PGF5103 Atividade 1

M. Monalisa Melo Paulino

9 de maio de 2024

Abstract

Em um experimento com o intuito de medir a correlação angular, utiliza-se simultaneamente a *contagem* de duas partículas proveniente de dois detectores diferentes (A e B), em função do *ângulo* entre elas em um mesmo instante. Neste trabalho os resultados experimentais são simulações de um experimento real de correlação angular. Os dados experimentais consistem no conjunto $\{(\theta_i, y_i, \sigma_i), i = 1, \ldots N\}$. Sendo θ_i o angulo entre os detectores, y_i a contagem de partículas e σ_i a incerteza da contagem. Para esta atividade foram utilizados os dados do arquivo *dadosAtividade1.dat* disponibilizado no site da disciplina. Foi realizado um ajuste por Métodos dos Mínimos Quadrados por meio de uma função modelo $y(\theta; \vec{b})$ com parâmetros $\vec{b} = (b_0, b_2, b_4)$. Em seguida, calculou-se os coeficientes da expansão dessa função em uma outra função $y(\theta; \vec{a})$ por meio da regra de transformação $\vec{a} = C\vec{b}$. Por fim, determinou-se a matriz de covariância de $\vec{a}$, bem como sua função, obtendo os mesmos valores interpolados que para $y(\theta; \vec{b})$. Além disso, obteve-se a matriz de covariância para $V_{\vec{a}}$, calculada pela transformação de variáveis, idêntica à matriz de covariância para $V_{\vec{a}}$ obtida por MMQ, bem como para os valores para $\vec{a}$.

1 Introdução teórica

Para determinar a correlaçao angular entre dois detectores A e B, utiliza-se uma *função modelo de medição de contagens* (número de eventos) de detecção de duas partículas produzidas simultaneamente, uma em cada um dos detectores, ver Fig.1, considerando um conjunto de dados $\{(\theta_i, y_i, \sigma_i)\}$ dada por

$$y(\theta; \vec{b}) = b_0 + b_2 \cos^2 \theta + b_4 \cos^4 \theta, \tag{1}$$

em que $\vec{b}$ são os parâmetros a serem ajustados, σ_i o desvio-padrão de y_i medido e θ_i o menor ângulo entre os detectores A e B.

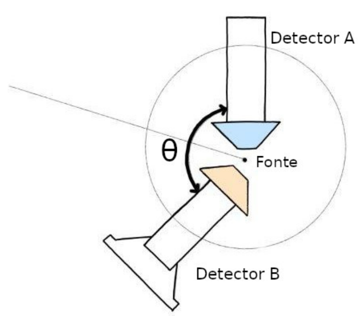


Figure 1: Arranjo de dois detetores para medida de correlação angular. O detetor A é mantido fixo, enquanto B é móvel.

A função modelo também pode ser escrita pela expansão em termos de $\sum_\kappa a_\kappa P(\cos\theta)$ tal que,

$$y(\theta;\vec{a}) = a_0 + a_2 P_2(\cos\theta) + a_4 P_4(\cos\theta), \tag{2}$$

onde P_κ são os polinômios de Legendre e,

$$P_2(\cos\theta) = \frac{1}{2}\left(3\cos^2\theta - 1\right) \tag{3}$$

$$P_4(\cos\theta) = \frac{1}{8}\left(35\cos^4\theta - 30\cos^4\theta + 3\right) \tag{4}$$

Por meio da comparação entre Eq.(2) e Eq.(2) podemos determinar os coeficientes $\vec{b}$ em função de a_0, a_2 e a_4. Utilizando formalismo matricial

$$\left.\begin{aligned}\vec{b} = B\ \vec{a}\\ \vec{a} = C\ \vec{b}\end{aligned}\right\} \quad \Rightarrow C = B^{-1}, \tag{5}$$

em que B e C são matrizes de transformação, sendo C a matriz inversa de B.

1.1 Interpolação para vários ângulos

Pode-se ainda, interpolar valores para vários ângulos. Seja um conjunto $\varphi = \{\varphi_j, j = 1, \ldots M\}$, utilizando as fórmulas modelos $y(\theta;\vec{b})$ ou $y(\theta;\vec{a})$ podemos obter os valores interpolados e a matriz de covariância para esse conjunto de dados a partir de

$$V_{y(\varphi)} = F\ V_{b,a}\ F^T \tag{6}$$

em que $V_{b,a}$ são as matrizes de covariâncias para V_b ou para V_a, a depender da função modelo empregada para a interpolação do conjunto φ e F é matriz do tipo $F_{jk} = (\cos\varphi_j)^{2(k-1)}$.

2 Execução da atividade

Neste trabalho foi utilizado a linguagem *Python* para a realização de todas as partes. O código completo foi disponibilizado em anexo na entrega deste documento. Inicialmente foi importado a bibliotecas necessárias para utilizar operações matemáticas e realizar o Método de Mínimos Quadrados. Em seguida, os dados foram preparados. De modo a salvar cada coluna em uma lista. Obtendo, assim, as listas *Theta*, *contagens* e *sigma*, ou seja, os valores simulados do experimento: θ_i, y_{exp} e $\sigma_{y_{exp}}$.

3 Ajuste de $y(\theta;\vec{b})$ por MMQ

Os parâmetros b_0, b_2 e b_4 foram obtidos por meio do ajuste do Método dos Mínimos Quadrados. Resultando na Fig.2. E na matriz covariência abaixo.

$$V_b = \begin{pmatrix} 5535.65 & -24517.35 & 20527.21 \\ -24517.35 & 237656.75 & -242065.72 \\ 20527.21 & -242065.72 & 266950.7 \end{pmatrix} \tag{7}$$

Os parâmetros obtidos pelo ajuste foram

Parâmetro	Valor	σ_b
b_0	$6.05082 \cdot 10^3$	$7.4401 \cdot 10^1$
b_2	$-6.1404 \cdot 10^2$	$4.875 \cdot 10^2$
b_4	$1.0752 \cdot 10^4$	$5.1667 \cdot 10^2$

Table 1

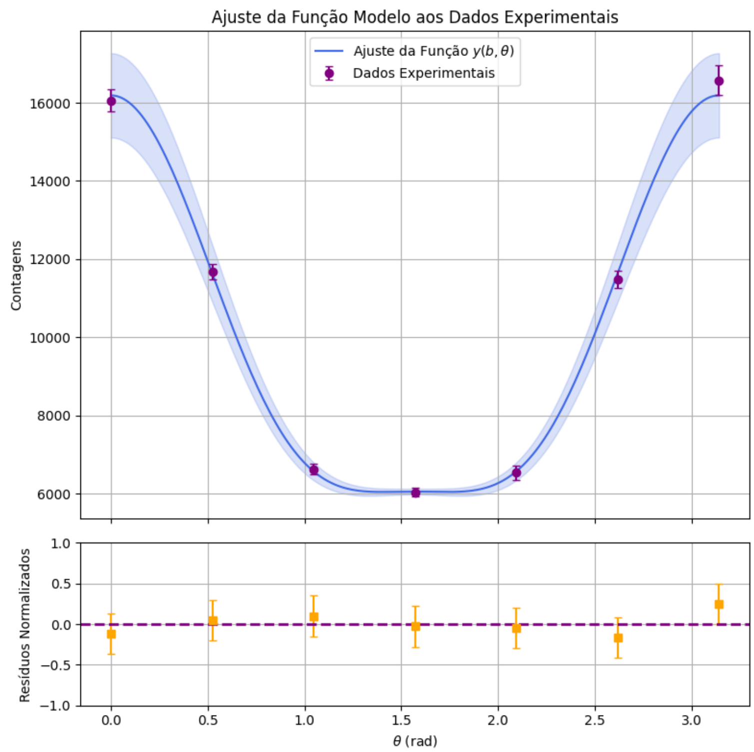


Figure 2: A curva em azul representa o ajuste pelo Método dos Minimos Quadrados $y(\theta;\vec{b}) = 6051 - 614\cos^2\theta + 10752\cos^4\theta$, com χ^2 absoluto de 1.92 e parâmetros dados pela Tabela 1, matriz de covariância dada por Eq.(7).

Os resíduos normalizados (res_{norm}) foi obtido ao dividirmos o resíduo reduzido (res_{red}) pelo número de graus de liberdade (ngl), Eq.(8). Do gráfico de resíduos é possível verificar que todos se encontram entre -1 e 1, isso sugere que a função modelo $y(\theta;\vec{b})$ está descrevendo bem a variação nos dados e que possivelmente não há um viés sistemático significativo.

$$res_{norm} = \frac{\frac{\text{contagens}_i - y(\theta_i;\vec{b})}{\sigma_i}}{\#\text{contagens} - \#\text{parâmetros}} \tag{8}$$

O χ^2 absoluto é uma medida da diferença entre os dados experimentais e a função ajustada, enquanto o χ^2 reduzido é uma versão normalizada do χ^2 total que leva em conta o número de graus de liberdade (ngl) no sistema. O χ^2_{red} para o nosso modelo foi de 0.48. Um bom ajuste é caracterizado por um valor próximo de 1, como o valor obtido foi ligeiramente menor que 0.5 isso sugere que as incertezas dos erros experimentais estão sendo sobrestimadas, ou seja, sendo consideradas maiores do que realmente são, o pode levar a uma confiança exagerada no ajuste do modelo.

4 Interpolando valores para vários ângulos

Utilizando os resultados do ajuste da seção anterior para os parâmetros $\vec{b}$ e para a matriz de covariância V_b pode-se determinar os valores da função $y(\varphi;\vec{b})$ para o conjunto $\varphi = \{20°, 40°, 70°, 85°\}$, bem como a sua matriz de covariância. Para isso, utilizou-se em Python, a substituição na função modelo dos parâmetros b_0, b_2 e b_4 obtendo uma y_i para cada valor de ângulo φ_i. Além disso, empregando a Eq.(6) foi obtido a matriz de covariância abaixo.

φ	$y(\varphi;\vec{b})$	σ_y
20°	13892	92
40°	9393	81
70°	6126	54
85°	6047	72

Table 2

$$V_{\varphi,b} = \begin{pmatrix} 8522.65 & 3033.07 & -302.31 & -133.08 \\ 3033.07 & 6561.70 & 1507.09 & -1544.69 \\ -302.31 & 1507.09 & 2888.55 & 2948.10 \\ -133.08 & -1544.69 & 2948.10 & 5179.05 \end{pmatrix} \tag{9}$$

5 Transformação de variáveis utilizando matriz de covariância

Determinou-se os parâmetros $\vec{a}$ a partir de $\vec{a} = C\ \vec{b}$. Para isso, inicialmente determinou-se a matriz B tal que $\vec{b} = B\ \vec{a}$, ao comparar as duas funções $y(\theta;\vec{b})$ e $y(\theta;\vec{a})$, Eq.(1) e Eq.(2), respectivamente.

$$y(\theta;\vec{b}) = b_0 + b_2\cos^2\theta + b_4\cos^4\theta \tag{10}$$

$$y(\theta;\vec{a}) = \left(a_0 + -\frac{a_2}{2} + \frac{3}{8}a_4\right) + \left(\frac{3}{2}a_2 - \frac{30}{8}a_4\right)\cos^2\theta + \left(\frac{35}{8}\right)\cos^4\theta. \tag{11}$$

Assim,

$$B = \begin{pmatrix} 1. & -1/2 & 3/8 \\ 0 & 3/2 & -15/4 \\ 0 & 0 & 35/8 \end{pmatrix} \Rightarrow B^{-1} = C = \begin{pmatrix} 1. & 0.33333333 & 0.2 \\ 0 & 0.66666667 & 0.57142857 \\ 0 & 0 & 0.57142857 \end{pmatrix} \tag{12}$$

Obtendo, dessa forma, os parâmetros $\vec{a}$ por meio da multiplicação de matrizes C e $\vec{b}$, bem como a matriz de covariância usando $V_{\hat{a}} = C\ V_b\ C^T$.

$$V_{\hat{a}} = \begin{pmatrix} 2210.54 & 323.01 & -1547.71 \\ 323.01 & 8361.77 & -2019.17 \\ -1547.71 & -2019.17 & 13946.81 \end{pmatrix} \tag{13}$$

Parâmetro	Valor	$\sigma_{\hat{a}}$
$\hat{a}_0$	7997	47
$\hat{a}_2$	5735	91
$\hat{a}_4$	2458	118

Table 3

O ajuste da função $y(\theta;\vec{a})$ utilizando os parâmetros e a matriz de covariância obtida acima encontra-se na curva vermelha da figura abaixo.

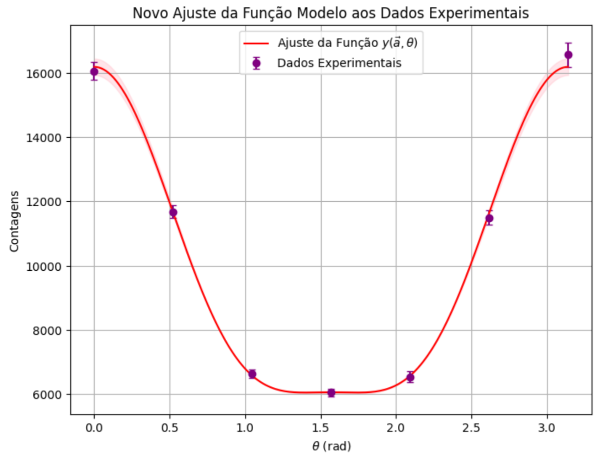
Ambos os ajustes possuem mesmo χ^2 e mesmo χ^2_{red}. A transformação de variáveis não alterou o desempenho do ajuste; entretanto, é perceptível que a matriz de covariância, como esperado, não são iguais.

6 Interpolando valores para vários ângulos por meio dos resultados de $\vec{\hat{a}}$ e $V_{\hat{a}}$

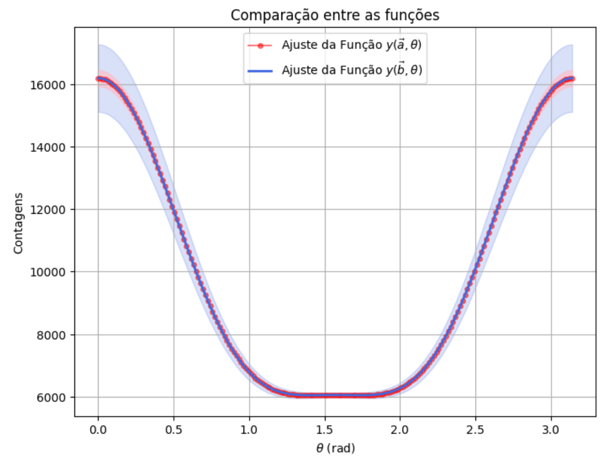
Assim como na Seção 4 foi utilizado o conjunto $\varphi = \{20°, 40°, 70°, 85°\}$ para determinar os valores da função $y(\varphi;\vec{\hat{a}})$ e sua matriz de covariância, utilizando os valores de parâmetros $\vec{\hat{a}}$ e matriz de covariância $V_{\hat{a}}$ obtidos na seção anterior, ou seja

$$V_{\varphi,\hat{a}} = F\ V_{\hat{a}}\ F^T, \tag{14}$$

onde a matriz F pode ser dada pelos termos multiplicadores dos parâmetros de $\vec{\hat{a}}$ dentro da função $y(\varphi;\vec{\hat{a}})$, ou seja,



(a) Ajuste da função $y(\theta;\vec{a}) = 7997 + 5735\ P_2(\cos\theta) + 2458\ P_4(\cos\theta)$ com χ^2 de 1.92 e χ^2_{red} de 0.48.



(b) Comparação entre os ajustes $y(\theta;\vec{b})$ por MMQ e $y(\theta;\vec{a})$ por transformação de variáveis.

Figure 3

$$F = \begin{pmatrix} 1 & 3\cos{\varphi_1}^2 - 1/2 & (35\cos^4\varphi_1 - 30\cos^2\varphi_1 + 3)/8 \\ 1 & 3\cos{\varphi_2}^2 - 1/2 & (35\cos^4\varphi_2 - 30\cos^2\varphi_2 + 3)/8 \\ 1 & 3\cos{\varphi_3}^2 - 1/2 & (35\cos^4\varphi_3 - 30\cos^2\varphi_3 + 3)/8 \\ 1 & 3\cos{\varphi_4}^2 - 1/2 & (35\cos^4\varphi_4 - 30\cos^2\varphi_4 + 3)/8 \end{pmatrix}. \tag{15}$$

Dessa forma, os resultados obtidos foram

φ	$y(\varphi;\vec{\hat{a}})$	σ_y
20°	13892	92
40°	9393	81
70°	6126	54
85°	6047	72

Table 4

$$V_{\varphi,\hat{a}} = \begin{pmatrix} 8522.65 & 3033.07 & -302.31 & -133.08 \\ 3033.07 & 6561.70 & 1507.09 & -1544.69 \\ -302.31 & 1507.09 & 2888.55 & 2948.10 \\ -133.08 & -1544.69 & 2948.10 & 5179.05 \end{pmatrix}. \tag{16}$$

7 Compatibilidade entre os resultados

Ao comparar com os resultados da Seção4 nota-se que foram obtidos os mesmos valores para a interpolação que utilizando $y(\varphi;\vec{b})$, $\vec{b}$ e V_b, como o esperado, já que a transformação de matrizes não alterou o desempenho do ajuste como visto nos resultados da Fig.3.

8 Ajustando a função $y(\theta;\vec{a})$ pelo Método dos Mínimos Quadrados

Por meio do ajuste de Método dos Mínimos Quadrados empregado pelo Python, obtemos os valores dos parâmetros $\vec{a}$ (Tabela 5) e a matriz de covariância V_a, Eq.(17), bem como o ajuste da Figura 4.

Parâmetro	Valor	σ_a
a_0	$7.9966 \cdot 10^3$	$4.7016 \cdot 10^1$
a_2	$5.7348 \cdot 10^3$	$9.1443 \cdot 10^1$
a_4	$2.4576 \cdot 10^3$	$1.1810 \cdot 10^2$

Table 5

$$V_a = \begin{pmatrix} 2210.54 & 323.01 & -1547.71 \\ 323.01 & 8361.77 & -2019.17 \\ -1547.71 & -2019.17 & 13946.81 \end{pmatrix} \tag{17}$$

O gráfico da figura a seguir representa o ajuste em verde da função $y(\theta; \vec{a})$ ajusta pelo Método dos mínimos quadrados, ou seja, com os parâmetros da Tabela 5 e covariância de matriz V_a, Eq.(17). Bem como o gráfico dos resíduos normalizados na parte inferior da figura.

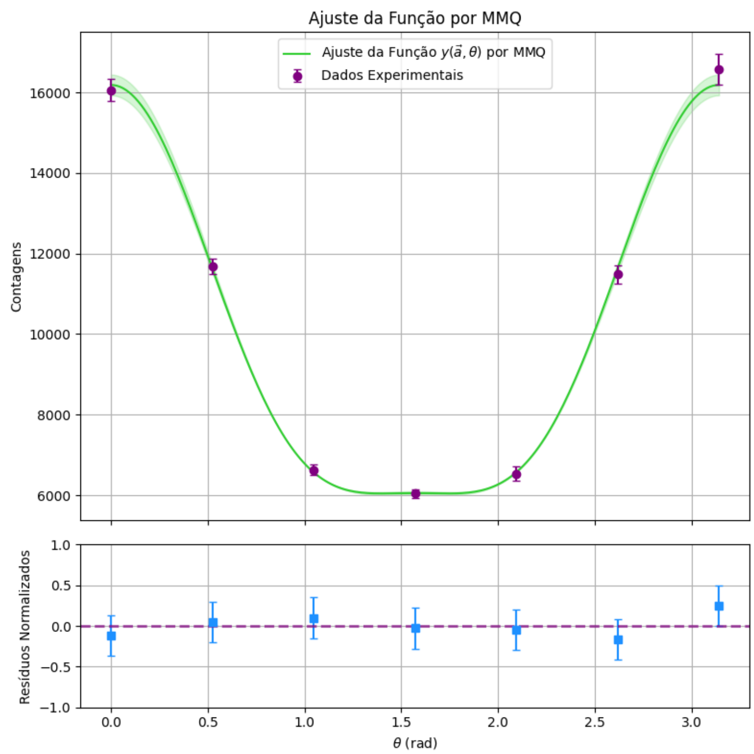


Figure 4: A curva em verde representa o ajuste pelo Método dos Minimos Quadrados $y(\theta; \vec{a}) = 7997 + 5735\ P_2(\cos\theta) + 2458\ P_4(\cos\theta)$, com χ^2 absoluto de 1.92 e parâmetros dados pela Tabela 5, matriz de covariância dada por Eq.(17).

O resultado obtido para o χ^2 absoluto e reduzido foram os mesmos que os obtidos para o ajuste de MMQ da função $y(\theta; \vec{b})$, Fig.2 e, novamente, como $\chi^2_{red} < 0.5$ podemos supor que as incertezas dos dados experimentais estejam sobrestimadas. Além disso, nota-se, assim como para o ajuste $y(\theta; \vec{b})$, por meio dos resíduos normalizados que que trata-se de um bom ajuste.

Ao compararmos os valores obtidos para $\hat{a}_0$, $\hat{a}_2$, $\hat{a}_4$ e $V_{\hat{a}}$ obtidos pela transformação de variáveis, Tabela 3 e Eq.(13) com os resultados para a_0, a_2, a_4 e V_a obtidos pelo Método dos Mínimos Quadrados, Tabela 5 e Eq.(17) vemos que os valores são idênticos. O *Python* encontrou diferença entre os valores dos parâmetros $\vec{\hat{a}}$ e $\vec{a}$ apenas aproximadamente a partir da oitava casa decimal, o que pode estar relacionado aos limites de aproximação do próprio algoritmo.