TD n°2 Ajustement de courbes

Afin de faciliter le TD, on partira du notebook `Ajustement` déposé sur le github https://github.com/MatManceau/Lumi2021-2022/TD2. Les fichiers de données y sont également déposés.

1 Maximum de vraisemblance

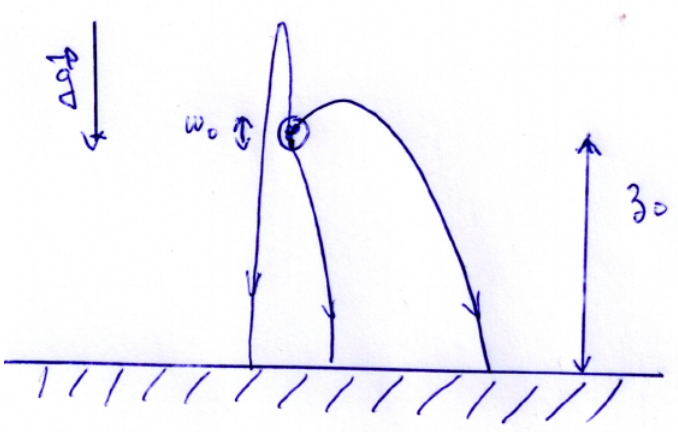
On considère un échantillon de points x_i issus d'une loi de probabilité $\mathcal{P}$. On rappelle que la vraissemblance (likelihood) se définit comme :

$$\mathcal{L}(\theta) = \prod_i \mathcal{P}(x_i|\theta)$$

Le maximum de vraissemblance est la valeur θ qui maximise $\mathcal{L}$. Il est souvent indispenable de faire les calculs avec la log de la vraissemblance (et donc de remplacer le produit par une somme).

2 Mesure de la gravité sur de l'antimatière

La matière attire la matière. A priori, c'est aussi le cas pour de l'antimatière. Par contre la question de savoir si de la matière attire ou pas l'antimatière et comment reste ouverte (et pourrait expliquer la dissymétrie matière/antimatière dans l'univers). Pour cela une expérience est en cours de réalisation au CERN. Il s'agit du projet GBAR qui consiste à laisser tomber un anti-atome d'hydrogène lent dans le champ de gravité de la Terre et à mesurer le temps de chute. Dans le meilleur des cas, on espère pouvoir réaliser 1000 fois l'expérience. Le but de ce problème est d'estimer l'incertitude sur la mesure de g à laquelle on s'attend.



A l'instant $t = 0$, la distribution en position des atomes est une gaussienne centrée autour de $z_0 = 30$ cm avec un écart type w_0 de l'ordre de 1 μm et une distribution en vitesse gaussienne d'écart type σ_v de l'ordre de 1 m/s centrée en 0. On prendra $g = 9.81$ m.s^{-2} orienté vers le bas. On négligera la dispersion initiale en position.

1. Ecrire l'équation du second degré décrivant la trajectoire de l'atome selon l'axe vertical. Montrer que le temps de chute est donné par : $\sqrt{v_0^2 + 2gh}/g + v_0/g$

2. Simuler un ensemble de $N = 1000$ temps de chute t_i et tracer l'histogramme (`plt.hist` en utilisant l'option `density=True`)
3. Premier estimateur : à partir d'un jeu de données t_i , on peut calculer la moyenne du temps de chute $\langle ti \rangle$ et ainsi estimer simplement g par la formule :

$$\hat{g}(t_1, ...t_N) = \frac{2z_0}{\langle t_i \rangle^2}$$

   Implémenter et caractériser cet estimateur (biais, incertitude, convergence). Pour ce, on simulera l'expérience M fois pour calculer l'espérance et l'écart type de l'estimateur.
4. Pour calculer la vraissemblance, il faut calculer $\mathcal{P}(t)$. C'est relativement simple car il existe une relation entre t et la vitesse initiale v_0 . En disant que $\mathcal{P}(t)dt = \mathcal{P}(v)dv$ et que $v(t) = gt/2 - h/t$ on obtient que :

$$\mathcal{P}(t) = (\frac{g}{2} + \frac{h}{t^2})\mathcal{P}(v(t))$$

   Dans cette formule, $\mathcal{P}(v)$ est donné par une Gausienne. Comparer graphiquement cette formmule à l'histogramme tracé précédement (on pourra prendre N très grand).
5. Pour simplifier les calculs, on supposera que le seul paramètre inconnu de la loi est g. Pour un jeu de donnée de 1000 points, tracer le log de la vraissemblance en fonction de g.
6. Utiliser la fonction `fmin` du package `scipy.optimize` pour calculer la max de la vraissemblance à l'aide du min de $-\log(\mathcal{L})$.
7. Caractériser l'estimateur de max de la vraissemblance.

3 Ajustement d'une courbe

On considère une courbe $y = f(x, \mathbf{p})$ où les $\mathbf{p} = p_1, ..., p_n$ sont des paramètres inconnus. Experimentalement, N mesures ont été effectuées pour des abscisses $x_1, ..., x_N$. Les valeurs mesurées y_i sont entâchées d'un bruit que l'on suppose gaussien de variance σ et non biaisé :

$$y_i = f(x_i, \mathbf{p}) + \epsilon_i$$

L'objectif est de trouver un estimateur des paramètres $\mathbf{p}$ à partir des données (x_i, y_i). Pour cela, on peut appliquer le principe du maximum de vraissemblance, et on obtient que

$$\hat{p} = \text{argmin} \sum_{i=1}^{N} (y_i - f(x_i, \mathbf{p}))^2$$

Dans le cas général, les différents paramètres $\mathbf{p} = p_1, ..., p_n$ sont corrélés. La matrice de correlation est donnée par :

$$\text{cov}(\mathbf{p}, \mathbf{p}) = \frac{\sigma^2}{2M}$$

avec la matrice M :

$$M_{k,l} = \sum_i \frac{\partial f}{\partial p_k}\Big|_{x_i} \frac{\partial f}{\partial p_l}\Big|_{x_i}$$

4 Fonction python curve_fit

On va utiliser la fonction `curve_fit` du package `scipy.optimize`. Cette fonction permet aussi d'obtenir l'incertitude des paramètres sous forme d'une matrice de corrélation. Cette fonction s'utilise de la façon suivante

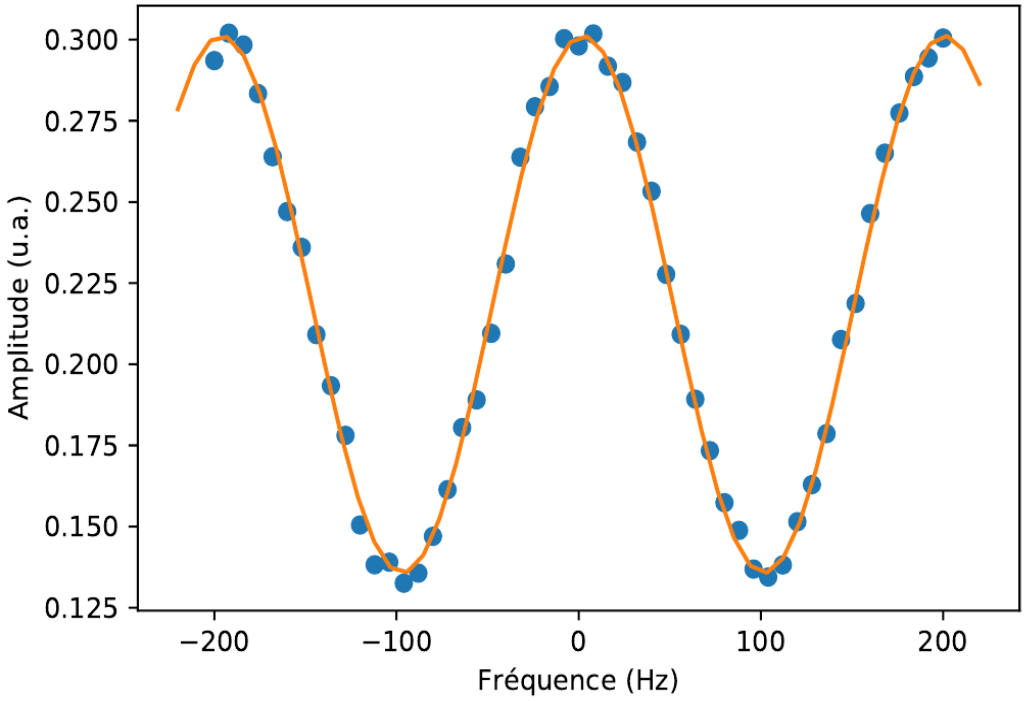
```
p_opt, cor_mat = curve_fit(fonction_de_fit, data_x, data_y, p_ini)
```

où

- `fonction_de_fit(x, p_1, p_2, ..., p_n)` est la fonction de fit. Les variables `p_1, .., p_n` sont les paramètres de la fonction de fit.
- `data_x` et `data_y` sont les points de mesure.
- `p_ini` sont les paramètres initiaux (sous forme d'une liste/tuple/array).
- `p_opt` seront les paramètres optimaux
- `cor_mat` est la matrice de correlation entre les paramètres.

5 Ajustement de frange d'interférence

On souhaite ajuster les franges d'un interféromètre atomique. Les données sont dans le fichier `fit_sinus.dat`. La première colonne du fichiers (axe x) représente une fréquence en Hz. La seconde colonne représente la population mesurée pour une fréquence donnée. L'objectif est de trouver la position de la frange centrale.



On ajustera par une fonction cosinus avec une amplitude, un décalage vertical, une position centrale et une largeur ajustable (soit quatre paramètres en plus de la fréquence).

1. Écrivez la fonction de fit qui dépend des paramètres ci dessus. On l'appellera `frange(x, ...)`. Tracez la courbe pour x entre ±220 Hz. On prendra un interfrange de 200 Hz.
2. Chargez et tracez les données. On représentera les données par des points (`plot(..., ..., 'o')`).
3. Calculez les paramètres optimaux. Quelle est la position la frange centrale ? Représentez les points et la courbe comme sur la figure ci-dessus.
4. Quelle est l'incertitude sur la position de la frange centrale ?

6 Corrélation entre paramètres

Le fichier `population_france` contient les données de la population de la France entre 2001 et 2015 :

1. Tracez et ajustez les données par une une droite $y = ax + b$.
2. Quel est l'incertitude sur b ? Quelle est la signification de b ? Qu'en pensez-vous ?
3. Calculez la valeur et l'incertitude de votre fit en $x = 2020$.
4. Trouvez une fonction de fit plus pertinente pour ce problème.