

Analisi delle dipendenze funzionali: il fit dei dati

- Dati n punti (X_i, Y_i) il problema di *fit* o *best fit* consiste nel cercare una curva semplice che si adatti nel migliore dei modi ai dati

- Spesso ci sono ragioni per preferire una data funzione (teoria, analogia) : si tratta di scegliere i parametri da cui questa funzione dipende in modo che sia la migliore possibile.

- Esistono vari criteri per dire che una curva è la migliore possibile:
 - Un fit di tipo generale
 - e metodi particolari più semplici che richiedono però la verifica preventiva della seguente condizione :

l'errore propagato da X a Y attraverso la funzione deve essere trascurabile nei confronti dell'errore sperimentale stimato nella misura di Y

Tradotto in linguaggio matematico:

$$\left| \left(\frac{df}{dx} \right)_{X_i} \Delta X_i \right| \ll \Delta Y$$

Metodo dei minimi quadrati

- Chiamiamo $D_i = Y_i - f(X_i)$ la differenza tra il valore misurato Y_i e il corrispondente $y = f(X_i)$ valore della curva
- Si costruisce $S = \sum (D_i)^2 = \sum [Y_i - f(X_i)]^2$
- Il metodo dei minimi quadrati stabilisce che i valori per i parametri della funzione $f(x)$ sono quelli che minimizzano la somma S
- *Osservazione*: il principio che sta alla base del metodo tratta tutte le misure Y_i sullo stesso piano, accettabile solo se le misure hanno lo stesso errore

• *Esempio 1*:

supponiamo che Y sia direttamente proporzionale ad X : allora $y=f(x)$ diventa semplicemente $y = mx$, cioè una retta che passa per l'origine caratterizzata da un solo parametro, il coefficiente angolare m . La somma S diventa

$$S = \sum (D_i)^2 = \sum [Y_i - mX_i]^2$$

il valore di m che rende minima la somma S sarà quello che annulla la derivata dS/dm

Calcoliamo allora la derivata

$$dS/dm = -2 \sum (Y_i - mX_i) X_i$$

e poniamola uguale a zero

$$-2 \sum (Y_i - mX_i) X_i = 0$$

e successivamente

$$\sum Y_i X_i - m \sum X_i^2 = 0$$

da cui infine si può ricavare m

$$m = \frac{\sum Y_i X_i}{\sum X_i^2} \quad \leftarrow$$

- *Esempio2:*

si misura una quantità y varie volte, ottenendo n valori distinti Y_i . Sia x il tempo;

$f(x) = \text{cost} = a$. Per trovare il miglior valore di a bisogna minimizzare la quantità

$$\begin{aligned} S &= \sum_{i=1}^n (Y_i - a)^2 \\ \frac{dS}{da} &= -2 \sum_{i=1}^n (Y_i - a) = 0 \\ \sum_{i=1}^n Y_i &= \sum_{i=1}^n a = na \\ a &= \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n Y_i \end{aligned} \quad \leftarrow$$

$$(\Delta a)^2 = \sum_{i=1}^n \left(\frac{\partial a}{\partial Y_i} \right)^2 \Delta Y_i^2 = \sum_{i=1}^n \frac{\Delta Y_i^2}{n^2} = \frac{\Delta Y^2}{n} \quad \leftarrow$$

La media aritmetica rende minima la somma dei quadrati degli scarti.

• *Esempio3:*

la funzione ipotizzata sia lineare: $f(x) = a + bx$, e $\{X_i, Y_i, i = 1 \dots n\}$ siano le misure. Per trovare i migliori valori di a e b perchè la retta si adatti il meglio possibile ai dati sperimentali costruiamo la funzione

$$S = \sum_{i=1}^n [Y_i - f(X_i)]^2 = \sum_{i=1}^n (Y_i - a - bX_i)^2.$$

Bisogna cercare il minimo di S al variare di a e b :

$$\begin{cases} \frac{\partial S}{\partial a} = -2 \sum (Y_i - a - bX_i) = 0 \\ \frac{\partial S}{\partial b} = -2 \sum (Y_i - a - bX_i)X_i = 0 \end{cases}$$

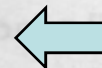
$$\begin{cases} Na + b \sum X_i = \sum Y_i \\ a \sum X_i + b \sum X_i^2 = \sum X_i Y_i \end{cases}$$

$$a = \frac{\sum Y_i \cdot \sum X_i^2 - \sum X_i \cdot \sum X_i Y_i}{n \sum X_i^2 - (\sum X_i)^2}$$

$$b = \frac{n \sum X_i Y_i - \sum X_i \cdot \sum Y_i}{n \sum X_i^2 - (\sum X_i)^2}$$

$$(\Delta a)^2 = \sum_i \left(\frac{\partial a}{\partial Y_i} \right)^2 (\Delta Y_i)^2 = \frac{(\Delta Y)^2 \sum X_i^2}{n \sum X_i^2 - (\sum X_i)^2}$$

$$(\Delta b)^2 = \sum_i \left(\frac{\partial b}{\partial Y_i} \right)^2 (\Delta Y_i)^2 = \frac{(\Delta Y)^2 n}{n \sum X_i^2 - (\sum X_i)^2}$$



○ **Esercizio:** ricavare con il metodo dei minimi quadrati il miglior valore di a per le seguenti funzioni:

• $f(x) = ax,$

• $f(x) = ax^2,$

• $f(x) = ae^{-x}.$

Il metodo dei minimi quadrati dà risultati semplici in tutti i casi in cui la funzione $f(x)$ dipende in modo lineare dai parametri: infatti in questi casi le condizioni di minimo conducono a sistemi di equazioni lineari nei parametri.

Metodo dei minimo chi quadro

Supponiamo di avere delle misure X_i, Y_i tali che l'errore su Y_i sia σ_i mentre manteniamo per ora l'ipotesi che l'errore sulle X_i sia molto piccolo.

Invece di calcolare le differenze $D_i = Y_i - f(X_i)$ si usa

$$D_i = \frac{Y_i - f(X_i)}{\sigma_i},$$

cioè ogni differenza viene pesata col relativo errore: si cercherà poi il minimo della funzione:

$$S = \sum_{i=1}^n \left(\frac{Y_i - f(X_i)}{\sigma_i} \right)^2$$

Questo metodo viene indicato come il metodo del minimo χ^2 . Infatti se si assume che le Y_i abbiano una distribuzione gaussiana, le D_i sono variabili gaussiane con media zero e varianza uno ed S è una variabile che ha la distribuzione del χ^2 .

□ **Esempio:** Sia $f(x) = \text{Cte} = a$. Applichiamo il metodo appena imparato:

$$\begin{aligned} S &= \sum_{i=1}^n \left(\frac{Y_i - a}{\sigma_i} \right)^2 = \text{minimo} \\ \frac{dS}{da} &= -2 \sum_{i=1}^n \left(\frac{Y_i - a}{\sigma_i} \right) \frac{1}{\sigma_i} = 0 \\ \Rightarrow a &= \frac{\sum Y_i / \sigma_i^2}{\sum 1 / \sigma_i^2}, \quad (\Delta a)^2 = \frac{1}{\sum 1 / \sigma_i^2}. \quad \Leftarrow \end{aligned}$$

cioè i valori delle Y_i sono pesati con l'inverso dei quadrati dell'errore. Si usa tutte le volte che le misure hanno precisione differente. Questa importante formula è detta *media pesata* delle Y_i .

□ **Esempio:** Prendiamo come funzione $f(x) = a + bx$.

$$S = \sum_{i=1}^n \left(\frac{Y_i - a - bX_i}{\sigma_i} \right)^2 = \text{minimo}$$

$$\begin{cases} \frac{\partial S}{\partial a} = -2 \sum \frac{1}{\sigma_i} \left(\frac{Y_i - a - bX_i}{\sigma_i} \right) = 0 \\ \frac{\partial S}{\partial b} = -2 \sum \frac{X_i}{\sigma_i} \left(\frac{Y_i - a - bX_i}{\sigma_i} \right) = 0 \end{cases} \quad \begin{cases} a \sum \frac{1}{\sigma_i^2} + b \sum \frac{X_i}{\sigma_i^2} = \sum \frac{Y_i}{\sigma_i^2} \\ a \sum \frac{X_i}{\sigma_i^2} + b \sum \frac{X_i^2}{\sigma_i^2} = \sum \frac{Y_i X_i}{\sigma_i^2} \end{cases}$$

$$\begin{cases} a = \frac{\sum \frac{Y_i}{\sigma_i^2} \cdot \sum \frac{X_i^2}{\sigma_i^2} - \sum \frac{X_i}{\sigma_i^2} \cdot \sum \frac{X_i Y_i}{\sigma_i^2}}{\sum \frac{1}{\sigma_i^2} \cdot \sum \frac{X_i^2}{\sigma_i^2} - \left(\sum \frac{X_i}{\sigma_i^2} \right)^2} \\ b = \frac{\sum \frac{1}{\sigma_i^2} \cdot \sum \frac{X_i Y_i}{\sigma_i^2} - \sum \frac{Y_i}{\sigma_i^2} \cdot \sum \frac{X_i}{\sigma_i^2}}{\sum \frac{1}{\sigma_i^2} \cdot \sum \frac{X_i^2}{\sigma_i^2} - \left(\sum \frac{X_i}{\sigma_i^2} \right)^2} \end{cases}$$

$$\begin{cases} (\Delta a)^2 = \sum \left(\frac{\partial a}{\partial Y_i} \right)^2 \sigma_i^2 = \frac{\sum \frac{X_i^2}{\sigma_i^2}}{\sum \frac{1}{\sigma_i^2} \cdot \sum \frac{X_i^2}{\sigma_i^2} - \left(\sum \frac{X_i}{\sigma_i^2} \right)^2} \\ (\Delta b)^2 = \sum \left(\frac{\partial b}{\partial Y_i} \right)^2 \sigma_i^2 = \frac{\sum \frac{1}{\sigma_i^2}}{\sum \frac{1}{\sigma_i^2} \cdot \sum \frac{X_i^2}{\sigma_i^2} - \left(\sum \frac{X_i}{\sigma_i^2} \right)^2} \end{cases}$$

Test del chi quadro

Richiamiamo la definizione della variabile " χ^2 a n gradi di libertà": date n variabili x_i gaussiane con media μ_i e deviazione standard σ_i , costruite le variabili standard

$$z_i = \frac{x_i - \mu_i}{\sigma_i},$$

la quantità

$$S = \sum_{i=1}^n \left(\frac{x_i - \mu_i}{\sigma_i} \right)^2$$

si chiama χ^2 ad n gradi di libertà.

$$P(S) = \frac{S^{n/2-1}}{2^{n/2} \Gamma\left(\frac{n}{2}\right)} e^{-S/2}$$

$$E[S] = n$$

$$\sigma_S^2 = 2n$$

La tavola riportata nell'ultima pagina dà qual'è il valore γ di S tale che per un assegnato n ad una assegnata probabilità $\wp$

$$P(S \leq \gamma) = \wp.$$

Ad esempio sia $n = 10$, ci si domanda qual'è il valore γ di χ^2 tale che la probabilità che $S \leq \gamma$ sia il 95%:

$$P(S_{10} \leq \gamma) = 95\%,$$

Le tavole² in corrispondenza della riga 10, colonna 4 danno $\gamma = 18.3$.

n	$\chi^2_{.995}$	$\chi^2_{.99}$	$\chi^2_{.975}$	$\chi^2_{.95}$	$\chi^2_{.90}$	$\chi^2_{.75}$	$\chi^2_{.5}$	$\chi^2_{.25}$	$\chi^2_{.10}$	$\chi^2_{.05}$	$\chi^2_{.025}$	$\chi^2_{.01}$	$\chi^2_{.005}$
1	7.88	6.63	5.02	3.84	2.71	1.32	.455	.102	.0158	.0039	.0010	.0002	.0000
2	10.6	9.21	7.38	5.99	4.61	2.77	1.39	.575	.211	.103	.0506	.0201	.0100
3	12.8	11.3	9.35	7.81	6.25	4.11	2.37	1.21	.584	.352	.216	.155	.072
4	14.9	13.3	11.1	9.49	7.78	5.39	3.36	1.92	1.06	.711	.484	.297	.207
5	16.7	15.1	12.8	11.1	9.24	6.63	4.35	2.67	1.61	1.15	.831	.554	.412
6	18.5	16.8	14.4	12.6	10.6	7.84	5.35	3.45	2.20	1.64	1.24	.872	.676
7	20.3	18.5	16.0	14.1	12.0	9.04	6.35	4.25	2.83	2.17	1.69	1.24	.989
8	22.0	20.1	17.5	15.5	13.4	10.2	7.34	5.07	3.49	2.73	2.18	1.65	1.34
9	23.6	21.7	19.0	16.9	14.7	11.4	8.34	5.90	4.17	3.33	2.70	2.09	1.73
10	25.2	23.2	20.5	18.3	16.0	12.5	9.34	6.74	4.87	3.94	3.25	2.56	2.16
11	26.8	24.7	21.9	19.7	17.3	13.7	10.3	7.58	5.58	4.57	3.82	3.05	2.60
12	28.3	26.2	23.3	21.0	18.5	14.8	11.3	8.44	6.30	5.23	4.40	3.57	3.07
13	29.8	27.7	24.7	22.4	19.8	16.0	12.3	9.30	7.04	5.89	5.01	4.11	3.57
14	31.3	29.1	26.1	23.7	21.1	17.1	13.3	10.2	7.79	6.57	5.63	4.66	4.07
15	32.8	30.6	27.5	25.0	22.3	18.2	14.3	11.0	8.55	7.26	6.26	5.23	4.60
16	34.3	32.0	28.8	26.3	23.5	19.4	15.3	11.9	9.31	7.96	6.91	5.81	5.14
17	35.7	33.4	30.2	27.6	24.8	20.5	16.3	12.8	10.1	8.67	7.56	6.41	5.70
18	37.2	34.8	31.5	28.9	26.0	21.6	17.3	13.7	10.9	9.39	8.23	7.01	6.26
19	38.6	36.2	32.9	30.1	27.2	22.7	18.3	14.6	11.7	10.1	8.91	7.63	6.84
20	40.0	37.6	34.2	31.4	28.4	23.8	19.3	15.5	12.4	10.9	9.59	8.26	7.43
21	41.4	38.9	35.5	32.7	29.6	24.9	20.3	16.3	13.2	11.6	10.3	8.90	8.03
22	42.8	40.3	36.8	33.9	30.8	26.0	21.3	17.2	14.0	12.3	11.0	9.54	8.64
23	44.2	41.6	38.1	35.2	32.0	27.1	22.3	18.1	14.8	13.1	11.7	10.2	9.26
24	45.6	43.0	39.4	36.4	33.2	28.2	23.3	19.0	15.7	13.8	12.4	10.9	9.89
25	46.9	44.3	40.6	37.7	34.4	29.3	24.3	19.9	16.5	14.6	13.1	11.5	10.5
26	48.3	45.6	41.9	38.9	35.6	30.4	25.3	20.8	17.3	15.4	13.8	12.2	11.2
27	49.6	47.0	43.2	40.1	36.7	31.5	26.3	21.7	18.1	16.2	14.6	12.9	11.8
28	51.0	48.3	44.5	41.3	37.9	32.6	27.3	22.7	18.9	16.9	15.3	13.6	12.5
29	52.3	49.6	45.7	42.6	39.1	33.7	28.3	23.6	19.8	17.7	16.0	14.3	13.1
30	53.7	50.9	47.0	43.8	40.3	34.8	29.3	24.5	20.6	18.5	16.8	15.0	13.8
40	56.8	53.7	50.3	46.8	43.8	37.2	32.2	27.0	23.0	20.7	18.5	16.8	15.0
50	59.9	56.8	53.7	49.9	46.8	39.7	34.7	29.5	25.5	22.3	20.0	18.3	16.8
60	62.7	59.4	56.3	52.4	49.3	42.2	37.2	32.0	28.0	24.8	22.5	20.0	18.3
70	65.2	61.8	58.9	55.0	51.8	44.7	39.7	34.5	30.4	26.9	24.4	22.2	20.7
80	67.8	64.3	61.4	57.5	54.3	47.2	42.2	37.0	32.9	29.4	26.9	24.4	22.2
90	70.3	66.8	63.9	59.9	56.8	49.7	44.7	39.5	35.4	31.9	29.4	26.9	24.4
100	72.8	69.3	66.4	62.4	59.3	52.2	47.2	42.0	37.9	34.4	31.9	29.4	26.9

- 1) Il χ^2 può fornire *un criterio generale ed obiettivo* per decidere se una certa equazione descriva bene oppure no i risultati sperimentali

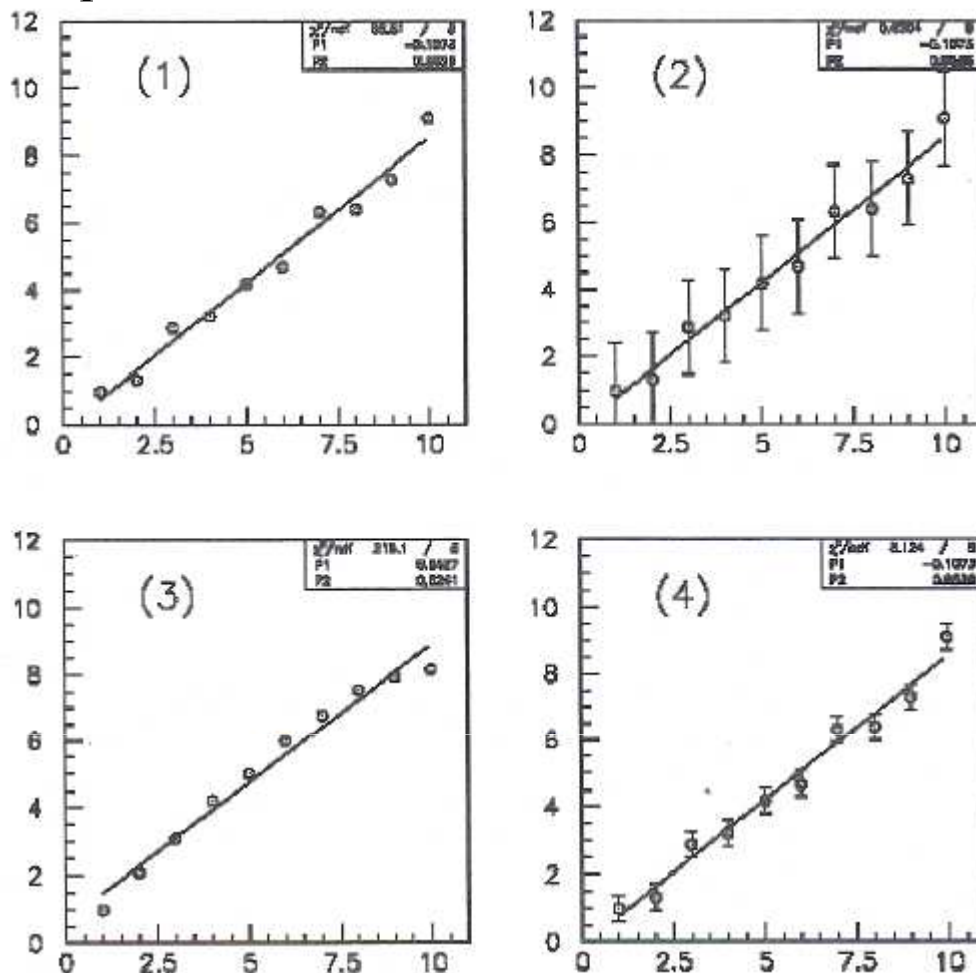
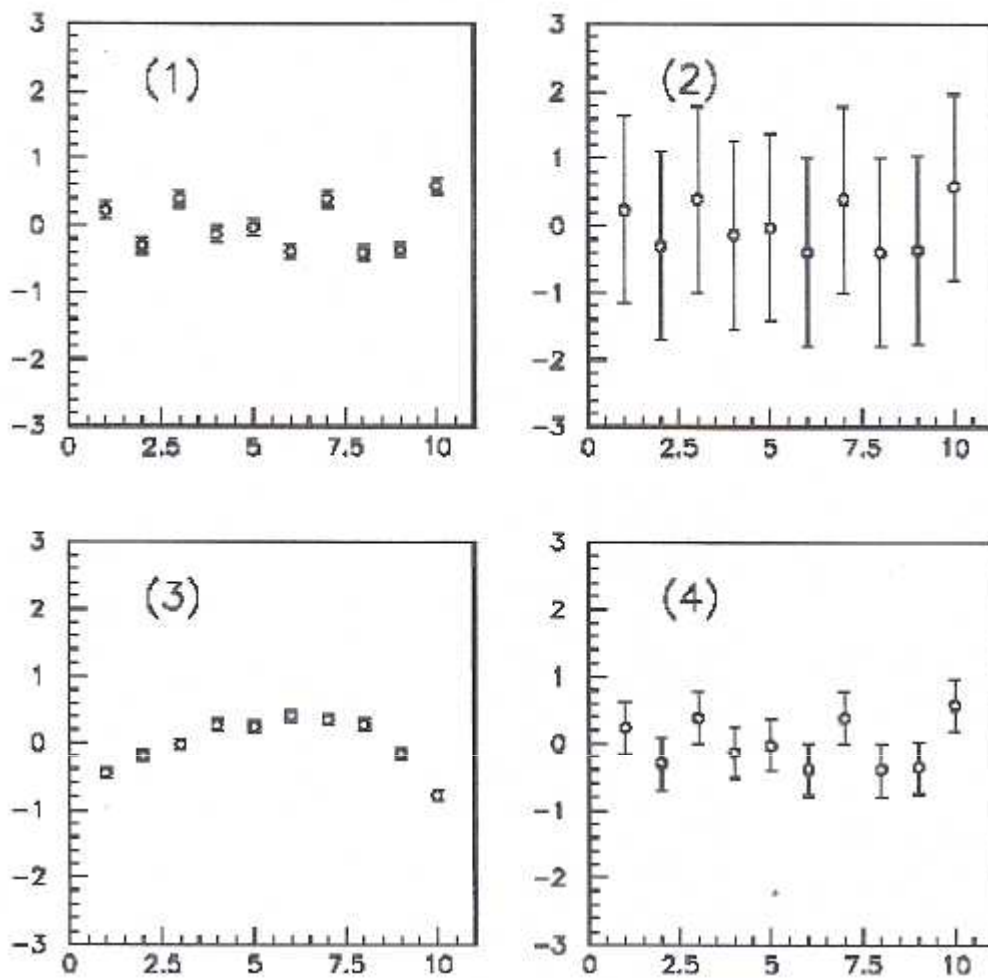


Fig.3.4. Sono i 4 casi di fit rettilineo descritti nel testo. Nei riquadri sono riportati per ogni fit il valore del χ^2 , di $N-2$ e dei 2 parametri della retta, rispettivamente c ed m ottenuti dal fit.

- Caso (1): i punti mostrano un andamento rettilineo ma le incertezze sono molto piccole per cui i punti scartano dalla retta per “molte deviazioni standard”;
- Caso (2): i punti mostrano un andamento rettilineo ma le incertezze sono molto grandi, per cui i punti scartano dalla retta solo per “frazioni di deviazioni standard”;
- Caso (3): i punti mostrano un andamento diverso da quello lineare. Gli scarti dei punti dalla retta hanno a loro volta un andamento;
- Caso (4): i punti mostrano un andamento rettilineo con le incertezze tali per cui i punti scartano mediamente una o poco più deviazioni standard.

$$res_i = y_i - \hat{m}x_i - \hat{c}$$



Osserviamo che: nei casi (1) e (2) l'andamento rettilineo è ragionevole, ma probabilmente non sono ben stimate le incertezze dei punti. Nel primo caso la media del modulo dei residui è molto maggiore e nel secondo molto minore delle singole incertezze (σ) stimate dai dati. Nel caso (3) si potrebbe ipotizzare un andamento diverso da quello lineare. Infine il caso (4) è quello "buono", cioè l'andamento è rettilineo e le incertezze sono ben stimate.

$$\sum_{i=1}^N \frac{(y_i - \hat{m}x_i - \hat{c})^2}{\sigma_i^2}$$

il test consiste nel calcolare il valore di questa variabile e poi confrontarlo con il valore atteso (cioè il numero dei gradi di libertà V): se dal test si ottiene un valore molto diverso da questo, è lecito sospettare qualche problema.

Riprendiamo, come esempio, i 4 casi enunciati, per i quali il valore del numero dei gradi di libertà è sempre 8, mentre il valore ottenuto per il χ^2 vale, rispettivamente: circa 86 nel caso 1); meno di 1 per il caso 2); 216 per il caso 3); circa 8 infine nel caso 4).

Risulta chiaro (vedere figura iniziale) che il valore troppo grande ottenuto nel caso 1 ed il valore troppo piccolo ottenuto nel caso 2, sono essenzialmente da imputare alle stime entrambe errate delle incertezze sperimentali: sottostimate in 1, sovrastimate, invece, in 2.

Il caso 3 è il più sospetto: il valore ottenuto per il χ^2 è molto elevato, come nel caso 1, ma non sembra imputabile stavolta ad una errata stima delle incertezze; è probabilmente errata l'ipotesi di linearità.

•1) Il χ^2 può fornire *un criterio generale ed obbiettivo* per decidere se una certa equazione descriva bene oppure no i risultati sperimentali

-Supponiamo di aver misurato $\{X_i, Y_i\}$ legate tra loro da una funzione $y=f(x,p)$ la cui forma è ipotizzata sulla base di considerazioni fisiche ecc e i cui parametri sono stati stimati col metodo del minimo χ^2 .

Il χ^2 in questo caso vale

$$\chi^2 = \sum_{i=1}^n \frac{[Y_i - f(X_i, p)]^2}{\sigma_{Y_i}^2} = S$$

-Quanti più S è piccolo tanto meno la curva teorica si discosta dai dati sperimentali

-che significato ha S ?

Si cerca sulle tavole in corrispondenza al numero di gradi di libertà dove si trova S . Quando si fa un fit il numero di gradi di libertà ν è il numero n delle misure meno il numero n_p di parametri della funzione $f(x, p)$

$$\nu = n - n_p$$

Per esempio supponiamo $S = 7.2$, $\nu = 5$. Si ottiene $P(\chi^2 \leq S) \approx 80\%$. Questo significa che ripetendo le misure tante volte ci si aspetta che nell'80% dei casi si otterrà un valore minore di 7.2, cioè 7.2 è un valore non molto buono per il χ^2 , ma nemmeno assurdo, nel 20% dei casi può succedere che venga un risultato più alto.

Convenzionalmente si accetta come limite per i risultati buoni quello del 95% da un lato, e quello dello 5% dall'altro, perchè, anche se a prima vista sembra che la cosa migliore sia ottenere dei χ^2 molto piccoli (o addirittura zero), in realtà questi casi vanno guardati con sospetto. Di solito χ^2 piccoli si ottengono perchè gli errori sono sovrastimati, oppure i risultati sono truccati, cioè lo sperimentatore (consciamente o no) tende ad attribuire al risultato delle misure il valore che gli piacerebbe.

•2) Altra applicazione del test del χ^2

•Supponiamo di fare un esperimento che ha come oggetto l'osservazione di possibili eventi $E_1, E_2, \dots, E_n$ di cui registriamo la frequenza $O_1, O_2, \dots, O_k, \dots, O_n$ ('O' sta per Osservato)

•Facendo ipotesi sul processo conosciamo le frequenze teoriche

$$e_1, e_2, \dots, e_n.$$

Ci saranno differenze tra le frequenze osservate e quelle teoriche. Per determinare se le differenze sono significative (e quindi eventualmente rifiutare le ipotesi che hanno portato a calcolare e_k) si usa la quantità

$$\sum_{i=1}^n \frac{(O_i - e_i)^2}{e_i}$$

che viene considerata ancora una variabile χ^2 : formalmente ricorda un χ^2 perchè si suppone che sia Poissoniana la distribuzione di ognuna delle frequenze O_i e l' O_i misurato rappresenta il valor medio della distribuzione campione, e_i rappresenta il valor medio della parent distribution, ed inoltre per la Poissoniana $\sigma_k^2 = e_k$.

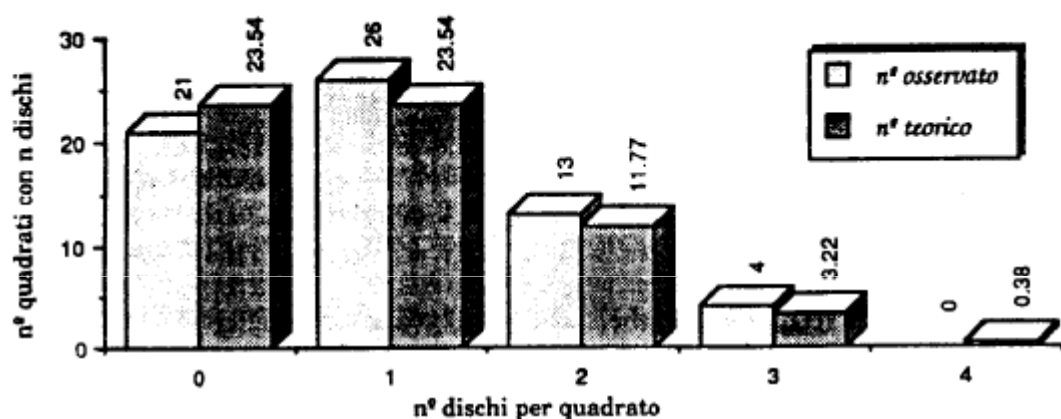
I gradi di libertà sono $n - m - 1$ dove n è il numero delle osservazioni fatte, m è il numero dei parametri che servono per calcolare le probabilità degli eventi $E_1, E_2, \dots, E_k, \dots, E_n$ e quindi le frequenze teoriche; inoltre c'è la seguente relazione:

$$\sum_{i=1}^n O_i = n$$

e questa relazione causa la perdita di un altro grado di libertà.

□ **Esempio:** si supponga di avere un foglio di carta diviso in 64 quadrati numerati (da 1 a 64). Si prendono 64 dischi e si lasciano cadere sul foglio di carta uno alla volta, in modo che si distribuiscano pressochè uniformemente sul quadrato. Quindi si fa una tavola suddividendo i quadrati in funzione del numero dei dischi che essi contengono:

k : n° dei dischi per quadrato.	O_k : n° quadrati con k dischi.	e_k : frequenza teorica
0	21	23.54
1	26	23.54
2	13	11.77
3	4	3.22
4	0	0.38



Per calcolare le frequenze teoriche, si è fatta l'ipotesi che la distribuzione della variabile k sia una Poissoniana:

$$P(k) = \frac{\mu^k}{k!} e^{-\mu} = \frac{1}{k!} \cdot e^{-1}.$$

Ovviamente μ vale uno (64 dischi in 64 quadrati cioè in media un disco per quadrato). Le frequenze teoriche si calcolano moltiplicando $P(k)$ per il numero totale $n = 64$ dei quadrati:

$$e_k = \frac{64}{e} \frac{1}{k!},$$

cioè

$$e_0 = \frac{64}{e}, \quad e_1 = \frac{64}{e}, \quad e_2 = \frac{64}{e} \cdot \frac{1}{2}, \quad e_3 = \frac{64}{e} \cdot \frac{1}{3!}, \quad e_4 = \frac{64}{e} \cdot \frac{1}{4!}.$$

Adesso prendiamo la calcolatrice e troviamo S :

$$S = \sum_{i=0}^3 \frac{(O_i - e_i)^2}{e_i} = \frac{(21 - 23.54)^2}{23.54} + \frac{(26 - 23.54)^2}{23.54} + \\ + \frac{(13 - 11.77)^2}{11.77} + \frac{(4 - 5.15)^2}{5.15}.$$

Calcolando la somma S si ottiene $S \approx 0.91$. I gradi di libertà sono $4 - 1 - 1 = 2$. Utilizzando le tavole si trova:

$$P(\chi^2 \leq S) \approx 35\%.$$