

## Fitowanie wykresów w programie GnuPlot

Zbigniew Koza  
Uniwersytet Wrocławski  
Instytut Fizyki Teoretycznej

marzec 2005

1

## Polecenie **fit**

- Polecenie **fit** służy do dopasowywania danych (eksperymentalnych) do wzoru teoretycznego zawierającego kilka nieznanymi parametrów.

2

## Polecenie **fit** w teorii...

- Załóżmy, że mamy zbiór danych  $\{(x_i, y_i, \epsilon_i)\}$ ,  $i = 1, \dots, N$ , gdzie  $\epsilon_i$  jest niepewnością wartości  $y_i$ , oraz funkcja  $f(x; a_1, \dots, a_k)$ . Celem polecenia **fit** jest minimalizacja

$$\chi^2(\bar{a}) = \sum_{i=1}^N \left[ \frac{y_i - f(x_i; \bar{a})}{\epsilon_i} \right]^2$$

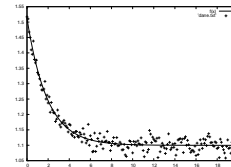
względem  $\bar{a} = a_1, \dots, a_k$ .

- Algorytm: Levenberga i Marquardta

3

## Polecenie **fit** w praktyce...

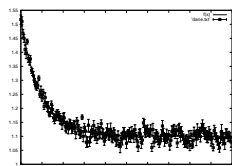
- `> f(x) = a + (b-a)*exp(-x/c)`
- `> fit [0:10] f(x) "dane.txt" via a,b,c`
- `> plot f(x), "dane.txt"`



4

## Polecenie **fit** w praktyce...

- `> f(x) = a + (b-a)*exp(-x/c)`
- `> fit [0:10] f(x) "dane.txt" u 1:2:3 via a,b,c`
- `> plot f(x), "dane.txt" with errorbars`



5

## Analiza wyników

- Ilość iteracji i ich przebieg:

```
Iteration 3
WSSR: 0.0635249 delta(WSSR)/WSSR: -7.93565e-09
delta(WSSR): -5.04111e-010 limit for stopping : 1e-05
lambda : 0.000549057
```

resultant parameter values

```
a      = 1.09976
b      = 1.51207
c      = 1.9132
```

6

WSSR (Weighted sum of squares of residuals) =  $\chi^2$

```
Iteration 3
WSSR: 0.0635249 delta(WSSR)/WSSR: -7.93565e-09
delta(WSSR): -5.04111e-010 limit for stopping : 1e-05
lambda : 0.000549057
```

resultant parameter values

```
a      = 1.09976
b      = 1.51207
c      = 1.9132
```

7

```
Iteration 3
WSSR: 0.0635249 delta(WSSR)/WSSR: -7.93565e-09
delta(WSSR): -5.04111e-010 limit for stopping : 1e-05
lambda : 0.000549057
```

resultant parameter values

```
a      = 1.09976
b      = 1.51207
c      = 1.9132
```

8

## Parametry zbieżności

- „limit for stopping”  
> FIT\_LIMIT = 1e-8
- maks. liczba iteracji  
> FIT\_MAXITER = 10

9

## Ocena jakości dopasowania

```
degrees of freedom (ndf) : 197
rms of residuals (stdfit) = sqrt(WSSR/ndf) : 1.26777
variance of residuals (reduced chisquare) = WSSR/ndf : 1.60724
```

- **ndf** = ilość punktów pomiarowych - ilość parametrów
- **stdfit**
  - jeśli dane miały oszacowany błąd pomiaru, nasza teoria jest poprawna i zachodzą inne warunki stosowalności polecenia fit, to wartość **stdfit** powinna być bliska 1  
> fit "dane.txt" u 1:2:3
  - Jeśli nie znamy niepewności pomiaru, to **stdfit** daje wyobrażenie o średniej wartości tego błędu (o ile teoria jest poprawna etc.)  
> fit "dane.txt"

10

## Macierz korelacji

correlation matrix of the fit parameters:

	a	b	c
a	1.000		
b	0.205	1.000	
c	-0.508	-0.743	1.000

- W idealnym przypadku wyrazy pozadiagonalne znikają.

11

## Poszukiwane parametry

Final set of parameters	Asymptotic Standard Error
=====	=====
a = 1.09948	+/- 0.001928 (0.1754%)
b = 1.51734	+/- 0.008143 (0.5366%)
c = 1.91274	+/- 0.05997 (3.135%)

- Jeżeli błędy są rzędu kilkudziesięciu procent, badaną teorię można odrzucić

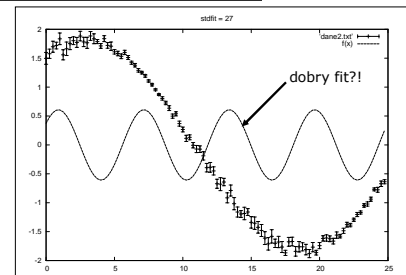
12

## Możliwe źródła kłopotów

- „pechowe” wartości początkowe
- zła teoria
- „nie-normalny” rozkład błędów
- nieprawidłowe wartości niepewności („błędów”) pomiarów
- silne korelacje parametrów – zły wybór dopasowywanej funkcji, np.  $f(x) = a \cdot \exp((x-b)/c)$
- poszukiwane parametry mają różne rzędy wielkości

13

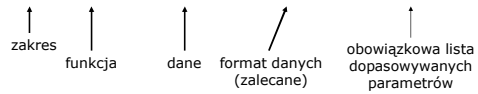
## Rola parametrów początkowych



14

## Podsumowanie

fit [0:10] f(x) "dane.txt" u 1:2:3 via a,b,c



15