Best-fit e matrice di correlazione

fuso@df.unipi.it; http://www.df.unipi.it/∼fuso/dida

(Dated: version 1 - FF, 30 ottobre 2013)

Questa breve nota riporta dei commenti sulla matrice di correlazione, che è un output della procedura di best-fit tramite minimo χ^2. Si fa riferimento ai dati acquisiti (da me!) nell'esperienza sulla scarica del condensatore.

I. INTRODUZIONE

Come già discusso in una precedente nota, eseguire un best-fit a una funzione non lineare è in genere una procedura ricca di aspetti degni di considerazione. Aumentare la comprensione di questi aspetti richiede di trovarsi a trattare un problema pratico. Il caso vuole che alcuni di questi aspetti siano rilevanti nell'esperienza pratica sulla scarica del condensatore. Dunque in questa nota riporto i risultati dell'esperienza condotta da me (medesimo) e i commenti sulla procedura di best-fit, eseguita usando gnuplot.

II. ESPERIMENTO

L'esperimento è concettualmente molto banale: si tratta di campionare nel tempo la corrente di scarica di un condensatore di capacità C attraverso una resistenza nota R. Il campionamento viene eseguito "a occhio", guardando la lancetta del multimetro analogico (usato come amperometro) e usando un cronometro per prendere i tempi. Poiché l'esperienza l'ho condotta da solo, per prendere i dati ho misurato tante volte (una trentina) il tempo necessario per ottenere un determinato valore della corrente, partendo da un istante iniziale definito arbitrariamente come quello della commutazione dello switch. In sostanza: (i) ho fatto partire la scarica agendo sullo switch e contemporaneamente (entro il tempo di reazione) ho fatto partire il cronometro; (ii) ho fermato il cronometro quando la lettura dell'amperometro corrispondeva a un dato valore I_j e registrato il tempo corrispondente t_j; (iii) ho ripetuto l'esperienza tante volte scegliendo valori di I_j via via decrescenti.

In un gruppo di due valenti sperimentatori avrei probabilmente scelto un'altra strategia, facendomi aiutare dal compagno o compagna allo scopo di risparmiare tempo (è quello che farete voi, credo). Tuttavia sono convinto che avrei ottenuto risultati simili a quelli che ho trovato. Notate che, poiché la lancetta dell'amperometro impiega un tempo evidentemente finito per passare da zero al valore di lettura subito dopo aver commutato lo switch, ho naturalmente preso dati solo nella fase di discesa della lancetta stessa.

A. Parametri sperimentali e incertezze

Ho usato $R = (99.3 \pm 0.8)$ kohm (ottenuta mettendo in serie due resistori e misurata con il multimetro digitale, ho usato come incertezza la precisione data dal costruttore arrotondata per eccesso) e $C = 220$ μ F $\pm 20\%$ (tolleranza). La costante tempo attesa è quindi $\tau_{att} = (21.8 \pm 4.4)$ s (l'incertezza è ovviamente dominata dalla tolleranza della capacità!). In questa stima ho trascurato la resistenza interna dell'amperometro. Come vedremo, la corrente massima misurata è dell'ordine delle decine di μ A. Dato che il costruttore del multimetro analogico indica (vedi manuale) una caduta di tensione di 100 mV per le misure di corrente sulla scala dei 50 μA, che è quella che ho impiegato, la resistenza interna dell'amperometro è dell'ordine del kohm. L'ho ritenuta trascurabile (i suoi effetti sono sicuramente all'interno dell'incertezza indicata). Inoltre ho misurato la tensione a vuoto del generatore: $V_0 = (4.93 \pm 0.03)$ V (anche qui ho usato la precisione dichiarata dal costruttore per il multimetro digitale, che è $\pm 0.5\%$, e poi ho arrotondato per eccesso).

Risolvendo l'equazione di scarica si vede che il valore massimo atteso per la corrente, che si ha all'istante iniziale t_0 del processo, è $I_{0,att} = V_0/R = (49.6 \pm 0.7)$ μA, che è il motivo per cui ho scelto il fondo scala di 50 μA (notate che nella propagazione degli errori ho stimato l'errore massimo, che rappresenta probabilmente una sovrastima essendo le misure di V_0 e R presumibilmente indipendenti). Naturalmente avrei anche potuto scegliere un'altra scala, ma avrei perso in risoluzione non potendo sfruttare la massima deflessione della lancetta.

Come incertezza della misura di intensità di corrente ΔI_j ho tenuto conto della precisione dichiarata dal costruttore, che è $\pm 1\%$. Tuttavia ho preferito impiegare il valore costante (lo stesso per tutte le misure) $\Delta I_j = 0.5$ μA, che può essere considerato un errore statistico che include la risoluzione dello strumento e la difficoltà di eseguire la misura (il valore di corrente va individuato mentre la lancetta scende!). Come incertezza sulla misura del tempo Δt_j non ho certamente usato la risoluzione dello strumento (il cronometro legge al centesimo di secondo), dato che nella misura conta il mio tempo di reazione, che è secolare come la mia età. Seguendo quanto suggerito dalle buone norme sperimentali, ho deciso di stimare l'incertezza su base statistica ripetendo alcune volte (cinque o sei) la stessa misura (per lo stesso valore di I_j) e guardando lo scarto dei risultati. Dato che l'andamento di scarica è esponenziale decrescente, la lancetta si muove rapidamente nei primi istanti e poi va giù più lentamente. Guardando i risultati ho deciso di usare l'incertezza $\Delta t_j = 0.6$ s per le prime misure ($j < 5$, corrispondenti ai primi 10 s circa di processo), $\Delta t_j = 0.4$ s per un secondo blocco di misure ($6 < j < 10$) e infine $\Delta t_j = 0.2$ s per le rimanenti misure (ne ho fatte in tutto 32). Evidentemente si tratta di una scelta arbitraria, ma mettendomi la mano sulla coscienza mi è sembrata una scelta onesta.

A questo punto è necessario commentare sulla capacità dello strumento di seguire in modo corretto il processo *transiente* di scarica e quindi sulla sua *prontezza*. Il costruttore non mi sembra dare informazioni in merito, dunque anche in questo caso mi sono basato sul buon senso e sull'esperienza, decidendo che le incertezze sui tempi appena citate fossero compatibili con il tempo di risposta dello strumento. Attenzione, però: se la prontezza è sufficiente per seguire il processo di scarica, essa si rivela sicuramente insufficiente per apprezzare la massima corrente di scarica I_0, quella che si ha all'istante iniziale della scarica t_0. Questo è palese osservando il tempo (superiore al secondo) che la lancetta impiega per passare dallo zero alla massima lettura in conseguenza della commutazione dello switch, e anche osservando che la massima corrente letta è sistematicamente inferiore a quella attesa sulla base dei valori di V_0 e R (e del modello della scarica).

Poiché non ho certezza sul fatto che la partenza del cronometro sia effettivamente contemporanea all'inizio della scarica a causa del mio tempo di reazione, ho deciso di modellare il processo secondo il seguente andamento temporale:

$$I(t) = I_0 \exp(-(t - t_0)/\tau) \ , \tag{1}$$

con $\tau = RC$ e t_0 parametro incognito che tiene proprio conto del tempo di reazione. Vedremo che la scelta della funzione modello renderà molto interessanti i risultati!

III. GRAFICO E FIT

Ho preparato il file `scarica.txt` che contiene, nell'ordine, $t_j, I_j, \Delta t_j, \Delta I_j$, e quindi ho graficato i dati (con barre di errore) usando gnuplot. Ho usato una rappresentazione semilogaritmica (`set logscale x`) in modo da evidenziare l'andamento esponenziale decrescente, che in questa rappresentazione dà luogo a una retta di pendenza -$1/\tau$. Poi ho eseguito il best-fit, il cui scopo principale è quello di determinare τ in modo da poterlo confrontare con il valore atteso.

Ho scritto la funzione di fit come `f(x) = I0*exp(-(x-x0)/tau); I0 = 50; x0 = 0.1; tau = 20` (un ripassino di gnuplot fa sempre bene) e quindi ho eseguito il fit con il comando `fit f(x) 'scarica.txt' using 1:2:4 via I0,t0,tau`. Dalla sintassi del comando si capisce che ho pesato con ΔI_j la deviazione standard della variabile aleatoria χ^2, e

```
degrees of freedom    (FIT_NDF)                        : 29
rms of residuals      (FIT_STDFIT) = sqrt(WSSR/ndf)    : 0.59752
variance of residuals (reduced chisquare) = WSSR/ndf   : 0.35703

Final set of parameters            Asymptotic Standard Error
=======================            ==========================

I0              = 49.6             +/- 1.064e+009   (2.145e+009%)
t0              = -0.0290839       +/- 5.209e+008   (1.791e+012%)
tau             = 24.2874          +/- 0.1544       (0.6358%)

correlation matrix of the fit parameters:

                I0     t0     tau
I0              1.000
t0             -1.000  1.000
tau             0.057 -0.057  1.000
```

Figura 1. Schermata di gnuplot per il best-fit a tre parametri liberi citato nel testo.

dunque mi sono almeno inizialmente disinteressato dell'incertezza Δt_j. Inoltre si capisce che ho lasciato come parametri di fit la tripletta $I0, t0, \tau$.

Vi risparmio il grafico (da cui comunque si vede un buon accordo tra dati e fit, tipo quello del grafico che allego alla fine di questa nota), ma vi mostro in Fig. 1 la schermata del log di gnuplot. Prima di procedere, ricordo a tutti che la determinazione dell'incertezza sui parametri di fit secondo le definizioni/convenzioni a cui siamo abituati richiede di dividere l'`Asymptotic Standard Error` per il valore definito come `rms of residuals (FIT_STDFIT) = sqrt(WSSR/ndf)` (tutto questo è discusso e provato nella nota "Best-fit e gnuplot").

Il risultato del best-fit è controverso: se è vero che il χ^2_{rid} è ragionevole e si ottengono valori in accordo con le aspettative (τ e $I0$ sono in accordo con i valori attesi considerando le incertezze, $t0$ è una ragionevole stima per un tempo di reazione), c'è un aspetto sconvolgente: le incertezze sui parametri $I0$ e $t0$ sono abnormi! Come potete facilmente verificare, il problema resta immutato se si dividono tali incertezze per l'"rms of residuals" e vi garantisco pure che il problema non migliora, anzi, peggiora, se si tiene conto dell'incertezza Δt_j, per esempio secondo quanto suggerito nella nota "Best-fit e gnuplot".

In realtà il motivo di questa apparente assurdità è ben chiarito dalla matrice di correlazione (`correlation matrix of the fit parameters:`). Si vede infatti che i parametri $I0$ e $t0$ sono *totalmente* correlati tra loro (correlazione pari a -1!). Ciò è ovvio: la funzione di Eq. 1 può essere riscritta come

$$I(t) = I_0 \exp(t_0/\tau) \exp(-t/\tau) \ , \tag{2}$$

dove si vede chiaramente che i parametri in questione sono correlati fra loro (si tratta di un unico parametro dato dal prodotto $I_0 \exp(t_0/\tau)$). Nella procedura LMA il software non sa, giustamente, che pesci pigliare dato che vede che variare $I0$ o $t0$ conduce a risultati simili. Di conseguenza non riesce a esprimere correttamente le incertezze su tali valori!

L'unico modo ragionevole per ovviare al problema consiste nel bloccare uno dei due parametri. Sulla base del modello e delle misure ho deciso di bloccare il valore del

```
degrees of freedom    (FIT_NDF)                        : 30
rms of residuals      (FIT_STDFIT) = sqrt(WSSR/ndf)    : 0.587477
variance of residuals (reduced chisquare) = WSSR/ndf   : 0.345129

Final set of parameters            Asymptotic Standard Error
=======================            ==========================

t0              = -0.029084        +/- 0.08522      (293%)
tau             = 24.2874          +/- 0.1516       (0.6241%)


correlation matrix of the fit parameters:

                t0     tau
t0              1.000
tau            -0.842  1.000
```

Figura 2. Schermata di gnuplot per il best-fit a due parametri liberi citato nel testo.

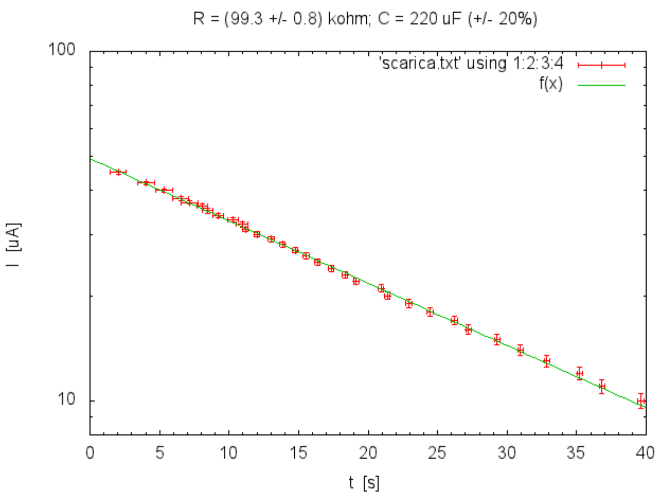

Figura 3. Intensità di corrente $I(t)$ vs tempo t nella scarica del condensatore e best-fit secondo la funzione $f(t)$ discussa nel testo.

parametro $I0$ ponendolo pari al valore $I_{0,att}$ citato sopra. Notate che facendo in questo modo mi gioco il fatto che questo parametro lo conosco solo con un certo margine di incertezza, però guadagno la possibilità di determinare in modo compiuto, cioè con un'incertezza statisticamente determinata, il parametro $t0$ che altrimenti non saprei valutare.

Allora ho posto `I0 = 49.6` e ho usato il comando `fit f(x) 'scarica.txt' using 1:2:4 via t0,tau` per indicare al software di considerare solo $t0$ e τ come parametri liberi, ottenendo il log riportato in Fig. 2. I risultati sono simili a quanto trovato prima, c'è ancora un po' di correlazione, ma stavolta l'incertezza sul valore di $t0$ non è più abnorme.

Per strafare, ho deciso di far considerare al best-fit anche l'incertezza Δt_j. Come suggerito nella nota "Best-fit e gnuplot", a questo scopo ho costruito una deviazione standard per la variabile aleatoria χ^2 in cui comparisse anche l'incertezza su I_j ottenuta per propagazione dell'incertezza Δt_j: $\Delta I_j|_{\Delta t_j} = \Delta t_j |\partial I(t)/\partial t|_{t=t_j} = \Delta t_j I_j/\tau$. Mentre nella nota precedente sommavo *in quadratura* questo contributo con quello dovuto a ΔI_j, stavolta ho deciso di sommare tout-court per tenere conto del fatto che le misure di intensità di corrente e tempo non sono indipendenti tra loro (non lo sono secondo me, tenendo conto della modalità di misura, però la mia affermazione è sicuramente questionabile). Salvo errori e omissioni, il comando di fit diventa allora `fit f(x) 'scarica.txt' using 1:2:(($4+($3*$2/tau))) via t0,tau`.

Come risultato stavolta vi metto il grafico, che è mostrato in Fig. 3. I parametri restituiti dal fit sono: $\chi^2_{rid} = 0.27$ per 30 gradi di libertà (confidenza dell'ordine del 95%), $\tau = (24.4 \pm 0.4)$ s, in accordo con le aspettative, $t_0 = (-0.11 \pm 0.31)$ s, ragionevole come tempo di reazione iniziale, comprensivo anche dei tempi di risposta dello switch e del sistema (il segno meno significa che il cronometro è stato fatto partire prima che la scarica avesse inizio, possibile perché è generalmente più facile premere un pulsante, quello del cronometro, che azionare uno switch). Faccio notare che, ovviamente, le incertezze sui parametri sono state corrette secondo quanto riportato nella nota "Best-fit e gnuplot".