Simulazione dell'esperienza dello spettrometro a prisma

Attilio Andreazza
Università degli Studi di Milano

November 15, 2000

1 Introduzione

Una misura sperimentale consiste nella raccolta di un insieme di dati, che non sono esatti, ma di cui è generalmente nota la distribuzione statistica (tipicamente si assume una distribuzione gaussiana attorno al valore vero). Generalmente questi dati vengono poi elaborati per dedurne il valore di grandezze fisiche interessanti. Per esempio, dalle misure del periodo di oscillazione T e della lunghezza l di un pendolo, si può ricavare il valore dell'accelerazione di gravità:

$$g = \frac{4\pi^2 l}{T^2}.$$

In un caso come questo, in cui la dipendenza funzionale della grandezza fisica significativa dalle quantità misurate è relativamente semplice, possiamo stimare l'errore su g attraverso le semplici formule di propagazione degli errori:

$$\left(\frac{\sigma_g}{g}\right)^2 = \left(\frac{\sigma_l}{l}\right)^2 + \left(2\frac{\sigma_T}{T}\right)^2.$$

Tuttavia molto spesso un esperimento richiede un'analisi dei dati molto più complessa e non è possibile dare una semplice formula matematica per connettere le variabili misurate (e le loro incertezze) con le variabili derivate (e le loro incertezze). In altri casi l'ipotesi stessa di errori gaussiani non è valida. In tal caso si deve procedere ad una simulazione del processo di analisi dei dati per essere in grado di valutare se il procedimento è corretto e dare una stima delle incertezze.

Tale processo viene anche utilizzato durante il progetto di nuovi esperimenti, per rispondere a domande del tipo: "Se voglio ottenere un certo errore sulla grandezza fondamentale X, con quale errore devo misurare le quantità osservabili W, Y e Z?"

In questo laboratorio, costruiremo una simulazione dell'esperienza del prisma di rifrazione e ne analizzeremo i dati utilizzando il metodo dei minimi quadrati. In questa esperienza tutta la propagazione degli errori può essere calcolata esplicitamente ed anche la determinazione dei parametri può essere fatta usando una regressione lineare. Questo permetterà in ogni momento di controllare i risultati della procedura.

Nel seguito verranno indicati degli obiettivi da raggiungere. **Essi saranno indicati in grassetto.** In più saranno indicati alcuni aspetti opzionali. *Essi verranno indicati in corsivo.* Infine la sezione 6 contiene un argomento addizionale da svolgere per chi fosse interessato a vedere come funziona il metodo di χ^2 nel caso non lineare.

Come esempio di caso in cui la propagazione gaussiana degli errori non è valida, considerate una quantità α, che è stata misurata valere 2.0 ± 0.5. Applicando la propagazione degli errori, quale sarebbe la migliore stima di $1/\alpha$ ed il suo errore? Provate ora a generare 10000 misure di α usando una distribuzione gaussiana con valor medio 2 e $\sigma = 0.5$. Usate queste misure per generare la distribuzione di $1/\alpha$: la distribuzione è gaussiana? Che valore medio ha? Qual è il valore della sua r.m.s.?

Come esempio di procedura per la quale non e' facile dare una stima a priori della precisione, immaginate il seguente metodo per la stima di π. Siano x_1 e x_2 due numeri estratti casualmente da una distribuzione uniforme tra 0 e 1. Consideriamo un esperimento consistente di 10000 estrazioni della coppia x_1, x_2: π può venire stimato dalla frequanza osservata dei casi in cui $x_1^2 + x_2^2 < 1$ (è semplice dimostrare che la probabilità di tale evento è pari a $\pi/4$). Effettuate 100 di questi esperimenti: quali sono il valor medio e la varianza di dei valori ottenuti? Questo puo' sembrare un esempio banale, ma è più o meno cosí che funzionano le misure di sezione d'urto in fisica nucleare e subnucleare...

2 Definizione delle grandezze

Durante l'esperienza del prisma di rifrazione vengono determinati l'angolo α di apertura del prisma e l'indice di rifrazione del materiale $n(\lambda)$ per diverse lunghezze d'onda.

Successivamente una regressione lineare viene utilizzata per determinare i parametri A e B della formula di Cauchy per l'indice di rifrazione

$$n(\lambda)^2 = A + \frac{B}{\lambda^2}. \tag{1}$$

Tutte queste grandezze vengono derivate a partire da misure di angoli su di un goniometro. L'errore sulla misura di tali angoli è determinato da diversi fattori: la divisione sulla scala del goniometro, la dimensione fisica delle immagini da

Linea	λ [nm]
Giallo 1	579.1
Giallo 2	577.0
Verde	546.1
Azzurro	491.6
Indaco	435.8
Viola 1	407.7
Viola 2	404.7

Table 1: Linee nel visibile del tubo di Plucker a vapori di Hg

osservare, la capacità dell'osservatore di determinare il punto di minima deflessione. Per semplicità assumeremo che tutte le misure abbiano un'incertezza comune σ_θ.

La simulazione consisterà nel

1. scegliere un valore vero delle grandezze primarie (in questo caso α, A e B),
2. da queste calcolare il valore vero delle osservabili (in questo caso i vari angoli),
3. applicare ad esse gli errori sperimentali (gaussiane con larghezza σ_θ),
4. utilizzare i valori delle osservabili simulate per ricostruire le grandezze intermedie $n(\lambda)$,
5. ed infine utilizzare i valori ricostruiti per determinare le stime di A e B e confrontarle con i valori veri, determinando cosí la precisione del metodo.

I valori "veri" da usare nella simulazione devono essere approssimazioni sensate ai valori che poi verranno misurati nell'esperimento. In questo caso, si dovranno usare i seguenti valori:

$$\begin{aligned}
\alpha_{\mathrm{vero}} &= 50^\circ \\
A_{\mathrm{vero}} &= 2.7 \\
B_{\mathrm{vero}} &= 6 \times 10^4 \ \mathrm{nm}^2 \\
\sigma_\theta &= 1' = 0.3 \ \mathrm{mrad}
\end{aligned}$$

Le lunghezze d'onda delle righe dello spettro della lampada a mercurio sono date nella tabella 1.

3 Misura dell'angolo α

L'angolo α viene determinato mettendo il prisma in una posizione θ_1 e fissando l'oculare sulla posizione dell'immagine della lampada dopo la riflessione su una

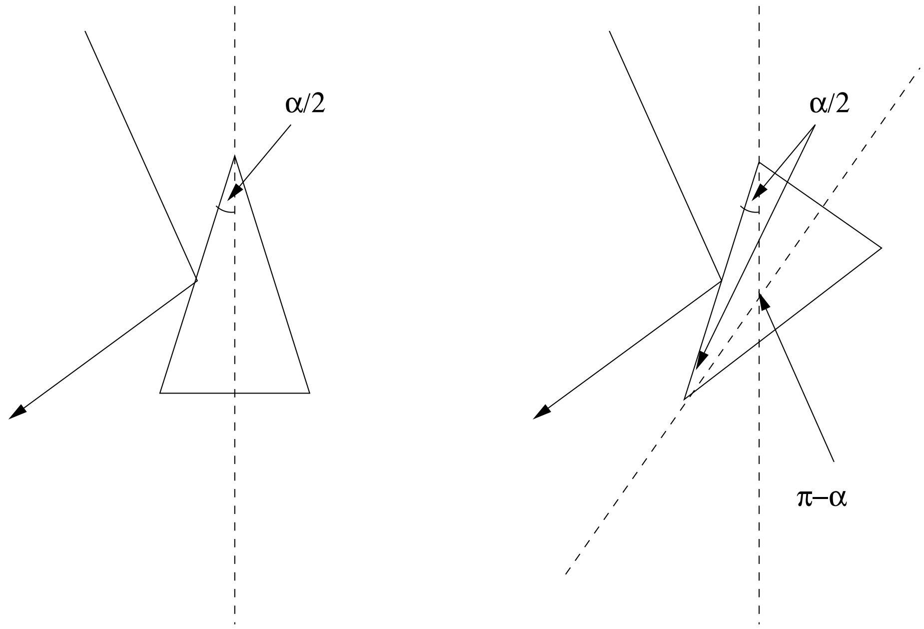

Figure 1: Misura dell'angolo di apertura del prisma attraverso la riflessione.

faccia del prisma. Dopo di ciò si ruota il prisma in modo che la seconda faccia rifletta la lampada nella stessa direzione e si misura la posizione θ_2 del prisma. Come mostrato in figura 1, si ha

$$\alpha = 180^\circ - (\theta_1 - \theta_2)\,. \tag{2}$$

La simulazione di questa misura consiste nei seguenti passi:

1. scegliere a caso un valore di $\theta_{1,\text{vero}}$ in una distribuzione uniforme tra 90° e 270°;
2. calcolare il valore di $\theta_{2,\text{vero}} = \theta_{1,\text{vero}} + \alpha_{\text{vero}} - 180^\circ$;
3. determinare un possibile valore misurato di $\theta_1 = \theta_{1,\text{vero}} + \epsilon_1$ dove ϵ_1 è l'errore sperimentale, estratto da una distribuzione gaussiana con valor medio 0 e sigma σ_θ;
4. determinare un possibile valore misurato di $\theta_2 = \theta_{2,\text{vero}} + \epsilon_2$ dove ϵ_2 è l'errore sperimentale, estratto da una distribuzione gaussiana con valor medio 0 e sigma σ_θ;
5. determinare il valore stimato di α dall'equasione 2.

Fare un programma (od una macro) che ripeta 10000 volte questa procedure e mettere i valori risultanti di α in un grafico. Il valor medio della distribuzione delle misure di α è compatibile con α_{vero}? La sigma della distribuzione è compatibile con quella che viene dalla propagazione degli errori?

4 Misura degli indici di rifrazione

L'indice di rifrazione per le diverse lunghezze d'onda, si determina misurando l'angolo di deflessione minima delle varie righe della lampada.

La procedura della misura e' la determinazione della posizione della della linea al minimo di deflessione $\theta_m(\lambda)$ per le varie linee.

Successivamente, togliendo il prima si misura la posizione θ_0 del fascio non deflesso.

L'angolo di deviazione minima

$$\delta_m(\lambda) = \theta_m(\lambda) - \theta_0$$

è collegato all'indice di rifrazione dalla relazione

$$n(\lambda) = \frac{\sin \frac{\delta_m(\lambda)+\alpha}{2}}{\sin \frac{\alpha}{2}}. \tag{3}$$

Ricordiamo che, mentre i valori di $\theta_m(\lambda)$ sono diversi (ed indipendenti) tra loro, i valori di α e θ_0 sono gli stessi per tutti i valori di λ.

Per simulare l'esperimento bisognerà procedere in maniera analoga al caso della misura di α:

1. dati i valori di λ dalla tabella 1 ed i valori A_{vero} e B_{vero}, determinare i valori di $n_{\text{vero}}(\lambda)$;
2. da $n_{\text{vero}}(\lambda)$ e α_{vero}, ricavare i valori $\delta_{m,\text{vero}}(\lambda)$;
3. scegliere $\theta_{0,\text{vero}}$ come un numero casuale tra $0°$ e $180°$;
4. da $\delta_{m,\text{vero}}(\lambda)$ e $\theta_{0,\text{vero}}$, ricavere i valori di $\theta_{m,\text{vero}}(\lambda)$;
5. simulare i valori osservati θ_0 e $\theta_m(\lambda)$, aggiungendo ai valori veri un errore casuale (gaussiano con sigma pari a σ_θ);
6. simulare il valore osservato di α, aggiungendo al valore vero un errore casuale con la sigma determinata nella sezione 3;
7. determinare i valori osservati $n(\lambda)$.

Scrivere un programma, (od una macro) che scriva su di un file i risultati, ovvero i valori osservati di $n(\lambda)$, per 10000 esperimenti di questo tipo.

Scegliere due lunghezze d'onda e fare gli istogrammi dei residui $\epsilon_i = n(\lambda_i) - n_{\mathbf{vero}}(\lambda_i)$ con $i = 1, 2$. Qual è l'errore finale sulla misura di $n(\lambda)$? *La sigma della distribuzione è quella che ci si attende dalla propagazione degli errori?*

Fare l'istogramma bidimensionale di ϵ_1 verso ϵ_2. Com'è questa distribuzione? Calcolare il coefficiente di correlazione ρ tra queste due quantità:

$$\rho = \frac{\langle \epsilon_1 \epsilon_2 \rangle}{\sqrt{\langle \epsilon_1^2 \rangle}\sqrt{\langle \epsilon_2^2 \rangle}}. \tag{4}$$

Qual è l'origine della correlazione?

Uno degli scopi principali di una simulazione è ottenere delle informazioni utili su come effettuare l'esperimento. Per esempio, siccome α e θ_0 sono utilizzate per tutte le lunghezze d'onda, potremmo decidere di effettuare multiple misure di queste grandezze, per migliorarne la precisione.

Ciò ha senso soltanto se le incertezze su queste grandezze dominano la misura.

Per vedere qual'è il contributo dell'incertezza su α all'incertezza totale, rigenerare un campione di 10000 esperimenti, stavolta però assumendo precisione assoluta nella determinazione di $\theta_m(\lambda)$ e θ_0. In tal caso la larghezza dei residui sarà dovuta solo ad una sorgente di incertezza.

Ripetere la procedura per valutare l'effetto dell'incertezza su θ_0 e su $\theta_m(\lambda)$.

Come si presentano gli istogrammi bidimensionali ed il valore di ρ per questi tre casi?

Se l'errore su α o su θ_0 danno un contributo maggiore di quello di $\theta_m(\lambda)$, quante volte sarà necessario ripetere la misura di queste quantità per avere un errore confrontabile?

Per terminare questa parte, bisognerà rigenerare l'insieme di 10000 esperimenti, assumendo su α un errore tale da dare un contributo all'errore sugli $n(\lambda)$ simile a quello di $\theta_m(\lambda)$.

5 Determinazione di A e B

Lo scopo finale dell'esperimento è ricavare, a partire dai valori osservati di $n(\lambda)$ i valori delle costanti A e B della parametrizzazione (1).

Essendo la parametrizzazione lineare, sarà possibile fare un fit ad una linea retta di $n(\lambda)^2$ come funzione di $1/\lambda^2$.

A tale proposito, ricordiamo un po' di formule senza dimostrazione.

Nel caso di un fit di un insieme di punti sperimentali (x_i, y_i), con errore σ_i su y_i, ad una retta $y = a + bx$, la migliore stima dei parametri a e b è quella data dalla minimizzazione del χ^2:

$$\chi^2(a,b) = \sum_{i=1}^{N} \left(\frac{y_i - a - bx_i}{\sigma_i}\right)^2 .$$

Definendo le quantità

$$\begin{array}{rcl} W & = & \sum_{i=1}^{N} \frac{1}{\sigma_i^2}, \\ X & = & \sum_{i=1}^{N} \frac{x_i}{\sigma_i^2}, \\ Y & = & \sum_{i=1}^{N} \frac{y_i}{\sigma_i^2}, \\ XX & = & \sum_{i=1}^{N} \frac{x_i^2}{\sigma_i^2}, \\ XY & = & \sum_{i=1}^{N} \frac{x_i y_i}{\sigma_i^2}, \\ \Delta & = & W \cdot XX - (X)^2, \end{array}$$

la migliore stima di a e b è data da

$$\begin{array}{rcl} a & = & \frac{XX \cdot Y - X \cdot XY}{\Delta}, \\ b & = & \frac{W \cdot XY - X \cdot Y}{\Delta}, \end{array} \quad (5)$$

e le relative varianze sono

$$\begin{array}{rcl} \sigma_a^2 & = & \frac{XX}{\Delta}, \\ \sigma_b^2 & = & \frac{W}{\Delta}. \end{array} \quad (6)$$

Poiché gli errori sui valori di $n(\lambda)$ sono noti dopo lo studio della sezione 4, l'utilizzarli nel fit è un semplice esercizio di propagazione degli errori.

Utilizzare il file scritto alla fine della sezione 4 per produrre 10000 stime dei parametri A e B dell'equazione (1) e delle relative incertezze σ_A e σ_B.

Confrontare i valori calcolati di σ_A e σ_B con gli errori "veri" ottenuti dalle distribuzioni dei residui $A - A_{\text{vero}}$ e $B - B_{\text{vero}}$. Qual è la ragione della differenza?

Provare ad applicare lo stesso procedimento al caso in cui α e θ_0 sono noti con precisione assoluta.

6 ...una parte molto opzionale

In questo caso, la relazione (1) è lineare nei parametri A e B, ma non sempre si ha il caso di relazioni lineari tra i parametri e le grandezze osservate.

Nel caso la relazione non fosse lineare, il procedimento per la determinazione dei parametri diventa praticamente non risolvibile in modo analitico, ma ancora accessibile dal punto di vista numerico.

Supponiamo di avere delle misure y_i con errore σ_i, esprimibili in termini di alcune variabili note x_i e di parametri da determinare $A, B, \ldots$, di modo che, in assenza di errori sperimentali si avrebbe la relazione

$$y_i = f\left(x_i, A, B, \ldots\right).$$

La migliore stima dei parametri è quella che minimizza il χ^2

$$\chi^2\left(A, B, \ldots\right) = \sum_{i=1}^{N} \frac{\left(y_i - f\left(x_i, A, B, \ldots\right)\right)^2}{\sigma_i^2}.$$

Se abbiamo una soluzione di prova dei parametri $A_0, B_0, \ldots$ sufficientemente vicina a quella vera, possiamo scrivere

$$f\left(x_i, A, B, \ldots\right) \approx f\left(x_i, A_0, B_0, \ldots\right) + \frac{\partial f}{\partial A}\left(x_i, A_0, B_0, \ldots\right)\left(A - A_0\right) + \frac{\partial f}{\partial B}\left(x_i, A_0, B_0, \ldots\right)\left(B - B_0\right) + \ldots$$

ed il χ^2 è lineare nelle nuove incognite $\delta A = A - A_0$, $\delta B = B - B_0$ e cosí via.

La condizione del minimo del χ^2 diventa quindi il sistema di equazioni

$$\begin{array}{rcll} \frac{\partial \chi^2}{\partial(\delta A)} & = & \sum_{i=1}^{N} \frac{1}{\sigma_i^2}\left(y_i - f\left(x_i, A_0, B_0, \ldots\right) - \frac{\partial f}{\partial A}\delta A - \frac{\partial f}{\partial B}\delta B - \ldots\right)\frac{\partial f}{\partial A} & = 0 \\ \frac{\partial \chi^2}{\partial(\delta B)} & = & \sum_{i=1}^{N} \frac{1}{\sigma_i^2}\left(y_i - f\left(x_i, A_0, B_0, \ldots\right) - \frac{\partial f}{\partial A}\delta A - \frac{\partial f}{\partial B}\delta B - \ldots\right)\frac{\partial f}{\partial B} & = 0 \\ & & \vdots & \end{array} \tag{7}$$

È facile vedere che usando le definizioni

$$W = \begin{pmatrix} 1/\sigma_1^2 & & \\ & 1/\sigma_2^2 & \\ & & \ddots \end{pmatrix}$$

$$D = \begin{pmatrix} \frac{\partial f}{\partial A}\left(x_1, A_0, B_0, \ldots\right) & \frac{\partial f}{\partial B}\left(x_1, A_0, B_0, \ldots\right) & \cdots \\ \frac{\partial f}{\partial A}\left(x_2, A_0, B_0, \ldots\right) & \frac{\partial f}{\partial B}\left(x_2, A_0, B_0, \ldots\right) & \cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}$$

$$Y = \begin{pmatrix} y_1 - f(x_1, A_0, B_0, \ldots) \\ y_2 - f(x_2, A_0, B_0, \ldots) \\ \vdots \end{pmatrix}$$

$$\delta = \begin{pmatrix} \delta A \\ \delta B \\ \vdots \end{pmatrix}$$

il sistema (7) può essere scritto in forma matriciale

$$D^T W Y - D^T W D \delta = 0 \tag{8}$$

da cui è evidente che la soluzione per il vettore δ è

$$\delta = \left(D^T W D\right)^{-1} D^T W Y. \tag{9}$$

A questo punto risulta chiaro come procedere: data una stima iniziale dei parametri, si determina un incremento degli stessi che porta verso un valore inferiore del χ^2. Si utilizza questa nuova stima dei parametri come punto centrale di un nuovo sviluppo di Taylor, e si continua iterativamente, fino a quando gli incrementi δ sono sufficientemente piccoli confrontati con gli errori.

Per provare su di un caso concreto, si possono utilizzare come y i valori di $n(\lambda)$ già usati nella sezione 5. La funzione f sarà

$$f(\lambda, A, B) = \sqrt{A + \frac{B}{\lambda^2}}.$$

Siccome ci sono solo due parametri, $D^T W D$ è una matrice 2×2 e quindi facile da invertire.

Si può poi confrontare se i valori di A e B ottenuti con questo metodo sono vicini a quelli stimati con il fit lineare.

Si può dimostrare che la matrice

$$C = \left(D^T W D\right)^{-1}$$

è della forma

$$\begin{pmatrix} \sigma_A^2 & \rho_{AB}\sigma_A\sigma_B & \cdots \\ \rho_{AB}\sigma_A\sigma_B & \sigma_B^2 & \\ \vdots & & \ddots \end{pmatrix}$$

dove ρ_{AB} è una generalizzazione della grandezza definita in (4):

$$\rho_{AB} = \frac{\langle (A - \langle A \rangle)(B - \langle B \rangle) \rangle}{\sqrt{\left\langle (A - \langle A \rangle)^2 \right\rangle \left\langle (B - \langle B \rangle)^2 \right\rangle}}. \tag{10}$$

La matrice C si dice "matrice di covarianza" dei parametri $A, B, \ldots$

7 Conclusione

In un'esperienza semplice come quella dello spettrometro a prisma, tutti i calcoli per la propagazione degli errori si possono effettuare analiticamente, ed anche il fit per la determinazione dei parametri A e B può essere fatto quasi manualmente.

L'analisi del processo di misura attraverso una simulazione ha però permesso di vedere "all'opera" l'effetto dell'avere misure correlate tra di loro, aspetto che sarebbe altrimenti passato inosservato in un trattamento semplificato degli errori.

Nel caso di esperimenti più complessi, una simulazione può essere l'unico modo per procedere alla stima degli errori del processo di analisi dei dato. A volte, anche se un procedimento analitico è possibile, dal punto di vista pratico una simulazione può essere più semplice e più affidabile di una trattazione analitica.

In questo lavoro, a partire da un modello, sono stati generati i dati sperimentali e successivamente a questi dati sono state applicate le stesse procedure di analisi che verranno applicate nell'esperienza di laboratorio. L'analisi dei passi intermedi ha permesso di formulare alcune scelte sulla procedura di misura. Questo è lo stesso approccio che viene usato nell'analisi e nel progetto di esperimenti reali, per quanto complessi essi siano.