

Best-fit e gnuplot

fuso@df.unipi.it; <http://www.df.unipi.it/~fuso/dida>

(Dated: version 2 - FF, 25 ottobre 2013)

Questa breve nota punta a sottolineare alcuni aspetti critici, in termini concettuali e pratici, nell'esecuzione dei best-fit. I dati considerati sono quelli relativi all'esperienza su legge di Ohm e resistenza interna del generatore e il software di riferimento è gnuplot. Pertanto questa nota riporta anche alcune note a margine di quell'esperienza sull'uso di quel software.

I. BEST-FIT

Eseguire un best-fit è una delle operazioni più frequenti nella pratica sperimentale. Fare un best-fit *non* significa, in genere, solo far passare una curva sui dati sperimentali, ma è molto spesso un'operazione che consente di:

1. confrontare diversi modelli di interpretazione dei dati, ovvero diverse funzioni di fit, per stabilire quale consenta la migliore descrizione dell'osservazione sperimentale;
2. determinare quantitativamente (*con un certo livello di confidenza*) la significatività dell'interpretazione e, soprattutto, stabilire, ovvero *misurare* in modo indiretto, i parametri che compaiono nella funzione di fit.

Se il primo scopo può essere raggiunto in modo abbastanza semplice dato che coinvolge solo un confronto, il secondo scopo richiede molta attenzione nel definire i dati sperimentali (le incertezze) e nell'applicare correttamente le procedure. Tutto questo è particolarmente vero quando, come nella quasi totalità dei casi, il best-fit deve essere eseguito in maniera numerica, cioè affidandosi a un software. Infatti solo per casi estremamente semplici è possibile determinare le relazioni necessarie al best-fit attraverso procedure analitiche: un caso (forse l'unico significativo praticamente) accessibile analiticamente è quello del best-fit a una funzione lineare, per il quale è relativamente facile giungere a relazioni analitiche attraverso la minimizzazione delle funzioni coinvolte. Molte situazioni fisiche di grande interesse comportano però l'uso di funzioni non lineari, per le quali è necessario un approccio numerico di minimizzazione. In questo rispetto, l'uso di gnuplot rappresenta una scelta sicuramente adeguata, dato che questo programma implementa un Levenberg-Marquardt Algorithm (LMA), una procedura numerica per la ricerca di minimi locali generalmente efficiente e affidabile.

A. Richiami su fit e minimo χ^2

Eseguire un best-fit (detto, in questo caso, dei minimi quadrati) secondo la funzione $f(x)$ richiede di minimizzare la somma dei residui (quadri), cioè di minimizzare

la funzione

$$\sum_i (y_i - f(x_i))^2, \quad (1)$$

dove y_i e x_i sono le coppie di dati sperimentali e la somma è estesa al numero n di dati disponibili. Come ben sapete, questo metodo ha lo svantaggio di non considerare l'incertezza dei dati sperimentali Δy_i , che può essere inserita come peso della somma nel seguente modo:

$$\sum_i \frac{(y_i - f(x_i))^2}{(\Delta y_i)^2}. \quad (2)$$

Alla grandezza considerata in Eq. 2 si dà spesso il nome di χ^2 . Questo nome nasce dall'analogia con una *distribuzione di probabilità*, detta appunto del χ^2 , che si riferisce a una variabile aleatoria χ^2 costruita come somma dei quadrati di un'altra variabile aleatoria standard ξ : $\chi^2 = \sum \xi^2$. La distribuzione del χ^2 è nota (tabelle e calcoli numerici) e si sa che essa, per un numero n sufficientemente grande, tende ad assumere il valore medio n e la deviazione standard $\sqrt{2n}$. Tutto questo si verifica se la variabile aleatoria ξ è distribuita secondo una Gaussiana (standard) a media nulla e *varianza unitaria (normalizzata)*. Se queste condizioni sono verificate si assume che: $\xi = (y_i - f(x_i))/(\Delta y_i)$. Oltre a introdurre le incertezze di misura, il metodo consente di stabilire dei criteri per la valutazione quantitativa della significatività del best-fit (il più noto di questi criteri è quello di Pearson, detto anche semplicemente del χ^2 , che è direttamente collegato alla stima della probabilità che si possa avere un χ^2 più alto, o più basso, di quello ottenuto).

B. Alcuni aspetti critici del metodo

Il metodo propone diversi aspetti critici, che vanno meditati e considerati con attenzione. I principali sono elencati qui nel seguito.

- Il carattere aleatorio della variabile χ^2 costruita con i dati sperimentali dipende dal fatto che le y_i sono risultato di una misura, dunque affette da incertezza statistica, e che anche la $f(x_i)$ ha un aspetto stocastico dovuto alla possibilità di aggiustare, idealmente in modo casuale, i parametri della funzione $f(x)$ per migliorare l'accordo con i dati. Tutto questo è vero solo se il campione è statisticamente significativo. Tra l'altro, ciò implica che il numero

di dati a disposizione sia sufficientemente grande. Nella pratica, il metodo si ritiene valido se il numero di gradi di libertà (n - numero parametri della funzione) è superiore ad almeno 5.

- Per rendere la distribuzione dei residui una variabile aleatoria che segue la distribuzione del χ^2 occorre che la differenza quadrata tra dati e funzione di fit sia correttamente normalizzata. Questa normalizzazione si ottiene dividendo per la varianza σ_i^2 , la quale, però, a priori non è nota. Nel metodo essa viene generalmente sostituita con $(\Delta y_i)^2$ anche quando, caso frequentissimo, i dati sperimentali sono affetti da una non trascurabile incertezza anche nella misura di x_i .
- In conseguenza di quanto appena affermato, il fatto che il software (gnuplot o *qualsiasi altro*) non permetta di considerare gli errori Δx_i non è una limitazione del software, ma è diretta conseguenza del metodo usato!
- Similmente, il fatto di considerare le sole incertezze Δy_i non è una caratteristica del software, che piuttosto richiede una colonna di dati da usare come σ_i , cioè come coefficienti di normalizzazione della presunta distribuzione del χ^2 che si sta usando.
- Il valore del χ^2 risultante dal best-fit dipende in modo inversamente proporzionale dal quadrato dei dati impiegati nella normalizzazione. Questo rende il metodo estremamente sensibile alla scelta delle incertezze sperimentali e/o del metodo usato per tenerne conto. Infatti è sufficiente che uno, o pochi, punti sperimentali cadano al di fuori della curva di fit per veder schizzare in alto il valore del χ^2 , mentre χ^2 miseri possono essere facilmente ottenuti per set di dati dotati di grosse barre di errore.

Sgombrati questi rischiosi luoghi comuni, resta il problema di cercare il modo migliore per tenere conto, se necessario, dell'incertezza Δx_i . Non esiste un metodo pulito e sicuro. Un modo può essere quello di basarsi sulla propagazione degli errori, cioè nel determinare il contributo sull'incertezza in y_i , $\Delta y_i|_{\Delta x_i}$, dovuto all'incertezza su x_i . Secondo le regole della propagazione degli errori, tale contributo può essere espresso come $\Delta x_i |\partial f(x)/\partial x|_{x=x_i}$ per cui si può porre:

$$\sigma_i^2 = (\Delta y_i)^2 + (\Delta x_i \left| \frac{\partial f(x)}{\partial x} \right|_{x=x_i})^2. \quad (3)$$

Questa espressione ha lo svantaggio di richiedere la conoscenza a priori della funzione $f(x)$ (inclusi i suoi parametri), che invece è in genere quanto si vuole determinare con la procedura di best-fit.

Una versione più grossolana dello stesso ragionamento, che può essere utile quando le incertezze relative sono simili per y_i e x_i (cioè $\Delta x_i/x_i \sim \Delta y_i/y_i$), consiste nell'aumentare artificiosamente di un certo fattore (per esempio 1.4, per tenere conto della somma in quadratura) i valori

di Δy_i . Nel caso, vi raccomando di non modificare la colonna delle incertezze sperimentali, che sono quelle decise quando si fa la misura e che devono comparire inalterate come barre di errore del grafico, ma piuttosto di creare un'ulteriore colonna che contiene le incertezze modificate, da usare solo per la normalizzazione del χ^2 , oppure di seguire quanto riportato ad esempio in seguito (in ogni caso è necessario che dichiariate per bene quello che avete fatto!)

II. GNUPLOT ED ESEMPIO

Gnuplot, pur non molto figo, è sicuramente un software adeguato per eseguire best-fit non lineari. Come sapete, il primo passo è quello di definire la funzione di fit, che chiameremo $f(x)$ (ma qualsiasi nome, senza spazi, va bene). Per semplicità, supponiamo che la nostra funzione di fit, stabilita sulla base di un modello, sia del tipo $f(x) = a/(b+x)$, che è proprio la funzione usata nell'esperienza sulla legge di Ohm e resistenza interna. Gnuplot richiede di scrivere nella finestra dei comandi: `f(x)=a/(b+x); a=5; b=20` (il punto e virgola equivale ad andare a capo), dove si vede che è necessario inizializzare correttamente i parametri. La scelta dei valori iniziali dei parametri, che qui sono proprio quelli opportuni per l'esempio considerato, è cruciale per ottenere una convergenza rapida e sicura della procedura. Infatti, dato che l'algoritmo LMA cerca minimi locali, è necessario che esso venga fatto partire da condizioni non troppo diverse da quelle che conducono alla convergenza. Per valutare i parametri di inizializzazione è in genere necessario stimare correttamente la situazione fisica e verificare come essa si riflette sul modello. In caso di necessità (se non si è sicuri della scelta), può essere utile graficare la funzione $f(x)$ sovrapposta ai dati sperimentali (supposti contenuti nel file `dati.txt` nel formato $x_i, y_i, \Delta x_i, \Delta y_i$), cosa che si può ottenere con il comando: `plot f(x), 'dati.txt' using 1:2:3:4 with xyerrorbars`. Osservare il grafico ottenuto può essere utile per aggiustare i parametri allo scopo di ottenere il migliore accordo iniziale.

La procedura di best-fit può a questo punto essere avviata con il comando `fit f(x) 'dati.txt' using 1:2:4 via a,b`. State molto, molto attenti a quello che scrivete in questa linea di comando, in particolare alla sintassi (la sequenza deve essere quella indicata!) e all'istruzione `using`. Essa è critica in quanto stabilisce quali colonne del file di dati devono essere impiegate come variabile indipendente x_i (la colonna identificata dal primo numero), come dato sperimentale y_i (la colonna identificata dal secondo numero), come colonna di dati da usare per la normalizzazione (la colonna identificata dal terzo numero). Nell'esempio, si suppone di impiegare direttamente la colonna che riporta gli errori Δy_i , che è supposta essere la numero 4 del file di dati. Occhio: la sintassi che abbiamo usato per fare il grafico è diversa (in quel caso avevamo posto nell'ordine le incertezze Δx_i e

Δy_i , affinché venissero graficate sotto forma di barre di errore, come indicato dal comando `with xerrorbars`).

Se tutto funziona per il meglio, la convergenza si ottiene in pochi passaggi (poche iterazioni) e a quel punto è necessario rigraficare la funzione $f(x)$ restituita dal fit e i dati, comprensivi delle barre di errore rispetto a x e a y , usando il comando riportato sopra. Se, come talvolta succede, i dati spaziano su diversi ordini di grandezza, può essere utile usare una rappresentazione in scala logaritmica, che richiede di scrivere il comando `set logscale` (carta bilogaritmica, altrimenti `set xlogscale` o `set ylogscale`, per avere un solo asse rappresentato in scala logaritmica). Occhio: se la rappresentazione è logaritmica la scala non può comprendere lo zero, e men che meno valori negativi. Fate buon uso dei comandi per regolare la scala (che io, in genere, lascio automatica, almeno in prima battuta).

I risultati del fit sono riportati nella finestra dei comandi e registrati (credo di default) in un file di log. Questi risultati vanno attentamente letti e presi in considerazione, altrimenti il lavoro che state facendo è inutile! Dunque non abbiate troppa fretta nel terminare!

A. Esempio e commento sulle incertezze

Come già anticipato, l'esempio si riferisce alle misure fatte nell'esperienza su legge di Ohm e resistenza interna del generatore, dove il primo obiettivo era quello di confrontare il modello senza $[g(x) = c/x]$ e con le resistenze interne $[f(x) = a/(b+x)]$. Il secondo obiettivo, stabilito che il modello con le resistenze interne era più verosimile, era quello di determinare i valori dei parametri a e b che meglio si accordavano con le misure, e che avevano il ruolo (e le dimensioni) rispettivamente della d.d.p. del generatore (ideale) e della resistenza interna (di generatore e amperometro, quest'ultima attesa trascurabile per il fondo scala di interesse). I dati li ho presi io, e su un paio di banchi diversi, ottenendo risultati simili a quelli che mi aspettavo e, soprattutto, non incontrando particolari problemi con il best-fit. I miei dati ($n = 15$ misure, ottenute anche collegando in parallelo resistori di piccolo valore in modo da avere parecchi dati per bassi valori di resistenza, che sono quelli di maggiore interesse) li ho scritti nel file di testo `dati.txt` mettendoli, come già anticipato, in questo ordine di colonne: $x_i, y_i, \Delta x_i, \Delta y_i$.

Come già affermato, la scelta dell'incertezza delle misure è cruciale. Io ho scelto di basarmi sulla *precisione* dichiarata dal costruttore per il multimetro digitale usato nell'esperienza (leggete il manuale disponibile in rete e ricordate cosa c'è scritto!), che è $\pm 0,5\%$ (o ± 1 digit, la peggiore delle due) per la misura di corrente con fondo scala fino a 20 mA e $\pm 1,2\%$ (o ± 1 digit, la peggiore delle due) con fondo scala fino a 2 A, e $\pm 0,8\%$ (o ± 3 digit, la peggiore delle due) per le misure di resistenza con fondo scala fino a 20 kohm e $\pm 0,8\%$ (o ± 1 digit, la peggiore delle due) con fondo scala fino a 2 Mohm. Notate che il fondo scala del multimetro è, espresso in digit, pari a 1999; dun-

que nella maggior parte dei casi la precisione citata porta a un'incertezza nettamente maggiore dell'ultima cifra significativa, che rappresenta la *risoluzione* della misura. D'altra parte, specie quando la misura è fatta su resistori di basso valore, la resistenza dei contatti può difficilmente essere considerata trascurabile. Come si può facilmente verificare, tale resistenza dipende fortemente dalle condizioni sperimentali (ad esempio, da come si ruotano le banane all'interno delle boccole), per cui costituisce sicuramente una fonte di incertezza non trascurabile, che possiamo ritenere inclusa nell'errore considerato.

Occorre notare che porre le incertezze sperimentali pari alla precisione dichiarata dal costruttore può condurre in alcuni casi a sovrastimare l'incertezza stessa. Infatti quelli del costruttore sono tipicamente dei dati di *calibrazione*, che quindi hanno a che fare soprattutto con errori di tipo sistematico. Se, come nel caso di questo esempio, l'obiettivo è quello di verificare un modello, può essere che gli errori sistematici, che sistematicamente affliggono tutte le misure considerate (allo stesso modo), possano essere trascurati. Tuttavia, nella nostra esperienza il multimetro viene impiegato per misure diverse tra loro (resistenza e corrente) e per di più con scale diverse, circostanze che impediscono di trascurare a cuor leggero gli errori sistematici.

La Fig. 1 riporta il risultato ottenuto (le due curve sovrapposte ai dati sperimentali si riferiscono alle funzioni modello senza e con le resistenze interne, rispettivamente di colore verde e rosso). Notate la rappresentazione in scala bilogaritmica. Inoltre i dati di intensità di corrente sono stati espressi in mA e quelli di resistenza in kohm allo scopo di evitare che il software di best-fit avesse a che fare con numeri troppo piccoli (in casi estremi ciò può condurre a problemi nella convergenza dell'algoritmo di minimizzazione). Osservate che $1 \text{ kohm} \times 1 \text{ mA} = 1 \text{ V}$, per cui i parametri a e c dei fit hanno unità di misura V, mentre b ha unità kohm. Si vede che, nonostante i timori, le barre di errore (pur presenti nel grafico) sono praticamente indistinguibili dai punti.

L'esito dei best fit fornisce in primo luogo una netta evidenza del fatto che il modello rappresentato da $f(x)$ è più adatto di quello rappresentato da $g(x)$ (si vede benissimo anche a occhio...). Infatti i valori dei χ^2 ridotti (divisi per il numero di gradi di libertà), riportati nel log di gnuplot con il nome di **variance of residuals (reduced chisquare) = WSSR/ndf**, valgono rispettivamente 0.76 e oltre 300! Concentriamoci allora sul risultato del best-fit a $f(x)$. Se ricordiamo le caratteristiche della distribuzione del χ^2 , che dovrebbe avere media pari al numero di gradi di libertà, un $\chi^2_{rid} = 0.76$ è certamente un buon risultato. Il valore non ridotto (si legge nella riga del log sotto **final sum of squares of residuals** :) è di 9.85. Considerando che il numero di gradi di libertà è 13 (15 dati meno due parametri), le tabelle (vedi ad esempio Martinelli, Baldini) della distribuzione del χ^2 dicono che c'è una probabilità compresa tra il 25% e il 50% di trovare un valore del χ^2 migliore di quello ottenuto. Si è dunque bene all'interno della fascia di confidenza

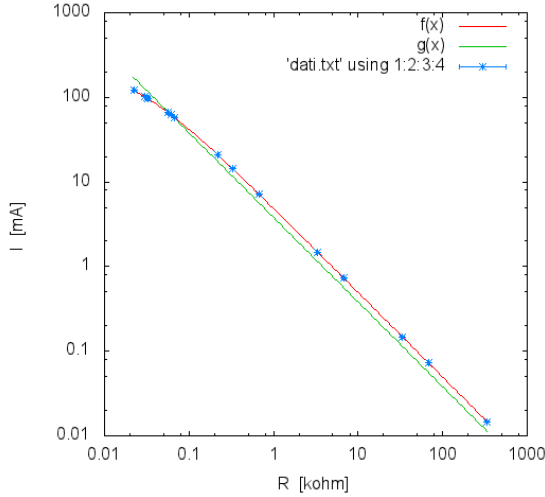


Figura 1. Dati sperimentali e risultati dei best-fit alle funzioni $g(x)$ e $f(x)$ citate nel testo.

5-95%.

Inoltre i parametri del fit risultano anche in accordo con le previsioni: infatti si ottiene $a = 4.94$ V [da confrontare con la misura a circuito aperto, $V_0 = (4.95 \pm 0.02)$ V] e $b = 18.0$ ohm (poi si discuterà dell'incertezza da attribuire a questi parametri, che è anche punto relevantissimo!)

B. Abbassare il χ^2

Pur essendo accettabile, il valore del χ^2 ottenuto potrebbe essere sovrastimato a causa della sottostima dell'incertezza sperimentale. Considerando che gli errori relativi nella misura delle resistenze e delle correnti sono paragonabili tra loro, in prima battuta ho provato a far utilizzare al software un'incertezza Δy_i manipolata in modo da essere moltiplicata per 1.4 volte. Per farlo ho usato la linea di comando `fit f(x) 'dati.txt' using 1:2:(1.4*$4)` via `a,b`, che per l'appunto impartisce al software il comando di moltiplicare per 1.4 i valori della colonna 4 (quella che contiene l'errore Δy_i) allo scopo di normalizzare i residui. Notate l'uso del carattere `1.4*$4`, che in sostanza dice a gnuplot di usare i valori riportati nella colonna 4 del file dopo averli moltiplicati per il fattore 1.4. Il risultato è ovvio: il χ^2 ottenuto si riduce di un fattore 2! Questo permette di ottenere un livello di confidenza prossimo al 2.5%, che è fin troppo buono (forse stavolta si sta sovrastimando troppo l'incertezza?), essendo al di fuori della fascia di confidenza generalmente adottata.

Per farmi del male, ho anche adottato l'altra tecnica, quella della propagazione degli errori. Si ha $|\partial f(x)/\partial x| = a/(b+x)^2$, dunque il fattore di normalizzazione diventa $\sqrt{(\Delta y_i)^2 + (\Delta x_i a/(b+x_i)^2)^2}$. Allora ho scritto la linea di comando, un po' compli-

cata, in questo modo: `fit f(x) 'dati.txt' using 1:2:(sqrt(($4)**2+($3*a/(b+$1)**2)**2))` via `a,b` (lascio a voi il piacere di decifrarla!). Questo ha generato un best-fit con $\chi^2_{rid} = 0.53$, dunque simile (ma un po' più ragionevole) a quello ottenuto prima per via abborracciata. Questo valore corrisponde a un livello di confidenza attorno al 10%, che è proprio di molto bellino.

C. Non sempre, però, è tutto giusto!

Nonostante il malcelato orgoglio, occorre osservare che l'esito di una procedura di best-fit non deve sempre e necessariamente essere quello di ottenere un buon valore del χ^2 . Per esempio, nel caso specifico, non è affatto detto che il modello prescelto, quello rappresentato da $f(x)$, sia corretto. Questo modello si basa infatti su un'affermazione poco ragionevole, quella che le resistenze interne (di generatore e amperometro, collegate in serie tra loro) siano sempre le stesse per tutte le misure svolte.

In primo luogo supporre che il generatore reale (di Thevenin) sia descritto come la serie di un generatore ideale e una resistenza interna è, per l'appunto, un modello, che potrebbe essere non del tutto verosimile quando si ha a che fare con alimentatori che contengono parecchia elettronica (parecchi componenti attivi). In secondo luogo, e questa affermazione è sicuramente vera, l'amperometro presenta una resistenza interna che *dipende dal fondo scala impiegato*. In particolare, spulciando il manuale del multimetro digitale (thanks, Diego), si nota l'affermazione data dal costruttore che la caduta di potenziale nelle misure di corrente è (fissa) di 200 mV. Applicando la legge di Ohm si trova che la resistenza interna è attesa, ad esempio nella scala dei 2 mA, pari a $200/2 = 100$ ohm (tutt'altro che trascurabile!). Invece, sempre ad esempio, nella scala dei 200 mA la resistenza interna è attesa essere pari a 1 ohm (questo è trascurabile). Ora, nell'esperienza citata i dati per i quali è maggiore la discrepanza tra i modelli sono quelli per cui la corrente erogata è alta, per i quali la resistenza interna dell'amperometro rimane pressoché fissa a un valore praticamente trascurabile. Di conseguenza il problema non si palesa in modo evidente, ma *ricordatevene!*

III. ERRORI SUI PARAMETRI E STRANEZZE DI GNUPLLOT

Dato che l'operazione di best-fit comprende, spesso, la determinazione (*misura indiretta*) di qualche parametro, è necessario preoccuparsi dell'incertezza da attribuire alla misura eseguita, cioè ai parametri determinati dalla procedura di best-fit. Chiaramente attribuire un'incertezza a un valore che esce da una procedura numerica è tutt'altro che banale, anzi è proprio concettualmente difficile. Generalmente si attribuisce come incertezza quella

che fa variare il valore del χ^2 di una deviazione standard (in alto o in basso in modo simmetrico).

Questa dovrebbe anche essere la convenzione con la quale si stabiliscono le incertezze sui parametri nel caso di best-fit analitici, per esempio a una retta. Però risulta evidente che *questa non è la convenzione adottata da gnuplot!*

Dato che siamo sperimentali, la dimostrazione migliore si ottiene facendo una prova. Ho prodotto dei dati di un esperimento immaginario ben rappresentati da una retta, del tipo $f(x) = q + mx$. Per farlo mi sono inventato una colonna di (15) punti, non perfettamente equispaziati tra loro per simulare un qualche esperimento reale, e quindi mi sono calcolato i valori risultanti secondo la funzione di cui sopra, supponendo $q = 1.7$ e $m = 0.85$ (in unità arbitrarie, tanto l'esperimento me lo sono inventato!). Quindi ho aggiunto ai valori ottenuti un po' di *rumore*, cioè un (piccolo) valore distribuito casualmente, che serve per rendere i punti non perfettamente allineati su una retta, come in un vero esperimento. Infine ho creato una colonna di errori (stavolta solo Δy_i , qui non sono interessato alla propagazione dell'incertezza come sopra), che ho posto pari al 10% del valore y_i .

A questi dati ho prima di tutto applicato le formule analitiche per la determinazione dei coefficienti m e q e per la loro incertezza (se non avete voglia di ricavarle, le formule sono quelle di pag. 126 di Martinelli, Baldini). Applicare le formule richiede di fare un bel po' di conti, per cui io ho usato un software (lo stesso che uso in genere per trattare i dati). Non ho provato a fare le operazioni richieste con gnuplot: prima o poi ci provo e vi faccio sapere se ci riesco (provateci anche voi!). I dati ottenuti sono: $q = (1.69 \pm 0.14)$ arb. un. e $m = 0.840 \pm 0.036$ arb. un..

Quindi ho creato un file di dati, chiamato *fake.txt*, dove ho messo nell'ordine x_i , y_i e Δy_i , e ho fatto fit e grafico con gnuplot, ottenendo quanto riportato in Fig. 2. Sono andato a leggere i parametri di fit determinati da gnuplot, ottenendo valori in accordo con il fit analitico: $q = 1.69$ arb. un. e $m = 0.840$ arb. un.. Poi ho visto l'incertezza determinata da gnuplot su questi parametri, che va sotto il nome di **Asymptotic Standard Error**, ottenendo *valori ben diversi* rispetto a quanto atteso! Nel caso specifico, ho infatti ottenuto: $\Delta q = 0.054$ arb. un. e $\Delta m = 0.014$ arb. un., che sono entrambi più piccoli di quanto dovuto! Tanto per essere più chiaro, riporto in Fig. 3 la schermata di log di gnuplot con tutti i dati usciti dal software.

L'inghippo è che gnuplot *considera una diversa definizione per l'errore sui parametri* (standard asymptotic, vorrà pur dire qualcosa). In particolare appare dalle prove condotte che gnuplot moltiplica l'incertezza come da noi definita per il valore che chiama **rms of residuals** ($\text{FIT_STDFIT} = \sqrt{\text{WSSR}/\text{ndf}}$), che non è altro che la radice quadrata del χ^2 (ovvero, se ci pensate, la deviazione standard - rms - della somma dei residui normalizzati). Questo valore è tanto più piccolo quanto migliore è l'accordo tra fit e dati, e viceversa è grande quando l'accordo

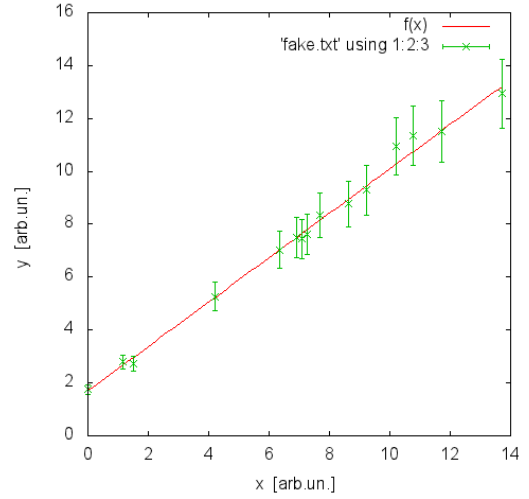


Figura 2. Simulazione dei dati sperimentali e best-fit come descritto nel testo.

è scarso. Dunque la misura dell'incertezza sui parametri restituita da gnuplot *dovrebbe* consentire di usare l'incertezza determinata numericamente dall'algoritmo di minimizzazione anche nei casi, sfortunati, in cui l'accordo è minimo, e viceversa diminuire (artificialmente) l'incertezza quando l'accordo è molto buono. Per noi, in genere, il best-fit è affidabile solo quando il χ^2 è abbastanza, ma non troppo, piccolo (per esempio χ^2_{rid} non troppo diverso da uno, ovvero appartenenza alla fascia di confidenza 5-95%). Fuori da queste situazioni il best-fit non dovrebbe proprio essere usato per implicazioni quantitative, per cui l'incertezza sui parametri determinati dalla procedura non dovrebbe essere quantificabile (neppure come stima).

In altre parole, io non condivido molto questa filosofia, che sembra essere connessa con una specifica definizione di incertezza da attribuire ai parametri seguita da chi ha creato gnuplot. Dunque vi invito a considerare come incertezza sui parametri del fit il valore riportato nel log di gnuplot *diviso per la grandezza citata sopra* (**rms of residuals** (FIT_STDFIT) = $\sqrt{\text{WSSR}/\text{ndf}}$). Ricordatevene! Vi invito anche a provare da soli quanto io ho affermato, come qualcuno di voi ha già fatto. Come suggerimento, per evitare troppa matematica, potete anche usare dei dati che rappresentano la stessa misura, aggiungendovi un po' di *rumore* e delle barre di errore scelte a vostro piacimento. In questo caso, come tutti sapete, il fit (a una funzione costante, che chiamiamo qui k) deve tendere al valore medio pesato ($k = (\sum y_i / (\Delta y_i)^2) / (\sum 1 / (\Delta y_i)^2)$, che è facile da calcolare, e l'incertezza sul parametro di fit (la costante) a $\Delta k = 1 / (\sqrt{\sum 1 / (\Delta y_i)^2})$ (vedi pag. 124 di Martinelli, Baldini). Vedrete che gnuplot non vi restituirà il valore atteso per Δk , a meno che voi non facciate l'operazione di divisione sopra citata.

Da ultimo, per finire, vi dico qual era il risultato del best-fit con gnuplot completo di incertezze per i dati dell'esperienza legge di Ohm e resistenza interna (ca-

```

resultant parameter values
q          = 1.69176
m          = 0.840061

After 1 iterations the fit converged.
final sum of squares of residuals : 1.98568
rel. change during last iteration : -1.46488e-014

degrees of freedom (FIT_NDF) : 13
rms of residuals (FIT_STDFIT) = sqrt(WSSR/ndf) : 0.390826
variance of residuals (reduced chisquare) = WSSR/ndf : 0.152745

Final set of parameters          Asymptotic Standard Error
=====
q          = 1.69176             +/- 0.05428      (3.209%)
m          = 0.840061           +/- 0.01414      (1.683%)

correlation matrix of the fit parameters:
q          q          m
m          -0.570  1.000

```

Figura 3. Schermata del log di gnuplot relativa al best-fit citato nel testo.

so con tutto l'ambaradan della propagazione degli erro-

ri). Tenendo conto della divisione di cui sopra, usciva: $a = (4.936 \pm 0.036)$ V e $b = (18.24 \pm 0.53)$ ohm.

E da ultimissimo vorrei richiamare la vostra attenzione, senza troppi commenti, sulla **correlation matrix of the fit parameters**:, che è anche un risultato in uscita da gnuplot. La matrice di correlazione (o covarianza), che è simmetrica con elementi diagonali pari necessariamente a uno, dice quanto sono correlati fra loro i parametri del fit. Quando il dato di correlazione è grande, allora il valore dei parametri (correlati in modo significativo tra loro) dipende da quello degli altri parametri. Può essere un'indicazione che si sono lasciati troppi parametri liberi nel fit (in effetti, nel caso della legge di Ohm e resistenza interna, avremmo potuto bloccare la differenza di potenziale, parametro a , al valore misurato a vuoto), oppure che la funzione di fit non è adeguata. Magari in futuro torneremo a occuparci di questi aspetti.

Dunque, buon divertimento e grazie!