

*6. A FÜGGVÉNYILLESZTÉS ELMÉLETE

Az előző fejezetben a *közvetlen mérések* kiértékelésével foglalkoztunk, amelyek esetében közvetlenül azt a paramétert (vagy azokat a paramétereket) mérjük, amelyek minket érdekelnek. Ritkán van azonban ilyen “szerencsénk”, mert az a gyakoribb, hogy csak *közvetett méréseket* tudunk végezni: amit közvetlenül mérni tudunk, csak alkalmas elméleti megfontolásokkal hozható kapcsolatba a minket érdeklő mennyiségekkel.

A függvényillesztés formalizmusát nagy általánosságban is meg lehet megfogalmazni, amelyet aztán egyszerűen lehet az egyes konkrét mérésekre alkalmazni. A jelen fejezetben ezt az általános formalizmust ismertetjük, és az alkalmazásokat a 7. fejezetre halasztjuk. Nehézsége miatt a jelen fejezet tanulmányozását viszont csak a matematikában jártas olvasók számára ajánljuk.

A mondottak értelmében feltesszük, hogy méréseink közvetlenül a $\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_n$ mennyiségeket adták eredményül, és elméleti megfontolásokból ismerjük várható értéküket:

$$M(\xi_i) = f(x_i, \mathbf{a}), \quad i = 1, 2, \dots, n, \quad (6.1)$$

ahol \mathbf{a} az ismeretlen paraméterek vektora: $\mathbf{a}^T = [a_1, a_2, \dots, a_m]$. A mérés célja ezek meghatározása. Az $f(x_i, \mathbf{a})$ függvényt *illesztőfüggvénynek* nevezzük. x_i argumentuma a *független változó*, amelynek értékeit adottnak tételezzük fel. A fejezet végén megvizsgáljuk annak a következményeit, hogy x_i is valószínűségi változó, de egyelőre legyen konstans. Feltesszük, hogy a mérési eredmények egymástól *függetlenek, torzítatlanok*, vagyis várható értéküket a (6.1) egyenlet adná meg, ha benne \mathbf{a} helyére a paraméterek valódi értékét helyettesítenénk.¹ Az egyes mérések szórásnégyzetét a

$$D^2(\xi_i) = \sigma_i^2 = \frac{\sigma^2}{w_i}, \quad i = 1, 2, \dots, n \quad (6.2)$$

alakban írjuk fel, ahol σ^2 ismeretlen arányossági tényező, a w_i súlyok pedig ismertek [vö. (5.29)]. Feltesszük továbbá, hogy a mérések Gauss-eloszlásúak, vagyis a maximális valószínűségek módszere átmeny a legkisebb négyzetek módszerébe. Később megszabadulunk ettől a feltevéstől is: a 6.7 alfejezetben belátjuk, hogy a gyakorlatban fontos valószínűség-eloszlások esetében a ma-

¹ Erről csak feltételes módon beszélhetünk, mivel a paraméterek valódi értékét nem ismerhetjük.

ximális valószínűség módszere – formálisan legalábbis – szintén átmegy a legkisebb négyzetek módszerébe.

*6.1. Bevezető megjegyzések

A függvényillesztés módszerét mindegyik, az 1. fejezetben példaként felhozott probléma és további problémák esetében külön-külön ki lehetne dolgozni. Ennek eredményeképpen megkapnánk a keresett paraméterek becsült értékét. Ehhez elég megadni a (6.1) szerinti illesztőfüggvényt és (6.2) szerinti súlyokat. A dolog azonban nem ilyen egyszerű. Az adatkezelésnek *minden esetben* meg kell határoznia a következő mennyiségeket:

- várható érték, illetve torzítás,
- a becsült paraméterek kovarianciamátrixa,
- konfidenciaintervallumok a becsült paraméterek számára.

Ezeken túlmenően ellenőrizni kell a kiindulási feltételeket, meg kell vizsgálni az esetleges kiszóró pontokat, stb.

A tapasztalat azt mutatja, hogy mindennek a meghatározása, illetve végrehajtása előbb-utóbb matematikai nehézségekbe ütközik. Leküzdésükhöz szükségünk van bizonyos elméleti ismeretekre, amelyek függetlenek a konkrét illesztési problémától. Ezért ebben a fejezetben az illesztési problémát *általánosságban* oldjuk meg, amit aztán konkrét problémákra specializálhatunk. Az általános formalizmust elég egyszer beprogramozni, majd ezt követően csak az illesztőfüggvény alakját és a w_i súlyokat kell megadni ahhoz, hogy egy konkrét probléma kezelését megoldjuk.

Ez az általános elmélet sok matematikai segédeszközt használ fel, de ettől függetlenül is meglehetősen bonyolult. Ezért áttanulmányozását nem ajánljuk kezdőknek. A laboratóriumi gyakorlatokban előforduló tipikus adatkezelési módszereket a 7. fejezetben tárgyaljuk az elsőévesek számára is követhető módon. A jelen fejezetből ott csak néhány tételre hivatkozunk, amelyeket minden fizikusnak már tanulmányai kezdetén is ismernie kell.

*6.2. Normálegyenletek

A (6.1) és (6.2) kiindulási feltevésekkel a közvetlenül mért mennyiségek együttes sűrűségfüggvénye

$$L(\mathbf{x}, \bar{\xi}, \mathbf{a}) = \frac{\sqrt{\prod_{i=1}^n w_i}}{(2\pi\sigma^2)^{n/2}} \exp\left(-\frac{Q(\mathbf{a})}{2\sigma^2}\right), \quad (6.3)$$

ahol

$$Q(\mathbf{a}) = \sum_{i=1}^n w_i [\xi_i - f(x_i, \mathbf{a})]^2. \quad (6.4)$$

Fontos, hogy a w_i súly a négyzetre emelt [...] különbség szórásnégyzetével fordítva arányos legyen.

A maximális valószínűség elve (6.3) esetében a Q négyzetösszeg minimumának a keresését igényli. Deriváljuk Q -t mindegyik paraméter szerint, és az eredményt tegyük nullával egyenlővé:

$$G_k(\mathbf{a}) = -\frac{1}{2} \frac{\partial Q(\mathbf{a})}{\partial a_k} = \sum_{i=1}^n w_i [\xi_i - f(x_i, \mathbf{a})] \frac{\partial f(x_i, \mathbf{a})}{\partial a_k} = 0, \quad (6.5)$$

$k = 1, 2, \dots, m$. Ezeket az egyenleteket *normálegyenleteknek* nevezzük. Megoldásuk adja a paraméterek becsült értékét.

*Az egyenletek megoldása iterációval

A (6.5) alatt definiált G_k deriváltakból mint komponensekből megalkotjuk a \mathbf{G} vektort ($k = 1, 2, \dots, m$). A normálegyenleteket ezzel átírhatjuk a

$$\mathbf{G}(\tilde{\mathbf{a}}) = \mathbf{0} \quad (6.5a)$$

vektoros alakba. Mint a korábbi fejezetben tettük, a normálegyenletek megoldásaként adódó becsléseket a betűjel fölé írt \sim jellel jelöljük. Vannak illesztőfüggvények, amelyek esetében a normálegyenletek egyszerű lineáris egyenletrendszeret alkotnak. Az esetek többségében azonban transzcendens egyenletekkel találkozunk, amelyek csak iterációval oldhatók meg. Először az iteráció módszereit tárgyaljuk. A későbbiekben aztán szót ejtünk a gyakran alkalmazott *linearizáció* problémáiról is (6.6. alfejezet).

Tegyük fel, hogy már l iterációs lépést tettünk. Ekkor az $(l + 1)$ -edik lépésben a következő sorfejtést alkalmazzuk:

$$\mathbf{G}(\tilde{\mathbf{a}}) = \mathbf{0} = \mathbf{G}(\mathbf{a}_l) + \mathbf{D}(\mathbf{a}_l)(\tilde{\mathbf{a}} - \mathbf{a}_l) + \dots,$$

ahol a \mathbf{D} mátrix elemei

$$D_{kk'}(\mathbf{a}_l) = \frac{\partial G_k(\mathbf{a}_l)}{\partial a_{k'}} = -\frac{1}{2} \frac{\partial^2 Q(\mathbf{a}_l)}{\partial a_k \partial a_{k'}} = D_{k'k}(\mathbf{a}_l).$$

Mivel a deriválások sorrendje felcserélhető, a mátrix szimmetrikus. Ha a fenti vektoregyenletet beszorozzuk a \mathbf{D} mátrix inverzével, akkor a következő iterációs formulát kapjuk:

$$\mathbf{a}_{l+1} = \mathbf{a}_l - \mathbf{D}^{-1}(\mathbf{a}_l)\mathbf{G}(\mathbf{a}_l). \quad (6.6)$$

Ezt az iterációt *Newton-iterációnak* nevezzük. Alkalmazásához szükség van az $l = 0$ -nak megfelelő paraméterértékekre, amelyeket a továbbiakban *kezdőértékeknek* fogunk nevezni.

A (6.6) képlet emlékeztet függvények gyökhelyének a keresésére. Tegyük fel ugyanis, hogy a $G(x) = 0$ egyenletet kell megoldanunk. Az iteráció l -edik lépésében az

$$x_{l+1} = x_l - \frac{G(x_l)}{G'(x_l)}$$

képletet alkalmazzuk. A \mathbf{D} mátrix inverze a G' derivált reciprokának felel meg. Emiatt az analógia miatt nevezzük (6.6)-ot is Newton-iterációnak.

*A konvergencia vizsgálata

A (6.6) iterációs formula alkalmazásakor felléphetnek hamis konvergenciák, ha rosszak a kezdőértékek. Például tekintsük a következő illesztőfüggvényt, amely első látásra egyszerűnek tűnik:

$$f(x, \mathbf{a}) = a_1 \cos[a_2(x - a_3)].$$

Ha az a_3 paraméter kezdőértékét elrontjuk, könnyen kijöhet az alábbi “megoldás”:

$$a_1 = \bar{\xi} = \frac{\sum_{i=1}^n w_i \xi_i}{\sum_{i=1}^n w_i}, \quad a_2 = 0, \quad a_3 = \text{akármilyen}$$

Ez kifogástalan megoldás, ha az illesztőfüggvény

$$f(x, \mathbf{a}) = a_1$$

lenne. Mi azonban nem egy állandó, hanem egy koszinusz alakú függvényt kívánunk illeszteni, tehát az efféle álmegoldás elfogadhatatlan. Ezen túlmenően nyilván csak olyan megoldásnak van értelme, amelynél mindegyik illesztett paraméter függ a mért adatoktól.

Az ilyen álkonvergenciák elkerülésére a legjobb módszer a megoldáshoz lehetőleg közeli kezdőérték megkeresése. Ez azonban nem mindig sikerül, így sok múlik az iterációs mátrixon. Ha a kezdőérték jó, kétségtelenül a leggyorsabb konvergenciát a (6.6) Newton-iteráció biztosítja. Általában azonban nem ez az egyetlen szempont: a gyakorlatban elfogadhatóbb egy olyan iterációs séma, amely ugyan lassabban konvergál, de a konvergencia a kezdőértékek szélesebb tartományában következik be. Egy ilyen séma megkeresésének az érdekében írjuk az iterációt a következő, általános alakban:

$$\mathbf{a}_{l+1} = \mathbf{a}_l + \mathbf{R}^{-1}(\mathbf{a}_l)\mathbf{G}(\mathbf{a}_l), \quad (6.7)$$

ahol az \mathbf{R} iterációs mátrixot az alábbi megfontolások alapján választjuk meg. Mindenesetre feltételezzük, hogy (\mathbf{D} -hez hasonlóan) *szimmetrikus*.

Nyilván azt tekintjük jó iterációnak, amely minden lépésben csökkenti Q értékét. Fejtsük Taylor-sorba Q -nak az l -edik iterációs lépéshez tartozó megváltozását:

$$Q(\mathbf{a}_{l+1}) - Q(\mathbf{a}_l) =$$

$$= -2\mathbf{G}^T(\mathbf{a}_l)(\mathbf{a}_{l+1} - \mathbf{a}_l) - (\mathbf{a}_{l+1} - \mathbf{a}_l)^T \mathbf{D}(\mathbf{a}_l)(\mathbf{a}_{l+1} - \mathbf{a}_l) + \dots$$

Ebben és a további képletekben mindegyik mátrixot és vektort az \mathbf{a}_l helyen kell kiszámítani, ezért az egyszerűség kedvéért ezt nem tüntetjük fel. Az iterációs képlet alapján

$$\begin{aligned} Q(\mathbf{a}_{l+1}) - Q(\mathbf{a}_l) &= -2\mathbf{G}^T \mathbf{R}^{-1} \mathbf{G} - \mathbf{G}^T \mathbf{R}^{-1} \mathbf{D} \mathbf{R}^{-1} \mathbf{G} + \dots = \\ &= -\mathbf{G}^T \mathbf{R}^{-1} \mathbf{G} - \mathbf{G}^T \mathbf{R}^{-1} \mathbf{R} \mathbf{R}^{-1} \mathbf{G} - \mathbf{G}^T \mathbf{R}^{-1} \mathbf{D} \mathbf{R}^{-1} \mathbf{G} + \dots = \\ &= -\mathbf{G}^T \mathbf{R}^{-1} \mathbf{G} - \mathbf{G}^T \mathbf{R}^{-1} (\mathbf{R} + \mathbf{D}) \mathbf{R}^{-1} \mathbf{G} + \dots \end{aligned}$$

A kapott eredmény első tagja biztosan negatív, ha az iterációs mátrix *pozitív definit*. A második tagról ilyen kijelentést nem lehet tenni, mert a \mathbf{D} mátrix lehet indefinit is. Következésképpen célszerű \mathbf{R} -et úgy megválasztani, hogy ez a második tag minél kisebb legyen. Végeredményben tehát olyan iterációs mátrixot keresünk, amely pozitív definit és $\mathbf{R} \approx -\mathbf{D}$, mert ekkor

$$Q(\mathbf{a}_{l+1}) - Q(\mathbf{a}_l) < 0,$$

vagyis az iteráció Q minimuma felé halad. Ha $\mathbf{R} = -\mathbf{D}$, akkor

$$Q(\mathbf{a}_{l+1}) - Q(\mathbf{a}_l) = \mathbf{G}^T(\mathbf{a}_l) \mathbf{D}^{-1}(\mathbf{a}_l) \mathbf{G}(\mathbf{a}_l) + \dots$$

Az itt szereplő \mathbf{D}^{-1} mátrix csak a megoldás közelében negatív definit, ugyanis

$$D_{kk'}(\mathbf{a}_l) = -\sum_{i=1}^n w_i \frac{\partial f}{\partial a_k} \frac{\partial f}{\partial a_{k'}} + \sum_{i=1}^n w_i [\xi_i - f(x_i, \mathbf{a}_l)] \frac{\partial^2 f}{\partial a_k \partial a_{k'}}.$$

A következő alfejezetben belátjuk, hogy az első tag negatív definit mátrixot ad, a második indefinit, de várható értéke a megoldás közelében zérus. Ezért a keresett mátrix

$$R_{kk'}(\mathbf{a}_l) = \sum_{i=1}^n w_i \frac{\partial f(x_i, \mathbf{a}_l)}{\partial a_k} \frac{\partial f(x_i, \mathbf{a}_l)}{\partial a_{k'}}, \quad (6.8)$$

($k, k' = 1, 2, \dots, m$). Ennek \mathbf{D} -hez képest további előnye, hogy nem kell az illesztőfüggvény második deriváltjait kiszámítani.

Az iteráció konvergenciájának a kritériuma

$$\text{CONV} = \max_k \left| \frac{a_{l+1,k} - a_{l,k}}{\Delta a_k} \right| \leq 10^{-5},$$

ahol általában $\Delta a_k \approx a_k/100$. Az iteráció ezzel csak azután áll le, miután mindegyik paraméter 7 értékes számjegyre konvergált.

*Az iteráció stabilizálása

Vannak esetek, amelyekben az iterációs mátrix gondos megválasztása sem segít: az iterált paraméterek “vadul” oszcillálnak a megoldás körül. Amikor ez fellép, az oszcilláció egyre nagyobb mértékűvé szokott válni, ami előbb-utóbb a számítógépben túlsorduláshoz vezet. Ennek megakadályozására több módszer is van. Az egyik az *alulrelaxálás*: az egymást követő iterációs lépésekben a (6.7) képlet által szolgáltatott iteráltak helyett a régi és az új iterált valamilyen átlagát vesszük. A legegyszerűbb a

$$\mathbf{a}_{l+1} = (\mathbf{a}'_{l+1} + \mathbf{a}_l)/2$$

számítási közepet venni, ahol vesszővel jelöltük a (6.7) képlet által szolgáltatott iteráltat. A tapasztalat azt mutatja, hogy eléggé korlátozott azoknak az eseteknek a száma, amelyekben ez biztonságos megoldást jelent. Az alulrelaxálás viszont a konvergencia jelentős gyorsulását eredményezi olyan (egyébként konvergens) esetekben, amelyekben az iteráció oszcillál. Ez az utóbbi elég gyakori eset. Hogyan lehet ezt felismerni? Nagyon egyszerűen. Normális (tehát nem oszcilláló) esetben az iteráció 10-nél kevesebb lépésben konvergál. Általában ugyanennyi lépés elegendő annak felismeréséhez, hogy növekvő amplitúdójú oszcillációval állunk szemben. Ha sem ez, sem az nem következik be, nagyon valószínű, hogy lassan, de oszcillálva konvergáló iterációval állunk szemben. Ilyenkor segít az alulrelaxálás, amelyet – mondjuk – a 25. lépéstől kezdve mindenképpen érdemes alkalmazni. A következő iterációs sémát célszerű beprogramozni:

- (1) Kezdetben alkalmazzuk a (6.7) iterációt minden változtatás nélkül.
- (2) Minden lépésben meghatározzuk CONV és Q addig legkisebb értékét.
- (3) Ha valamelyik lépésben az addigi legkisebb érték 100-szorosa lép fel CONV vagy Q értékében, az iterációt divergensnek minősítjük, és leállítjuk. (Lásd az alábbi megjegyzést.)
- (4) Ha az iterációk száma elérte a 25-öt, áttérünk az alulrelaxálásra. A tapasztalat szerint az ezt követő 2–3 lépésben bekövetkezik a konvergencia.

A (3) ajánlással kapcsolatban megjegyezzük, hogy még gyorsan konvergáló iteráció esetében is az első lépésekben felléphetnek nagyságrendi változások CONV és Q értékében. Ezért célszerű itt nagyon laza feltételt szabni. Valami ilyen feltétel azonban elkerülhetetlen. Általában ugyanis nagy számú illesztési problémát sorozatban oldunk meg. Ha ezek közé egy divergens iteráció keveredik, akkor az emiatt fellépő gépi túlsordulás az egész sorozatot félbeszakítja. Érdekünk tehát az ilyesminek még a túlsordulást megelőző fázisban való felismerése.

Mi a teendő, ha a fenti séma szerint az iteráció divergens? Két dolgot tehetünk: vagy keresünk *jobb kezdőértékeket*, vagy *stabilizáljuk* az iterációt. Az előbbi út sok emberi munkát igényel. Általában egyszerűbb az iterációt olyan mértékben stabilizálni, hogy elviselje a rossz kezdőértékeket is. Legyen a p_k mennyiség körülbelül akkora, amekkora változást várunk az iteráció során az

a_k paraméterben ($k = 1, 2, \dots, m$).² Az alábbiakban ismertetünk egy olyan iterációs sémát, amely nem engedi, hogy az iteráció a p_k mennyiségekhez képest lényegesen nagyobb változásokat eredményezzen. Eszerint Q helyett az alábbi funkcionál minimumát keressük:

$$Q(\mathbf{a}_{l+1}) + c(\mathbf{a}_{l+1} - \mathbf{a}_l)^T \mathbf{P}(\mathbf{a}_{l+1} - \mathbf{a}_l) = \text{minimum},$$

ahol \mathbf{P} az $1/p_k^2$ -ekből alkotott diagonális mátrix. Így elérjük, hogy az a_k paraméterben p_k -nál lényegesen nagyobb eltérés ne lépjen fel. Ezt a megszorítást természetesen fokozatosan fel kell oldani, miközben az iteráció a konvergencia felé tart, aminek érdekében a c együttható értékét annak mértékében csökkentjük, ahogy a konvergencia halad előre. Mivel a megoldásnál a \mathbf{G} vektor minden komponense eltűnik, célszerű a c együtthatót a \mathbf{G} vektor valamilyen normájával arányosan megválasztani. Hogy esetleges, nehezen kézben tartható arányossági tényezők hatását kikapsoljuk, célszerű nem közvetlenül a \mathbf{G} vektort alapul venni, hanem a normáját Q -val elosztani. A numerikus vizsgálatok szerint a következő algoritmus válik be a gyakorlatban:

$$c = 2c_0 \|\mathbf{G}'\|/Q, \quad G'_k = p_k G_k;$$

$c_0 = 1$, ha $\text{CONV} > 1$ és $c_0 = 10$, ha $\text{CONV} < 1$.

Az ennek megfelelő iterációs formula

$$\mathbf{a}_{l+1} = \mathbf{a}_l + [\mathbf{R}(\mathbf{a}_l) + c\mathbf{P}]^{-1} \mathbf{G}(\mathbf{a}_l).$$

Ahogy a konvergencia halad előre, $c \rightarrow 0$, vagyis az iteráció átmegy az eredetibe, viszont az elején még nem enged meg nagy ingadozásokat. E jegyzet szerzője több évtizedes munkája során nem találkozott olyan (megoldható) illesztési problémával, amelyre ez az iterációs eljárás ne adott volna megoldást.

*Az iteráció kezdőértéke

Az iteráció kezdőértékének a meghatározása döntő hatással lehet a konvergenciára. Erről általánosságban alig lehet valamit mondani. Két speciális esetben azonban lehet eljárást javasolni:

1. Az illesztett paraméterekben lineáris függvények (például polinomillesztés) esetében közömbös a kezdőértékek megválasztása. Ilyenkor ugyanis az első lépés azonnal a keresett megoldást adja, bárhogy választjuk meg a kezdőértékeket.
2. Linearizálható problémák esetében (lásd a 6.6. alfejezetben) a linearizált illesztés eredménye kitűnő kezdőértéket szolgáltat. Ebből kiindulva az iteráció néhány lépésben be szokott konvergálni.

² Ha erre sem tudunk értelmes becslést adni, esetünk reménytelen: adjuk fel az illesztési probléma megoldását.

Egyéb esetekben valamilyen ötlet szükséges. A normálási probléma esetében a 7.7. alfejezetben szerepel egy ilyen ötlet. Általában a grafikus módszerek bizonyulnak a leghatékonyabbnak.

Egy jól kidolgozott illesztőprogram minden illesztett függvényre vonatkozóan tartalmaz eljárást a kezdőértékek meghatározására. Ez különösen olyan programok esetében fontos, amelyeket sok mérés sorozatban való kiértékelésére használunk. Jó példa erre a γ -spektrumok kiértékelése, ami sok nukleáris mérésben előfordul. Nagyon időrabló, ha minden spektrumot fel kell rajzolni, és arról le kell olvasni az egyes vonalak helyét, szélességét és maximumát. A mért γ -spektrum általában megjelenik az analizátor képernyőjén, és a kiértékelő program automatikusan meghatározza az egyes γ -vonalakhoz tartozó paraméterek kezdőértékét, vagy legalábbis lehetővé teszi, hogy a grafikusan meghatározott értékeket kezdőértékként írassuk elő.

*6.3. A becsült paraméterek tulajdonságai

Ebben az alfejezetben a függvényillesztés eredményeképpen kapott paraméterértékek statisztikai tulajdonságait fogjuk megvizsgálni. Bevezetjük a következő jelöléseket. Az illesztőfüggvénynek az illesztett paraméterek szerinti deriváltjaiból megalkotjuk az $n \times m$ -es \mathbf{F} mátrixot:

$$[\mathbf{F}]_{ik} = F_{ik} = \frac{\partial f(x_i, \mathbf{a})}{\partial a_k}, \quad (6.9a)$$

$i = 1, 2, \dots, n; k = 1, 2, \dots, m$. A w_i súlyokat a diagonális \mathbf{W} mátrix elemeinek tekintjük:

$$[\mathbf{W}]_{ij} = W_{ij} = w_i \delta_{ij},$$

$i, j = 1, 2, \dots, n$. A (6.8) képlettel definiált \mathbf{R} mátrix kifejezhető ezek segítségével:

$$R_{kk'} = \sum_{i=1}^n w_i F_{ik} F_{ik'} = [\mathbf{F}^T \mathbf{W} \mathbf{F}]_{kk'},$$

$k, k' = 1, 2, \dots, m$, vagyis

$$\mathbf{R} = \mathbf{F}^T \mathbf{W} \mathbf{F}. \quad (6.9b)$$

6.1. TÉTEL. Az \mathbf{R} mátrix pozitív szemidefinit.

Tetszőleges \mathbf{z} vektorra igaz, hogy

$$\mathbf{z}^T \mathbf{R} \mathbf{z} = (\mathbf{F} \mathbf{z})^T \mathbf{W} (\mathbf{F} \mathbf{z}) = \sum_{i=1}^n w_i \{[\mathbf{F} \mathbf{z}]_i\}^2 \geq 0,$$

amivel a tételt igazoltuk. A 6.2. TÉTEL bizonyításának a keretében megvizsgáljuk, milyen feltételekkel lehet az \mathbf{R} mátrix szinguláris, illetve hogyan lehet a szingularitást megszüntetni. Ennél fogva feltehetjük, hogy az egyenlőség jele

nem lehet érvényes, vagyis a mátrix valóban pozitív definit, és ennél fogva létezik az inverze. Ha ez nem így lenne, akkor az iterációt nem is lehetne végrehajtani, vagyis a (6.5) normálegyenletek sem lennének megoldhatók.

***Kovarianciamátrix**

A (6.2) feltevésekből és a mérési adatok függetlenségéből következik, hogy kovarianciamátrixuk

$$M(\Delta\bar{\xi}\Delta\bar{\xi}^T) = \sigma^2 \mathbf{W}^{-1}, \quad (6.10)$$

ahol

$$\Delta\xi_i = \xi_i - f(x_i, \mathbf{a}) = \xi_i - y_i = [\Delta\bar{\xi}]_i,$$

$$y_i = f(x_i, \mathbf{a}).$$

A \mathbf{W} mátrix diagonális, ha a ξ_i mérések függetlenek különböző i -re. Az alábbi képletek általánosíthatók nemdiagonális mátrixra, de az egyszerűség kedvéért feltettük, hogy \mathbf{W} diagonális. Ekkor a becült paraméterek a (6.5) egyenletrendszer megoldásai, amelyet most a következő alakban írunk fel:

$$G_k(\bar{\xi}, \tilde{\mathbf{a}}) = \sum_{i=1}^n w_i \frac{\partial f(x_i, \mathbf{a})}{\partial a_k} (\xi_i - f(x_i, \tilde{\mathbf{a}})) = 0,$$

($k = 1, 2, \dots, m$). Alkalmazzuk itt a következő sorfejtést:

$$\begin{aligned} \xi_i - f(x_i, \tilde{\mathbf{a}}) &= \xi_i - y_i - \sum_{k'=1}^m \frac{\partial f(x_i, \mathbf{a})}{\partial a_{k'}} (\tilde{a}_{k'} - a_{k'}) + \dots = \\ &= \Delta\xi_i - \sum_{k'=1}^m F_{ik'} \Delta a_{k'} + \dots, \end{aligned} \quad (6.11)$$

ahol $\Delta a_k = \tilde{a}_k - a_k$. Írjuk ezt vissza az előbbi egyenletbe, és alkalmazzuk a fenti mátrixjelöléseket:

$$\begin{aligned} 0 = G_k(\bar{\xi}, \tilde{\mathbf{a}}) &= \sum_{i=1}^n W_{ii} F_{ik} \Delta\xi_i - \sum_{i=1}^n W_{ii} F_{ik} \sum_{k'=1}^m F_{ik'} \Delta a_{k'} + \dots = \\ &= [\mathbf{F}^T \mathbf{W} \Delta\bar{\xi}]_k - \sum_{k'=1}^m R_{kk'} \Delta a_{k'} + \dots \end{aligned}$$

Végeredményben tehát a következő vektoregyenletet kaptuk:

$$\mathbf{F}^T \mathbf{W} \Delta\bar{\xi} - \mathbf{R} \Delta \mathbf{a} + \dots = 0, \quad (6.12a)$$

amiből

$$\Delta \mathbf{a} = \mathbf{R}^{-1} \mathbf{F}^T \mathbf{W} \Delta\bar{\xi}. \quad (6.12b)$$

A sorfejtésben elhanyagolt tagok miatt ez csak első közelítés.

A (6.12b) összefüggés több későbbi levezetés alapja. A becült paraméterek kovarianciamátrixát ezzel már könnyen megkaphatjuk:

$$\begin{aligned} \mathbf{B} &= \mathbf{M}(\Delta \mathbf{a} \Delta \mathbf{a}^T) = \mathbf{R}^{-1} \mathbf{F}^T \mathbf{W} \mathbf{M}(\Delta \bar{\xi} \Delta \bar{\xi}^T) \mathbf{W} \mathbf{F} \mathbf{R}^{-1} = \\ &= \sigma^2 \mathbf{R}^{-1} \mathbf{F}^T \mathbf{W} \mathbf{W}^{-1} \mathbf{W} \mathbf{F} \mathbf{R}^{-1} = \sigma^2 \mathbf{R}^{-1} \mathbf{R} \mathbf{R}^{-1} = \sigma^2 \mathbf{R}^{-1}. \end{aligned} \quad (6.13)$$

A kovarianciamátrix főátlójában található a becült paraméterek szórásnégyzete:

$$D^2(\tilde{a}_k) = \sigma^2 [\mathbf{R}^{-1}]_{kk}, \quad k = 1, 2, \dots, m. \quad (6.14)$$

Ahhoz, hogy ezt használhassuk, ismernünk kell σ^2 -et, amelynek a becsülésével később foglalkozunk.

A (6.4) egyenlettel kapcsolatban megjegyeztük: lényeges, hogy a w_i súlyok a mért értékek szórásnégyzetével fordítottan arányosak legyenek. Most tudjuk először megmutatni ennek a kikötésnek az értelmét. Tegyük fel, hogy (6.10) nem érvényes:

$$\mathbf{M}(\Delta \bar{\xi} \Delta \bar{\xi}^T) = \mathbf{X} \neq \sigma^2 \mathbf{W}^{-1},$$

amit (6.13)-ba helyettesítve a

$$\mathbf{B} = \mathbf{M}(\Delta \mathbf{a} \Delta \mathbf{a}^T) = \mathbf{R}^{-1} \mathbf{F}^T \mathbf{W} \mathbf{X} \mathbf{W} \mathbf{F} \mathbf{R}^{-1} \neq \sigma^2 \mathbf{R}^{-1}$$

végeredményt kapjuk. A megszokott és minden függvényillesztő program által használt képlet tehát érvényét veszti. Ez önmagában még nem baj, csak kellemtelen, hiszen helyette egy ugyan jóval bonyolultabb, de mégis alkalmazható képletet lehetett felírni. Az viszont baj, hogy minden alábbi tételünk érvényét veszti, mert emiatt egyetlen adatkezelési módszerünk sem lesz alkalmazható, az egész kiértékelés komolytalanná válik.

*Várható érték (torzítás)

Ha a (6.11) képletben a pontokkal jelölt a másod- és magasabb rendű tagokat elhanyagoljuk, a paraméterek becslése torzítatlan, hiszen ekkor

$$\mathbf{M}(\Delta \mathbf{a}) = \mathbf{R}^{-1} \mathbf{F}^T \mathbf{W} \mathbf{M}(\Delta \bar{\xi}) = 0. \quad (6.15)$$

A becslés tehát első rendben torzítatlan, ha minden i -re $\mathbf{M}(\Delta \xi_i) = 0$. Az elhanyagolt tagok nagyságrendjének a becslésére a (6.11) egyenletben megtartjuk a másodrendű tagot is:

$$\xi_i - f(x_i, \tilde{\mathbf{a}}) = \Delta \xi_i - \sum_{k'=1}^m \frac{\partial f(x_i, \mathbf{a})}{\partial a_{k'}} \Delta a_{k'} -$$

$$-\frac{1}{2} \sum_{k'=1}^m \sum_{k''=1}^m \frac{\partial^2 f(x_i, \mathbf{a})}{\partial a_{k'} \partial a_{k''}} \Delta a_{k'} \Delta a_{k''} + \dots$$

Bevezetjük a következő jelölést:

$$[\mathbf{H}_k]_{k'k''} = \sum_{i=1}^n w_i \frac{\partial f(x_i, \mathbf{a})}{\partial a_k} \frac{\partial^2 f(x_i, \mathbf{a})}{\partial a_{k'} \partial a_{k''}}.$$

Ezzel fenti egyenletünk magasabb rendű közelítése

$$\mathbf{F}^T \mathbf{W} \Delta \bar{\boldsymbol{\xi}} - \mathbf{R} \Delta \mathbf{a} - \frac{1}{2} \mathbf{h} + \dots = 0,$$

ahol

$$[\mathbf{h}]_k = h_k = \Delta \mathbf{a}^T \mathbf{H}_k \Delta \mathbf{a},$$

vagyis

$$\Delta \mathbf{a} = \mathbf{R}^{-1} \left(\mathbf{F}^T \mathbf{W} \Delta \bar{\boldsymbol{\xi}} + \frac{1}{2} \mathbf{h} \right) + \dots \quad (6.16)$$

Ekkor a becslés torzított, és torzítása

$$\boldsymbol{\delta} \mathbf{a} = \mathbf{M}(\Delta \mathbf{a}) = -\frac{1}{2} \mathbf{R}^{-1} \mathbf{M}(\mathbf{h}).$$

Belátható, hogy

$$\begin{aligned} \mathbf{M}(h_k) &= \boldsymbol{\delta} \mathbf{a}^T \mathbf{H}_k \boldsymbol{\delta} \mathbf{a} + \sum_{k'=1}^m \sum_{k''=1}^m B_{k'k''} [\mathbf{H}_k]_{k'k''} = \\ &= \boldsymbol{\delta} \mathbf{a}^T \mathbf{H}_k \boldsymbol{\delta} \mathbf{a} + \sigma^2 \sum_{k'=1}^m [\mathbf{R}^{-1} \mathbf{H}_k]_{k'k'} = \boldsymbol{\delta} \mathbf{a}^T \mathbf{H}_k \boldsymbol{\delta} \mathbf{a} + \sigma^2 d_k. \end{aligned}$$

A $\boldsymbol{\delta} \mathbf{a}$ torzításvektor tehát (6.16) szerint kielégíti az alábbi (nem lineáris, tehát iterációval megoldandó) egyenletrendszer ($k = 1, 2, \dots, m$):

$$[\mathbf{R} \boldsymbol{\delta} \mathbf{a}]_k = -\frac{1}{2} \boldsymbol{\delta} \mathbf{a}^T \mathbf{H}_k \boldsymbol{\delta} \mathbf{a} - \frac{1}{2} \sigma^2 d_k, \quad (6.17)$$

amelynek a megoldása első közelítésben

$$\boldsymbol{\delta} \mathbf{a} \approx -\frac{1}{2} \sigma^2 \mathbf{R}^{-1} \mathbf{d}. \quad (6.18)$$

A torzítás a mérések pontosságának javulásával ($\sigma^2 \rightarrow 0$) csökken.³ Tekintve, hogy a szórás σ -val arányos, a torzítás pedig σ^2 -tel, a torzítás/szórás

³ Ez a kijelentés nem nyilvánvaló, hiszen (6.2)-ben választhatunk $\sigma^2 = 1$ -et is, ha biztosak vagyunk abban, hogy a w_i súlyok a szórásnégyzetek reciprokai. A fenti kijelentés akkor válik érthetővé, ha a súlyok normálása rögzített, például összegük mindenkor 1-gyel egyenlő. Eb-

hányados a pontosság javulásával csökken. A tapasztalat szerint a torzítás csak nagyon pontatlan mérések esetében számottevő, általában a becslés torzítatlan. Ezért az alábbiakban $\delta\mathbf{a}$ -t elhanyagoljuk.

***A közvetlenül mért adatok várható értékének becslése**

A közvetlenül mért adatok $y_i = f(x_i, \mathbf{a})$ várható értékét úgy tudjuk becsülni, hogy \mathbf{a} helyére a becsült paramétereket helyettesítjük:

$$\begin{aligned}\tilde{y}_i = f(x_i, \tilde{\mathbf{a}}) &= f(x_i, \mathbf{a}) + \sum_{k=1}^m \frac{\partial f(x_i, \mathbf{a})}{\partial a_k} \Delta a_k + \\ &+ \frac{1}{2} \sum_{k=1}^m \sum_{k'=1}^m \frac{\partial^2 f(x_i, \mathbf{a})}{\partial a_k \partial a_{k'}} \Delta a_k \Delta a_{k'} + \dots\end{aligned}$$

Ez a becslés láthatóan torzított, hiszen

$$\begin{aligned}\delta\tilde{y}_i &= \mathbf{M}(\tilde{y}) - f(x_i, \mathbf{a}) = \\ &= \sum_{k=1}^m \frac{\partial f(x_i, \mathbf{a})}{\partial a_k} \delta a_k + \frac{1}{2} \sum_{k=1}^m \sum_{k'=1}^m \frac{\partial^2 f(x_i, \mathbf{a})}{\partial a_k \partial a_{k'}} B_{kk'} + \dots,\end{aligned}$$

ahol $B_{kk'}$ a (6.13) képletben adott \mathbf{B} kovarianciamátrix (k, k') eleme. Ez σ^2 nagyságrendű torzítás, amelyre egyszerűen lehet korrekciót alkalmazni: a

$$y_i^* = f(x_i, \tilde{\mathbf{a}}) - \sum_{k=1}^m \frac{\partial f(x_i, \mathbf{a})}{\partial a_k} \delta a_k - \frac{1}{2} \sum_{k=1}^m \sum_{k'=1}^m \frac{\partial^2 f(x_i, \mathbf{a})}{\partial a_k \partial a_{k'}} B_{kk'} + \dots$$

mennyiség várható értéke már csak σ^4 nagyságrendben tér el a valódi y_i várható értéktől. Az itt szereplő korrekció általában elhanyagolható, ezért leggyakrabban az egyszerűbb

$$\tilde{y}_i = f(x_i, \tilde{\mathbf{a}})$$

becslést alkalmazzuk.

Az \tilde{y}_i becslés kovarianciamátrixa az alábbi módon számítható ki. Legyen

$$\Delta\tilde{y}_i = \tilde{y}_i - f(x_i, \mathbf{a}) = [\mathbf{F}\Delta\mathbf{a}]_i, \quad (6.19a)$$

amelynek a kovarianciamátrixa

$$\mathbf{M}(\Delta\tilde{\mathbf{y}}\Delta\tilde{\mathbf{y}}^T) = \mathbf{F} \mathbf{M}(\Delta\mathbf{a}\Delta\mathbf{a}^T) \mathbf{F}^T = \mathbf{F}\mathbf{B}\mathbf{F}^T = \sigma^2 \mathbf{F}\mathbf{R}^{-1}\mathbf{F}^T.$$

Ebből kapjuk az \tilde{y}_i becslés szórásnégyzetét:

ben az esetben az egyes mérések szórásnégyzetének a csökkenése (vagyis a pontosság javulása) σ^2 csökkenésével egyenértékű.

$$\sigma_i^{*2} = \sigma^2 [\mathbf{FR}^{-1}\mathbf{F}^T]_{ii}. \quad (6.19b)$$

* Q_{\min} statisztikai tulajdonságai

Bebizonyítjuk a következő nevezetes tételt:

6.2. TÉTEL. Ha az illesztést végre lehet hajtani, akkor a Q funkcionál minimuma arányos egy $(n - m)$ szabadsági fokú χ^2 változóval:

$$Q_{\min} = \sigma^2 \chi_{n-m}^2, \quad (6.20)$$

ami az 5.1. TÉTEL általánosításának is felfogható. A Q négyzetösszeg minimumát definíció szerint a következő alakban írhatjuk fel:

$$Q_{\min} = \sum_{i=1}^n w_i (\xi_i - \tilde{y}_i)^2 = (\bar{\boldsymbol{\xi}} - \tilde{\mathbf{y}})^T \mathbf{W} (\bar{\boldsymbol{\xi}} - \tilde{\mathbf{y}}).$$

(6.19a) és (6.12) alapján ezt a

$$Q_{\min} = \Delta \bar{\boldsymbol{\xi}}^T (\mathbf{E} - \mathbf{WFR}^{-1}\mathbf{F}^T) \mathbf{W} (\mathbf{E} - \mathbf{FR}^{-1}\mathbf{F}^T \mathbf{W}) \Delta \bar{\boldsymbol{\xi}}$$

képlet kapcsolja össze a közvetlenül mért mennyiségek $\Delta \bar{\boldsymbol{\xi}}$ hibájával.

Általában a mérések függetlenek, vagyis \mathbf{W} diagonális. Így lehet beszélni a négyzetgyökekről. A 6.2. TÉTEL korrelált mérésekre is igaz, mivel ekkor is létezik egy olyan \mathbf{V} mátrix, amelyre fennáll:

$$\mathbf{W} = \mathbf{V}^T \mathbf{V}.$$

Ha a súlyok mátrixa diagonális, $\mathbf{V} = \mathbf{V}^T = \mathbf{W}^{1/2}$, ahol az utóbbiban a w_i súlyok négyzetgyökei állnak. Ezzel

$$Q_{\min} = (\mathbf{V} \Delta \bar{\boldsymbol{\xi}})^T (\mathbf{E} - \mathbf{VFR}^{-1}\mathbf{F}^T \mathbf{V}^T)^2 (\mathbf{V} \Delta \bar{\boldsymbol{\xi}}). \quad (6.21)$$

Bevezetjük a

$$\mathbf{A} = \mathbf{VFR}^{-1}\mathbf{F}^T \mathbf{V}^T$$

jelölést, és belátjuk, hogy

$$\text{rang}(\mathbf{A}) = m,$$

ha

$$\text{rang}(\mathbf{F}) = \text{rang}(\mathbf{VF}) = m.$$

(Erre a feltételre még visszatérünk.) Szorzással a rangszám nem növekedhet, tehát a definíció alapján

$$\text{rang}(\mathbf{A}) \leq \text{rang}(\mathbf{VF}) = m.$$

Másrészt

$$\mathbf{F}^T \mathbf{V}^T \mathbf{A} = \mathbf{F}^T \mathbf{V}^T \mathbf{V} \mathbf{F} \mathbf{R}^{-1} \mathbf{F}^T \mathbf{V}^T = \mathbf{R} \mathbf{R}^{-1} \mathbf{F}^T \mathbf{V}^T = \mathbf{F}^T \mathbf{V}^T,$$

vagyis

$$m = \text{rang}(\mathbf{V}^T \mathbf{F}^T) \leq \text{rang}(\mathbf{A}).$$

Ez a két egyenlőtlenség csak úgy lehet igaz, ha az \mathbf{A} mátrix rangja m .

Könnyen belátható, hogy

$$\mathbf{A}^2 = \mathbf{A}, \quad \text{és így} \quad (\mathbf{E} - \mathbf{A})^2 = \mathbf{E} - \mathbf{A}.$$

Ez azt jelenti, hogy a mátrix kielégíti a következő egyenletet:

$$\mathbf{A}(\mathbf{A} - \mathbf{E}) = 0,$$

vagyis az \mathbf{A} mátrix minimál-polinomja $\Delta(\lambda) = \lambda(\lambda - 1)$. A sajátértékek tehát többszörösek, és értékük vagy 1 vagy 0. Mivel az \mathbf{A} mátrix rangja m , az 1 sajátérték m -szeres, a 0 sajátérték pedig $(n - m)$ -szeres. A mátrix tehát diagonalizálható:

$$\mathbf{A} = \mathbf{U}^T \mathbf{\Lambda} \mathbf{U},$$

ahol $\mathbf{\Lambda}$ olyan diagonális mátrix, amelynek főátlójában m darab 1 és $(n - m)$ darab 0 van. Rendezzük a mátrixot úgy, hogy az 1-esek az utolsó m helyre kerüljenek. Legyen

$$\bar{\boldsymbol{\zeta}} = \mathbf{U} \mathbf{V} \Delta \bar{\boldsymbol{\xi}},$$

aminek a kovarianciamátrixa

$$\mathbf{M}(\bar{\boldsymbol{\zeta}} \bar{\boldsymbol{\zeta}}^T) = \mathbf{U} \mathbf{V} \mathbf{M}(\Delta \bar{\boldsymbol{\xi}} \Delta \bar{\boldsymbol{\xi}}^T) \mathbf{V}^T \mathbf{U}^T = \sigma^2 \mathbf{U} \mathbf{V} \mathbf{W}^{-1} \mathbf{V}^T \mathbf{U}^T = \sigma^2 \mathbf{E},$$

tehát a $\bar{\boldsymbol{\zeta}}$ vektor komponensei független, azonos σ szórású valószínűségi változók. Helyettesítsük ezt (6.21)-be:

$$\begin{aligned} Q_{\min} &= (\mathbf{V} \Delta \bar{\boldsymbol{\xi}})^T (\mathbf{E} - \mathbf{A}) (\mathbf{V} \Delta \bar{\boldsymbol{\xi}}) = (\mathbf{V} \Delta \bar{\boldsymbol{\xi}})^T (\mathbf{U}^T \mathbf{U} - \mathbf{U}^T \mathbf{\Lambda} \mathbf{U}) (\mathbf{V} \Delta \bar{\boldsymbol{\xi}}) = \\ &= (\mathbf{U} \mathbf{V} \Delta \bar{\boldsymbol{\xi}})^T (\mathbf{E} - \mathbf{\Lambda}) (\mathbf{U} \mathbf{V} \Delta \bar{\boldsymbol{\xi}}) = \bar{\boldsymbol{\zeta}}^T (\mathbf{E} - \mathbf{\Lambda}) \bar{\boldsymbol{\zeta}} = \sum_{i=1}^{n-m} \zeta_i^2 = \sigma^2 \chi_{n-m}^2. \end{aligned}$$

Éppen ezt állítjuk (6.20)-ban.

Már csak a $\text{rang}(\mathbf{F}) < m$ vagy $\text{rang}(\mathbf{V} \mathbf{F}) < m$ eseteket kell megvizsgálnunk.

Mivel

$$\mathbf{R} = \mathbf{F}^T \mathbf{W} \mathbf{F} = (\mathbf{V} \mathbf{F})^T (\mathbf{V} \mathbf{F}),$$

ebből az következik, hogy

$$\text{rang}(\mathbf{R}) \leq \text{rang}(\mathbf{V} \mathbf{F}) < m,$$

tehát az \mathbf{R} mátrix szinguláris. Ekkor az illesztést nem lehet végrehajtani. Ezzel a tételt bebizonyítottuk.

* σ^2 becslése

A szórásnégyzetek és kovarianciamátrixok számítására szolgáló képletekben gyakran előforduló σ^2 paraméter becslését a Q_{\min} segítségével kapjuk. A (6.3)-ban felírt sűrűségfüggvényre alkalmazzuk a maximális valószínűség módszerét:

$$\frac{\partial \ln L}{\partial \sigma^2} = -\frac{n}{2\sigma^2} + \frac{Q(\tilde{\mathbf{a}})}{2\sigma^4} = 0,$$

amiből

$$\tilde{\sigma}^2 = \frac{Q(\tilde{\mathbf{a}})}{n} = \frac{Q_{\min}}{n}.$$

Ez torzított becslés, hiszen a 6.2. TÉTEL alapján

$$M\left(\frac{Q_{\min}}{n}\right) = M\left(\frac{\sigma^2 \chi_{n-m}^2}{n}\right) = \sigma^2 \frac{n-m}{n}.$$

$n \rightarrow \infty$ esetén ez aszimptotikusan torzítatlan, de véges n -re jobb a korrigált

$$s^2 = \frac{Q_{\min}}{n-m} \quad (6.22)$$

becslés, mert ez torzítatlan.

*További összefüggések

A paraméterekre vonatkozó intervallumbecslés megszerkesztéséhez szükségünk van a 5.2. TÉTEL általánosítására:

6.3. TÉTEL. Az $\tilde{\mathbf{a}}$ paraméterbecslés független a Q_{\min} négyzetösszegtől.

Mivel

$$Q_{\min} = \sum_{i=1}^n w_i [\xi_i - f(x_i, \tilde{\mathbf{a}})]^2 = \sum_{i=1}^n w_i (\xi_i - \tilde{y}_i)^2,$$

elég megmutatni, hogy a $(\xi_i - \tilde{y}_i)$ különbségek függetlenek mindegyik paraméter becslt értékétől. Mivel Gauss-eloszlású valószínűségi változóról van szó, azt kell belátnunk, hogy kovarianciájuk zérus. (6.19a) és (6.12) alapján írhatjuk:

$$\tilde{\xi} - \tilde{\mathbf{y}} = \Delta \tilde{\xi} - \mathbf{F} \Delta \mathbf{a} = (\mathbf{E} - \mathbf{F} \mathbf{R}^{-1} \mathbf{F}^T \mathbf{W}) \Delta \tilde{\xi}. \quad (6.23a)$$

Ennek a becslt paraméterekkel való kovarianciája eltűnik:

$$\begin{aligned} \mathbf{M}\left[\left(\bar{\boldsymbol{\xi}} - \tilde{\mathbf{y}}\right)\Delta\mathbf{a}^T\right] &= \left(\mathbf{E} - \mathbf{FR}^{-1}\mathbf{F}^T\mathbf{W}\right)\mathbf{M}\left(\Delta\bar{\boldsymbol{\xi}}\Delta\bar{\boldsymbol{\xi}}^T\right)\mathbf{WFR}^{-1} = \\ &= \sigma^2\mathbf{FR}^{-1} - \sigma^2\mathbf{FR}^{-1}\mathbf{F}^T\mathbf{WFR}^{-1} = 0, \end{aligned}$$

ahol kihasználtuk a (6.9b) összefüggést. Ezzel a tételt bebizonyítottuk.

A későbbiekben szükségünk lesz a $\left(\bar{\boldsymbol{\xi}} - \tilde{\mathbf{y}}\right)$ különbség kovarianciamátrixára. Ezt (6.23a) alapján számíthatjuk ki:

$$\begin{aligned} \mathbf{M}\left[\left(\bar{\boldsymbol{\xi}} - \tilde{\mathbf{y}}\right)\left(\bar{\boldsymbol{\xi}} - \tilde{\mathbf{y}}\right)^T\right] &= \\ &= \left(\mathbf{E} - \mathbf{FR}^{-1}\mathbf{F}^T\mathbf{W}\right)\mathbf{M}\left(\Delta\bar{\boldsymbol{\xi}}\Delta\bar{\boldsymbol{\xi}}^T\right)\left(\mathbf{E} - \mathbf{WFR}^{-1}\mathbf{F}^T\right) = \\ &= \sigma^2\left(\mathbf{W}^{-1} - \mathbf{FR}^{-1}\mathbf{F}^T\right)\left(\mathbf{E} - \mathbf{WFR}^{-1}\mathbf{F}^T\right) = \sigma^2\left(\mathbf{W}^{-1} - \mathbf{FR}^{-1}\mathbf{F}^T\right). \end{aligned}$$

Az i -edik pontra ez azt jelenti, hogy

$$D^2(\xi_i - \tilde{y}_i) = D^2(\xi_i) - D^2(\tilde{y}_i). \quad (6.23b)$$

A szórásnégyzeteket – független valószínűségi változók esetében – össze kell adni, de itt olyan erős a korreláció, hogy a különbség szerepel. A két változó korrelációs együtthatója:

$$r(\xi_i, \tilde{y}_i) = \frac{D(\tilde{y}_i)}{D(\xi_i)}.$$

Ez általában kicsi, tehát a $(\xi_i - \tilde{y}_i)$ különbség szórásnégyzete általában alig kisebb, mint $D^2(\xi_i)$, de a különbség ritkán hanyagolható el.

*6.4. Konfidenciaintervallumok

A (6.22) képlet felhasználásával a becsült paraméterek kovarianciamátrixát a

$$\mathbf{B} = s^2\mathbf{R}^{-1} = \frac{Q_{\min}}{n-m}\mathbf{R}^{-1}$$

képlettel becsüljük. Tehát az egyes paraméterek szórása

$$D(\tilde{a}_k) = \sqrt{\frac{Q_{\min}}{n-m}\left[\mathbf{R}^{-1}\right]_{kk}}, \quad (k = 1, 2, \dots, m).$$

Ennek alapján a következőképpen szerkeszthetjük meg az egyes paraméterekre vonatkozó konfidenciaintervallumokat.

Belátjuk, hogy a

$$t_k = \frac{\tilde{a}_k - a_k}{\sqrt{\frac{Q_{\min}[\mathbf{R}^{-1}]_{kk}}{n-m}}}$$

mennyiség $(n - m)$ szabadsági fokú Student-eloszlást követ. Ennek érdekében elvégezzük a

$$t_k = \frac{\tilde{a}_k - a_k}{\sigma \sqrt{[\mathbf{R}^{-1}]_{kk}}} \frac{1}{\sqrt{\frac{Q_{\min}}{\sigma^2(n-m)}}} = \frac{\zeta}{\sqrt{\frac{\chi_{n-m}^2}{n-m}}}$$

átalakítást, ahol kihasználtuk a (6.20) összefüggést, továbbá bevezettük a

$$\zeta = \frac{\tilde{a}_k - a_k}{\sigma \sqrt{[\mathbf{R}^{-1}]_{kk}}}$$

jelölést. A ζ valószínűségi változóról tudjuk, hogy

- várható értéke 0, mert az \tilde{a}_k becslés torzítatlan,
- szórásnégyzete 1, mert a nevező a számláló szórása,
- független a nevezőtől, mert a becsült paraméterek függetlenek Q_{\min} -től (a 6.3. TÉTEL szerint).

Emiatt a felírt tört valóban Student-tört, hiszen a számláló független a nevezőtől. Definiáljuk a γ kvantilist:

$$P\{|t_k| < \gamma\} = 1 - \varepsilon,$$

ahol ε a konfidencia-valószínűség. Így a paraméter valódi értéke $(1 - \varepsilon)$ valószínűséggel az alábbi intervallumba esik:

$$\tilde{a}_k - \gamma D(\tilde{a}_k) < a_k < \tilde{a}_k + \gamma D(\tilde{a}_k).$$

Az 5.1. alfejezet végén foglalkozunk a mérések végeredményének a közlésével. Az ott mondottak érvényesek a paraméterek becsült értékére is. Általában egynél több paramétert kell egyszerre becsülnünk. Felmerül a kérdés, hogyan lehet a becsült paraméterek együttesére vagy egy részére olyan tartományt kijelölni, amelybe azok adott valószínűséggel esnek. A 7. fejezetben megmutatjuk, hogy ez a tartomány a

$$(\tilde{\mathbf{a}} - \mathbf{a})^T \mathbf{B}^{-1} (\tilde{\mathbf{a}} - \mathbf{a}) = \gamma^2,$$

egyenlettel definiált konfidenciaellipszoid belseje, ahol γ a χ_m^2 -eloszlás kvantilise:

$$P\{\chi_m^2 < \gamma\} = 1 - \varepsilon.$$

A konfidenciaellipszoid úgy értendő, hogy a paraméterek \mathbf{a} valódi értéke $(1 - \varepsilon)$ valószínűséggel esik az $\tilde{\mathbf{a}}$ becslés körül mint középpont körül felvett ellipszoid belsejébe.

*6.5. Kiegyenlítés

Gyakran fordul elő, hogy az illesztett paraméterek értékét nem választhatjuk meg szabadon, hanem közöttük bizonyos összefüggéseknek kell fennállniuk. Erre példa az 1. fejezetben említett és a 7.4. alfejezetben tárgyalt probléma. Ebben az alfejezetben a probléma matematikai aspektusait tárgyaljuk. Arról van tehát szó, hogy a (6.4)-ben felírt négyzetösszeg minimumát mellékfeltételekkel keressük, amelyeket a következő alakban írunk fel:

$$\Psi_j(\mathbf{a}) = 0, \quad j = 1, 2, \dots, J. \quad (6.24)$$

A korábbiakon felül bevezetjük a következő jelöléseket. A feltételekben szereplő függvényeknek az illesztett paraméterek szerinti deriváltjait a \mathbf{C} mátrix elemeinek tekintjük:

$$C_{jk} = \frac{\partial \Psi_j(\mathbf{a})}{\partial a_k}. \quad (6.25)$$

Ennek a mátrixnak J sora és m oszlopa van. A feladat nyilván csak akkor függvényillesztés, ha $J < m$. Az általánosság megszorítása nélkül kiköthetjük, hogy $\text{rang}(\mathbf{C}) = J$. Ha ugyanis ennél kisebb lenne a rangja, a (6.24) feltételek J számát addig csökkenthetnénk, amíg a rang meg nem egyezik a feltételek számával. A feltételes szélsőérték-problémát a Lagrange-multiplikátorok módszerével oldjuk meg, vagyis a (6.5) normálegyenletek helyett a

$$-\frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial a_k} \left(Q - 2 \sum_{j=1}^J \lambda_j \Psi_j(\tilde{\mathbf{a}}) \right) = 0 \quad (6.26)$$

egyenletek megoldását keressük ($k = 1, 2, \dots, m$). Ez m egyenlet $(m + J)$ ismeretlenre. A λ_j multiplikátorok kiszámítására szolgálnak a (6.24) feltételek, amelyek száma J .

*Megoldás iterációval

A (6.26) egyenletrendszer iterációval oldjuk meg, ha vagy az illesztő-függvény, vagy a (6.24) feltételek nem lineárisak. A deriválást végrehajtva a

$$G_k(\tilde{\mathbf{a}}) + \sum_{j=1}^J \lambda_j \frac{\partial \Psi_j(\tilde{\mathbf{a}})}{\partial a_k} = 0$$

egyenletek adódnak, ahol a G_k függvényt (6.5)-ben írtuk fel. A (6.25)-ben definiált \mathbf{C} mátrix segítségével a kapott egyenletrendszert átírjuk vektoros alakba:

$$\mathbf{G}(\tilde{\mathbf{a}}) + \mathbf{C}^T \tilde{\boldsymbol{\lambda}} = \mathbf{0},$$

ahol $\vec{\lambda}$ a λ_j multiplikátorokból mint komponensekből alkotott vektor. Tételezzük fel, hogy már l iterációs lépést végrehajtottunk, és \mathbf{a}_l -et kaptunk eredményül. A 6.2. alfejezetben alkalmazott gondolatmenettel a

$$\mathbf{G}(\mathbf{a}_l) - \mathbf{R}(\mathbf{a}_{l+1} - \mathbf{a}_l) + \mathbf{C}^T \vec{\lambda}_l = \mathbf{0}$$

iterációs képletet kapjuk. A (6.24) feltételekben is alkalmazzuk ugyanezt a sorfejtést. Az eredmény vektori alakja

$$\vec{\Psi}(\mathbf{a}_l) + \mathbf{C}(\mathbf{a}_{l+1} - \mathbf{a}_l) = \mathbf{0}.$$

$\vec{\Psi}$ a Ψ_j függvényekből mint komponensekből képzett vektor. E két egyenlet átrendezhető egy $\vec{\lambda}_l$ -re vonatkozó egyenletté, amelynek a megoldása

$$\vec{\lambda}_l = -\mathbf{M}^{-1}(\vec{\Psi}(\mathbf{a}_l) + \mathbf{C}\mathbf{R}^{-1}\mathbf{G}(\mathbf{a}_l)),$$

ahol bevezettük az

$$\mathbf{M} = \mathbf{C}\mathbf{R}^{-1}\mathbf{C}^T \quad (6.27)$$

jelölést. Ezt az előbbi egyenletbe helyettesítve adódik a paraméterekre vonatkozó iterációs képlet:

$$\mathbf{a}_{l+1} = \mathbf{a}_l + \mathbf{R}^{-1}(\mathbf{G}(\mathbf{a}_l) + \mathbf{C}^T \vec{\lambda}_l).$$

*A becsült paraméterek és a multiplikátorok statisztikai tulajdonságai

A becsült paraméterek és a multiplikátorok statisztikai tulajdonságait ugyanazokkal a módszerekkel vezethetjük le, mint a 6.3. alfejezetben. Legyen most is

$$\Delta \mathbf{a} = \tilde{\mathbf{a}} - \mathbf{a}$$

a becsült és a valódi paraméterértékek különbsége. Mivel

$$\Psi_j(\mathbf{a}) = \Psi_j(\tilde{\mathbf{a}}) = 0, \quad j = 1, 2, \dots, J,$$

a (6.24) feltételek a következő módon írhatók át vektoros alakba:

$$\sum_{k=1}^m C_{jk} \Delta a_k = \mathbf{C} \Delta \mathbf{a} = \mathbf{0}. \quad (6.28)$$

A (6.12a) képletben kiszámítottuk, hogy

$$\mathbf{G}(\tilde{\mathbf{a}}) = \mathbf{F}^T \mathbf{W} \Delta \vec{\xi} - \mathbf{R} \Delta \mathbf{a},$$

ahol a szereplő mennyiségek jelentését a 6.3. alfejezetben megadtuk. Ezzel a (6.26) egyenletrendszer így írható át vektoros alakba:

$$\mathbf{F}^T \mathbf{W} \Delta \vec{\xi} - \mathbf{R} \Delta \mathbf{a} + \mathbf{C}^T \vec{\lambda} = \mathbf{0}, \quad (6.29a)$$

amiből

$$\Delta \mathbf{a} = \mathbf{R}^{-1} \mathbf{F}^T \mathbf{W} \Delta \bar{\boldsymbol{\xi}} + \mathbf{R}^{-1} \mathbf{C}^T \bar{\boldsymbol{\lambda}}. \quad (6.29b)$$

Ha ezt (6.28)-ba helyettesítjük, a

$$\mathbf{C} \mathbf{R}^{-1} \mathbf{F}^T \mathbf{W} \Delta \bar{\boldsymbol{\xi}} + \mathbf{C} \mathbf{R}^{-1} \mathbf{C}^T \bar{\boldsymbol{\lambda}} = \mathbf{0}$$

egyenlet adódik. Ezt megoldjuk $\bar{\boldsymbol{\lambda}}$ -ra:

$$\bar{\boldsymbol{\lambda}} = -\mathbf{M}^{-1} \mathbf{C} \mathbf{R}^{-1} \mathbf{F}^T \mathbf{W} \Delta \bar{\boldsymbol{\xi}}, \quad (6.30a)$$

ahol \mathbf{M} -et (6.27)-ben definiáltuk, majd (6.29)-be helyettesítjük:

$$\Delta \mathbf{a} = \left(\mathbf{R}^{-1} \mathbf{F}^T \mathbf{W} - \mathbf{R}^{-1} \mathbf{C}^T \mathbf{M}^{-1} \mathbf{C} \mathbf{R}^{-1} \mathbf{F}^T \mathbf{W} \right) \Delta \bar{\boldsymbol{\xi}}. \quad (6.30b)$$

A kapott összefüggésekből egyszerűen kapjuk a szereplő mennyiségek statisztikai tulajdonságait. (6.30a)-ból mindenekelőtt látszik, hogy a multiplikátorok zérus várható értékű, Gauss-eloszlású valószínűségi változók. Ami a kovarianciamátrixukat illeti egyszerűen bizonyítható a

$$\mathbf{B}_{\boldsymbol{\lambda}} = \mathbf{M}(\bar{\boldsymbol{\lambda}} \bar{\boldsymbol{\lambda}}^T) = \sigma^2 \mathbf{M}^{-1} = \sigma^2 (\mathbf{C} \mathbf{R}^{-1} \mathbf{C}^T)^{-1} \quad (6.30c)$$

képlet. Szintén az Olvasóra bízunk a becsült paraméterek kovarianciamátrixának a kiszámítását:

$$\mathbf{B}_{\mathbf{a}} = \mathbf{M}(\Delta \mathbf{a} \Delta \mathbf{a}^T) = \sigma^2 (\mathbf{R}^{-1} - \mathbf{R}^{-1} \mathbf{C}^T \mathbf{M}^{-1} \mathbf{C} \mathbf{R}^{-1}). \quad (6.30d)$$

A következő szakaszban belátjuk, hogy a $\mathbf{B}_{\boldsymbol{\lambda}}$ és $\mathbf{B}_{\mathbf{a}}$ mátrixok rangja rendre m és $(m - J)$.

*Példa

Példaképpen tekintsük az 1. fejezetben már részben megoldott kiegyenlítési problémát. Az ottani jelölések helyett írjuk át a mérést a jelen fejezet jelöléseivel:

$$\xi_1 = 54^\circ 5', \quad \xi_2 = 50^\circ 1', \quad \xi_3 = 76^\circ 6',$$

amelyek várható értéke rendre a_1 , a_2 és a_3 . Ezek az illesztendő paraméterek, és ki kell elégíteniük a

$$\Psi_1(\mathbf{a}) = a_1 + a_2 + a_3 - 180^\circ = 0 \quad (6.24a)$$

mellékfeltételt. A (6.26) szerinti normálegyenletek most a következők:

$$-\frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial a_k} \left[\sum_{i=1}^3 (\xi_i - a_i)^2 - 2\lambda(a_1 + a_2 + a_3 - 180^\circ) \right] = \xi_k - a_k + \lambda = 0,$$

($k = 1, 2, 3$). A paraméterek becsült értéke tehát

$$a_k = \xi_k + \lambda, \quad k = 1, 2, 3. \quad (6.24b)$$

λ értékét a (6.24a) mellékfeltétel alapján kapjuk meg, vagyis

$$3\lambda + 12' = 0, \quad \lambda = -4'.$$

Ha ezeket (6.24b)-be helyettesítjük, ugyanazt kapjuk, mint az 1. fejezetben.

A jelen fejezetben azonban már képesek vagyunk a kovarianciamátrixokat is becsülni. Egyszerűen belátható, hogy most

$$\mathbf{F} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} = \mathbf{E} \quad \text{és} \quad \mathbf{C} = [1 \quad 1 \quad 1].$$

(6.9b) szerint ekkor $\mathbf{R} = \mathbf{E}$, amivel (6.27)-ből adódik, hogy \mathbf{M} skalár, értéke 3. λ szórásnégyzete ekkor (vö. (6.27))

$$D^2(\lambda) = \frac{\sigma^2}{3},$$

a háromszög szögeinek a kovarianciamátrixa pedig (vö. (6.30d)):

$$\mathbf{B}_a = \sigma^2 \left\{ \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} - \frac{1}{3} \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \end{bmatrix} \right\} = \frac{\sigma^2}{3} \begin{bmatrix} 2 & -1 & -1 \\ -1 & 2 & -1 \\ -1 & -1 & 2 \end{bmatrix}.$$

Ennek a mátrixnak a determinánsa zérus⁴, viszont van zérustól különböző másodrendű aldeterminánsa, vagyis a rangja 2, ahogy fent állítjuk. Hátravan még σ^2 becslése. Mivel most $n - m + J = 3 - 3 + 1 = 1$, az alább bizonyított tétel szerint ez (vö. (6.24b))

$$s^2 = Q_{\min} = 3\lambda^2 = 3 \cdot (4')^2,$$

amivel a három szögeinek kiegyenlített becslése:

$$\tilde{a}_1 = 54^\circ 1' \pm 5,6', \quad \tilde{a}_2 = 49^\circ 57' \pm 5,6', \quad \tilde{a}_3 = 76^\circ 2' \pm 5,6'.$$

Ha konfidenciaintervallumot kívánunk szerkeszteni, akkor figyelmebe kell vennünk, hogy a szabadsági fokok száma most 1 (tehát szokatlanul kicsi).

* Q_{\min} statisztikai tulajdonságai

A 6.2. TÉTEL mintájára be lehet látni, hogy

$$Q_{\min} = \sigma^2 \chi_{n-m+J}^2.$$

Az állítás plauzibilis: a (6.24) feltételek teljesítése azt jelenti, hogy voltaképpen nem m , hanem $(m - J)$ paramétert illesztünk, hiszen a feltételek révén J

⁴ Például azért, mert sorainak összege zérus.

paraméter kifejezhető a többi $(m - J)$ paraméterrel (lásd a következő szakaszban). Ez pedig a szabadsági fokok számát J -vel megnöveli.

A 6.2. TÉTEL bizonyításából csak azokat a dolgokat részletezzük, amelyek mások, mint a 6.3. alfejezetben. A vizsgált négyzetösszeg (6.21) mintájára a

$$Q_{\min} = (\mathbf{V}\Delta\vec{\xi})^T (\mathbf{E} - \mathbf{A})^2 (\mathbf{V}\Delta\vec{\xi})$$

alakra hozható, ahol most

$$\mathbf{A} = \mathbf{V}\mathbf{F}(\mathbf{R}^{-1} - \mathbf{R}^{-1}\mathbf{C}^T\mathbf{M}^{-1}\mathbf{C}\mathbf{R}^{-1})\mathbf{F}^T\mathbf{V}^T.$$

Némi mátrixalgebrával meg lehet mutatni, hogy \mathbf{A} ugyanúgy projektor, mint korábban:

$$\mathbf{A}^2 = \mathbf{A},$$

tehát a sajátértékei vagy 1-gyel, vagy 0-val egyenlők. Az egyesek száma a mátrix rangjával egyenlő. Megmutatjuk, hogy ez $(m - J)$, amivel a tétel bizonyítását be is fejeztük. Mivel \mathbf{R} pozitív definit és szimmetrikus, lehet találni olyan \mathbf{U} mátrixot, hogy

$$\mathbf{R} = \mathbf{U}^T\mathbf{U}.$$

Ezzel \mathbf{A} a következő alakra hozható:

$$\mathbf{A} = \mathbf{V}\mathbf{F}\mathbf{U}^{-1}(\mathbf{E} - \mathbf{D})(\mathbf{V}\mathbf{F}\mathbf{U}^{-1})^T. \quad (6.31)$$

Az itt szereplő $m \times m$ méretű

$$\mathbf{D} = (\mathbf{C}\mathbf{U}^{-1})^T \mathbf{M}^{-1} \mathbf{C}\mathbf{U}^{-1}$$

mátrixnak pontosan J sajátvektora van, és a nekik megfelelő sajátérték 1. Ezek a sajátvektorok $\mathbf{C}\mathbf{U}^{-1}$ transzponáltjának az oszlopai:

$$\begin{aligned} \mathbf{D}(\mathbf{C}\mathbf{U}^{-1})^T &= (\mathbf{C}\mathbf{U}^{-1})^T \mathbf{M}^{-1} \mathbf{C}\mathbf{U}^{-1} (\mathbf{C}\mathbf{U}^{-1})^T = \\ &= (\mathbf{C}\mathbf{U}^{-1})^T \mathbf{M}^{-1} \mathbf{M} = (\mathbf{C}\mathbf{U}^{-1})^T. \end{aligned}$$

Fentebb kikötöttük, hogy a \mathbf{C} mátrix rangja J , így ezek lineárisan független sajátvektorok, vagyis $\text{rang}(\mathbf{D}) \geq J$. Mivel \mathbf{D} -t úgy kaptuk, hogy \mathbf{C} -t bizonyos mátrixokkal szoroztuk, $\text{rang}(\mathbf{D}) \leq \text{rang}(\mathbf{C}) = J$. A két egyenlőtlenség csak úgy lehet egyszerre igaz, hogy $\text{rang}(\mathbf{D}) = J$. Mivel \mathbf{D} nemzérus sajátértékei 1-gyel egyenlők, az \mathbf{A} mátrix (6.31) szerinti felírásában szereplő $(\mathbf{E} - \mathbf{D})$ rangja $(m - J)$. Szorzással a rangszám nem növekedhet, így (6.31)-ből következik, hogy

$$\text{rang}(\mathbf{A}) \leq \text{rang}(\mathbf{E} - \mathbf{D}) = m - J.$$

Szintén (6.31)-ből következik, hogy

$$\left(\mathbf{V}\mathbf{F}\mathbf{U}^{-1}\right)^{\mathbf{T}}\mathbf{A}\mathbf{V}\mathbf{F}\mathbf{U}^{-1}=\mathbf{E}-\left(\mathbf{C}\mathbf{U}^{-1}\right)^{\mathbf{T}}\mathbf{M}^{-1}\mathbf{C}\mathbf{U}^{-1}=\mathbf{E}-\mathbf{D},$$

ami azt jelenti, hogy

$$\text{rang}(\mathbf{A}) \geq \text{rang}(\mathbf{E}-\mathbf{D})=m-J.$$

A két utóbbi egyenlőtlenség egyszerre csak úgy teljesülhet, hogy az \mathbf{A} mátrix rangja $(m-J)$, amint állítottuk.

Mivel $\tilde{\mathbf{a}}$ kovarianciamátrixa

$$\mathbf{B}_{\tilde{\mathbf{a}}}=\sigma^2\mathbf{U}^{-1}(\mathbf{E}-\mathbf{D})\left(\mathbf{U}^{-1}\right)^{\mathbf{T}}$$

alakban írható, ennek a rangja legfeljebb $(m-J)$, ahogy lenni is kell, hiszen $\tilde{\mathbf{a}}$ -nak csak ennyi lineárisan független komponense van.

*Kiegyenlítés a változók kifejezésével

Ugyan kevésbé elegáns módszer, de vázlatosan mutatunk egy másikat is: a (6.24) feltételi egyenletekből J darab paraméter kifejezhető a többivel. Ez utóbbiak száma nyilván $(m-J)$, és az illesztés csak ezekre vonatkozóan hajtható végre. Legyen a paraméterek számozása olyan, hogy a $k > m-J$ sorszámúakat fejezzük ki a $k \leq m-J$ sorszámúakkal:

$$\Delta a_{k'}=\sum_{k=1}^{m-J}H_{k'k}\Delta a_k, \quad k' > m-J. \quad (6.32a)$$

Ekkor tehát a mellékfeltételek (6.28) szerinti, linearizált alakjában szereplő \mathbf{C} mátrixot a

$$\mathbf{C}_{J,m}=\left[-\mathbf{H}_{J,m-J} \quad \mathbf{E}_{J,J}\right] \quad (6.32b)$$

alakban bonthatjuk blokkokra.⁵ Magát az illesztést csak az első $(m-J)$ darab paraméterre végezzük, majd a kapott paraméterek segítségével a (6.32a) képlettel fejezzük ki a fennmaradó J paramétert.

A deriváltak \mathbf{F} mátrixából most el kell hagynunk a nem illesztett paraméterekhez tartozó oszlopokat, a többi meg módosítanunk kell, hiszen az illesztőfüggvény most két módon függ az illesztett, $k \leq m-J$ sorszámú paraméterektől: egyrészt közvetlenül, másrészt a (6.32a) képletben kifejezett paramétereken keresztül:

$$F'_{ik}=\frac{\partial f(x_i,\mathbf{a})}{\partial a_k}+\sum_{k'=m-J+1}^m\frac{\partial f(x_i,\mathbf{a})}{\partial a_{k'}}H_{k'k}, \quad k \leq m-J.$$

⁵ Az alábbi megfontolások világosabbá tétele érdekében jelöljük a mátrixok sorainak és oszlopainak a számát. Az itt szereplő \mathbf{H} mátrix nem tévesztendő össze a (6.17)-ben szereplő \mathbf{H} mátrixszal.

Végeredményben az eredeti $\mathbf{F}_{n,m}$ mátrix helyett az illesztésben az

$$\mathbf{F}'_{n,m-J} = \mathbf{F}_{n,m} \begin{bmatrix} \mathbf{E}_{m-J,m-J} \\ \mathbf{H}_{J,m-J} \end{bmatrix}$$

mátrixot használjuk. Így az eredetileg m oszlopú \mathbf{F} mátrix az $(m-J)$ oszlopú \mathbf{F}' mátrixszá transzformálódik. Erre változatlanul alkalmazhatjuk a 6.3. és 6.4. alfejezetekben szereplő képleteket és tételeket. Ha iterálni kell, a transzformációt minden lépésben el kell végezni.

Megmutatjuk, hogy a két módszer egyenértékű, legfeljebb csak az illesztés matematikai formalizmusa különböző. Legyen $\Delta \mathbf{a}'$ a teljes $\Delta \mathbf{a}$ vektor első $(m-J)$ komponenséből képzett vektor. Ekkor (6.32a) alapján írhatjuk:

$$\Delta \mathbf{a} = \begin{bmatrix} \mathbf{E}_{m-J,m-J} \\ \mathbf{H}_{J,m-J} \end{bmatrix} \Delta \mathbf{a}'.$$

A (6.9b)-ben definiált \mathbf{R} mátrix helyett most az

$$\mathbf{R}'_{m-J,m-J} = \begin{bmatrix} \mathbf{E}_{m-J,m-J} & \mathbf{H}_{J,m-J}^T \end{bmatrix} \mathbf{R}_{m,m} \begin{bmatrix} \mathbf{E}_{m-J,m-J} \\ \mathbf{H}_{J,m-J} \end{bmatrix}$$

mátrixszal dolgozunk. A (6.12a) képlet átmegy az

$$\mathbf{F}'^T \mathbf{W} \Delta \vec{\xi} - \mathbf{R}' \Delta \mathbf{a}' = 0$$

egyenletbe. Fenti képleteink alapján ennek részletes alakja

$$\begin{bmatrix} \mathbf{E} & \mathbf{H}^T \end{bmatrix} \mathbf{F}^T \mathbf{W} \Delta \vec{\xi} - \begin{bmatrix} \mathbf{E} & \mathbf{H}^T \end{bmatrix} \mathbf{R} \Delta \mathbf{a} = 0. \quad (6.33a)$$

A mátrixok sorainak és oszlopainak a számát a továbbiakban nem jelöljük, mert az eddigiekből világos. Ez csak $(m-J)$ egyenlet m ismeretlenre. Az egyenletrendszer megoldhatóvá válik azonban, ha hozzávesszük a (6.32a) alatti J egyenletet. Ezen a módon tehát – (6.12b) analógiájára – a $\Delta \mathbf{a}$ vektort kifejeztük a $\Delta \vec{\xi}$ vektorral.

A Lagrange-multiplikátoros módszer szerint ugyanezt a szerepet játsszák a (6.29a) és (6.29b) egyenletek. A két módszer egyenértékűségének bizonyításához elég belátni, hogy a (6.29) egyenletek szerint ugyanez az összefüggés áll fenn a $\Delta \mathbf{a}$ és $\Delta \vec{\xi}$ vektorok között. (6.29a)-t balról beszorozzuk az $\begin{bmatrix} \mathbf{E} & \mathbf{H}^T \end{bmatrix}$ mátrixszal:

$$\begin{bmatrix} \mathbf{E} & \mathbf{H}^T \end{bmatrix} \mathbf{F}^T \mathbf{W} \Delta \vec{\xi} - \begin{bmatrix} \mathbf{E} & \mathbf{H}^T \end{bmatrix} \mathbf{R} \Delta \mathbf{a} + \begin{bmatrix} \mathbf{E} & \mathbf{H}^T \end{bmatrix} \mathbf{C}^T \vec{\lambda} = \mathbf{0}, \quad (6.33b)$$

amivel a Lagrange-multiplikátorokat kiküszöböltük a (6.29) egyenletekből, ugyanis (6.32b) szerint

$$\begin{bmatrix} \mathbf{E} & \mathbf{H}^T \end{bmatrix} \mathbf{C}^T = \begin{bmatrix} \mathbf{E} & \mathbf{H}^T \end{bmatrix} \begin{bmatrix} -\mathbf{H}^T \\ \mathbf{E} \end{bmatrix} = -\mathbf{H}^T + \mathbf{H}^T = \mathbf{0}.$$

Beláttuk tehát, hogy a (6.33a) és (6.33b) egyenletek azonosak, vagyis a két módszer egyenértékű.

*6.6. A linearizálás kérdései

Több helyen említettük, hogy az illesztést lehet az illesztőfüggvény linearizálása útján is végrehajtani. Nos, az alábbiakban az ezzel összefüggő problémákat fogjuk megbeszélni.

*Linearizálás transzformációval

Az illesztést egyszerűsíthetjük, amikor van olyan $h(t)$ transzformációs függvény, hogy az illesztőfüggvény a

$$h[f(x_i, \mathbf{a})] = b_1 + b_2 x_i$$

alakra hozható, ahol b_1 és b_2 lineáris regresszióval becsülhető együtthatók. Példák a $h(t)$ függvényre:

$$h(t) = \ln t, \quad h(t) = \arccos t, \quad h(t) = 1/\sqrt{t}$$

és így tovább. Az általuk linearizálható illesztőfüggvények rendre

$$\begin{aligned} a_1 e^{-a_2 x_i}, \quad b_1 &= \ln a_1, \quad b_2 = -a_2, \\ a_1 \cos[a_2(x_i - a_3)], \quad b_1 &= -a_2 a_3, \quad b_2 = a_2, \\ \frac{a_1}{(x_i + a_2)^2}, \quad b_1 &= \frac{a_2}{\sqrt{a_1}}, \quad b_2 = \frac{1}{\sqrt{a_1}}. \end{aligned}$$

A $h(t)$ transzformációt persze nem az illesztőfüggvényen hajtjuk végre, hanem a közvetlenül mért adatokon. Ez azt jelenti, hogy a

$$Q = \sum_{i=1}^n p_i [h(\xi_i) - b_1 - b_2 x_i]^2 \quad (6.34)$$

funkcionálnak keressük a minimumát b_1 és b_2 függvényében. A p_i súlyokat a (6.2) képlet szerint határozzuk meg. A 6.3. alfejezethez hasonlóan legyen

$$y_i = M(\xi_i) \quad \text{és} \quad \Delta \xi_i = \xi_i - y_i.$$

Fejtsük a transzformációs függvényt a várható érték körül Taylor-sorba:

$$h(\xi_i) = h(y_i) + h'(y_i) \Delta \xi_i + \frac{1}{2} h''(y_i) (\Delta \xi_i)^2 + \dots$$

(6.2) szellemében a súlyok fordítva arányosak a transzformált mennyiségek szórásnégyzetével. Célszerű megtartani a ξ_i mennyiségekhez tartozó eredeti arányossági tényezőt (σ^2):

$$\begin{aligned}\frac{\sigma^2}{p_i} &= D^2[h(\xi_i)] = M\left\{[h(\xi_i) - h(y_i)]^2\right\} = \\ &= [h'(y_i)]^2 D^2(\xi_i) + \dots = \frac{\sigma^2}{w_i} [h'(y_i)]^2 + \dots\end{aligned}$$

Azt kaptuk tehát, hogy a súlyokat a

$$p_i = \frac{w_i}{[h'(y_i)]^2} \quad (6.35)$$

képlet szerint kell megválasztanunk, ha azt akarjuk, hogy a b_1 és b_2 paraméterek kovarianciamátrixára használható legyen a (6.13) alatt kapott képlet.⁶

A linearizálás helyessége attól függ, mennyire érvényes a (6.1) képlet a transzformált mennyiségekre. (6.1) akkor lenne érvényes, ha minden i -re fennállna, hogy

$$M[h(\xi_i)] = h[M(\xi_i)].$$

Ez pedig csak akkor lehet igaz, amikor $h(t)$ lineáris függvény, márpedig a linearizálásra csak akkor van szükség, amikor $h(t)$ *nem* lineáris. A transzformált mennyiségekkel végzett illesztés tehát torzított becslést ad a b_1 és b_2 paraméterekre, amire a transzformált mennyiségeket korrigálni kell. Ha az eredeti ξ_i adatok torzítatlanok, a sorfejtés lineáris tagjának a várható értéke zérus, de a kvadratikus tagé nem. Azt kaptuk tehát, hogy

$$\begin{aligned}M[h(\xi_i)] &= h(y_i) + \frac{1}{2} h''(y_i) D^2(\xi_i) + \dots = \\ &= h(y_i) + \frac{1}{2} h''(y_i) \frac{\sigma^2}{w_i} + \dots,\end{aligned}$$

[vö. (6.2)], vagyis (6.34) helyett a

$$Q = \sum_{i=1}^n p_i \left[h(\xi_i) - \frac{1}{2} h''(y_i) \frac{\sigma^2}{w_i} - b_1 - b_2 x_i \right]^2$$

funkcionál minimumát kell keresnünk.

⁶ A (6.34) funkcionál minimalizálása révén a b_1 és b_2 paraméterekre kapott becslés torzított vagy torzítatlan volta nem függ a p_i súlyok megválasztásától. Viszont a kovarianciamátrixra megadott (6.13) képlet csak a (6.35) szerinti súlyok mellett lesz érvényes. Ha mégis más súlyokat használunk, ezt a képletet módosítani kell, amit a (6.14) képletet követően mondottak értelmében tanácsos elkerülni.

A 7.1. alfejezetben tárgyaljuk a lineáris regressziót. Az ott kapott (7.3) normálegyenletet az itteni esetre alkalmazva a következőt kapjuk, ha a korrekciót *nem* hajtjuk végre:

$$\mathbf{Rb} = \mathbf{g}, \quad (6.36)$$

ahol $\mathbf{b}^T = (b_1, b_2)$,

$$R_{11} = \sum_{i=1}^n p_i, \quad R_{12} = R_{21} = \sum_{i=1}^n p_i x_i, \quad R_{22} = \sum_{i=1}^n p_i x_i^2,$$

továbbá

$$g_1 = \sum_{i=1}^n p_i h(\xi_i), \quad g_2 = \sum_{i=1}^n p_i h(\xi_i) x_i.$$

A (6.36) egyenletrendszer megoldását a

$$\tilde{\mathbf{b}} = \mathbf{R}^{-1} \mathbf{g} \quad (6.37)$$

képlet adja meg. A $h(t)$ függvény nemlineáris voltára úgy korrigálhatunk, hogy a \mathbf{g} vektorból levonjuk a \mathbf{g}^c vektort, amelynek a következők az összetevői:

$$g_1^c = \frac{\sigma^2}{2} \sum_{i=1}^n p_i \frac{h''(y_i)}{w_i}, \quad g_2^c = \frac{\sigma^2}{2} \sum_{i=1}^n p_i \frac{h''(y_i)}{w_i} x_i.$$

Ezzel a paraméterek korrigált becslése

$$\tilde{\mathbf{b}} = \mathbf{R}^{-1} (\mathbf{g} - \mathbf{g}^c).$$

Vegyük észre, hogy a korrekció ugyanúgy σ^2 -tel arányos, mint a (6.18) szerint számolt torzítás. Ha a súlyokat (6.35)-ből helyettesítjük, a korrekció

$$g_1^c = \frac{\sigma^2}{2} \sum_{i=1}^n \frac{h''(y_i)}{[h'(y_i)]^2} \approx \frac{\sigma^2}{2} \sum_{i=1}^n \frac{h''(\xi_i)}{[h'(\xi_i)]^2},$$

$$g_2^c = \frac{\sigma^2}{2} \sum_{i=1}^n x_i \frac{h''(y_i)}{[h'(y_i)]^2} \approx \frac{\sigma^2}{2} \sum_{i=1}^n x_i \frac{h''(\xi_i)}{[h'(\xi_i)]^2}.$$

A kapott eredmények értékeléséhez nézzünk egy példát! Legyen $h(t)$ az exponenciális illesztőfüggvényekhez gyakran alkalmazott $\ln t$ függvény. Ekkor

$$h(t) = \ln t, \quad h'(t) = 1/t, \quad h''(t) = -1/t^2.$$

A mérési adatok a 6.1. táblázatban találhatóak, amelyek Poisson-eloszlású valószínűségi változók, tehát

$$w_i = \frac{1}{y_i},$$

[vö. (6.37), 6.7. alfejezet]. Ezzel (6.35) alapján

$$p_i = y_i \approx \xi_i.$$

Mivel az eredeti w_i súlyok egyenlők a szórásnégyzetek reciprokával, feltehetjük, hogy $\sigma^2 = 1$.

Az eredeti illesztőfüggvényre iterációval elvégzett illesztés eredménye:

$$\tilde{a}_1 = 9912,2 \pm 71,8 \quad \tilde{a}_2 = 0,2000 \pm 0,0011.$$

E becslések torzítása (6.18) szerint:

$$\delta a_1 = -0,647 \quad \text{és} \quad \delta a_2 = -1,56 \cdot 10^{-5},$$

ami gyakorlatilag elhanyagolható. A szabadsági fokok száma $n - m = 18$. A Student-eloszlásnak ehhez $\varepsilon = 0,05$ mellett tartozó kvantilise 2,1009, vagyis a konfidenciaintervallumok:

$$(9761,4; 10063,0) \quad (0,1977; 0,2023).$$

Megjegyezzük, hogy a 6.1. táblázat generálásakor felvett paraméterek valódi értéke: $a_1 = 10000$ és $a_2 = 0,2$. Ezek benne vannak a kapott intervallumokban. $Q_{\min} = 16,33$, ami megfelel egy 18 szabadsági fokú χ^2 -eloszlásnak.

6.1. táblázat. Exponenciális illesztés linearizálással

| x_i | ξ_i | $\ln \xi_i$ | korrekció |
|-------|---------|-------------|-----------|
| 1 | 8118 | 9,0018 | -0,00006 |
| 2 | 6700 | 8,8099 | -0,00007 |
| 3 | 5474 | 8,6078 | -0,00009 |
| 4 | 4471 | 8,4054 | -0,00011 |
| 5 | 3649 | 8,2022 | -0,00014 |
| 6 | 2916 | 7,9780 | -0,00017 |
| 7 | 2466 | 7,8104 | -0,00020 |
| 8 | 1985 | 7,5934 | -0,00025 |
| 9 | 1595 | 7,3746 | -0,00031 |
| 10 | 1323 | 7,1877 | -0,00038 |
| 11 | 1104 | 7,0067 | -0,00045 |
| 12 | 912 | 6,8156 | -0,00055 |
| 13 | 728 | 6,5903 | -0,00069 |
| 14 | 597 | 6,3919 | -0,00084 |
| 15 | 505 | 6,2246 | -0,00099 |
| 16 | 418 | 6,0355 | -0,00120 |
| 17 | 349 | 5,8551 | -0,00143 |
| 18 | 238 | 5,4723 | -0,00210 |
| 19 | 237 | 5,4681 | -0,00211 |
| 20 | 213 | 5,3613 | -0,00235 |

A 6.1. táblázat harmadik oszlopában levő transzformált mennyiségekre (6.37) alapján a

$$\tilde{b}_1 = 9,2013 \pm 0,0076 \quad \tilde{b}_2 = -0,1997 \pm 0,0011$$

becsléseket kapjuk. Ha ezeket az eredeti paraméterekre számoljuk át, akkor az

$$\tilde{a}_1 = e^{\tilde{b}_1} = 9910,0 \pm 75,3 \quad \tilde{a}_2 = -\tilde{b}_2 = 0,1997 \pm 0,0011.$$

eredményeket kapjuk. Ezek a becslések nyilvánvalóan ekvivalensek az iterációval kapott illesztés eredményeivel. Még a négyzetösszeg is gyakorlatilag azonos: $Q_{\min} = 16,53$. \tilde{a}_1 szórását a

$$D(\tilde{a}_1) = e^{\tilde{b}_1} D(\tilde{b}_1) = 9910,0 \cdot 0,0076 = 75,3.$$

Erre a dolgóra a hibaterjedéssel foglalkozó 7.5. alfejezetben térünk vissza részletesen.

Befejezésül nézzük meg a korrekciót. Ha a megadott képletek alapján kiszámítjuk a \mathbf{g}^c vektort, a következő korrekciók adódnak:

$$\delta b_1 = 1,3 \cdot 10^{-4} \quad \text{és} \quad \delta b_2 = -7 \cdot 10^{-5},$$

amit az eredeti paraméterekre átszámolva a

$$\delta a_1 = 1,29 \quad \text{és} \quad \delta a_2 = 7 \cdot 10^{-5}$$

korrekciókat kapjuk, amelyek megegyeznek a közvetlen illesztés torzításaival. A fentiek és a hibaterjedés szabályai szerint ugyanis

$$\delta a_1 = e^{\tilde{b}_1} \delta b_1 = 9910,0 \cdot 1,3 \cdot 10^{-4} = 1,29 \quad \delta a_2 = -\delta b_2.$$

Végeredményben azt látjuk, hogy a linearizálás után kapott paraméterbecslések *egyenértékűek* az eredeti illesztőfüggvénnyel és iterációval adódó eredményekkel, ha a transzformációt kellő gondossággal hajtjuk végre, például kiszámítjuk a p_i súlyokat. Mégsem lenne szerencsés, ha méréseink kiértékelésében erre a módszerre próbálnánk berendezkedni. Ennek pedig nem elvi, hanem gyakorlati okai vannak:

1. Az illesztőfüggvények nagy része nem linearizálható. Ezért nem kerülhetjük meg a normálegyenletek iterációval való megoldását.
2. Ha a linearizálást korrektül hajtjuk végre, annyi mellékszámításra van szükség, hogy végeredményben több munkát végzünk, mintha végrehajtanánk az iterációt. A tapasztalat egyébként azt mutatja, hogy linearizálható illesztőfüggvények esetében három-négy lépésben konvergál az iteráció.
3. A mérési adatok kiértékelésében a jövő útja jól kidolgozott számítógépi programok használata. Ilyenek nélkül kísérleti fizikus manapság aligha dolgozhat. A közhasznú programok azonban csak az iteráció kezdőértékének a becslésére használják a linearizációt.

*Linearizálás sorfejtéssel

Az illesztőfüggvény linearizálásának általánosan alkalmazható módja a függvény sorfejtése:

$$f(x_i, \tilde{\mathbf{a}}) = f(x_i, \mathbf{a}) + \sum_{k=1}^m \frac{\partial f(x_i, \mathbf{a})}{\partial a_k} (\tilde{a}_k - a_k) = f(x_i, \mathbf{a}) + [\mathbf{F}\Delta\mathbf{a}]_i$$

[vö. (6.38)]. Ebben a közelítésben a $\Delta\mathbf{a}$ vektor komponenseit tekintjük illesztendő paramétereknek. Mivel az illesztőfüggvény ezekben lineáris, ezt a módszert is nevezhetjük *linearizálásnak*. Tulajdonképpen a teljes 6.3. alfejezetben ezt a módszert alkalmaztuk.

A legtöbb kézikönyv szintén ebben a felfogásban tárgyalja a függvényillesztést. Nem mindegy azonban, milyen paraméterértékek mellett számítjuk ki az elméletben szereplő mátrixokat (\mathbf{F} , \mathbf{R} stb.). Fenti levezetéseinkből következik, hogy ez nem lehet más, mint a (6.5) normálegyenletek megoldása, de legalábbis valami ehhez közeli paramétervektor. Emiatt nem lehet megkerülni a 6.2. alfejezetben tárgyalt iterációt.

A linearizálás hibája a (6.17) és (6.18) egyenletben kiszámított $\delta\mathbf{a}$ torzítás. Megbeszéltük, hogy ez általában elhanyagolható, de ennek ellenére célszerű becsleni annak érdekében, hogy erről meggyőződjünk.

*6.7. A súlyozás

A fentiekben a legkisebb négyzetek módszerét használtuk, ami akkor felel meg a maximális valószínűség elvének, amikor a közvetlenül mért ξ_i mennyiségek Gauss-eloszlásúak. A gyakorlatban előforduló mérések esetében szereplő valószínűségi eloszlások más típusúak. A maximális valószínűség elve – érdekes módon – formálisan ekkor is a legkisebb négyzetek módszerének megfelelő egyenletekre vezet, ha a w_i súlyokat alkalmasan választjuk meg. Ebben az alfejezetben ezt fogjuk tárgyalni néhány nevezetes eloszlásra vonatkozóan.

*Poisson-eloszlás

Poisson-eloszlás esetében a közvetlenül mért ξ_i mennyiségek együttes eloszlásfüggvénye

$$L(\mathbf{x}, \tilde{\boldsymbol{\xi}}, \mathbf{a}) = \prod_{i=1}^n e^{-f(x_i, \mathbf{a})} \frac{[f(x_i, \mathbf{a})]^{\xi_i}}{\xi_i!}.$$

A maximális valószínűség elve szerint a paraméterek becsült értékét a következő egyenletrendszer megoldása adja ($k = 1, 2, \dots, m$):

$$\begin{aligned} \frac{\partial \ln L(\mathbf{x}, \tilde{\boldsymbol{\xi}}, \mathbf{a})}{\partial a_k} &= \sum_{i=1}^n \left\{ -\frac{\partial f(x_i, \mathbf{a})}{\partial a_k} + \frac{\xi_i}{f(x_i, \mathbf{a})} \frac{\partial f(x_i, \mathbf{a})}{\partial a_k} \right\} = \\ &= \sum_{i=1}^n \frac{\xi_i - f(x_i, \mathbf{a})}{f(x_i, \mathbf{a})} \frac{\partial f(x_i, \mathbf{a})}{\partial a_k} = 0, \end{aligned} \quad (6.38)$$

ami ugyanolyan alakú, mint a (6.5) alatti normálegyenletek, ha a súlyokat a

$$w_i = \frac{1}{f(x_i, \mathbf{a})} \approx \frac{1}{\xi_i} \quad (6.39)$$

képlet szerint választjuk meg. Vegyük észre, hogy ez éppen a szórásnégyzet reciprokával való súlyozás, hiszen Poisson-eloszlás esetében

$$D^2(\xi_i) = M(\xi_i) = f(x_i, \mathbf{a}) \approx \xi_i. \quad (6.39a)$$

Ezért lehet a Poisson-eloszlást Gauss-eloszlással közelíteni.

Könnyű belátni, hogy a (6.38) normálegyenleteket úgy is megkaphatjuk, hogy a

$$Q(\mathbf{a}) = \sum_{i=1}^n \frac{[\xi_i - f(x_i, \mathbf{a})]^2}{f(x_i, \mathbf{a})} \approx \sum_{i=1}^n \frac{[\xi_i - f(x_i, \mathbf{a})]^2}{\xi_i}$$

funkcionál minimumát keressük, de deriválásakor a súlyfüggvényt nem deriváljuk.

Előbbi képleteinkben a súly kiszámításakor az illesztőfüggvényt ξ_i -vel közelítettük. Mindkét súlyozás problémás, mert torzítást okozhat. Tekintsük példaként az $f(x, \mathbf{a}) = a$ illesztőfüggvényt. Ekkor a (6.38) normálegyenletek megoldása

$$\tilde{a} = \frac{\sum_{i=1}^n w_i \xi_i}{\sum_{i=1}^n w_i} = \frac{\sum_{i=1}^n \frac{1}{\xi_i} \xi_i}{\sum_{i=1}^n \frac{1}{\xi_i}} = \frac{n}{\sum_{i=1}^n \frac{1}{\xi_i}} = \frac{1}{1/\bar{\xi}}.$$

Belátható (lásd alább), hogy

$$M(\tilde{a}) \approx a - 1 - 1/a,$$

ami kis beütésszámok esetében jelentős torzítás. Erősen nem lineáris illesztő függvények esetében pedig a $w = 1/f(x, \mathbf{a})$ súlyozás okoz torzítást: hajlamos a nagy beütésszámokhoz túlságosan kis súlyokat rendelni. Például a 6.6. alfejezetben tárgyalt exponenciális illesztőfüggvény ($a_1 e^{-a_2 x_i}$) esetében az a_1 paraméter értéke a nagyobb értékek felé tolódik el, hiszen Q értéke nem csak akkor csökken, ha a $[\xi_i - f(x_i, \mathbf{a})]$ eltérések csökkennek, hanem akkor is, amikor a súlyok megnőnek. Ennek egyszerű módja pedig a_1 növelése. Emiatt a_2 -re is nagyobb becsült értéket kapunk, ami torzított becslést jelent. A legjobb megoldás a méréseket úgy tervezni, hogy a beütésszámok nagyok legyenek, mert akkor az $1/\xi_i$ -vel való súlyozás kifogástalan.

Befejezésül belátjuk legutóbbi képletünket. Amikor ξ Poisson-eloszlású,

$$M\left(\frac{1}{\xi}\right) = \sum_{k=1}^{\infty} e^{-a} \frac{a^k}{k \cdot k!}$$

Ezt az összeget a következőképpen alakíthatjuk át:

$$\begin{aligned} M\left(\frac{1}{\xi}\right) &= \sum_{k=1}^{\infty} e^{-a} \left[\frac{a^k}{(k+1)!} + \frac{a^k}{k \cdot (k+1)!} \right] = \\ &= \frac{1}{a} \sum_{k=0}^{\infty} e^{-a} \frac{a^k}{k!} + \sum_{k=2}^{\infty} e^{-a} \frac{a^{k-1}}{k \cdot (k-1)!} = \frac{1}{a} + \frac{1}{a} M\left(\frac{1}{\xi-1}\right). \end{aligned}$$

Hasonló gondolatmenettel beláthatjuk a következő összefüggést:

$$M\left(\frac{1}{\xi-1}\right) = M\left(\frac{1}{\xi}\right) + \frac{1}{a^2} + O\left(\frac{1}{a^3}\right),$$

amit előbbi egyenletünkbe helyettesítve kapjuk, hogy

$$M\left(\frac{1}{\xi}\right) = \frac{1/a + 1/a^3}{1 - 1/a} = \frac{1 + 1/a^2}{a - 1},$$

vagyis

$$\frac{1}{M\left(\frac{1}{\xi}\right)} = \frac{a-1}{1 + \frac{1}{a^2}} = a - 1 - \frac{1}{a} + O\left(\frac{1}{a^2}\right).$$

Megjegyezzük, hogy ez a sorfejtés a egészen kis értékeire ($a < 5$) tovább finomítandó lenne.

*Gauss-eloszlás, de x_i is valószínűségi változó

Az illesztőfüggvény x_i független változóját általában konstansnak tételezzük fel. Vannak azonban esetek, amikor x_i is valószínűségi változó. Az alábbiakban megmutatjuk, hogy ezek is visszavezethetők a konstans x_i esetre, ha a súlyokat alkalmasan választjuk meg. Feltesszük, hogy mind x_i , mind ξ_i Gauss-eloszlású. Az utóbbiak együttes sűrűségfüggvényét (6.3)-ban felírtuk. Ezt ki kell egészítenünk az x_i változókéval:

$$L_i(x_i, x_{i0}) = \frac{1}{\sigma_{xi} \sqrt{2\pi}} \exp\left\{-\frac{(x_i - x_{i0})^2}{2\sigma_{xi}^2}\right\},$$

ahol

$$x_{i0} = M(x_i), \quad \sigma_{xi}^2 = D^2(x_i).$$

A későbbiekben szükségünk lesz még a

$$\sigma_{\xi_i}^2 = D^2(\xi_i)$$

jelölésre. Az x_i és ξ_i változók együttes sűrűségfüggvénye

$$L(\mathbf{x}, \bar{\boldsymbol{\xi}}, \mathbf{a}) = L_0(\mathbf{x}_0, \bar{\boldsymbol{\xi}}, \mathbf{a}) \prod_{i=1}^n L_i(x_i, x_{i0}).$$

Ezek deriváltját kell zérussal egyenlővé tenni $k = 1, 2, \dots, m$ -re:

$$G_k(\mathbf{a}, \mathbf{x}_0) = \frac{\partial \ln L(\mathbf{x}, \bar{\boldsymbol{\xi}}, \mathbf{a})}{\partial a_k} = \sum_{i=1}^n \frac{\xi_i - f(x_{i0}, \mathbf{a})}{\sigma_{\xi_i}^2} \frac{\partial f(x_{i0}, \mathbf{a})}{\partial a_k} = 0, \quad (6.40a)$$

illetve $i = 1, 2, \dots, n$ -re:

$$g_i(\mathbf{a}, \mathbf{x}_0) = \frac{\partial \ln L}{\partial x_{i0}} = \frac{\xi_i - f(x_{i0}, \mathbf{a})}{\sigma_{\xi_i}^2} \frac{\partial f(x_{i0}, \mathbf{a})}{\partial x_{i0}} + \frac{x_i - x_{i0}}{\sigma_{x_i}^2} = 0. \quad (6.40b)$$

Ezekből az egyenletekből kiküszöböljük az x_{i0} -akat, hogy bennük csak a mért mennyiségek, az x_i -k maradjanak. Ebből a célból $f(\dots)$ -et sorba fejtjük:

$$f(x_{i0}, \mathbf{a}) = f(x_i, \mathbf{a}) - (x_i - x_{i0}) \frac{\partial f(x_i, \mathbf{a})}{\partial x_i},$$

amivel

$$\xi_i - f(x_{i0}, \mathbf{a}) = \xi_i - f(x_i, \mathbf{a}) + (x_i - x_{i0}) \frac{\partial f(x_i, \mathbf{a})}{\partial x_i}.$$

Ezt (6.40b)-be helyettesítve írhatjuk:

$$x_i - \tilde{x}_{i0} = - \frac{[\xi_i - f(x_i, \mathbf{a})] \frac{\partial f(x_i, \mathbf{a})}{\partial x_i}}{\left[\frac{\partial f(x_i, \mathbf{a})}{\partial x_i} \right]^2 + \frac{\sigma_{\xi_i}^2}{\sigma_{x_i}^2}},$$

vagyis

$$\xi_i - f(\tilde{x}_{i0}, \mathbf{a}) = [\xi_i - f(x_i, \mathbf{a})] \frac{\sigma_{\xi_i}^2}{\sigma_{\xi_i}^2 + \sigma_{x_i}^2 \left[\frac{\partial f(x_i, \mathbf{a})}{\partial x_i} \right]^2}.$$

Ezzel x_{i0} -at kiküszöböltük, így az a_k paraméterekre vonatkozó normálegyenletek ($k = 1, 2, \dots, m$):

$$G_k(\mathbf{a}, \tilde{\mathbf{x}}_0) = \sum_{i=1}^n \frac{\xi_i - f(x_i, \mathbf{a})}{\sigma_i^2} \frac{\partial f(x_i, \mathbf{a})}{\partial a_k} = 0, \quad (6.41a)$$

ahol

$$\sigma_i^2 = \sigma_{\xi_i}^2 + \sigma_{x_i}^2 \left[\frac{\partial f(x_i, \mathbf{a})}{\partial x_i} \right]^2 = \frac{\sigma^2}{w_i} \quad (6.41b)$$

Ez a $[\xi_i - f(x_i, \mathbf{a})]$ különbség szórásnégyzete. Ezután úgy is vehetjük, mintha x_i állandó lenne, de ξ_i szórásnégyzetét (6.41b) szerint nagyobboknak kell vennünk.

Ha az illesztőfüggvénynek több független változója van: $f(x, t, z, \dots, \mathbf{a})$, akkor a fentiek mintájára könnyen belátható, hogy a helyes súlyozás

$$\begin{aligned} \sigma_i^2 = & \sigma_{\xi_i}^2 + \sigma_{x_i}^2 \left[\frac{\partial f(x_i, t_i, z_i, \dots, \mathbf{a})}{\partial x_i} \right]^2 + \\ & + \sigma_{t_i}^2 \left[\frac{\partial f(x_i, t_i, z_i, \dots, \mathbf{a})}{\partial t_i} \right]^2 + \sigma_{z_i}^2 \left[\frac{\partial f(x_i, t_i, z_i, \dots, \mathbf{a})}{\partial z_i} \right]^2 + \dots \end{aligned} \quad (6.39c)$$

*Számlálás holtidővel

Ha nem minden i -re azonos a számlálási idő, akkor az illesztőfüggvényt a következő alakúra célszerű választani:

$$M(\xi_i) = T_i f(x_i, \mathbf{a}).$$

$f(x_i, \mathbf{a})$ most az *időegységre eső beütésszám* várható értékét adja meg. Minden számlálónak van holtideje, ami azt jelenti, hogy egy részecske megszámlálását követően egy bizonyos τ ideig nem képes továbbiakat fogadni. Emiatt számlálási veszteségek lépnek fel, amelyek figyelembevételére szolgál a *holtidő-korrektíós tényező*:

$$v_i = \frac{T_i}{T_i - \xi_i \tau} \approx 1 + f(x_i, \mathbf{a}) \tau,$$

ami azt jelenti, hogy a megszámlált részecskék ξ_i számának a várható értéke

$$M(\xi_i | \tau) = \frac{T_i f(x_i, \mathbf{a})}{v_i} \approx \frac{T_i f(x_i, \mathbf{a})}{1 + f(x_i, \mathbf{a}) \tau}.$$

$\tau \neq 0$ holtidő esetén ξ_i nem Poisson-eloszlású.

Nézzük meg, mit ad a maximális valószínűség módszere ebben az esetben. Ismeretes ([1], Jánossy), hogy a mérési eredmények együttes valószínűsége

$$L(\mathbf{x}, \bar{\xi}, \mathbf{a}) = \prod_{i=1}^n e^{-T_i^{\text{eff}} f(x_i, \mathbf{a})} \frac{[T_i^{\text{eff}} f(x_i, \mathbf{a})]^{\xi_i}}{\xi_i!}, \quad (6.42)$$

ahol

$$T_i^{\text{eff}} = T_i - (\xi_i - 1)\tau \approx T_i - \xi_i\tau$$

az *effektív számlálási idő*, hiszen – az elsőt leszámítva – mindegyik megszámlált részecskét követően τ idő kiesik. A holtidő-korrekcións tényezőt ezzel is kifejezhetjük:

$$v_i = \frac{T}{T_i^{\text{eff}}}.$$

A maximális valószínűség módszere a következő normálegyenletekre vezet:

$$\frac{\partial \ln L}{\partial a_k} = \sum_{i=1}^n \frac{\xi_i - T_i f(x_i, \mathbf{a})/v_i}{T_i f(x_i, \mathbf{a})/v_i} \frac{\partial f(x_i, \mathbf{a})}{\partial a_k} \frac{T_i}{v_i} = 0,$$

ami ugyanaz, mint a legkisebb négyzetek módszere, ha

$$w_i = \frac{1}{T_i f(x_i, \mathbf{a})/v_i}. \quad (6.43)$$

Ez látszólag a következő funkcionál deriváltja:

$$Q(\mathbf{a}) = \sum_{i=1}^n w_i \left[\xi_i - \frac{T_i f(x_i, \mathbf{a})}{v_i} \right]^2,$$

ha a súlyok deriváltját elhagyjuk. A (6.43) szerinti súlyozás nem megfelelő, mert a súlyok nem arányosak ξ_i szórásnégyzetének a reciprokával. A (6.42) eloszlásfüggvény alapján meg lehet mutatni, hogy

$$D^2(\xi_i) = \frac{T_i f(x_i, \mathbf{a})}{v_i^3} \approx \frac{\xi_i}{v_i^2}.$$

A helyes egyenletek tehát:

$$G_k(\mathbf{a}) = \sum_{i=1}^n w_i \left[\xi_i - \frac{T_i f(x_i, \mathbf{a})}{v_i} \right] \frac{\partial T_i f(x_i, \mathbf{a})}{v_i \partial a_k} = 0,$$

ahol

$$\frac{\sigma^2}{w_i} = \frac{T_i f(x_i, \mathbf{a})}{v_i^3} + \sigma_{xi}^2 \left[\frac{T_i}{v_i} \frac{\partial f(x_i, \mathbf{a})}{\partial x_i} \right]^2 \approx \frac{\xi_i + \sigma_{xi}^2 \left[\frac{T_i \partial f(x_i, \mathbf{a})}{\partial x_i} \right]^2}{v_i^2}.$$

A holtidő-korrekción nélkül becsült szórásnégyzeteket tehát a holtidő-korrekcións tényező négyzetével kell osztani. Az így kapott becslés nem felel meg szigorúan a maximális valószínűség elvének, de Q szempontjából megfelelő, amin azt értjük, hogy érvényes marad a 6.2. TÉTEL. Érdeemes még megjegyezni, hogy a holtidőre korrigált $\xi'_i = v_i \xi_i$ beütésszám nem tekinthető

Poisson-eloszlásúnak. Szórásnégyzete ugyanis nem egyenlő a várható értékével:

$$D^2(\xi'_i) = v_i^2 D^2(\xi_i) \approx v_i^2 \frac{\xi_i}{v_i^2} = \xi_i \neq \xi'_i.$$

*Bomlási korrekció monitorral

A Dy-huzallal végzett eloszlásmérés esetében az aktivitás lebomlását úgy vesszük korrekcióba, hogy a mérési időt egy külön besugárzott Dy-fólia aktivitásának a mérése révén határozzuk meg. A mérésben tehát két számlálót használunk: a huzal aktivitását az *effektusszámlálóval*, a Dy-fólia aktivitását pedig a *monitorszámlálóval* mérjük. Az utóbbin beállítunk egy K beütésszámot (értéke 10 és 40 ezer között szokott változni), és a huzal kiszemelt pontján addig mérjük a huzal aktivitását, ameddig a monitorszámlálóban össze nem gyűlik pontosan K számú beütés. Az K -adik beütés érkezésének pillanatában az effektusszámláló automatikusan leáll. Jelöljük T -vel azt az időt, amely alatt a monitorszámlálóban K beütés összegyűlik. Arról van tehát szó, hogy az effektusszámlálónak ezt a T mérési idejét a monitorszámláló méri. Mivel a radioaktív bomlás miatt a T időtartam a Dy bomlásának mértékében egyre hosszabb, heurisztikusan azt lehet várni, hogy ezen a módon automatikusan megtörténik a huzal aktivitásának a bomlására vonatkozó korrekció. Ezzel kapcsolatban két kérdést vizsgálunk meg: egyrészt valóban így van-e ez, másrészt hogyan kell az így mért huzalaktivitásokat kiértékelni? Amilyen egyszerűnek tűnik ez a mérés, olyan fáradságos lesz az elméleti tárgyalása.

Az effektusszámlálóban 1 s alatt mérhető beütésszám a $t = 0$ időpillanatban éppen az illesztőfüggvény: $f(x, \mathbf{a})$. Egy $t > 0$ időpillanatban ez az $e^{-\lambda t}$ tényezővel csökken, ahol λ a Dy bomlási állandója. A $(t, t+T)$ intervallumban mért N beütésszám várható értéke:

$$M(N) = \int_t^{t+T} f(x, \mathbf{a}) e^{-\lambda t'} dt' = f(x, \mathbf{a}) e^{-\lambda t} s(T),$$

ahol

$$s(T) = \frac{1 - e^{-\lambda T}}{\lambda}.$$

A továbbiakban bevezetjük az

$$f_0 = f(x, \mathbf{a}) \quad \text{és} \quad f = f_0 e^{-\lambda t}$$

jelöléseket. Ha a monitorfólia aktivitása a $t = 0$ időpillanatban μ_0 , egy $t > 0$ időpillanatban $\mu = \mu_0 e^{-\lambda t}$. T -re a következő közelítő egyenletet írhatjuk fel:

$$\mu \cdot s(T) \approx K,$$

amiből

$$M(N) = f \cdot s(T) \approx \frac{fK}{\mu} = \frac{f_0 K}{\mu_0}.$$

Ez független t -től, tehát a bomláskorrekció tényleg megtörténik. Az alábbiakban ezt pontosan is levezetjük.

Ha a T számlálási idő rögzített, az N beütésszámok a Poisson-eloszlást követik, tehát feltételes eloszlásuk:

$$P(N|T) = \frac{[f \cdot s(T)]^N}{N!} e^{-f \cdot s(T)}. \quad (6.44)$$

A T időpont sűrűségfüggvényét szintén a Poisson-eloszlás alapján írhatjuk fel. Annak a valószínűsége, hogy a K -adik monitorbeütés a $(T, T+dT)$ intervallumban érkezik, két tényező szorzata:

$$\frac{[\mu \cdot s(T)]^{K-1}}{(K-1)!} e^{-\mu \cdot s(T)}$$

annak a valószínűsége, hogy a $[0, T]$ időintervallumban a monitorszámláló $(K-1)$ beütést mérjen, továbbá

$$\mu e^{-\lambda T} dT = \mu s'(T) dT$$

pedig annak a valószínűsége, hogy a $(T, T+dT)$ intervallumban egy további beütés (a K -adik) érkezzon. Ezzel a keresett valószínűség

$$P_K(T) dT = \frac{[\mu \cdot s(T)]^{K-1}}{(K-1)!} e^{-\mu \cdot s(T)} \mu s'(T) dT. \quad (6.45)$$

Így annak a valószínűsége, hogy az effektusszámláló N beütésszámot regisztráljon, mialatt a monitorszámlálóban K beütésszám gyűlik össze:

$$P(N, K) = \int_0^{\infty} P(N|T) \cdot P_K(T) dT. \quad (6.46)$$

Fontos megjegyezni, hogy ezek a képletek (és az alábbiak is) csak akkor érvényesek, amikor mind a holtidő, mind a háttér elhanyagolható.

A (6.46) alatti integrál jó közelítéssel analitikusan is kiszámítható:

$$\begin{aligned} P(N, K) &= \int_0^{\infty} \frac{[f \cdot s(T)]^N}{N!} e^{-f \cdot s(T)} \frac{[\mu \cdot s(T)]^{K-1}}{(K-1)!} e^{-\mu \cdot s(T)} \mu s'(T) dT = \\ &= \int_0^{1/\lambda} \frac{[f \cdot s]^N}{N!} e^{-f \cdot s} \frac{[\mu \cdot s]^{K-1}}{(K-1)!} e^{-\mu \cdot s} \mu ds \end{aligned}$$

K -t általában úgy választjuk meg, hogy a monitorfólia aktivitása csak kissé csökkenjen, mialatt K beütésszám összegyűlik. Így minden esetben $\lambda T \ll 1$, tehát számottevő valószínűséggel csak az $s \ll 1/\lambda$ értékek valósulnak meg, ami azt jelenti, hogy az s szerinti integrálban az integrandus a felső határ közelében elhanyagolhatóan kicsi. Mivel az integrandus itt monoton csökken, az integrált jó közelítéssel kiterjeszthetjük $+\infty$ -ig. Ezzel az integrál analitikusan kiértékelhetővé válik. Elemi számítással kapjuk a

$$\begin{aligned} P(N, K) &\approx \int_0^{\infty} \frac{[f \cdot s]^N}{N!} e^{-f \cdot s} \frac{[\mu \cdot s]^{K-1}}{(K-1)!} e^{-\mu \cdot s} \mu ds = \\ &= \frac{f^N \mu^K}{(f + \mu)^{N+K}} \frac{(N + K - 1)!}{N!(K-1)!} \end{aligned}$$

végeredményt, amely az előbb tárgyalt feltétellel jó közelítés. Jobb oldala még tartalmazza az $e^{-\lambda t}$ tényezőt, hiszen f és μ szerepelnek benne. Nyilvánvaló azonban, hogy lehet vele egyszerűsíteni, amivel a keresett valószínűség⁷

$$P(N, K) = \frac{f_0^N \mu_0^K}{(f_0 + \mu_0)^{N+K}} \frac{(N + K - 1)!}{N!(K-1)!}. \quad (6.47)$$

Nézzük most meg, mit ad e mérés esetében a maximális valószínűség elve. A mérési eredmények együttes valószínűsége így írható:⁸

$$L(\mathbf{N}, \mathbf{a}) = \prod_{i=1}^n P(N_i, K),$$

amely f_0 -on keresztül függ az illetett paraméterektől (\mathbf{a}). Mivel ebben a szorzatban mindegyik tényező azonos alakú, elég az egyiknek a deriváltjait kiszámítani. Egyszerűség kedvéért az i indexet egyelőre elhagyjuk:

$$\frac{\partial \ln P(N)}{\partial a_k} = \frac{\partial \ln P(N)}{\partial f_0} \frac{\partial f_0}{\partial a_k}.$$

(6.47)-ből levezethetjük, hogy

$$\frac{\partial \ln P(N)}{\partial f_0} = \frac{N}{f_0} - \frac{N + K}{f_0 + \mu_0} = \frac{\mu_0}{f_0(f_0 + \mu_0)} \left(N - \frac{Kf_0}{\mu_0} \right),$$

vagyis

⁷ Nem triviális, de az előbbi integrál alapján be lehet látni, hogy ennek $N=0$ -tól végtelenig vett összege 1.

⁸ A jegyzet más részeiben a mért értékeket ξ_i -vel jelöljük. Itt – kivételesen – az N_i jelölést alkalmazzuk ugyanerre.

$$\begin{aligned}\frac{\partial \ln P(N)}{\partial a_k} &= \frac{\mu_0}{f_0(f_0 + \mu_0)} \left(N - \frac{Kf_0}{\mu_0} \right) \frac{\partial f_0}{\partial a_k} = \\ &= w \frac{K}{\mu_0} \left(N - \frac{Kf_0}{\mu_0} \right) \frac{\partial f_0}{\partial a_k},\end{aligned}$$

ahol

$$w = \frac{1}{\frac{Kf_0}{\mu_0} \left(1 + \frac{f_0}{\mu_0} \right)}. \quad (6.48)$$

A normálegyenletek tehát így írhatók ($k = 1, 2, \dots, m$):

$$\sum_{i=1}^n w_i \left(N_i - \frac{Kf(x_i, \mathbf{a})}{\mu_0} \right) \frac{K}{\mu_0} \frac{\partial f(x_i, \mathbf{a})}{\partial a_k} = 0. \quad (6.49)$$

Mivel μ_0 -at nem ismerjük, a K/μ_0 tényezőt beolvasztjuk az illesztőfüggvénybe, vagy – ha ez nem lehetséges – külön illesztendő paraméternek tekintjük.

Ahhoz, hogy eredményeinket értelmezni tudjuk, meg kell adnunk a (6.49) alatti szumma zárójelében szereplő mennyiség, valamint a w_i súly jelentését. Megmutatjuk, hogy az előbbi N_i várható értéke, az utóbbi pedig N_i szórásnégyzetének a reciproka. A (6.47) szerinti valószínűség esetében N várható értéke a következőképpen írható:

$$M(N) = \sum_{N=1}^{\infty} N \cdot P(N, K) = \frac{Kf_0}{\mu_0},$$

amint némi számítással levezethetjük. Ez nem más, mint a (6.49) alatti zárójelben szereplő kifejezés. Egyébként visszakaptuk ezzel a fentiekben heurisztikusan levezetett eredményt. Hasonló módon kapjuk N szórásnégyzetét:

$$D^2(N) = \frac{f_0 K}{\mu_0} \left(1 + \frac{f_0}{\mu_0} \right) = M(N) \left(1 + \frac{M(N)}{K} \right) \approx N \left(1 + \frac{N}{K} \right), \quad (6.50)$$

ami nem más, mint a (6.48) szerinti w reciproka. Végeredményben tehát ismét azt kaptuk, hogy a normálegyenletek ugyanolyan alakúak, mint a Gauss-eloszlás esetében, ha a súlyokat megfelelően választjuk.

(6.50) szerint tehát a monitorral mért T idő alatt kapott beütésszám szórása a Poisson-eloszlás szóráshoz képest nagyobb. A dolog mélyebb megértése érdekében belátjuk, hogy ez annak a következménye, hogy a mérési idő most valószínűségi változó. A (6.45) egyenlet alapján levezethetjük T várható értékét:

$$M(T) = \int_0^{\infty} \frac{[\mu \cdot s(T)]^{K-1}}{(K-1)!} e^{-\mu \cdot s(T)} \mu s'(T) T dT =$$

$$= \int_0^{1/\lambda} \frac{[\mu \cdot s]^{K-1}}{(K-1)!} e^{-\mu \cdot s} \mu T(s) ds.$$

Az itt szereplő $T(s)$ függvény az $s(T)$ függvény inverze

$$T(s) = -\frac{\ln(1-\lambda s)}{\lambda} \approx s,$$

amivel

$$M(T) \approx \int_0^{\infty} \frac{[\mu \cdot s]^{K-1}}{(K-1)!} e^{-\mu \cdot s} \mu s ds = \frac{K}{\mu} = \frac{K}{\mu_0} e^{\lambda \mu}.$$

Hasonlóan kapjuk:

$$D^2(T) = \frac{K}{\mu^2}.$$

N feltételes várható értéke a (6.44) egyenlet alapján

$$M(N|T) = f \cdot s(T) \approx f \cdot T,$$

tehát N -nek a T változásából eredő szórásnégyzete

$$D_T^2(N) \approx f^2 \cdot D^2(T) = \frac{f^2 K}{\mu^2} = \frac{M(N)^2}{K} \approx \frac{N^2}{K}.$$

Ez éppen N (6.50) alatt kapott teljes szórásnégyzetének második tagja.

*Binomiális eloszlás

A binomiális eloszlást (3.34)-ben írtuk fel. Tegyük fel, hogy ξ_i ilyen eloszlású, ahol a p valószínűség függ az illetőfüggvényről: $p[f(x_i, \mathbf{a})]$. Erre a következő példát idézzük. Egy időben gyorsan változó függvényt *időanalizátor* szoktunk megmérni.⁹ Ez olyan berendezés, amely az $[(i-1)\theta, i\theta]$ időintervallumban megméri az $f(x_i, \mathbf{a})$ mennyiséget. Ezt az intervallumot az időanalizátor i -edik csatornájának nevezzük. Ebben a függvényben az x változó az idő, amelynek értékei: $x_i = i\theta$. Amikor a berendezésnek holtideje van, gyorsan változó illesztőfüggvény esetében nagyon bonyolult lenne a megfelelő korrekciós képletet megadni. Ezért ilyen esetekben az analizátort úgy működtetik, hogy nem az egyes csatornában regisztrált jeleket számlálják meg, hanem 1-et van 0-t regisztrálnak attól függően, hogy érkezett jel vagy sem. Annak a valószínűsége, hogy az i -edik csatornában ne érkezzen jel: $\exp\{-f(x_i, \mathbf{a})\}$, annak a valószínűsége pedig, hogy érkezzen jel

$$p[f(x_i, \mathbf{a})] = 1 - \exp\{-f(x_i, \mathbf{a})\}.$$

⁹ Az időanalizátort sokan *multiscalernek* nevezik.

Ha az analízátor N -szer futott végig minden csatornán, akkor annak a valószínűségét, hogy az i -edik csatornában ξ_i -t regisztrál, a binomiális eloszlás adja meg. Eszerint a valószínűség-függvényt az

$$L(\vec{\xi}, \mathbf{a}) = \prod_{i=1}^n \binom{N}{\xi_i} p^{\xi_i} (1-p)^{N-\xi_i}.$$

A normálegyenletek a

$$\frac{\partial \ln L(\vec{\xi}, \mathbf{a})}{\partial a_k} = \sum_{i=1}^n \left[\left(\frac{\xi_i}{p} - \frac{N - \xi_i}{1-p} \right) \frac{\partial p}{\partial a_k} \right] = 0$$

alakban adódnak ($k = 1, 2, \dots, m$). Ha itt N -nel bővítünk, a következő alakot kapjuk:

$$\sum_{i=1}^n \frac{1}{Np(1-p)} \left[(\xi_i - Np) \frac{\partial(Np)}{\partial a_k} \right] = 0.$$

Az (3.34) képletekből látható, hogy $Np = M(\xi_i)$ és $Np(1-p) = D^2(\xi_i)$, tehát az itt kapott normálegyenletek megfelelnek (6.5)-nek. Ebben az esetben a tulajdonképpen illesztőfüggvény

$$f_1(x_i, \mathbf{a}) = Np[f(x_i, \mathbf{a})].$$

Ezzel és az

$$\frac{1}{w_i} = Np[f(x_i, \mathbf{a})](1 - p[f(x_i, \mathbf{a})])$$

súlyozással összes korábbi képletünk érvényben marad.

*Véges szabadsági fokkal becsült szórások

Több helyen hangsúlyozzuk, hogy a w_i súlyoknak a mért mennyiségek szórásnégyzetével fordítva arányosnak kell lenniük. Gyakran előfordul, hogy másodlagos illesztést kell végrehajtanunk, vagyis a ξ_i mennyiségek nem valószínűségi mért adatok, hanem korábbi paraméterbecslések eredményei. Ilyenkor ezek szórásnégyzetét mindig csak véges szabadsági fokok mellett tudjuk becsülni. Az alábbiakban megnézzük, van-e ennek a körülménynek hatása az illesztésben alkalmazandó képletekre.

A véges szabadsági fok azt jelenti, hogy a

$$t_i = \frac{\xi_i - f(x_i, \mathbf{a})}{\sigma_i}$$

tört n_i szabadsági fokú Student-tört. (3.40a) szerint ekkor a valószínűség-függvényt a következő alakban írhatjuk fel:

$$L(\bar{\xi}, \mathbf{a}) = \prod_{i=1}^n \frac{1}{\sqrt{n_i \pi}} \frac{\Gamma\left(\frac{n_i+1}{2}\right)}{\Gamma\left(\frac{n_i}{2}\right)} \left(1 + \frac{t_i^2}{n_i}\right)^{-\frac{n_i+1}{2}}.$$

Némi számolás után a következő normálegyenleteket kapjuk:

$$\sum_{i=1}^n \frac{n_i+1}{n_i} \cdot \frac{\xi_i - f(x_i, \mathbf{a})}{\sigma_i^2 + \frac{(\xi_i - f(x_i, \mathbf{a}))^2}{n_i}} \frac{\partial f(x_i, \mathbf{a})}{\partial a_k} = 0,$$

amelyek akkor felelnek meg (6.5)-nek, ha

$$w_i = \frac{n_i+1}{n_i} \cdot \frac{1}{\sigma_i^2 + \frac{(\xi_i - f(x_i, \mathbf{a}))^2}{n_i}}.$$

A nevezőben levő különbség négyzetének a várható értéke éppen σ_i^2 , vagyis a súlyokat a

$$w_i = \frac{n_i+1}{n_i} \cdot \frac{1}{\sigma_i^2 + \frac{\sigma_i^2}{n_i}} = \frac{1}{\sigma_i^2}$$

képlet szerint kell megválasztanunk. Végeredményben tehát azt kaptuk, hogy a véges szabadsági fokokkal becsült szórásokat – másodlagos illesztésben – ugyanúgy tekinthetjük, mintha pontosan ismert szórások lennének. Mivel a súlyozott átlagolást is lehet illesztésként megfogalmazni (vö. 5.2. alfejezet), ezek a súlyok minden további nélkül használhatók súlyozásra.

***6.8. Az illesztés geometriai szemléltetése**

A függvényillesztést a következő módon tudjuk geometriailag is szemléltetni. A közvetlenül mért $\bar{\xi}$ vektornak a várható értékétől való eltérését két részre bonthatjuk:

$$\bar{\xi} - \mathbf{y} = (\bar{\xi} - \tilde{\mathbf{y}}) + (\tilde{\mathbf{y}} - \mathbf{y}),$$

ahol a használt jelöléseket a 6.3. alfejezetben definiáltuk. A 6.3. TÉTEL bizonyításából következik, hogy az itt szereplő két különbségvektor kovarianciája eltűnik. Gauss-eloszlás esetében ez függetlenséget is jelent. Az alábbiakban ezt fogjuk feltételezni.

Az első vektor hosszáról a 6.2. TÉTEL szerint tudjuk, hogy

$$(\bar{\xi} - \tilde{y})^T \mathbf{W}(\bar{\xi} - \tilde{y}) = Q_{\min} = \sigma^2 \chi_{n-m}^2. \quad (6.51a)$$

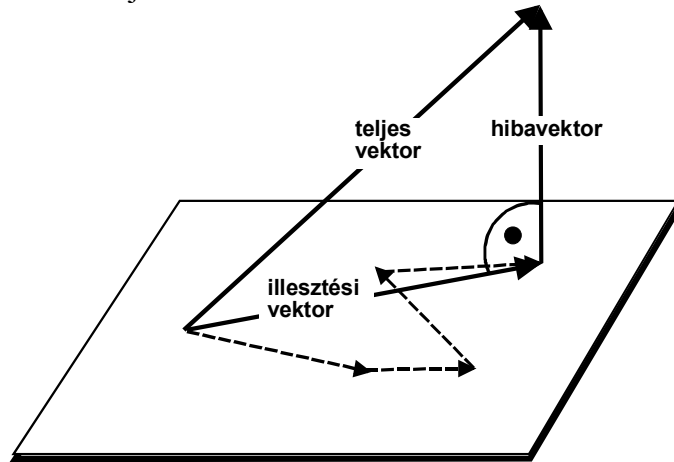
A második vektort (6.40) szerint

$$\tilde{y} - \mathbf{y} = \mathbf{F}\Delta\mathbf{a}, \quad (6.52)$$

ahol $\Delta\mathbf{a}$ -t (6.28b)-ben írtuk fel. Ennek a hosszáról a 6.2. TÉTEL bizonyításához hasonló megfontolásokkal be lehet látni, hogy

$$\begin{aligned} q &= (\tilde{y} - \mathbf{y})^T \mathbf{W}(\tilde{y} - \mathbf{y}) = \Delta\mathbf{a}^T \mathbf{F}^T \mathbf{W} \mathbf{F} \Delta\mathbf{a} = \Delta\mathbf{a}^T \mathbf{R} \Delta\mathbf{a} = \\ &= \Delta\bar{\xi}^T \mathbf{F} \mathbf{W} \mathbf{R}^{-1} \mathbf{R} \mathbf{R}^{-1} \mathbf{F}^T \mathbf{W} \Delta\bar{\xi} = \Delta\bar{\xi}^T \mathbf{F} \mathbf{W} \mathbf{R}^{-1} \mathbf{F}^T \mathbf{W} \Delta\bar{\xi} = \sigma^2 \chi_m^2. \end{aligned} \quad (6.51b)$$

(6.52) szerint az $\tilde{y} - \mathbf{y}$ illesztési vektor az n -dimenziós térnek azt az m -dimenziós alterét tölti ki, amelyet az \mathbf{F} mátrix m darab oszlopvektora kifeszít. A teljes $\bar{\xi} - \mathbf{y}$ eltérésvektort úgy kapjuk, hogy ehhez hozzáadjuk a $\bar{\xi} - \tilde{y}$ vektort, amely megadja a közvetlenül mért $\bar{\xi}$ vektor és az illesztésből kapott \tilde{y} vektor eltérését, ezért ezt az illesztés hibavektorának nevezzük. Mivel korrelálatlan a $\tilde{y} - \mathbf{y}$ vektorral, a hibavektort az utóbbi által kifeszített alterre merőlegesen képzelhetjük el. Így kapjuk a 6.1. ábrát, amelyen az m -dimenziós alteret egy síknak mutatjuk be.



6.1. ábra. Függvényillesztés geometriai szemléltetése

A hibavektor nagyságát jellemzi Q_{\min} , amelyet az illesztésből meg is kapunk. Az illesztési vektort azonban nem tudjuk kiszámítani, hiszen nem ismerjük a $\Delta\bar{\xi}$ vektort. Becslést azonban adhatunk rá. A (6.51) képletek értelmében az

$$F_{m,n-m} = \frac{q/m}{Q_{\min}/(n-m)} = \frac{\chi_m^2/m}{\chi_{n-m}^2/(n-m)}$$

egy Fisher-hányados [vö. (3.41)], amelyre a 2. függelék táblázatai alapján kvantilist lehet találni. Választunk egy ε konfidenciaszintet, és megkeressük azt a γ_F értéket, amelyre

$$P\{F_{m,n-m} < \gamma_F\} = 1 - \varepsilon.$$

Ennek alapján $(1 - \varepsilon)$ valószínűséggel fennáll a

$$q < \frac{m}{n-m} Q_{\min} \gamma_F$$

egyenlőtlenség.