Ajustar un modelo

“Fitting data to a model”

Grupo 3: Sebastián Chegini, Mateo Barnes , Tomás Obregón

EXACTAS UBA

Laboratorio 4ª - 1° Cuatrimestre 2024 – Departamento de Física – FCEyN – UBA

Objetivo

Dado un un modelo lineal

(que la relación de y y los parámetros sea lineal)

EJs:

$$f(x) = a\ .x + b\ .x^2 + c\ .x^3$$

$$f(x) = a\ .\log(x)$$

Queremos obtener:

- Los valores de los parámetros
- Sus errores
- Y ver que tan bueno es el ajuste para una distribución de datos medida

Asumimos distribución gaussiana y datos no relacionados.

$\Longrightarrow$ Definimos: $\chi^2 = \sum_{i=1}^{N} \left(\frac{y_i - f(x_i)}{\sigma_i} \right)^2$

N = # de variables

M = # de parámetros

$n \equiv N - M$ = Grados de libertad

$\chi^2 \approx 0 \Longrightarrow$

$\sigma_i \gg$ valor "real" – valor ajustado

$\chi^2 \gg 0 \Longrightarrow$

El valor ajustado se aleja del "real"

mientras más lo haga mayor será χ^2 $\Longrightarrow$ El modelo representa menos la realidad

Para obtener los parámetros a_β minimizamos χ^2

$\Longrightarrow$ Obtenemos:

$$U_{\alpha\beta} \bullet a_\beta = v_\alpha$$

$$U_{\alpha\beta} = \sum_{i=1}^{N} \frac{x_i^{\alpha+\beta}}{\sigma_i^2} \qquad v_\alpha = \sum_{i=1}^{N} \frac{x_i^{\alpha} \bullet y_i}{\sigma_i^2}$$

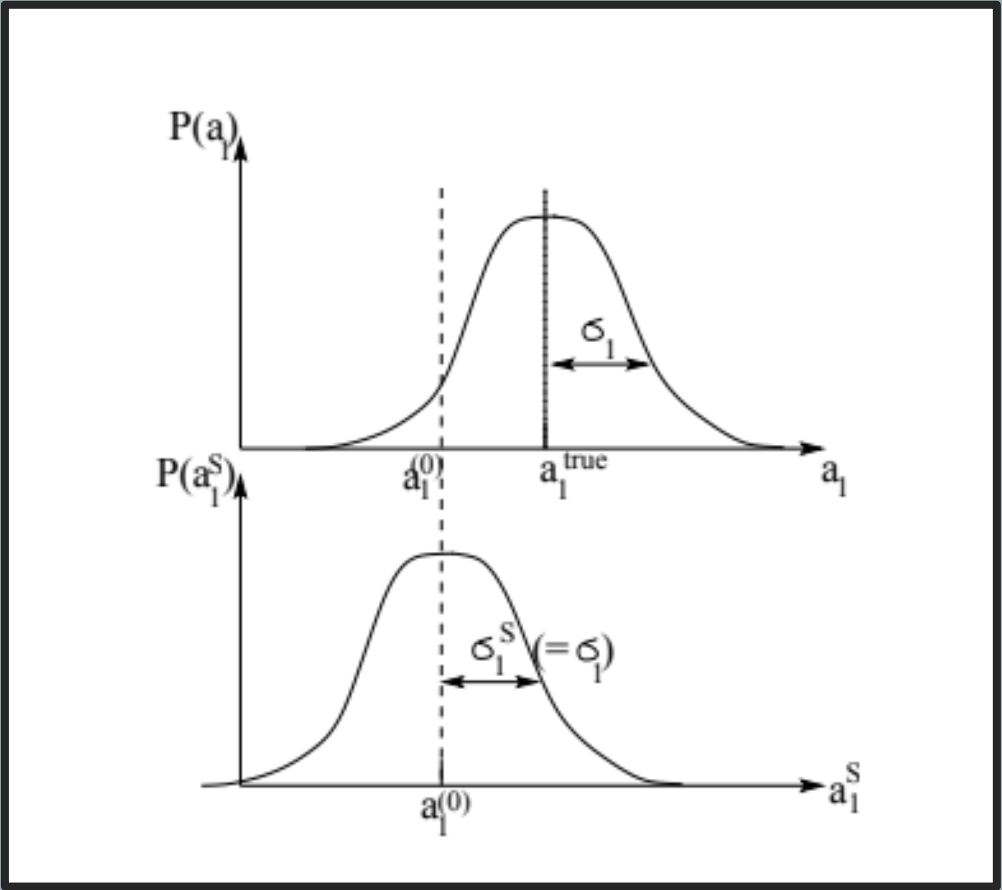
∴ Cada parámetro queda:

$$\boxed{a_\beta = \sum_{\beta=0}^{M-1} \left(U_{\alpha\beta}\right)^{-1} v_\beta}$$

OBS:

- U = Matriz de curvatura
- U^{-1} = Matriz de covarianza

Barras de error



Sea el vector de parámetros "reales" del sistema $\vec{a}^{true}$ y $\vec{a}^{(i)}$ el correspondiente a la medición i

$\Longrightarrow$ Definimos:

σ_j a la desviación estándar de la distribución $\mathrm{P}(a_j)$ correspondiente al j-$esimo$ parámetro

Si se simulan los valores de $a_j^{(0)}$ la desviación σ_j^s será igual al error σ_j

Para sistemas lineales vale:

$$\boxed{\left(\sigma_j\right)^2 = \left(\sigma_j^s\right)^2 = \left(U_{jj}\right)^{-1}}$$

Demostración de esto último:

We shall now prove this result. As stated above, to derive the error bars in the fit parameters we take simulated values of the data points, y_i^S, which vary by some amount δy_i^S about $y_i^{(0)}$, i.e. $\delta y_i^S = y_i^S - y_i^{(0)}$, with a standard deviation given by the error bar σ_i. The fit parameters of this simulated data set, $\vec{a}^S$, then deviate from $\vec{a}^{(0)}$ by an amount $\delta\vec{a}^S$ where

$$\delta a_\alpha^S = \sum_{i=1}^{N} \frac{\partial a_\alpha}{\partial y_i}\, \delta y_i^S \,. \tag{88}$$

Averaging over fluctuations in the y_i^S we get the variance of a_α^S to be

$$\left(\sigma_\alpha^S\right)^2 \equiv \langle \left(\delta a_\alpha^S\right)^2 \rangle = \sum_{i=1}^{N} \sigma_i^2 \left(\frac{\partial a_\alpha}{\partial y_i}\right)^2 , \tag{89}$$

since $\langle \left(\delta y_i^S\right)^2 \rangle = \sigma_i^2$, and the data points y_i are statistically independent. Writing Eq. (82) explicitly in terms of the data values,

$$a_\alpha = \sum_\beta \left(U^{-1}\right)_{\alpha\beta} \sum_{i=1}^{N} \frac{y_i\, x_i^\beta}{\sigma_i^2} , \tag{90}$$

and noting that U is independent of the y_i, we get

$$\frac{\partial a_\alpha}{\partial y_i} = \sum_\beta \left(U^{-1}\right)_{\alpha\beta} \frac{x_i^\beta}{\sigma_i^2} . \tag{91}$$

Substituting into Eq. (89) gives

$$\left(\sigma_\alpha^S\right)^2 = \sum_{\beta,\gamma} \left(U^{-1}\right)_{\alpha\beta} \left(U^{-1}\right)_{\alpha\gamma} \left[\sum_{i=1}^{N} \frac{x_i^{\beta+\gamma}}{\sigma_i^2}\right] . \tag{92}$$

The term in rectangular brackets is just $U_{\beta\gamma}$, and since U is given by Eq. (80) and is symmetric, the last equation reduces to

$$\left(\sigma_\alpha^S\right)^2 = \left(U^{-1}\right)_{\alpha\alpha} . \tag{93}$$

Recall that σ_α^S is the standard deviation of the fitted parameter values about the $\vec{a}^{(0)}$ when constructing simulated data sets from the one set of data that is available to us.

However, the error bar is defined to be the standard deviation the fitted parameter values would have relative to a_α^{true} if we could average over many actual data sets. To determine this quantity we simply repeat the above calculation with $\delta y_i = y_i - y_i^{\text{true}}$ in which y_i is the value of the i-th data point in one of the actual data sets. Since U is a constant (for a linear model) equations (88) to (93) go through unchanged simply omitting the superscript S's. The (unknown) values of y_i^{true} never enter. In other words

$$\boxed{\sigma_\alpha^2 = \left(U^{-1}\right)_{\alpha\alpha} ,} \tag{94}$$

Everything you wanted to know about Data Analysis and Fitting but were afraid to ask, Peter Young – Páginas 25 y 26

¿Cuán bueno es el ajuste?

Definimos el valor:

$$Q = \frac{1}{\Gamma\left(\frac{n}{2}\right)} \int_{\frac{\chi^2}{2}}^{\infty} y^{\left(\frac{n}{2}-1\right)} e^{-y} dy$$

Q mide la probabilidad de que los datos obtenidos hayan sido aleatorios o no

$Q \approx 0 \Longrightarrow$ El ajuste no es confiable y el set de datos probablemente sea erróneo

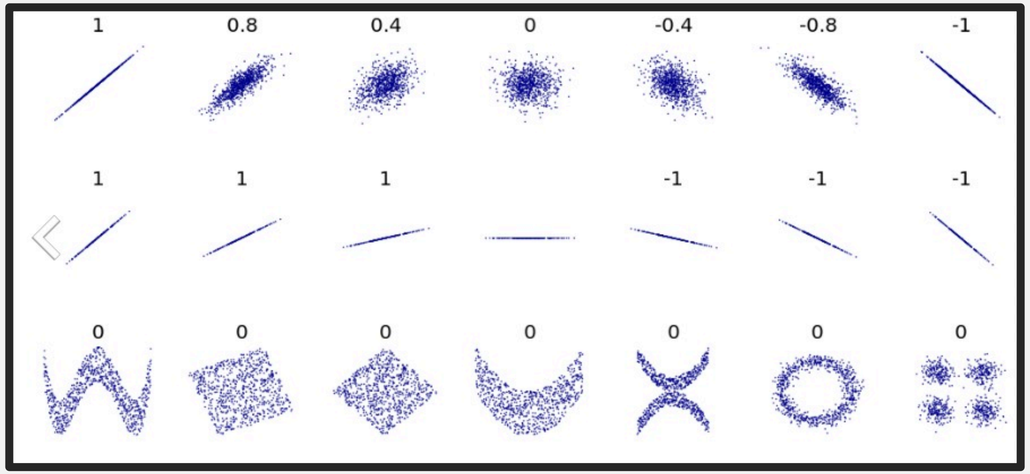
Antes, hablamos de U^{-1}

Los elementos por fuera de la diagonal de la matriz de covarianza proveen información sobre la relación entre parámetros α y β

$$Cov\left(\alpha, \beta\right) = U^{-1}_{\alpha\beta}$$

- Definimos el coeficiente de correlación:

$$r_{\alpha\beta} = \frac{Cov\left(\alpha, \beta\right)}{\sigma_\alpha \sigma_\beta}$$



Modelos No-Lineales

La ecuación diferencial podría tener más de una solución o no tenerla en absoluto

No necesariamente se cumple que:

$$\left(\sigma_j\right)^2 = \left(\sigma_j^s\right)^2$$

El truquito de siempre

Asumimos que las diferencias son lo suficientemente pequeñas para no tenerlas en cuenta

$\Longrightarrow$

Se minimiza χ^2

$\Downarrow$

Para ese valor, se toma la inversa de la matriz de curvatura como la de covarianza

Límites de confianza

Si se toman datos simulados y asumiendo un ruido gaussiano, la probabilidad de distribución de $\vec{a}^s$ está dada tal que :

$$P\left(\vec{a}^S\right) \propto exp\left(-\frac{1}{2}\sum_{\alpha,\beta}^{N} \delta a_\alpha^s \, U_{\alpha\beta} \, \delta a_\beta^s\right)$$

Tomando en cuenta que χ^2 se relaciona con la 2^{da} derivada de de la matriz de curvatura obtenemos:

$$P\left(\vec{a}^S\right) \propto exp\left(-\frac{1}{2}\Delta\,\chi^2\right)$$

$\Longrightarrow$ La probabilidad de que una desviación $\delta\vec{a}^s$ de los parámetros fitteados respecto a los parámetros en el set de datos real depende de $\Delta\,\chi^2$

El límite de confianza es un rango de esta variable para el cual un valor menor obtenido denota un ajuste confiable.

Límites de confianza

Si se toman datos simulados y asumiendo un ruido gaussiano, la probabilidad de distribución de $\vec{a}^{s}$ está dada tal que :

$$P\left(\vec{a}^{S}\right) \propto exp\left(-\frac{1}{2}\sum_{\alpha,\beta}^{N} \delta a_{\alpha}^{s}\, U_{\alpha\beta}\, \delta a_{\beta}^{s}\right)$$

Tomando en cuenta que χ^2 se relaciona con la 2^{da} derivada de de la matriz de curvatura obtenemos:

$$P\left(\vec{a}^{S}\right) \propto exp\left(-\frac{1}{2}\Delta\,\chi^2\right)$$

Ahora tomemos el cambio en χ^2 manteniendo a_j^s fijo. Entonces tenemos que para minimizar χ^2 se puede hacer el siguiente desarrollo

El límite de confianza es un rango de esta

We therefore consider the change in χ^2 when one variable, a_1^S say, is held at a specified value, and all the others ($\beta = 2, 3, \cdots, M$) are varied in order to minimize χ^2. Minimizing $\Delta\chi^2$ in Eq. (113) with respect to a_β^S gives

$$\sum_{\gamma=1}^{M} U_{\beta\gamma}\, \delta a_\gamma^S = 0, \qquad (\beta = 2, 3, \cdots, M)\,. \tag{115}$$

The corresponding sum for $\beta = 1$, namely $\sum_{\gamma=1}^{M} U_{1\gamma}\, \delta a_\gamma^S$, is not zero because δa_1 is fixed. It will be some number, c say. Hence we can write

$$\sum_{\gamma=1}^{M} U_{\alpha\gamma}\, \delta a_\gamma^S = c_\alpha, \qquad (\alpha = 1, 2, \cdots, M)\,, \tag{116}$$

where $c_1 = c$ and $c_\beta = 0\,(\beta \neq 1)$. The solution is

$$\delta a_\alpha^S = \sum_{\beta=1}^{M} \left(U^{-1}\right)_{\alpha\beta} c_\beta = \left(U^{-1}\right)_{\alpha 1} c\,. \tag{117}$$

For $\alpha = 1$ this gives

$$c = \delta a_1^S / \left(U^{-1}\right)_{11}\,. \tag{118}$$

Substituting Eq. (117) into Eq. (113), and using Eq. (118) we find that $\Delta\chi^2$ is related to $(\delta a_1^S)^2$ by

$$\Delta\chi^2 = \frac{(\delta a_1^S)^2}{(U^{-1})_{11}}. \tag{119}$$

Límites de confianza

Si se toman datos simulados y asumiendo un ruido gaussiano, la probabilidad de distribución de $\vec{a}^s$ está dada tal que :

$$P\left(\vec{a}^S\right) \propto exp\left(-\frac{1}{2}\sum_{\alpha,\beta}^{N} \delta a_\alpha^s \, U_{\alpha\beta} \, \delta a_\beta^s\right)$$

Tomando en cuenta que χ^2 se relaciona con la 2^{da} derivada de de la matriz de curvatura obtenemos:

$$P\left(\vec{a}^S\right) \propto exp\left(-\frac{1}{2}\Delta\,\chi^2\right)$$

- Podemos deducir:

$$\boxed{P\left(a_1^{true}\right) \propto exp\left(-\frac{1}{2}\frac{(\delta a_1)^2}{\sigma_1^2}\right)}$$

La probabilidad de que a_α este entre los valores que minimizan a χ^2 está relacionada con el σ_α