

Il fit non lineare del programma di acquisizione “Proecm2”

La nota che segue descrive compiutamente le caratteristiche della procedura di fit non lineare come implementata all'interno del programma di acquisizione ed analisi dati “Proecm2”. Lo scopo principale è quello di definire compiutamente il significato delle variabili e dei parametri che si impostano o si ottengono in uscita dalla procedura, in modo tale da permettere un utilizzo migliore della medesima e una valutazione esatta dei risultati; tuttavia si è cercato di presentare l'argomento in modo compiuto ad un livello elementare che non presupponga particolari conoscenze in materia, così da fornire una introduzione al problema del fit non lineare. Il codice di fit qui descritto è mantenuto sostanzialmente inalterato nell'applicazione “ProecmX”, che costituisce la naturale evoluzione di “Proecm2” nel sistema operativo Mac OS X. “ProecmX” in ogni caso contiene un certo numero di miglioramenti dal punto di vista dell'interfaccia-utente, come la possibilità di variare i singoli parametri di un fit e vederne il risultato, numerico e grafico, in tempo reale.¹

1. Il fit non lineare

Si abbia una serie di n dati sperimentali (x_i, y_i, σ_i) con $i = 1, n$, dove x è una variabile indipendente e y è supposta legata alla x da una funzione che contiene r parametri $\mathbf{p} = (p_1, p_2, \dots, p_r)$ ($r < n$): $y = f(x, \mathbf{p})$. I valori x_i sono supposti esatti, mentre a ciascun y_i è associato un errore statistico σ_i ; gli y_i , che costituiscono le nostre variabili casuali sono infine supposti fra loro indipendenti. Lo scopo del fit è quello di determinare il set di valori di \mathbf{p} per cui si ha il “miglior” accordo fra i dati sperimentali e la funzione. Nelle condizioni suesposte la statistica suggerisce che i valori ottimali di \mathbf{p} siano quelli che minimizzano l'espressione

$$\chi^2 = \sum_{i=1}^n \frac{[y_i - f(x_i, \mathbf{p})]^2}{\sigma_i^2} \quad (1.1)$$

Nei casi in cui la funzione possa essere scritta nella forma $f(x, \mathbf{p}) = p_1 f_1(x) + p_2 f_2(x) + \dots + p_r f_r(x)$, ossia se i parametri compaiono linearmente in f , la minimizzazione di χ^2 produce un sistema di equazioni lineari facilmente risolvibile. In molti casi invece questa condizione non è soddisfatta ed allora è necessario ricorrere a metodi più complessi. Quello che qui seguiremo consiste nel linearizzare la funzione intorno a un valore approssimato dei parametri: supponiamo di conoscere una stima iniziale \mathbf{p}_0 dei parametri stessi e considerare piccoli spostamenti intorno ai valori iniziali. Se indichiamo con $\theta_j = p_j - p_{0j}$ potremo approssimare al primo ordine

$$f(x, \mathbf{p}) \simeq f(x, \mathbf{p}_0) + \sum_{j=1}^r \left. \frac{\partial f(x, \mathbf{p})}{\partial p_j} \right|_{\mathbf{p}=\mathbf{p}_0} \cdot \theta_j \quad (1.2)$$

¹ Una descrizione particolareggiata della funzionalità di “ProecmX” è contenuta nel sistema di documentazione on-line dell'applicazione stessa.

Corrispondentemente avremo

$$\chi^2 = \sum_{i=1}^n \frac{\left[y_i - f(x_i, \mathbf{p}_0) - \sum_{j=1}^r \left. \frac{\partial f(x, \mathbf{p})}{\partial p_j} \right|_{\mathbf{p}=\mathbf{p}_0} \cdot \theta_j \right]^2}{\sigma_i^2} \quad (1.3)$$

che minimizzeremo rispetto alle variazioni θ_j dei parametri. Da ora in poi indicheremo $\left. \frac{\partial f(x_i, \mathbf{p})}{\partial p_j} \right|_{\mathbf{p}=\mathbf{p}_0}$ semplicemente come $\frac{\partial f_i}{\partial p_j}$. Il minimo di χ^2 sarà dato dai valori di θ_k che annullano tutte le derivate parziali $\frac{\partial \chi^2}{\partial \theta_k}$. Si ha

$$\frac{\partial \chi^2}{\partial \theta_k} = 2 \sum_{i=1}^n \frac{\left[y_i - f(x_i, \mathbf{p}_0) - \sum_{j=1}^r \frac{\partial f_i}{\partial p_j} \theta_j \right] \left(-\frac{\partial f_i}{\partial p_k} \right)}{\sigma_i^2} \quad (1.4)$$

Rovesciando l'ordine delle sommatorie si ottengono r equazioni lineari nelle θ_k :

$$\sum_{j=1}^r \sum_{i=1}^n \left(\frac{\partial f_i}{\partial p_j} \frac{\partial f_i}{\partial p_k} \right) \theta_j = \sum_{i=1}^n \frac{[y_i - f(x_i, \mathbf{p}_0)] \frac{\partial f_i}{\partial p_k}}{\sigma_i^2} \quad k = 1, r \quad (1.5)$$

Il sistema può essere scritto in forma compatta introducendo una matrice Z ed un vettore \mathbf{w} tali che

$$Z_{kj} = \sum_{i=1}^n \left(\frac{\partial f_i}{\partial p_j} \frac{\partial f_i}{\partial p_k} \right) \quad w_k = \sum_{i=1}^n \frac{[y_i - f(x_i, \mathbf{p}_0)] \frac{\partial f_i}{\partial p_k}}{\sigma_i^2} \quad (1.6)$$

Avremo quindi per il sistema e per la sua soluzione le relazioni:

$$Z\boldsymbol{\theta} = \mathbf{w} \quad \boldsymbol{\theta} = Z^{-1}\mathbf{w} \quad (1.7)$$

Il procedimento per ricavare i parametri consiste quindi nel partire da un valore iniziale \mathbf{p}_0 , calcolare Z e \mathbf{w} , risolvere il sistema e ricavare gli incrementi $\boldsymbol{\theta}$ che verranno sommati ai valori iniziali dei parametri. Data la non linearità del problema, i valori ottenuti non costituiscono la soluzione definitiva ma solo (e non sempre, vedi §3) una migliore approssimazione. Si dovrà quindi procedere in modo iterativo, usando i parametri modificati come stima iniziale per un altro passo del fit e così via. Per decidere quando terminare l'iterazione, si confronterà il valore dell'espressione di χ^2 calcolata prima dell'ultimo passo, χ_{m-1}^2 con quello calcolato dopo il passo χ_m^2 calcolando la percentuale di diminuzione

$$q = \frac{\chi_{m-1}^2 - \chi_m^2}{\chi_{m-1}^2} \quad (1.8)$$

si considererà concluso il fit quando q , che deve essere positivo ad ogni passo, sarà più piccolo di un valore prefissato (in Proecm2 $q < 10^{-4}$).

Notiamo infine che se le y_i sono distribuite in modo gaussiano la quantità χ^2 è effettivamente distribuita come la distribuzione statistica omonima, con $n - r$ gradi di libertà, ed ha valore di aspettazione pari a $n - r$.

2. Gli errori sui parametri

Gli errori sui parametri coincidono con gli errori sulle componenti di $\boldsymbol{\theta}$ all'ultimo passo del fit. L'errore nell'espressione di $\boldsymbol{\theta}$ compare in quanto gli y_i sono affetti da errori σ_i e si potrebbe ricavare con una normale, se pur laboriosa, propagazione quadratica. Preferiamo invece utilizzare un metodo più elegante, basato sul calcolo matriciale². Possiamo riscrivere Z e \mathbf{w} in termini di prodotti di matrici e vettori, se definiamo una matrice diagonale $G \{n \times n\}$, una matrice $A \{r \times n\}$ e un vettore $\mathbf{u} \{n\}$:

$$G_{ij} = \delta_{ij} \frac{1}{\sigma_i^2} \quad A_{kj} = \frac{\partial f_j}{\partial p_k} \quad u_j = y_j - f(x_j, \mathbf{p}_0) \quad (2.1)$$

In questi termini il sistema (1.7) assume la forma:

$$AGA^t \boldsymbol{\theta} = AG \mathbf{u} \quad \boldsymbol{\theta} = (AGA^t)^{-1} AG \mathbf{u} \quad (2.2)$$

dove t indica la trasposizione della matrice. Si noti che $Z = AGA^t$ è una matrice simmetrica. Possiamo quindi esprimere la trasformazione dal vettore \mathbf{u} nel vettore $\boldsymbol{\theta}$ come la trasformazione lineare associata alla matrice $(AGA^t)^{-1} AG$. È un risultato noto che quando una variabile casuale vettoriale viene trasformata in un'altra da una trasformazione lineare associata a una matrice M , $\mathbf{y} = M\mathbf{x}$, fra le matrici di covarianza delle due variabili casuali vale la relazione $C_{\mathbf{y}} = M C_{\mathbf{x}} M^t$ ³. Inoltre la matrice di covarianza della \mathbf{u} coincide con quella delle y_i e, per la supposta indipendenza, non è che G^{-1} . Si avrà quindi⁴

$$\begin{aligned} C_{\boldsymbol{\theta}} &= (AGA^t)^{-1} AG G^{-1} \left[(AGA^t)^{-1} AG \right]^t \\ &= (AGA^t)^{-1} AG G^{-1} GA^t \left[(AGA^t)^{-1} \right]^t \\ &= (AGA^t)^{-1} AGA^t (AGA^t)^{-1} \\ &= (AGA^t)^{-1} \end{aligned} \quad (2.3)$$

La matrice di covarianza dei parametri risulta quindi essere semplicemente la matrice inversa Z^{-1} che compare nella soluzione del sistema.

² Cfr. BRANDT pagg. 196–200.

³ Cfr. BRANDT pag. 32.

⁴ Nel calcolo si sfrutta la proprietà associativa del prodotto di matrici e la relazione $(XY)^t = Y^t X^t$. Nella terza riga si utilizza anche la simmetria di AGA^t e quindi di $(AGA^t)^{-1}$. È da notare che, valendo la relazione $(XY)^{-1} = Y^{-1} X^{-1}$, si potrebbe essere tentati di applicarla al gruppo $(AGA^t)^{-1}$, ma questo sarebbe grossolanamente errato, in quanto la relazione sull'inversione di un prodotto funziona solo se tutte le matrici componenti sono quadrate (e non singolari), mentre A è rettangolare.

Nel presentare gli errori sui parametri e sulle grandezze associate in Proecm2 si è utilizzato un artificio dovuto a *Rosenfeld et al.*⁵ che consiste nel moltiplicarli per la radice quadrata del χ^2 ridotto, per cui ad esempio per i parametri si ha

$$\Delta\theta_k = \sqrt{Z_{kk}^{-1}} \sqrt{\frac{\chi^2}{n-r}} \quad (2.4)$$

Tale artificio non ha una spiegazione rigorosa, ma può essere giustificato con il seguente ragionamento: il valore d'aspettazione del χ^2 ridotto risulta essere 1 e se fittiamo i nostri dati con una funzione che li rappresenta perfettamente, entro gli errori statistici, dovremmo attenderci come risultato valori del χ^2 ridotto intorno a 1⁶. Se il valore risulta minore di 1 possiamo ipotizzare che:

- a- sono stati sovrastimati gli errori σ_i
 - b- i dati non sono statistici ma in qualche modo 'aggiustati' alla funzione
- mentre se il χ^2 ridotto è maggiore di 1 le ipotesi possono essere:
- c- sono stati sottostimati gli errori σ_i
 - d- la funzione non rappresenta, anche entro gli errori statistici, i dati sperimentali.

Nel caso delle ipotesi a e c, il procedimento di Rosenfeld è equivalente a moltiplicare gli errori σ_i per un fattore correttivo che porta il χ^2 ridotto a 1; in genere è possibile scartare a priori l'ipotesi b, mentre nel caso dell'ipotesi d il procedimento può essere giustificato dal fatto che noi siamo comunque interessati a ricavare informazioni sui dati sperimentali (ad esempio l'area di una riga in uno spettro) anche se la statistica ci mostra che il nostro modello, la funzione, non si adatta perfettamente ad essi. In questo caso gli errori più grandi introdotti dal procedimento sono un modo di 'compensare' per l'accordo scadente.

In ogni caso il valore del χ^2 ridotto è riportato in uscita da ogni fit di Proecm2 e quindi l'utente potrà eventualmente eliminare l'effetto del procedimento di Rosenfeld sugli errori.

3. La convergenza del fit

L'approssimazione lineare fatta del χ^2 nella (1.3) può, per alcuni valori dei parametri \mathbf{p}_0 , non essere sufficientemente buona da garantire che il nuovo χ^2 ricavato col procedi-

⁵ Cfr. BRANDT pagg. 195–196.

⁶ L'intervallo di valori di χ^2 ridotto statisticamente accettabile dipende dai gradi di libertà: in tabella sono riportati i limiti dell'intervallo di confidenza per una probabilità del 90% in funzione dei gradi di libertà.

gdl	$P(0.05)$	$P(0.95)$	gdl	$P(0.05)$	$P(0.95)$
1	$3.9 \cdot 10^{-3}$	3.84	100	0.78	1.24
5	0.23	2.21	200	0.84	1.17
10	0.39	1.83	500	0.90	1.11
20	0.54	1.57	1000	0.93	1.07
50	0.70	1.35	2000	0.95	1.05

mento di §1 risulti inferiore a quello originale. In tal caso si dice che il passo di fit diverge e in genere ulteriori passi di iterazione non fanno che peggiorare la cosa. Questa possibilità è particolarmente probabile durante i primi passi del fit, quando ancora siamo lontani dal minimo di χ^2 . Un possibile rimedio potrebbe essere di ripetere il passo variando leggermente i valori dei parametri fino a ritrovare la convergenza, ma questo sarebbe assai poco conveniente, soprattutto quando i parametri sono molti.

Esiste invece un algoritmo semplice ed efficace, dovuto a *Kenneth Levenberg* e *Donald Marquardt*,⁷ che permette di ovviare a questi problemi ed è stato implementato all'interno di Proecm2. L'algoritmo di Levenberg–Marquardt consiste nel moltiplicare i termini diagonali della matrice Z (1.6 e 1.7) per un fattore $1 + \lambda$, sostituendo a Z una nuova matrice Z' definita da $Z'_{ij} = Z_{ij}(1 + \lambda\delta_{ij})$. Per il primo passo del fit si sceglie generalmente un valore di λ dell'ordine di 10^{-3} . Risolto il sistema (1.7) usando Z' , si incrementano i parametri, si calcola il nuovo χ^2 e si verifica se si è avuta convergenza o meno. In caso positivo si riduce il valore di λ di un fattore φ (tipicamente $\varphi = 10$) e si procede ad un nuovo passo; se invece non si è avuta convergenza, si riportano i parametri ai valori che avevano prima dell'ultimo passo e si ripete il passo con un nuovo valore di λ , moltiplicato di un fattore φ rispetto al precedente. In generale aumentando λ si riesce a far sì che il passo di fit diventi convergente e ad “aggirare” la divergenza. Se esiste una effettiva corrispondenza fra dati sperimentali e funzione usata per il fit, il problema della divergenza si riduce via via che si passa a valori più piccoli di χ^2 , così da arrivare a un valore di q (1.8) positivo e minore del minimo prefissato in corrispondenza di valori di λ a loro volta sufficientemente piccoli (tipicamente $10^{-5} \div 10^{-6}$). A questo punto si può eseguire un passo finale con $\lambda = 0$ e se questo converge il fit è concluso.

Resta da vedere perché questo algoritmo risulti efficace: possiamo dire che al crescere di λ i termini diagonali della matrice Z' acquistano via via più importanza degli altri. Al limite in cui essi diventano sufficientemente grandi da poter trascurare gli elementi non diagonali di Z' , la soluzione del sistema diventa banalmente

$$\theta_k = \frac{w_k}{Z'_{kk}} = \frac{\sum_{i=1}^n \frac{[y_i - f(x_i, \mathbf{p}_0)] \frac{\partial f_i}{\partial p_k}}{\sigma_i^2}}{(1 + \lambda) \sum_{i=1}^n \frac{\left(\frac{\partial f_i}{\partial p_k}\right)^2}{\sigma_i^2}} \quad k = 1, r \quad (3.1)$$

Se calcoliamo dalla (1.1) il gradiente di χ^2 rispetto ai parametri otteniamo

$$\left. \frac{\partial \chi^2}{\partial p_k} \right|_{\mathbf{p}=\mathbf{p}_0} = -2 \sum_{i=1}^n \frac{[y_i - f(x_i, \mathbf{p}_0)] \frac{\partial f_i}{\partial p_k}}{\sigma_i^2} \quad (3.2)$$

Quindi il numeratore della soluzione data dalla (3.1) per ciascun θ_k è proporzionale con un fattore -2 alla rispettiva componente del gradiente di χ^2 rispetto ai parametri. Il denominatore risulta sempre positivo. Possiamo dire che il vettore di incrementi $\boldsymbol{\theta}$ così

⁷ Cfr. BEVINGTON pag. 235.

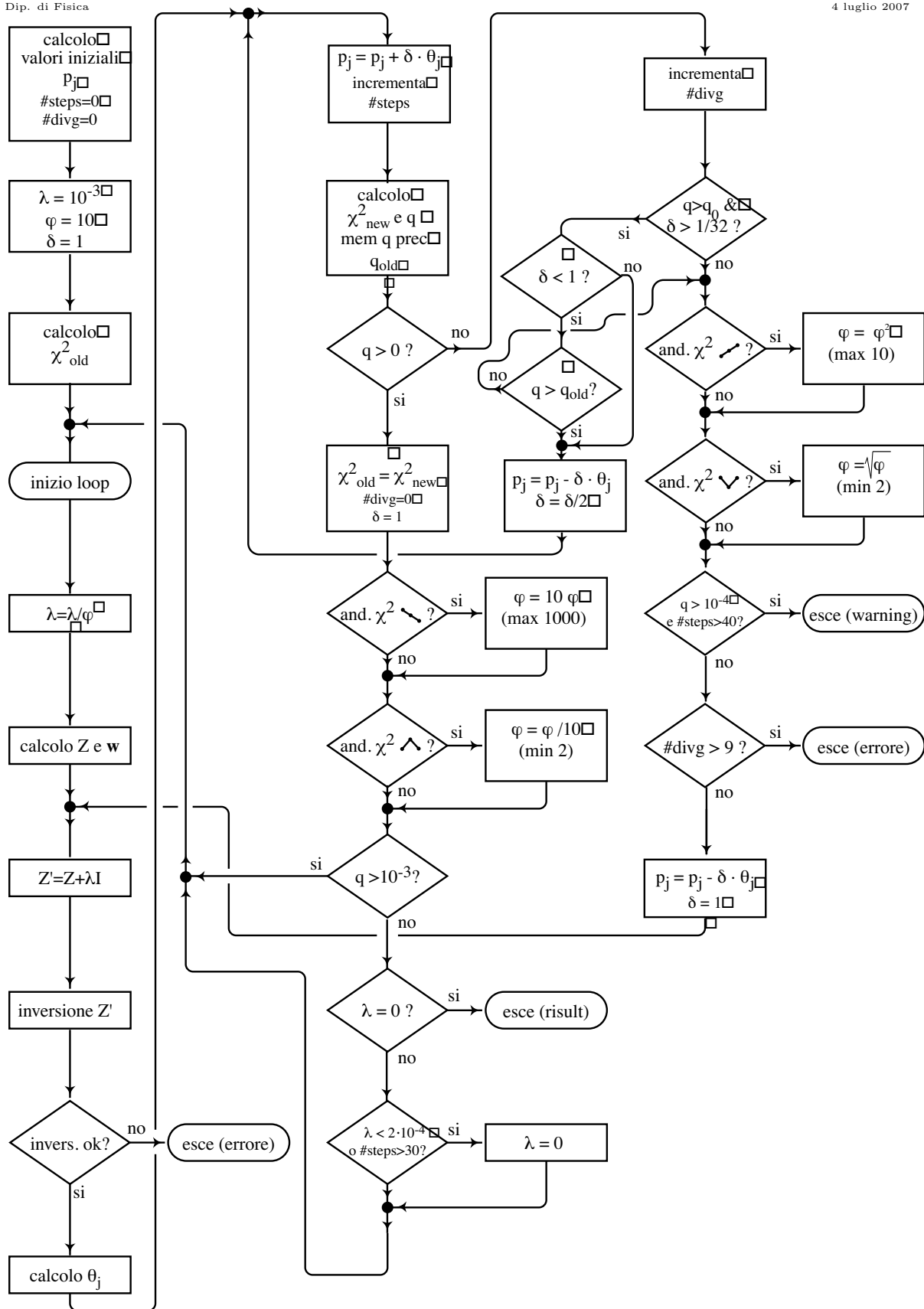


Fig.3.1: diagramma semplificato dell'algoritmo di fit con la procedura di L-M, come implementato in Proecm2.

determinato è approssimativamente diretto in verso opposto al gradiente di χ^2 (solo approssimativamente a causa dei fattori al denominatore della (3.1) che sono diversi fra loro) e che al crescere di λ gli incrementi diminuiscono. È evidente che se facciamo uno spostamento sufficientemente piccolo in una direzione approssimativamente opposta a quella del gradiente troveremo valori di χ^2 più piccoli. A valori intermedi di λ gli incrementi risultano determinati da un algoritmo che è “intermedio” fra il fit di §1 e uno spostamento lungo il gradiente, ma l’importante è che comunque il χ^2 diventi via via più piccolo, mentre diminuisce anche λ . Il passo finale con $\lambda = 0$ è infine un passo di fit puro.

Nell’implementare l’algoritmo di L–M all’interno di Proecm2 abbiamo verificato che in diversi casi si produce il fenomeno seguente: un passo divergente porta a aumentare λ , dopo di che la ripetizione converge; si riporta λ al valore di prima ma il passo successivo diverge e così via in alternanza. In questo modo il fit converge lo stesso, ma si raddoppia sostanzialmente il numero di passi e quindi aumenta⁸ il tempo di calcolo. Per ovviare a questo comportamento, la procedura di fit di Proecm2 “ricorda” la storia degli ultimi passi effettuati e quando si verifica l’alternanza provvede a ridurre il fattore φ , prendendone ogni volta la radice quadrata (da 10 a $\sqrt{10}$, etc.). Questo accorgimento tende ad evitare il fenomeno dell’alternanza; viceversa, quando si ha convergenza o divergenza di seguito per più passi si incrementa di nuovo il fattore di variazione di λ fino a riportarlo a 10 o oltre.

L’introduzione recente di nuove opzioni di fit (vedi §§4.4 e 4.5) ha provocato l’apparire di passi divergenti in modo molto leggero ($q > -0.0002$) anche nei passi finali del fit. Questi piccoli effetti non sono particolarmente sensibili al meccanismo di L–M, mentre si è visto che è possibile ‘curarli’ con un altro espediente; i parametri p_j vengono incrementati non direttamente degli incrementi calcolati θ_j , ma di una frazione determinata da un parametro δ : $p_j = p_j + \delta \cdot \theta_j$. Inizialmente viene posto $\delta = 1$, e quindi abbiamo la situazione precedentemente descritta; tuttavia se si verifica una divergenza lieve si riportano i parametri ai valori precedenti e si riduce δ di un fattore 2, eventualmente fino a raggiungere $\frac{1}{32}$ o ad ottenere un passo convergente ($q > 0$). Questo procedimento si basa sul fatto che gli incrementi trovati in certi casi possono essere corretti in direzione ma eccessivi in ampiezza, per cui si ha un miglioramento a applicarne solo una frazione. In ogni caso se dopo il passo con $\delta = \frac{1}{32}$ si è avuto un peggioramento di q significa che il metodo non funziona e quindi non vengono effettuate ulteriori riduzioni di δ .

4. Il fit gaussiano di Proecm2

4.1 La funzione di fit

Il programma Proecm2 è stato progettato per analizzare spettri gamma raccolti con rivelatori al Ge o scintillatori e spettri di elettroni raccolti con rivelatori al Si. La funzione di fit ha lo scopo di valutare posizione e area dei picchi, anche quando questi siano fra loro parzialmente sovrapposti, al netto del fondo sempre presente negli spettri. Per questi tipi

⁸ L’aumento è inferiore a un fattore 2 in quanto dopo un passo divergente non è necessario ricalcolare Z e \mathbf{w} , visto che i parametri non vengono modificati.

di spettri valgono le seguenti considerazioni:

- la forma dei picchi è almeno approssimativamente gaussiana. Nel caso degli elettroni, spesso è presente una “coda” sul lato di bassa energia.
- la larghezza dei picchi cresce al crescere dell’energia, ma in modo sufficientemente lento da permettere di trascurarne la variazione quando si considera una zona non più vasta di alcune volte la larghezza delle righe (come avviene nel fit contemporaneo di più picchi), e quindi in ogni operazione di fit la larghezza può essere mantenuta costante per i vari picchi.
- il fondo, in una zona ristretta di spettro, può essere approssimato come lineare o al più quadratico. In alcuni casi ogni picco presenta anche un fondo “a scalino”, ossia il fondo a sinistra del picco è più alto di quello a destra. Lo scalino risulta comunque “smussato” dalla risoluzione finita del sistema di misura (vedi oltre).

Queste considerazioni hanno guidato nella scelta della funzione di fit: in particolare si è rivelata efficace una funzione in cui ogni picco è rappresentato dalla convoluzione fra una gaussiana e una forma-base costituita da una delta di Dirac e un’esponenziale troncata. Il fondo è rappresentato da un polinomio di secondo grado più, per ciascun picco, la convoluzione fra una gaussiana e una funzione a scalino.

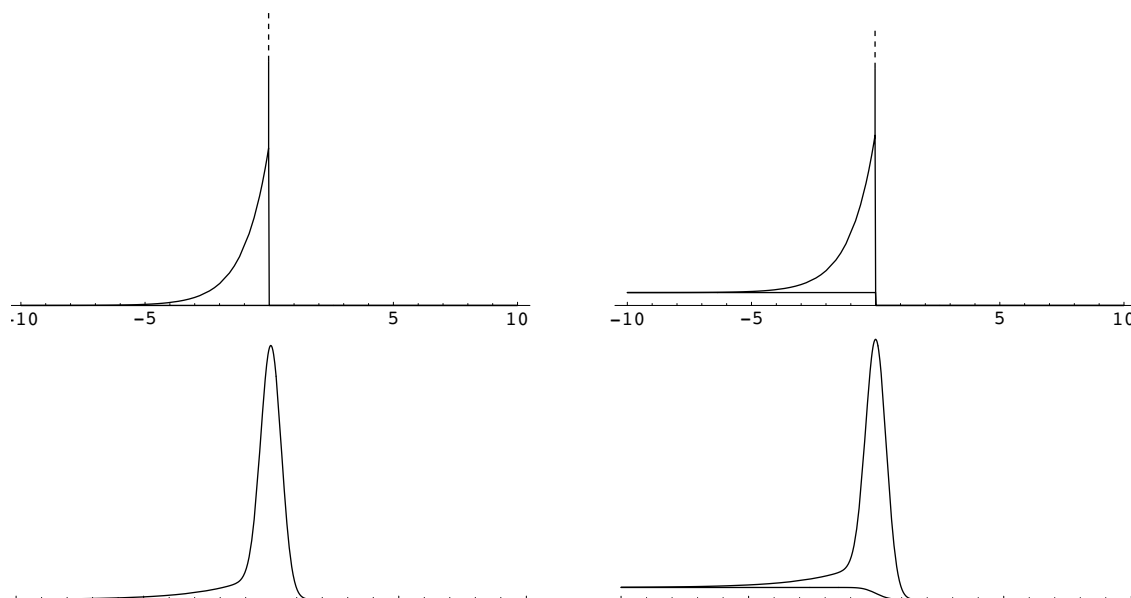


Fig.4.1: Forma della funzione di fit per un picco, senza o con fondo “a scalino”, prima e dopo la convoluzione con una gaussiana.

In caso si abbiano s picchi da approssimare in una zona, la funzione di fit, senza il

fondo e prima della convoluzione con la gaussiana risulta

$$f(t) = \sum_{i=1}^s \alpha_i [(1 - \beta)\delta(t - x_{0i}) + \beta h(t - x_{0i})] \quad \text{dove} \quad h(u) = \begin{cases} \frac{1}{\lambda} \exp\left(\frac{u}{\lambda}\right) & u \leq 0 \\ 0 & u > 0 \end{cases} \quad (4.1)$$

dove α_i e x_{0i} sono parametri che si riferiscono rispettivamente all'ampiezza e alla posizione di ciascun picco, mentre β rappresenta la percentuale di coda esponenziale rispetto alla gaussiana. Si opera quindi la convoluzione con una gaussiana normalizzata:

$$\begin{aligned} F(x) &= \sum_{i=1}^s \alpha_i \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \exp\left[-\frac{1}{2} \frac{(x-t)^2}{\sigma^2}\right] [(1 - \beta)\delta(t - x_{0i}) + \beta h(t - x_{0i})] dt \\ &= \sum_{i=1}^s \alpha_i (1 - \beta) \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \exp\left[-\frac{1}{2} \frac{(x - x_{0i})^2}{\sigma^2}\right] + \\ &\quad + \sum_{i=1}^s \alpha_i \beta \int_{-\infty}^{x_{0i}} \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma\lambda} \exp\left[\frac{t - x_{0i}}{\lambda} - \frac{1}{2} \frac{(x - t)^2}{\sigma^2}\right] dt \end{aligned} \quad (4.2)$$

Svolgendo i calcoli si ottiene⁹

$$\begin{aligned} F(x) &= f_1(x) + f_2(x) \quad \text{dove} \\ f_1(x) &= \sum_{i=1}^s \alpha_i (1 - \beta) \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \exp\left[-\frac{1}{2} \frac{(x - x_{0i})^2}{\sigma^2}\right] \\ f_2(x) &= \sum_{i=1}^s \frac{\alpha_i \beta}{\sqrt{\pi}\lambda} \exp(\xi) \int_{-\infty}^{\zeta} e^{-z^2} dz = \sum_{i=1}^s \frac{\alpha_i \beta}{2\lambda} \exp(\xi) [1 + \operatorname{erf}(\zeta)] \\ \text{dove} \quad \xi &= \frac{x - x_{0i}}{\lambda} + \frac{\sigma^2}{2\lambda^2} \quad \zeta = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{x_{0i} - x}{\sigma} - \frac{\sigma}{\lambda} \right) \quad \operatorname{erf}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x e^{-z^2} dz \end{aligned} \quad (4.3)$$

Per quanto riguarda il fondo, avremo un polinomio di secondo grado più la convoluzione della funzione a scalino con una gaussiana:

$$\begin{aligned} B(x) &= b_0 + b_1 x + b_2 x^2 + \sum_{i=1}^s \alpha_i \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma\tau} \exp\left[-\frac{1}{2} \frac{(x-t)^2}{\sigma^2\tau^2}\right] \gamma \eta(x_{0i} - t) dt \\ &= b_0 + b_1 x + b_2 x^2 + \sum_{i=1}^s \frac{\alpha_i \gamma}{2} \left[1 + \operatorname{erf}\left(\frac{x_{0i} - x}{\sqrt{2}\sigma\tau}\right) \right] \end{aligned} \quad (4.4)$$

Dove $\eta(x)$ è la funzione a scalino: $\eta(x) = 1$ se $x \geq 0$, $\eta(x) = 0$ se $x < 0$. Il fondo introduce quindi come nuovi parametri b_0 , b_1 , b_2 , coefficienti del polinomio, più γ , altezza

⁹ Si ricorda che $\int_{-\infty}^{x_0} \exp\left[-(ax^2 + bx + c)\right] dx$ con $a > 0$ può essere portato, tramite la sostituzione di variabile $z = \sqrt{a}\left(x + \frac{b}{2a}\right)$, nella forma $\frac{1}{\sqrt{a}} \exp\left[\frac{b^2}{4a} - c\right] \int_{-\infty}^{\sqrt{a}(x_0 + \frac{b}{2a})} e^{-z^2} dz$.

relativa dello scalino, e τ . Quest'ultimo parametro era stato introdotto per verificare se si ottenevano miglioramenti sostanziali nel fit effettuando la convoluzione del fondo con una gaussiana di ampiezza diversa rispetto a quella usata per le righe, ma non si è rivelato particolarmente utile. Esso rimane nel programma Proecm2 per ragioni storiche, ma è normalmente fissato a 1 ed è possibile variarlo solo impostando i parametri iniziali nel modo "custom" (vedi sotto).

Si vede quindi che il fit gaussiano di Proecm2 utilizza un massimo di 8 parametri generali: $b_0, b_1, b_2, \sigma, \lambda, \beta, \gamma, \tau$, più due parametri individuali per ciascun picco, α_i e x_{0i} . Il programma di fit consente comunque di variare anche soltanto un sottogruppo di parametri, mantenendo gli altri fissi al valore iniziale. Le opzioni base sono:

- a- fit gaussiano puro con fondo lineare: b_2, β e γ sono fissati a 0; $3 + 2 \times s$ parametri
 - b- fit con fondo parabolico: si varia anche b_2
 - c- fit asimmetrico: si varia anche β
 - d- fit con fondo a scalino: si varia anche γ
- Le opzioni b, c, d possono essere abilitate singolarmente o in qualsiasi combinazione. con il comando **Set fit parameters...**; inoltre è possibile accedere al modo *custom* in cui l'utente può specificare il valore iniziale di ciascun parametro e scegliere se variarlo o mantenerlo costante durante il fit.

Le informazioni fondamentali che si vogliono ottenere dal fit degli spettri riguardano la posizione e l'area di ciascun picco. Le posizioni sono date direttamente dai parametri x_{0i} , mentre le aree, al netto del contributo del fondo, risultano semplicemente uguali ai parametri α_i . Infatti per ogni picco fittato avremo nella funzione $f(t)$ un termine $f_i(t)$ normalizzato in modo che $\int_{-\infty}^{\infty} f_i(t) dt = \alpha_i$. Ogni $f_i(t)$ viene sottoposta a convoluzione con una gaussiana normalizzata in modo da avere area unitaria. In queste condizioni si può dimostrare che l'integrale della funzione risultante dalla convoluzione è uguale al prodotto degli integrali delle due funzioni, la $f_i(t)$ e la gaussiana, e quindi vale proprio α_i ¹⁰.

4.2 Le derivate rispetto ai parametri

¹⁰ Si consideri la funzione $h(x)$ ottenuta dalla convoluzione $h(x) = \int_{-\infty}^{\infty} f(t)g(x-t) dt$ dove $f(t) \geq 0$, $g(x) \geq 0$ e $\int_{-\infty}^{\infty} f(t) dt = \hat{f}$, $\int_{-\infty}^{\infty} g(x) dx = \hat{g}$; avremo per il suo integrale

$$\hat{h} = \int_{-\infty}^{\infty} h(x) dx = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} f(t)g(x-t) dt dx = \lim_{b \rightarrow \infty} \int_{-b}^b \left[f(t) \lim_{a \rightarrow \infty} \int_{-a}^a g(x-t) dx \right] dt$$

dove si è operato uno scambio di integrali. Se $G(x)$ è una primitiva di $g(x)$ avremo

$$\hat{h} = \lim_{b \rightarrow \infty} \lim_{a \rightarrow \infty} \int_{-b}^b f(t)(G(a-t) - G(-a-t)) dt$$

nelle nostre condizioni possiamo applicare all'integrale che resta il teorema della media:

$$\hat{h} = \lim_{b \rightarrow \infty} \lim_{a \rightarrow \infty} \hat{f} (G(a - \bar{t}) - G(-a - \bar{t})) dt$$

dove $-b \leq \bar{t} \leq b$. Andando al limite per a e b risulta $\hat{h} = \hat{f}\hat{g}$.

Come si vede in (1.6), per calcolare la matrice Z e il vettore \mathbf{w} è necessario valutare sia la funzione di fit che le sue derivate rispetto ai parametri. Per quanto riguarda queste ultime, possono essere calcolate in due modi, o tramite l'espressione analitica o mediante approssimazione numerica, ossia valutando la funzione per piccoli spostamenti dei parametri¹¹

$$\frac{\partial f(x, \mathbf{p})}{\partial p_k} \simeq \frac{f(x, p_1 \dots p_{k-1}, p_k + \Delta_{p_k}, p_{k+1} \dots) - f(x, p_1 \dots p_{k-1}, p_k - \Delta_{p_k}, p_{k+1} \dots)}{2\Delta_{p_k}} \quad (4.5)$$

Il metodo numerico può essere l'unico possibile in alcuni casi in cui non esiste una rappresentazione analitica delle derivate, ed ha il vantaggio di semplificare il codice del programma, tuttavia in genere il calcolo risulta più lento perché richiede, per r parametri, $3 \times r$ valutazioni della funzione in ogni punto di fit, mentre spesso nel calcolo delle derivate analitiche espressioni a comune possono essere valutate una sola volta (vedi sotto). In Proecm2 si è scelto di valutare le derivate analiticamente, con le formule seguenti, in cui $G(x) = F(x) + B(x)$, $W(x) = 1 + \text{erf}(x)$, $\epsilon = -\frac{1}{2} \frac{(x-x_{0i})^2}{\sigma^2}$ ¹²

$$\begin{aligned} \frac{\partial G}{\partial b_0} &= 1 & \frac{\partial G}{\partial b_1} &= x & \frac{\partial G}{\partial b_2} &= x^2 \\ \frac{\partial G}{\partial \sigma} &= \sum_{i=1}^s \alpha_i \left\{ \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \exp(\epsilon) \left[(1-\beta) \left(\frac{(x-x_{0i})^2}{\sigma^3} - \frac{1}{\sigma} \right) + \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + \frac{\beta}{\lambda} \left(\frac{x-x_{0i}}{\sigma} - \frac{\sigma}{\lambda} \right) \right] + \frac{\beta\sigma}{2\lambda^3} \exp(\xi) W(\zeta) + \frac{\gamma}{\sqrt{\pi}} \exp \left[-\frac{1}{2} \frac{(x-x_{0i})^2}{\sigma^2 \tau^2} \right] \frac{x-x_{0i}}{\sqrt{2}\sigma^2 \tau} \right\} \\ \frac{\partial G}{\partial \lambda} &= \sum_{i=1}^s \alpha_i \frac{\beta}{\lambda^2} \left[\frac{\sigma^2}{\lambda} \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \exp(\epsilon) + \frac{1}{2} \left(\frac{x_{0i}-x}{\lambda} - \frac{\sigma^2}{\lambda^2} - 1 \right) \exp(\xi) W(\zeta) \right] \\ \frac{\partial G}{\partial \beta} &= \sum_{i=1}^s \alpha_i \left[-\frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \exp(\epsilon) + \frac{1}{2\lambda} \exp(\xi) W(\zeta) \right] \\ \frac{\partial G}{\partial \gamma} &= \sum_{i=1}^s \frac{\alpha_i}{2} W \left(\frac{x_{0i}-x}{\sqrt{2}\sigma\tau} \right) \\ \frac{\partial G}{\partial \tau} &= \sum_{i=1}^s \alpha_i \frac{\gamma}{\sqrt{\pi}} \exp \left[-\frac{1}{2} \frac{(x-x_{0i})^2}{\sigma^2 \tau^2} \right] \frac{x-x_{0i}}{\sqrt{2}\sigma\tau^2} \end{aligned} \quad (4.6)$$

¹¹ La valutazione fatta variando simmetricamente il parametro nei due sensi dà un risultato più preciso: si supponga di voler valutare numericamente la derivata di una funzione $f(x)$ rispetto a x in un punto x_0 ; se supponiamo $f(x)$ esprimibile in serie di Taylor intorno a x_0 , $f(x) = f(x_0) + f'(x_0)(x-x_0) + 1/2 f''(x_0)(x-x_0)^2 + \dots$ avremo $(f(x_0 + \Delta x) - f(x_0))/\Delta x = f'(x_0) + 1/2 f''(x_0)\Delta x + \dots$ mentre $(f(x_0 + \Delta x) - f(x_0 - \Delta x))/2\Delta x = f'(x_0) + 1/3! f'''(x_0)\Delta x^2 + \dots$. Con la formula simmetrica l'errore introdotto è dell'ordine di Δx^2 ; il prezzo da pagare è di dover valutare la funzione in due punti variati per ogni derivata, anziché in uno.

¹² Si ricorda che $\frac{d}{dx} \int_a^{f(x)} g(z) dz = g(f(x)) f'(x)$.

$$\begin{aligned}\frac{\partial G}{\partial \alpha_i} &= (1 - \beta) \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \exp(\epsilon) + \frac{\beta}{2\lambda} \exp(\xi) W(\zeta) + \frac{\gamma}{2} W\left(\frac{x_{0i} - x}{\sqrt{2}\sigma\tau}\right) \\ \frac{\partial G}{\partial x_{0i}} &= \alpha_i \left\{ \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \exp(\epsilon) \left[(1 - \beta) \frac{x - x_{0i}}{\sigma^2} + \frac{\beta}{\lambda} \right] - \frac{\beta}{2\lambda^2} \exp(\xi) W(\zeta) + \right. \\ &\quad \left. + \frac{\gamma}{\sqrt{\pi}} \exp\left[-\frac{1}{2} \frac{(x - x_{0i})^2}{\sigma^2\tau^2}\right] \frac{1}{\sqrt{2}\sigma\tau} \right\}\end{aligned}$$

Come si nota, nella funzione e nelle derivate compaiono più volte le stesse strutture. All'interno di Proecm2 queste strutture, fra cui le funzioni trascendenti, sono valutate una volta sola per ogni punto di fit, allo scopo di minimizzare il tempo di calcolo. Le espressioni relative all'asimmetria e al fondo a scalino sono valutate solo quando richiesto, ossia quando β e γ sono rispettivamente diversi da 0. La funzione $\text{erf}(x)$ è stata valutata utilizzando una approssimazione numerica¹³.

4.3 La stima iniziale dei parametri

La procedura di fit non lineare richiede che ai parametri sia assegnato un valore iniziale rispetto al quale verranno valutati iterativamente gli incrementi. Tale scelta risulta particolarmente importante per la riuscita del fit: se i parametri iniziali sono abbastanza vicini ai valori 'ottimali' che saranno determinati dal fit avremo bisogno di un numero inferiore di iterazioni, e quindi avremo un vantaggio in velocità; viceversa parametri iniziali particolarmente infelici possono portare la procedura a divergere irrimediabilmente. All'interno di Proecm2 si è cercato di ottimizzare la scelta dei parametri iniziali; prima di avviare il fit l'operatore designa graficamente la zona di canali in cui avrà luogo e marca all'interno di essa le posizioni in cui ritiene si trovino i picchi. Il numero di markers inseriti corrisponde al numero di picchi su cui sarà calcolato il fit. Il programma procede quindi a valutare i valori iniziali dei parametri come segue:

- x_{0i} : le posizioni iniziali dei picchi corrispondono ai canali su cui sono stati posti i markers.
- b_0 , b_1 e b_2 : b_0 e b_1 sono valutati sulla base della retta che unisce il primo e l'ultimo canale della zona selezionata, b_2 viene posto a 0 sia che sia successivamente variato o meno.
- σ : la scelta iniziale di questo parametro è importantissima per il fit, per cui ad essa si è dedicata particolare cura. Nel caso che siano già stati fatti fit con esito positivo, viene usato il valore determinato nel fit precedente; inoltre è possibile istruire il programma in modo che tenga conto della variazione della larghezza delle righe con l'energia, eseguendo preventivamente due fit di riferimento su due righe nella parte bassa e alta dello spettro, le cui larghezze vengono usate per interpolare linearmente σ in tutto lo spettro (vedi manuale di istruzioni). Nel caso non esista un riferimento precedente, il programma sceglie fra i canali di picco selezionati quello a cui corrisponde il conteggio

¹³ Si è usata la formula 7.1.26 a pag. 299 in ABRAMOWITZ.

massimo e determina poi il primo dei canali seguenti per cui il conteggio risulta minore della metà di quello sul picco. Il confronto fra i conteggi viene fatto dopo aver sottratto il contributo del fondo lineare calcolato sulla base della stima di b_0 e b_1 , mentre la scelta del lato destro del picco tende a minimizzare l'effetto di una eventuale asimmetria. Il doppio della differenza fra il canale del picco e quello più a destra viene presa come stima della larghezza totale a metà altezza (*full width at half maximum* o FWHM), che, per una gaussiana pura, è legata a σ dalla relazione $FWHM = 2\sqrt{2\log 2}\sigma$.

- λ : la stima di questo parametro è basata su quella di σ ; il valore iniziale viene dato da $\lambda = 2\sigma$.
- β : qualora si desideri un fit con righe asimmetriche è necessario che il valore iniziale di β sia diverso da 0, altrimenti la derivata $\frac{\partial G}{\partial \lambda}$ in (4.6) risulta sempre nulla e il fit non dà informazione su λ . Il valore iniziale è scelto sulla base dell'espressione $\beta = 0.1 \cdot \lambda$. Questo valore risulta empiricamente corretto per la maggior parte delle righe con cui abbiamo a che fare; in linea di principio sarebbe possibile una valutazione più accurata del valore iniziale di β e λ partendo dai dati, con procedure del tipo di quella usata per σ , ma questo metodo funzionerebbe esclusivamente nel caso di righe ben separate, e quindi non si è ritenuto opportuno implementarlo.
- γ : qualora si voglia introdurre il fondo a scalino, occorre fornire un valore iniziale non nullo, come per β . Empiricamente è stato scelto $\gamma = 0.01$.
- τ : come già accennato, questo parametro è di norma fissato a 1.

4.4 Errori sui dati e pesi

L'espressione (1.1) contiene al denominatore, come pesi, gli errori statistici sui dati sperimentali, ossia le *standard deviations* della distribuzione di ciascun y_i . In realtà questi valori non sono noti ma solo stimabili in qualche modo dagli y_i stessi. In generale negli spettri che si ricavano dalle misure nucleari possiamo supporre che gli y_i siano indipendenti e distribuiti secondo la statistica di Poisson¹⁴; dovendo stimare la media e la standard deviation della popolazione associata a ciascun canale dal conteggio sperimentale, dovremmo come noto¹⁵ usare rispettivamente i conteggi y_i e le radici quadrate $\sqrt{y_i}$. Quando gli y_i sono sufficientemente grandi (almeno $y_i > 10$) le relative distribuzioni di Poisson tendono a diventare gaussiane, quindi simmetriche, la (1.1) è con buona approssimazione distribuita secondo la statistica di χ^2 , e valgono tutti i presupposti per il metodo dei minimi quadrati. Viceversa quando gli y_i sono piccoli o addirittura nulli le distribuzioni sono fortemente asimmetriche, stimare i pesi dalla radice quadrata del conteggio (ossia dalla stima della standard deviation) ha poco o, nel caso di conteggio 0, nessun senso (la 1.1 diverge!). Se

¹⁴ In alcuni testi di statistica si afferma che i canali di un istogramma seguono una distribuzione multinomiale, ma questo è vero nel caso che si sia raccolto un numero prefissato di dati distribuiti in modo continuo e si siano poi divisi in categorie, i canali dell'istogramma, mentre le misure di spettroscopia nucleare sono generalmente misure a tempo dove anche il numero totale di eventi è una variabile casuale.

¹⁵ Cfr. BRANDT pag. 47.

vogliamo quindi usare la (1.1) come base del nostro fit in ogni caso, dovremo trattare correttamente i pesi al denominatore.

All'interno di Proecm2 sono possibili due opzioni per l'attribuzione dei pesi:

- a- i pesi sono semplicemente presi uguali alla radice dei conteggi, e quindi al denominatore avremo $\sigma_i^2 = y_i$; nel caso di conteggi nulli, per evitare la divergenza, si assume convenzionalmente un peso pari a 1.
- b- i pesi sono valutati non dal conteggio ma dal valore della funzione di fit, ossia avremo $\sigma_i^2 = f(x_i, \mathbf{p})$. Naturalmente, al primo passo la funzione di fit non è nota con sufficiente precisione dalla stima iniziale dei parametri, e quindi alla prima iterazione viene usato comunque il metodo a.

Per confrontare i risultati con i due metodi, sono stati condotti tests in cui veniva effettuato il fit di spettri 'artificiali' costruiti generando conteggi casuali, con statistica di Poisson, basati su un picco gaussiano e un fondo dati. Ne è risultato che il primo metodo converge più velocemente ma può dare valori meno precisi nel caso di bassa statistica. I risultati del secondo metodo, in questi casi, si avvicinano maggiormente al valore aspettato, ma questo avviene a spese di una convergenza più lenta o addirittura di qualche difficoltà a raggiungere il minimo finale. Va detto che, in ogni caso, i risultati di entrambi i metodi sono compatibili entro gli errori con i valori aspettati¹⁶ che le differenze tendono a scomparire del tutto via via che cresce la statistica. Pertanto, si consiglia di partire in generale con il metodo a, eventualmente passando al metodo b, per avere un confronto, nei casi di bassa statistica. Così facendo otterremo anche il vantaggio di iniziare il fit più delicato già con una buona stima iniziale dei parametri.

4.5 Correzione per la larghezza finita dei canali

In prima approssimazione possiamo pensare che la funzione di fit vada adattata, canale per canale, ai conteggi rispettivi, ma se pensiamo meglio dobbiamo convenire che il contenuto di canale rappresenta *l'integrale* della funzione in una zona di ampiezza unitaria e quindi è questo integrale I che dobbiamo confrontare con il contenuto di canale. Trattandosi di una correzione, la valuteremo al primo ordine significativo; ciò si può effettuare considerando la funzione sviluppata in serie di potenze fino al secondo ordine nel centro del canale. Corrispondentemente l'integrale I vale

$$\begin{aligned}
 I &= \int_{x_0-1/2}^{x_0+1/2} f(x) dx \\
 &\simeq \int_{x_0-1/2}^{x_0+1/2} [f(x_0) + f'(x_0)(x - x_0) + \frac{1}{2}f''(x_0)(x - x_0)^2] dx = f(x_0) + \frac{1}{24}f''(x_0)
 \end{aligned}
 \tag{4.7}$$

Questa correzione è quindi sostanzialmente sensibile solo nei punti dove il raggio di cur-

¹⁶ Una differenza dell'ordine di 2σ si è verificata nel fit di una riga con FWHM $\simeq 4$, area = 100 e fondo nullo.

vatura della funzione è particolarmente stretto, come in corrispondenza dei massimi dei picchi. Essa può essere attivata all'interno di Proecm2: il prezzo è un tempo di calcolo leggermente più lungo e una maggiore probabilità di divergenze. Per quanto riguarda i risultati, negli esperimenti fatti le differenze, quando erano visibili, sono sempre state ampiamente entro gli errori.

Bibliografia

- SIEGMUND BRANDT: *Statistical and Computational Methods in Data Analysis* North-Holland Publ. Comp., Amsterdam 1970.
- PHILIP R. BEVINGTON: *Data Reduction and Error Analysis for the Physical Sciences* Mc. Graw-Hill, New York 1969.
- ROSENFELD ET AL.: Rev. Mod. Phys. **33** 1, 1967.
- KENNETH LEVENBERG: *A Method for the Solution of Certain Problems in Least Squares*. Quart. Appl. Math. 2, 164-168, 1944.
- DONALD W. MARQUARDT: *An algorithm for least-squares estimation of non-linear parameters*, J. Soc. Ind. Appl. Math. **11** n° 2 pagg. 431-441 June 1963.
- M. ABRAMOWITZ AND I. A. STEGUN (ed.) *Handbook of Mathematical Functions*, Dover, New York 1972.