode ser feito com uma forma funcional do tipo de Gauss diretamente, utilizando o método de Powell multiparamétrico. O pico pode ainda ser ajustado transformando a curva de Gauss numa curva do 2º grau, ou numa reta. Nesse último caso, para melhorar a qualidade do ajuste, utiliza-se um procedimento iterativo para a determinação do valor de um dos 3 parâmetros que definem a gaussiana.

8.6.1 - AJUSTE LINEAR COM ITERAÇÃO

Considera-se que um pico isolado de um espectro possa ser representado, em primeira aproximação, por uma curva de Gauss, de forma:

$$I_i = I_0 e^{-k(c_i - c_0)^2},$$

onde: I_i = intensidade ou contagem de cada pico i ($i=1,2,\dots,n$).

I_0 = intensidade ou contagem máxima do pico, a determinar.

c_i = canal correspondente a I_i .

c_0 = canal correspondente ao valor máximo I_0 , a determinar.

k = constante, a determinar.

Tomando o logaritmo dessa expressão, buscando um ajuste linear, obtém-se:

$$\ln I_i = \ln I_0 - k(c_i - c_0)^2.$$

Fazendo a seguinte mudança de variável:

$$\begin{aligned} y_i &= \ln I_i & a &= \ln I_0 \\ x_i &= (c_i - c_0)^2 & b &= -k \end{aligned}$$

obtem-se a forma linear para a curva de Gauss, dada por:

$$y_i = a + bx_i$$

onde a variável x_i contém um dos parâmetros a determinar, C_0 . Essa transformação está apresentada na Fig. 8.8.

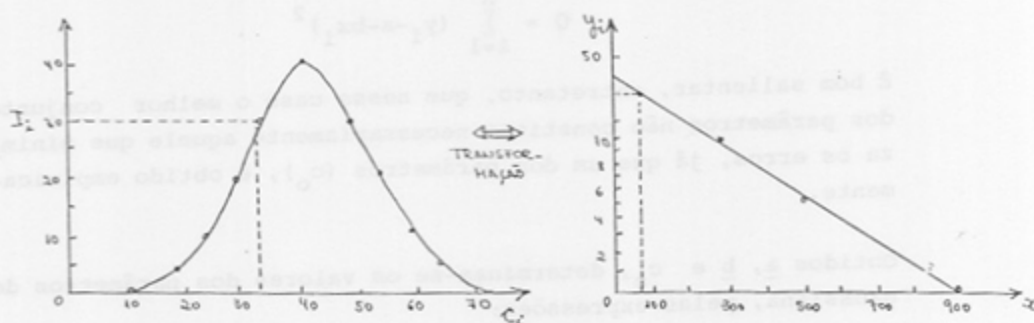


FIGURA 8.8

Assim, dentro da aproximação do método, o valor de c_0 pode ser inicialmente obtido por:

$$c_0 = \frac{\sum_{i=1}^n c_i}{n}$$

onde n corresponde ao número de canais do pico analisado. Após uma primeira determinação dos parâmetros a e b , dá-se um pequeno acréscimo, positivo ou negativo, ao valor de c_0 , e realiza-se um novo ajuste com a forma $y_i = a + bx_i$, ou seja, obtêm-se novos valores para a e b . Utilizando a soma dos desvios quadráticos Q entre os dados experimentais e calculados, por exemplo, pode-se escolher o melhor valor do acréscimo que fornece o menor valor para Q dentro de um certo número de iterações. Isso significa que o valor da variável x_i em cada ponto i , após a primeira tentativa de ajuste, seria obtido por:

$$x_i = (c_i - c_0 - \delta c_0)^2,$$

onde δc_0 corresponde ao acréscimo arbitrário, positivo ou negativo, no valor de c_0 .

Para escolher o melhor dentre os vários ajustes realizados, utiliza-se o conjunto dos parâmetros a , b e $c_0 + \delta c_0$ que fornece o menor valor da soma dos desvios quadráticos, expressa por:

$$Q = \sum_{i=1}^n (y_i - a - bx_i)^2.$$

É bom salientar, entretanto, que nesse caso o melhor conjunto dos parâmetros não constitui necessariamente aquele que minimiza os erros, já que um dos parâmetros (c_0), é obtido empiricamente.

Obtidos a , b e c_0 , determinam-se os valores dos parâmetros da gaussiana, pelas expressões:

$$I_0 = e^a$$

$$k = -b$$

$$c_0 = c_0' + \delta c_0'$$

Os valores calculados \hat{I}_i , e os respectivos desvios percentuais δ_i em relação aos valores experimentais I_i , são obtidos por:

$$\hat{I}_i = I_0 e^{-k(c_i - c_0)^2}$$

$$\delta_i = \frac{I_i - \hat{I}_i}{\hat{I}_i} 100\%$$

8.6.2 - AJUSTE PARABÓLICO

Para evitar o procedimento empírico anterior na obtenção do valor do parâmetro c_0 , realiza-se agora o ajuste não mais com

uma curva linear, mas sim com uma curva do 2º grau, que contém 3 parâmetros. Dessa forma, uma vez determinados os valores dos parâmetros por minimização de Q, obtém-se os parâmetros correspondentes à curva de Gauss.

Novamente parte-se da curva de Gauss, tomando o seu logaritmo:

$$\ln I_i = \ln I_0 - k(c_i - c_0)^2.$$

Agora, entretanto, vai-se fazer o desenvolvimento do termo quadrático:

$$\begin{aligned}\ln I_i &= \ln I_0 - k(c_i^2 - 2c_0 c_i + c_0^2) \\ &= \ln I_0 - kc_i^2 + 2kc_0 c_i + kc_0^2.\end{aligned}$$

Fazendo a seguinte mudança de variáveis:

$$\begin{aligned}y_i &= \ln I_i \\ x_i &= c_i \\ a &= \ln I_0 - kc_0^2 \\ b &= 2kc_0 \\ c &= -k\end{aligned}$$

a curva de Gauss torna-se uma curva do 2º grau, de forma:

$$y_i = a + bx_i + cx_i^2.$$

Essa transformação está apresentada na Fig.VII.9.

Definindo Q como:

$$Q = \sum_{i=1}^n (y_i - a - bx_i - cx_i^2)^2$$

e impondo o critério de minimização de Q em relação aos parâmetros a, b e c, obtém-se:

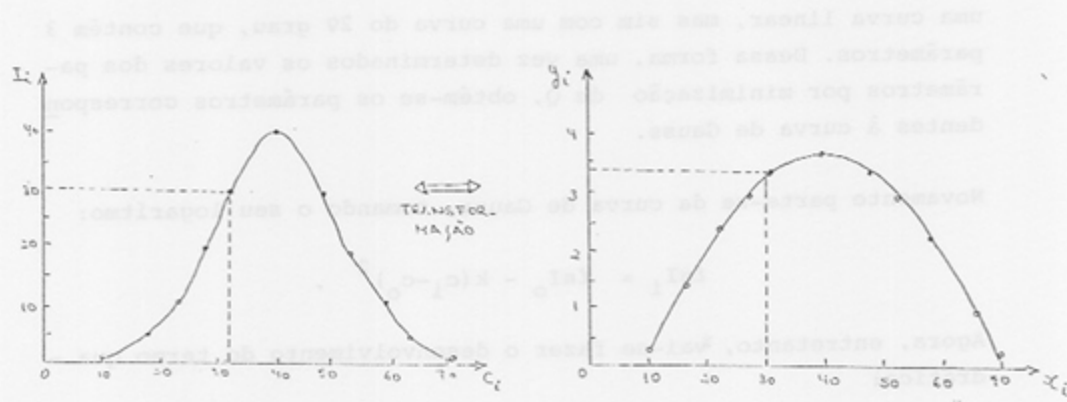


FIGURA 8.9

$$\frac{\partial Q}{\partial a} = 0 = 2 \sum_{i=1}^n (y_i - a - bx_i - cx_i^2)(-1) = 0$$

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

$$\frac{\partial Q}{\partial c} = 0 = 2 \sum_{i=1}^n (y_i - a - bx_i - cx_i^2)(-x_i^2) = 0$$

ou seja:

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^n y_i &= an + b \sum_{i=1}^n x_i + c \sum_{i=1}^n x_i^2 \\ \sum_{i=1}^n x_i y_i &= a \sum_{i=1}^n x_i + b \sum_{i=1}^n x_i^2 + c \sum_{i=1}^n x_i^3 \\ \sum_{i=1}^n x_i^2 y_i &= a \sum_{i=1}^n x_i^2 + b \sum_{i=1}^n x_i^3 + c \sum_{i=1}^n x_i^4 \end{aligned}$$

Esse sistema de equações pode ser resolvido pela Regra de Cramer, e o resultado é idêntico ao obtido para Δ , Δa , Δb e Δc no item 8.5- Ajuste Parabólico, onde:

$$a = \frac{\Delta a}{\Delta} ; \quad b = \frac{\Delta b}{\Delta} \quad e \quad c = \frac{\Delta c}{\Delta} .$$

Conhecendo-se os valores de a , b e c , obtém-se os valores de k , c_0 e I_0 usando o inverso das relações já definidas, ou seja:

$$k = -c$$

$$c_0 = \frac{b}{2a}$$

$$I_0 = \exp\left(\frac{4ac-b^2}{4c}\right) .$$

Os valores calculados \hat{I}_i , e os respectivos desvios percentuais δ_i são obtidos novamente por:

$$\hat{I}_i = I_0 e^{-k(c_i - c_0)^2}$$

$$\delta_i = \frac{I_i - \hat{I}_i}{\hat{I}_i} \cdot 100\%$$

O ajuste por uma curva de Gauss transformada em uma reta ou em uma parábola, pode ser ponderado, onde a atribuição do peso w_i é feita de forma similar a já realizada, e o procedimento para a obtenção das equações, erros e valores dos parâmetros também é o mesmo já apresentado (ver, por exemplo, item 8.4 - Ajuste Exponencial).

8.6.3 - AJUSTE PELO MÉTODO DA CORREÇÃO DIFERENCIAL

Tendo-se n pares de pontos (x_i, y_i) obtidos de observações experimentais, busca-se uma forma de ajuste do tipo gaussiano:

$$y_i = y_0 \exp[-(x_i - x_0)^2 / 2\sigma^2] \quad (8.1)$$

onde y_0 , x_0 e σ são parâmetros a determinar, correspondendo respectivamente a:

y_0 = amplitude máxima, ou de pico.

x_0 = canal ou posição correspondente a y_0 .

σ = desvio padrão em torno do valor médio x_0 , associado à semi-largura Γ da gaussiana, através de:

$$\Gamma = 2\sigma \sqrt{2\ln 2}$$

A representação gráfica desses parâmetros está na Fig. 8.10.

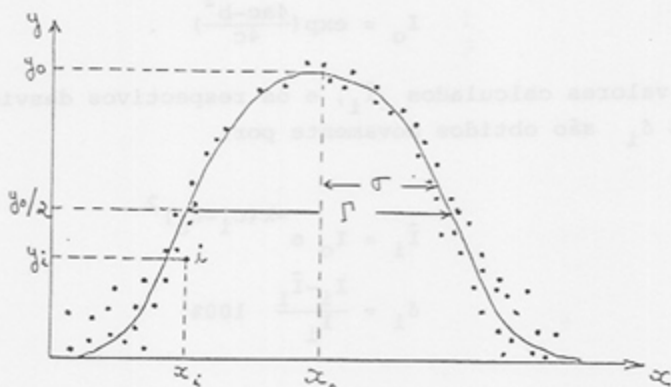


FIGURA 8.10

O método da correção diferencial consiste em supor que os valores buscados dos parâmetros podem ser inferidos, em primeira aproximação, através de valores aproximados y_0' , x_0' e σ' , mais os acréscimos δy_0 , δx_0 e $\delta \sigma$, obtidos por minimizações sucessivas do desvio (Q) entre o valor experimental y_i , e o valor calculado \hat{y}_i . Os valores iniciais de y_0' , x_0' e σ' são obtidos por processos gráficos ou recursos de equipamento (multicanal, por exemplo).

Assim, os valores mais corretos dos parâmetros são expressos por:

$$\begin{aligned} y_o &= y_o' + \delta y_o \\ x_o &= x_o' + \delta x_o \\ \sigma &= \sigma' + \delta \sigma \end{aligned} \quad (8.2)$$

Expandindo a expressão (8.1) em série de Taylor em torno dos valores iniciais, aproximados, tem-se:

$$\begin{aligned} y_i &= \hat{y}_i(y_o', x_o', \sigma') + \left. \frac{\partial y_i}{\partial y_o} \right|_{(y_o', x_o', \sigma')} \delta y_o + \\ &+ \left. \frac{\partial y_i}{\partial x_o} \right|_{(y_o', x_o', \sigma')} \delta x_o + \left. \frac{\partial y_i}{\partial \sigma} \right|_{(y_o', x_o', \sigma')} \delta \sigma + \dots \quad (8.3) \end{aligned}$$

\hat{y}_i representa o valor calculado de y_i com os parâmetros dados por y_o' , x_o' e σ' , ou seja:

$$\hat{y}_i = y_o' \exp[-(x_i - x_o')^2 / 2\sigma'^2]$$

Calculando-se as derivadas da expansão (8.3), e obtendo-se seus valores para y_o' , x_o' e σ' , tem-se:

$$\left. \frac{\partial y_i}{\partial y_o} \right|_{(y_o', x_o', \sigma')} = \exp[-(x_i - x_o')^2 / 2\sigma'^2] = \frac{\hat{y}_i}{y_o'}$$

$$\begin{aligned} \left. \frac{\partial y_i}{\partial x_o} \right|_{(y_o', x_o', \sigma')} &= \frac{y_o' \cdot 2(x_i - x_o')}{2\sigma'^2} \exp[-(x_i - x_o')^2 / 2\sigma'^2] = \\ &= \hat{y}_i \frac{(x_i - x_o')}{\sigma'^2} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \left. \frac{\partial y_i}{\partial \sigma} \right|_{(y_o', x_o', \sigma')} &= y_o' \frac{(x_i - x_o')^2}{\sigma'^3} \exp[-(x_i - x_o')^2 / 2\sigma'^2] = \\ &= \hat{y}_i \frac{(x_i - x_o')^2}{\sigma'^3} \end{aligned}$$

Então, a expansão (VII.3) toma a forma:

$$y_i = \hat{y}_i + \frac{\hat{y}_i}{y_o} \delta y_o + \frac{(x_i - x_o')}{\sigma^2} \hat{y}_i \delta x_o + \frac{(x_i - x_o')^2}{\sigma^3} \hat{y}_i \delta \sigma + \dots \quad (8.4)$$

O método dos mínimos quadrados, que permite a obtenção dos acréscimos δy_o , δx_o e $\delta \sigma$, é o já desenvolvido anteriormente, ou seja:

$$Q = \sum_{i=1}^n [y_i - \hat{y}_i - \frac{\hat{y}_i}{y_o} \delta y_o - \hat{y}_i \frac{(x_i - x_o')}{\sigma^2} \delta x_o - \hat{y}_i \frac{(x_i - x_o')^2}{\sigma^3} \delta \sigma]^2$$

Então:

$$\frac{\partial Q}{\partial \delta y_o} = 2 \sum_{i=1}^n [y_i - \hat{y}_i - \frac{\hat{y}_i}{y_o} \delta y_o - \hat{y}_i \frac{(x_i - x_o')}{\sigma^2} \delta x_o - \hat{y}_i \frac{(x_i - x_o')^2}{\sigma^3} \delta \sigma] (-\frac{\hat{y}_i}{y_o}) = 0$$

$$\frac{\partial Q}{\partial \delta x_o} = 2 \sum_{i=1}^n [y_i - \hat{y}_i - \frac{\hat{y}_i}{y_o} \delta y_o - \hat{y}_i \frac{(x_i - x_o')}{\sigma^2} \delta x_o - \hat{y}_i \frac{(x_i - x_o')^2}{\sigma^3} \delta \sigma] (-\hat{y}_i \frac{(x_i - x_o')}{\sigma^2}) = 0$$

$$\frac{\partial Q}{\partial \delta \sigma} = 2 \sum_{i=1}^n [y_i - \hat{y}_i - \frac{\hat{y}_i}{y_o} \delta y_o - \hat{y}_i \frac{(x_i - x_o')}{\sigma^2} \delta x_o - \hat{y}_i \frac{(x_i - x_o')^2}{\sigma^3} \delta \sigma] (-\hat{y}_i \frac{(x_i - x_o')^2}{\sigma^3}) = 0$$

Dessas expressões, obtêm-se as seguintes equações normais:

$$\sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i) \hat{y}_i = \frac{\delta y_o}{y_o} \sum_{i=1}^n \hat{y}_i^2 + \frac{\delta x_o}{\sigma^2} \sum_{i=1}^n \hat{y}_i^2 (x_i - x_o') +$$

$$\begin{aligned}
 & + \frac{\delta\sigma}{\sigma^3} \sum_{i=1}^n \hat{y}_i^2 (x_i - x_0')^2 \\
 \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i) \hat{y}_i (x_i - x_0') & = \frac{\delta y_0}{y_0} \sum_{i=1}^n \hat{y}_i^2 (x_i - x_0') + \\
 & + \frac{\delta x_0}{\sigma^2} \sum_{i=1}^n \hat{y}_i^2 (x_i - x_0')^2 + \frac{\delta\sigma}{\sigma^3} \sum_{i=1}^n \hat{y}_i^2 (x_i - x_0')^3 \\
 \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i) \hat{y}_i (x_i - x_0')^2 & = \frac{\delta y_0}{y_0} \sum_{i=1}^n \hat{y}_i^2 (x_i - x_0')^2 + \\
 & + \frac{\delta x_0}{\sigma^2} \sum_{i=1}^n \hat{y}_i^2 (x_i - x_0')^3 + \frac{\delta\sigma}{\sigma^3} \sum_{i=1}^n \hat{y}_i^2 (x_i - x_0')^4
 \end{aligned}$$

A determinação dos parâmetros δy_0 , δx_0 e $\delta\sigma$ pode então ser feita, resolvendo esse sistema de equações pela Regra de Cramer, que fornece:

$$\begin{aligned}
 \Delta & = \frac{1}{y_0 \sigma^5} \left\{ \sum_{i=1}^n \hat{y}_i^2 \sum_{i=1}^n \hat{y}_i^2 (x_i - x_0')^2 \sum_{i=1}^n \hat{y}_i^2 (x_i - x_0')^4 + \right. \\
 & + 2 \sum_{i=1}^n \hat{y}_i^2 (x_i - x_0') \sum_{i=1}^n \hat{y}_i^2 (x_i - x_0')^2 \sum_{i=1}^n \hat{y}_i^2 (x_i - x_0')^3 + \\
 & - \left[\sum_{i=1}^n \hat{y}_i^2 (x_i - x_0')^2 \right]^3 - \left[\sum_{i=1}^n \hat{y}_i^2 (x_i - x_0') \right]^2 \sum_{i=1}^n \hat{y}_i^2 (x_i - x_0')^4 + \\
 & - \sum_{i=1}^n \hat{y}_i^2 \left[\sum_{i=1}^n \hat{y}_i^2 (x_i - x_0')^3 \right]^2 \Big\} \\
 \Delta \delta y_0 & = \frac{1}{\sigma^5} \left\{ \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i) \hat{y}_i \cdot \sum_{i=1}^n \hat{y}_i^2 (x_i - x_0')^2 \cdot \sum_{i=1}^n \hat{y}_i^2 (x_i - x_0')^4 + \right. \\
 & + \sum_{i=1}^n \hat{y}_i^2 (x_i - x_0') \cdot \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i) \hat{y}_i (x_i - x_0')^2 \sum_{i=1}^n \hat{y}_i^2 (x_i - x_0')^3 +
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y}_i) \bar{y}_i (x_i - x_0') \sum_{i=1}^n \bar{y}_i^2 (x_i - x_0')^2 \sum_{i=1}^n \bar{y}_i^2 (x_i - x_0')^3 + \\
& - \left[\sum_{i=1}^n \bar{y}_i^2 (x_i - x_0')^2 \right]^2 \sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y}_i) \bar{y}_i (x_i - x_0')^2 + \\
& - \sum_{i=1}^n \bar{y}_i^2 (x_i - x_0') \sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y}_i) \bar{y}_i (x_i - x_0') \sum_{i=1}^n \bar{y}_i^2 (x_i - x_0')^4 + \\
& - \left[\sum_{i=1}^n \bar{y}_i^2 (x_i - x_0')^3 \right]^2 \sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y}_i) \bar{y}_i
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\Delta \delta x_0 &= \frac{1}{y_0' \sigma^3} \left\{ \sum_{i=1}^n \bar{y}_i^2 \sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y}_i) \bar{y}_i (x_i - x_0') \sum_{i=1}^n \bar{y}_i^2 (x_i - x_0')^4 + \right. \\
& + \sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y}_i) \bar{y}_i \cdot \sum_{i=1}^n \bar{y}_i^2 (x_i - x_0')^2 \cdot \sum_{i=1}^n \bar{y}_i^2 (x_i - x_0')^3 + \\
& + \sum_{i=1}^n \bar{y}_i^2 (x_i - x_0') \sum_{i=1}^n \bar{y}_i^2 (x_i - x_0')^2 \sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y}_i) \bar{y}_i (x_i - x_0')^2 + \\
& - \sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y}_i) \bar{y}_i (x_i - x_0') \left[\sum_{i=1}^n \bar{y}_i^2 (x_i - x_0')^2 \right]^2 + \\
& - \sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y}_i) \bar{y}_i \sum_{i=1}^n \bar{y}_i^2 (x_i - x_0') \sum_{i=1}^n \bar{y}_i^2 (x_i - x_0')^4 + \\
& \left. - \sum_{i=1}^n \bar{y}_i^2 \sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y}_i) \bar{y}_i (x_i - x_0')^2 \sum_{i=1}^n \bar{y}_i^2 (x_i - x_0')^3 \right\}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\Delta \delta \sigma &= \frac{1}{y_0' \sigma^2} \left\{ \sum_{i=1}^n \bar{y}_i^2 \sum_{i=1}^n \bar{y}_i^2 (x_i - x_0')^2 \sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y}_i) \bar{y}_i (x_i - x_0')^2 + \right. \\
& + \sum_{i=1}^n \bar{y}_i^2 (x_i - x_0') \sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y}_i) \bar{y}_i (x_i - x_0') \sum_{i=1}^n \bar{y}_i^2 (x_i - x_0')^2 + \\
& \left. + \sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y}_i) \bar{y}_i \sum_{i=1}^n \bar{y}_i^2 (x_i - x_0') \sum_{i=1}^n \bar{y}_i^2 (x_i - x_0')^3 + \right.
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & - \sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y}_i) \bar{y}_i \left[\sum_{i=1}^n \bar{y}_i^2 (x_i - x_0')^2 \right]^2 + \\
 & - \left[\sum_{i=1}^n \bar{y}_i^2 (x_i - x_0')^2 \right]^2 \sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y}_i) \bar{y}_i (x_i - x_0')^2 + \\
 & - \sum_{i=1}^n \bar{y}_i^2 \sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y}_i) \bar{y}_i (x_i - x_0') \sum_{i=1}^n \bar{y}_i^2 (x_i - x_0')^3 .
 \end{aligned}$$

Portanto, os valores dos acréscimos dos parâmetros são:

$$\delta y_0 = \frac{\Delta \delta y_0}{\Delta} ; \quad \delta x_0 = \frac{\Delta \delta x_0}{\Delta} \quad \text{e} \quad \delta \sigma = \frac{\Delta \delta \sigma}{\Delta} \quad (8.5)$$

Obtidos os acréscimos pelo processo de iteração sucessiva, obtêm-se os melhores valores de y_0' , x_0' e σ' através de (8.2), e com estes, obtêm-se os melhores valores para y_0 , x_0 e σ . O critério de convergência ou de grau de precisão do ajuste, pode ser o nível de mudança relativa entre os valores sucessivos de Q, ou simplesmente, dos valores dos acréscimos.

No caso de um ajuste por computador, o programa torna-se mais simplificado e completo quando dependente somente dos n pares de pontos (x_i, y_i) . Isto se consegue fazendo com que os valores iniciais dos parâmetros x_0 , y_0 e σ sejam atribuídos, respectivamente, ao valor médio \bar{x} , dado por:

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

à contagem máxima, e ao desvio padrão, calculado por:

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

Para o caso de análise de um espectro, o ajuste simplesmente gaussiano é insuficiente, pois os seus picos, em geral, são levemente assimétricos. Para simular tal assimetria pode-se realizar um ajuste com uma curva de Gauss superposta a uma reta ou polinômio. Além do mais, é preciso entrar com dados adicionais, como canais inicial e final, e nível estatístico de significância.

8.7- ANÁLISE DE CORRELAÇÃO

Numa amostragem de n observações de variáveis (x_i, y_i) , por argumentos físicos, químicos, biológicos, etc, se busca relacionar as variáveis x e y através do comportamento dos resultados observados x_i e y_i . Tal comportamento pode ser inferido da interpretação de um gráfico dos valores de x_i versus os correspondentes y_i . Se se considerar a quantidade y como sendo uma variável dependente de x , por exemplo, através de uma relação linear da forma

$$y = a + bx$$

os coeficientes a e b podem ser determinados pelo método dos mínimos quadrados, conforme já foi visto.

Assim, a análise de regressão permite se obter o valor de uma variável (y), conhecendo-se uma segunda (x), e dá ênfase à estimativa e medida do erro do processo.

Na análise de correlação, o objetivo básico é obter uma medida do grau de associação que existe entre as duas variáveis. Agora o interesse se concentra na intensidade do relacionamento entre as variáveis ou, em outras palavras, em como as variáveis estão correlacionadas.

Uma medida da quantidade de correlação que existe entre x e y pode ser desenvolvida em termos da variação relativa dos valores de y ao redor da linha de regressão e da correspondente variação ao redor da média da variável y . O termo "variação", como usado em estatística, convencionalmente se refere a uma soma de desvios qua

drados. Assim, a variação dos valores de y ao redor da linha de regressão é medida por:

$$\sum (y - \bar{y})^2$$

e a variação dos valores de y ao redor da média da variável y é medida por:

$$\sum (y - \bar{y})^2$$

A primeira dessas expressões é a soma dos quadrados dos desvios verticais dos valores de y da linha de regressão. A segunda expressão é a soma dos quadrados dos desvios verticais da linha horizontal $y = \bar{y}$. O relacionamento entre as variações ao redor da linha de regressão e da média pode ser sumarizada numa única medida para indicar o grau de associação entre x e y . A medida usada para esse propósito é o Coeficiente de Determinação da Amos - tra, definido como

$$r^2 = 1 - \frac{\sum (y - \hat{y})^2}{\sum (y - \bar{y})^2} \quad (8.6)$$

O coeficiente de determinação, algumas vezes também chamado de coeficiente de determinação linear, é uma medida da tendência dos dados se situar sobre a linha de regressão. Os valores de r^2 variam de 0 a 1, e valores próximos a zero indicam uma pequena (ou nenhuma) associação entre as variáveis x e y , enquanto que valores próximos a 1 indicam uma forte associação entre as variáveis. Desde que os valores de r^2 são sempre positivos, eles não indicam se o relacionamento, se existir, é direto ou inverso. A raiz quadrada do coeficiente de determinação r^2 é chamado "coeficiente de correlação" r , e sempre toma o sinal do parâmetro b da equação de regressão. Então, o coeficiente de correlação r é positivo quando a linha de regressão tem uma inclinação positiva, ou seja, quando o relacionamento entre x e y é tal que pequenos valores de y correspondem a pequenos valores de x , e grandes valores de y correspondem a grandes valores de x . A correlação é ne-

gativa quando a linha de regressão tem uma inclinação negativa, de forma a que grandes valores de y correspondam a pequenos valores de x , e pequenos valores de y correspondam a grandes valores de x . Geometricamente, exemplos de correlações positivas, negativas e nulas são mostrados na Fig. 8.11.

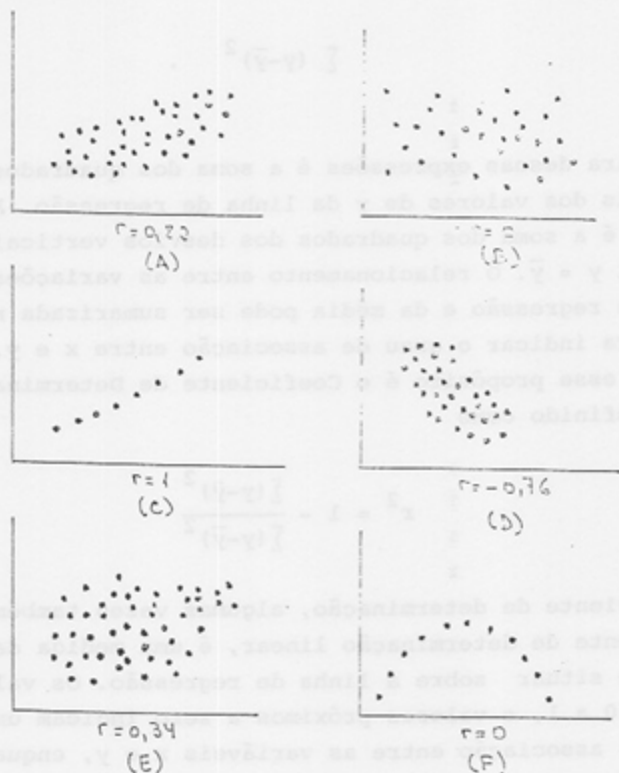


FIGURA 8.11

Observe que desde que r é definido como \pm a raiz quadrada de uma proporção, seus valores estão no intervalo de -1 a $+1$. Quando $r = -1$ ou quando $r = +1$, isto significa que 100% da variação entre os y 's pode ser atribuída ao relacionamento com x ; em outras palavras, $\sum (y - \hat{y})^2 = 0$ e os pontos devem cair todos na linha de

regressão. Quando $r = 0$, significa que nenhuma variação entre os y's pode ser atribuída ao relacionamento com x, e diz-se que não existe correlação.

A definição (8.6) dada para r mostra claramente a natureza, ou essência, do coeficiente de correlação, mas na prática raramente é usada. É comum o uso da expressão:

$$r = \frac{n(\sum xy) - (\sum x)(\sum y)}{\sqrt{n(\sum x^2) - (\sum x)^2} \cdot \sqrt{n(\sum y^2) - (\sum y)^2}} \quad (8.7)$$

que tem a vantagem de dar automaticamente o sinal correto para r. Com exceção de $(\sum y^2)$, todas as outras quantidades necessárias são as mesmas usadas para calcular os coeficientes a e b da linha de regressão.

Quando r é igual a +1, -1 ou 0, não existe problema sobre a interpretação do coeficiente de correlação. Como já foi indicado, r é +1 ou -1 quando todos os pontos estão sobre a linha, e r é zero quando nenhuma variação entre os y's pode ser atribuída ao seu relacionamento com x, ou em outras palavras, quando o conhecimento de x não ajuda na predição de y. Em geral, a definição de r fala que a proporção da variação dos y's que é devida ao relacionamento com x é igual a r^2 , ou que a percentagem é igual a $(100 r^2)$, e é assim que se interpreta a intensidade (força) do relacionamento que está implícito em r.

Se $r = 0,80$ para um conjunto qualquer de dados, e $r = 0,40$ para outro, então a correlação de 0,80 é duas vezes melhor ou duas vezes mais forte que a correlação de 0,40. Quando $r = 0,80$, então $[100(0,80)^2] = 64\%$ da variação dos y's é considerada pelo relacionamento com x, e quando $r = 0,40$, $[100(0,40)^2] = 16\%$ da variação dos y's é considerada pelo relacionamento com x. Dessa forma, levando-se em conta a percentagem de variação, diz-se que uma correlação de 0,80 é 4 vezes mais forte que uma de 0,40. Pelo mesmo raciocínio, uma correlação de 0,60 é 9 vezes mais forte que uma correlação de 0,20.

Existem muitos perigos na interpretação de r . Primeiro, é frequente se fazer vista grossa ao fato que r mede somente a intensidade de relacionamentos lineares; segundo, deve-se lembrar sempre que uma correlação forte (um valor de r perto de $+1$ ou -1) não implica necessariamente num relacionamento causa-efeito.

Se r é calculado indiscriminadamente para os 3 conjuntos de dados da Fig. 8.12, tem-se $r = 0,75$ em cada caso, mas r é uma medi

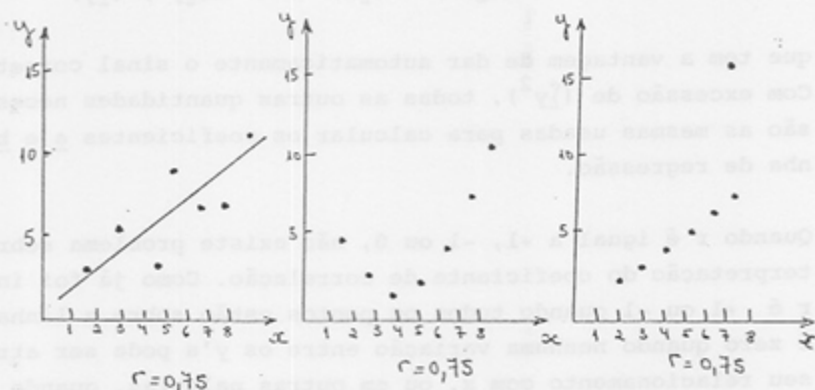


FIGURA 8.12

da significativa da intensidade (força) do relacionamento entre x e y somente no primeiro caso. No segundo caso existe um muito forte relacionamento entre as duas variáveis, mas que não é linear, e no terceiro caso, 6 dos 7 pontos realmente se situam sobre uma linha reta, mas o sétimo ponto é tão afastado que sugere a possibilidade de um erro grosseiro na obtenção dos dados. Então, antes de se calcular r , deve-se sempre plotar os dados para ver se existe alguma razão para acreditar que o relacionamento é, de fato, linear.

A ilusão da interpretação de uma forte correlação como uma indicação de um relacionamento causa-efeito, é melhor explicada com uns poucos exemplos. Uma ilustração popular é a forte correlação

positiva que tem sido obtida para a venda anual de gomas de mascar e a incidência de crimes nos Estados Unidos. Obviamente não se pode concluir que a razão de crimes possa ser reduzida pela proibição de venda de gomas de mascar - ambas as variáveis dependem do tamanho da população, e é esse relacionamento mútuo com uma terceira variável (tamanho da população) que produz a correlação positiva. Outro exemplo é a forte correlação positiva obtida para o número de ninhos de cegonhas em algumas vilas inglesas, e o número de crianças nascidas nessas mesmas vilas.

É algumas vezes perdoável que quando r é calculado com base nos dados de amostras, pode ocorrer uma razoavelmente forte correlação positiva ou negativa puramente por acaso, ainda que não exista um relacionamento entre as duas variáveis sob consideração. Suponha, para raciocínio, que se toma um par de dados, um vermelho e outro verde, e que eles são jogados algumas vezes, e se tomam os resultados apresentados na Tabela 8.4. Calculando r para

TABELA 3.4- Resultado para 2 Dados

Dado Vermelho (y)	Dado Verde (x)
3	5
2	2
5	6
3	1
4	3

esses dados, se obtém o surpreendentemente alto valor $r = 0,66$, e então surge a questão se alguma coisa está errada com a suposição sobre se aqui não existe um relacionamento entre x e y , ou seja, se um dado não sabe o que o outro dado está fazendo. Para responder essa pergunta, é necessário ver se esse alto valor de r pode ser atribuído ao acaso. É importante observar que os valores de r e r^2 não dependem das unidades em que x e y são expressos, e nem de qual das variáveis é escolhida como dependente ou independente. Para um valor de r ser considerado alto, depende somente do campo específico de aplicação do resultado.

Quando um coeficiente de correlação é calculado a partir de dados de uma amostra, como no exemplo dos 2 dados, o valor então obtido para r é somente uma estimativa de um parâmetro correspondente, o "coeficiente de correlação para a população", denotado por ρ . O que r mede para uma amostra, ρ mede para uma população.

Para rejeitar a hipótese nula de não-correlação, tem-se que ter

$$r < -r_{\alpha/2} \quad \text{ou} \quad r > r_{\alpha/2}$$

onde o valor de $r_{\alpha/2}$ pode ser obtido da Tabela 8.4 para $\alpha = 0,05$ e $\alpha = 0,01$. Se a hipótese nula pode ser rejeitada, diz-se que existe uma "correlação significativa"; de outro modo, diz-se que o valor de r não é estatisticamente significativo.

Observação: Uma outra forma de se obter o coeficiente de correlação seria pensando que se existe uma relação linear entre x e y do tipo:

$$y = a + bx$$

onde:

$$a = \frac{\Delta a}{\Delta} = \frac{\sum x^2 \sum y - \sum x \sum xy}{n \sum x^2 - (\sum x)^2}$$

$$b = \frac{\Delta b}{\Delta} = \frac{n \sum xy - \sum x \sum y}{n \sum x^2 - (\sum x)^2}$$

é óbvio que a relação recíproca entre x e y também será linear. Assim, se poderia escrever:

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

Os coeficientes a' e b' seriam igualmente determinados pelo ajuste linear, como foram a e b anteriormente, fornecendo:

$$a' = \frac{\Delta a'}{\Delta} = \frac{\sum y^2 \sum x - \sum y \sum xy}{n \sum y^2 - (\sum y)^2}$$

$$b' = \frac{\Delta b'}{\Delta} = \frac{n \sum xy - \sum x \sum y}{n \sum y^2 - (\sum y)^2}$$

Agora, se a relação entre as variáveis x e y realmente existir, deve haver uma relação entre os coeficientes a e b da reta $y = a + bx$, e os coeficientes a' e b' da dependência recíproca $x = a' + b'y$. Isso quer dizer:

$$\begin{aligned} y &= a + bx = \frac{1}{b'} (x - a') \\ &= \frac{1}{b'} x - \frac{a'}{b'} \end{aligned}$$

Igualando os coeficientes vem:

$$a = -\frac{a'}{b'} \quad \text{e} \quad b = \frac{1}{b'}$$

Assim, havendo uma correlação completa deve-se ter $bb' = 1$, caso contrário, b e b' são nulos. Pode-se então definir um coeficiente de correlação linear $r = \sqrt{bb'}$, como uma medida do grau de correlação linear entre as variáveis x e y , isto é:

$$r = \frac{n \sum xy - \sum x \sum y}{\sqrt{n \sum x^2 - (\sum x)^2} \cdot \sqrt{n \sum y^2 - (\sum y)^2}}$$

que é uma relação idêntica à (8.7). Se o valor de r se aproxima de ± 1 , existe uma correlação linear completa, caso contrário, r tende a zero.

EXERCÍCIO 8.1 - AJUSTE LINEAR

Os resultados da calibração de um detector de GMX foram os seguintes:

ENERGIA (keV)	CANAL
511	46
661	56
835	66
1274	96
1333	100

Determinar:

- Os parâmetros de ajuste A e B para uma expressão do tipo,
 $Y = Ax + B$, onde, Y = energia
 x = canal
- Determinar os desvios percentuais entre os pontos ajustados e os experimentais.

EXERCÍCIO 8.2 - AJUSTE LINEAR PONDERADO

Os resultados das medidas de massa e espessura de um material poroso foram os seguintes:

MASSA (g)	ESPESSURA (mm)
15 ± 2	$1 \pm 0,2$
16 ± 4	$2 \pm 0,4$
20 ± 3	$3 \pm 0,3$
25 ± 7	$4 \pm 0,6$

Determinar:

- Os coeficientes A e B para uma forma de ajuste ponderado, do tipo:

$$Y = A x + B$$

onde,

Y = massa
x = espessura

- b) O Desvio Padrão da estimativa;
- c) Os desvios percentuais dos valores experimentais em relação aos valores ajustados;
- d) As incertezas s_A e s_B dos coeficientes A e B, propagados de Y_i e x_i ;
- e) O intervalo de aceitação dos valores de A e B com um nível de confiança de 95%, utilizando as expressões:

$$A \pm t_{v, 1-\alpha/2} \cdot \frac{S}{\left[\sum (x_i - \bar{x})^2 \right]^{1/2}}$$

$$B \pm t_{v, 1-\alpha/2} \cdot \left(\frac{1}{n} + \frac{\bar{x}^2}{\sum (x_i - \bar{x})^2} \right)^{1/2} \cdot S$$

sendo,

$$S = \left(\frac{\sum (Y_i - A x_i - B)^2}{n-2} \right)^{1/2}$$

n = número de pontos a ajustar

- f) O intervalo de aceitação de S;
- g) A região de aceitação dos pontos, definida pelo ajuste;
- h) O coeficiente de correlação r;
- i) A região de aceitação do coeficiente de correlação r, para um nível de confiança de 95%.

Dados adicionais:

$$s_A = \frac{1}{\Delta} \left\{ \sum_j \omega_j^2 [(Y_j - \sum \omega_j Y_j) - 2A(x_j - \sum \omega_j x_j)]^2 \cdot s_{x_j}^2 + \sum_j \omega_j^2 (x_j - \sum \omega_j x_j)^2 \cdot s_{Y_j}^2 \right\}^{1/2}$$

$$s_B = \frac{1}{\Delta} \left\{ \sum_j \omega_j^2 \left[2x_j (\sum_i \omega_i Y_i) - (\sum_i \omega_i x_i Y_i) - 2B(x_j - \sum_i \omega_i x_i) \right]^2 \cdot s_{x_j}^2 + \right. \\ \left. + \sum_j \omega_j^2 \left[(\sum_i \omega_i x_i) - x_j (\sum_i \omega_i x_i) \right]^2 \cdot s_{Y_j}^2 \right\}^{1/2}$$

Intervalo de aceitação de A e B

Para fixar o intervalo de aceitação dos coeficientes A e B, é utilizado o desvio padrão da estimativa S, dividido pela soma quadrática dos afastamentos de x_i em relação à média \bar{x} .

O desvio padrão da estimativa indica o afastamento médio dos Y_i em relação aos valores calculados Y_{c_i} . Assim, utilizando o nível de confiança de 95%, tem-se os intervalos de aceitação de A e B:

$$A - t_{v, 1-\alpha/2} \cdot \frac{S}{[\sum (x_i - \bar{x})^2]^{1/2}} < A < A + t_{v, 1-\alpha/2} \cdot \frac{S}{[\sum (x_i - \bar{x})^2]^{1/2}}$$

$$B - t_{v, 1-\alpha/2} \left(\frac{1}{n} + \frac{\bar{x}^2}{\sum (x_i - \bar{x})^2} \right)^{1/2} \cdot S < B < B + t_{v, 1-\alpha/2} \cdot \left(\frac{1}{n} + \frac{\bar{x}^2}{\sum (x_i - \bar{x})^2} \right)^{1/2} \cdot S$$

onde,

$$v = n - 2$$

$$S = \left(\frac{\sum (Y_i - Y_{c_i})^2}{n - 2} \right)^{1/2}$$

Intervalo de aceitação de S

Para um nível de confiança $P = 1 - \alpha$, tem-se:

$$\frac{v \cdot S^2}{\chi_{v, 1-\alpha/2}^2} < \sigma^2 < \frac{v \cdot S^2}{\chi_{v, \alpha/2}^2}$$

Região de aceitação dos pontos, definidos pelo ajuste

$$Ax+B-t_{v, 1-\alpha/2} \cdot K.S < \alpha.x + \beta < Ax+B+t_{v, 1-\alpha/2} \cdot K.S$$

onde,

$$K = \left(\frac{1}{n} + \frac{(x_i - \bar{x})^2}{\sum (x_i - \bar{x})^2} \right)^{1/2}$$

$$\bar{x} = \sum \omega_i x_i$$

$$A = \frac{\sum \omega_i x_i Y_i - (\sum \omega_i x_i)(\sum \omega_i Y_i)}{\sum \omega_i x_i^2 - (\sum \omega_i x_i)^2}$$

$$B = \frac{(\sum \omega_i x_i^2)(\sum \omega_i Y_i) - (\sum \omega_i x_i)(\sum \omega_i x_i Y_i)}{\sum \omega_i x_i^2 - (\sum \omega_i x_i)^2}$$

Coefficiente de correlação r

$$r = \frac{\sum \omega_i x_i Y_i - (\sum \omega_i x_i)(\sum \omega_i Y_i)}{[(\sum \omega_i x_i^2) - (\sum \omega_i x_i)^2]^{1/2} \cdot [(\sum \omega_i Y_i^2) - (\sum \omega_i Y_i)^2]^{1/2}}$$

Variância do coeficiente de correlação

$$S^2(r) = \frac{(1-r^2)^2}{n}$$

Região de aceitação do coeficiente de correlação

$$Z - Z_{1-\alpha/2} \cdot \sigma(Z) < Z_o < Z + Z_{1-\alpha/2} \cdot \sigma(Z)$$

onde,

$$Z = \frac{1}{2} \ln \left[\frac{1+r}{1-r} \right]$$

$$\sigma(Z) = \left(\frac{1}{n-3} \right)^{1/2}$$

$Z_{1-\alpha/2}$ = fator da distribuição de Gauss para um nível de confiança de $(1-\alpha/2)$

EXERCÍCIO 8.3 - AJUSTE LINEAR PONDERADO

Os resultados da contagem do decaimento de uma fonte radioativa foram os seguintes:

CONTAGEM (cps)	TEMPO (dia)
15	1
9	3
7	4

- a) Calcular as incertezas associadas à cada contagem;
 b) Fazer o ajuste, por uma exponencial do tipo: $C = C_0 e^{-\lambda t}$ utilizando a transformação:

$$Y_i = \ln C_i$$

$$x_i = t_i$$

$$A = -\lambda$$

$$B = \ln C_0$$

resultando em: $Y_i = A x_i + B$

- c) Determinar os parâmetros C_0 e λ e suas respectivas incertezas, s_{C_0} e s_λ

Obs: Os cálculos devem ser realizados, quando utilizados os logaritmos, pelo menos com 4 casas decimais, senão não convergência de valores, no ajuste.

IX - TESTE DE HIPÓTESES

"Acreditamos invariavelmente naquilo que nos contam como incrível."

- Carlos Drummond de Andrade -

9.1 - INTERVALO DE CONFIANÇA

9.1.1 - Função de Distribuição Simétrica

A probabilidade de se encontrar o valor de uma variável randômica dentro de um certo intervalo, está associada à obtenção da área sob a curva de uma função distribuição. Essa área expressa a frequência acumulada relativa ou a integral da função distribuição até o valor da variável. Para cada valor, existe uma probabilidade associada. Estes valores podem ser tabelados e, o uso das tabelas difere um pouco se a distribuição é simétrica ou não, ou se para grandes ou pequenas amostras.

No caso da distribuição de Gauss, como é impossível e desnecessário, construir tabelas para todas as curvas normais, tabela-se a Distribuição Normal Padrão, que possui $\mu=0$, e $\sigma=1$, e qualquer outra distribuição pode ser a ela reduzida mediante a mudança de escala:

$$z = \frac{x - \mu}{\sigma} \quad (9.1)$$

onde,

x = variável da medida

μ = média da distribuição estimada pela média da amostra \bar{x}

σ = desvio padrão da distribuição estimado pelo desvio padrão da amostra s .

Um dado valor de z significa quantos desvios padrões σ o correspondente valor de x está distante da média μ .

Assim, por exemplo, na Tabela 9.1, para um valor de $z = 1,65$ corresponde uma frequência acumulada relativa de 0,4505, isto é, 45,05% dos valores da distribuição estão contidos entre o valor médio $\mu=0$ e $z=1,65$. Este percentual corresponde à área hachuriada da Fig. 9.1 e expressa a probabilidade de um ponto estar contido ou "cair" neste intervalo.

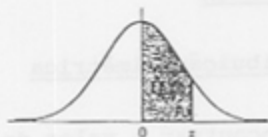


Fig.9.1

Pela simetria da distribuição, no intervalo $\mu \pm z\sigma$ (onde $\sigma=1$) estão contidos 95,01% dos valores da distribuição, isto é, dos possíveis valores que pode assumir a variável x (ou z), 95,01% devem cair dentro do intervalo e 4,99% fora. Assim, este intervalo $\mu \pm z\sigma$ é denominado de "Intervalo de Confiança" com 95,01%, ou o seu complemento, $\alpha = 4,99\%$ de erro possível, associado, ou "Incerteza". A Tabela 9.1 não tem entradas para valores negativos de z , em virtude da simetria da distribuição em relação ao valor médio μ .

Esta tabela permite obter, também, a probabilidade de, numa distribuição com $\mu=10$ e $\sigma=5$, x cair entre 12 e 15. Assim, os valores de z normalizados serão,

$$z_1 = \frac{12-10}{5} = 0,4$$

$$z_2 = \frac{15-10}{5} = 1,0$$

A probabilidade de x cair entre 12 e 15 será:

$$p = p(z_2) - p(z_1) = 0,3413 - 0,1554 = 0,1859$$

O valor de z assim obtido, é usado para fornecer resultados de medidas em grandes amostras, com um pré-fixado intervalo de confiança p (ou incerteza α), sob a forma:

$$(\bar{x} \pm \text{incerteza}) = (\bar{x} \pm z_{\alpha} s) \quad (9.2)$$

onde z_{α} define o tamanho do intervalo, em termos de múltiplos do desvio padrão s da amostra, dentro do qual, qualquer valor obtido por amostragem da mesma população deverá cair dentro com probabilidade p , ou possibilidade de erro α .

Uma outra aplicação da Tabela 9.1 pode ser ilustrada pelo exemplo a seguir. Supondo que a quantidade de radiação cósmica que uma pessoa fica exposta quando viaja de avião tenha uma distribuição normal com $\mu=4,35$ mrem e $\sigma= 0,59$ mrem, pode-se determinar, por exemplo, qual a probabilidade de, num voo, ficar exposta a mais de 5,0 mrem. Com efeito,

$$z = \frac{5,00 - 4,35}{0,59} = 1,10$$

Pela Tabela 9.1, tem-se que esta probabilidade é justamente o valor de α , para $z_{\alpha} = 1,10$. Pela Fig.9.2, tem-se que,

$$\alpha = 0,50 - 0,3643 = 0,1357$$

O valor 0,50 corresponde à metade do valor total da área sob a curva normal, que é igual a 1.

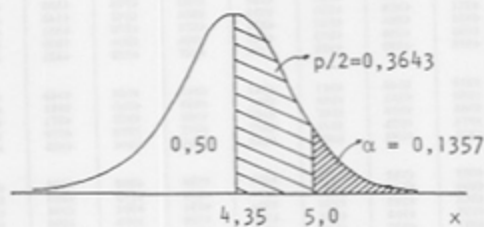


Fig.9.2

Outra situação importante é conhecer, para um número n de medidas feitas numa amostra de valor médio \bar{x} e desvio padrão s , qual o intervalo de confiança tal que, qualquer outra medida realizada (reprodutibilidade) tenha um valor médio dentro dele. Neste caso, o resultado é expresso em função do desvio padrão da média $s_{\bar{x}} = s/\sqrt{n}$,

$$(\bar{x} \pm \text{incerteza da média}) = (\bar{x} \pm z_{\alpha} \cdot \frac{s}{\sqrt{n}})$$

É bom salientar aqui a diferença para o caso anterior, onde a incerteza $z_{\alpha} \cdot s$ representa a chance de uma medida, do conjunto das n medidas feitas com uma amostra, fornecer valor diferente da média. Neste caso, $z_{\alpha} \cdot s/\sqrt{n}$ representa a chance do valor médio de um outro conjunto de n medidas, diferir do valor médio da medida anterior. O intervalo de variação é mais reduzido.

Um outro tipo de função distribuição simétrica muito utilizada é a de Student, especialmente para amostras pequenas. A maneira de utilização dos valores tabelados como os da Tabela 9.2 difere do caso da distribuição normal, pela sua dependência do grau de liberdade $v = n-1$ da medida.

O valor da variável da distribuição é definido por,

$$t = \frac{\bar{x} - \mu}{s/\sqrt{n}} \quad (9.3)$$

e os resultados da medida são dados sob a forma,

$$\bar{x} - t_{\alpha/2} \cdot \frac{s}{\sqrt{n}} < \mu < \bar{x} + t_{\alpha/2} \cdot \frac{s}{\sqrt{n}} \quad (9.4)$$

Assim, o erro máximo da estimativa de μ pelo valor \bar{x} obtido pela a mostra de n medidas é de,

$$E = t_{\alpha/2} \cdot \frac{s}{\sqrt{n}} \quad (9.5)$$

Tabela 4.9

PERCENTAGE POINTS OF THE χ^2 DISTRIBUTIONValues of $\chi^2_{\alpha, p}$ such that

$$P = \frac{1}{2\pi\Gamma(r/2)} \int_0^{\chi^2_{\alpha, p}} y^{r/2-1} e^{-y/2} dy$$



P	0.005	0.010	0.025	0.050	0.100	0.250	0.500	0.750	0.900	0.950	0.975	0.990	0.995	0.999
1	0.00004	0.00016	0.00098	0.00393	0.01579	0.1015	0.4549	1.323	2.706	3.841	5.024	6.635	7.879	10.81
2	0.0100	0.0201	0.0506	0.1026	0.2107	0.5754	1.386	2.773	4.605	5.991	7.378	9.210	10.60	13.82
3	0.0717	0.1418	0.2158	0.3518	0.5844	1.213	2.366	4.108	6.251	7.815	9.348	11.34	12.84	16.27
4	0.2070	0.2971	0.4844	0.7107	1.064	1.923	3.357	5.385	7.779	9.488	11.14	13.28	14.86	18.47
5	0.4117	0.5543	0.8312	1.145	1.610	2.675	4.351	6.626	9.236	11.07	12.83	15.09	16.75	20.51
6	0.6757	0.8721	1.2373	1.635	2.204	3.455	5.348	7.841	10.64	12.59	14.45	16.81	18.55	22.46
7	0.9893	1.239	1.690	2.167	2.833	4.255	6.346	9.037	12.02	14.07	16.01	18.48	20.28	24.33
8	1.344	1.646	2.180	2.733	3.490	5.071	7.344	10.22	13.36	15.51	17.53	20.09	21.96	26.19
9	1.735	2.088	2.700	3.325	4.168	5.899	8.343	11.39	14.68	16.92	19.02	21.67	23.59	27.88
10	2.156	2.558	3.247	3.940	4.865	6.737	9.342	12.55	15.99	18.31	20.48	23.21	25.19	29.58
11	2.603	3.053	3.816	4.575	5.578	7.584	10.34	13.70	17.28	19.68	21.92	24.72	26.76	31.21
12	3.074	3.571	4.404	5.226	6.304	8.438	11.34	14.85	18.55	21.03	23.34	26.22	28.30	32.9
13	3.565	4.107	5.009	5.892	7.041	9.299	12.34	15.98	19.81	22.36	24.74	27.69	29.82	34.5
14	4.075	4.660	5.629	6.571	7.790	10.17	13.34	17.12	21.06	23.68	26.12	29.14	31.32	36.1
15	4.601	5.229	6.262	7.261	8.547	11.04	14.34	18.25	22.31	25.00	27.49	30.58	32.80	37.7
16	5.142	5.812	6.908	7.962	9.312	11.91	15.34	19.37	23.54	26.30	28.85	32.00	34.27	39.2
17	5.697	6.408	7.564	8.672	10.09	12.79	16.34	20.49	24.77	27.59	30.19	33.41	35.72	40.7
18	6.265	7.015	8.231	9.390	10.86	13.68	17.34	21.60	25.99	28.87	31.53	34.81	37.16	42.3
19	6.844	7.633	8.907	10.12	11.65	14.56	18.34	22.72	27.20	30.14	32.85	36.19	38.58	43.8
20	7.434	8.260	9.591	10.85	12.44	15.45	19.34	23.83	28.41	31.41	34.17	37.57	40.00	45.3
21	8.034	8.897	10.28	11.59	13.24	16.34	20.34	24.93	29.62	32.67	35.48	38.93	41.40	46.8
22	8.643	9.542	10.98	12.34	14.04	17.24	21.34	26.04	30.81	33.92	36.78	40.29	42.80	48.2
23	9.260	10.20	11.69	13.09	14.85	18.14	22.34	27.14	32.01	35.17	38.08	41.64	44.18	49.7
24	9.886	10.86	12.40	13.85	15.66	19.04	23.34	28.24	33.20	36.42	39.36	42.98	45.56	51.1
25	10.52	11.52	13.12	14.61	16.47	19.94	24.34	29.34	34.38	37.65	40.65	44.31	46.93	52.6
26	11.16	12.20	13.84	15.38	17.29	20.84	25.34	30.43	35.56	38.89	41.92	45.64	48.29	54.0
27	11.81	12.88	14.57	16.15	18.11	21.75	26.34	31.53	36.74	40.11	43.19	46.95	49.64	55.4
28	12.46	13.56	15.31	16.93	18.94	22.66	27.34	32.62	37.92	41.34	44.46	48.28	50.99	56.8
29	13.12	14.26	16.05	17.71	19.77	23.57	28.34	33.71	39.09	42.56	45.72	49.59	52.34	58.3
30	13.79	14.95	16.79	18.49	20.60	24.48	29.34	34.80	40.26	43.77	46.98	50.89	53.67	59.7
40	20.71	22.16	24.43	26.51	29.05	33.66	39.34	45.62	51.80	55.76	59.34	63.69	66.77	73.4
50	27.99	29.71	32.36	34.76	37.69	42.94	49.33	56.33	63.17	67.50	71.42	76.15	79.49	86.6
60	35.53	37.48	40.48	43.19	46.46	52.29	59.33	66.98	74.60	79.08	83.30	88.38	91.95	99.6
70	43.28	45.44	48.76	51.74	55.33	61.70	69.33	77.58	85.53	90.53	95.02	100.4	104.2	112.3
80	51.17	53.54	57.15	60.39	64.28	71.14	79.33	88.13	96.58	101.9	106.6	112.3	116.3	124.3
90	59.20	61.75	65.65	69.13	73.29	80.62	89.33	98.65	107.6	113.1	118.1	124.1	128.3	137.2
100	67.33	70.06	74.22	77.93	82.36	90.13	99.33	109.1	118.5	124.3	129.6	135.8	140.2	149.4

* Reproduced with permission from Pearson and Hartley, *Biometrika Tables for Statisticians*, Vol. 1, pp. 120-131 (1958).

Por exemplo, para os intervalos de confiança com $p=0,95$ ($\alpha=0,05$) e $p=0,99$ ($\alpha=0,01$) num teste bi-caudal, os valores críticos de t são obtidos nas colunas,

$$t_{1-\alpha/2} = t_{1-0,05/2} = t_{0,975}, \text{ para } p=0,95$$

$$t_{1-\alpha/2} = t_{1-0,01/2} = t_{0,995}, \text{ para } p=0,01$$

respectivamente, em função do grau de liberdade $v = n-1$, numa tabela construída como a Tabela 9.2.

Tabela 9.2 - Valores de t em função de p e v

$$P = \int_{-\infty}^{t_0} \frac{1}{\sqrt{v}} \frac{\Gamma\left(\frac{v+1}{2}\right)}{\Gamma\left(\frac{v}{2}\right)} \left(1 + \frac{t^2}{v}\right)^{-\frac{v+1}{2}} dt$$



P	0.750	0.900	0.950	0.975	0.990	0.995	0.999	0.9995
1	1.000	3.078	6.314	12.706	31.821	63.657	318.31	636.62
2	0.816	1.886	2.920	4.303	6.965	9.925	22.326	31.598
3	0.765	1.638	2.353	3.182	4.541	5.841	10.213	12.924
4	0.741	1.533	2.132	2.776	3.747	4.604	7.173	8.610
5	0.727	1.476	2.015	2.571	3.365	4.032	5.893	6.869
6	0.718	1.440	1.943	2.447	3.143	3.707	5.208	5.959
7	0.711	1.415	1.895	2.365	2.998	3.499	4.785	5.408
8	0.706	1.397	1.860	2.306	2.896	3.355	4.501	5.041
9	0.703	1.383	1.833	2.262	2.821	3.250	4.297	4.781
10	0.700	1.372	1.812	2.228	2.764	3.169	4.144	4.587
11	0.697	1.363	1.796	2.201	2.718	3.106	4.025	4.437
12	0.695	1.356	1.782	2.179	2.681	3.055	3.930	4.318
13	0.694	1.350	1.771	2.160	2.650	3.012	3.852	4.221
14	0.692	1.345	1.761	2.145	2.624	2.977	3.787	4.140
15	0.691	1.341	1.753	2.131	2.602	2.947	3.733	4.073
16	0.690	1.337	1.746	2.120	2.583	2.921	3.686	4.015
17	0.689	1.333	1.740	2.110	2.567	2.898	3.646	3.965
18	0.688	1.330	1.734	2.101	2.552	2.878	3.610	3.922
19	0.688	1.328	1.729	2.093	2.539	2.861	3.579	3.883
20	0.687	1.325	1.725	2.086	2.528	2.845	3.552	3.850
21	0.686	1.323	1.721	2.080	2.518	2.831	3.527	3.819
22	0.686	1.321	1.717	2.074	2.508	2.819	3.505	3.792
23	0.685	1.319	1.714	2.069	2.500	2.807	3.485	3.767
24	0.685	1.318	1.711	2.064	2.492	2.797	3.467	3.745
25	0.684	1.316	1.708	2.060	2.485	2.787	3.450	3.725
26	0.684	1.315	1.706	2.056	2.479	2.779	3.435	3.707
27	0.684	1.314	1.703	2.052	2.473	2.771	3.421	3.690
28	0.683	1.313	1.701	2.048	2.467	2.763	3.408	3.674
29	0.683	1.311	1.699	2.045	2.462	2.756	3.396	3.659
30	0.683	1.310	1.697	2.042	2.457	2.750	3.385	3.646
40	0.681	1.303	1.684	2.021	2.423	2.704	3.307	3.551
60	0.679	1.296	1.671	2.000	2.390	2.660	3.232	3.460
120	0.677	1.289	1.658	1.980	2.358	2.617	3.160	3.373
∞	0.674	1.282	1.645	1.960	2.326	2.575	3.090	3.291

Para $n = 10$, $v=n-1=9$ e, portanto, $t_{0,975} = 2,262$ e $t_{0,995} = 3,250$.

Existem tabelas construídas diretamente para $t_{\alpha/2}$, ou seja, em função da incerteza α , correspondente à área à direita de $t_{\alpha/2}$. O uso de $t_{1-\alpha/2}$ ou $t_{\alpha/2}$ está somente associado ao teste bi-caudal, significando que existe, para uma incerteza α , uma chance de $\alpha/2$ do valor cair à esquerda ou à direita do intervalo. Para um teste mono-caudal, utiliza-se $t_{0,95}$ e $t_{0,99}$ para $p=0,95$ e $p=0,99$, respectivamente, de modo direto da Tabela 9.2

9.1.2 - Função de Distribuição Assimétrica

Considerando a distribuição χ^2 , representada na Fig.9.3, para determinado intervalo de confiança p ou incerteza α , é preciso admitir que $\alpha/2$ chances ocorram à sua esquerda e $\alpha/2$ à sua direita, devido à assimetria da distribuição. Por exemplo, para um intervalo de confiança $p=0,95$, existem 2 limites, não iguais: o inferior em $\chi^2_{0,025}$ e o superior em $\chi^2_{0,975}$. Exemplificando para o grau de liberdade igual a 10, tem-se: (Tabela 4.9 -pg.59)

$$\chi^2_{0,025} = 3,247 \quad \text{e} \quad \chi^2_{0,975} = 20,48$$

Isto significa que o valor de χ^2 da amostra, definido por,

$$\chi^2 = \frac{n s^2}{\sigma^2} \quad (9.6)$$

deve situar-se entre os limites,

$$\chi^2_{0,025} < \frac{n s^2}{\sigma^2} < \chi^2_{0,975} \quad (9.7)$$

ou então, o desvio padrão da distribuição σ , situar-se no intervalo,

$$\frac{s \sqrt{n}}{\chi^2_{0,975}} < \sigma < \frac{s \sqrt{n}}{\chi^2_{0,025}} \quad (9.8)$$

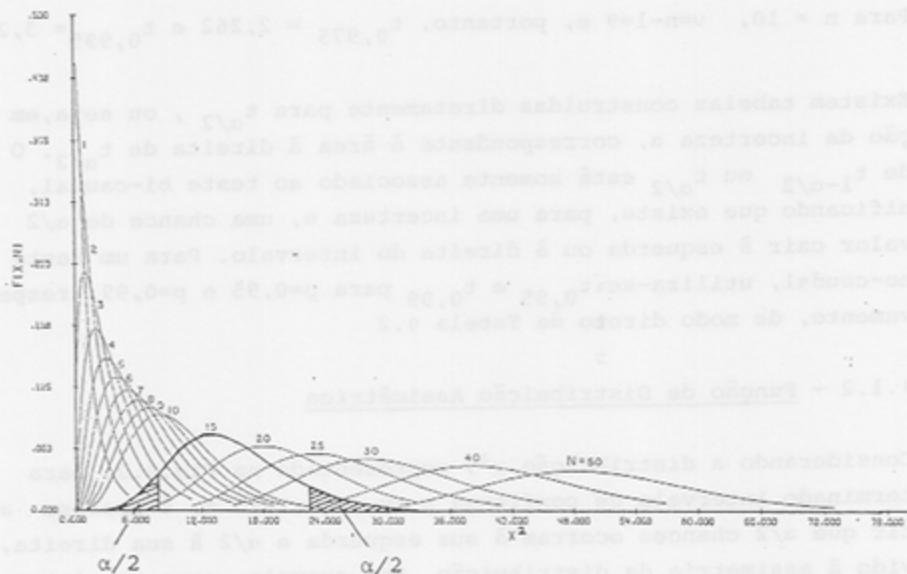


Fig.9.3

Formas da distribuição χ^2 em função do grau de liberdade, e indicação de intervalo de confiança para $N=15$, incerteza α .

9.2 - DIMENSIONAMENTO DE UMA AMOSTRA

Sendo \bar{x} a melhor estimativa do valor médio μ da população, e $s_{\bar{x}}$ o desvio padrão da média, igual a s/\sqrt{n} , o intervalo de confiança de \bar{x} é dado por,

$$\bar{x} \pm z_{\alpha/2} \cdot s_{\bar{x}} \quad (9.9)$$

Se for fixado, "a priori" um erro máximo E de estimativa de μ , pode-se definir um critério para determinar o número n de elementos a serem amostrados, a fim de garantir, uma estimativa da média da população pela amostra, com uma probabilidade p , prê-fixada. Ou se

ja, impondo que,

$$E = z_{\alpha/2} \cdot \frac{s}{\sqrt{n}} = z_{\alpha/2} \cdot \frac{s}{\sqrt{n}} \quad (9.10)$$

Resolvendo a expressão para n, tem-se,

$$n = \left(\frac{z_{\alpha/2} \cdot s}{E} \right)^2 \quad (9.11)$$

Por exemplo, quantas medidas devem ser feitas para que o erro de estimativa do valor médio do tempo de operação de um equipamento seja menor do que 0,25 segundos, com probabilidade de 0,95, sabendo-se que, estudos preliminares indicaram um desvio padrão de 1,5s?

$$n = \left(\frac{1,96 \cdot 1,50}{0,25} \right)^2 = 139$$

onde $z_{\alpha/2} = 1,96$ foi obtido da Tabela 4.3 (pg.51.)

9.3 - TESTE DE HIPÓTESES

Métodos estatísticos de teste de hipóteses são frequentemente utilizados para julgar se existem diferenças significativas, dentro de um grau de confiança p, ou incerteza α , entre dois ou mais resultados de medida.

As alternativas de teste são várias, englobando os resultados comparativos de Amostra x População, Amostra x Amostra, para os seus valores médios e suas variâncias.

Além destas alternativas existem condições de detalhamento do teste, no sentido se a igualdade ou desigualdade dos valores em questão, possui ou não uma causa ou uma direção esperada.

Basicamente existem dois tipos de hipóteses:

- a). Hipótese Nula, H_0 , onde se faz o teste se dois resultados são iguais, dentro de um determinado nível de confiança (ou grau de incerteza);
- b). Hipótese Alternativa, H_1 , onde se faz o teste se dois resultados são diferentes, dentro de um determinado nível de confiança (ou grau de incerteza).

A hipótese nula é prioritária e, sua aceitação ou não, implica numa decisão correta ou não, em relação à realidade em estudo. Isto pode ser resumido na Tabela 9.3.

Tabela 9.3 - Decisão e Acerto

	ACEITAÇÃO DE H_0	REJEIÇÃO DE H_0
H_0 É VERDADEIRA	DECISÃO CORRETA	ERRO DO TIPO α
H_1 É VERDADEIRA	ERRO DO TIPO β	DECISÃO CORRETA

Se a hipótese H é verdadeira e aceita, ou falsa e rejeitada, a decisão é, em qualquer caso, correta. Se a hipótese H é verdadeira mas é rejeitada, ou é falsa e aceita, tem-se uma decisão errônea.

Para a decisão errônea na hipótese nula H_0 , tem-se um erro do tipo α ou do Tipo I; para uma decisão errônea na hipótese alternativa H_1 tem-se um erro do Tipo β , ou do Tipo II. Os valores definidos dos erros α e β não precisam ser iguais. Isto significa que, a rejeição de H_0 num nível α não implica numa aceitação automática num nível β , da hipótese H_1 .

Por exemplo, supondo que a atividade média verdadeira de um material radioativo seja $\mu=13,4$ Bq, e que foram feitas 40 medidas para

estimá-la, através da média da amostra.

Deseja-se afirmar que $\mu = 13,4$ Bq, desde que \bar{x} caia entre 13,2 e 13,6 Bq. Este critério parece simples e decisivo mas, na verdade, é bastante vulnerável. Nas 40 medidas, existe sempre a possibilidade do valor da medida exceder 13,6 Bq ou ser menor que 13,2 Bq, mesmo que o valor médio se situe dentro do citado intervalo.

Supondo que o desvio padrão seja $s = 0,8$ Bq, o desvio padrão da média será, $s_{\bar{x}} = s/\sqrt{n} = 0,126$ Bq. Assim, os limites do intervalo normalizado, segundo (8.1), serão,

$$z_1 = \frac{13,2 - 13,4}{0,126} = -1,59$$

$$z_2 = \frac{13,6 - 13,4}{0,126} = 1,59$$

Utilizando a Tabela 4.3 (pg.51), tem-se o valor da incerteza α para $z_{\alpha/2} = 1,59$, ou seja, $\alpha = 0,1118$.

Assim, a probabilidade de se rejeitar erroneamente a hipótese nula $H_0: \mu = 13,4$ Bq será $\alpha = 0,11$, ou seja, uma chance de erro de 11%. Cabe ao experimentador, decidir se este é um erro aceitável.

Supondo agora que $\mu = 13,7$ Bq seja um valor indesejável no estudo e se deseja verificar, por um teste, qual o erro associado em afirmar que $H_1: \mu \neq 13,7$ Bq.

Seguindo o mesmo procedimento que no caso anterior, tem-se,

$$z_1 = -3,97 \quad \text{e} \quad z_2 = -0,79$$

para os valores 13,2 e 13,6, respectivamente. Ao menor valor de z corresponde o maior erro na aceitação de hipótese H_1 . Como se deseja que a média seja diferente de 13,7, existe uma tendência a priori, na expectativa. Isto significa que, o erro de aceitação errônea de H_1 será, usando a Tabela 4.8 (pg.67), $\beta = 0,21$. Pela Tabela 4.3 (pg.51), bi-caudal, o erro será muito maior, $\beta = 0,43$.

No cálculo da probabilidade de um erro do Tipo II ou β , arbitariamente se escolheu o valor $\mu = 13,7$. Entretanto, nesse como em muitos outros problemas, existe um número infinitamente grande de outras alternativas e, para cada uma, existe uma probabilidade β de erroneamente se aceitar a hipótese H_1 . Assim, na prática, escolhe-se alguns valores e se calcula a probabilidade β . Faz-se um gráfico destas probabilidades em função do valor da média, denominado de "Curva Característica de Operação", ou simplesmente C.O., conforme ilustra a Fig.9.4. Tal curva permite decidir sobre o menor risco a que se está exposto em aceitar erroneamente H_1 .

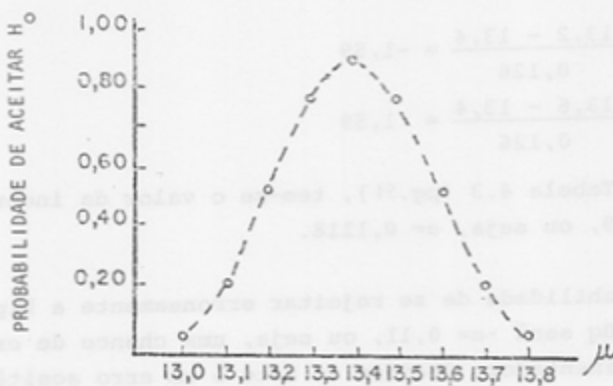


Fig.9.4 - Curva Característica de Operação

9.3.1 - Procedimento do Teste de Hipóteses

Na realização dos testes H_0 e H_1 de dois resultados de medida, é preciso caracterizar em que condições a igualdade, ou não, dos valores médios e de suas variâncias, se testa, uma vez que eles podem referir-se a valores de amostra ou de população.

Na Tabela 9.4 se discrimina as várias alternativas fixando, inclusive, o tipo de distribuição a ser utilizada, a maneira de se definir a variável de relacionamento dos valores em teste, e a região crítica de decisão.

Tabela 9.4 - Situações do Procedimento de Teste

PARÂMETRO	CONDIÇÕES	VARIÁVEL	DISTRIBUIÇÃO	REGIÃO DE ACEITAÇÃO
VARIÂNCIA	AMOSTRA x POPULAÇÃO	$\chi^2 = (n-1)s^2/\sigma^2$	χ^2 com $\nu = (n-1)$	$\chi^2_{\nu, \alpha/2} < \chi^2 < \chi^2_{\nu, 1-\alpha/2}$
	AMOSTRA x AMOSTRA	$F = s_1^2/s_2^2 \quad (s_1 > s_2)$	F com $\nu_1 = (n_1-1)$ $\nu_2 = (n_2-1)$	$F < F_{\nu_1, \nu_2, 1-\alpha/2}$
MÉDIA	AMOSTRA x POPULAÇÃO	$z = (\bar{x} - \mu)/\sigma$	NORMAL	$z_{\alpha/2} < z < z_{1-\alpha/2}$
	AMOSTRA x AMOSTRA	$t = (\bar{x} - \mu)/s_{\bar{x}}$	t de STUDENT, $\nu = (n-1)$	$t_{\nu, \alpha/2} < t < t_{\nu, 1-\alpha/2}$
		$z = \frac{\bar{x}_1 - \bar{x}_2}{s \sqrt{1/n_1 + 1/n_2}}$	NORMAL	$z_{\alpha/2} < z < z_{1-\alpha/2}$
	AMOSTRA x AMOSTRA	$t = \frac{\bar{x}_1 - \bar{x}_2}{\sqrt{\frac{(n_1-1)s_1^2 + (n_2-1)s_2^2}{n_1+n_2-2} \left(\frac{1}{n_1} + \frac{1}{n_2} \right)}}$	STUDENT $\nu = (n_1+n_2-2)$	$t_{\nu, \alpha/2} < t < t_{\nu, 1-\alpha/2}$
	AMOSTRA x AMOSTRA	$t = \frac{(\bar{x}_1 - \bar{x}_2)/\sqrt{s_1^2/n_1 + s_2^2/n_2}}{\sqrt{\frac{(s_1^2/n_1 + s_2^2/n_2)^2}{(s_1^2/n_1)^2 + (s_2^2/n_2)^2}}}$	STUDENT, $\nu = \frac{n_1 - 1}{1 + \frac{n_2 - 1}{n_1}}$	$t_{\nu, \alpha/2} < t < t_{\nu, 1-\alpha/2}$
	PARES CORRELACIONADOS	$t = (\bar{x}_1 - \bar{x}_2)/(s/\sqrt{n})$	STUDENT, ν	$t_{\nu, \alpha/2} < t < t_{\nu, 1-\alpha/2}$

A realização de um teste possui a seguinte sequência de procedimentos:

- 1). Realiza-se o teste da hipótese nula H_0 para os valores médios \bar{x} , conforme o caso, para as variâncias, definindo o nível de confiança $p=1-\alpha$ de decisão;
- 2). Identifica-se o tipo de teste a ser realizado com o uso da Tabela 9.4, e define-se o valor da variável de teste utilizando os valores fornecidos pelas medidas;
- 3). Buscam-se, nos valores tabelados, os limites inferior e superior, do intervalo de confiança $p=1-\alpha$ da função distribuição vinculada à variável de teste, definindo-se se este será mono ou bi-caudal;
- 4). Compara-se o valor da variável de teste com os limites obtidos pela tabela, para decidir se aceita ou se rejeita a hipótese nula H_0 ;
- 5). No caso de rejeição de H_0 , realiza-se o teste alternativo H_1 , definindo-se o erro β ou o intervalo de confiança $p=1-\beta$.

O teste mono-caudal é usado sempre que se espera o resultado numa direção preferencial ou quando existe uma causa para a expectativa de variação de um resultado em relação a uma referência. Ele é mais restritivo e possui um intervalo menor de decisão.

O teste bi-caudal é sempre utilizado quando a probabilidade do resultado cair à esquerda ou à direita do valor de referência é a mesma, ou seja, quando sujeito a somente flutuações randômicas. É usado sempre quando não tem nenhuma razão para que dois resultados sejam diferentes, dentro de um determinado nível de confiança.

Para exemplificar esta sequência, considere o caso em que 36 amostras foram coletadas num dado local no dia 7 de janeiro de 1980 e, no ano seguinte, na mesma época, foram coletadas 7 amostras para estudos de deposição de Sr^{90} , em mCi/km^2 , e os resultados, dados em $(\bar{x} \pm s)$, foram os seguintes:

$$1980 \quad -(70 \pm 10) \text{ mCi/km}^2$$

$$1981 \quad -(80 \pm 12) \text{ mCi/km}^2$$

Para verificar se o valor de 1981 é realmente maior que o de 1980, por exemplo, com um nível de confiança de 0,95, faz-se o teste da hipótese nula H_0 entre os valores médios de duas amostras, supondo que suas variâncias sejam iguais. Assim, a hipótese nula se escreve:

$$H_0 : \bar{x}_{1981} = \bar{x}_{1980}$$

Consultando a Tabela 9.4 para teste de médias, em Amostra x Amostra supondo que as variâncias sejam iguais, embora não se conheça a variância σ^2 da população, tem-se,

1). O valor da variável de teste,

$$t = \frac{\bar{x}_1 - \bar{x}_2}{\sqrt{\frac{(n_1-1)s_1^2 + (n_2-1)s_2^2}{n_1+n_2-2} \cdot \left(\frac{1}{n_1} + \frac{1}{n_2}\right)}} = -1,614$$

onde,

$$n_1 = 6$$

$$n_2 = 7$$

$$s_1^2 = 10$$

$$s_2^2 = 12$$

$$\bar{x}_1 = 70$$

$$\bar{x}_2 = 80$$

2). Utilizando a Distribuição de Student, para o número de graus de liberdade $vm = n_1 + n_2 - 2 = 6 + 7 - 2 = 11$, tem-se, utilizando a Tabela 9.2,

a) Teste Bi-Caudal:

Supondo que não haja razão nenhuma para que a amostra de 1981 apresente um resultado diferente da de 1980, então o teste bi-caudal é o mais indicado. Neste caso, para $p=0,95$, ou $\alpha=0,05$, busca-se na Tabela 9.2, o valor crítico de t em $t_{1-\alpha/2} = t_{0,975}$, para $v=11$, ou seja,

$$t_{0,975} = 2,201 = t_c$$

Comparando o valor obtido dos resultados de $t = 1,614$, tem-se que,

$$t < t_c$$

Isto permite concluir que, para um nível de confiança de 95% os valores médios de precipitação de 1980 e 1981 são iguais, isto é, a hipótese nula H_0 deve ser aceita, neste nível.

b) Teste Mono-Caudal:

Se se esperasse, por alguma razão, uma precipitação em 1981 diferente de 1980, far-se-ia o teste mono-caudal. Assim, pela Tabela 9.2, o valor crítico de t será,

$$t_{0,95} = 1,796 = t_c$$

Como o valor obtido de t é, ainda, menor que 1,796, a hipótese nula continua válida. Isto significa que não houve qualquer alteração no nível de precipitação de Sr^{90} .

Supondo agora que se questionasse sobre a igualdade das duas variâncias. Neste caso, deve-se fazer o teste da hipótese nula H_0 para as variâncias, no mesmo nível de confiança de 0,95 e, se não for aceita, deve-se re-calcular o valor de t (ver Tabela 9.2) para o caso de $\sigma_1^2 \neq \sigma_2^2$, com σ^2 desconhecido e Amostra x Amostra.

A hipótese nula para as variâncias das amostras se escreve,

$$H_0: s_1^2 = s_2^2$$

- 1). Calculando o valor de F, dividindo-se a maior variância pela menor, uma vez que a distribuição F é definida para $F > 1$, tem-se

$$F = \frac{s_2^2}{s_1^2} = \frac{12^2}{10^2} = 1,44 \quad \text{pois } s_2 > s_1$$

- 2). O valor crítico de F é obtido da Tabela 4.10 (pg. 70) para 0,95, ou seja, $F_{1-\alpha/2} = F_{0,975}$ para os graus de liberdade de,

$$v_1 = n_1 - 1 = 6 - 1 = 5$$

$$v_2 = n_2 - 1 = 7 - 1 = 6$$

portanto,

$$F_{6,5,0.975} = F_C = 6,98$$

- 3). Como o valor obtido de F pelos dados de medida ($F=1,44$) é menor do que F_C , ele se situa na região de aceitação da hipótese, ou seja, que as variâncias das amostras são iguais para um nível de confiança de 0,95.

Como as médias são iguais e as variâncias também, os resultados das amostras são iguais, no nível de confiança de 95%, ou com uma certeza de 5%.

É importante salientar que, no uso da Tabela 4.10, v_1 e v_2 correspondem aos graus de liberdade dos valores das medidas associadas ao numerador e denominador de F, respectivamente (com $F > 1$).

No caso em que se rejeite a hipótese nula da igualdade das variâncias das amostras, deve-se refazer o teste dos valores médios uti

lizando o valor de t definido por,

$$t = \frac{\bar{x}_1 - \bar{x}_2}{\sqrt{\frac{s_1^2}{n_1} + \frac{s_2^2}{n_2}}} \quad (9.12)$$

e o número de graus de liberdade v definido por,

$$v = \frac{\left(\frac{s_1^2}{n_1} + \frac{s_2^2}{n_2} \right)^2}{\frac{\left(\frac{s_1^2}{n_1} \right)^2}{n_1 - 1} + \frac{\left(\frac{s_2^2}{n_2} \right)^2}{n_2 - 1}} \quad (9.13)$$

Com o uso da Distribuição de Student, tabelada em 9.2, decide-se sobre a aceitação ou não da hipótese H_0 .

O teste da hipótese alternativa H_1 segue o mesmo procedimento, somente que necessita da definição do intervalo de confiança $p=1-\beta$, ou do erro β de aceitação.

9.4 - TESTE DE CONFIABILIDADE DE EQUIPAMENTO

A verificação da possível igualdade entre a variância de uma amostra e da população, constitui a base do "Teste de Confiabilidade", para a verificação das condições de funcionamento de um sistema de medida. Trata-se do teste H_0 para Amostra x População.

Para um sistema de contagem, para radiações ionizantes, o valor da variância da população é igual ao seu valor médio μ , por satisfazer à distribuição de Poisson. Assim, realizando-se uma série de n medidas, em geral entre 20 e 50, obtém-se o valor da variância da

amostra s^2 que, pela estatística de Poisson, $s^2 = \bar{x}$. A relação entre s^2 e σ^2 deve convergir para 1 à medida que a distribuição de frequências da amostra tender para a distribuição da população, pois, $s^2/\sigma^2 = \bar{x}/\mu$.

Definindo, então,

$$\frac{\chi^2}{v} = \frac{s^2}{\sigma^2} = \frac{\bar{x}}{\mu} \quad (9.14)$$

onde,

μ = valor médio da população

v = graus de liberdade = $n-1$

χ^2 = Qui-quadrado, tabelado em 4.9 (pg.68) cumulativamente

s^2 = variancia da amostra

\bar{x} = média da amostra

pode-se construir um gráfico de controle de qualidade (χ^2/vx), parametrizado pela probabilidade de erro Q , conforme mostra a Fig.9.5

Assim, para cada valor de v , ou seja, número de medidas menos 1, obtém-se os limites de confiança para cada incerteza definida. Para valores de Q muito baixos ou muito altos correspondem, respectivamente, flutuações (medida por s^2) muito grandes ou muito pequenas em relação ao valor médio μ , estimado por \bar{x} através das medidas. Nestas duas situações, é quase certo que o sistema está com problemas, isto é, ruído de mais ou ruído de menos.

É bom salientar que os valores de Q correspondem à integral parcial da distribuição χ^2 que se inicia no valor χ^2 do intervalo e $+\infty$. Para uma incerteza α , as curvas limites são definidas por $(1-\alpha/2)$, no limite inferior e $\alpha/2$, no limite superior. Assim, para uma incerteza de 5% ($\alpha=0,05$), as curvas limites são as de $Q_{0,975}$ e $Q_{0,025}$. Para um número n de medidas o valor de χ^2/v , deve cair dentro do intervalo, cujos limites são as curvas.

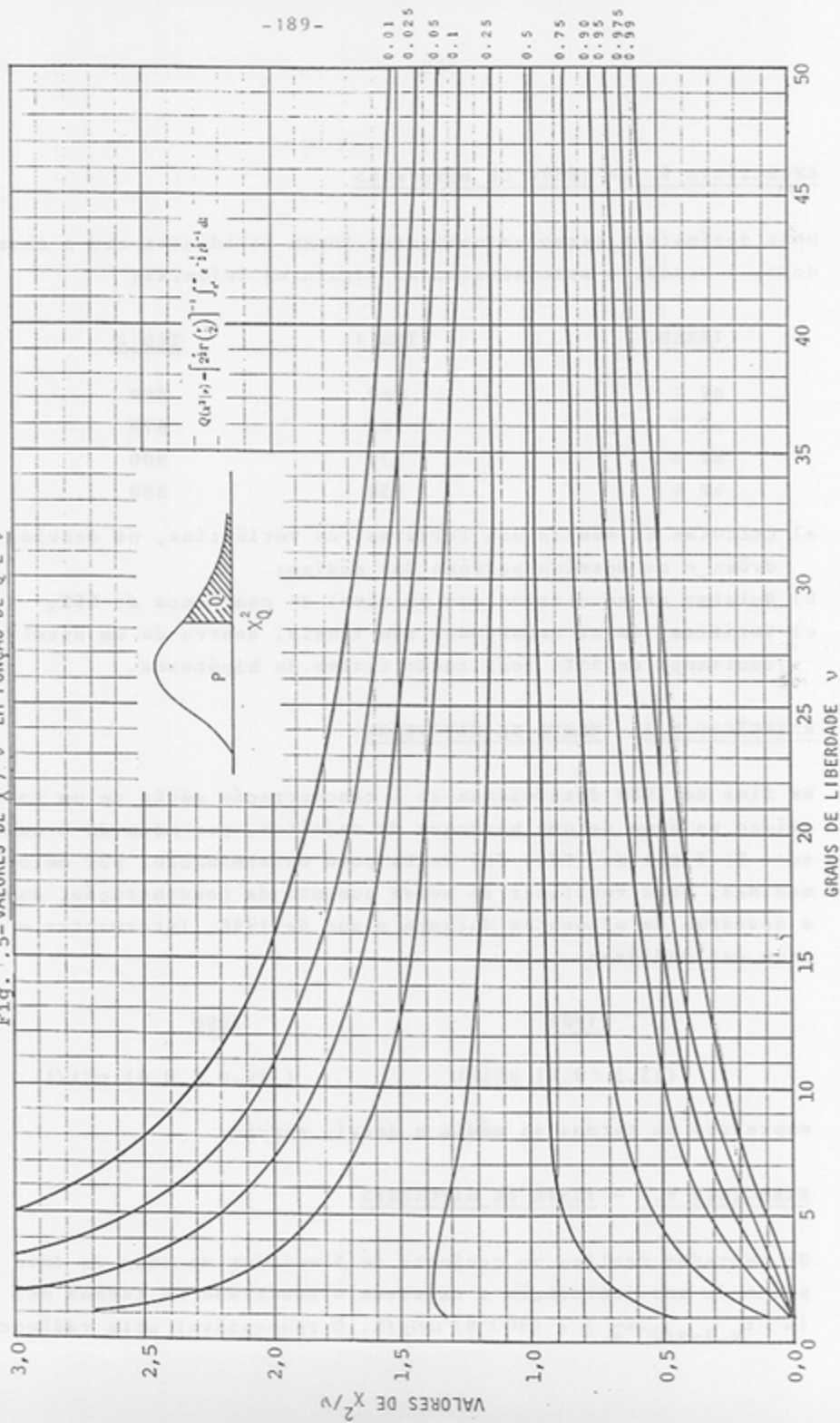
5- PERCENTAGEM DE PONTOS DA DISTRIBUIÇÃO χ^2 - VALORES DE χ^2 EM FUNÇÃO DE Q E DE V

$$p(x|s) = \left[\frac{1}{2\pi} r\left(\frac{s}{\sigma}\right) \right]^{-1} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{1}{2} \left(\frac{s}{\sigma}\right)^2} ds$$

1	-0.9995	0.999	0.9975	0.995	0.99	0.975	0.95	0.925	0.9	0.875	0.85	0.825	0.8	0.775	0.75	0.725	0.7	0.675	0.65	0.625	0.6	0.575	0.55	0.525	0.5	0.475	0.45	0.425	0.4	0.375	0.35	0.325	0.3	0.275	0.25	0.225	0.2	0.175	0.15	0.125	0.1	0.075	0.05	0.025	0.0	0.0001																																																																																																																																																																																																																																										
2	-0.999204	0.998408	0.997612	0.996816	0.996020	0.995224	0.994428	0.993632	0.992836	0.992040	0.991244	0.990448	0.989652	0.988856	0.988060	0.987264	0.986468	0.985672	0.984876	0.984080	0.983284	0.982488	0.981692	0.980896	0.980100	0.979304	0.978508	0.977712	0.976916	0.976120	0.975324	0.974528	0.973732	0.972936	0.972140	0.971344	0.970548	0.969752	0.968956	0.968160	0.967364	0.966568	0.965772	0.964976	0.964180	0.963384	0.962588	0.961792	0.960996	0.960200	0.959404	0.958608	0.957812	0.957016	0.956220	0.955424	0.954628	0.953832	0.953036	0.952240	0.951444	0.950648	0.949852	0.949056	0.948260	0.947464	0.946668	0.945872	0.945076	0.944280	0.943484	0.942688	0.941892	0.941096	0.940300	0.939504	0.938708	0.937912	0.937116	0.936320	0.935524	0.934728	0.933932	0.933136	0.932340	0.931544	0.930748	0.929952	0.929156	0.928360	0.927564	0.926768	0.925972	0.925176	0.924380	0.923584	0.922788	0.921992	0.921196	0.920400	0.919604	0.918808	0.918012	0.917216	0.916420	0.915624	0.914828	0.914032	0.913236	0.912440	0.911644	0.910848	0.910052	0.909256	0.908460	0.907664	0.906868	0.906072	0.905276	0.904480	0.903684	0.902888	0.902092	0.901296	0.900500	0.899704	0.898908	0.898112	0.897316	0.896520	0.895724	0.894928	0.894132	0.893336	0.892540	0.891744	0.890948	0.890152	0.889356	0.888560	0.887764	0.886968	0.886172	0.885376	0.884580	0.883784	0.882988	0.882192	0.881396	0.880600	0.879804	0.879008	0.878212	0.877416	0.876620	0.875824	0.875028	0.874232	0.873436	0.872640	0.871844	0.871048	0.870252	0.869456	0.868660	0.867864	0.867068	0.866272	0.865476	0.864680	0.863884	0.863088	0.862292	0.861496	0.860700	0.859904	0.859108	0.858312	0.857516	0.856720	0.855924	0.855128	0.854332	0.853536	0.852740	0.851944	0.851148	0.850352	0.849556	0.848760	0.847964	0.847168	0.846372	0.845576	0.844780	0.843984	0.843188	0.842392	0.841596	0.840800	0.840004	0.839208	0.838412	0.837616	0.836820	0.836024	0.835228	0.834432	0.833636	0.832840	0.832044	0.831248	0.830452	0.829656	0.828860	0.828064	0.827268	0.826472	0.825676	0.824880	0.824084	0.823288	0.822492	0.821696	0.820900	0.820104	0.819308	0.818512	0.817716	0.816920	0.816124	0.815328	0.814532	0.813736	0.812940	0.812144	0.811348	0.810552	0.809756	0.808960	0.808164	0.807368	0.806572	0.805776	0.804980	0.804184	0.803388	0.802592	0.801796	0.801000	0.800204	0.799408	0.798612	0.797816	0.797020	0.796224	0.795428	0.794632	0.793836	0.793040	0.792244	0.791448	0.790652	0.789856	0.789060	0.788264	0.787468	0.786672	0.785876	0.785080	0.784284	0.783488	0.782692	0.781896	0.781100	0.780304	0.779508	0.778712	0.777916	0.777120

From E. S. Pearson and H. O. Hartley (editors), *Biometrika tables for statisticians*, vol. I. Cambridge Univ. Press, Cambridge, England, 1954 (with permission) for $Q > 0.0005$.

Fig. 1.5- VALORES DE χ^2/v EM FUNÇÃO DE Q E v



EXERCÍCIO 9.1 - TESTE DE HIPÓTESES

Dois dosímetros termoluminescentes foram irradiados com a mesma dose, 4 vezes, e apresentaram as seguintes leituras:

<u>IRRAD.</u>	<u>TLD 1</u>	<u>TLD 2</u>
nº 1	940	890
nº 2	960	870
nº 3	935	900
nº 4	950	880

- Calcular as médias das leituras, as variâncias, os desvios padrões e os desvios padrões das médias;
- Relatar os resultados com um nível de confiança de 95%;
- Verificar se os resultados são iguais, dentro de um nível de confiança de 95%, realizando testes de hipóteses.

EXERCÍCIO 9.2 - TESTE DE HIPÓTESES

Em fins de 1989 determinou-se a concentração média de um radionuclídeo na água de uma barragem de rejeitos, por meio de 6 análises. No final de 1990, foi feita nova determinação, por meio de 10 medidas, para verificar se houve aumento da concentração, devido a descarga de efluentes durante o ano de 1990. Interpretar o resultado das medidas:

<u>1989</u>	<u>1990</u>
$(15,3 \pm 0,9) \text{ pCi/l}$	$(16,0 \pm 0,8) \text{ pCi/l}$

expressas em termos da média e desvio padrão.

EXERCÍCIO 9.3 - TESTE DE HIPÓTESES

Um operador realiza um conjunto de 5 medidas de taxa de dose num ponto de uma instalação e expressa o resultado em termos de:

$$(\bar{x} \pm t_{v, 1-\alpha/2} \cdot \frac{s}{\sqrt{n}}) = (30 \pm 8) \mu\text{Gy/h. O responsável pela radioprote}$$

ção, acreditando que o resultado é um pouco estranho, voltou ao local e fez 15 medidas, expressas da mesma maneira que o operador, e obteve o resultado de $(24 \pm 6) \mu\text{Ci/h}$, e concluiu que suas medidas deram um valor da taxa de dose média, menor. Pergunta-se: a conclusão foi correta?

EXERCÍCIO 9.4 - TESTE DE HIPÓTESES

Verificar se o resultado de uma análise de ^{137}Cs em solo, expresso em termos de $(\bar{x} \pm s)$, está compatível com o valor de referência, estabelecido por um laboratório primário, dentro de um intervalo de confiança de 95%.

ANÁLISE	REFERÊNCIA
(pCi/kg)	(pCi/kg)
(150 ± 10)	(140 ± 4)

EXERCÍCIO 9.5 - TESTE DE HIPÓTESES

Os resultados de medidas da atividade específica beta total de ^{40}K em pCi/g, em amostras de banana d'água e banana prata, coletadas no período de 1979 a 1981, dentro do programa Pré-Operacional de Angra dos Reis, foram os seguintes:

BR-101 - PERTO DA CNAAB (ENE)	MAMBUCABA (WSW)
355 ± 44 (d'água)	307 ± 30 (d'água)
332 ± 41 (prata)	313 ± 40 (d'água)
319 ± 39 (prata)	158 ± 21 (d'água)
300 ± 38 (prata)	301 ± 38 (prata)
	308 ± 39 (d'água)

onde a incerteza associada aos valores é de 3s.

- Calcular os valores médios \bar{x}_1 e \bar{x}_2 representativos das amostras de cada local e os desvios padrões s_1 e s_2 médios;
- Verificar se os resultados são iguais, num nível de confiança de 95%; expurgar o valor (158 ± 21) pCi/g e repetir o teste.

X - LIMITES DE DETECÇÃO

" A solução para o primeiro conflito entre dois homens foi estabelecer uma lei para dirimi-lo. A lei foi interpretada de dois modos, e gerou novo conflito."

- Carlos Drummond de Andrade -

10.1 - LIMITES DE DETECÇÃO

Existem diversas expressões e uma ampla terminologia para definir o "Limite de Detecção". É comum encontrar expressões como: "Minima Atividade Detectável", "Sensitividade" ou "Sensibilidade" e "Limite de Detecção", na definição de um mesmo conceito. Por outro lado, conceitos diferentes, como 2 vezes o Background, 2 vezes o desvio padrão do background, 10% do background, 3 vezes o desvio padrão do "branco", são usados com a denominação única de " Limite de Detecção."

Consequentemente, os resultados obtidos por diferentes autores ficam de difícil comparação, uma vez que estas ambiguidades podem conduzir a diferenças em 2 ou mais ordens de grandeza. Isto evidentemente é insatisfatório.

Essa variedade de conceitos tem origem em diversas causas como:

- a). variedade de técnicas de detecção ;
- b). número de parâmetros controláveis de cada técnica;
- c). necessidade de otimizar operacionalmente uma técnica, com a introdução de simplificações não prejudiciais aos seus resultados típicos;
- d). variação na exigência do técnico na fixação da qualidade da medida em termos de intervalo de confiança.

Por exemplo, na técnica de determinação de baixas concentrações por Absorção Atômica, o limite de detecção pode ser definido facilmente como: "A concentração que equivale a dois desvios padrão de