Fit Lorentzprofiel

October 31, 2021

1 Fit Lorentzprofiel

Ruben Van der Borght Wiskunde-Fysica, r0829907

[1]:
```
import numpy as np #Importeer enkele nodige packages.
import math
from scipy.optimize import minimize, fsolve
import matplotlib.pyplot as plt
from scipy.stats import chi2
import nbconvert

#TO DO:
#REFERENTIES -> PAS IN LATEX
#BEDUIDENDE CIJFERS AANPASSEN
#FIGUREN IN ORDE MAKEN
#DIE ENE BREUK MET EEN IN DE TELLER
#CHECKEN DAT THETA VET IS
```

In dit document wordt een dataset met metingen van posities x [mm] en intensiteiten I met een arbitraire eenheid [arb.eenh] geanalyseerd. Met een fit worden x_0 de verschuivingsparameter, γ de schaalparameter, A de vermenigvuldigheidsfactor en y_0 de offset berekend. Het Lorentzprofiel is gegeven door

$$I(x_j|\gamma, A, y_0, x_0) = \frac{A}{\pi} \frac{\gamma}{(x - x_0)^2 + \gamma^2} + y_0.$$

De paramters worden ook genoteerd als $\theta = (\gamma, A, y_0, x_0)$. Er is gegeven dat I gemeten is door fotonen te meten en dat I een Poissonverdeling $P(I(x|\theta))$ volgt. [ref] Omdat het minimum van de I-waarden ((78 ± 9) arb.eenh.) (1σ-fout) veel groter is dan 10, benaderen we de verdeling met een normale verdeling $N(I(x|\theta), I(x|\theta))$.

[2]:
```
dataset = np.loadtxt("38.txt", delimiter=" ").T #Laad de dataset.
x=dataset[0]
I=dataset[1]

theta = ["gamma","A","y_0","x_0"] #Definieer enkele lijsten die later helpen bij␣
↪iteraties
theta_latex = ["gamma","A","y_0","x_0"]
theta_units=["mm","arb.eenh.\cdot mm","arb.eenh.","mm"]
```

```
def intensity(x,gamma,A,y_0,x_0): #Definieer het model
    I = A*gamma/(np.pi*((x-x_0)**2+gamma**2))+y_0
    return I

print(min(I)) #Bereken de kleinste I-waarde
```

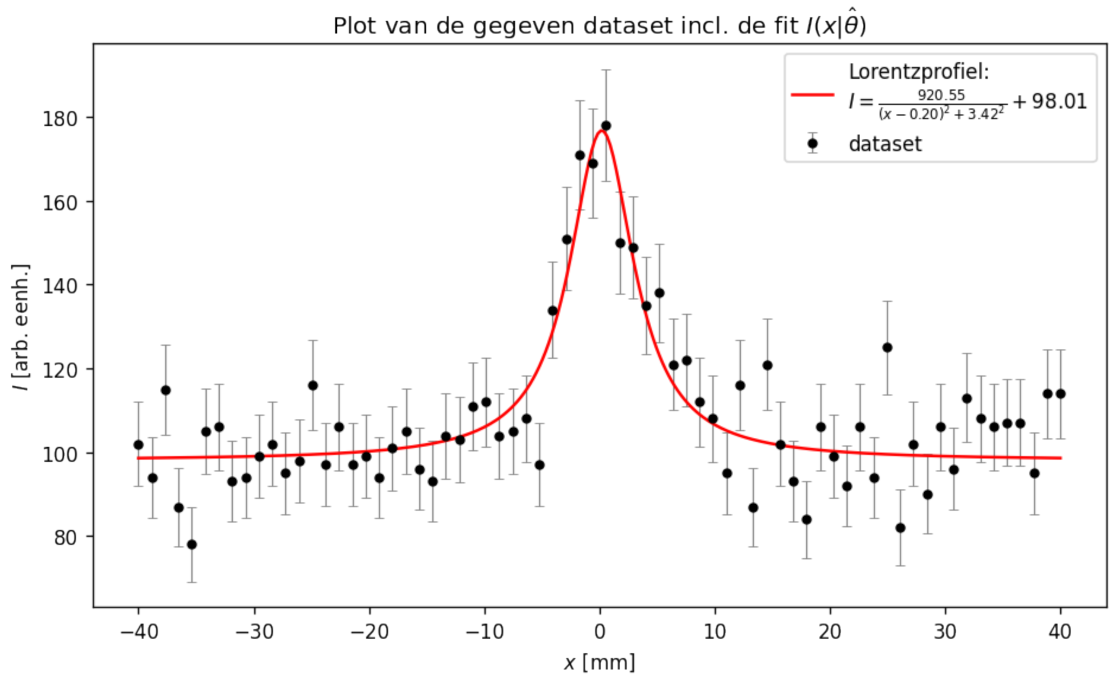
```
78.0
```

1.1 Plot van de dataset inclusief fit

De dataset valt te bekijken op onderstaande grafiek.

[40]:
```
def LS_intensity(theta): #Definieer een functie die de Least Square-waarde ofwel␣
 ↪\chi^2-waarde berekend bij gegeven \theta.
    gamma,A,y_0,x_0=theta
    LS=0
    for i in range(len(x)):
        LS+=(I[i]-intensity(x[i],gamma,A,y_0,x_0))**2/I[i]
    return LS
```

[45]:
```
fig, ax = plt.subplots(nrows=1, ncols=1, dpi=120, figsize=(8, 5)) #Laad de␣
 ↪figuur en plot de datapunten met onzekerheid
ax.errorbar(x, I, yerr=np.sqrt(I), label="dataset",marker="o", markersize=4,␣
 ↪fmt=" ",
            color="black", ecolor="gray", capsize=2.3, capthick=0.5, linewidth=0.
 ↪7)

opt = minimize(LS_intensity,(100,1000,0,5)) #Bereken de beste schatter␣
 ↪\hat{\theta}.
gamma,A,y_0,x_0=theta_hat=opt.x              #De gok is gebaseerd op de␣
 ↪scatterplot van de datapunten.

x_dots = np.linspace(np.min(x),np.max(x),300) #Plot het Lorentzprofiel voor de␣
 ↪beste schatter \hat{\theta}.
ax.plot(x_dots, intensity(x_dots,opt.x[0],opt.x[1],opt.x[2],opt.x[3]), "r",
        label="Lorentzprofiel:\n"+r"$I=\frac{%0.2f}{(x-%0.2f)^2+%0.2f^2}+%0.2f$"␣
 ↪% (A*gamma/np.pi,x_0,gamma,y_0))

mini = LS_intensity(theta_hat) #Bereken de LS-waarde van \theta{\hat}.

ax.set_ylabel(r"$I$ [arb. eenh.]") #Verzorg de lay-out van de plot.
ax.set_xlabel(r"$x$ [mm]")
ax.legend()
ax.set_title(r"Plot van de gegeven dataset incl. de fit $I(x\vert\hat{\theta})$")
plt.tight_layout() ; plt.show()
```




```
[46]: for i in range(len(theta)):                              #Print de componenten van␣
       ↪\theta{\hat}.
          print("%s\t" % theta[i],"%0.2f" % theta_hat[i])      #Deze componenten zijn␣
       ↪nog niet afgerond op het juiste aantal BC.
```

```
gamma    3.42
A        845.92
y_0      98.01
x_0      0.20
```

Bijgevolg is $\hat{\theta}$=(3.42 mm, 845.92 arb.eenh.· mm, 98.01 arb.eenh., 0.20 mm), zodat het Lorentzprofiel

$$I(x|\hat{\theta}) = \frac{845.92}{\pi} \frac{3.42}{(x-0.20)^2 + 3.42^2} + 98.01$$

wordt. Bij de waarden hierboven werd nog geen rekening gehouden met de onzekerheden die in de volgende paragraaf zullen gevonden worden. Wanneer deze berekend zijn, wordt het effectieve model met de juiste waarde $\hat{\theta}_{eff}$ gegeven.

1.2 Onzekerheden op de gefitte $\hat{\theta}$

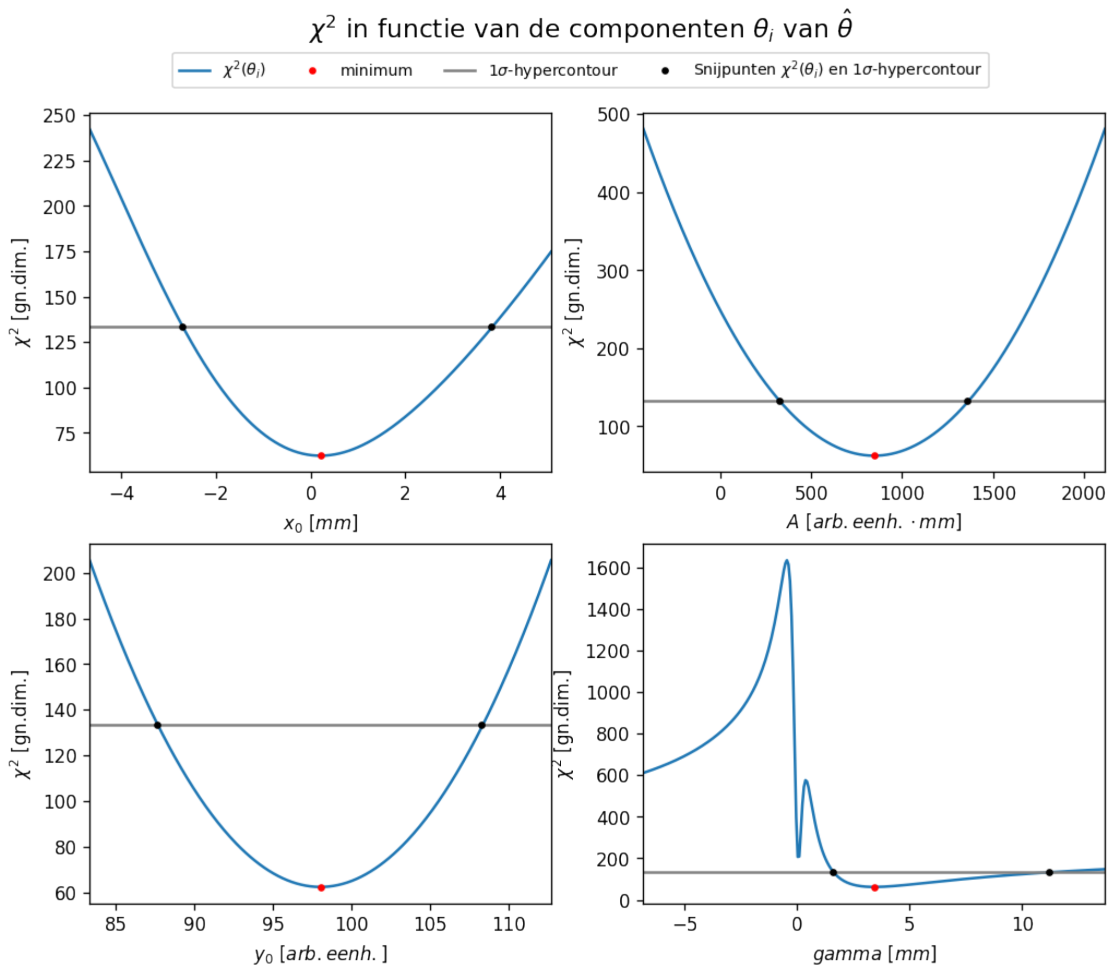
Met behulp van de methode die in het opgaveblad werd besproken (ref.) wordt de onzekerheid op de verschillende parameters achtereenvolgens berekend.

```
[4]: fig, bx = plt.subplots(nrows=2, ncols=2, dpi=120, figsize=(10, 8))

     nu=len(x)-len(theta)               #Bereken de waarde van de 1\sigma-hypercontour
```

```
sigma = mini+chi2.ppf(0.68,df=nu)

theta_uncertainty=[]
bounds = [3,1.5,0.15,24]

for i in range(len(theta_hat)):
    par=theta_hat[i]
    points = np.linspace(par-par*bounds[i],par+par*bounds[i],300)  #Bereken de␣
↪grenzen van de plot
    b=list(theta_hat)
    b[i]=points

    j = 1 if i%2==0 else 0    #Bepaal de subplot
    k = 0 if i>1 else 1

    bx[j][k].plot(points,LS_intensity(b),                     #Plot \chi^2(par)
                  label=r'$\chi^2( \theta_i)$',zorder=-1)

    bx[j][k].plot(theta_hat[i],mini,"o",color='red',          #Plot het minimum van␣
↪\chi^2(par)
                  markersize=3,label=r'minimum',zorder=1)

    bx[j][k].plot(points,sigma*np.ones(300),'gray',           #Plot de␣
↪1\sigma-hypercontour
                  label=r'$1 \sigma$-hypercontour',zorder=-1)

    idx = np.argwhere(np.diff(np.sign(LS_intensity(b) - sigma*np.ones(300)))).
↪flatten() #Bereken de snijpunten en plot ze
    bx[j][k].plot(points[idx[0]],sigma,"o",color='black',markersize=3,
                  label=r'Snijpunten $\chi^2(\theta_i)$ en␣
↪$1\sigma$-hypercontour',zorder=1)
    bx[j][k].plot(points[idx[1]],sigma,"o",color='black',markersize=3,zorder=1)


    theta_uncertainty.append((np.
↪format_float_scientific(theta_hat[i]-points[idx[0]],  #Maak een lijst van de␣
↪onzekerheden
                                                                   ␣
↪precision=1,unique=True,exp_digits=1),
                              np.
↪format_float_scientific(points[idx[1]]-theta_hat[i],
                                                                   ␣
↪precision=1,unique=True,exp_digits=1)))

    bx[j][k].set_ylabel(r"$\chi^2$ [gn.dim.]")  #Verzorg de lay-out van de␣
↪subplot
```

```
    bx[j][k].set_xlabel(r"$%s$ [$%s$]" % (theta[i],theta_units[i]))
    bx[j][k].set_xlim(param-param*bounds[i],param+param*bounds[i])


lines, labels = fig.axes[-1].get_legend_handles_labels()     #Verzorg de lay-out␣
 ↪van de totale plot
fig.legend(lines, labels,ncol=4, loc ='upper center' ,bbox_to_anchor=(0.5, 0.
 ↪945),fontsize=8.5)
fig.suptitle(r'$\chi^2$ in functie van de componenten $\theta_i$ van␣
 ↪$\hat{\theta}$',fontsize=14)
```

[4]: Text(0.5, 0.98, '$\\chi^2$ in functie van de componenten $\\theta_i$ van $\\hat{\\theta}$')




```
[5]: for i in range(len(theta)):  #Print de onzekerheden
```

```
    print('%s:\t' % theta[i],'[',␣
↪theta_uncertainty[i][0],',',theta_uncertainty[i][1],']')
```

```
gamma:   [ 1.8e+0 , 7.8e+0 ]
A:       [ 5.2e+2 , 5.1e+2 ]
y_0:     [ 1.0e+1 , 1.0e+1 ]
x_0:     [ 2.9e+0 , 3.6e+0 ]
```

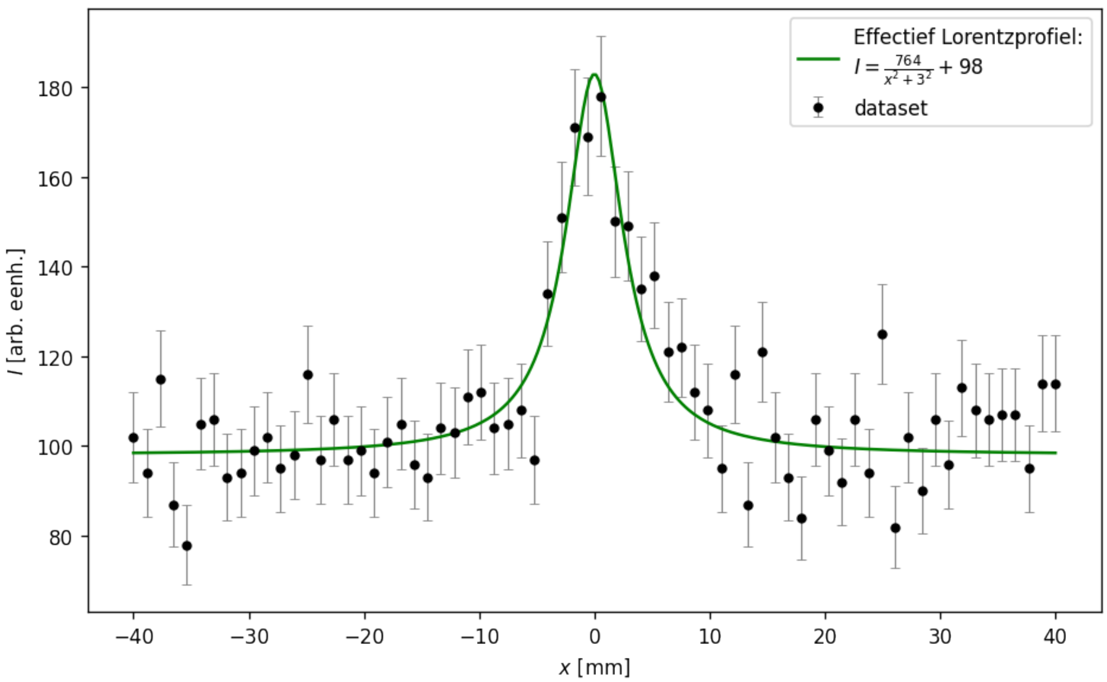
De parameters met hun onzekerheden worden dus gegeven door

$$\gamma = 3^{+8}_{-2}\text{ mm} \qquad A = (800 \pm 500)\text{ arb.eenh.} \cdot \text{mm} \qquad y_0 = (98 \pm 10)\text{ mm} \qquad x_0 = 0^{+4}_{-3}\text{ mm.}$$

Bijgevolg is $\hat{\theta}_{eff}$=(3 mm,800 arb.eenh.·mm,98 arb.eenh.,0 mm). Hiermee kan de effectieve fit berekend en geplot worden. Die is

$$I(x|\hat{\theta}_{eff}) = \frac{800}{\pi}\frac{3}{x^2+9} + 98$$

[35]:
```
theta_eff=(3,800,98,0)
fig, ax = plt.subplots(nrows=1, ncols=1, dpi=120, figsize=(8, 5)) #Laat de␣
↪figuur en plot de datapunten met onzekerheid
ax.errorbar(x, I, yerr=np.sqrt(I), label="dataset",marker="o", markersize=4,␣
↪fmt=" ",
             color="black", ecolor="gray", capsize=2.3, capthick=0.5, linewidth=0.
↪7)

ax.plot(x_dots,␣
↪intensity(x_dots,theta_eff[0],theta_eff[1],theta_eff[2],theta_eff[3]),␣
↪"green", #Plot de effectieve fit
        label="Effectief Lorentzprofiel:\n"+r"$I=\frac{%0.0f}{x^2+%0.0f^2}+%0.
↪0f$" % (theta_eff[1]*theta_eff[0]/np.pi,theta_eff[0],theta_eff[2]))

ax.set_ylabel(r"$I$ [arb. eenh.]") #Verzorg de lay-out van de plot.
ax.set_xlabel(r"$x$ [mm]")
ax.legend()
plt.tight_layout() ; plt.show()
```



1.3 Kwaliteit van de fit

Nu wordt onderzocht of de gevonden fit aanvaardbaar is. Daarvoor wordt een rechteenzijdige hypothesetest uitgevoerd. De nulhypothese H_0 is dat χ_0^2 een χ_ν^2-verdeling volgt.[ref] Er wordt gewerkt op significantieniveau $\alpha = 5\%$. Deze keuze van α zorgt voor een kleine kans dat de fit niet foutief verworpen of aanvaard wordt. [ref]

[6]:
```
chi_2_0=LS_intensity(theta_hat)   #Bereken \chi^2_0
print('chi²_0:\t\t',chi_2_0)

nu=len(x)-len(theta)              #Bereken \chi^2_red
chi_2_red=chi_2_0/nu
print('chi²_red:\t',chi_2_red)
```

```
chi²_0:          62.46963064893224
chi²_red:        0.9465095552868521
```

Eerst word het model geëvalueerd met behulp van de teststatistiek χ^2_{red}. Aangezien $\chi^2_{red} \approx 1$, zal de fit goed aansluiten bij de steekproef. Het model is geen overfit want dan zou $\chi^2_{red} < 1$, en ook geen onderfit want dan zou $\chi^2_{red} > 1$.

Vervolgens wordt bepaald of het Lorentz profiel een goed model is voor de dataset met behulp van p-waarden. Daarvoor wordt de p-waarde $p(\chi_\nu^2 > \chi_0^2)$ berekend. Uit het model volgt dat $\nu = N - p = 66$

[7]:
```
p = 1-chi2.cdf(chi_2_0,df=nu)  #Bereken de p-waarde
print(p)
```

```
0.6004862383071693
```

De gevonden p-waarde is groter dan het significantieniveau $\alpha = 5\%$, dus de gevonden fit wordt aanvaard. Omdat het model aan de twee evaluatiecriteria voldoet, wordt besloten dat Lorentz-model goed aansluit bij de gegeven dataset.

1.4 Referenties