Laboratorio II – 1° modulo Lezione 11

Grafici, regressione e stima delle incertezze

ADEGLI STUDI ADEGLI STUDI BIENCEA BIENCEA

- Rappresentazione grafica di relazioni tra due grandezze fisiche:
 - Le classi TGraph e TGraphErrors di ROOT
 - Regressione (i.e. fit) con TGraphErrors
 - Errori sia in x che in y
 - Interpolazione/Estrapolazione
- Relazione tra curva di livello per ∆Min² = 1 ed incertezze sulla stima dei parametri
- Alcuni esempi patologici
- Test di bontà della regressione
- Esercizi
- Approfondimenti



TGraph di ROOT

Spesso si ha la necessità di mettere in relazione due grandezze fisiche, e.g. posizione (y_i) – tempo (x_i) , tensione (y_i) – frequenza (x_i) , etc... per fare questo ROOT mette a disposizione due classi: TGraph e TGraphErrors

• **TGraph:** consente di mettere in relazione due grandezze (x e y) ma non contempla la possibilità di attribuirne delle incertezze

#include <TGraph.h>

Esempio di file di dati

Possiede diversi tipi di costruttori:

```
TGraph myGraph; \\ Default constructor
```

0 1 0.1 0.998029 0.2 0.992123 0.3 0.982305

TGraph myGraph(const char* filename); \\ Il costruttore legge i dati dal file contenente due colonne con le coordinate x e y dei punti

TGraph myGraph(int n, const double* x, const double* y); \\ Il costruttore legge i dati dai due array contenenti le coordinate x e y dei punti (n = numero di punti)



TGraph di ROOT

```
#include <iostream>
#include <cmath>
#include <TApplication.h>
#include <TCanvas.h>
#include <TGraph.h>
#include <TAxis.h>
using namespace std;
int main(int argc, char** argv)
  if (argc < 2)
      cout << "Not enough parameters: ./MyTGraph filename.txt" << endl;</pre>
      return 1:
  TApplication* myApp = new TApplication("myApp", NULL, NULL);
  TCanvas* myC = new TCanvas("myC", "myC", 0, 0, 700, 500);
  // TGraph default constructor and SetPoint method
  double x, y;

    Metodo per inserire le misure

  int nPoints
                = 100;
  double period = 10;
  TGraph myGraph0;
  for (int i = 0; i < nPoints; i++)
      x = static cast<double>(i) / nPoints * period;
      y = \sin(2.\overline{*}3.14/\text{period * x});
                                                              Imposta attributi:
      myGraph0.SetPoint(i,x,y); \( \mathcal{L} \)
                                                                 titolo degli assi
  myGraph0.GetXaxis()->SetTitle("x (units)");
                                                               tipo di simbolo del maker
  myGraph0.GetYaxis()->SetTitle("y (units)");
                                                               dimensione del marker
  myGraph0.SetMarkerStyle(20);
```

Lezione 11

myGraph0.SetMarkerSize(0.5);



TGraph di ROOT

```
// TGraph constructor from file
TGraph myGraph1(argv[1]);
myGraph1.SetMarkerStyle(21);
myGraph1.SetMarkerSize(0.5);
myGraph1.SetMarkerColor(kRed);

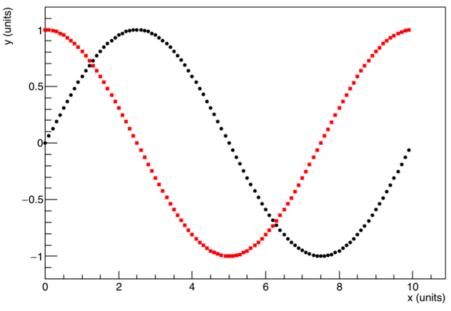
myC->cd();
myGraph0.Draw("AP");
myGraph1.Draw("P same");
myC->Modified();
myC->Update();

myApp->Run();
return 0;
```

Imposta attributi:

- tipo di simbolo del maker
- dimensione del marker
- colore del marker
- Opzione "A" per disegnare gli assi
- Opzione "P" per disegnare i marker
- Opzione "same" per disegnare sullo stesso canvas senza cancellare ciò che è stato disegnato precedentemente

Risultato del programma





TGraphErrors di ROOT

Se si ha la necessità di impostare anche le incertezze dei punti sperimentali è necessario usare la classe TGraphErrors

• TGraphErrors: consente di mettere in relazione due grandezze (x e y) attribuendone anche le incertezze

Esempio di file di dati

#include <TGraphErrors.h>

Possiede diversi tipi di costruttori:

TGraphErrors myGraph; \\ Default constructor

0.25 0.05 0.987701 0.05 0.25 0.25 0.5 0.951106 0.25 0.05 0.05 0.75 0.25 0.891115 0.05 0.809204 0.25

TGraphErrors myGraph(const char* filename); \\ Il costruttore legge i dati dal file contenente quattro colonne con le coordinate x e y dei punti e le incertezze, in x e y, da attribuire a ciascun punto

TGraphErrors myGraph(int n, const double* x, const double* y, const double* ex, const double* ey); \\ Il costruttore legge i dati dai quattro array contenenti le coordinate x e y dei punti e le incertezze da attribuire a ciascun punto (n = numero di punti)



TGraphErrors di ROOT

```
#include <iostream>
#include <cmath>
#include <TApplication.h>
#include <TCanvas.h>
#include <TGraphErrors.h>
#include <TAxis.h>
using namespace std;
int main(int argc, char** argv)
  if (argc < 2)
      cout << "Not enough parameters: ./MyTGraphErrors filename.txt" << endl;</pre>
      return 1:
  TApplication* myApp = new TApplication("myApp", NULL, NULL);
  TCanvas* myC = new TCanvas("myC", "myC", 0, 0, 700, 500);
  // TGraphErrors default constructor and SetPoint method
  double x, v;
  int nPoints
                = 40:
  double period = 10;
  double errX = period / nPoints;
  double errY = 0.05;
  TGraphErrors myGraph0;
  for (int i = 0; i < nPoints; i++)
      x = static cast<double>(i) / nPoints * period;
                                                             Metodi per inserire le misure
      y = \sin(2.\overline{x}3.14/\text{period } x);
                                                             e le incertezze
      myGraph0.SetPoint(i,x,y);
      myGraph0.SetPointError(i,errX,errY);
```



TGraphErrors di ROOT

```
myGraph0.GetXaxis()->SetTitle("x (units)");
myGraph0.GetYaxis()->SetTitle("v (units)");
myGraph0.SetMarkerStyle(20);
myGraph0.SetMarkerSize(0.5);
// TGraphErrors constructor from file
TGraphErrors myGraph1(arqv[1]);
myGraph1.SetMarkerStyle(21);
mvGraph1.SetMarkerSize(0.5);
myGraph1.SetMarkerColor(kRed);
myC->cd();
myGraph0.Draw("AP");
myGraph1.Draw("P same");
myC->Modified();
myC->Update();
myApp->Run();
return 0;
```

Imposta attributi:

- titolo degli assi
- tipo di simbolo del maker
- dimensione del marker

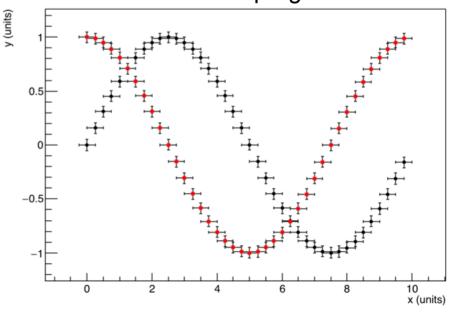
Imposta attributi:

- tipo di simbolo del maker
- dimensione del marker
- colore del marker

• Opzione "A" per disegnare gli assi

- Opzione "P" per disegnare i marker
- Opzione "same" per disegnare sullo stesso canvas senza cancellare ciò che è stato disegnato precedentemente

Risultato del programma





Regressione (i.e. fit) con TGraphErrors

```
double cauchy(double* x, double* par)
{
  double val = par[0] + par[1]/(x[0]*x[0]);
  return val;
}
```

Modello per fittare i dati: $n(\lambda) = a + b/\lambda^2$, relazione di Cauchy che lega l'indice di rifrazione di un mezzo dispersivo alla lunghezza d'onda dell'onda elettromagnetica che lo attraversa

```
void ComputeChi2(TGraphErrors* myData, TF1* myFun, double& chi2, double& NDF)
{
   double result = 0;

   for (int i = 0; i < myData->GetN(); i++)
        {
        result += pow(myData->GetY()[i] - myFun->Eval(myData->GetX()[i]),2.) /
        (pow(myData->GetErrorY(i),2.) + pow(myFun->Derivative(myData->GetX()[i])*myData->GetErrorX(i),2.));
     }

   chi2 = result;
   NDF = myData->GetN() - myFun->GetNpar();
}
```

```
int main(int argc, char** argv)
{
   if (argc < 2)
      {
       cout << "Not enough parameters: ./MyTGraphErrors filename.txt" << endl;
       return 1;
      }

   gStyle->SetOptFit(1112);

   TApplication* myApp = new TApplication("myApp", NULL, NULL);
   TCanvas* myC = new TCanvas("myC", "myC", 0, 0, 700, 500);
```



Regressione (i.e. fit) con TGraphErrors

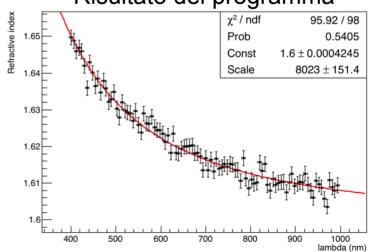
```
TF1* mvFun = new TF1("mvFun", cauchy, 400, 1000, 2);
myFun->SetParameter(0,1.6);
myFun->SetParameter(1,8e3);
myFun->SetParName(0, "Const");
myFun->SetParName(1, "Scale");
// TGraphErrors constructor from file
TGraphErrors* myGraph = new TGraphErrors(argv[1]); .
myGraph->GetXaxis()->SetTitle("lambda (nm)");
myGraph->GetYaxis()->SetTitle("Refractive index");
myGraph->SetMarkerStyle(20);
myGraph->SetMarkerSize(0.5);
mvC->cd();
myGraph->Draw("AP");
myGraph->Fit("myFun");
myC->Modified();
myC->Update();
std::cout << "Reduced Chi-2: ";</pre>
std::cout << myFun->GetChisquare()/myFun->GetNDF();
std::cout << std::endl;</pre>
std::cout << "p-value: " << myFun->GetProb();
std::cout << std::endl;</pre>
double chi2, NDF;
ComputeChi2 (myGraph, myFun, chi2, NDF);
std::cout << "My Chi-2: " << chi2 << std::endl;
std::cout << "My NDF: " << NDF << std::endl;</pre>
myApp->Run();
return 0;
```

Abbiamo visto i metodi del TGraphErrors:

- GetN(): restituisce il numero di punti del TGraphErrors
- GetX(): restituisce un array di double (i.e. double*)
- GetY(): restituisce un array di double (i.e. double*)
- GetErrorX(i): restituisce l'incertezza in x del punto i-esimo del TGraphErrors
- GetErrorY(i): restituisce l'incertezza in y del punto i-esimo del TGraphErrors

Inoltre abbiamo visto il metodo Eval (double x) di TF1: restituisce il valore della funzione in corrispondenza di x ed il metodo Derivative (double x) che computa la derivata numerica della TF1 in x

Risultato del programma



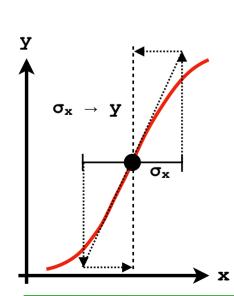


Errori sia in x che in y

A volte oltre alle incertezze sulla variabile dipendente (y) possono essere presenti anche le incertezze sulla variabile indipendente (x). Nel computo del funzionale Min^2 è necessario considerarle entrambe, infatti i denominatori della serie di Min^2 devono corrispondere a l'incertezza dei numeratori. Lo si fa tramite la formula per la propagazione degli errori e sotto l'ipotesi che le misure di x e y siano statisticamente indipendenti:

$$\operatorname{Var}[y - f(x; \overrightarrow{\theta})] = \sigma_y^2 + \left(\frac{\partial f(x; \overrightarrow{\theta})}{\partial x}\right)^2 \sigma_x^2$$

Di conseguenza il funzionale dei minimi quadrati diventa:



$$\operatorname{Min}^{2}(\overrightarrow{\theta}) = \sum_{i=1}^{n} \frac{(y_{i} - f(x_{i}; \overrightarrow{\theta}))^{2}}{\sigma_{y_{i}}^{2} + \left(\frac{\partial f(x; \overrightarrow{\theta})}{\partial x}\Big|_{x_{i}}\right)^{2} \sigma_{x_{i}}^{2}} \sim \chi_{n-m}^{2}$$

Per errori con distribuzione di probabilità Normale il funzionale dei minimi quadrati segue una **distribuzione di probabilità** χ^2_{n-m} , n numero di misure, m numero dei parametri del modello



Interpolazione/Estrapolazione

Dopo aver eseguito il fit ed aver quindi stimato i parametri del modello con le relative incertezze può essere necessario stimare il valore della variabile dipendente (y) del modello per un punto arbitrario dell'intervallo di validità della variabile indipendente (x) In generale dato un modello lineare nei parametri:

$$f(x; \overrightarrow{\theta}) = \theta_1 h_1(x) + \theta_2 h_2(x) + \theta_3 h_3(x) + \dots = y$$

l'incertezza associata a y, applicando la formula per la propagazione degli errori, risulta:

$$\sigma_y^2 = \sum_{i=1}^m \left(\frac{\partial f}{\partial \theta_i}\right)^2 \sigma_{\theta_i}^2 + 2 \sum_{j=1, \neq i}^m \frac{\partial f}{\partial \theta_i} \frac{\partial f}{\partial \theta_j} \operatorname{Cov}[\theta_i, \theta_j] =$$

$$= \sum_{i=1}^{m} h_i^2(x)\sigma_{\theta_i}^2 + 2\sum_{j=1,\neq i}^{m} h_i(x)h_j(x)\operatorname{Cov}[\theta_i, \theta_j]$$

E.g.: dato un modello parabolico $y = \theta_1 + \theta_2 x + \theta_3 x^2$ si vuole stimare il valore dei parametri dai dati, ed interpolare/estrapolare il valore del modello a x_p
• Eseguire fit con l'opzione "s" → salva la matrice di covarianza (*cfr. Lezione 10*)

- Fissato x_p calcolare y_p con il metodo $Eval(x_p)$
- L'incertezza sulla stima di y_p risulta:

$$\sigma_y^2 = \sigma_{\theta_1}^2 + x_p^2 \sigma_{\theta_2}^2 + x_p^4 \sigma_{\theta_3}^2 + 2(x_p \text{Cov}[\theta_1, \theta_2] + x_p^2 \text{Cov}[\theta_1, \theta_3] + x_p^3 \text{Cov}[\theta_2, \theta_3])$$



Relazione tra curva di livello per ΔMin² = ed incertezze sulla stima dei parametri

L'incertezza sulla stima dei parametri è intimamente legata alla curvatura (i.e. derivata seconda) del funzionale dei minimi quadrati nell'intorno del minimo. Per modelli lineari nei parametri questo equivale a proiettare la curva di livello per \Delta minimi = 1 sugli assi coordinati

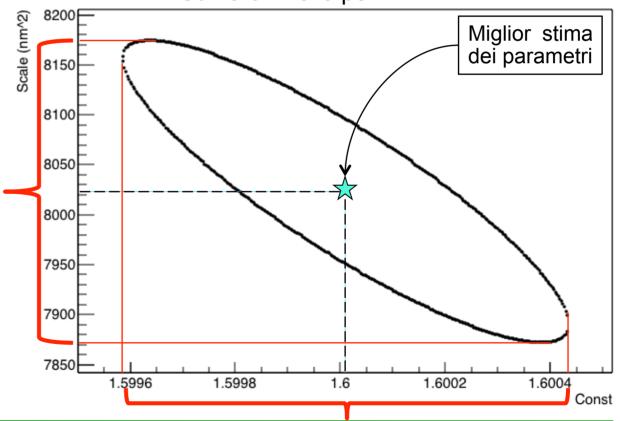
Prendiamo l'esempio della relazione di Cauchy (n (λ) = **a** + **b**/ λ ²). Il risultato del

fit fornisce la seguente stima dei parametri:

Curva di livello per $\Delta Min^2 = 1$

Il cui range coincide esattamente con la proiezione sugli assi della curva di livello per

 $\Delta Min^2 = 1$

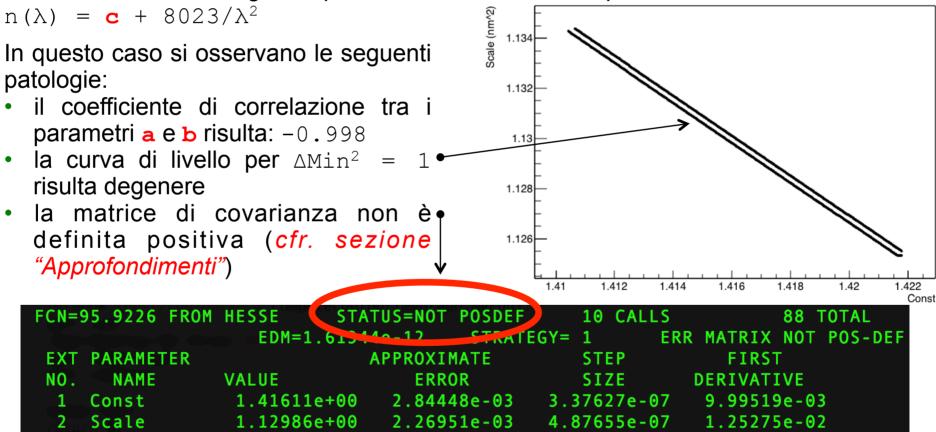




Alcuni esempi patologici

Un esempio di errata impostazione del problema di fit lo si ha quando nel modello sono presenti due o più parametri altamente correlati

Per simulare questo fittiamo i dati con il modello $n(\lambda) = a*b + 8023/\lambda^2$, dove a e b sono ovviamente degeneri perché lo stesso modello potrebbe essere scritto come



→ quando possibile evitare elevate correlazioni tra i parametri ed evitare sempre che due o più parametri siano degeneri come nell'esempio



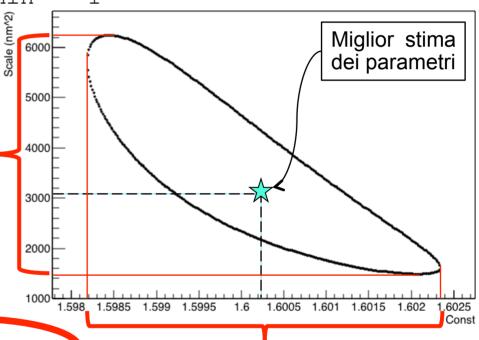
Alcuni esempi patologici

Prendiamo ancora come esempio la legge di Cauchy (n (λ) = a + b/ λ^2) dove però abbiamo volutamente "non-linearizzato" il modello: n (λ) = a + 1000*log (b) / λ^2

Se si esegue il programma di esempio con il file di dati "fittgrapherrors_nonLin.txt" si ottiene la seguente curva di livello per \(\Delta Min^2 = 1 \)

La curva risulta distorta e questo si ripercuote sulla stima delle incertezze dei parametri (le incertezze possono non aver più distribuzione Normale, e.g. possono non essere più simmetriche) -> quando possibile è consigliabile utilizzare modelli lineari nei parametri (cfr. sezione "Approfondimenti")

Questo non vuol dire che dovete linearizzare/approssimare, il modello, semplicemente se c'è la possibilità di riscrivere il modello in maniera che sia lineare nei parametri, ma formalmente equivalente a quello non-lineare, e preferibile



```
121 CALLS
FCN=98.9501 FROM MIGRAD
                    EDM=5.67+
                                                        ERROR MATRIX ACCURATE
EXT PARAMETER
                                                 STEP
      NAME
                VALUE
                                 ERROR
                                                 SIZE
                                                           DERIVATIVE
                 1.60026e+00
                               2.07160e-03
                                             4.88494e-06
    Const
                                                            1.70097e-01
    Scale
                 3.03235e+03
                               2.18166e+03
                                              5.07053e+00
                                                            2.74680e-07
```



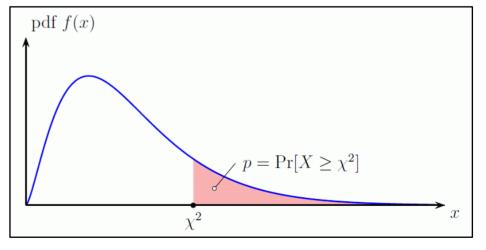
Test di bontà della regressione

Il funzionale dei **minimi quadrati**, sotto l'ipotesi di incertezze aventi distribuzione di probabilità Normale, ha **distribuzione di probabilità** χ^2_{n-m} , n numero di misure, m numero dei parametri del modello (per una dimostrazione si veda "Statistical Methods in Data Analysis," W.J. Metzger, capitolo 3.11)

$$\operatorname{Min}^{2}(\overrightarrow{\theta}) = \sum_{i=1}^{n} \left(\frac{y_{i} - f(x_{i}; \overrightarrow{\theta})}{\sigma_{i}} \right)^{2} \sim \chi_{n-m}^{2}$$

Infatti se è vero che i dati seguono il modello $f(x;\theta)$ allora $f(x_i;\theta)$ è il "vero" valore che avrebbe dovuto assumere la grandezza fisica (chiamiamola μ_i), ma a causa delle incertezze (rappresentate da σ_i) ha assunto i valori y_i . Se le incertezze hanno distribuzione Normale, allora

$$\frac{y_i - \mu_i}{\sigma_i} \sim N(0,1)$$



il cui quadrato ségue una distribuzione χ^2_1 . A seguito del processo di ottimizzazione \min^2 è un numero. Calcolare l'area sottesa dalla distribuzione χ^2_{n-m} da \min^2 a infinito (i,e. il "p-value") equivale a chiedersi quale sia la probabilità che il funzionale assuma un qualunque valore nell'intervallo $[\min^2,\infty]$. Se il p-value è "piccolo" allora è poco probabile che il mio modello descriva i dati



Riassumendo...

L'operazione di regressione (i.e. fit) consta di tre passaggi distinti:

- ✓ Problema di ottimizzazione del modello rispetto ai dati (e.g. minimizzazione minimi quadrati) → miglior stima dei parametri
- Quantificare l'incertezza sulla stima dei parametri
- ✓ Quantificare la qualità della regressione → effettuare un test statistico che sia in grado di dire quale sia la probabilità che il modello descriva i dati

Per quanto detto fino ad ora è importante notare che anche se MIGRAD è stato in grado di trovare il minimo del funzionale dei minimi quadrati non è detto che sia stato in grado di calcolare opportunamente la matrice di covarianza

Prima ancora di guardare al risultato grafico del fit è necessario guardare all'output di MIGRAD per verificare STATUS=CONVERGED

Quando si implementa un modello per descrivere i dati se possibile bisogna scriverlo in maniera tale che sia lineare nei parametri

Bisogna inoltre evitare che ci siano parametri degeneri

Lezione 9 17



Esercizi

• Esercizio 1: Inserire i dati contenuti nel file "ese01Fit.txt" in un TGraphErrors ed eseguirne il fit secondo il modello:

$$f(x;\tau) = V_0[1 - \exp(-x/\tau)]$$

• Stampate a schermo i risultati ottenuti per i parametri V_0 e τ , unitamente ai loro errori

- Esercizio 2: Fittare i dati contenuti nel file "ese02Extr.txt" con una parabola ed estrapolare il valore della variabile y_p corrispondente a $x_p = 32$
 - Stimare quindi l'incertezza associata a y_p tenendo conto delle correlazioni associate ai parametri di fit

Esercizi

- Esercizio 3: Aggiungere al codice di slide 9 e 10 una funzione che calcola la curva di livello per ΔMin² = delta (dove delta è un parametro della funzione)
 - Il prototipo della funzione e`:

```
TGraph* ComputeContour(TGraphErrors* myData,
TF1* myFun, double delta);
```

Riceve quindi in ingresso il TGraphErrors contenente i dati, la TF1 che contiene la funzione di fit ed il valore di AMin² a cui calcolare la curva di livello. Restituisce un puntatore a TGraph nel quale la funzione avrà salvato i punti che costituiscono la curva di livello

La funzione deve ricercare nello spazio (Const; Scale) il valore di \(\Delta \) in che più si avvicina a delta. Deve quindi implementare due cicli for (uno dentro l'altro, quello più esterno sulla variabile Const, quello più interno sulla variabile Scale) con i quali realizzare la ricerca

Esercizi

Entrambi i cicli devono partire dal valore ottimo del parametro meno due sigma e devono arrivare fino al valore ottimo più due sigma: (Const-2 σ ; Const+2 σ) e (Scale-2 σ ; Scale+2 σ). I cicli devono essere divisi in un numero di passi pari a 600

Per ogni valore di Const (chiamiamolo $Const_{i-esimo}$) il ciclo for più interno ricerca il valore di Scale tale per cui ΔMin^2 si avvicina di più a delta. Quando questo punto viene trovato (chiamiamolo $Scale_{j-esimo}$) salva il punto $Const_{i-esimo}$; $Scale_{j-esimo}$ in un TGraph.

N.B.:

I valori ottimi dei parametri sono quelli restituiti dal fit

Il ΔMin^2 è calcolato come differenza tra il valore del funzionale Min^2 ottenuto al termine del fit e quello ottenuto per ogni punto $\text{Const}_{\text{i-esimo}}; \text{Scale}_{\text{j-esimo}}$ durante l'esecuzione del ciclo for più interno



- Matrice di covarianza
- Modelli non lineari nei parametri



Matrice di covarianza

La matrice di covarianza è una matrice che ha sulla diagonale principale le varianze, mentre gli elementi non diagonali sono le covarianze tra i diversi parametri

E.g.: nel caso di modello con due parametri (θ_1, θ_2) gli elementi (1,1) e (2,2) della matrice di covarianza saranno $Var[\theta_1]$ e $Var[\theta_2]$, rispettivamente. Mentre l'elemento (1,2) sarà $Cov[\theta_1, \theta_2]$ (l'elemento (2,1) è identico all'elemento (1,2) perché $Cov[\theta_1, \theta_2] = Cov[\theta_2, \theta_1]$)

In generale la matrice di covarianza è quindi **simmetrica**. Inoltre la matrice di covarianza è anche **semidefinita positiva** (i.e. se \mathbb{C} è la matrice di covarianza e \mathbf{u} è un qualunque vettore $\mathbf{u}^{\mathbb{T}}\mathbb{C}\mathbf{u} \geq 0$)

$$C \equiv E[(\mathbf{x} - \overline{\mathbf{x}})(\mathbf{x} - \overline{\mathbf{x}})^T]$$

$$\mathbf{u}^T C \mathbf{u} = \mathbf{u}^T E[(\mathbf{x} - \overline{\mathbf{x}})(\mathbf{x} - \overline{\mathbf{x}})^T] \mathbf{u} =$$

$$E[\mathbf{u}^T (\mathbf{x} - \overline{\mathbf{x}})(\mathbf{x} - \overline{\mathbf{x}})^T \mathbf{u}] = E[s^2] \ge 0$$

Infatti l'ultima riga non è nient'altro che il valore atteso di una variabile aleatoria scalare, s^2 , sempre positiva. E` interessante a questo punto ricordare che nei problemi di regressione la matrice di covarianza è stimata tramite l'inverso della matrice Hessiana. Quindi se quest'ultima non è semidefinita positiva il funzionale dei minimi quadrati nell'intorno del minimo non risulta un iper-paraboloide ellittico



Modelli non lineari nei parametri

Per modelli con dipendenza lineare dai parametri il calcolo degli errori dei parametri del modello mediante l'approssimazione parabolica del funzionale dei minimi quadrati (i.e. quindi mediante la matrice Hessiana) e mediante la proiezione delle curva di livello per $\Delta \text{Min}^2 = 1$ coincidono. Quando però si è costretti ad utilizzare modelli non lineari nei parametri questo non è in generale più vero. MIGRAD di *default* utilizza la matrice Hessiana perché è il metodo più veloce

Per forzare l'uso del metodo basato sulla proiezione della curva di livello per $\Delta Min^2 = 1$ (i.e. metodo più corretto per trattare gli errori nel caso non lineare) bisogna utilizzare l'opzione di fit "E"

In ROOT il metodo della proiezione della curva di livello per $\Delta Min^2 = 1$ è detto **MINOS**, mentre quello basato sulla matrice Hessiana è detto **HESSE**

