KIT-Fakultät für Physik
Institut für Experimentelle Teilchenphysik
Institut für Theorie der Kondensierten Materie
Prof. Dr. Ulrich Husemann (ETP)
Dr. Nils Faltermann (ETP)
Dr. Andreas Poenicke (TKM)

Praktikum: Computergestützte Datenauswertung

Sommersemester 2021

Übungsblatt Nr. 6 Bearbeitung bis: 30.06., 18 Uhr

Aufgabe 6.1: Parameterschätzung Resonanzkurve mit Daten

Die Schätzung von Parametern einer Modellfunktion ist eine typische Aufgabe in der Datenanalyse. Wir betrachten in dieser Aufgabe die gemessenen Daten einer Resonanzkurve, welche durch folgendes Modell beschrieben wird:

$$A(\eta; D) = \frac{1}{\sqrt{(1-\eta^2)^2 + (2\eta D)^2}}\,.$$

Gemessen wurde die Amplitude A in Abhängigkeit der normierten Frequenz η, wir wollen nun die Dämpfungskonstante D bestimmen. Die Messdaten und deren Unsicherheiten entnehmen Sie bitte der Vorlage `B6A1_start.ipynb`. Die Vorlage enthält bereits eine grafische Darstellung der Messwerte, sowie die entsprechende Modellkurve für einige Werte von D.

Zur Bestimmung von D benötigen wir zunächst ein geeignetes Maß, um die durch den Wert von D festgelegte Resonanzkurve bewerten zu können. Wir wollen hier die von Gauß vorgeschlagene „Summe der Residuenquadrate”, d.h. die Summe der auf die Messunsicherheit normieren Quadrate der Abweichungen der Messwerte von der Funktion, verwenden:

$$S = \sum_{i=1}^{n} \frac{(A_i - A_i^{\mathrm{model}})^2}{\sigma_i^2}\,.$$

Scannen Sie 100 Werte von D zwischen $0,35$ und $0,5$ und berechnen Sie jeweils $S(D)$. Die beste Anpassung ist erreicht, wenn $S(D)$ ein Minimum erreicht. Tragen Sie in einer Grafik $S(D)$ gegen D auf, so können Sie das Minimum immer genauer eingrenzen. Welchen Wert erhalten Sie?

Aufgabe 6.2: Anpassung von Modellen an Daten mit `kafe2`

Obwohl sich viele Anpassungsprobleme auch analytisch lösen lassen, setzt man in der Praxis Software-Werkzeuge ein, die die Verwaltung von Daten, Modellen und das Durchführen der eigentlichen Anpassung mit numerischen Methoden bewerkstelligen.

Ein solches Werkzeug ist `kafe2`, siehe http://kafe2.readthedocs.io. Verschaffen Sie sich zunächst mit Hilfe der Online-Dokumentation einen Überblick über die Funktionalität. Als einfaches Beispiel und Grundlage für diese Aufgabe dient die Vorlage `fitexample_kafe2.ipynb`, die Sie leicht für die Aufgabenstellung unten anpassen können (s. Abb. 1). Im Vergleich zur Vorlesung mit `PhyPraKit.k2Fit()` verwenden wir hier direkt das Paket `kafe2` aufgrund des größeren Funktionsumfangs.

Ergänzen Sie die Vorlage um das Einlesen der Daten aus der Datei `fitexample_kafe2.txt`. Da die Daten mehrfach verwendet werden erzeugen Sie am besten aus diesen eine Instanz eines `kafe2`-XYContainer (`kafe2.XYContainer()`), dies ist aber nicht unbedingt nötig.

Bei den Daten handelt es sich um eine mit gaußförmigen Unsicherheiten behaftete simulierte Messung an festen Stützstellen. Passen Sie zunächst eine Gerade in der üblichen Parametrisierung $y = a_0 + a_1 x$ an.

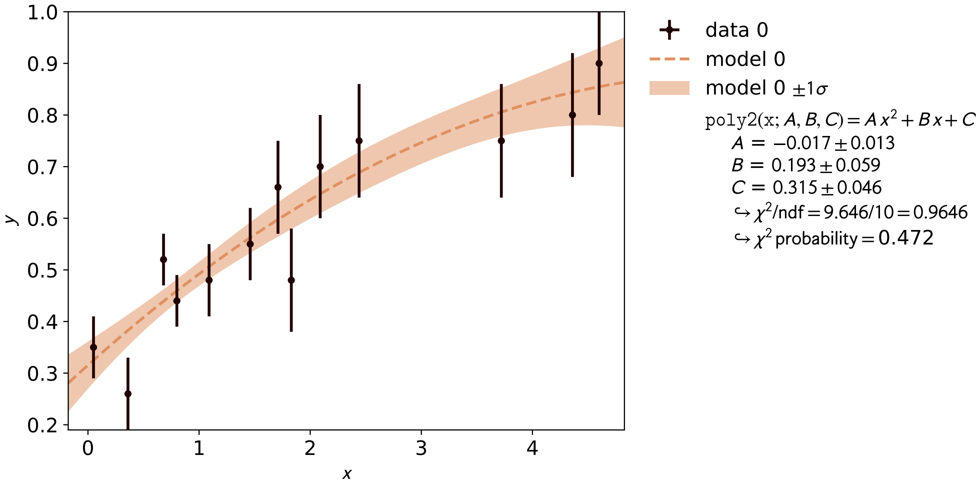

Abbildung 1: Grafische Ausgabe von `fitexample_kafe2.ipynb`: Datenpunkte mit Unsicherheit und angepasster Parabel.

Erstellen Sie dazu die entsprechende Fit-Funktion, analog zu der Parametrisierung einer Parabel (`poly2(x, a, b, c)`) in der Vorlage, und führen Sie die Anpassung durch.

Aufgabe 6.3: Korrelation von Fit-Parametern (Fortsetzung von Aufgabe 6.2)

Bei der Anpassung in Aufgabe 6.2 werden Sie feststellen, dass die beiden Parameter a_0 und a_1 der Anpassung eine große Korrelation zeigen. Um dies näher zu studieren, schauen Sie sich als nächstes eine grafische Darstellung der Korrelationen in Form von Kovarianz-Ellipsen an. Nutzen Sie dazu die Methode `kafe2.ContoursProfiler()`.

Ändern Sie nun die Parametrisierung, so dass die Gerade um den Schwerpunkt der x-Werte dargestellt wird, also gemäß $y = s(x - \bar{x}) + c$. Führen Sie wie in Aufgabe 6.2 die Anpassung durch und vergleichen Sie. Welche Korrelation der Parameter s und c beobachten Sie? Sehen Sie sich dazu auch die Darstellung der Kovarianz-Ellipsen an.

Vergleichen Sie in die grafische Darstellung des angepassten Modells und die Lage des Bands der Unsicherheiten[1]. Überlegen Sie, welche Parametrisierung Sie für die Angabe Ihres Ergebnisses bevorzugen würden?

[1] In `kafe2` wird die vollständige Kovarianzmatrix der angepassten Parameter $\vec{a}$ benutzt, um mittels Fehlerfortpflanzung für jeden x-Wert die Unsicherheit auf die Modellvorhersage $\lambda(x; \vec{a})$ zu berechnen.