



# **TUTORIAL DO ORIGIN 8.0 AJUSTE DE CURVA NÃO LINEAR**

**Prof. Henrique M.J. Barbosa**  
**Versão 0.1**

**9 de Maio 2009**

# FUNÇÃO DE AJUSTE

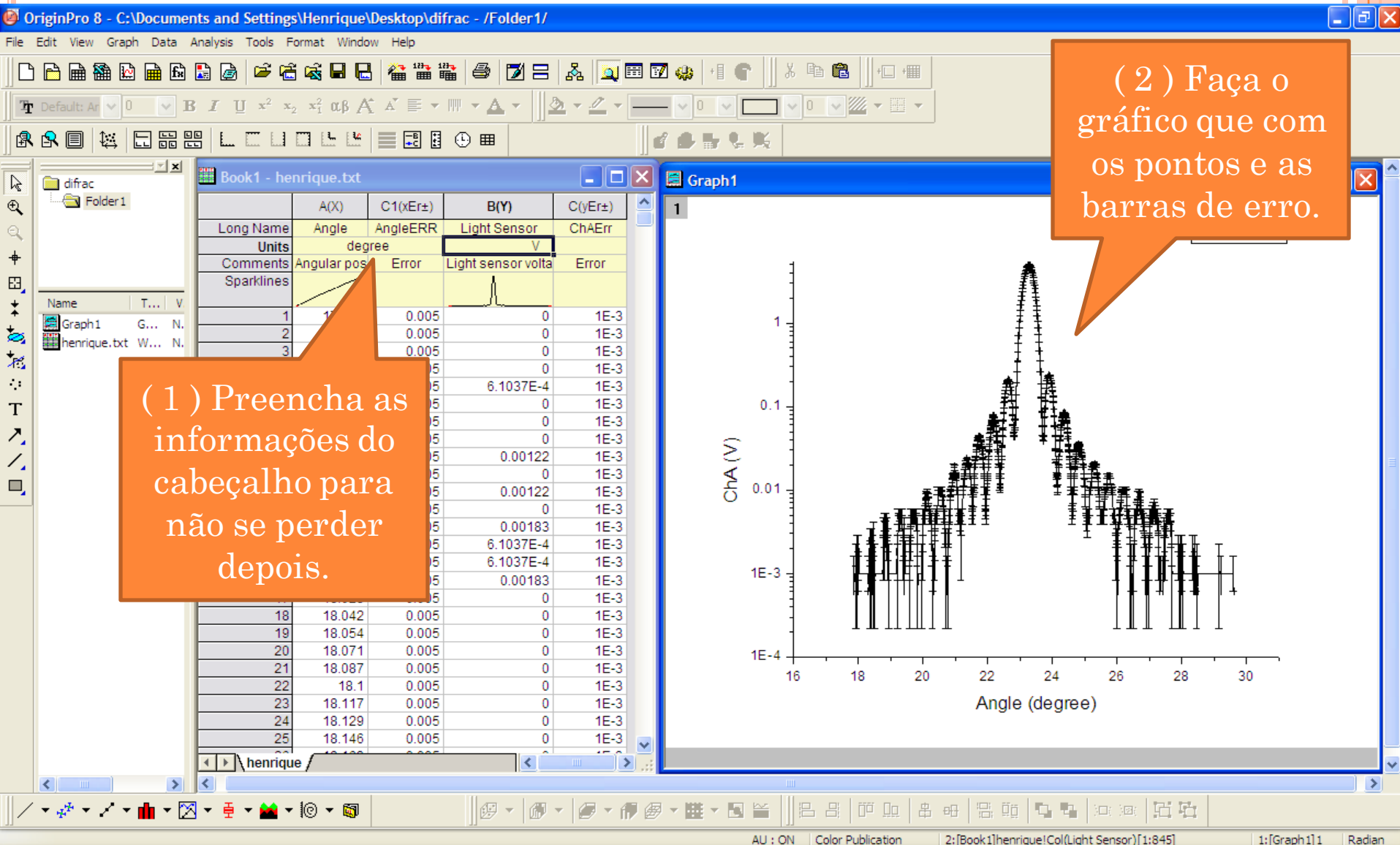
- Para fazer um ajuste não linear é preciso saber qual função queremos ajustar. Neste tutorial vamos usar dados do experimento de fenda simples do LAB Flex4. Os dados foram obtidos experimentalmente no nosso laboratório usando o espectrofotômetro com o sensor de luz e ângulo da PASCO acoplados ao DataStudio.
- Neste experimento, estamos trabalhando no regime de Fraunhofer e por isso a intensidade luminosa em função do ângulo para a difração do laser pela fenda simples será dado por:

$$I = I_0 \left( \frac{\sin \beta}{\beta} \right)^2, \text{ onde } \beta = \pi \frac{d}{\lambda} \sin \theta$$

- onde  $d$  é a largura da fenda,  $\lambda$  o comprimento de onda da luz e  $\theta$  o ângulo de espalhamento. Cabem algumas observações. Primeiro,  $d$  e  $\lambda$  tem que estar nas mesmas unidades, mas não importa qual. Segundo  $\theta$  e  $\beta$  são ângulo medidos em radianos. Terceiro, a intensidade é máxima para  $\theta=0$ , ou seja a posição do máximo determina a origem do sistema de coordenadas

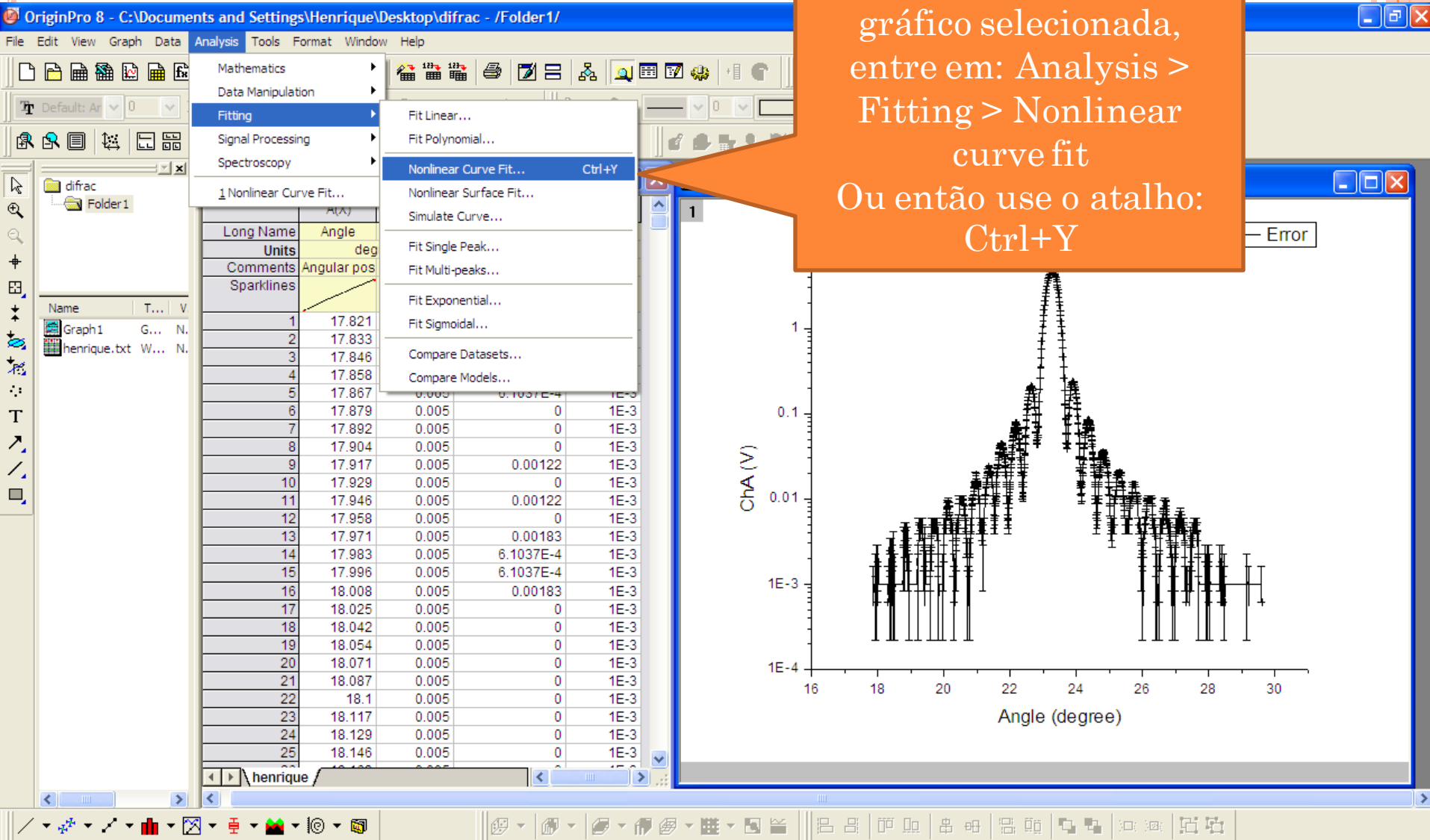


# ABRA O ORIGIN COM OS DADOS PARA AJUSTAR

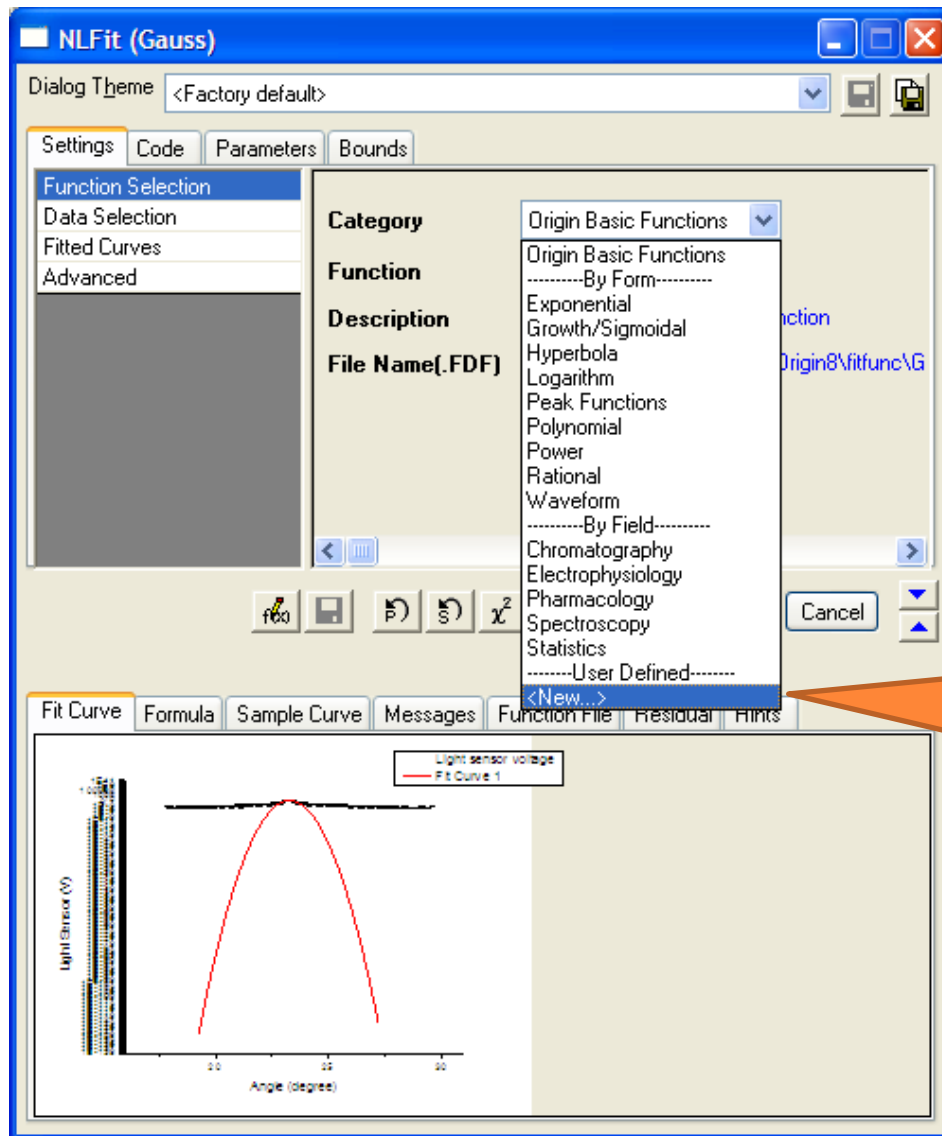


# ANALYSIS > FITTING > NONLINEAR CURVE FIT...

(3) Com a janela do gráfico selecionada, entre em: Analysis > Fitting > Nonlinear curve fit  
Ou então use o atalho: Ctrl+Y



# CRIANDO UMA NOVA FUNÇÃO



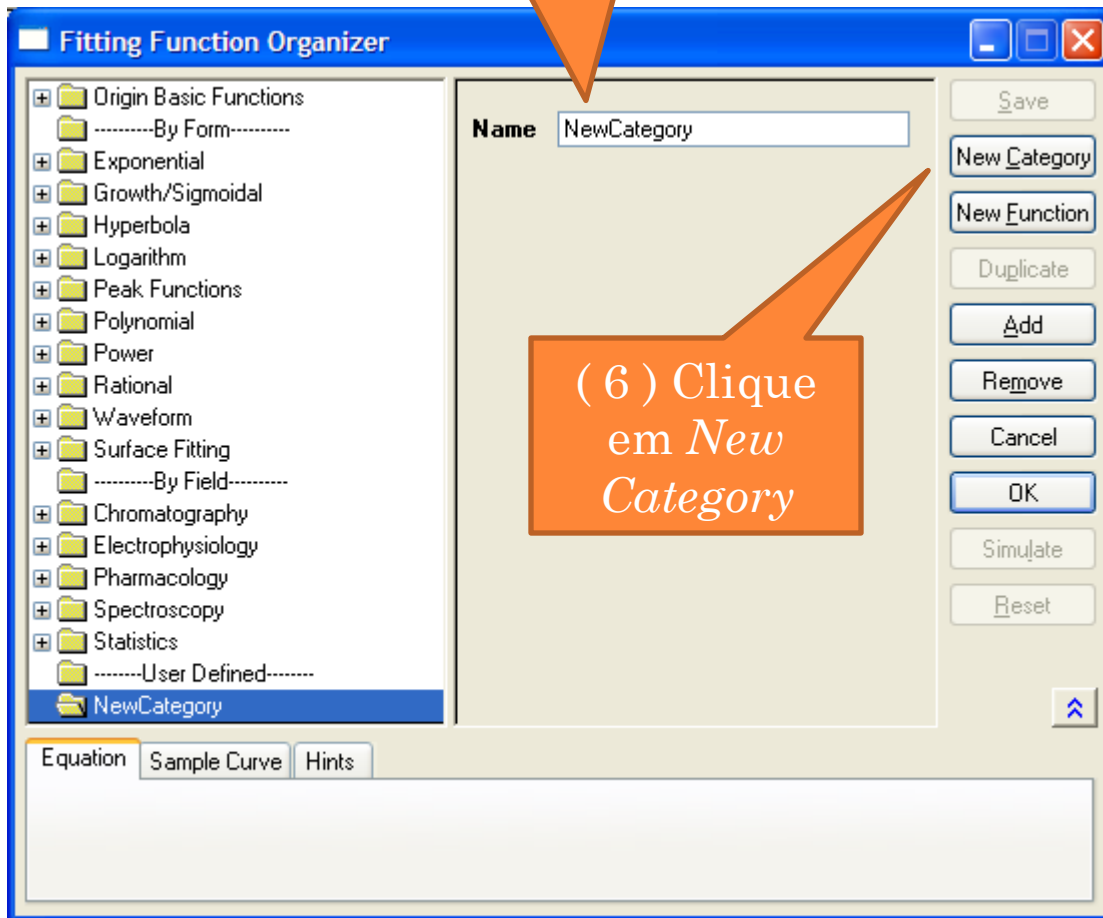
A janela do ajuste não linear vai abrir. Vamos criar uma nova função.

( 4 ) Na página *Settings*, entre em *Category*, *User Defined* e então *New...*



# CRIANDO UMA NOVA CATEGORIA

( 5 ) Entre com o nome da categoria .



( 6 ) Clique em *New Category*

A janela do organizador de funções vai abrir. Antes de criar a nova função, vamos criar uma nova categoria de funções para guardar todas as funções que vamos usar durante o LabFlex.

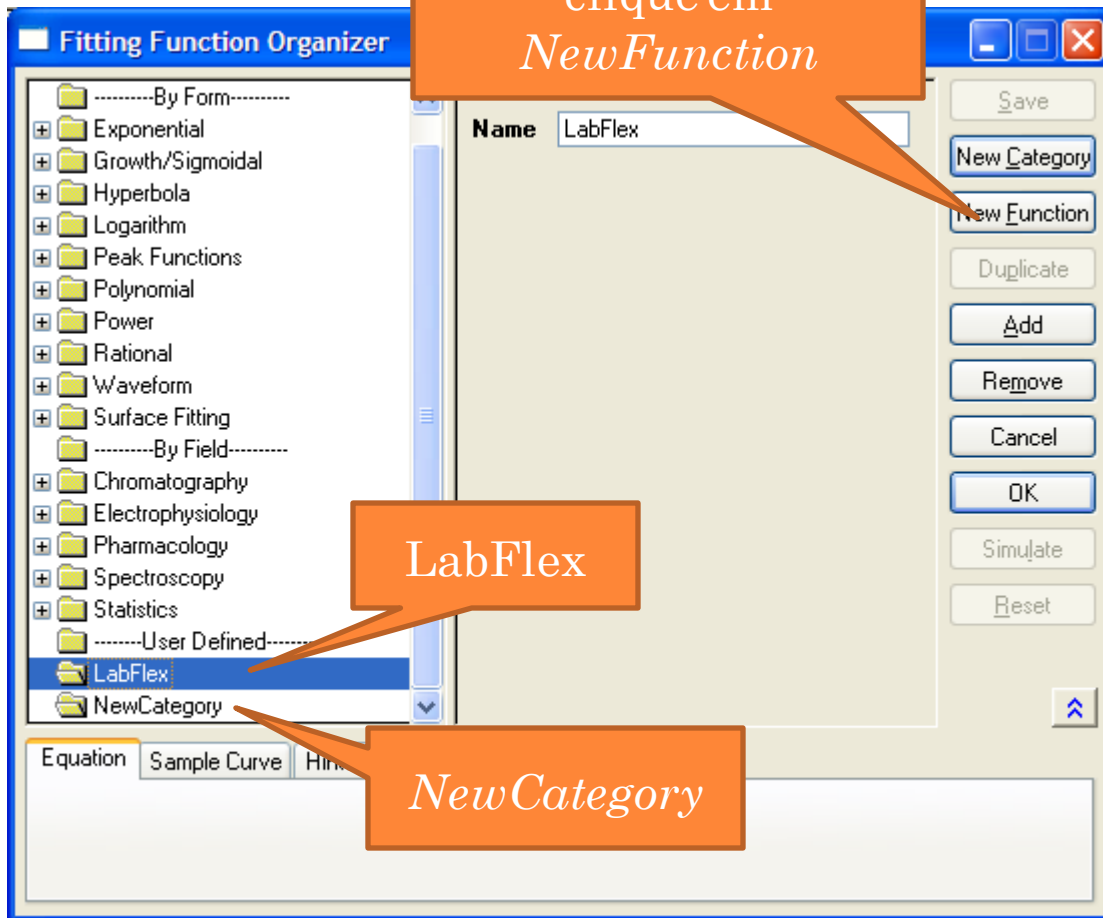


# CRIANDO UMA NOVA FUNÇÃO

( 7 ) Com a categoria LabFlex selecionada, clique em *NewFunction*

LabFlex

*NewCategory*



A nova categoria vai aparecer na lista do lado esquerdo. Note que existe uma categoria “lixo” chamada *NewCategory*. Pode apagá-la se quiser. Agora vamos criar uma nova função dentro desta categoria.



# CRIANDO UMA NOVA FUNÇÃO

O organizador de funções vai se modificar, mostrando vários campos que precisam ser preenchidos para definir a nova função.

( 8 ) Entre um nome para a função

( 9 ) uma descrição

( 10 ) defina a variável dependente I

( 11 ) defina os parâmetros  $I_0$ ,  $x_0$ ,  $d$  e  $\lambda$

( 13 ) Quando terminar, clique no OK

( 12 ) Entre com a equação da função

Function Name: DifracaoSimples

File Name(.FDF): C:\Documents and Settings\Henrique\My Doc

Brief Description: Formula da difracao em fenda simples (angl

Function Type: User-Defined

Independent Variables: x

Dependent Variables: I

Parameter Names: I0,d,lamb,x0

Function Form: Origin C

Derivatives:

Function:  $I = I_0 * \left( \frac{\sin(\pi * d * \sin((x - x_0) * \pi / 180.))}{\lambda} \right) / (\pi * d * \sin((x - x_0) * \pi / 180.))$

Equation Sample Curve Hints

Enter dependent parameter names separated by comma (,) in the list. Note that variable names need to be unique, so cannot define P1, P2, P3. However, variable names are case sensitive when writing Origin C. Examples: P1, P2, P3



# A EQUAÇÃO DA FUNÇÃO

- Um dos grandes problemas em fazer o ajuste de uma curva qualquer com o Origin é justamente definir a equação da função. A nossa equação era:

$$I = I_0 \left( \frac{\sin \beta}{\beta} \right)^2, \text{ onde } \beta = \pi \frac{d}{\lambda} \sin \theta$$

- E escrevemos assim:

$$I = I_0 * ( \sin(\pi*d*\sin((x-x_0)*\pi/180.)/\lambda) / (\pi*d*\sin((x-x_0)*\pi/180.)/\lambda) )^2$$

- Observações:

- Multiplicamos por  $\pi/180$  pois o argumento do  $\sin()$  deve ser em radianos (note que o Origin entende “pi” como  $\pi$ )
- Subtraímos o ângulo em graus de um “ $x_0$ ” porque o máximo deve aparecer em  $x=0$ , ou melhor, em  $x=x_0$ .
- Para elevar um termo ao quadrado, usar  $^2$
- Um erro comum é esquecer de fechar ou abrir um parênteses



# CRIANDO UMA NOVA FUNÇÃO

Uma vez preenchido todos os dados, é só gravar e partir para o ajuste.

The screenshot shows the 'Fitting Function Organizer' window. On the left is a tree view of function categories, with 'DifracaoSimples (User)\*' selected. The main area contains fields for:

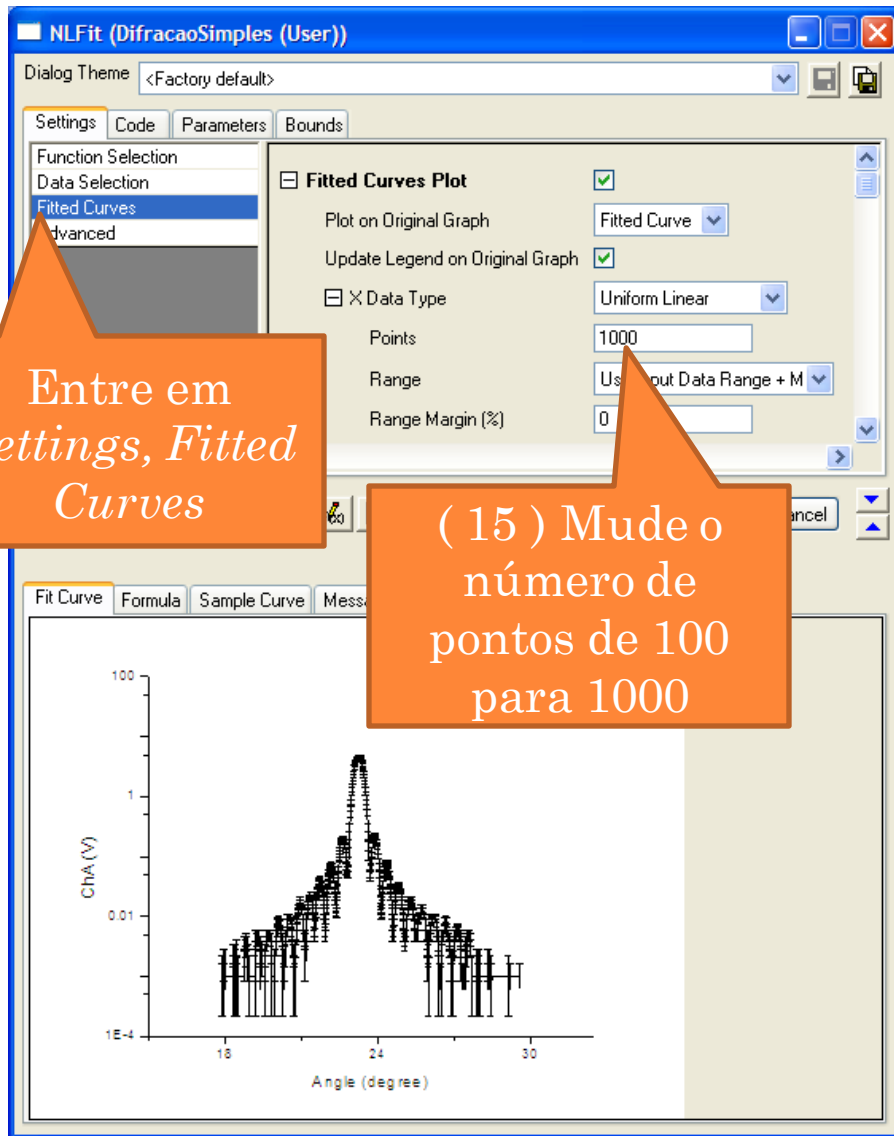
- Function Name:** (empty)
- File Name(.FDF):** (empty)
- Brief Description:** Formula da difracao em fenda simples (angi)
- Function Type:** User-Defined
- Independent Variables:** x
- Dependent Variables:** I
- Parameter Names:** I0,d,lamb,x0
- Function Form:** Origin C
- Derivatives:**
- Function:**  $I = I0 * ( \sin(\pi*d*\sin((x-x0)*\pi/180.)/\text{lamb}) / (\pi*d*\sin((x-x0)*\pi/180$

On the right side, there is a vertical stack of buttons: Save, New Category, New Function, Duplicate, Add, Remove, Cancel, OK, and Simulate. Two orange callout boxes provide instructions:

- Box 1: '( 13 ) Quando terminar, clique no SAVE' (When finished, click on SAVE)
- Box 2: '( 14 ) Depois de gravado, clique em OK' (After saving, click on OK)

At the bottom, there are tabs for 'Equation', 'Sample Curve', and 'Hints'. The 'Hints' tab is active, showing instructions: 'Enter dependent parameter names separated by comma (,) in this edit box. Note that variable names need to be unique, so cannot define parameters such as "p1, P1". However, variable names are case sensitive when writing Origin C code for the fitting function. Examples: P1, P2, P3'.

# COMO O AJUSTE APARECE NO GRÁFICO



Feito isso, o Origin volta a mostrar a janela do ajuste não linear (NLFit), mas agora a nova função, dentro da categoria LabFlex, vai estar selecionada.

Quando o Origin termina um ajuste, ele calcula a função em 100 pontos (default) e adiciona estes dados no gráfico. Ou seja, ele NÃO desenha a função!

As vezes 100 pontos pode significar uma resolução baixa. Vamos aumentar para 1000 pontos.

# CHUTE INICIAIS PARA OS PARÂMETROS

Na aba  
*Parameters*

( 16 ) Fixe o comprimento de onda em  $0.628 \mu\text{m}$ , e entre com valores apropriados para os parâmetros livres.

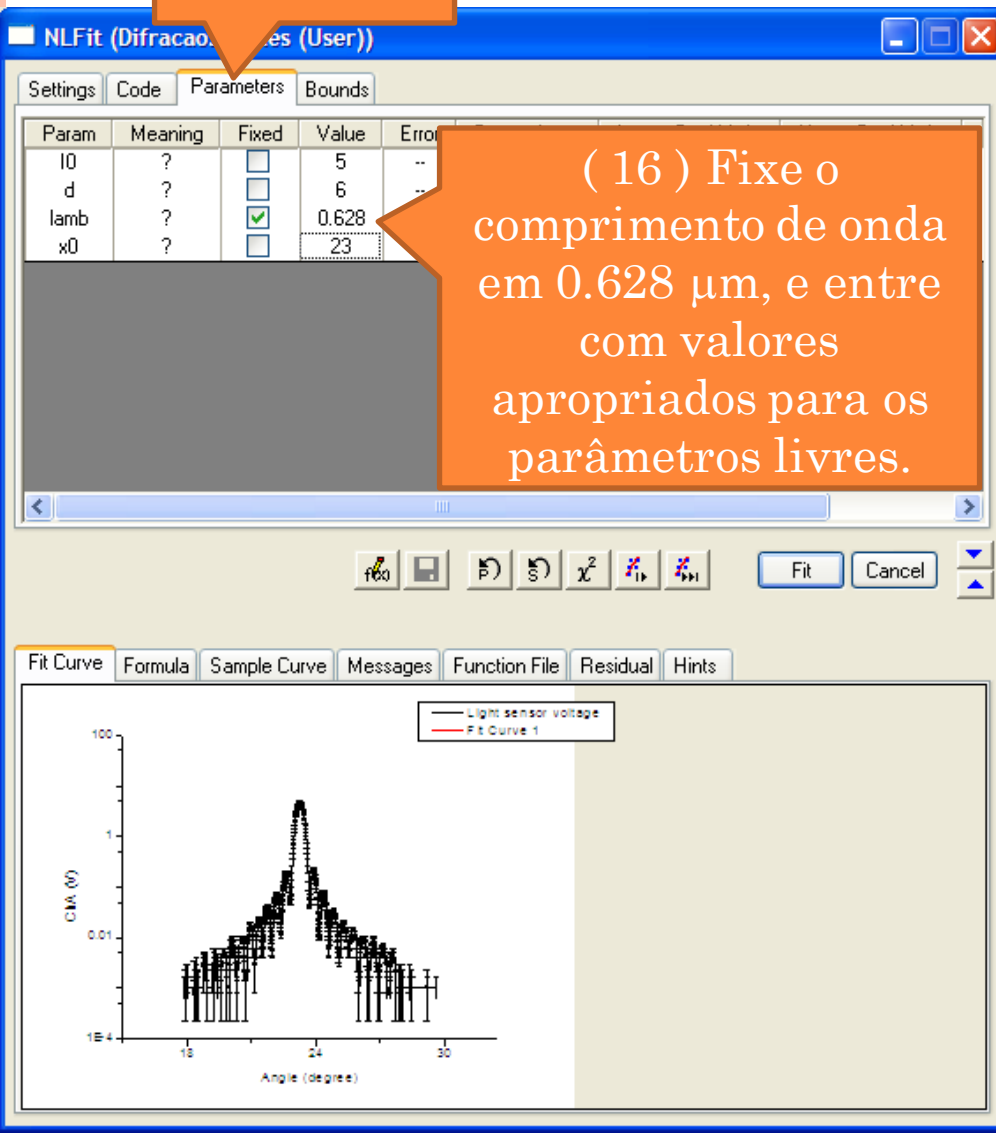
O próximo passo é dar valores iniciais para todos os parâmetros e definir quais serão variados e fixados. OBS:

1) O laser tem  $628\text{nm}$  e usamos  $\text{lamb}=0.628$ , portanto a unidade é  $\mu\text{m}$  que será a mesma unidade para  $d$ .

2) Um bom chute inicial para o valor máximo  $I_0$  é o máximo do eixo vertical.

3) Para o  $x_0$ , basta olhar mais ou menos onde está o máximo.

4) Como tem difração,  $d$  deve ser da ordem de  $\lambda$ . Colocamos  $10x$ .



# FAZENDO O AJUSTE

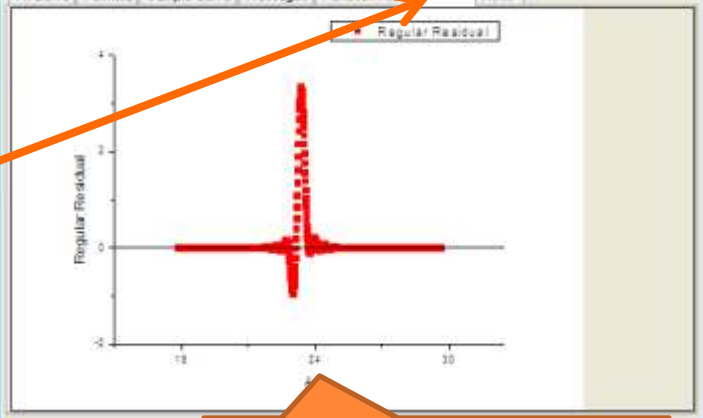
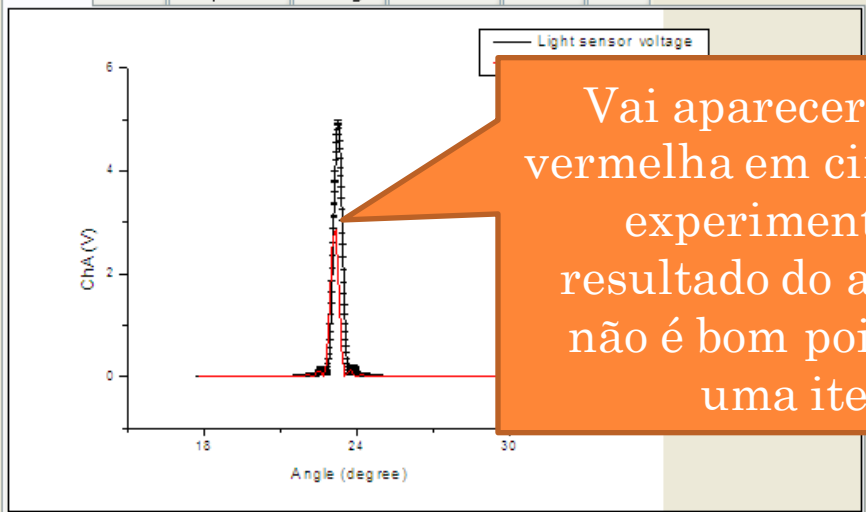
Param	Meaning	Fixed	Value	Error
l0	?	<input type="checkbox"/>	2.96814	0.11
d	?	<input type="checkbox"/>	84.99968	3.7
lamb	?	<input checked="" type="checkbox"/>	0.628	0
x0	?	<input type="checkbox"/>	23.13438	0.00673

Os parâmetros também mudaram!

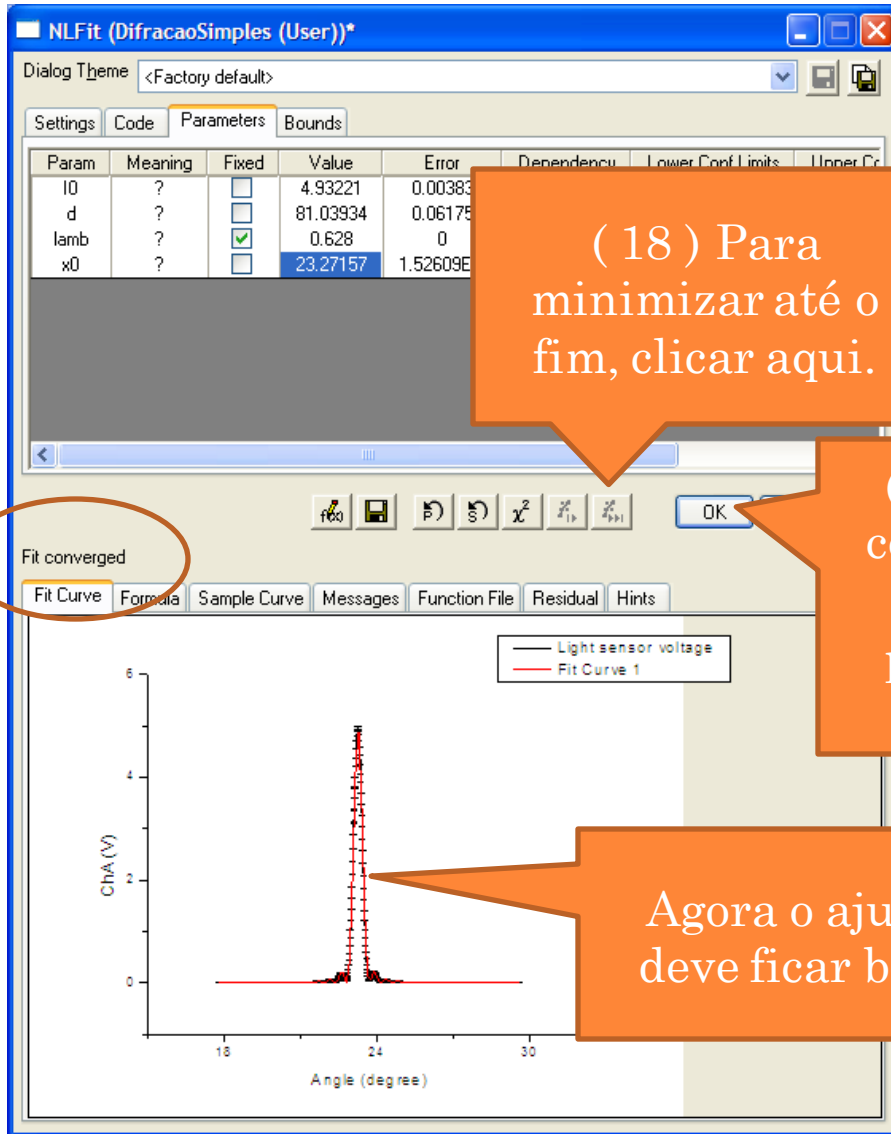
(17) Para fazer 1 iteração do algoritmo de ajuste, clique aqui

Vai aparecer uma curva vermelha em cima dos pontos experimentais com o resultado do ajuste. Ainda não é bom pois só fizemos uma iteração.

Na aba dos resíduos você pode ver como está evoluindo o seu ajuste!



# AJUSTANDO ATÉ MINIMIZAR O $\chi^2$



# RESULTADO DO AJUSTE

Valor final, com incerteza, de cada um dos parâmetros ajustados

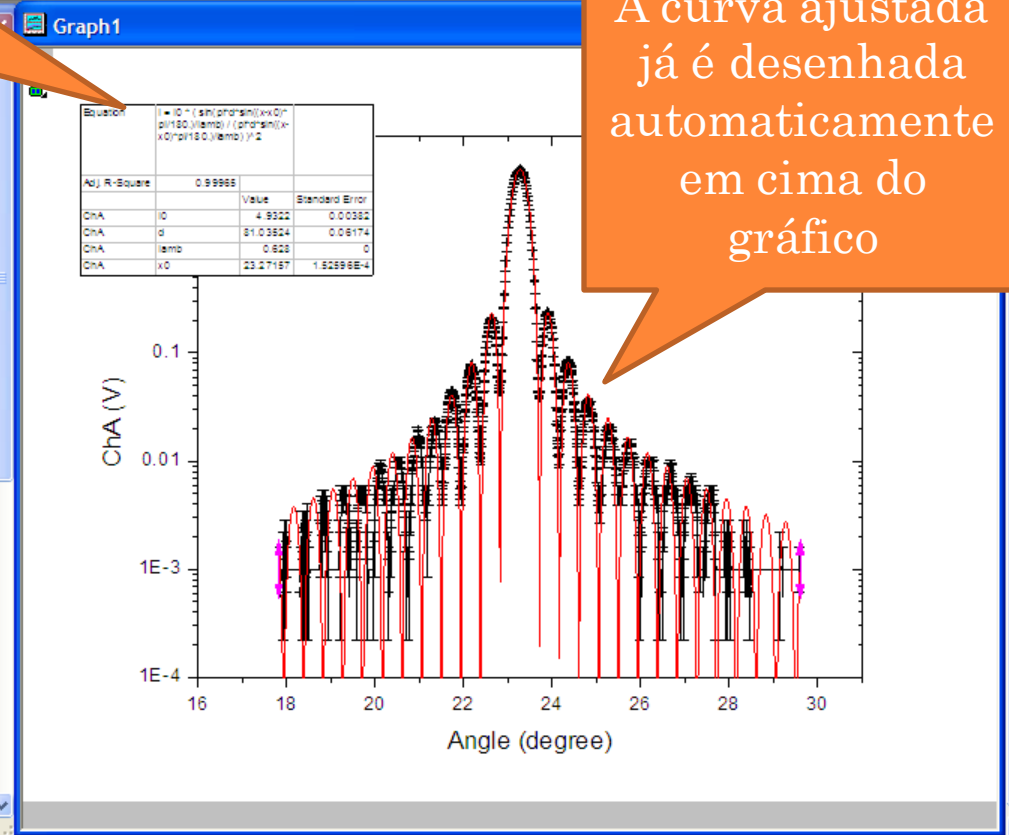
	Value	Standard Error
ChA		
i0	4.9322	0.00382
d	81.03524	0.06174
lamb	0.628	0
x0	23.27157	1.52596E-4

Iterations Performed = 6  
Total Iterations in Session = 8  
Fit converged - tolerance criterion satisfied.  
Some parameter values were fixed.

Statistics	
	ChA
Number of Points	845
Degrees of Freedom	842
Reduced Chi-Sqr	205.73012
Residual Sum of Squares	173224.76262
Adj. R-Square	0.99965
Fit Status	Succeeded(100)

Resumo de várias informações estatísticas importantes para a análise do ajuste

A curva ajustada já é desenhada automaticamente em cima do gráfico



# GRÁFICO DOS RESÍDUOS

Pergunta: Esse ajuste ficou bom? Podemos afirmar que nossa teoria bate com a experiência?  
Temo  $\chi^2_{\text{red}}=205.7$  e  $R^2=0.99965$  e os gráficos abaixo...

Clicando aqui, já aparece também o gráfico dos resíduos

