

---

# METODI STATISTICI E COMPUTAZIONALI

---

Stefania Spagnolo

*Dipartimento di Matematica e Fisica, Univ. del Salento*



---

# LEZIONE 9-BIS

---

---

# ANALISI MULTIVARIATA E REGRESSIONE

---

Testi:

*Dispense* M. Marchetti Università Di Firenze “**Introduzione all’analisi dei dati multivariati**”

(<http://local.disia.unifi.it/rampichini/intro.pdf>)

H.J.C. Berendens “Data and Error Analysis”

# ANALISI MULTIVARIATA

- Col termine ***analisi multivariata*** si indica quell'insieme di metodi statistici usati per analizzare simultaneamente più caratteri.
- In tutte le analisi statistiche multivariate il materiale grezzo è costituito da un certo numero di eventi (osservazioni) che si vogliono studiare simultaneamente.
- In alcuni casi si cercano correlazioni relazioni funzionali tra gruppi di variabili (***regressione***)
- In altri casi ancora si può essere interessati a ridurre le dimensioni della variabile multipla considerata (identificazione delle ***componenti principali***).
- In alcuni casi l'obiettivo dell'analisi è semplicemente quello di classificare gli eventi sulla base di tutte le variabili considerate (***classificazione***).
- L'analisi multivariata è comunemente usata in fisica e inconsapevolmente ne avete già fatto uso. La regressione è un esempio di analisi multivariata

# ANALISI MULTIVARIATA

- Spesso in fisica si ha a che fare un insieme di punti sperimentali  $(x_i, y_i)$  e la necessità di identificare la legge che lega  $y_i$  a  $x_i$ .
- Questo problema non sempre è trattabile in maniera semplice:
  - la relazione tra queste misure  $y=f(x)$  può non essere nota oppure più di una  $f(x)$  sembra adeguata, quale scegliere.
- La  $f(x)$  tipicamente dipenderà da parametri non noti che devono essere determinati a partire dalle misure sperimentali. Come si può fare a scegliere tra le diverse  $f(x)$ ? È sufficiente stimare quanto vicino la  $f(x)$  passa ai punti?

# REGRESSIONE

- Supponiamo di avere  $n$  coppie di dati  $x_i$  (note con errori trascurabili) e  $y_i$  le quali hanno errori  $\sigma$  e supponiamo che le le variabili  $x$  e  $y$  siano legate dalla relazione:  $y=f(x,\lambda)$  dove  $\lambda$  è un parametro incognito.
- La probabilità che dato un certo  $x$  si ottenga un certo  $y$  è una probabilità condizionata ad una particolare scelta di  $\lambda$ . Si può valutare cioè per un fissato  $\lambda$  la probabilità di ottenere una particolare coppia di  $x$  e  $y$ :
  - $P(x_i, y_i ; \lambda)$
- Se ipotizzo che le misure fluttuino in maniera gaussiana allora:

$$P(x_i, y_i; \lambda) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} e^{-\frac{(y_i - f(x_i; \lambda))^2}{2\sigma^2}}$$

- Il che equivale a supporre a supporre che:  $y_i = f(x_i; \lambda) + \epsilon_i$  dove gli  $\epsilon_i$  sono gli errori di misura distribuiti gaussianamente attorno a valore medio 0

# REGRESSIONE

- Applicando il metodo di massima verosimiglianza si arriva al metodo dei minimi quadrati.

$$L = \left( \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \right)^n \prod_{i=1}^n \left( \frac{1}{\sigma_i} \right) \prod_{i=1}^n e^{-\frac{(y_i - f(x_i, \lambda))^2}{2\sigma_i^2}}$$

Calcolando il logaritmo

$$\ln(L) = \text{cost.} + \sum_{i=1}^n -\frac{(y_i - f(x_i, \lambda))^2}{2\sigma_i^2}$$

- **Massimizzare la likelihood equivale a minimizzare il  $\chi^2$**

$$\sum_{i=1}^n \frac{(y_i - f(x_i, \lambda))^2}{2\sigma_i^2} = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \frac{(y_i - f(x_i, \lambda))^2}{\sigma_i^2} = \frac{1}{2} \chi^2$$

Variabile aleatoria che si distribuisce come un  $\chi^2$

- Se interpretiamo L come la probabilità che il particolare set di misure  $(\mathbf{x}, \mathbf{y})$  per un dato valore di  $\lambda$  si verifichi, questa è una  $P(\lambda | \mathbf{x}, \mathbf{y})$  per quel particolare set e ha una distribuzione del tipo:

$$P(\lambda | \mathbf{x}, \mathbf{y}) \sim \exp \left[ -\frac{1}{2} \chi^2(\lambda) \right]$$

# REGRESSIONE

- Se gli errori sulle misure  $x_i$  non sono trascurabili posso usare lo stesso formalismo, ma le  $\sigma_i$  che compaiono nell'espressione non saranno coincidenti con le  $\sigma(y_i)$  (errori della sola variabile  $y$ ) ma dovranno rappresentare anche l'incertezza sulle  $x_i$

$$\varepsilon_i = y_i - f(x_i, \lambda)$$

Sviluppando fino al primo ordine

$$\sigma_i^2 = \sigma_{y_i}^2 + \sigma_{x_i}^2 \left( \frac{\partial f}{\partial x} \right)_{x=x_i}^2$$

- Il caso più semplice da trattare è il caso in cui la dipendenza dai parametri della
- funzione  $f(x)$  è di tipo lineare  $y_i = \sum_{i=0}^k \lambda_i x_i$
- In questo caso è possibile risolvere analiticamente il problema della determinazione del minimo della funzione  $S$  introdotta in precedenza. Nel caso di dipendenze non lineari si cerca di linearizzarla altrimenti la soluzione numerica è spesso l'unica possibile.

# REGRESSIONE - TOY MC

- Ipotizziamo che tra due variabili esiste una relazione lineare del tipo  $y=5x+2$  che rappresenta un certo processo fisico che stiamo studiando. Assumiamo di disporre di 10 misure sperimentali.
- Predisponiamo un Toy Monte Carlo che ci permetta di simulare l'esperimento. Il Toy Monte Carlo ci permetterà di valutare le varie situazioni possibili e come queste influenzano l'analisi e il processo di adattamento dei dati alla f
  - Errori su x trascurabili, errori su y importanti
  - Errori su y trascurabili, errori su x importanti
  - Errori importanti su x e su y
  - Incertezza sperimentali
    - stimati correttamente
    - sottostimati
    - sovrastimata

# REGRESSIONE - TOY MC

```

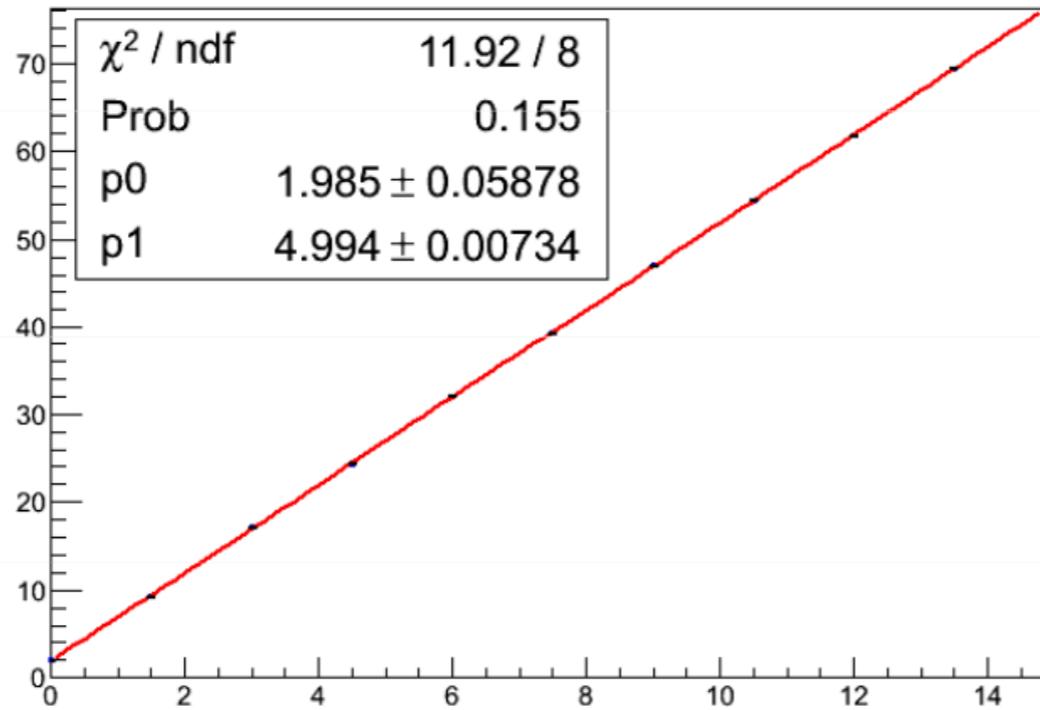
TRandom R(1234567);
double xTrue[NMISURE], x[NMISURE];
double yTrue[NMISURE], y[NMISURE];
double ex[NMISURE], ey[NMISURE];
double stepX=1.5;
for (int i=0; i<NMISURE; i++) {
// questi sono i valori "veri" del processo fisico
    xTrue[i]=i*stepX;
    yTrue[i]=5*xTrue[i]+2;
// assume che gli errori di misura sulla y
// siano distribuiti gaussianamente con sigma=0.1
    double eps=R.Gaus(0,0.1);
// questo e' il valore misurato.
    y[i]=yTrue[i]+eps;
// Errori sulle x nulli e sulle y sempre uguali a 1, 0.1, 0.01
    ex[i]=0;
    ey[i]=1;
}

```

- NMISURE è il numero di coppie di punti di cui si dispone (10 nel nostro caso).
- I vettori xTrue e yTrue contengono i valori “veri” del processo sotto analisi.
- I vettori x e y contengono i valori “misurati” delle due grandezze.
- I vettori ex e ey contengono la nostra stima delle incertezze statistiche su ogni misura

# REGRESSIONE - TOY MC

Y vs X errori solo Y



## Configurazione I

X "esatti" e Y soggette ad errore sperimentale.

Errore assunto ( $\sigma_y$ ) e fluttuazione dei punti coincidono

- $p_0, p_1$  valori dei parametri di best fit, ossia valori che minimizzano il  $\chi^2$

- $\chi^2$  minimo  $\Rightarrow \Rightarrow \Rightarrow S_0 = \sum_{i=1}^N \frac{(y_i - f(x_i; \vec{\lambda}))^2}{\sigma_i^2},$  con  $\vec{\lambda} = (p_0, p_1)$

- n.d.f. = number of degrees of freedom = N - dimensione di  $\vec{\lambda}$

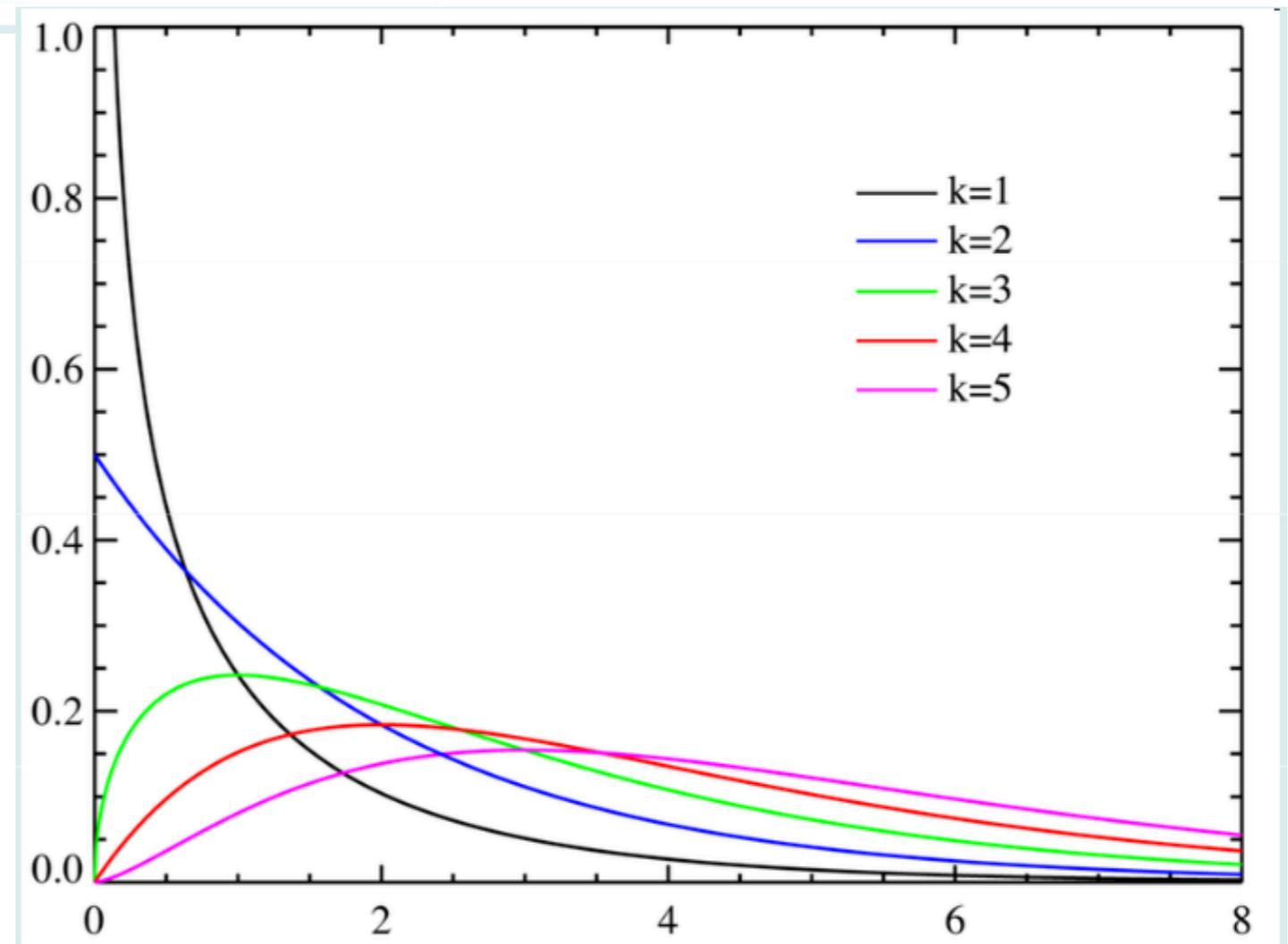
# REGRESSIONE

- Per valutare la bontà di un fit si può ricorrere al test del  $\chi^2$ .  
Il test del  $\chi^2$  è affidabile solo nel caso in cui si ha una ragionevole accuratezza nella stima delle incertezze  $\sigma_i$  dei singoli punti.
- In questo caso il modo di procedere vi è già noto:
  - 1) Si determina il valore del  $\chi^2$  in corrispondenza del valore dei parametri che lo minimizzano
  - 2) Si identificano il numero di gradi di libertà che in questo caso saranno pari al numero di punti meno il numero di parametri
  - 3) Si assume che la grandezza  $S_0$  sia distribuita come una  $\chi^2$
  - 4) Si fissa un intervallo di confidenza e si valuta se il valore ottenuto è contenuto o meno nell'intervallo di confidenza.
- E' preferibile fare un test a due code e escludere le regioni in cui  $S_0$  assume valori troppo grandi o troppo piccoli.

# REGRESSIONE

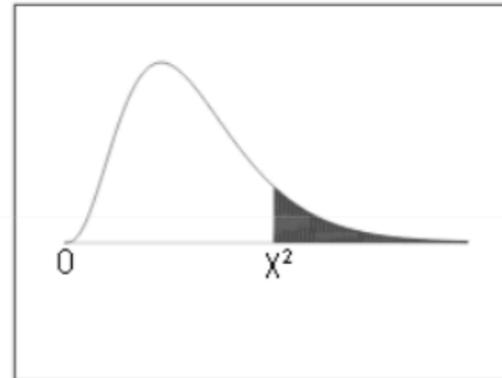
$$p_\nu(\chi^2) = \frac{1}{2^{\frac{\nu}{2}} \cdot (\frac{\nu}{2} - 1)!} (\chi^2)^{\frac{\nu}{2} - 1} e^{-\frac{\chi^2}{2}}$$

- Media  $\nu$ , Varianza  $2\nu$
- Per  $\nu \rightarrow \text{inf.}$  tende a una gaussiana



# REGRESSIONE

Chi-Square Distribution Table



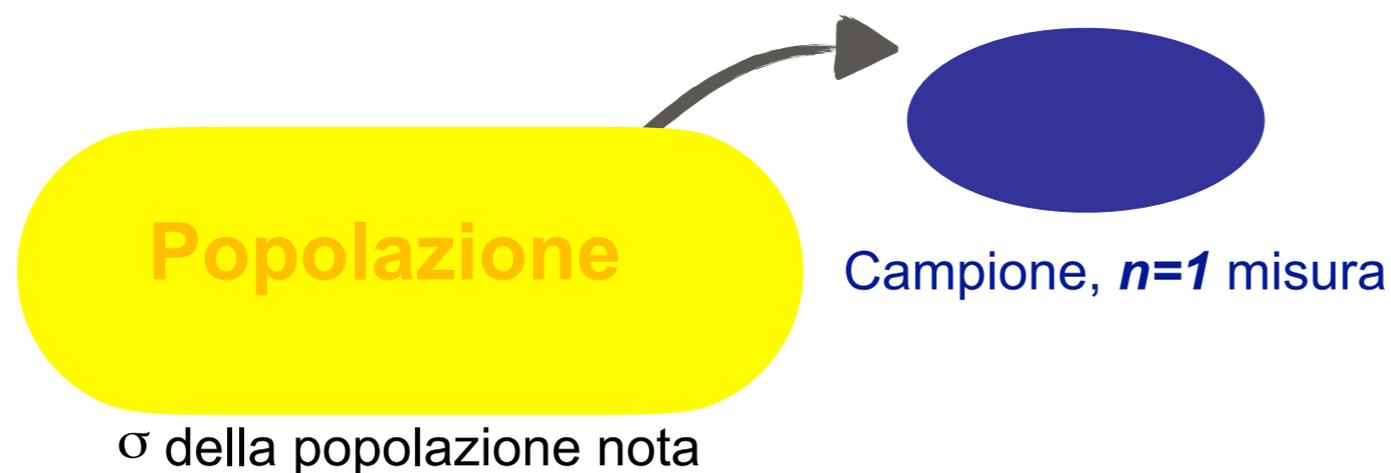
The shaded area is equal to  $\alpha$  for  $\chi^2 - \chi^2_\alpha$ .

$df$	$\chi^2_{.995}$	$\chi^2_{.990}$	$\chi^2_{.975}$	$\chi^2_{.950}$	$\chi^2_{.900}$	$\chi^2_{.100}$	$\chi^2_{.050}$	$\chi^2_{.025}$	$\chi^2_{.010}$	$\chi^2_{.005}$
1	0.000	0.000	0.001	0.004	0.016	2.706	3.841	5.024	6.635	7.879
2	0.010	0.020	0.051	0.103	0.211	4.605	5.991	7.378	9.210	10.597
3	0.072	0.115	0.216	0.352	0.584	6.251	7.815	9.348	11.345	12.838
4	0.207	0.297	0.484	0.711	1.064	7.779	9.488	11.143	13.277	14.860
5	0.412	0.554	0.831	1.145	1.610	9.236	11.070	12.833	15.086	16.750
6	0.676	0.872	1.237	1.635	2.204	10.645	12.592	14.449	16.812	18.548
7	0.989	1.239	1.690	2.167	2.833	12.017	14.067	16.013	18.475	20.278
8	1.344	1.646	2.180	2.733	3.490	13.362	15.507	17.535	20.090	21.955
9	1.735	2.088	2.700	3.325	4.168	14.684	16.919	19.023	21.666	23.589
10	2.156	2.558	3.247	3.940	4.865	15.987	18.307	20.483	23.209	25.188
11	2.603	3.053	3.816	4.575	5.578	17.275	19.675	21.920	24.725	26.757
12	3.074	3.571	4.404	5.226	6.304	18.549	21.026	23.337	26.217	28.300
13	3.565	4.107	5.009	5.892	7.042	19.812	22.362	24.736	27.688	29.819
14	4.075	4.660	5.629	6.571	7.790	21.064	23.685	26.119	29.141	31.319
15	4.601	5.229	6.262	7.261	8.547	22.307	24.996	27.488	30.578	32.801

Esempio di tabella di  $\chi^2$

# REGRESSIONE

- Esempio: determinare il valore di una grandezza fisica mediante misura.
- **Misura singola** (campione costituito da un solo valore).
  - Il valore che ottengo è anche la miglior stima (unica) del valore di aspettazione della popolazione (valore vero). In pratica sto facendo la media di 1 misura. Ricorro a questo metodo quando la sensibilità dello strumento è inferiore alla sua precisione.
- **La varianza della media campionaria coincide con la varianza della popolazione.** Tipicamente in queste misure si assume di conoscere sia il tipo di distribuzione di probabilità che segue la popolazione (gaussiana, uniforme,...) che la varianza di questa.
- **L'errore di misura consiste nella sigma** della distribuzione delle medie campionarie, ma come detto, in questo caso, coincide con la sigma assunta per la distribuzione **della popolazione**.



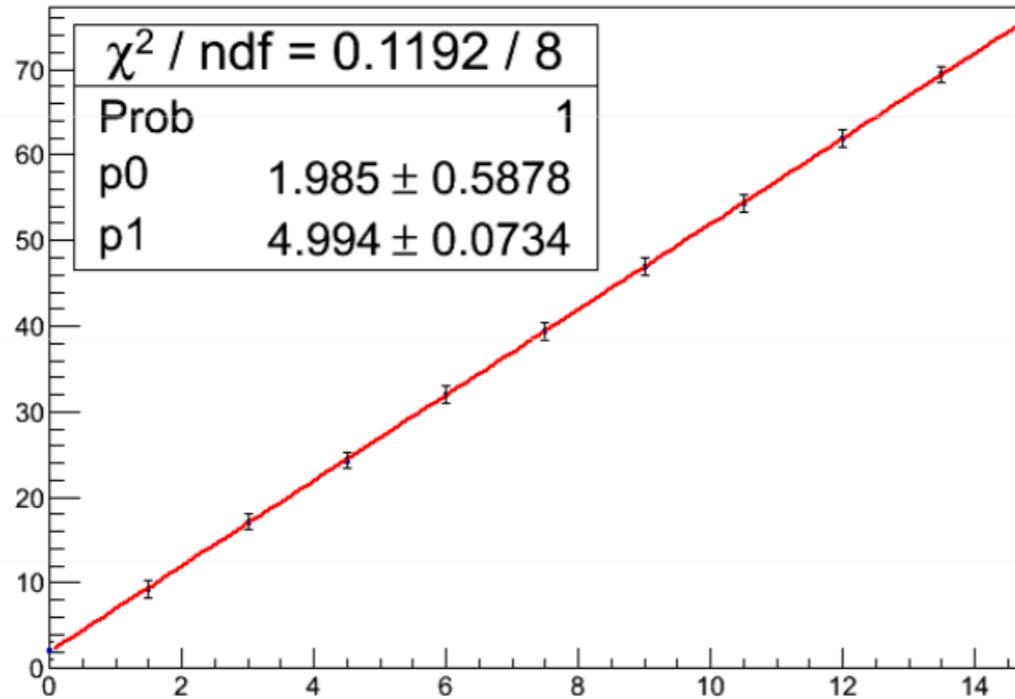
$\langle m \rangle = m$  stima di  $\mu$

Errore su stima

$$\sigma_{\langle m \rangle} = \frac{\sigma}{\sqrt{n}} = \sigma$$

# REGRESSIONE

Y vs X errori solo Y

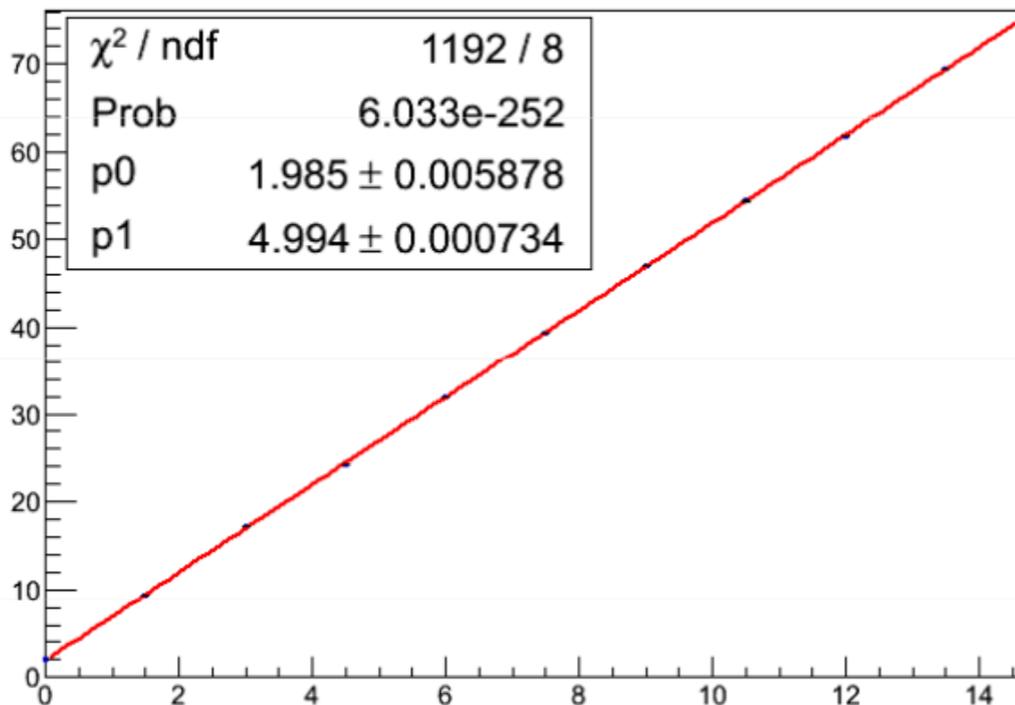


## Configurazione II

X "esatti" e Y soggette ad errore sperimentale.

Errore assunto ( $e_y$ ) e molto più **grande** delle fluttuazione dei punti.

Y vs X errori solo Y



## Configurazione III

X "esatti" e Y soggette ad errore sperimentale.

Errore assunto ( $e_y$ ) e molto più **piccolo** delle fluttuazione dei punti.

# ERRORI SUI PARAMETRI DETERMINATI DAL FIT E LORO UTILIZZO

- Nello stimare il valore dei parametri che meglio si adatta ad un insieme di misure è rilevante la determinazione dell'incertezza associata ai parametri stessi.
- Nel processo di identificazione dei parametri ottimali viene fornita una matrice di covarianza che tiene conto e dell'incertezza sul singolo parametro e del gradi di correlazione dei parametri tra di loro. La matrice di covarianza è una matrice simmetrica sulla cui diagonale compaiono le varianze dei singoli parametri.
- Nel caso semplice di due parametri  $a$  e  $b$ , come nel nostro esempio, la matrice di covarianza assume la forma:

$$\begin{pmatrix} \sigma_a^2 & \text{cov}(a,b) \\ \text{cov}(a,b) & \sigma_b^2 \end{pmatrix}$$

- I termini diagonali sono le varianze associate ai singoli parametri. I termini non diagonali rappresentano le rispettive covarianze che quantificano il grado di correlazione tra i parametri.

# ERRORI SUI PARAMETRI DETERMINATI DAL FIT E LORO UTILIZZO

- Le classi che gestiscono il fit in Root ci danno la stima della matrice di covarianza

```

44 // definisco una funzione parametrica
45 TF1 * fun= new TF1("fun", "[0]+[1]*x", 0, 20);
46 // La uso per fare un fit
47 gr->Fit("fun");
48 // estraggo i risultati della regressione
49 TVirtualFitter * fitter = TVirtualFitter::GetFitter();
50 // Estraggo e stampo il valore dei parametri.
51 double p1=fitter->GetParameter(1);
52 double p0=fitter->GetParameter(0);
53 printf("\n p1=%f p0=%f\n", p1, p0);
54 // estraggo e stampo la matrice di covarianza
55 double * covMatrix = fitter->GetCovarianceMatrix();
56 printf("\n c11=%f c12=%f\n ", covMatrix[0], covMatrix[1]);
57 printf("\n c21=%f c22=%f\n ", covMatrix[2], covMatrix[3]);

```

```

FCN=0.417844 FROM MIGRAD STATUS=CONVERGED 30 CALLS 31 TOTAL
EDM=1.9285e-014 STRATEGY= 1 ERROR MATRIX ACCURATE
EXT PARAMETER STEP FIRST
NO. NAME VALUE ERROR SIZE DERIVATIVE
1 p0 2.01184e+000 2.99125e-001 9.35706e-005 1.21548e-006
2 p1 4.99013e+000 3.73543e-002 1.16850e-005 8.67053e-006

```

```

p1=4.990132 p0=2.011839
c11=0.089476 c12=-0.009419
c21=-0.009419 c22=0.001395

```

Stampa aggiunta manualmente

# ERRORI SUI PARAMETRI DETERMINATI DAL FIT E LORO UTILIZZO

```

FCN=0.417844 FROM MIGRAD STATUS=CONVERGED 30 CALLS 31 TOTAL
EDM=1.9285e-014 STRATEGY= 1 ERROR MATRIX ACCURATE
EXT PARAMETER STEP ERROR MATRIX FIRST
NO. NAME VALUE ERROR SIZE DERIVATIVE
1 p0 2.01184e+000 2.99125e-001 9.35706e-005 1.21548e-006
2 p1 4.99013e+000 3.73543e-002 1.16850e-005 8.67053e-006

p1=4.990132 p0=2.011839
c11=0.089476 c12=-0.009419
c21=-0.009419 c22=0.001395
    
```

Errore del parametro p0:  $\sigma_{p0} = 0.299125$   
 $c11 = \sigma_{p0}^2 = 0.089476$

Analogamente per  $p_1$

- A cosa serve la covarianza?
  - Ipotizziamo che una volta che si sono identificati i parametri della funzione incognita vogliamo calcolare il valore atteso della variabile y in un punto x diverso dai valori sperimentali disponibili. Qual'è il giusto errore da associare a questa stima?

# ERRORI SUI PARAMETRI DETERMINATI DAL FIT E LORO UTILIZZO

```

FCN=0.417844 FROM MIGRAD STATUS=CONVERGED 30 CALLS 31 TOTAL
EDM=1.9285e-014 STRATEGY= 1 ERROR MATRIX ACCURATE
EXT PARAMETER STEP ERROR MATRIX ACCURATE
NO. NAME VALUE ERROR SIZE DERIVATIVE
1 p0 2.01184e+000 2.99125e-001 9.35706e-005 1.21548e-006
2 p1 4.99013e+000 3.73543e-002 1.16850e-005 8.67053e-006

p1=4.990132 p0=2.011839
c11=0.089476 c12=-0.009419
c21=-0.009419 c22=0.001395
    
```

Errore del parametro p0:  $\sigma_{p0} = 0.299125$   
 $c11 = \sigma_{p0}^2 = 0.089476$

Analogamente per  $p_1$

- A cosa serve la covarianza?
  - Ipotizziamo che una volta che si sono identificati i parametri della funzione incognita vogliamo calcolare il valore atteso della variabile  $y$  in un punto  $x$  diverso dai valori sperimentali disponibili. Qual'è il giusto errore da associare a questa stima?

# ERRORI SUI PARAMETRI DETERMINATI DAL FIT E LORO UTILIZZO

$$y = ax + b$$

$$\text{var}(y) = \text{var}(ax) + \text{var}(b) + 2 \text{cov}(ax, b)$$

$$\text{cov}(ax, b) = x \text{cov}(a, b)$$

$$\text{var}(ax) = x^2 \text{var}(a)$$

$$\text{var}(a) = 1.497E - 3$$

$$\text{var}(b) = 9.257E - 2$$

$$\text{cov}(a, b) = -9.919E - 3$$

$$\text{var}(y) = 10^2 \text{var}(a) + \text{var}(b) + 20 \text{cov}(a, b) = 0.1497 + 9.256 \cdot 10^{-2} - 0.19838 = 0.04388$$

$$Y(10) = 42.6 \pm 0.2$$

Senza tener conto del termine di covarianza

$$\text{var}(y) = x^2 \text{var}(a) + \text{var}(b) = 0.241$$

- Come verificiamo che sia questa la stima corretta dell'errore ?

# COME SONO DETERMINATI GLI ERRORI NEL FIT

- Come sono determinati gli errori sui parametri ottenuto con il metodo dei minimi quadrati o massima verosimiglianza ?
- La likelihood rappresenta la probabilità con cui posso osservare il mio campione di punti sperimentali  $(\mathbf{y}_i, \mathbf{x}_i)$  data la legge oggetto di studio  $y = f(x; \vec{\lambda})$ 
  - I valori di  $\vec{\lambda}$  determinati cercando il minimo del  $\chi^2$  (o il massimo della Likelihood) sono variabili aleatorie (funzioni di variabili aleatorie)
  - Posso interpretare la likelihood come la distribuzione di probabilità congiunta dei parametri in studio  $\vec{\lambda}$
- Abbiamo visto che vale la relazione: 
$$P(\vec{\lambda} | \mathbf{x}, \mathbf{y}) \sim \exp\left[-\frac{1}{2}\chi^2(\vec{\lambda})\right]$$
- Per un solo parametro 
$$P(\lambda | \mathbf{x}, \mathbf{y}) \sim \exp\left[-\frac{1}{2}\chi^2(\lambda)\right]$$
- Per valutare l'errore sul parametro  $\lambda$  dobbiamo capire come varia la sua distribuzione di probabilità attorno al valore di best fit (valore di minimo del  $\chi^2$ )

# COME SONO DETERMINATI GLI ERRORI NEL FIT

- Consideriamo il caso più semplice di tutti:

- Una sola misura  $y$ , in corrispondenza di un valore  $x$ , **affetta da errore  $\sigma$  gaussiano**

- $\lambda_0$  = valore di best fit

- Dalla  $L(y, \lambda)$  si vede che

- se  $y = y_{\pm 1\sigma} = f(x; \lambda_0) \pm \sigma$

- si ha  $\Delta\chi^2 = 1$ ,  
 $\Delta \ln L = -1/2$

- $P(y_{-1\sigma} < y < y_{+1\sigma}) = 68.3\%$

- $y = y_{\pm 2\sigma} = f(x; \lambda_0) \pm 2\sigma$

- si ha  $\Delta\chi^2 = 4, \Delta \ln L = -2$

- $P(y_{-2\sigma} < y < y_{+2\sigma}) = 95.5\%$

$$L(y; \lambda) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \exp\left(-\frac{(y - f(x; \lambda))^2}{2\sigma^2}\right)$$

$$\ln L(y; \lambda) \sim \left(-\frac{(y - f(x; \lambda))^2}{2\sigma^2}\right) = \left(-\frac{\chi^2}{2}\right)$$

$$\chi^2 = \frac{(y - f(x; \lambda))^2}{\sigma^2}$$

- Definiamo come errore su  $\lambda$  l'intervallo  $\Delta\lambda$  tale per cui

$$\Delta\chi^2 = \frac{(y - f(x; \lambda_0 + \Delta\lambda))^2}{\sigma^2} = 1$$

Infatti la probabilità che

$\lambda_0 - \Delta\lambda < \lambda < \lambda_0 + \Delta\lambda$  corrisponde alla probabilità che il valore del  $\chi^2$  sia compreso tra il suo valore minimo  $S_0$  e  $S_0+1$ , e questa corrisponde a

$$P(y_{-1\sigma} < y < y_{+1\sigma}) = 68.3\%$$

# COME SONO DETERMINATI GLI ERRORI NEL FIT

- **Nel caso generale di N misure e 1 parametro**

- Se abbiamo N misura  $y_i$ , in corrispondenza di valori  $x_i$ , **affette da errore  $\sigma$**  (rappresentativi eventualmente anche delle incertezze alle  $x$ ) **non necessariamente gaussiane**, nel limite di N grande, la

$P(\lambda | \mathbf{x}, \mathbf{y}) \sim \exp\left[-\frac{1}{2}\chi^2(\lambda)\right]$  rappresenta una distribuzione di probabilità

approssimativamente gaussiana per  $\lambda$ .

**NOTA:** questo significa che il  $\chi^2 = -\ln L$  è una funzione quadratica di  $\lambda$

- Se  $\lambda_0$  =valore di best fit e  $\Delta\lambda$  è l'ampiezza dell'intervallo in corrispondenza del quale si ha  $\Delta\chi^2 = 1$  (e allo stesso tempo  $\Delta \ln L = -1/2$ ) la probabilità

$$P(\lambda_0 - \Delta\lambda < \lambda < \lambda_0 + \Delta\lambda) = 68.3 \%$$

- Quindi possiamo dire che  $\lambda = \lambda_0 \pm \Delta\lambda$  con il 68.3% di C.L.

- $\Delta\lambda$  è l'ampiezza dell'intervallo in corrispondenza del quale si ha  $\Delta\chi^2 = 4$  (e allo stesso tempo  $\Delta \ln L = -2$ ) la probabilità

$$P(\lambda_0 - \Delta\lambda < \lambda < \lambda_0 + \Delta\lambda) = 95.5 \% \rightarrow \lambda = \lambda_0 \pm \Delta\lambda \text{ con il } 95.5\% \text{ di C.L.}$$

# METODO DELLA MASSIMA VEROSIMIGLIANZA

RICORDIAMO (dalla lezione sul metodo di massima verosimiglianza)

- Per definizione la varianza di  $\hat{\lambda}$  e'

$$\sigma^2(\hat{\lambda}) = \int (\hat{\lambda}(x') - \hat{\lambda}_{medio})^2 L(x'_1, x'_2, \dots, x'_n; \lambda) dx'_1 dx'_2 \dots dx'_n$$

- Difficile da calcolare, tipicamente si affronta numericamente
- Una relazione approssimata, valida per  $n$  grande, e'

$$\sigma^2(\hat{\lambda}) = - \left( \frac{d^2 \ln L}{d\lambda^2} \right)^{-1}$$

- Con lo stesso livello di approssimazione se la distribuzione di probabilita' dipende da più' parametri, l'inverso della matrice i cui elementi sono

$$U_{ij} = - \frac{d^2 \ln L}{d\lambda_i d\lambda_j}$$

rappresenta la matrice di covarianza, i cui elementi diagonali sono le varianze e quelli fuori diagonali le covarianze di coppie di variabili

# METODO DELLA MASSIMA VEROSIMIGLIANZA

RICORDIAMO (dalla lezione sul metodo di massima verosimiglianza)

**NOTA:** Se abbiamo N misura  $y_i$ , in corrispondenza di valori  $x_i$ , affette da errore  $\sigma$  non necessariamente gaussiane, la Likelihood rappresenta un pdf approssimativamente gaussiana per  $\lambda$ . Questo significa che il  $\chi^2 = -\ln L$  è una funzione quadratica di  $\lambda$

$$L^* = -\ln L = A\lambda_1^2 + B\lambda_2^2$$

$$-\frac{d^2 \ln L}{d\lambda_1^2} = 2A \quad -\frac{d^2 \ln L}{d\lambda_2^2} = 2B$$

$$\begin{pmatrix} \frac{1}{2A} & 0 \\ 0 & \frac{1}{2B} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2A & 0 \\ 0 & 2B \end{pmatrix} = \mathbf{I}$$

$$\hat{\lambda}_1 = 0 \quad \hat{\lambda}_2 = 0$$

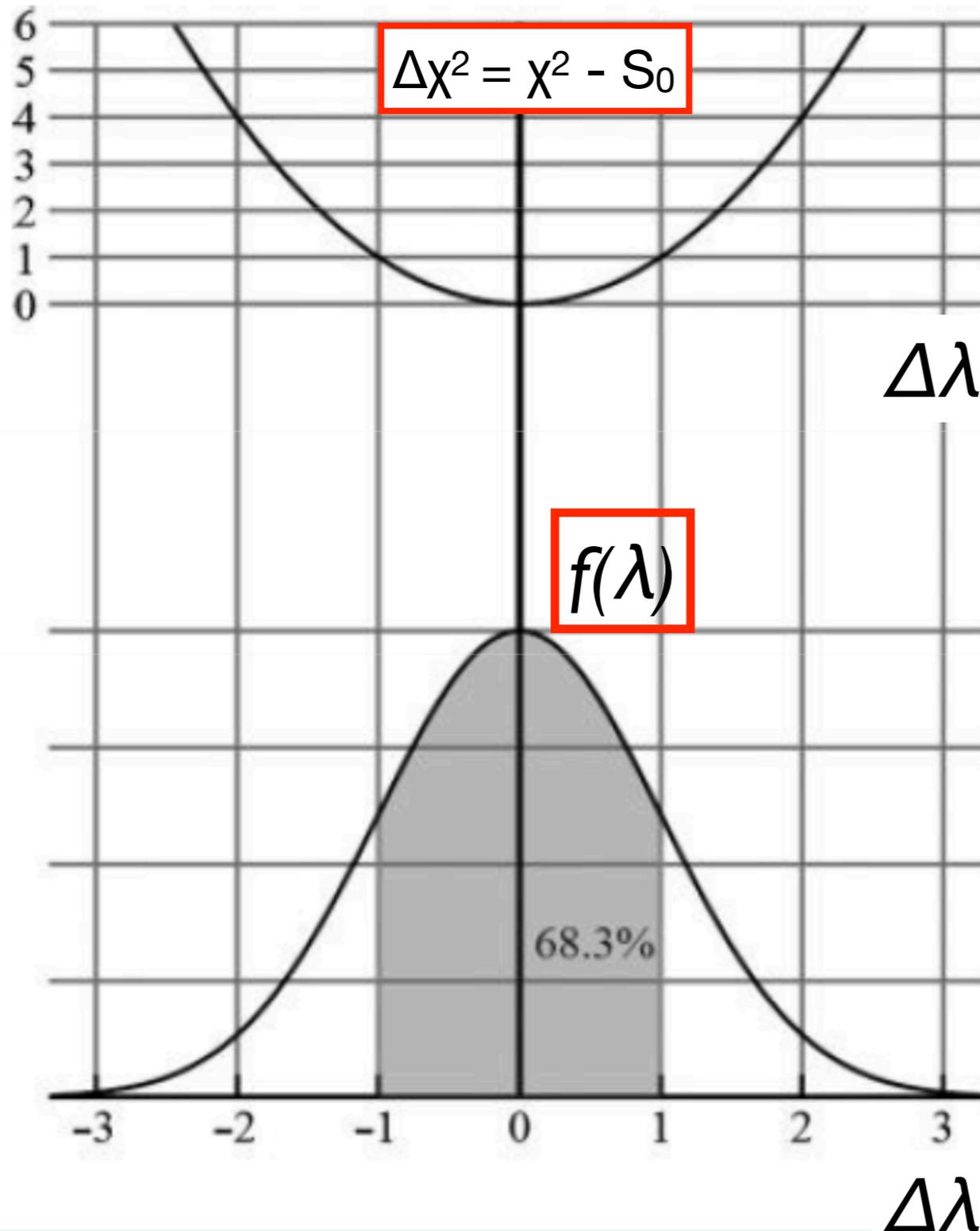
$$\sigma(\lambda_1) = \sqrt{\frac{1}{2A}}$$

$$\sigma(\lambda_2) = \sqrt{\frac{1}{2B}}$$

$$\Delta L^* = L^*(\hat{\lambda}_1 + \sigma(\lambda_1), \hat{\lambda}_2) - L^*(\hat{\lambda}_1, \hat{\lambda}_2) = \frac{1}{2}$$

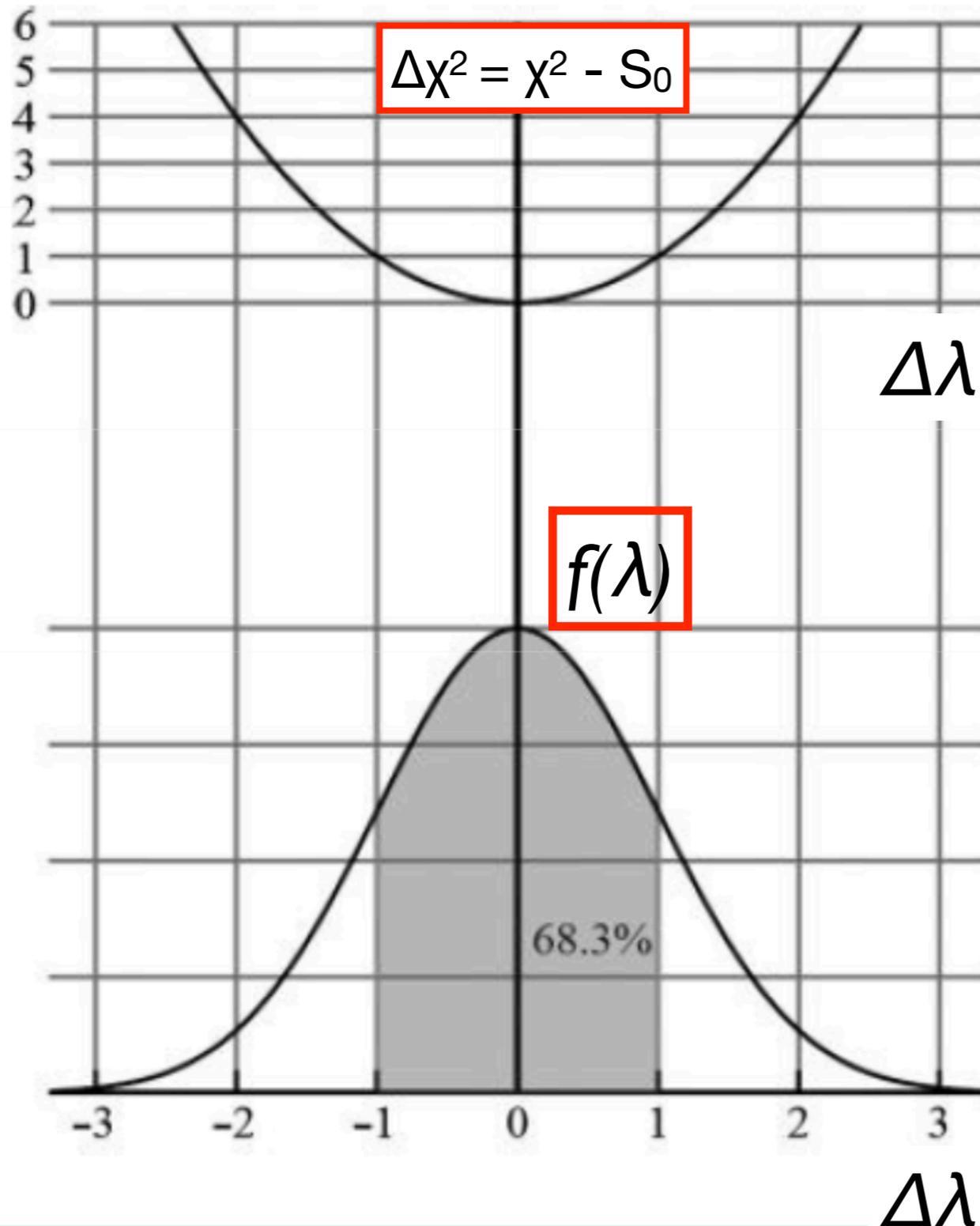
$$\Delta L^* = L^*(\hat{\lambda}_1, \hat{\lambda}_2 + \sigma(\lambda_2)) - L^*(\hat{\lambda}_1, \hat{\lambda}_2) = \frac{1}{2}$$

# COME SONO DETERMINATI GLI ERRORI NEL FIT



- In pratica, l'intervallo di  $y$  attorno al valore "vero"  $[f(x, \lambda_0)]$  che corrisponde a un incremento del  $\chi^2$  pari a 1 rappresenta un intervallo in cui  $y$  ricade con probabilita' del 68.3% Dato il valore  $\lambda$  del parametro
- Analogamente
- l'intervallo di  $\lambda$ , attorno al valore "vero"  $[\lambda_0]$  che corrisponde a un incremento del  $\chi^2$  pari a 1, rappresenta un intervallo in cui  $\lambda$  ricade con probabilita' del 68.3% dato il risultato  $y$  della misura

# COME SONO DETERMINATI GLI ERRORI NEL FIT



- Quindi operativamente determinare con un fit il valore di un parametro, con errore, significa:
  - Trovare il valore di  $\lambda$  che minimizza il  $\chi^2$  (o massimizza la log-likelihood),  $\lambda_0$
  - Trovare l'intervallo  $\Delta\lambda$  attorno a  $\lambda_0$  tale che per  $\lambda = \lambda_0 \pm \Delta\lambda$  il  $\chi^2 = S_0 + 1$

# COME SONO DETERMINATI GLI ERRORI NEL FIT

- **Nel caso generale di  $N$  misure e  $m$  parametri**

- Se abbiamo  $N$  misura  $y_i$ , in corrispondenza di valori  $x_i$ , **affette da errore  $\sigma_i$**  (rappresentativi eventualmente anche delle incertezze alle  $x$ ) **non necessariamente gaussiane**, nel limite di  $N$  grande, la  $P(\vec{\lambda} | \mathbf{x}, \mathbf{y}) \sim \exp\left[-\frac{1}{2}\chi^2(\vec{\lambda})\right]$  rappresenta una distribuzione di probabilità congiunta approssimativamente gaussiana per i parametri  $(\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_m)$

**NOTA:** questo significa che il  $\chi^2 = -\ln L$  è una funzione quadratica di  $\lambda_i$

- Se  $\vec{\lambda}_0$  = valore di best fit, gli errori  $\Delta \vec{\lambda}_i$  ad un certo C.L. sono determinati in corrispondenza di incrementi del valore di  $\chi^2$  che garantiscano la copertura richiesta dal livello di confidenza
- Quali sono in questo caso i valori  $\Delta\chi^2$  che corrispondono a intervalli di probabilità tipici ??
  - Chiameremo intervallo a 1 sigma quello a cui corrisponde una prof -> 68.3%
  - 2 sigma -> 95.5%
  - ...

*Dipende da  $m$*

# COME SONO DETERMINATI GLI ERRORI NEL FIT

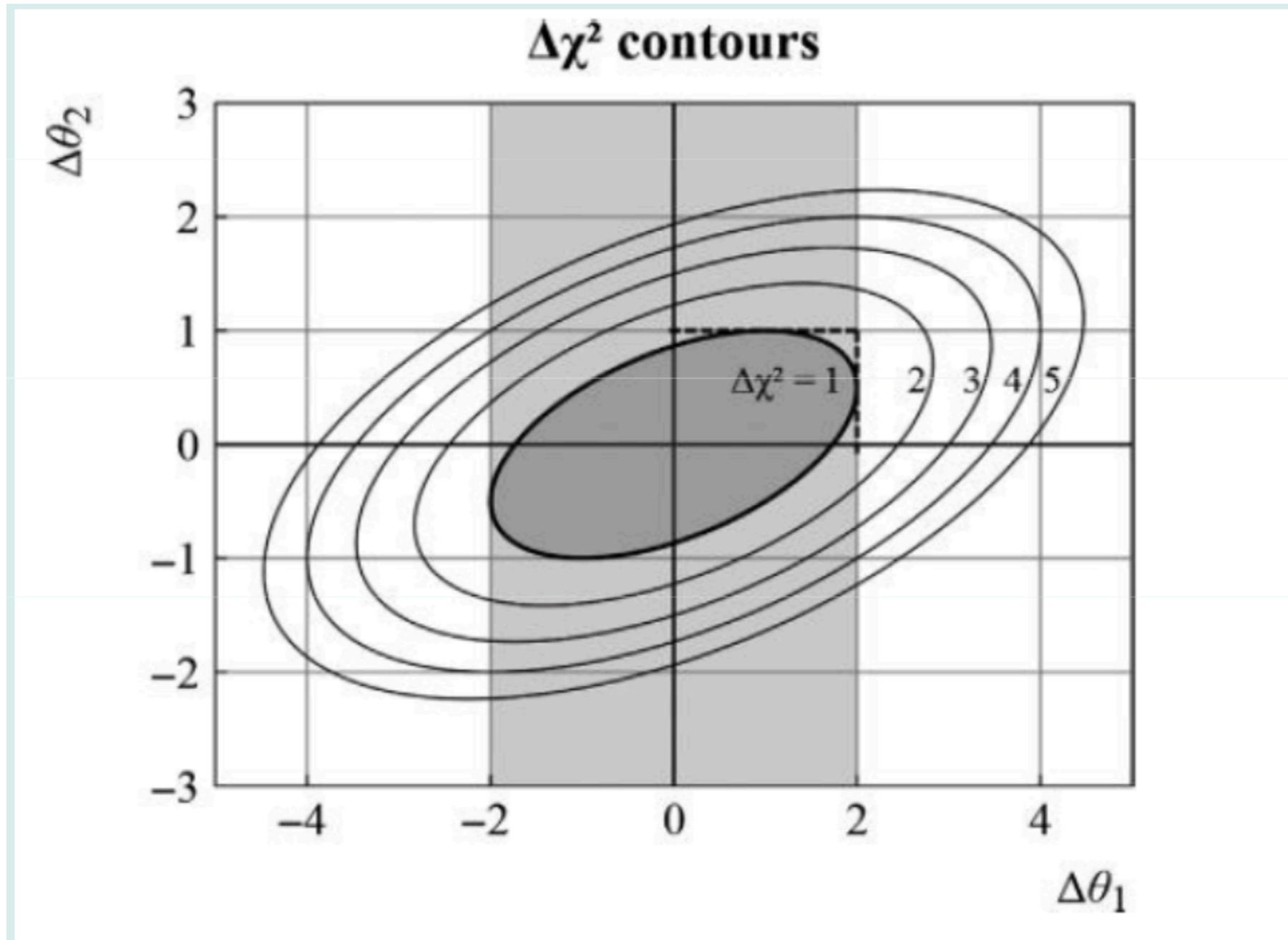
**Table 40.2:** Values of  $\Delta\chi^2$  or  $2\Delta\ln L$  corresponding to a coverage probability  $1 - \alpha$  in the large data sample limit, for joint estimation of  $M$  parameters.

	$(1 - \alpha)$ (%)	$M = 1$	$M = 2$	$M = 3$
1 sigma	68.27	1.00	2.30	3.53
	90.	2.71	4.61	6.25
	95.	3.84	5.99	7.82
2 sigma	95.45	4.00	6.18	8.03
	99.	6.63	9.21	11.34
	99.73	9.00	11.83	14.16

Numero di parametri determinati contemporaneamente nel fit

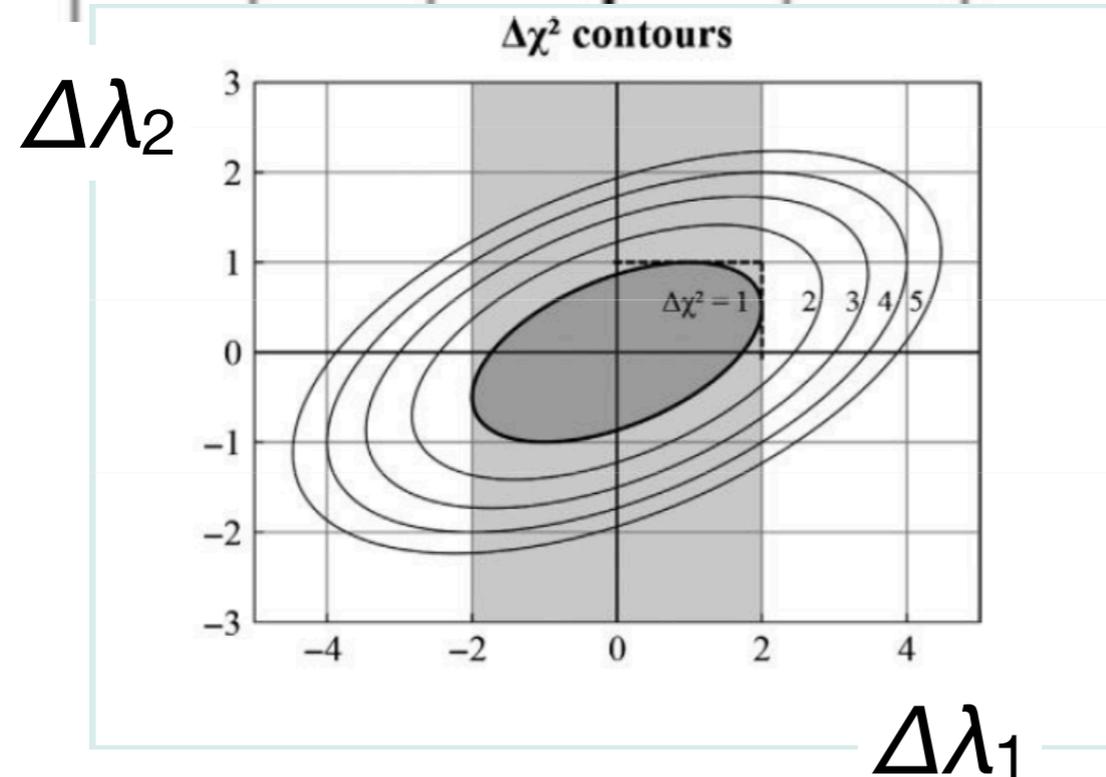
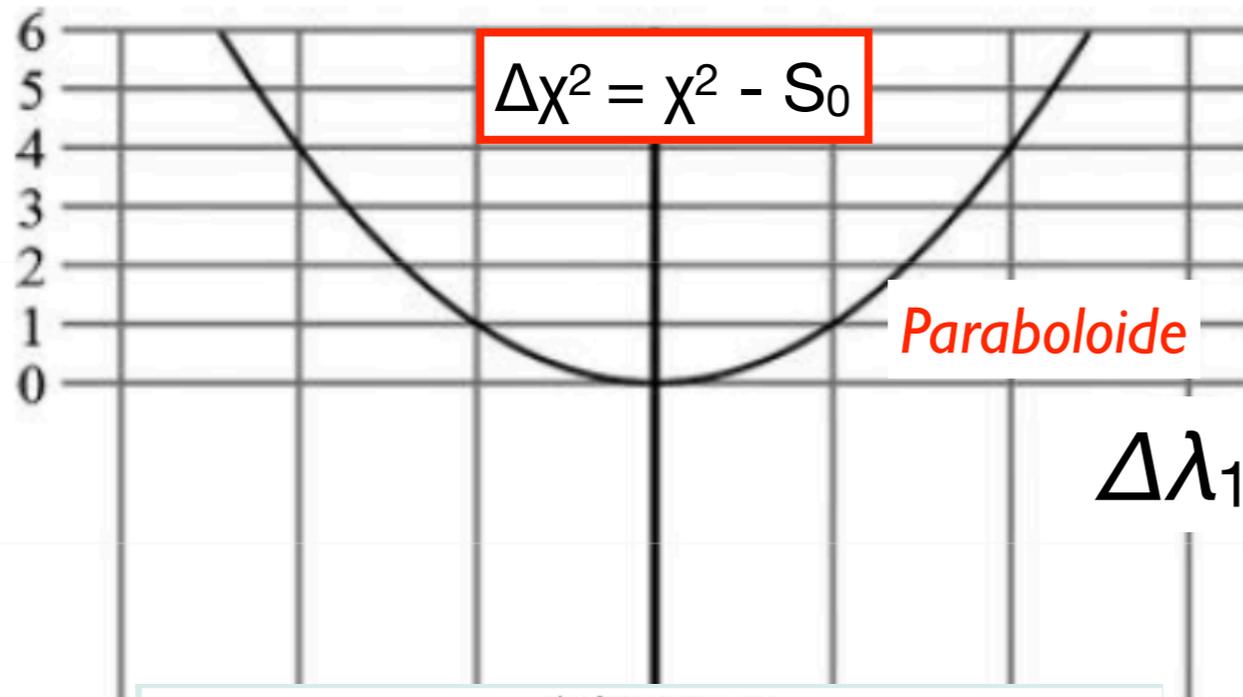
[https://pdg.lbl.gov/2022/reviews/contents\\_sports.html](https://pdg.lbl.gov/2022/reviews/contents_sports.html)

# COME SONO DETERMINATI GLI ERRORI NEL FIT



- Curve di livello  $\Delta\chi^2 = \text{costante}$

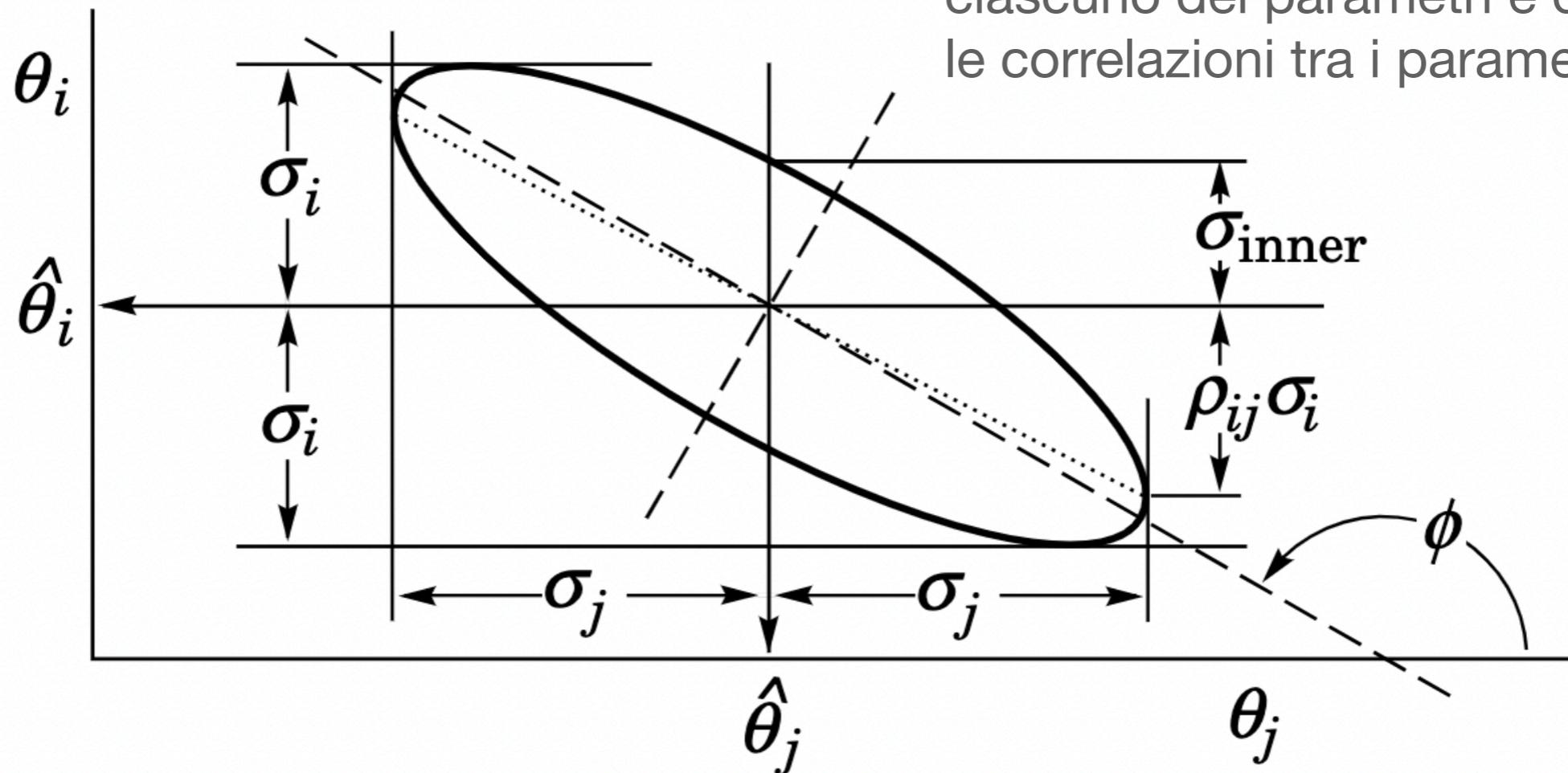
# COME SONO DETERMINATI GLI ERRORI NEL FIT



- Quindi operativamente determinare con un fit contemporaneamente il valore di piu' di un parametro, con relativi errore, significa:
  - Trovare i valori  $\lambda_i$  che minimizzano il  $\chi^2$  (o massimizzano la log-likelihood)
  - Trovare la regione (un ellissoide, se la  $f$  è una funzione lineare dei  $\lambda_i$ ) nello spazio dei parametri attorno al punto di minimo  $\vec{\lambda}_0$  entro la quale il  $\chi^2$  varia rispetto al minimo meno di un certo  $\Delta\chi^2$  (determinato dal C.L. fissato)
  - Stimare i limiti di questa regione per ciascuno dei parametri e determinare le correlazioni tra i parametri

# COME SONO DETERMINATI GLI ERRORI NEL FIT

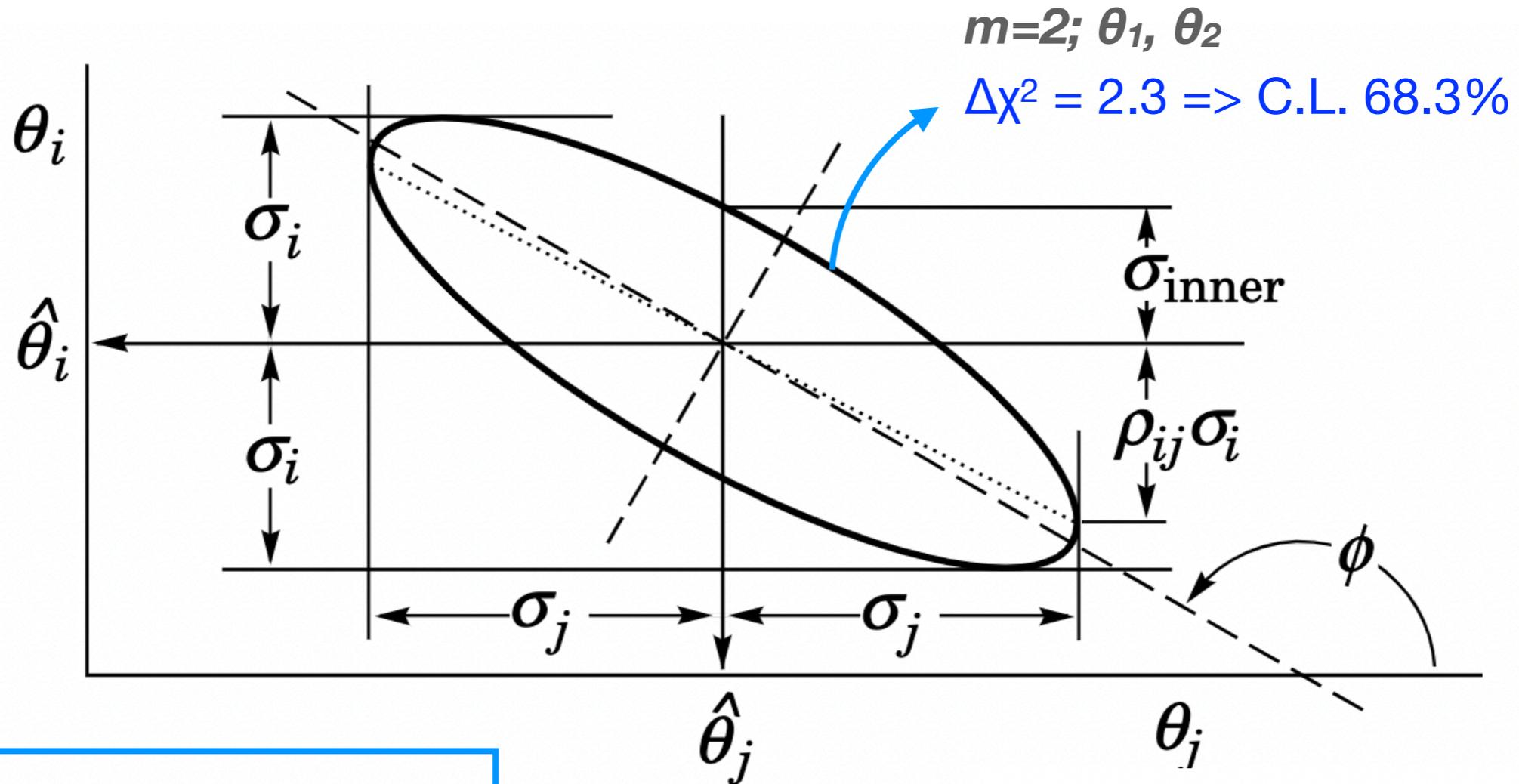
Stimare i limiti di questa regione per ciascuno dei parametri e determinare le correlazioni tra i parametri



**Figure 40.5:** Standard error ellipse for the estimators  $\hat{\theta}_i$  and  $\hat{\theta}_j$ . In the case shown the correlation is negative.

[https://pdg.lbl.gov/2022/reviews/contents\\_sports.html](https://pdg.lbl.gov/2022/reviews/contents_sports.html)

# COME SONO DETERMINATI GLI ERRORI NEL FIT



al CL del 68%

$$\hat{\theta}_i - \sigma_i < \theta_i < \hat{\theta}_i + \sigma_i$$

$$\hat{\theta}_j - \sigma_j < \theta_j < \hat{\theta}_j + \sigma_j$$

$$\tan 2\phi = \frac{2\rho_{ij}\sigma_i\sigma_j}{\sigma_j^2 - \sigma_i^2}$$

$$\rho_{ij} = \text{COV}[\hat{\theta}_i, \hat{\theta}_j] / \sigma_i\sigma_j$$

# COME SONO DETERMINATI GLI ERRORI NEL FIT

- Spesso in questo genere di rappresentazioni essendo i parametri correlati ha poco senso parlare di 1 o 2 sigma ma quello che si fa è di identificare regioni entro le quali i parametri sono contenuti con una certa probabilità.
- Il concetto è molto simile a quello che abbiamo affrontato nel caso di intervalli di confidenza.
  - 1. Si stabilisce un livello di confidenza (es.:90%)
  - 2. Si traccia la curva del  $\chi^2$  che identifica la regione entro la quale si possono muovere i parametri affinché la probabilità congiunta dei due sia del 90%.
- L'identificazione analitica della curva è possibile solo nel caso di dipendenza lineare dai parametri. In questo caso, infatti, è possibile dimostrare che regioni che assumono lo stesso valore di  $\chi^2$  nello spazio dei due (n) parametri sono delle ellissi (ellissoide n-dimensionali). In tutti gli altri casi occorre ricorrere a metodi numerici.

# ESEMPIO

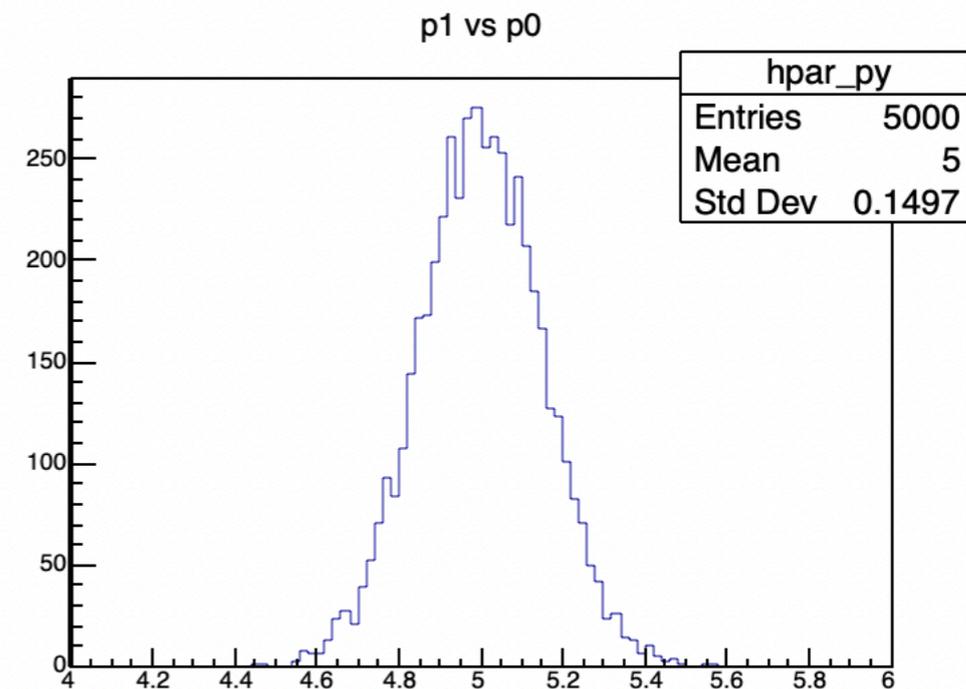
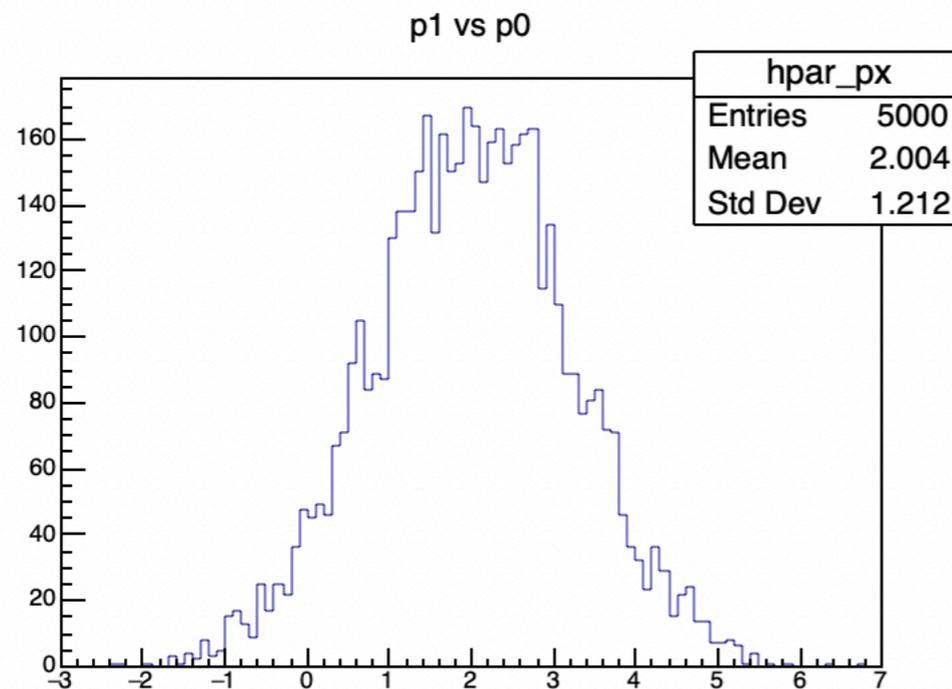
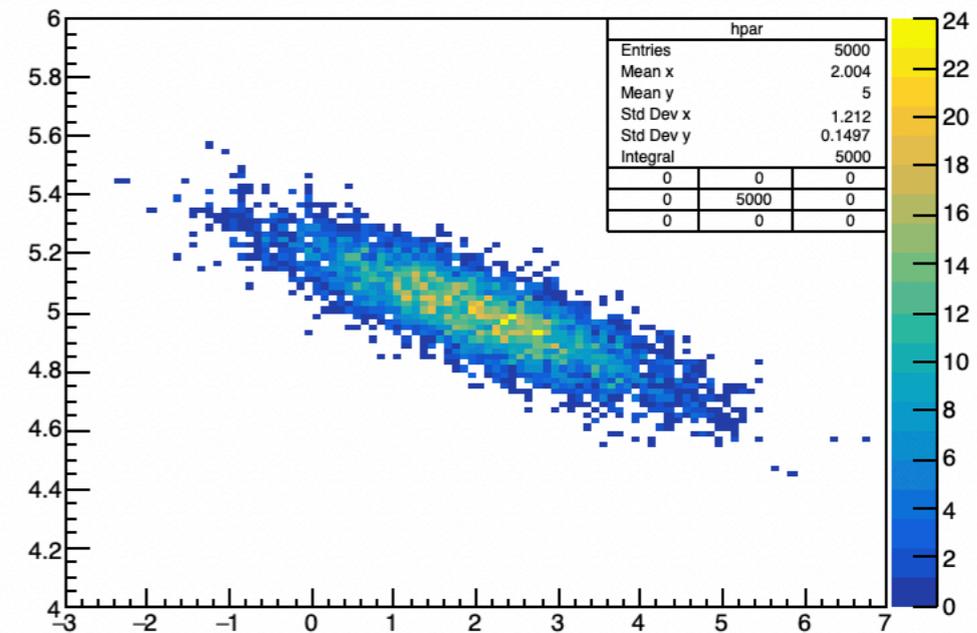
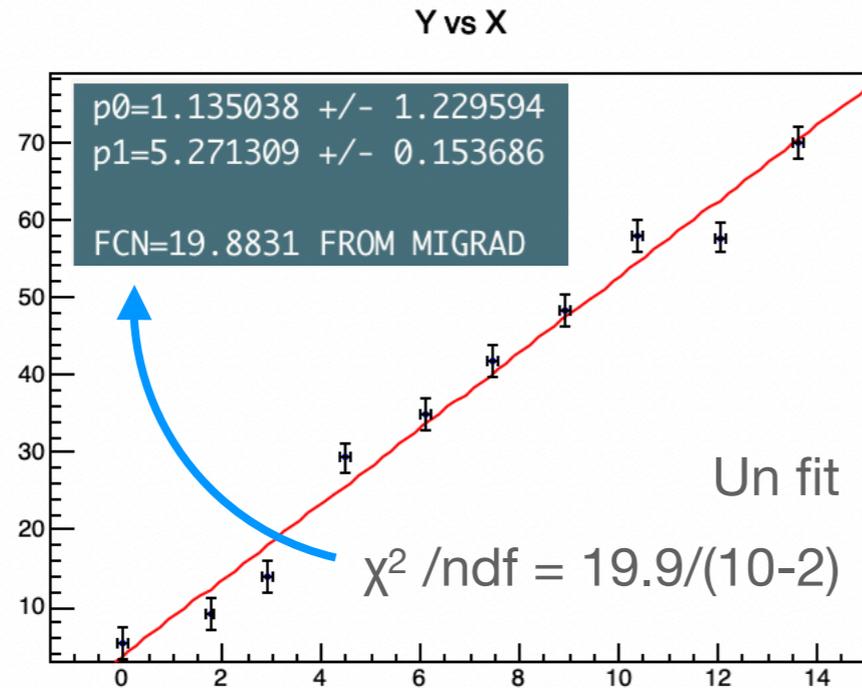
- $x \rightarrow$  fluttua gaussianamente con sigma  $\sigma_x = 0.1$
- $y \rightarrow$  fluttua gaussianamente con sigma  $\sigma_y = 2.0$

```
// definisco una funzione parametrica
TF1 * fun= new TF1("fun", "[0]+[1]*x", 0, 20);
TGraphErrors *gr;
for (int iter=0; iter<5000; ++iter)
{
    for (int i=0; i<NMISURE; i++) {
        // questi sono i valori "veri" del processo fisico
        xTrue[i]=i*stepX;
        yTrue[i]=5*xTrue[i]+2;
        // assume che gli errori di misura sulla y
        // siano distribuiti gaussianamente con sigma=0.1
        double eps=R.Gaus(0,2.);
        // questo e' il valore misurato di Y.
        y[i]=yTrue[i]+eps;
        eps=R.Gaus(0,0.1);
        // questo e' il valore misurato di X.
        x[i]=xTrue[i]+eps;
        // Errori sulle x nulli e sulle y sempre uguali a 1, 0.1, 0.01
        ex[i]=0.1;
        ey[i]=2.;
    }
    // costruisco il grafico
    gr= new TGraphErrors(NMISURE,x,y,ex,ey);
    // aspetto estetico.....
    gr->SetTitle("Y vs X");
    gr->SetMarkerColor(4);
    gr->SetMarkerStyle(21);
    gr->SetMarkerSize(0.2);
    // Disegno i punti "A" sta per disegna gli assi, "P"
    gr->Draw("AP");
    // La uso per fare un fit
    gr->Fit("fun");
    // estraggo i risultati della regressione
    TVirtualFitter * fitter = TVirtualFitter::GetFitter();
    // Estraggo e stampo il valore dei parametri.
    double p1=fitter->GetParameter(1);
    double p0=fitter->GetParameter(0);
    printf("\n***** p1=%f p0=%f\n",p1,p0);
    // estraggo e stampo la matrice di covarianza
    double * covMatrix = fitter->GetCovarianceMatrix();
    printf("\n c11=%f c12=%f\n",covMatrix[0],covMatrix[1]);
    printf(" c21=%f c22=%f\n ",covMatrix[2],covMatrix[3]);
    printf("\n p0=%f +/- %f\n",p0,sqrt(covMatrix[0]));
    printf(" p1=%f +/- %f\n\n",p1,sqrt(covMatrix[3]));

    hpar->Fill(p0,p1);
}
}
```

## ESEMPIO 1

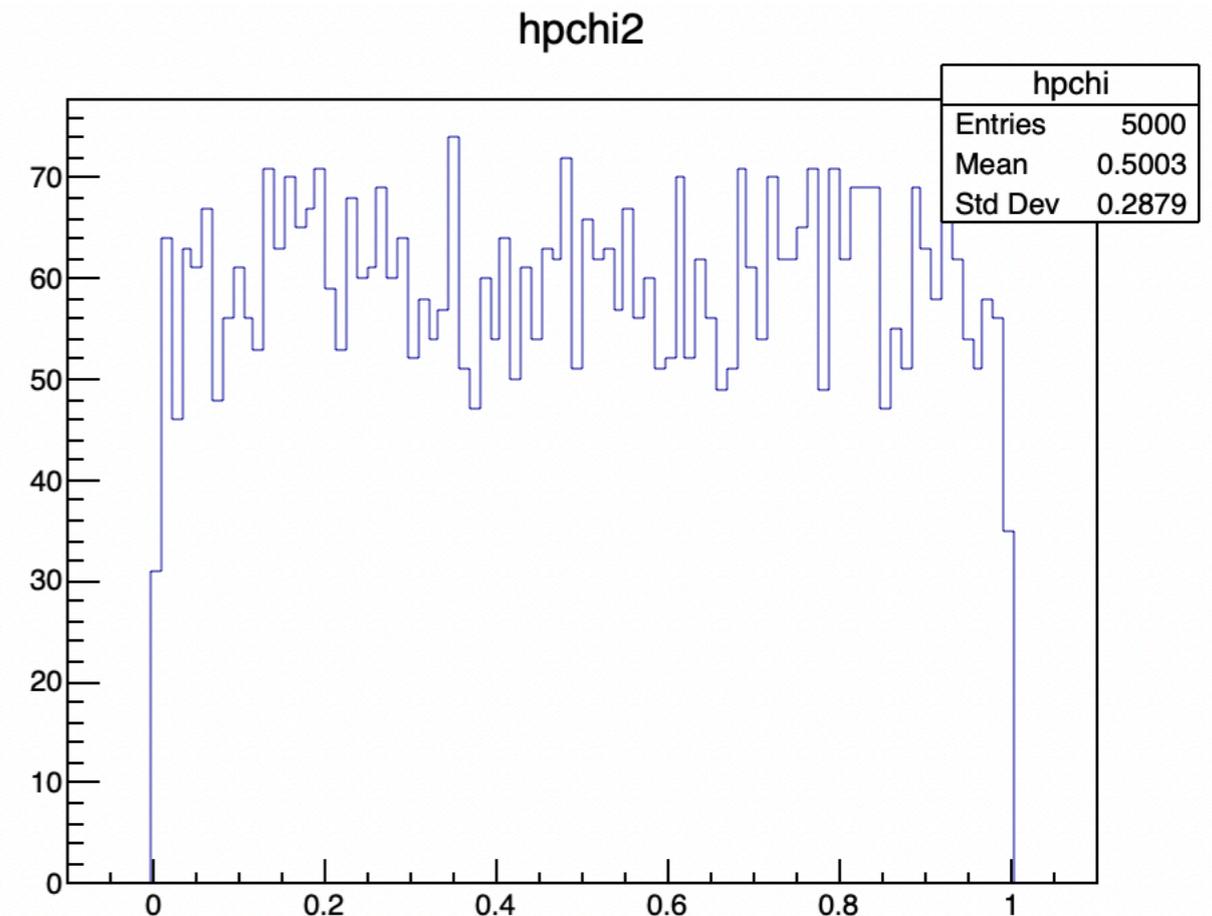
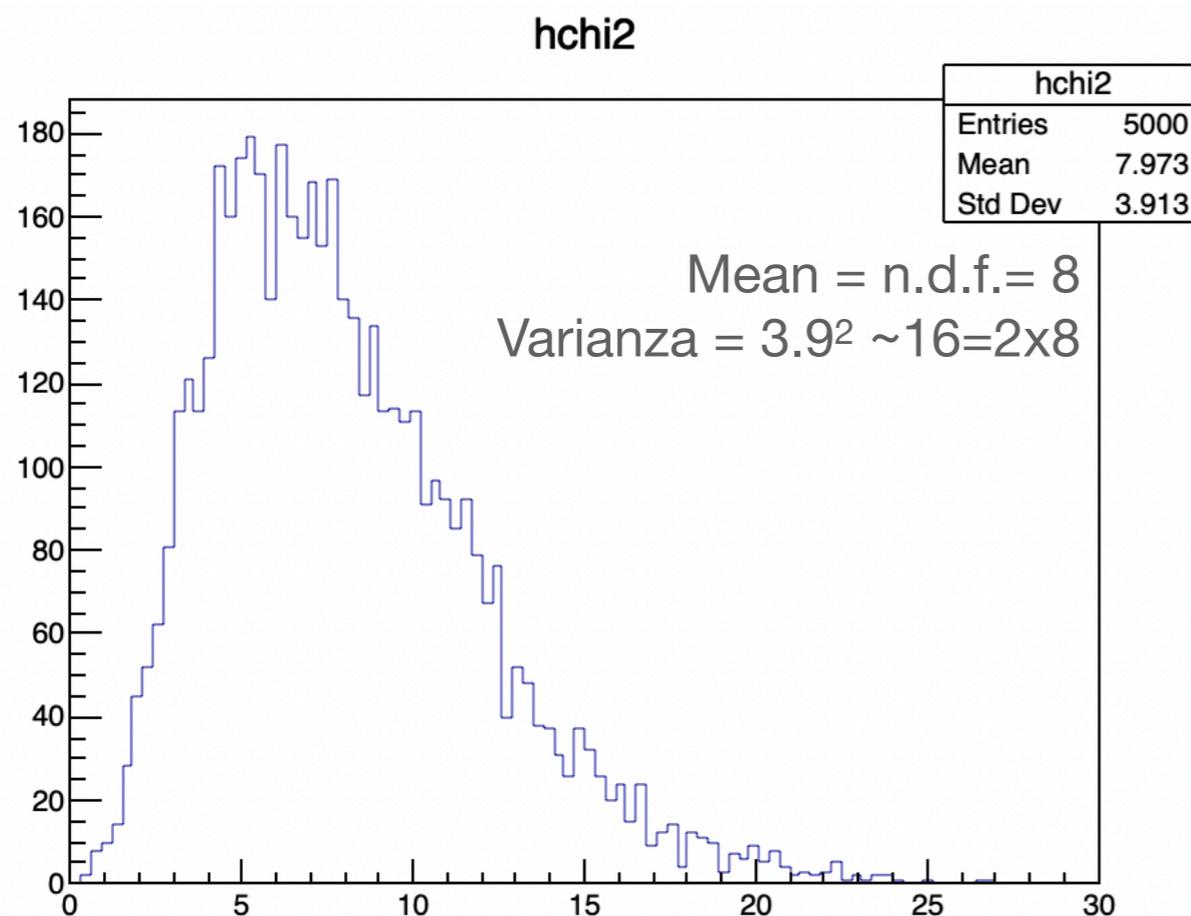
5000 set di misure e  
5000 fit



## ESEMPIO 1

5000 set di misure e  
5000 fit

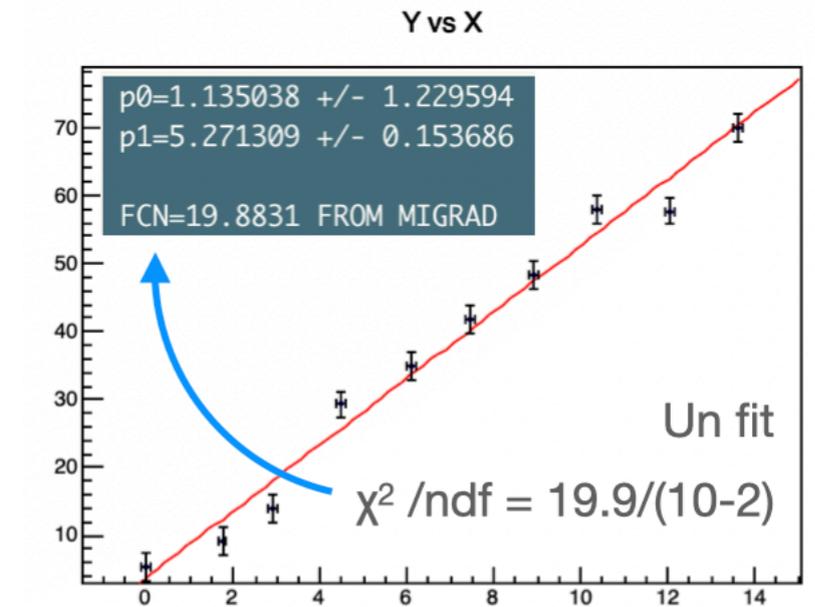
```
double chi2 = fun->GetChisquare();
double pchi2 = fun->GetProb();
```



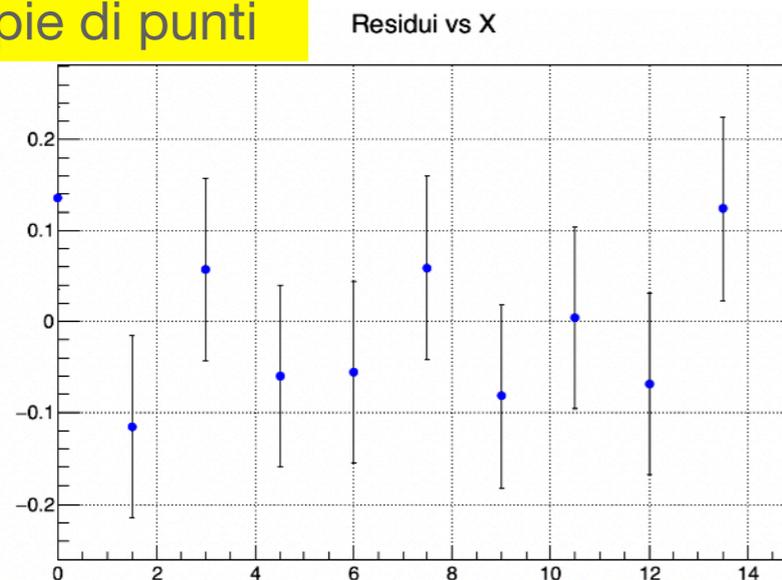
Se  $x$  è una variabile aleatoria distribuita secondo la pdf  $f(x)$ , allora  $f(x)$  è distribuita uniformemente tra 0 e 1

# ESEMPIO 2

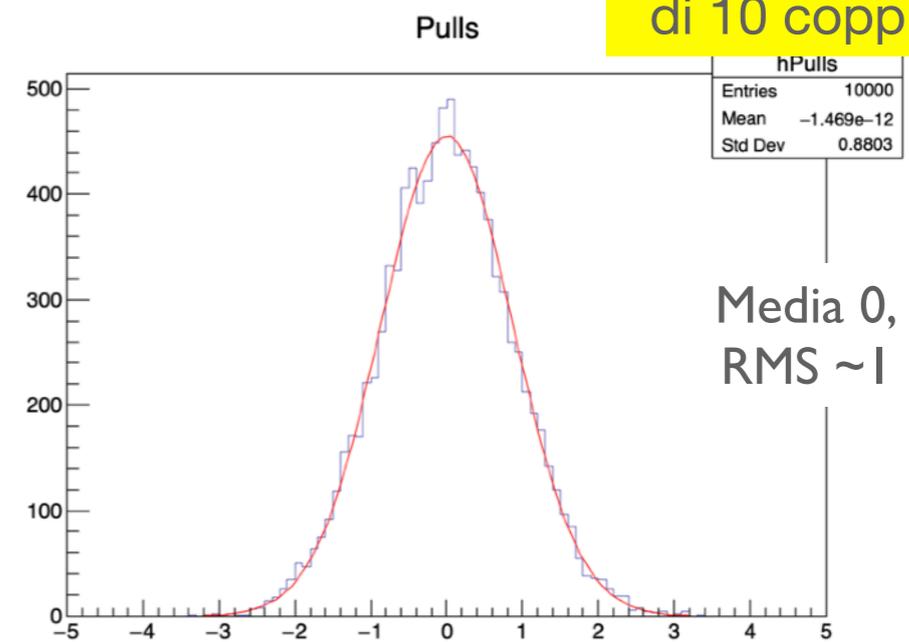
- Residui e Residui normalizzati
  - Per valutare la bontà' di ogni fit e' utile studiare (oltre al chi2) i residui
    - $R_i = y_i - f(x_i; \vec{\lambda}_0)$
    - Che devono essere distribuiti casualmente attorno a 0, essendo statisticamente compatibili con fluttuazioni gaussiane relative a un deviazione standard  $\sigma_i$



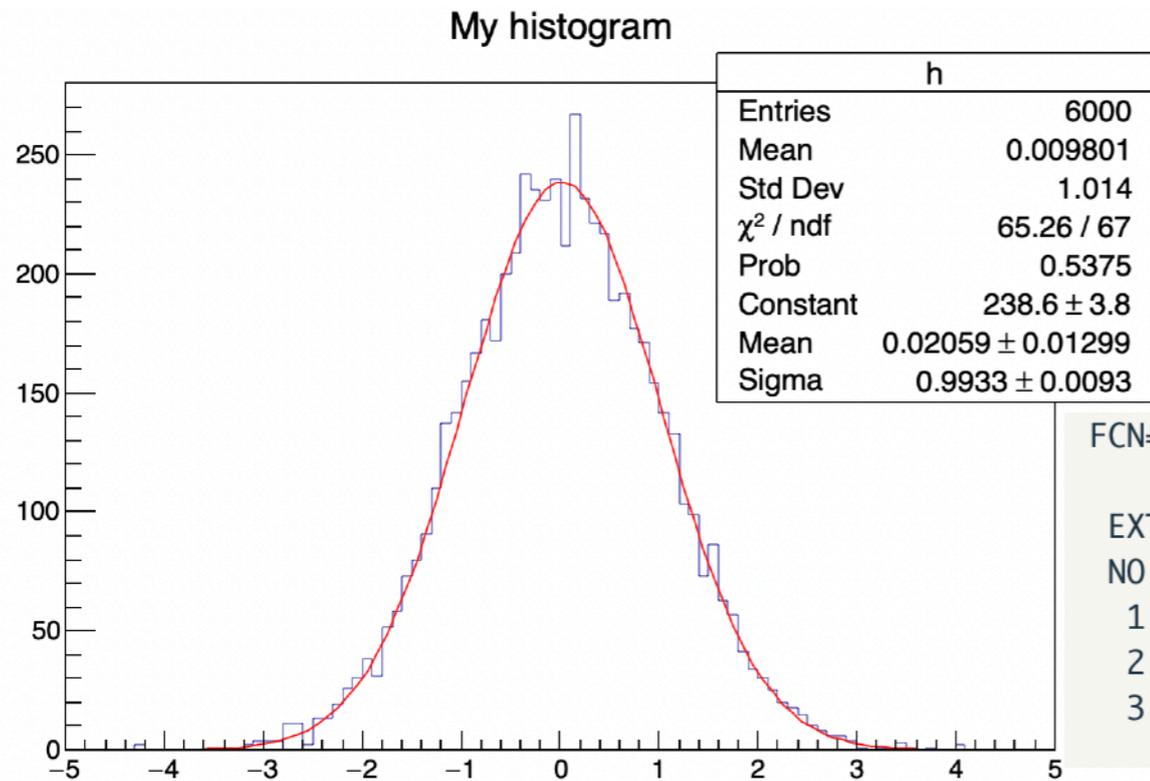
Residui in un fit lineare a 10 coppie di punti



Residui normalizzato su fit lineari a 1000 set di 10 coppie di punti



## ESEMPIO 3



Generato estraendo da una gaussiana normale

Fit con una gaussiana, tutti i e parametri da determinare contemporaneamente nel fit

FCN=65.2581 FROM MIGRAD STATUS=CONVERGED 62 CALLS 63 TOTAL  
EDM=9.11307e-10 STRATEGY= 1 ERROR MATRIX ACCURATE

EXT NO.	PARAMETER NAME	VALUE	ERROR	STEP SIZE	FIRST DERIVATIVE
1	Constant	2.38594e+02	3.80928e+00	1.23098e-02	-6.27631e-06
2	Mean	2.05919e-02	1.29916e-02	5.15403e-05	2.31062e-03
3	Sigma	<u>9.93349e-01</u>	9.33666e-03	1.00053e-05	2.46257e-03

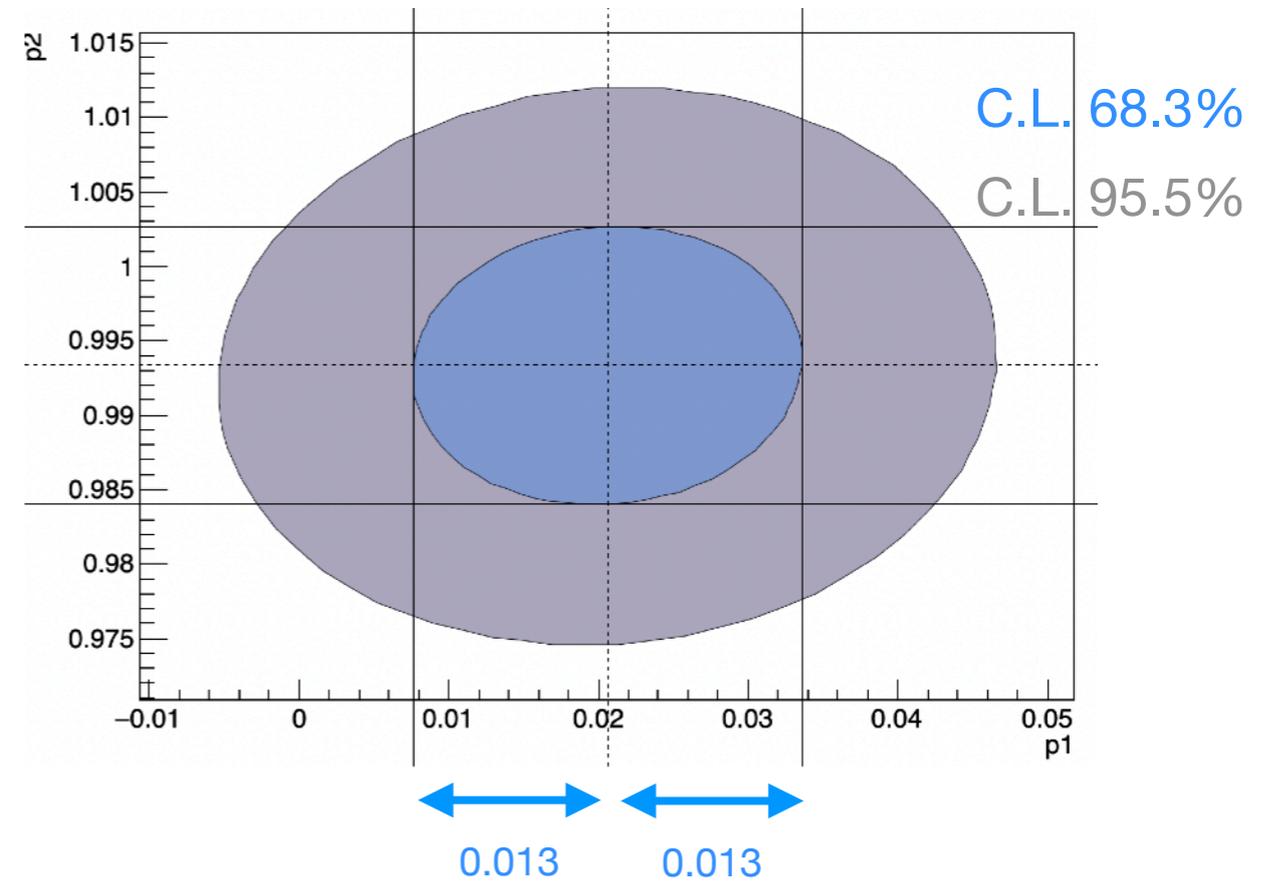
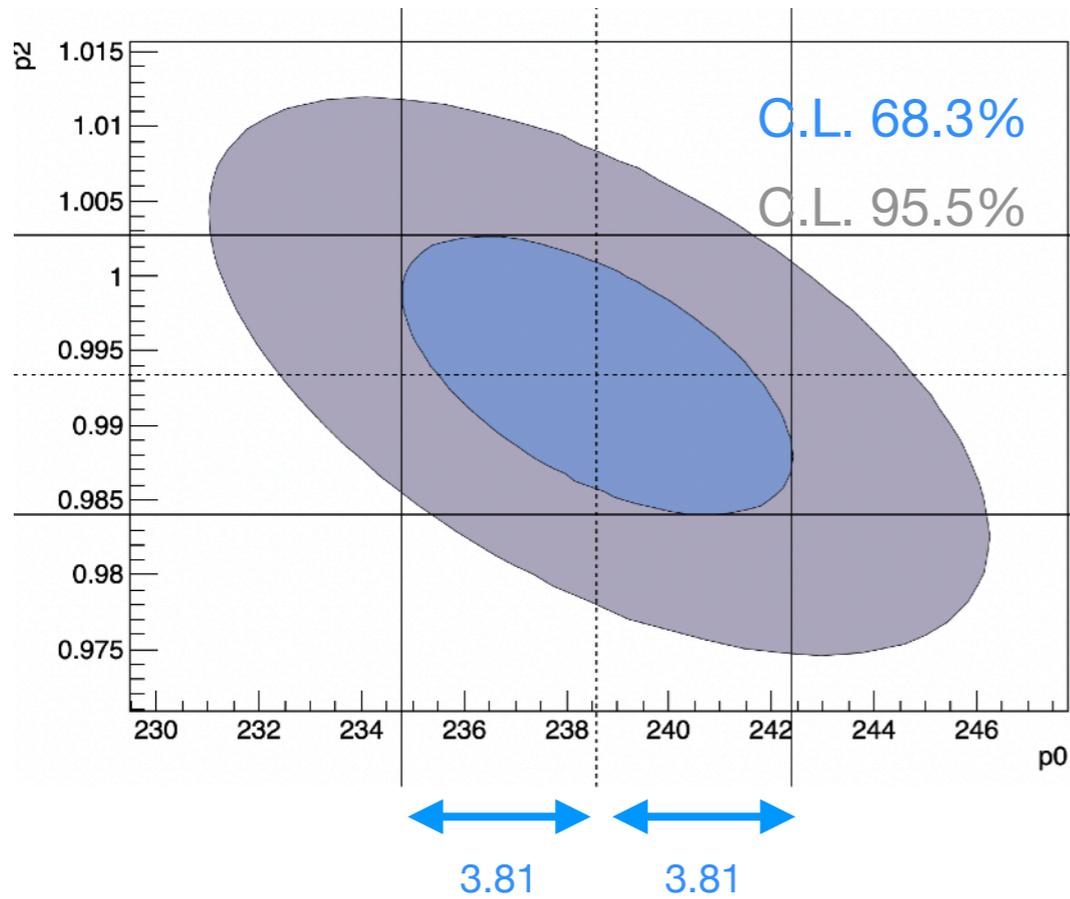
c11=14.510645    c12=-0.001761    c13=-0.020707  
c21=-0.001761    c22=0.000169    c23=0.000007  
c31=-0.020707    c32=0.000007    c33=0.000087

Matrice di covarianza

p2=0.993349 err 0.009337  
p1=0.020592 err 0.012992  
p0=238.593819 err 3.809284

Parametro con i loro errori

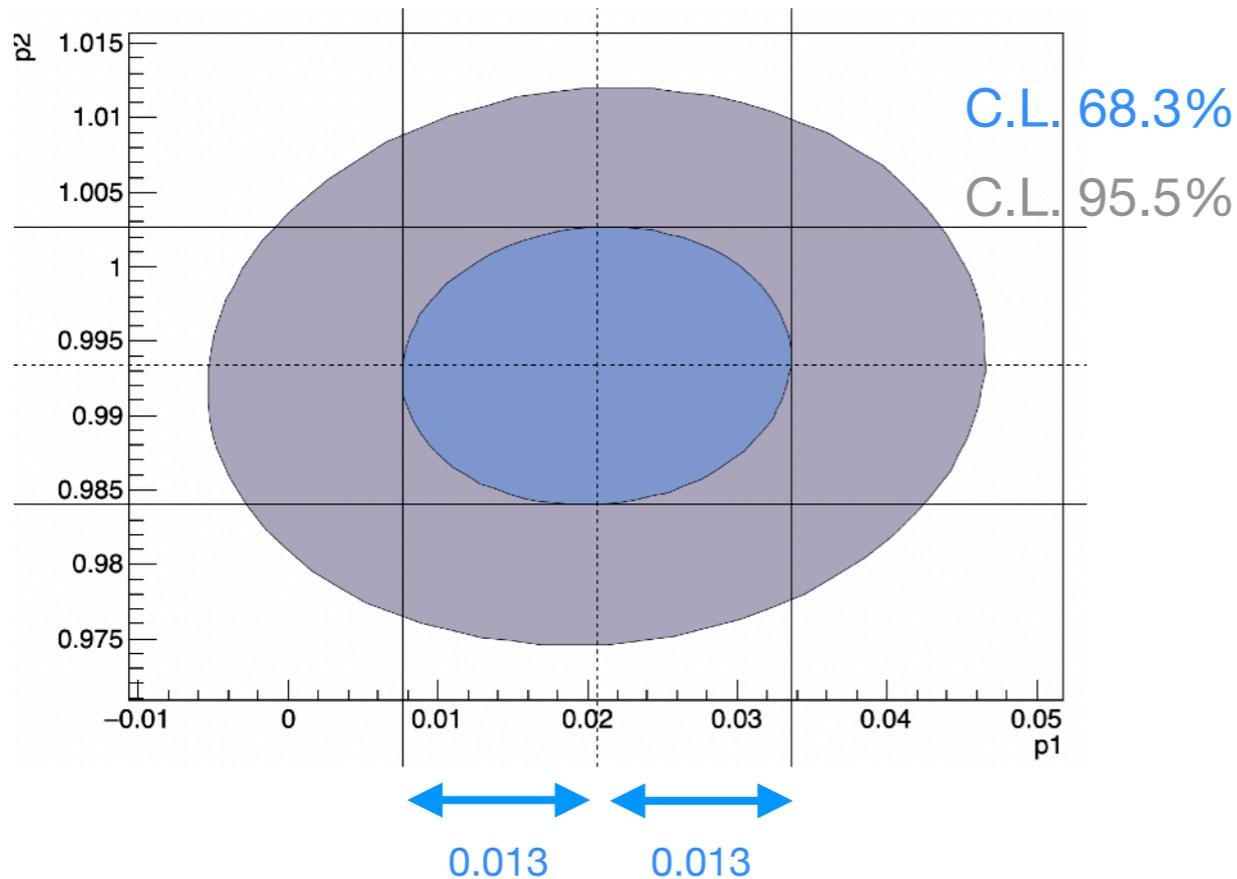
## ESEMPIO 3



$c_{11}=14.510645$	$c_{12}=-0.001761$	$c_{13}=-0.020707$
$c_{21}=-0.001761$	$c_{22}=0.000169$	$c_{23}=0.000007$
$c_{31}=-0.020707$	$c_{32}=0.000007$	$c_{33}=0.000087$

$p_2=0.993349$  err 0.009337  
 $p_1=0.020592$  err 0.012992  
 $p_0=238.593819$  err 3.809284

## ESEMPIO 3



c11=14.510645	c12=-0.001761	c13=-0.020707
c21=-0.001761	c22=0.000169	c23=0.000007
c31=-0.020707	c32=0.000007	c33=0.000087

p2=0.993349 err 0.009337  
 p1=0.020592 err 0.012992  
 p0=238.593819 err 3.809284

```
// Chiedo a codice di graficarmi la regione di confidenza^M
// ad una sigma (68.3%) e a due sigma (95.5%) entro la quale si possono muovere
// i parametri 1 e 2 (media e varianza)
```

```
// Per ottenere curve di livello a n-sigma, l'argomento deve essere n^2.
gMinuit->SetErrorDef(4.); //la variazione del chi2 che definisce la regione dipendera' dal numero di parametri liberi
TGraph *gr11 = (TGraph*)gMinuit->Contour(80,1,2);
gr11->SetFillColor(40);
gr11->GetXaxis()->SetTitle("p1");
gr11->GetYaxis()->SetTitle("p2");
gr11->Draw("alf");
// Per ottenere curve di livello a n-sigma, l'argomento deve essere n^2.
gMinuit->SetErrorDef(1.); //la variazione del chi2 che definisce la regione dipendera' dal numero di parametri liberi
TGraph *gr12 = (TGraph*)gMinuit->Contour(80,1,2);
gr12->SetFillColor(38);
gr12->Draw("lf");
```