

Fit non lineare di funzioni esplicite con errori anche sulla variabile indipendente

In questa piccola dispensa viene spiegato come il metodo di fit introdotto da Levenberg [4] e Marquardt [5] possa essere esteso anche ai casi in cui i dati a cui si vuole adattare una funzione esplicita $y = f(x)$ hanno errori non trascurabili su entrambe le variabili. Il testo non richiede particolari nozioni oltre alla conoscenza dell'analisi matematica e dell'algebra lineare a livello elementare, ma, per coloro che non hanno sufficiente esperienza di fit con il metodo dei "minimi quadrati", si consiglia la lettura preventiva dei primi 3 paragrafi della dispensa [1].

Consideriamo il caso di una grandezza fisica y legata a una grandezza x tramite una relazione esplicita del tipo

$$y = f(x, \mathbf{p}) \quad (1)$$

dove \mathbf{p} rappresenta un vettore di r parametri (p_1, p_2, \dots, p_r) . Supponiamo di disporre di n ($n > r$) misure di coppie corrispondenti (x_i, y_i) , che costituiscano $2n$ variabili indipendenti, con standard deviation (note o stimate) $(\sigma_{x_i}, \sigma_{y_i})$. Supponiamo inoltre che le x_i e y_i siano distribuite in modo gaussiano.

Il nostro scopo è determinare i parametri \mathbf{p} in modo da ottenere *il migliore* accordo fra la funzione e le grandezze misurate. Non esiste una definizione completamente univoca di quale sia il migliore accordo, ma nelle condizioni date è opportuno adottare come criterio quello di minimizzare la somma dei quadrati delle distanze fra i punti sperimentali e la funzione, pesate con il reciproco degli errori corrispondenti. Nel caso più semplice e noto, in cui si possono trascurare gli errori sulle x_i , questo porta a minimizzare il χ^2 definito come

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

Nel nostro caso occorre tenere presente che anche le ascisse sono affette da errore e la (2) si può estendere come segue. Per ogni punto sperimentale (x_i, y_i) sul piano cartesiano, consideriamo un punto $\tilde{x}_i, f(\tilde{x}_i, \mathbf{p})$ sulla curva rappresentata dalla funzione.

In analogia alla (2), in questo caso possiamo minimizzare la somma dei quadrati delle distanze fra il punto sperimentale e il punto più vicino sulla curva, in cui le componenti x e y sono pesate secondo il reciproco degli errori corrispondenti:

$$\chi^2 = \sum_{i=1}^n \frac{[x_i - \tilde{x}_i]^2}{\sigma_{x_i}^2} + \frac{[y_i - f(\tilde{x}_i, \mathbf{p})]^2}{\sigma_{y_i}^2} \quad (3)$$

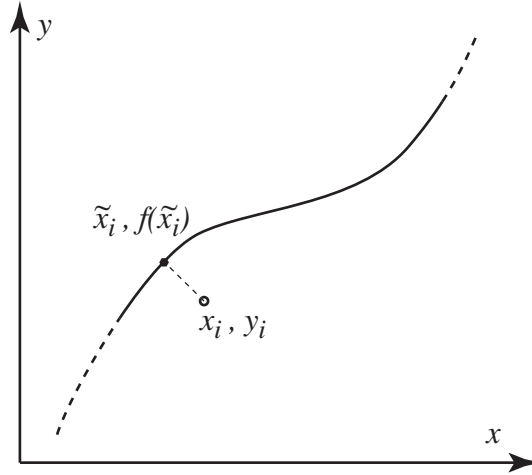


Fig.1: Ricerca dell'accordo fra funzione e dati sperimentali in corrispondenza di un punto.

Sulla (3) è opportuno fare qualche considerazione:

1. La minimizzazione dell'espressione viene fatta rispetto agli r parametri, ma per ogni punto x_i occorre determinare il corrispondente \tilde{x}_i per cui, a parità di parametri, si minimizza la "distanza". Dovremo quindi minimizzare rispetto a $r + n$ variabili.
2. Se sono rispettate le condizioni di indipendenza e distribuzione gaussiana enunciate sopra, la quantità indicata come χ^2 è proporzionale, con segno negativo e a meno di termini additivi costanti, al logaritmo della densità cumulativa di probabilità (a posteriori) delle $2n$ variabili casuali x_i e y_i . Minimizzare la (3) quindi corrisponde a una ricerca di massima verosimiglianza (maximum likelihood), uno dei criteri più generali per l'adattamento di parametri.
3. Sempre nelle predette condizioni, l'espressione (3) è distribuita effettivamente secondo la statistica di χ^2 , con un numero di gradi di libertà pari alla differenza fra il numero di variabili indipendenti, $2n$, e il numero di parametri adattati, $n + r$, ossia $n - r$.

Il minimo si potrebbe determinare risolvendo il sistema di $n + r$ equazioni:

$$\begin{cases} \frac{\partial \chi^2}{\partial \tilde{x}_i} = 0 & 1 \leq i \leq n \\ \frac{\partial \chi^2}{\partial p_k} = 0 & 1 \leq k \leq r \end{cases} \quad (4)$$

Il sistema (4) è costituito da equazioni non lineari e non si presta ad essere risolto direttamente. Si può pensare di estendere a questo caso il metodo di Levenberg–Marquardt e operare nello stesso modo. Si sviluppa la funzione $f(\tilde{x}_i, \mathbf{p})$ al primo ordine rispetto a \tilde{x}_i e ai parametri, intorno a un set di valori dati \tilde{x}_{0i} , \mathbf{p}_0

$$f(\tilde{x}_i, \mathbf{p}) \simeq f(\tilde{x}_{0i}, \mathbf{p}_0) + \left. \frac{\partial f(x, \mathbf{p})}{\partial x} \right|_{\substack{x=\tilde{x}_{0i} \\ \mathbf{p}=\mathbf{p}_0}} \xi_i + \sum_{j=1}^r \left. \frac{\partial f(x, \mathbf{p})}{\partial p_j} \right|_{\substack{x=\tilde{x}_{0i} \\ \mathbf{p}=\mathbf{p}_0}} \theta_j \quad (5)$$

dove $\xi_i = \tilde{x}_i - \tilde{x}_{0i}$ e $\theta_j = p_j - p_{0j}$. Il procedimento di fit consiste nel partire da un set di valori iniziali per \tilde{x}_{0i} e p_{0j} (per quanto riguarda gli \tilde{x}_{0i} , una scelta ragionevole è $\tilde{x}_{0i} = x_i$, per i parametri occorre trovare un metodo di stima iniziale a seconda dei casi), minimizzare il χ^2 rispetto alle variabili ξ_i e θ_j , aggiornare i valori d'ingresso $\tilde{x}'_{0i} = \tilde{x}_{0i} + \xi_i$, $p'_{0j} = p_{0j} + \theta_j$ sommando i rispettivi incrementi e procedere iterativamente a minimizzare l'espressione finché il suo valore si stabilizza.

Cerchiamo di ricavare esplicitamente la forma delle equazioni che intervengono a ogni passo dell'iterazione. Per semplicità di notazione indichiamo

$$\begin{aligned} f(\tilde{x}_{0i}, \mathbf{p}_0) &= f_i \\ \left. \frac{\partial f(x, \mathbf{p})}{\partial x} \right|_{\substack{x=\tilde{x}_{0i} \\ \mathbf{p}=\mathbf{p}_0}} &= f'_i \\ \left. \frac{\partial f(x, \mathbf{p})}{\partial p_j} \right|_{\substack{x=\tilde{x}_{0i} \\ \mathbf{p}=\mathbf{p}_0}} &= A_{ij} \end{aligned} \quad (6)$$

Corrispondentemente la (3) diventa

$$\chi^2 = \sum_{i=1}^n \frac{[x_i - \tilde{x}_{0i} - \xi_i]^2}{\sigma_{x_i}^2} + \frac{[y_i - f_i - f'_i \xi_i - \sum_{j=1}^r A_{ij} \theta_j]^2}{\sigma_{y_i}^2} \quad (7)$$

Alcuni termini della (7) possono essere direttamente interpretati come elementi di vettori o matrici: è conveniente per la compattezza dei calcoli riscrivere tutta l'espressione in forma vettoriale-matriciale, il che può essere fatto con le sostituzioni indicate nella tabella seguente:

Variabile	Dimensioni	Definizione
h	$n \times 1$	$h_i = x_i - \tilde{x}_{0i}$
ξ	$n \times 1$	ξ_i
c	$n \times 1$	$c_i = y_i - f_i$
θ	$r \times 1$	θ_j
A	$n \times r$	$A_{ij} = \left. \frac{\partial f(x, \mathbf{p})}{\partial p_j} \right _{\substack{x=\tilde{x}_{0i} \\ \mathbf{p}=\mathbf{p}_0}}$
F'	$n \times n$	$F'_{ij} = \delta_{ij} f'_i$
G^x	$n \times n$	$G^x_{ij} = \delta_{ij} \frac{1}{\sigma_{x_i}^2}$
G^y	$n \times n$	$G^y_{ij} = \delta_{ij} \frac{1}{\sigma_{y_i}^2}$
G^s	$n \times n$	$G^s_{ij} = \delta_{ij} \frac{1}{\sigma_{y_i}^2 + f'^2_i \sigma_{x_i}^2}$

Utilizzando le nuove variabili la (7) può essere scritta come

$$\chi^2 = (\mathbf{h} - \boldsymbol{\xi})^t G^x (\mathbf{h} - \boldsymbol{\xi}) + (\mathbf{c} - F' \boldsymbol{\xi} - A\boldsymbol{\theta})^t G^y (\mathbf{c} - F' \boldsymbol{\xi} - A\boldsymbol{\theta}) \quad (8)$$

dove l'operatore t indica trasposizione. Possiamo calcolare le derivate parziali di χ^2 rispetto agli elementi di $\boldsymbol{\xi}$ e $\boldsymbol{\theta}$ sotto forma di due vettori, di dimensioni rispettive n e r

$$\begin{aligned} \frac{\partial \chi^2}{\partial \boldsymbol{\xi}} &= -2G^x (\mathbf{h} - \boldsymbol{\xi}) - 2F' G^y (\mathbf{c} - F' \boldsymbol{\xi} - A\boldsymbol{\theta}) \\ \frac{\partial \chi^2}{\partial \boldsymbol{\theta}} &= -2A^t G^y (\mathbf{c} - F' \boldsymbol{\xi} - A\boldsymbol{\theta}) \end{aligned} \quad (9)$$

Nel fare i calcoli si è utilizzata la formula $\frac{d}{dx}(f(x) \cdot g(x)) = f'(x)g(x) + f(x)g'(x)$, tenendo conto che in questo caso i due termini danno lo stesso risultato, e si è considerato che la trasposta di una matrice diagonale coincide con la matrice stessa. Per la minimizzazione entrambe le (9) devono essere ugagliate a 0. Dalla prima otteniamo

$$G^x (\mathbf{h} - \boldsymbol{\xi}) + F' G^y (\mathbf{c} - F' \boldsymbol{\xi} - A\boldsymbol{\theta}) = 0 \quad \text{da cui} \quad (G^x + F' G^y F') \boldsymbol{\xi} = G^x \mathbf{h} + F' G^y (\mathbf{c} - A\boldsymbol{\theta}) \quad (10)$$

La matrice che moltiplica $\boldsymbol{\xi}$ è diagonale e si può scrivere come

$$(G^x + F' G^y F')_{ij} = \delta_{ij} \left(\frac{1}{\sigma_{x_i}^2} + \frac{f_i'^2}{\sigma_{y_i}^2} \right) \quad \text{da cui} \quad (G^x + F' G^y F') = G^x G^y (G^s)^{-1} \quad (11)$$

La (10) si può risolvere rispetto a $\boldsymbol{\xi}$

$$\boldsymbol{\xi} = \left[G^x G^y (G^s)^{-1} \right]^{-1} [G^x \mathbf{h} + F' G^y (\mathbf{c} - A\boldsymbol{\theta})] = G^s (G^y)^{-1} \mathbf{h} + G^s (G^x)^{-1} F' (\mathbf{c} - A\boldsymbol{\theta}) \quad (12)$$

Nell'ultimo passaggio si è tenuto conto del fatto che se A e B sono matrici quadrate invertibili $(AB)^{-1} = B^{-1}A^{-1}$ e del fatto che un prodotto di matrici diagonali non cambia se si altera l'ordine dei fattori. La seconda delle (9) produce l'equazione

$$A^t G^y (\mathbf{c} - F' \boldsymbol{\xi} - A\boldsymbol{\theta}) = 0 \quad (13)$$

Possiamo sostituire nella (13) la soluzione (12) trovata per $\boldsymbol{\xi}$ e abbiamo

$$A^t G^y \left(\mathbf{c} - F' G^s (G^y)^{-1} \mathbf{h} - F' G^s (G^x)^{-1} F' \mathbf{c} + F' G^s (G^x)^{-1} F' A\boldsymbol{\theta} - A\boldsymbol{\theta} \right) = 0 \quad (14)$$

ossia

$$A^t G^y \left(I - F' G^s (G^x)^{-1} F' \right) A\boldsymbol{\theta} = A^t G^y \left[\left(I - F' G^s (G^x)^{-1} F' \right) \mathbf{c} - F' G^s (G^y)^{-1} \mathbf{h} \right] \quad (15)$$

dove I rappresenta la matrice identità. Consideriamo adesso il gruppo $I - F' G^s (G^x)^{-1} F'$, che costituisce una matrice diagonale

$$\left(I - F' G^s (G^x)^{-1} F' \right)_{ij} = \delta_{ij} \left(1 - \frac{f_i'^2 \sigma_{x_i}^2}{\sigma_{y_i}^2 + f_i'^2 \sigma_{x_i}^2} \right) \quad (16)$$

da cui si ricava immediatamente

$$I - F' G^s (G^x)^{-1} F' = (G^y)^{-1} G^s \quad (17)$$

Introducendo la (17) nella (15) l'equazione si semplifica in

$$A^t G^s A \boldsymbol{\theta} = A^t G^s (\mathbf{c} - F' \mathbf{h}) \quad (18)$$

La (18) è perfettamente analoga alla (2.2) in [1]. Le differenze consistono nella presenza del termine $F' \mathbf{h}$ e nel fatto che la matrice di pesi è adesso G^s . La forma di G^s porta ad affermare che gli errori sulle x_i sono stati aggiunti a quelli sulle y_i tenendo conto della pendenza locale della curva. Le (18) costituiscono un sistema di r equazioni in r incognite nella forma

$$\begin{aligned} \sum_{j=1}^r \sum_{i=1}^n \left[\frac{\left. \frac{\partial f(x, \mathbf{p})}{\partial p_k} \right|_{x=\tilde{x}_{0i}, \mathbf{p}=\mathbf{p}_0}}{\left. \frac{\partial f(x, \mathbf{p})}{\partial p_j} \right|_{x=\tilde{x}_{0i}, \mathbf{p}=\mathbf{p}_0}} \frac{\left. \frac{\partial f(x, \mathbf{p})}{\partial p_j} \right|_{x=\tilde{x}_{0i}, \mathbf{p}=\mathbf{p}_0}}{2} \right] \theta_j = \\ = \sum_{i=1}^n \frac{\left[y_i - f(\tilde{x}_{0i}, \mathbf{p}_0) - \left. \frac{\partial f(x, \mathbf{p})}{\partial x} \right|_{x=\tilde{x}_{0i}, \mathbf{p}=\mathbf{p}_0} (x_i - \tilde{x}_{0i}) \right] \left. \frac{\partial f(x, \mathbf{p})}{\partial p_k} \right|_{x=\tilde{x}_{0i}, \mathbf{p}=\mathbf{p}_0}}{\sigma_{y_i}^2 + \left(\left. \frac{\partial f(x, \mathbf{p})}{\partial x} \right|_{x=\tilde{x}_{0i}, \mathbf{p}=\mathbf{p}_0} \right)^2 \sigma_{x_i}^2} \quad 1 \leq k \leq r \end{aligned} \quad (19)$$

Il sistema può essere risolto invertendo la matrice come nella (1.7) di [1]. Una volta determinato il vettore $\boldsymbol{\theta}$ degli incrementi dei parametri, si calcola con la (12) il vettore $\boldsymbol{\xi}$ degli incrementi alle ascisse sulla curva \tilde{x}_i . Gli incrementi si aggiungono alle variabili corrispondenti e si itera la minimizzazione a partire dai nuovi valori. Il procedimento è soggetto a passi divergenti esattamente come spiegato in [1] per il caso con errori solo sulle y_i : possiamo utilizzare ancora l'algoritmo di Levenberg-Marquardt, ossia moltiplicare i termini diagonali della matrice che opera su $\boldsymbol{\theta}$ al primo membro della (18) per un fattore $1 + \lambda$. Anche in questo caso il fattore λ viene scelto inizialmente, come valore tipico, pari a 10^{-3} e quindi diminuito di un ordine di grandezza ad ogni passo convergente e aumentato ad ogni passo divergente. Se ci mettiamo nel caso estremo $\lambda \gg 1$ per cui gli elementi diagonali della matrice in (19) sono dominanti, il metodo diventa praticamente una ricerca lungo il gradiente di χ^2 , in cui gli spostamenti risultano ridotti di un fattore $1 + \lambda$ rispetto a quelli che risulterebbero da un metodo iterativo al primo ordine, come

quello delle “tangenti di Newton”. In coerenza con questo, si dividono per un fattore $1 + \lambda$ anche gli incrementi ξ_i .

Vogliamo infine determinare la matrice di covarianza dei parametri di fit. Come spiegato in [1], questa corrisponde alla matrice di covarianza dei θ_j determinati nell’ultimo passo dell’iterazione. Calcoliamo il vettore $\boldsymbol{\theta}$ dalla (18)

$$\boldsymbol{\theta} = (A^t G^s A)^{-1} A^t G^s (\mathbf{c} - F' \mathbf{h}) \quad (20)$$

Utilizziamo ancora la formula di trasformazione della matrice di covarianza data in [2] a pag. 32: se $\mathbf{y} = M\mathbf{x}$, allora $C_{\mathbf{y}} = M C_{\mathbf{x}} M^t$. Il vettore iniziale, $\mathbf{c} - F' \mathbf{h}$, contiene nei due termini rispettivamente le grandezze y_i e x_i affette da errori statistici. Data l’indipendenza delle variabili, si può dire immediatamente, con una normale propagazione quadratica, che

$$(C_{\mathbf{c}-F'\mathbf{h}})_{ij} = \delta_{ij}(\sigma_{y_i}^2 + f_i'^2 \sigma_{y_i}^2) \quad \text{ossia} \quad C_{\mathbf{c}-F'\mathbf{h}} = (G^s)^{-1} \quad (21)$$

Corrispondentemente

$$C_{\boldsymbol{\theta}} = (A^t G^s A)^{-1} A^t G^s (G^s)^{-1} \left[(A^t G^s A)^{-1} A^t G^s \right]^t \quad (22)$$

Svolgendo i calcoli e considerando che il gruppo $A^t G^s A$ e il suo inverso sono matrici simmetriche si ha

$$\begin{aligned} C_{\boldsymbol{\theta}} &= (A^t G^s A)^{-1} A^t G^s (G^s)^{-1} G^s A (A^t G^s A)^{-1} = \\ &= (A^t G^s A)^{-1} \end{aligned} \quad (23)$$

Analogamente al caso trattato in [1], la matrice di correlazione dei parametri corrisponde alla matrice inversa che si usa nella risoluzione del sistema.

Un caso particolare: la regressione lineare

La regressione lineare, ossia il fit con il metodo del minimo di χ^2 su una retta, è un procedimento usato molto spesso, per cui diamo di seguito le formule esplicite. La nostra funzione sia $y = ax + b$ e indichiamo con θ_a e θ_b gli incrementi dei parametri. Il sistema di equazioni (19) diventa

$$\begin{cases} \sum_{i=1}^n \frac{\tilde{x}_{0i}^2}{\sigma_{t_i}^2} \theta_a + \sum_{i=1}^n \frac{\tilde{x}_{0i}}{\sigma_{t_i}^2} \theta_b = \sum_{i=1}^n \frac{[y_i - ax_i - b] \tilde{x}_{0i}}{\sigma_{t_i}^2} \\ \sum_{i=0}^n \frac{\tilde{x}_{0i}}{\sigma_{t_i}^2} \theta_a + \sum_{i=0}^n \frac{1}{\sigma_{t_i}^2} \theta_b = \sum_{i=1}^n \frac{y_i - ax_i - b}{\sigma_{t_i}^2} \end{cases} \quad (24)$$

dove $\sigma_{t_i}^2 = \sigma_{y_i}^2 + a^2 \sigma_{x_i}^2$.

Una volta calcolati dal sistema gli incrementi dei parametri θ_a e θ_b , si possono calcolare gli incrementi ξ_i degli \tilde{x}_{0i} dalla (12)

$$\xi_k = \frac{\sigma_{y_k}^2 (x_k - \tilde{x}_{0k}) + \sigma_{x_k}^2 a [y_k - (a + \theta_a) \tilde{x}_{0k} - (b + \theta_b)]}{\sigma_{t_k}^2} \quad 1 \leq k \leq n \quad (25)$$

Per determinare i valori finali dei parametri si deve quindi:

1. Determinare dei valori iniziali approssimati per a e b . Ciò può essere fatto da una coppia di dati o applicando una regressione lineare iniziale in cui si trascurano gli errori sulle x_i , per cui il risultato non richiede né la stima di valori iniziali né un procedimento iterativo.
2. Porre inizialmente gli \tilde{x}_{0i} pari agli x_i .
3. Calcolare i termini del sistema lineare (24) e risolverlo per θ_a e θ_b .
4. Calcolare gli incrementi ξ_i dei valori \tilde{x}_{0i} .
5. Applicare gli incrementi trovati ad a , b e agli \tilde{x}_{0i} e ripetere i passi da 3 a 5 calcolando ad ogni iterazione il nuovo valore di χ^2 e controllando che diminuisca. L'iterazione termina quando la diminuzione relativa di χ^2 risulta più piccola di un valore prefissato. Per evitare gli effetti di eventuali passi divergenti, usare il metodo di L-M, come spiegato sopra.

Infine, se si vuole fare un fit a un'ipotesi di proporzionalità, ossia considerando come funzione una retta $y = ax$ passante per'origine, le formule risolutive diventano

$$\sum_{i=1}^n \frac{\tilde{x}_{0i}^2}{\sigma_{t_i}^2} \theta_a = \sum_{i=1}^n \frac{[y_i - ax_i] \tilde{x}_{0i}}{\sigma_{t_i}^2} \quad (26)$$

da cui si ricavano immediatamente gli incrementi θ_a , mentre la formula per gli incrementi ξ_k si riduce a

$$\xi_k = \frac{\sigma_{y_k}^2 (x_k - \tilde{x}_{0k}) + \sigma_{x_k}^2 a [y_k - (a + \theta_a) \tilde{x}_{0k}]}{\sigma_{t_k}^2} \quad 1 \leq k \leq n \quad (27)$$

È da notare, e si può facilmente verificare, che anche per la regressione lineare, la quale in assenza di errori sulle x_i potrebbe essere calcolata senza bisogno di procedimenti iterativi, la linearizzazione (5) risulta necessaria, in quanto in assenza di essa si avrebbero comunque equazioni non facilmente risolvibili.

Bibliografia

1. ANDREA PEREGO: *Il fit non lineare del programma di acquisizione "Proecm2"*, dispensa didattica del Corso di Laurea in Fisica dell'Università di Firenze, reperibile al sito <http://homepage.mac.com/spiderbat>.
2. SIEGMUND BRANDT: *Statistical and Computational Methods in Data Analysis* North-Holland Publ. Comp., Amsterdam 1970.

3. PHILIP R. BEVINGTON: *Data Reduction and Error Analysis for the Physical Sciences* Mc. Graw-Hill, New York 1969.
4. KENNETH LEVENBERG: *A Method for the Solution of Certain Problems in Least Squares*. Quart. Appl. Math. 2, 164-168, 1944.
5. 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.