

INFORMÀTICA APLICADA A LA QUÍMICA

1. Per ajustar una recta $y = a + b x$ (és a dir determinar el millor valor dels coeficients a i b) així com la seva imprecisió. Cal fer ús les fórmules següents (t és el paràmetre de Student, el seu valor el podeu consultar en http://www3.uji.es/~planelle/APUNTS/IAQ/t_Student.htm: e.g. per a un ajust amb 10 punts, i.e. $10-2=8$ graus de llibertat i una probabilitat standard del 0.05 $t = 2.31$)

$$b = \frac{\langle xy \rangle - \langle x \rangle \langle y \rangle}{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2}$$

$$\langle x^2 \rangle = \frac{\sum_{i=1}^N x_i^2}{N}$$

$$I(a) = t S_a$$

$$S_r^2 = \frac{1}{N-2} (D_y^2 - b^2 D_x^2)$$

$$S_{y_{calc}}^2 = \frac{S_r^2}{N} \left(1 + \frac{N(x_i - \langle x \rangle)^2}{D_x^2} \right)$$

$$S_y^2 = \frac{D_y^2}{N-1}$$

$$a = \langle y \rangle - b \langle x \rangle$$

$$\langle xy \rangle = \frac{\sum_{i=1}^N x_i y_i}{N}$$

$$S_b^2 = \frac{S_r^2}{D_x^2}$$

$$D_z^2 = \sum_{i=1}^N (z_i - \langle z \rangle)^2$$

$$\text{coef. autocorrelació } r_o = \sqrt{1 - \frac{S_r^2}{S_y^2}}$$

$$\text{coef. correl. } r = \frac{\langle xy \rangle - \langle x \rangle \langle y \rangle}{\sqrt{(\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2)(\langle y^2 \rangle - \langle y \rangle^2)}}$$

$$\langle x \rangle = \frac{\sum_{i=1}^N x_i}{N}$$

$$I(b) = t S_b$$

$$S_a^2 = \frac{\langle x^2 \rangle}{D_x^2} S_r^2$$

$$I(y_{calc}) = t S_{y_{calc}}$$

INFORMÀTICA APLICADA A LA QUÍMICA

2a. Per ajustar una recta $y = A + b x$ (és a dir determinar el millor valor de b imaginant que A és exactament coneguda) així com la seva imprecisió Cal fer ús les fórmules següents (el nombre de graus de llibertat en aquests ajustos és $(N-1)$ i no $(N-2)$ com en primer cas):

$$b = \frac{\langle xy \rangle - A \langle x \rangle}{\langle x^2 \rangle}$$

$$I(b) = t S_b$$

$$S_b^2 = \frac{S_r^2}{N \langle x^2 \rangle}$$

$$(y_i)_{\text{calc.}} = A + b x_i$$

$$I(y_{\text{calc}}) = t S_{y_{\text{calc}}}$$

$$S_{y_{\text{calc}}}^2 = x_i^2 \frac{S_r^2}{N \langle x^2 \rangle}$$

$$S_r^2 = \frac{1}{N-1} \sum_i (y_i - (y_i)_{\text{calc.}})^2$$

$$\text{coef. autocorrelació } r_o = \sqrt{1 - \frac{S_r^2}{S_y^2}}$$

2b. Per ajustar una recta $y = a + B x$ (és a dir determinar el millor valor del paràmetre a imaginant que B és exactament coneguda) així com la seva imprecisió. Cal fer ús les fórmules següents:

$$a = \langle y \rangle - B \langle x \rangle$$

$$I(a) = t S_a$$

$$S_a^2 = \frac{S_r^2}{N}$$

$$(y_i)_{\text{calc.}} = a + B x_i$$

$$I(y_{\text{calc}}) = t S_{y_{\text{calc}}}$$

$$S_{y_{\text{calc}}}^2 = S_a^2$$

$$S_r^2 = \frac{1}{N-1} \sum_i (y_i - (y_i)_{\text{calc.}})^2$$

$$\text{coef. autocorrelació } r_o = \sqrt{1 - \frac{S_r^2}{S_y^2}}$$