Řešení seminárních úloh 11

1. V experimentu byla měřena závislost napětí na prodloužení při tahové deformaci kovového drátu. Byly zjištěny následující hodnoty relativního prodloužení ε a napětí σ. Chyba určení ε byla minimálně o řád menší než chyba určení σ a proto ji zanedbáváme.

ε (%)	σ (GPa)
0.10	0.11 ± 0.03
0.20	0.16 ± 0.02
0.30	0.18 ± 0.02
0.40	0.22 ± 0.03
0.50	0.33 ± 0.02
0.60	0.39 ± 0.03
0.70	0.42 ± 0.02
0.80	0.51 ± 0.03
0.90	0.63 ± 0.03
1.00	0.65 ± 0.02

Vyneste do grafu závislost σ na ε a proveďte lineární fit této závislosti metodou nejmenších čtverců. Z lineárního fitu určete Youngův modul pružnosti měřeného vzorku a jeho chybu.

Řešení:
Podle Hookova zákona platí mezi napětím σ a relativním prodloužení ε lineární vztah $\sigma = E\varepsilon$, kde E je Youngův modul pružnosti. Závislost σ na ε proto budeme fitovat přímkou procházející počátkem a se směrnicí E. Chyby naměřených hodnot σ_i označíme jako Δ_i (aby nedošlo k zaměnění se σ nebo ε). Směrnici E určíme metodou nejmenších čtverců, kde minimalizujeme „chí-kvadrát“ ve tvaru:

$$\chi^2(E) = \sum_{i=1}^{10} \frac{(\sigma_i - E\varepsilon_i)^2}{\Delta_i^2}.$$

Funkce $\chi^2(E)$ nabývá minima pro parametr $\hat{E}$.

$$\hat{E} = \frac{\langle \varepsilon\sigma \rangle}{\langle \varepsilon^2 \rangle}$$

$$\hat{E} = \frac{\sum_{i=1}^{10} \frac{\varepsilon_i \sigma_i}{\Delta_i^2}}{\sum_{i=1}^{10} \frac{\varepsilon_i^2}{\Delta_i^2}}$$

$$\hat{E} = 64.88 \text{ GPa}$$

Chybu $\sigma_{\hat{E}}$ odhadu parametru $\hat{E}$ spočítáme metodou přenosu chyb a dostaneme:

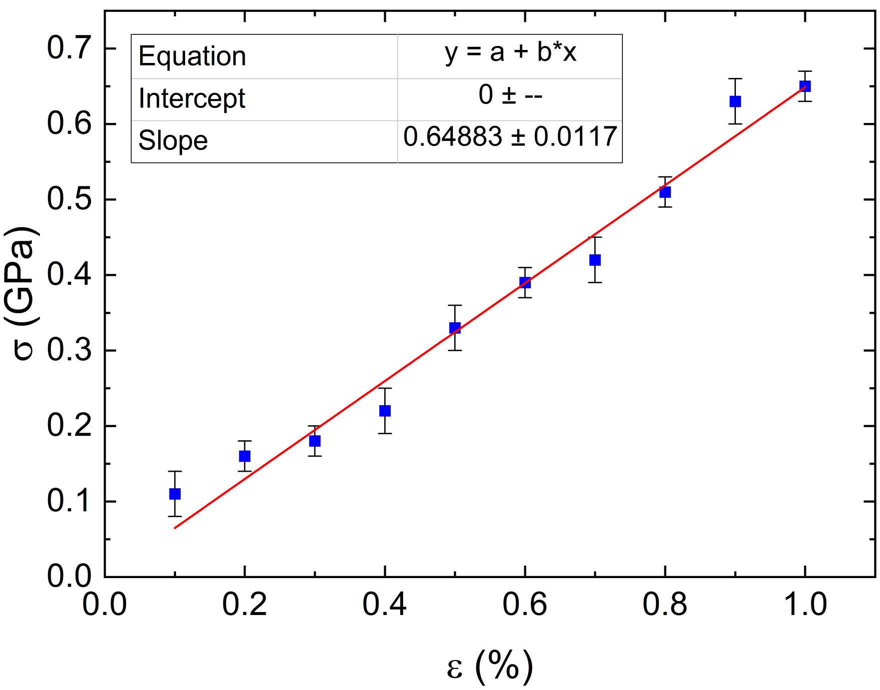
$$\sigma_{\hat{E}}^2 = \frac{1}{\langle \varepsilon^2 \rangle}$$

$$\sigma_{\hat{E}}^2 = \frac{1}{\sum_{i=1}^{10} \frac{\varepsilon_i^2}{\Delta_i^2}}$$

$$\sigma_{\hat{E}}^2 = \frac{1}{\sqrt{\sum_{i=1}^{10} \frac{\varepsilon_i^2}{\Delta_i^2}}}$$

$$\sigma_{\hat{E}} = 1.17 \text{ GPa}$$

Naměřený Youngův modul pružnosti je $\hat{E} = (65 \pm 1)$ GPa. Stejný výsledek bychom získali fitováním lineární závislosti $\sigma = E\varepsilon$ např. v Originu.
Poznámka: Pozor na jednotku $[\varepsilon] = 0.01$!



2. Niob je kov s kubickou prostorově centrovanou krystalickou strukturou. Při teoretických výpočtech elektronové struktury Nb byly zjištěny následující hodnoty energie připadající na 1 atom pro různé hodnoty mřížové konstanty a. Relativní chyba vypočítaných hodnot energie je 0.1%.

a (Å)	E (eV)
3.4000	-11.090
3.3000	-11.271
3.2500	-11.313
3.2000	-11.306
3.1000	-11.172
3.0000	-10.817

Proveďte parabolický fit této závislosti metodou nejmenších čtverců a z fitu najděte rovnovážnou mřížovou konstantu Nb, tj. hodnotu a, pro kterou má systém nejnižší energii.

Řešení:
Modelová funkce je $\lambda(a|\boldsymbol{\theta}) = \theta_0 + \theta_1 a + \theta_2 a^2$. Hodnoty modelové funkce pro 6 uvažovaných hodnot mřížové konstanty a můžeme zapsat jako sloupcový vektor $\boldsymbol{\lambda} = \boldsymbol{A} \cdot \boldsymbol{\theta}$, kde A je matice 6×3.

$$\boldsymbol{A} = \begin{pmatrix} 1 & a_1 & a_1^2 \\ 1 & a_2 & a_2^2 \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ 1 & a_6 & a_6^2 \end{pmatrix}$$

Veličinu $\chi^2(\boldsymbol{\theta})$ lze vyjádřit maticovým zápisem

$$\chi^2(\boldsymbol{\theta}) = (\boldsymbol{E} - \boldsymbol{A}\boldsymbol{a})^T \boldsymbol{V}^{-1} (\boldsymbol{E} - \boldsymbol{A}\boldsymbol{a}),$$

kde $\boldsymbol{E}$ je vektorem hodnot energie (nikoli jednotková matice) a $\boldsymbol{V}$ je kovarianční matice proměnných E_i:

$$V_{ij} = \mathrm{cov}(E_i, E_j)$$

$$V_{ij} = \begin{cases} (\eta_E E_i)^2 & \text{pro } i = j \\ 0 & \text{pro } i \neq j \end{cases}$$

Jako $\eta_E = 0.001$ jsme označili relativní chybu určení energie E. Minimum χ^2 získáme jeho derivací podle parametrů $\boldsymbol{\theta}$ a její položení rovné nule. Dostáváme soustavu 3 lineárních rovnic pro 3 neznámé, kterou můžeme zapsat maticovou rovnicí.

$$\boldsymbol{A}^T \boldsymbol{V}^{-1} \boldsymbol{A} \hat{\boldsymbol{\theta}} = \boldsymbol{A}^T \boldsymbol{V}^{-1} \boldsymbol{E}, \tag{1}$$

kde matice soustavy je“

$$\boldsymbol{A}^T \boldsymbol{V}^{-1} \boldsymbol{A} = \begin{pmatrix} \sum_{i=1}^3 \frac{1}{(\eta_E E_i)^2} & \sum_{i=1}^3 \frac{a_i}{(\eta_E E_i)^2} & \sum_{i=1}^3 \frac{a_i^2}{(\eta_E E_i)^2} \\ \sum_{i=1}^3 \frac{a_i}{(\eta_E E_i)^2} & \sum_{i=1}^3 \frac{a_i^2}{(\eta_E E_i)^2} & \sum_{i=1}^3 \frac{a_i^3}{(\eta_E E_i)^2} \\ \sum_{i=1}^3 \frac{a_i^2}{(\eta_E E_i)^2} & \sum_{i=1}^3 \frac{a_i^3}{(\eta_E E_i)^2} & \sum_{i=1}^3 \frac{a_i^4}{(\eta_E E_i)^2} \end{pmatrix} \tag{2}$$

a vektor pravé strany je:

$$\boldsymbol{A}^T\boldsymbol{V}^{-1}\boldsymbol{E} = \begin{pmatrix} \sum_{i=1}^{3} \frac{E_i}{(\eta_E E_i)^2} \\ \sum_{i=1}^{3} \frac{a_i E_i}{(\eta_E E_i)^2} \\ \sum_{i=1}^{3} \frac{a_i^2 E_i}{(\eta_E E_i)^2} \end{pmatrix}. \tag{3}$$

Řešení soustavy rovnic (1) je dáno součinem inverzní matice k matici (2) a vektoru (3).

$$\hat{\boldsymbol{\theta}} = \left(\boldsymbol{A}^T\boldsymbol{V}^{-1}\boldsymbol{A}\right)^{-1}\boldsymbol{A}^T\boldsymbol{V}^{-1}\boldsymbol{E}$$
$$\hat{\boldsymbol{\theta}} = \boldsymbol{B}\boldsymbol{E}$$

Číselně:

$$\hat{\boldsymbol{\theta}} = \begin{pmatrix} \hat{\theta}_0 \\ \hat{\theta}_1 \\ \hat{\theta}_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 81.11 & \mathrm{eV} & \\ -57.11 & \mathrm{eV} & \mathrm{\mathring{A}}^{-1} \\ 8.823 & \mathrm{eV} & \mathrm{\mathring{A}}^{-2} \end{pmatrix}$$

Kovariance parametrů $\boldsymbol{\theta}$ udává kovarianční matice $\boldsymbol{U}$.

$$U_{ij} = \mathrm{cov}(\theta_i, \theta_j)$$
$$\boldsymbol{U} = \left[\left(\boldsymbol{A}^T\boldsymbol{V}^{-1}\boldsymbol{A}\right)^{-1}\boldsymbol{A}^T\boldsymbol{V}^{-1}\right]\boldsymbol{V}\left[\left(\boldsymbol{A}^T\boldsymbol{V}^{-1}\boldsymbol{A}\right)^{-1}\boldsymbol{A}^T\boldsymbol{V}^{-1}\right]^T$$
$$\boldsymbol{U} = \boldsymbol{B}\boldsymbol{V}\boldsymbol{B}^T$$

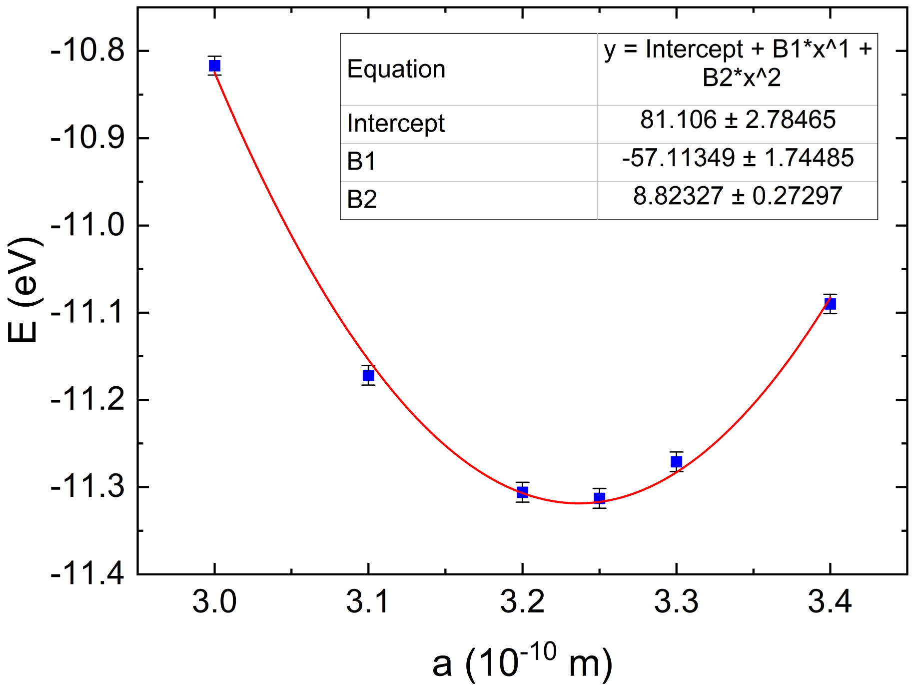
Číselně:

$$\boldsymbol{U} = \begin{pmatrix} 7.754\ \mathrm{eV}^2 & -4.858\ \mathrm{eV}^2\mathrm{\mathring{A}}^{-1} & 0.7595\ \mathrm{eV}^2\mathrm{\mathring{A}}^{-2} \\ -4.858\ \mathrm{eV}^2\mathrm{\mathring{A}}^{-1} & 3.044\ \mathrm{eV}^2\mathrm{\mathring{A}}^{-2} & -0.4762\ \mathrm{eV}^2\mathrm{\mathring{A}}^{-3} \\ 0.7595\ \mathrm{eV}^2\mathrm{\mathring{A}}^{-2} & -0.4762\ \mathrm{eV}^2\mathrm{\mathring{A}}^{-3} & 0.07451\ \mathrm{eV}^2\mathrm{\mathring{A}}^{-4} \end{pmatrix}$$

Z kovarianční matice $\boldsymbol{U}$ lze odečíst následující hodnoty standardních odchylek a kovariancí. Stejný výsledek bychom získali fitováním kvadratické závislosti $E = \theta_0 + \theta_1 a + \theta_2 a^2$ např. v Originu.

$$\sigma_0 = \sqrt{U_{00}} = \sqrt{7.754\ \mathrm{eV}^2} = 2.785\ \mathrm{eV}$$
$$\sigma_1 = \sqrt{U_{11}} = \sqrt{3.044\ \mathrm{eV}^2\mathrm{\mathring{A}}^{-2}} = 1.745\ \mathrm{eV}\,\mathrm{\mathring{A}}^{-1}$$
$$\sigma_2 = \sqrt{U_{22}} = \sqrt{0.07451\ \mathrm{eV}^2\mathrm{\mathring{A}}^{-4}} = 0.273\ \mathrm{eV}\,\mathrm{\mathring{A}}^{-2}$$

$$\mathrm{cov}(\theta_0, \theta_1) = U_{01} = U_{10} = -4.858\ \mathrm{eV}^2\mathrm{\mathring{A}}^{-1}$$
$$\mathrm{cov}(\theta_0, \theta_2) = U_{02} = U_{20} = 0.7595\ \mathrm{eV}^2\mathrm{\mathring{A}}^{-2}$$
$$\mathrm{cov}(\theta_1, \theta_2) = U_{12} = U_{21} = -0.4762\ \mathrm{eV}^2\mathrm{\mathring{A}}^{-3}$$



Rovnovážná hodnota mřížové konstanty a_0 odpovídá minimu modelové funkce $\lambda(a|\boldsymbol{\theta})$.

$$
\begin{aligned}
\frac{\mathrm{d}\lambda}{\mathrm{d}a} &= 0 \\
\hat{\theta}_1 + 2\hat{\theta}_2\hat{a}_0 &= 0 \\
\hat{a}_0 &= -\frac{\hat{\theta}_1}{2\hat{\theta}_2} \\
\hat{a}_0 &= 3.237\ \text{Å}
\end{aligned}
$$

Chybu a_0 zjistíme metodou přenosu chyb.

$$
\begin{aligned}
\sigma^2_{\hat{a}_0} &= \left(\frac{\partial \hat{a}_0}{\partial \hat{\theta}_1}\sigma_1\right)^2 + \left(\frac{\partial \hat{a}_0}{\hat{\theta}_2}\sigma_2\right)^2 + 2\frac{\partial \hat{a}_0}{\partial \hat{\theta}_1}\frac{\partial \hat{a}_0}{\partial \hat{\theta}_2}\mathrm{cov}(\theta_1, \theta_2) \\
\sigma^2_{\hat{a}_0} &= \left(\frac{1}{2\hat{\theta}_2}\sigma_1\right)^2 + \left(\frac{\hat{\theta}_1}{\hat{\theta}_2^2}\sigma_2\right)^2 - \frac{1}{\hat{\theta}_2}\frac{\hat{\theta}_1}{\hat{\theta}_2^2}\mathrm{cov}(\theta_1, \theta_2) \\
\sigma^2_{\hat{a}_0} &= 0.0103\ \text{Å}^2 \\
\sigma_{\hat{a}_0} &\doteq 0.1\ \text{Å}
\end{aligned}
$$

Výsledná rovnovážná mřížová konstanta je $\hat{a}_0 = (3.2 \pm 0.1)$ AA.