

7. MÉRÉSEK KIÉRTÉKELÉSE FÜGGVÉNYILLESZTÉSSEL

Ebben a fejezetben konkrét mérések kiértékelését mutatjuk be, köztük azokat is, amelyeket az 1. fejezetben leírtunk. A kiértékelés módszerét tulajdonképpen levezethetjük a 6. fejezetben kifejtett általános elméletből. Az egyes mérések esetében így elég lenne az illesztőfüggvényt felírni, és a w_i súlyokat megválasztani. Tekintve azonban, hogy ez a jegyzet kezdők számára is készült, akik a 6. fejezetet nem olvasták, néhány egyszerűbb esetben attól függetlenül adjuk meg a teljes megoldást.

7.1. Lineáris regresszió

Mivel a laborgyakorlatok keretében legtöbbször lineáris regressziót kell csinálnunk, illetve méréseinket erre vezetjük vissza, először ennek a részleteivel foglalkozunk.

Az illesztés végrehajtása

Akkor beszélünk *lineáris regresszióról*, amikor

$$M(\xi_i) = a_1 + a_2 x_i, \quad i = 1, 2, \dots, n. \quad (7.1)$$

A legkisebb négyzetek módszere szerint a keresett paraméterek függvényében meg kell keresnünk a

$$Q = \sum_{i=1}^n w_i (\xi_i - a_1 - a_2 x_i)^2 \quad (7.2)$$

funkcionál minimumát. Ez a következő két egyenletből álló egyenletrendszer megoldását igényli:

$$G_1 = -\frac{1}{2} \frac{\partial Q}{\partial a_1} = \sum_{i=1}^n w_i (\xi_i - a_1 - a_2 x_i) = 0,$$
$$G_2 = -\frac{1}{2} \frac{\partial Q}{\partial a_2} = \sum_{i=1}^n w_i x_i (\xi_i - a_1 - a_2 x_i) = 0.$$

Ez a_1 -re és a_2 -re lineáris egyenletrendszer, amelyet a következő vektoros alakra hozhatunk:

$$\mathbf{Ra} = \mathbf{g}, \quad (7.3)$$

ahol

$$R_{11} = \sum_{i=1}^n w_i, \quad R_{12} = R_{21} = \sum_{i=1}^n w_i x_i, \quad R_{22} = \sum_{i=1}^n w_i x_i^2, \quad (7.4a)$$

továbbá

$$g_1 = \sum_{i=1}^n w_i \xi_i, \quad g_2 = \sum_{i=1}^n w_i \xi_i x_i. \quad (7.4b)$$

A w_i súlyokat a (6.2) képlet szerint kell megválasztani. A (7.3) egyenletrendszer az \mathbf{R} mátrix invertálásával oldjuk meg:

$$\tilde{\mathbf{a}} = \mathbf{R}^{-1} \mathbf{g}. \quad (7.5)$$

A keresett paraméterek becslt értékeit a paraméter jele fölé tett spanyol ékezettel ($\tilde{\cdot}$) jelöljük. A (7.3) egyenletrendszer közvetlenül meg tudjuk oldani. Az \mathbf{R} mátrix inverze

$$\mathbf{R}^{-1} = \frac{1}{R_{11}R_{22} - R_{12}^2} \begin{bmatrix} R_{22} & -R_{12} \\ -R_{12} & R_{11} \end{bmatrix}. \quad (7.6)$$

Megjegyezzük, hogy a nevező az \mathbf{R} mátrix determinánsa. (7.5) alapján adódnak a becslt paraméterek:

$$\tilde{a}_1 = \frac{g_1 R_{22} - g_2 R_{12}}{R_{11} R_{22} - R_{12}^2} \quad \text{és} \quad \tilde{a}_2 = \frac{g_2 R_{11} - g_1 R_{12}}{R_{11} R_{22} - R_{12}^2}. \quad (7.7)$$

A 6. fejezetben általában tárgyaljuk ezek statisztikai tulajdonságait. A (6.14) képlet szerint szórásnégyzetüket a

$$D^2(\tilde{a}_1) = \sigma^2 \frac{R_{22}}{R_{11} R_{22} - R_{12}^2} \quad \text{és} \quad D^2(\tilde{a}_2) = \sigma^2 \frac{R_{11}}{R_{11} R_{22} - R_{12}^2} \quad (7.8)$$

képletek adják meg. Kovarianciájuk pedig

$$\text{cov}(\tilde{a}_1, \tilde{a}_2) = \sigma^2 \frac{-R_{12}}{R_{11} R_{22} - R_{12}^2}. \quad (7.9)$$

Két utóbbi képletünkből kapjuk a becslt paraméterek korrelációs együtthatóját:

$$\rho_{12} = \frac{-R_{12}}{\sqrt{R_{11} R_{22}}}. \quad (7.10)$$

A σ^2 együtthatót

$$Q_{\min} = \sum_{i=1}^n w_i (\xi_i - \tilde{a}_1 - \tilde{a}_2 x_i)^2$$

segítségével becsüljük, ami úgy adódik, hogy a becsült paramétereket (7.2)-be helyettesítjük. A 6.2. TÉTEL szerint ez $(n-2)$ szabadsági fokú χ^2 -változóval arányos, és σ^2 becslésére az

$$s^2 = \frac{Q_{\min}}{n-2} \quad (7.11)$$

empirikus szórásnégyzetet használjuk [vö. (5.7)]. Ezt kell a (7.8) és (7.9) képletekbe helyettesíteni.

Gyakorlásképpen javasoljuk, hogy az Olvasó mutassa meg, hogy a (7.7) alatti becslések torzítatlanok.¹ Befejezésül megadjuk a keresett paraméterekre vonatkozó konfidenciaintervallumot:

$$\tilde{a}_1 - \gamma D(\tilde{a}_1) \leq a_1 \leq \tilde{a}_1 + \gamma D(\tilde{a}_1) \quad (7.12a)$$

és

$$\tilde{a}_2 - \gamma D(\tilde{a}_2) \leq a_2 \leq \tilde{a}_2 + \gamma D(\tilde{a}_2), \quad (7.12b)$$

ahol γ az $(n-2)$ szabadsági fokú Student-eloszlás kvantilise, a szórásokat pedig (7.8) és (7.11) szerint számítjuk ki.

A (7.1) és (7.2) szerinti lineáris regresszió természetes általánosítása a polinomillesztés, amit a 7.2. alfejezetben tárgyalunk.

Galton megfogalmazása

Galton az utódok és a szülők magassága (ξ_1 , illetve ξ_2) közötti összefüggést kereste, és azt találta, hogy közöttük pozitív korreláció van. Vizsgáljuk meg ezt most matematikailag. Kovarianciamátrixuk

$$\mathbf{B} = \begin{bmatrix} \sigma_1^2 & \sigma_1 \sigma_2 \rho \\ \sigma_1 \sigma_2 \rho & \sigma_2^2 \end{bmatrix},$$

aminek az inverze

$$\mathbf{B}^{-1} = \frac{1}{1-\rho^2} \begin{bmatrix} \frac{1}{\sigma_1^2} & -\frac{\rho}{\sigma_1 \sigma_2} \\ -\frac{\rho}{\sigma_1 \sigma_2} & \frac{1}{\sigma_2^2} \end{bmatrix}.$$

A változók várható értéke

$$M(\xi_1) = b_1, \quad M(\xi_2) = b_2.$$

Ezekkel a jelölésekkel a két változó együttes eloszlásfüggvénye (3.37) alapján

¹ Útmutatás: írjuk fel először g_1 és g_2 várható értékét, és ezt helyettesítsük (7.7)-be. Például

$$M(g_1) = \sum_{i=1}^n w_i (a_1 + a_2 x_i).$$

$$f(z_1, z_2) = \frac{1}{2\pi\sigma_1\sigma_2\sqrt{1-\rho^2}} \exp\left\{-\frac{q}{2}\right\},$$

ahol

$$q = \frac{1}{1-\rho^2} \left[\frac{(z_1 - b_1)^2}{\sigma_1^2} + \frac{(z_2 - b_2)^2}{\sigma_2^2} - \frac{2\rho(z_1 - b_1)(z_2 - b_2)}{\sigma_1\sigma_2} \right].$$

Közvetlenül felírhatjuk ξ_2 perem-sűrűségfüggvényét:

$$f(z_2) = \frac{1}{\sigma_2\sqrt{2\pi}} \exp\left\{-\frac{(z_2 - b_2)^2}{2\sigma_2^2}\right\}.$$

E két sűrűségfüggvény hányadosa ξ_1 feltételes sűrűségfüggvénye

$$f(z_1|z_2) = \frac{1}{\sigma_1\sqrt{2\pi}\sqrt{1-\rho^2}} \exp\left\{-\frac{q'}{2}\right\},$$

[vö. (3.23)], ahol

$$q' = \frac{1}{1-\rho^2} \left[\frac{z_1 - b_1}{\sigma_1} - \frac{\rho(z_2 - b_2)}{\sigma_2} \right]^2,$$

amint ez egyszerűen belátható. A feltételes sűrűségfüggvényt át lehet írni az

$$f(z_1|z_2) = \frac{1}{\sigma_1'\sqrt{2\pi}} \exp\left\{-\frac{(z_1 - b_1')^2}{2\sigma_1'^2}\right\} \quad (7.13)$$

alakba, ahol

$$b_1' = M(\xi_1|\xi_2) = b_1 + \frac{\rho\sigma_1}{\sigma_2}(\xi_2 - b_2) \quad (7.13a)$$

ξ_1 feltételes várható értéke, továbbá

$$\sigma_1'^2 = D^2(\xi_1|\xi_2) = \sigma_1^2(1-\rho^2) \quad (7.13b)$$

ξ_1 feltételes szórásnégyzete.

Galton esetében mindkét valószínűségi változó ugyanabból az eloszlásból vett minta, tehát $b_1 = b_2 = b$ és $\sigma_1 = \sigma_2$, vagyis az utód magasságának a várható értéke

$$M(\xi_1|\xi_2) = b + \rho(\xi_2 - b)$$

feltéve, hogy a szülő magassága ξ_2 . Erről a képletről leolvasható Galton következtetése. Ha $\xi_2 > b$ (vagyis a szülő az átlagnál magasabb), várhatóan az utód

magassága is nagyobb lesz az átlagnál. Mivel a ρ korrelációs együttható 1-nél kisebb, az utód magassága kevesebbel múlja felül az átlagot, mint a szülőé. Ezt a jelenséget nevezte el "visszatérésnek", latin eredetű szóval *regresszió*nak. Analóg következtetéseket lehet levonni $\xi_2 < b$ esetén is.

Az általánosságra visszatérve tegyük fel, hogy n számú független megfigyelést végeztünk, és a (ξ_{i1}, ξ_{i2}) értékpárokat ($i = 1, 2, \dots, n$) kaptuk eredményül. Az alábbiakban azt keressük, hogyan lehet együttes eloszlásuk paramétereit becsülni. Mivel azonos pontosságú megfigyelésekről van szó, alkalmazhatjuk a (5.4) és (5.7) képleteket:

$$\tilde{b}_1 = \bar{\xi}_1 = \frac{\sum_{i=1}^n \xi_{i1}}{n}, \quad s_1^2 = \frac{\sum_{i=1}^n (\xi_{i1} - \bar{\xi}_1)^2}{n-1}$$

és

$$\tilde{b}_2 = \bar{\xi}_2 = \frac{\sum_{i=1}^n \xi_{i2}}{n}, \quad s_2^2 = \frac{\sum_{i=1}^n (\xi_{i2} - \bar{\xi}_2)^2}{n-1}.$$

A ρ korrelációs együttható meghatározása céljából a maximális valószínűség elvét alkalmazzuk. A valószínűség-függvényt a (7.13) képletek segítségével írjuk fel. Ehhez bevezetjük a vektori jelölésmódot. A ξ_{i1} megfigyeléseket a $\bar{\xi}_1$, a ξ_{i2} megfigyeléseket pedig a $\bar{\xi}_2$ vektor komponenseinek tekintjük. (7.13) alapján az előbbi vektornak az utóbbira vonatkozó feltételes sűrűségfüggvénye

$$f(\bar{\xi}_1 | \bar{\xi}_2) = \frac{1}{[2\pi(1-\rho^2)\sigma_1^2]^{n/2}} \exp\left\{-\frac{Q^2}{2(1-\rho^2)}\right\},$$

ahol

$$Q = \sum_{i=1}^n \left[\xi_{i1} - b_1 - \frac{\rho\sigma_1}{\sigma_2} (\xi_{i2} - b_2) \right]^2.$$

A maximális valószínűség elvének közvetlen alkalmazhatósága kedvéért rögtön behelyettesítettük a valószínűségi változók megfigyelt értékeit. A keresett paraméterek becsléséhez meg kell keresnünk Q minimumát. Ha bevezetjük az

$$a_1 = b_1 - \frac{\rho\sigma_1}{\sigma_2} b_2, \quad a_2 = \frac{\rho\sigma_1}{\sigma_2}$$

jelöléseket, Q -t (7.2) szerinti alakra hozhatjuk:

$$Q = \sum_{i=1}^n (\xi_{i1} - a_1 - a_2 \xi_{i2})^2.$$

Látható, hogy most $w_i \equiv 1$, x_i szerepét pedig ξ_{i2} játssza. A (7.1) alakú illesztőfüggvénnyel való illesztést eredetileg ezért nevezték el lineáris regresszióknak. A (7.4) egyenletek alapján ekkor tehát

$$R_{11} = n, \quad R_{12} = R_{21} = \sum_{i=1}^n \xi_{i2} = n\bar{\xi}_2, \quad R_{22} = \sum_{i=1}^n \xi_{i2}^2 = n\bar{\xi}_2^2,$$

$$g_1 = \sum_{i=1}^n \xi_{i1} = n\bar{\xi}_1, \quad g_2 = \sum_{i=1}^n \xi_{i1}\xi_{i2} = n\bar{\xi}_1\bar{\xi}_2.$$

Némi számolással beláthatjuk, hogy

$$R_{11}R_{22} - R_{12}^2 = n^2\left(\bar{\xi}_2^2 - \bar{\xi}_2^2\right) = n(n-1)s_2^2.$$

(7.7) felhasználásával és hasonló számolással kapjuk, hogy

$$\tilde{a}_2 = \frac{n(\bar{\xi}_1\bar{\xi}_2 - \bar{\xi}_1\bar{\xi}_2)}{(n-1)s_2^2} = \frac{\sum_{i=1}^n (\xi_{i1} - \bar{\xi}_1)(\xi_{i2} - \bar{\xi}_2)}{(n-1)s_2^2},$$

amivel

$$\begin{aligned} \tilde{\rho} &= \frac{s_2\tilde{a}_2}{s_1} = \frac{\sum_{i=1}^n (\xi_{i1} - \bar{\xi}_1)(\xi_{i2} - \bar{\xi}_2)}{(n-1)s_1s_2} = \\ &= \frac{\sum_{i=1}^n (\xi_{i1} - \bar{\xi}_1)(\xi_{i2} - \bar{\xi}_2)}{\sqrt{\sum_{i=1}^n (\xi_{i1} - \bar{\xi}_1)^2 \times \sum_{i=1}^n (\xi_{i2} - \bar{\xi}_2)^2}}. \end{aligned} \quad (7.14)$$

Vegyük észre, hogy az itt szereplő összeg használható ξ_1 és ξ_2 kovarianciájának a becslésére:

$$\text{cov}(\xi_1, \xi_2) = \frac{\sum_{i=1}^n (\xi_{i1} - \bar{\xi}_1)(\xi_{i2} - \bar{\xi}_2)}{(n-1)}. \quad (7.15)$$

Gyakran felmerül az a kérdés, hogy a megfigyelt valószínűségi változók korreláltak-e sem. Ennek eldöntésére szükségünk van a ρ együtthatóra vonatkozó konfidenciaintervallumra. Amikor x_i nem valószínűségi változó, ez nem jelent problémát, hiszen a (7.12b)-ben felírt konfidenciaintervallum választ ad a kérdésre: ha ez tartalmazza a nullát, akkor a_2 -t (az adott konfidenciaszinten) 0-nak vehetjük. A (7.14) szerinti korrelációs együttható esetében azonban nem ilyen egyszerű a kérdés, ugyanis $\tilde{\rho}$ sűrűségfüggvénye bonyolult az általános esetben. Reimann József könyve [1] idézi a következő tételt: amikor $\rho = 0$, a

$$t = \sqrt{n-2} \frac{\tilde{\rho}}{\sqrt{1-\tilde{\rho}^2}}$$

mennyiség Student-eloszlású valószínűségi változó $(n-2)$ szabadsági fokkal. Így tehát a korrelációt akkor tekinthetjük zérusnak, amikor

$$\left| \sqrt{n-2} \frac{\tilde{\rho}}{\sqrt{1-\tilde{\rho}^2}} \right| < \gamma, \quad (7.16)$$

ahol γ az $(n-2)$ szabadsági fokú Student-eloszlás kvantilise.

Az 1.3. ábrán mutatott adatok esetében a következő eredmények jönnek ki a lineáris regresszióból:

$$\tilde{\rho} = 0,5234; \quad t = 6,081; \quad n = 100.$$

A 2. függelék táblázatai szerint a kvantilis értéke

$$\gamma = \begin{cases} 1,985 & \varepsilon = 0,05 \\ 2,627 & \varepsilon = 0,01 \end{cases}$$

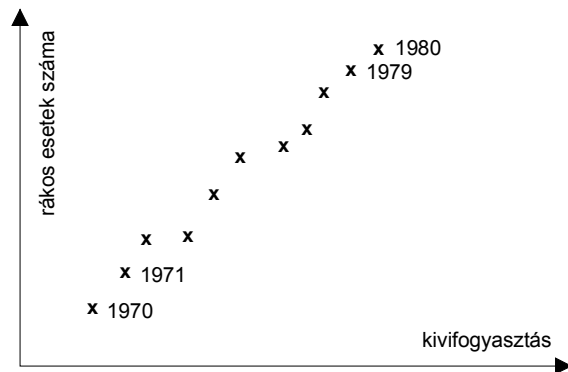
vagyis a korreláció mind 95%, mind 99% konfidenciaszinten szignifikáns.

A lineáris regresszió csapdái

A lineáris regresszió hasznos segédeszköz különböző mennyiségek közötti kapcsolatok felismerésére. Fölrajzoljuk az egyik változót a másik függvényében, és kapcsolatot vélünk felfedezni, ha a pontok emelkedő vagy csökkenő tendenciát mutatnak, vagy – ha előnyben részesítjük a számszerű vizsgálatot – a (7.14) képlettel becsüljük a korrelációs együtthatót, és a két mennyiség között kapcsolatot látunk, ha ez szignifikánsan különbözik zérustól. Ez a megközelítés így önmagában veszélyes, mert számos csapdát rejt magában. A felismert összefüggés látszólagos lehet, ha az analízis mögött nem állnak elméleti megfontolások.

Ok és okozat

Saville és Wood könyvéből [1] vettük az alábbi példát. A 7.1. ábra az Egyesült Államokban megfigyelt rákos esetek számát mutatja a kivifogyasztás függvényében. Mivel 1970 és 1980 között mindkét mennyiség növekedett, ezek évente megfigyelt értékei *korreláltak*. Jóllehet ez matematikai bizonyosság, mégsem állíthatjuk, hogy a rákos esetek számának a növekedését az *okozta*, hogy az emberek több kivit ettek. A ténylegesen talált (és statisztikailag bizonyított) korrelációt csak akkor szabad *ok-okozati* kapcsolatnak tekinteni, ha erre *elméleti indok* van.



7.1. ábra. Kapcsolat az Egyesült Államokban megfigyelt rákos esetek száma és a kivifogyasztás között

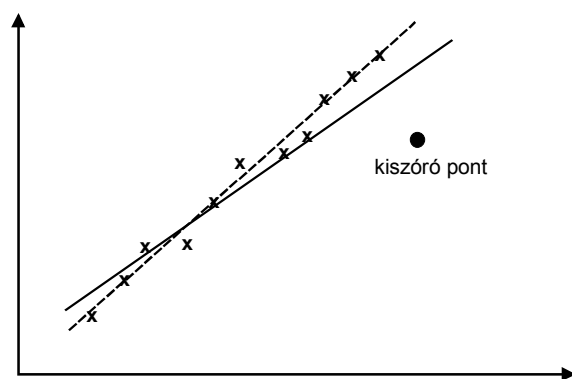
Hasonló példákat lehet az élet legkülönbözőbb területén találni. Például határozottan pozitív korreláció van a Duna vízállása és a BME területén tartózkodó hallgatók száma között. Nyilván épeszű ember nem tételez fel ezek között okozati kapcsolatot. A matematikai statisztika, vagy inkább az azt rosszul alkalmazó áltudomány iránt bizalmatlan emberek gyakran köszörülik szellemességüket az ilyen korrelációkon. Akkor mire vezethetők vissza ezek a látszólagos összefüggések? A válasz egyszerű. Az ilyen példákban általában lehet találni egy közvetítő mennyiséget, ami legtöbbször az idő. Mikor magas ugyanis a Duna vízszintje? Koratavasszal és késő ősszel. Éppen ezek az időszakok előzik meg a vizsgaidőszakokat, amikor a hallgatók a legszorgalmasabban járnak az egyetemre. Hasonlóan az idő a közvetítő a 7.1. ábrán mutatott példában is.

Az extrapoláció veszélyei

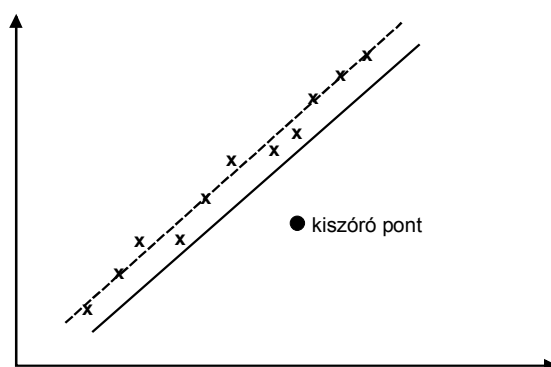
Nem csak a lineáris regresszióban, hanem – általánosabban – a polinomillesztésben (vö. 7.2. alfejezet) is nagyon veszélyes az illesztésben kapott függvényt a vizsgált valószínűségi változók mérési tartományán túl extrapolálni. Súlyos tévedések forrása az ilyesmi. A probléma hangsúlyozottan főleg a polinomillesztésnél merül fel, ugyanis többnyire akkor fordulunk ehhez az eszközhöz, amikor semmi más ötletünk nincs az illesztőfüggvényre vonatkozóan.

Kiszóró pontok

Ha a kiértékelt adathalmaz tartalmaz kiszóró pontokat, akkor a regressziós egyenes teljesen hibás lehet. Erre mutatnak példát a 7.2a. és 7.2b. ábrák, amelyeket a 7.1. ábrából kiindulva szerkesztettünk. Láthatóan a kiszóró pont elhúzza maga felé a regressziós egyenest. A torzítás módja a kiszóró pont elhelyezkedésétől függ.



7.2a. ábra. Aszimmetrikusan elhelyezkedő kiszóró pont



7.2b. ábra. Központosan elhelyezkedő kiszóró pont

A kiszóró pontok felismerésével a 8. fejezetben foglalkozunk részletesen. Természetesen nem csak az okoz problémát, ha az adatok között kiszóró pont van. Elképzelhető az is, hogy a két vizsgált mennyiség között nem lineáris, hanem másfajta a kapcsolat. Ilyenkor – jobb híján – egy legalább másodfokú polinommal célszerű próbálkozni.

A grafikus ábrázolás haszna

A fentiekben vázolt problémák felismeréséhez nagyon hasznos a vizsgált adatokat grafikusán is ábrázolni. Erre példaként a 7.1. táblázatban négy adatsor található, amelyet F. J. Anscombe ötlete² alapján konstruáltunk. Az adatokat a 7.3a.–7.3d. ábrák mutatják. Mindegyik illesztésben azonos nemcsak a paraméterek

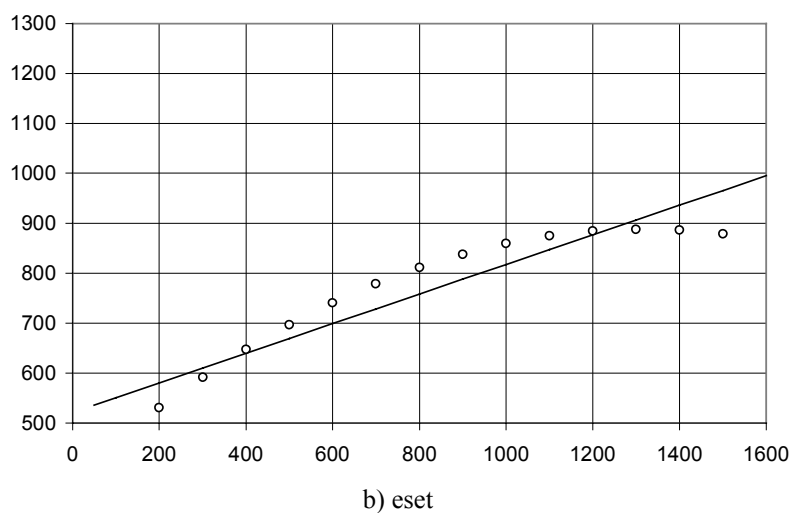
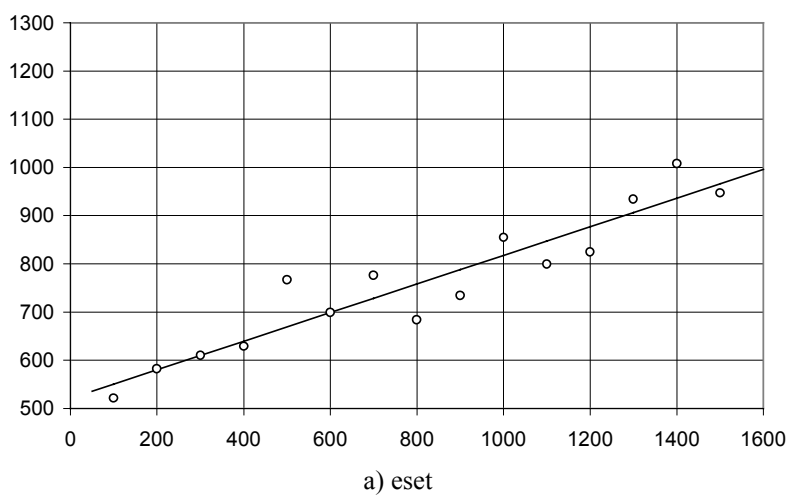
$$\tilde{a}_1 = 520,91 \pm 27,63 \quad \tilde{a}_2 = 0,2965 \pm 0,0304$$

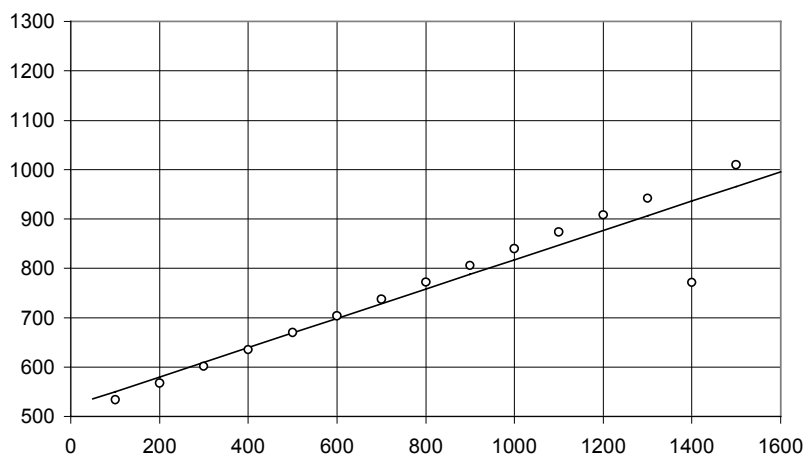
illesztett értéke, hanem kovarianciamátrixuk is ugyanaz mind a négy illesztésben. A Q_{\min} -ra kapott értékek már a negyedik tizedes jegyben egy egységgel eltérnek, de ennek oka, hogy a 7.1. táblázatban kerekített értékek találhatók.

7.1. táblázat. Adatok a lineáris regresszió csapdáinak illusztrálására

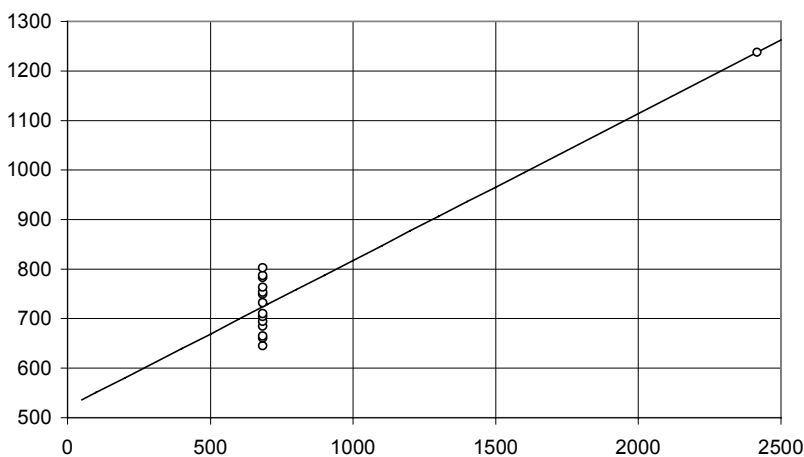
² F. J. Anscombe, Graphs in Statistical Analysis, The American Statistician **27**, pp. 17–21 (1973).

x	a) eset	b) eset	c) eset	x	d) eset
100	521,4	464,0	533,5	684,53	645,0
200	582,3	530,7	567,6	684,53	660,8
300	610,4	591,8	601,6	684,53	664,7
400	629,4	647,1	635,6	684,53	684,4
500	766,4	696,8	669,7	684,53	694,3
600	699,2	740,7	703,7	684,53	704,2
700	776,1	778,9	737,7	684,53	709,9
800	684,1	811,4	771,8	684,53	731,9
900	734,2	838,2	805,8	684,53	749,6
1000	854,8	859,3	839,8	684,53	753,5
1100	799,5	874,7	873,9	684,53	763,4
1200	824,9	884,4	907,9	684,53	783,1
1300	934,6	888,3	941,9	684,53	787,0
1400	1007,5	886,6	771,6	684,53	802,8
1500	947,1	879,1	1010,0	2416,58	1237,5





c) eset



d) eset

7.3. ábra. A 7.1. táblázatban mutatott adatokra végzett illesztés eredményei

A bemutatott esetek egyikében sem vennénk észre, hogy az adatokkal baj lehet, ha nem vizsgáljuk meg a róluk készült ábrákat. Az a) eset kifogástalan lineáris regressziót mutat. Nagyjából ilyenek kell lenniük az illesztett egyenes és a mért adatokat együtt mutató ábráknak. A b) esetben nyilvánvaló, hogy a mért adatok nem lineárisan, hanem (legalább) kvadratikusan függenek x -től, tehát az illesztést meg kell ismételnünk egy magasabb fokszámú polinommal. A c) esetben $x = 1400$ -nál nyilvánvalóan fellépett egy kiszóró pont, ami valószínűleg téves adatbevitel következménye. Hasonló oka lehet a d) esetnek, de itt az x változó értékei vannak hibásan megadva.

Nemlineáris problémák linearizálása

Az előző szakaszban tárgyalt illesztési problémák közös jellemzője, hogy az illesztőfüggvény lineáris a *keresett paraméterekben*. Ilyen esetekben az illesztés a (7.3) lineáris egyenletrendszerre vezethető vissza. Számos illesztési probléma van azonban, amelyekben az illesztőfüggvény a keresett paraméterekben nem lineáris. Ennek legegyszerűbb példája az exponenciális illesztés:

$$M(\xi_i) = a_1 e^{-a_2 x_i}, \quad i = 1, 2, \dots, n. \quad (7.17)$$

Ebben az esetben a minimalizálandó funkcionál a

$$Q = \sum_{i=1}^n w_i (\xi_i - a_1 e^{-a_2 x_i})^2 \quad (7.18)$$

alakban írható fel. Ha ennek az a_1 -re és a_2 -re vonatkozó deriváltjait nullával tesszük egyenlővé, egyenletrendszer kapunk a_1 -re és a_2 -re vonatkozóan. Az adódó egyenletek transzcendensek, tehát csak iterációval oldhatók meg, aminek az elkerülése érdekében szokás az illesztési problémát *linearizálni*: vesszük a (7.17) egyenlet logaritmusát. (7.17) szerint a közvetlenül mért ξ_i mennyiségek logaritmusai a keresett paraméterek lineáris függvénye:

$$\ln \xi_i \approx \ln a_1 - a_2 x_i, \quad i = 1, 2, \dots, n. \quad (7.19)$$

Ha tehát $\ln \xi_i$ értékeire egy (7.1) szerinti lineáris regressziót alkalmazunk, a kapott eredményekből a keresett paraméterek meghatározhatók.

Hasonló linearizálást alkalmazhatunk egy sor egyéb illesztési probléma megoldásában is. Két példát mutatunk még. Amikor a sugárdózist mérjük a távolság függvényében, az illesztőfüggvény

$$M(\xi_i) = f(x_i, \mathbf{a}) = \frac{a_1}{(x_i - a_2)^2} \quad (7.20a)$$

alakú. Ez a probléma úgy linearizálható, hogy vesszük a mért dózisok négyzetgyökének a reciprokát:

$$\frac{1}{\sqrt{\xi_i}} \approx \frac{x_i - a_2}{\sqrt{a_1}} = a'_1 + a'_2 x_i, \quad \text{ahol} \quad a_1 = \frac{1}{a_1'^2}, \quad a_2 = -\frac{a_2'}{a_1'}. \quad (7.20b)$$

A vesszős paraméterek a (7.1) szerinti lineáris regresszióval becsülhetők, majd belőlük az eredeti paramétereket a (7.20b) alatti képletekkel kapjuk meg.

A másik példa a reaktorban mért axiális eloszlás, amelyre vonatkozóan az illesztőfüggvény

$$M(\xi_i) = f(x_i, \mathbf{a}) = a_1 \cos[a_2(x_i - a_3)] \quad (7.21a)$$

alakú. Ez a probléma akkor linearizálható, ha ismerjük a_1 értékét. Ha a mért értékeket x_i függvényében felrajzoljuk, a maximális érték a_1 jó becslése. Ezután a linearizálás már elvégezhető az arccos függvény segítségével:

$$\arccos \frac{\xi_i}{a_1} = a_2(x_i - a_3) = a'_1 + a'_2 x_i, \quad \text{ahol} \quad a_2 = a'_1, \quad a_3 = -\frac{a_2'}{a_1'}. \quad (7.21b)$$

A vesszős paraméterek a (7.1) szerinti lineáris regresszióval becsülhetők, majd belőlük az eredeti paramétereket a (7.21b) alatti képletekkel kapjuk meg. Ha szükséges, a_1 becslését javíthatjuk: a lineáris regressziót a_1 különböző értékei

mellett végezzük el, és végül azt választjuk, amelyre a (7.2) szerinti Q a legkisebb.

A példák sorát folytathatnánk. Mindegyik lényege, hogy a mért adatokat valamilyen alkalmasan választott függvény szerint transzformáljuk úgy, hogy a transzformált mennyiségek várható értéke egy kétparaméteres lineáris függvénnyel legyen közelíthető. A módszer legfőbb előnye, hogy az így transzformált mennyiségeket x_i függvényében ábrázolva egyszerű grafikus becslést kaphatunk a keresett paraméterekre. Az ilyen módon végzett illesztés elméleti kérdéseinek egy külön részt szentelünk (6.6. alfejezet).

7.2. Polinomillesztés

Definíciók

A 7.3.b). ábrán látható pontok nyilvánvalóan nem írhatók le egy lineáris függvénnyel. Ilyen esetekben próbálkozhatunk egy magasabb fokszámú polinommal:

$$M(\xi_i) = \sum_{k=1}^m a_k x_i^{k-1}, \quad i = 1, 2, \dots, n. \quad (7.22)$$

A minimalizálandó funkcionál ekkor

$$Q = \sum_{i=1}^n w_i \left(\xi_i - \sum_{k=1}^m a_k x_i^{k-1} \right)^2. \quad (7.23)$$

Ha ezt a keresett paraméterek szerint deriváljuk, a deriváltakat nullával tesszük egyenlővé, végeredményben ismét a (7.3) lineáris egyenletrendszert kapjuk, ahol

$$R_{kk'} = \sum_{i=1}^n w_i x_i^{k+k'-1}, \quad (7.24a)$$

$$g_k = \sum_{i=1}^n w_i \xi_i x_i^{k-1}, \quad k, k' = 1, 2, \dots, m. \quad (7.24b)$$

(7.3)-at ebben az esetben megoldva (7.5) szerint kapjuk a paraméterek becült értékeit. Kovarianciamátrixukat pedig a

$$\mathbf{B} = \sigma^2 \mathbf{R}^{-1} \quad (7.25)$$

képlet adja meg, ahol σ^2 becslése

$$s^2 = \frac{Q_{\min}}{n - m}, \quad (7.26)$$

[vö. (7.11)]. A k -adik paraméter szórásnégyzete

$$D^2(\tilde{a}_k) = s^2 [\mathbf{R}^{-1}]_{kk}, \quad k = 1, 2, \dots, m, \quad (7.27)$$

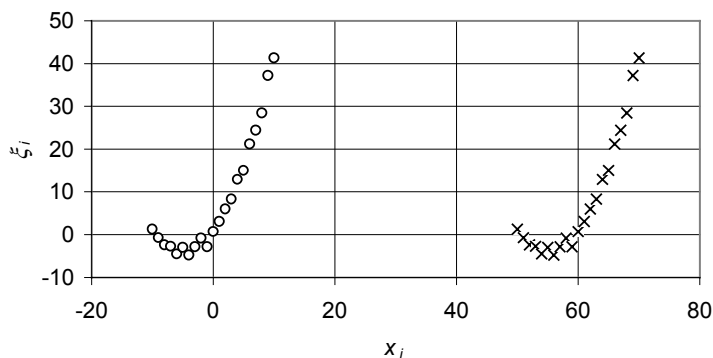
továbbá a megfelelő konfidenciaintervallum

$$\tilde{a}_k - \gamma D(\tilde{a}_k) \leq a_k \leq \tilde{a}_k + \gamma D(\tilde{a}_k), \quad k = 1, 2, \dots, m, \quad (7.28)$$

[vö. (7.12)]. γ az $(n - m)$ szabadsági fokú Student-eloszlás kvantilise (vö. 2. függelék).

Numerikus problémák

A polinomillesztés a legegyszerűbb függvényillesztési feladatok közé tartozik, mert (7.22) a keresett *paraméterekben* lineáris függvény.³ Emiatt nincs szükség a 6.2. alfejezetben tárgyalt iterációra. Az ehhez hasonló előnyök mellett azonban a polinomillesztés numerikusan a legkellemetlenebb feladatok közé tartozik. Illusztrációképpen tekintsük a 7.4. ábrát, amely két, egymáshoz képest eltolt parabolát mutat: az első az x_i értékek az origó körül, a másodikon az $x = 60$ érték körül csoportosulnak. Az előbbi esetben numerikus problémák nem jelentkeznek, viszont az utóbbiban nem egyszerű az \mathbf{R} mátrixot invertálni.



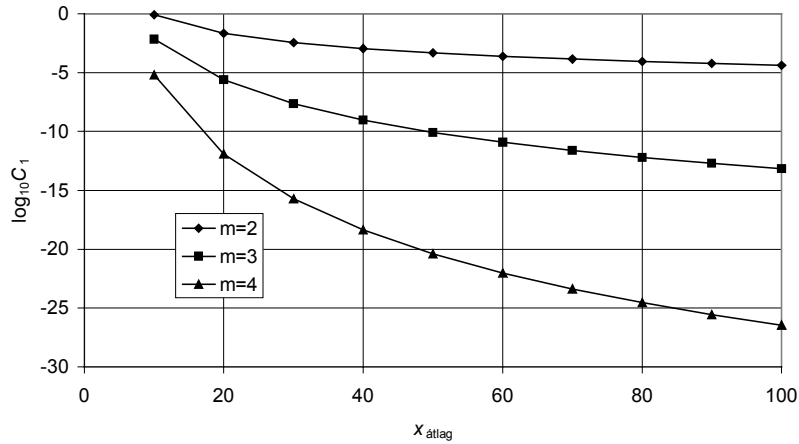
7.4. ábra. Egymáshoz képest eltolt parabolák

A 2.3. alfejezetben foglalkozunk a mátrixok invertálásának a problémáival. A (2.10) képletben definiálunk egy C_1 mérőszámot, amely megmutatja, milyen mértékben rosszul kondicionált az invertálandó mátrix.⁴ Kiszámoltuk $m = 2$ -, 3- és 4-edfokú polinomokra ezt a mutatót az x_i értékek átlagának a függvényében. A 7.5a. ábrán mutatjuk be az eredményt arra az esetre vonatkozóan, amikor az illesztendő pontok száma $n = 20$. Látható, hogy C_1 rohamosan csökken, és harmadfokú polinom ($m = 4$) esetében már 10^{-27} nagyságrendű érték. Ekkor az invertáláskor már 8–9 értékes számjegy elvész, tehát az inverzet dupla pontosságú számítással is csak körülbelül négy tizedesjegy pontossággal lehet megkapni. Amint a 2.3. alfejezetben megmutatjuk, az inverzet utóiterációval javítani lehet. $m = 5$ esetében azonban már elképzelhető, hogy a számítógépi pontossá-

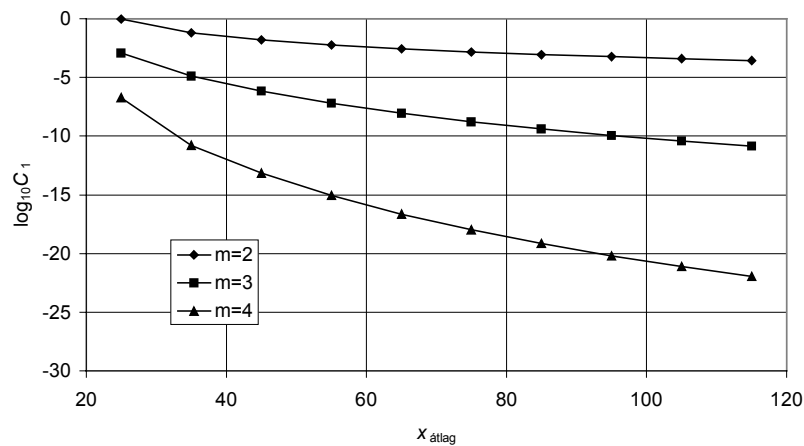
³ Ez nem tévesztendő össze a lineáris regresszióval, ahol a “lineáris” jelző arra utal, hogy az illesztőfüggvény az x_i változóban lineáris. Más kérdés, hogy a (7.1) függvény éppen a paraméterekben is lineáris.

⁴ Minél kisebb C_1 , annál nehezebb az inverzet kiszámítani.

gon belül az inverzet nem lehet kiszámítani. A probléma mértéke függ a pontok számától: a 7.5b. ábrán ugyanezt bemutatjuk $n = 50$ esetében is. A helyzet némileg javult, de nem sokkal.



7.5a. ábra. A $C_1(\mathbf{R})$ paraméter függése \bar{x} -től ($n = 20$)



7.5b. ábra. A $C_1(\mathbf{R})$ paraméter függése \bar{x} -től ($n = 50$)

Ortogonalis polinomok

Az imént bemutatott numerikus problémák kezelésére szolgálnak az *ortogonalis polinomok*.⁵ A 7.5a. és 7.5b. ábrákról látszik, hogy a polinomillesztés akkor a legkedvezőbb, amikor az x_i értékek átlaga az origó körül van. Ha történetesen nem ilyenek, akkor ilyené lehet transzformálni, vagyis a (7.22) illesztőfüggvény helyett egy transzformált polinomot használunk:

$$f'(x_i, \mathbf{c}) = \sum_{k=1}^m c_k (x_i - x_0)^{k-1}, \quad i = 1, 2, \dots, n,$$

⁵ Elméletüket eredetileg Csebisev dolgozta ki.

ahol x_0 egy alkalmasan megválasztott állandó. A fentiekből következik, hogy célszerű az x_i értékek átlagával egyenlőnek választani. Az illesztésből adódó c_1, c_2, \dots, c_m együtthatókból az eredeti együtthatókat egyszerűen kiszámíthatjuk.

Ezt az ötletet továbbfejleszthetjük, ha az előbbi transzformáció helyett az általánosabb

$$f'(x_i, \mathbf{c}) = \sum_{k=1}^m c_k \varphi_k(x_i), \quad i = 1, 2, \dots, n \quad (7.29)$$

képletet írjuk, ahol $\varphi_k(x)$ egy $(k-1)$ -edfokú polinom. A mátrixinverzió numerikus problémáit úgy tudjuk a legjobban kiküszöbölni, hogy az \mathbf{R} mátrixot diagonálissá tesszük. Ehhez az szükséges, hogy a (7.29)-ben szereplő polinomok ortogonálisak legyenek:

$$\sum_{i=1}^n w_i \varphi_k(x_i) \varphi_{k'}(x_i) = \delta_{kk'} \sum_{i=1}^n w_i [\varphi_k(x_i)]^2. \quad (7.30)$$

Itt $\delta_{kk'}$ a Kronecker-delta. Ezeket a polinomokat rekurzióval építjük fel. Az elsőt azonosan 1-gyel tesszük egyenlővé:

$$\varphi_1(x) \equiv 1, \quad (7.31a)$$

és a többit

$$\varphi_k(x) = x^{k-1} + \sum_{l=1}^{k-1} d_{kl} \varphi_l(x) \quad (7.31b)$$

alakban keressük. A definícióból következik, hogy $d_{kk} = 0$. A (7.30) ortogonalitási feltételből számolható az itt szereplő többi együttható:

$$d_{kl} = -\frac{\sum_{i=1}^n w_i x_i^{k-1} \varphi_l(x_i)}{\sum_{i=1}^n w_i [\varphi_l(x_i)]^2}, \quad l = 1, 2, \dots, k-1; \quad d_{kk} = 0. \quad (7.31c)$$

Ezekkel a polinomokkal (7.23) helyett a

$$Q = \sum_{i=1}^n w_i \left(\xi_i - \sum_{k=1}^m c_k \varphi_k(x_i) \right)^2 \quad (7.32a)$$

funkcionál minimumát keressük a c_k paraméterek függvényében. Ez most is a (7.3) alakú

$$\mathbf{R}'\mathbf{c} = \mathbf{g}' \quad (7.32b)$$

egyenletrendszerre vezet, ahol az \mathbf{R}' mátrix és \mathbf{g}' vektor elemei (7.24) analógiájára

$$R'_{kk'} = \sum_{i=1}^n w_i \varphi_k(x_i) \varphi_{k'}(x_i) = \delta_{kk'} \sum_{i=1}^n w_i [\varphi_k(x_i)]^2 \quad (7.32c)$$

és

$$g'_k = \sum_{i=1}^n w_i \xi_i \varphi_k(x_i), \quad (7.32d)$$

($k, k' = 1, 2, \dots, m$). Az \mathbf{R}' mátrix invertálása nem okoz semmiféle numerikus problémát, hiszen most

$$\tilde{c}_k = \frac{g'_k}{\sum_{i=1}^n w_i [\varphi_k(x_i)]^2}. \quad (7.33)$$

A (7.25) képlet alapján ezek a paraméterek egymástól függetlenek, és szórásnégyzetük

$$D^2(\tilde{c}_k) = \frac{1}{\sum_{i=1}^n w_i [\varphi_k(x_i)]^2} = \frac{1}{R'_{kk}}. \quad (7.34)$$

Mind az ortogonális polinomok megszerkesztéséhez, mind az eredeti paraméterek rekonstruálásához szükség van a polinomok együtthatóira. Keressük tehát a polinomokat

$$\varphi_k(x) = \sum_{l=1}^k b_{kl} x^{l-1} \quad (7.35a)$$

alakban. (7.31)-ből következik, hogy

$$b_{kk} \equiv 1, \quad k = 1, 2, \dots, m. \quad (7.35b)$$

(7.31b) szerint pedig

$$b_{kl} = \sum_{l'=1}^{k-1} d_{kl'} b_{l'l}, \quad l = 1, 2, \dots, k-1, \quad (7.35c)$$

aminek a levezetését az Olvasóra bízjuk.

Az imént kapott algoritmus megvilágítása érdekében kiszámítjuk az első néhány ortogonális polinomot. (7.31)-ből következik, hogy $d_{11} = 0$, $b_{11} = 1$. Helyettesítsük ezt (7.35b)-be és (7.35c)-be $k = 2$ mellett:

$$b_{22} = 1, \quad b_{21} = d_{21} b_{11} = d_{21}.$$

(7.31c) alapján

$$d_{21} = -\frac{\sum_{i=1}^n w_i x_i \varphi_1(x_i)}{\sum_{i=1}^n w_i [\varphi_1(x_i)]^2} = -\frac{\sum_{i=1}^n w_i x_i}{\sum_{i=1}^n w_i} = -\bar{x},$$

vagyis

$$\varphi_2(x) = x - \bar{x}.$$

Ez eddig ugyanaz, mint amit a 7.5. ábrák alapján heurisztikusan sejtettünk. Alkalmazzuk ismét (7.31c)-t:

$$d_{31} = -\frac{\sum_{i=1}^n w_i x_i^2}{\sum_{i=1}^n w_i} = \overline{x^2}, \quad d_{32} = -\frac{\sum_{i=1}^n w_i x_i^2 (x_i - b_{21})}{\sum_{i=1}^n w_i (x_i - b_{21})^2}, \quad d_{33} = 0.$$

(7.35b)-ből és (7.35c)-ből

$$b_{33} = 1, \quad b_{32} = d_{32} b_{22} = d_{32}, \quad b_{31} = d_{31} b_{11} + d_{32} b_{21}.$$

Ezt tovább folytatva felépíthetjük a $\varphi_4(x)$, $\varphi_5(x)$ stb. polinomokat. Amikor programot készítünk, a polinomok helyettesítési értékeinek a kiszámítására célszerű a *Horner-elrendezést* alkalmazni, vagyis a (7.35a) képlet helyett a következő sémát beprogramozni:

$$\varphi_k(x) = b_{k1} + x(b_{k2} + x(b_{k3} + \dots + x(b_{k,k-1} + x b_{kk}))).$$

Így tudjuk nem csak a szorzások és összeadások számát, hanem a kivonási jegyvesztéseket is a minimumra lehet csökkenteni.

Az eredeti polinom együtthatóit a következő azonosságból kapjuk meg:

$$\sum_{k=1}^m a_k x^{k-1} \equiv \sum_{k=1}^m c_k \varphi_k(x).$$

Könnyű belátni, hogy ez az azonosság akkor teljesül, amikor

$$a_k = \sum_{l=k}^m c_l b_{lk}. \quad (7.36a)$$

Ennek a képletnek az alkalmazásakor is léphetnek fel kikerülhetetlen kivonási jegyvesztések, de ezek általában sokkal kisebb hibát okoznak, mint azok, amelyek a mátrixinvertálás során fellépnek. Ha bevezetjük az

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} b_{11} & 0 & 0 & \dots & 0 \\ b_{21} & b_{22} & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ b_{m1} & b_{m2} & b_{m3} & \dots & b_{mm} \end{bmatrix}$$

jelölést, akkor (7.36a)-t átírhatjuk vektori alakba:

$$\tilde{\mathbf{a}} = \mathbf{A}^T \tilde{\mathbf{c}}. \quad (7.36b)$$

(3.29) alapján adódik ebből az eredeti paraméterek kovarianciamátrixa:

$$\mathbf{B}_{\tilde{\mathbf{a}}} = \mathbf{A}^T \mathbf{B}_{\tilde{\mathbf{c}}} \mathbf{A} = \sigma^2 \mathbf{A}^T \mathbf{R}'^{-1} \mathbf{A}. \quad (7.37)$$

Vegyük észre, hogy (7.35b)-re való tekintettel mindig

$$\tilde{a}_m = \tilde{c}_m. \quad (7.36c)$$

Hányadfokú legyen a polinom?

Gyakran kérdezzük, hányadfokú polinomot célszerű választani. Nyilván minél magasabb a polinom fokszáma, annál jobban fogja az illesztőfüggvény a mérési eredményeket közelíteni. Mivel az $\tilde{\mathbf{a}}$ becült paraméterek szórása viszont rohamosan nő a fokszámmal, igyekszünk minél alacsonyabb fokszámú polinomot illeszteni. Szélső esetben n pontra egzaktul lehet egy $(n-1)$ -edfokú polinomot illeszteni ($m=n$), de ennek aligha van valami fizikai értelme. Az ortogonális polinomok segítségével megtalálhatjuk e két ellentmondó szempont között a középutat.

Írjunk fel ugyanis konfidenciaintervallumot a c_k együtthatókra. Ha γ az $(n-m)$ szabadsági fokú Student-eloszlás kvantilise, akkor (7.28) mintájára a következő intervallumot szerkeszthetjük meg:

$$\tilde{c}_k - \gamma D(\tilde{c}_k) \leq c_k \leq \tilde{c}_k + \gamma D(\tilde{c}_k), \quad k = 1, 2, \dots, m, \quad (7.38)$$

ahol a szórásokat (7.34) alapján becsüljük. Mivel ezek az együtthatók egymástól függetlenek, azokat el lehet vetni, amelyek nem különböznek szignifikánsan 0-tól, vagyis amelyekre a (7.38) intervallum tartalmazza a 0-t. m megfelelő értéke tehát az a legnagyobb k , amelynél nagyobb indexekre ez teljesül.

Az elmondottakat a 7.2. táblázatban mutatott adatokkal illusztráljuk.⁶ Harmadfokú polinomot illesztettünk rájuk, és 99% konfidenciaszinten a következő intervallumok adódtak (7.38) és a 2. függelék szerint:

$$\begin{aligned} 351,56 \leq c_1 \leq 352,26; & \quad 0,4149 \leq c_2 \leq 0,4376; \\ 1,778 \cdot 10^{-3} \leq c_3 \leq 2,507 \cdot 10^{-3}; & \quad -1,142 \cdot 10^{-5} \leq c_4 \leq 1,312 \cdot 10^{-5}. \end{aligned}$$

⁶ Ezek valószínűleg mért adatok: egy reaktor magasságát (ξ_i) mutatja a hőmérséklet (x_i) függvényében.

Látható, hogy c_4 nem különbözik szignifikánsan 0-tól, tehát m megfelelő értéke 3, vagyis az adatok leírhatók egy másodfokú polinommal. Amikor ilyen következtetésre jutunk, érdemes az illesztést az alacsonyabb fokszámmal is megismételni. Ha akkor a fentitől lényegesen eltérő konfidenciaintervallumok jönnek ki, akkor ez azt jelenti, hogy a polinomillesztéssel nincs minden rendben. Nézzük meg ezért, mi jön ki Q_{\min} -ra a két illesztésben:

$$Q_{\min} = 3,553 \quad m = 4 - \text{re} \quad \text{és} \quad Q_{\min} = 3,564 \quad m = 3 - \text{ra} .$$

A két érték gyakorlatilag megegyezik egymással, tehát teljesen elegendő másodfokú polinomot illeszteni.

7.2. táblázat. Példa polinomillesztésre

x_i	ξ_i	x_i	ξ_i
22,00	330,38	90,73	353,02
35,90	332,55	94,70	355,00
45,61	335,45	100,00	357,03
54,85	338,95	105,61	360,03
63,30	340,80	111,30	362,96
65,68	342,52	115,70	366,08
73,38	345,02	120,40	368,45
80,67	347,42	126,10	371,40
85,99	351,00	131,44	376,33

Elvileg ugyan lehetséges, hogy egy c_k együtthatót ilyen alapon 0-nak vesszünk, és egy másik, magasabb fokszámú $\varphi_k(x)$ polinomé meg szignifikánsan különbözik 0-tól, de ez nem szokott a gyakorlatban előfordulni. Ha ugyanis a mérések leírhatók egy k -adfokú polinommal, akkor a (7.30) szerinti ortogonalitás miatt $k' > k$ -ra mindegyik $\tilde{c}_{k'}$ várható értéke zérus. Ez is az ortogonális polinomok előnye, mert az a_k együtthatókkal könnyen megtörténhet, hogy \tilde{a}_k nem különbözik szignifikánsan 0-tól, de $k' > k$ -ra $\tilde{a}_{k'}$ igen. Természetesen az ortogonális polinomokkal sem árt a körültekintés, amint a 7.3. alfejezetben mutatott példa illusztrálni fogja.

7.3. Simítás

A polinomillesztés egyik gyakori alkalmazása a *simítás*, ami azon alapul, hogy tetszőleges, nem nagyon gyorsan változó (ún. sima) függvényt egy elegendően szűk intervallumban Taylor-sorba lehet fejteni. Más szóval: egy alkalmas fokszámú polinommal lehet közelíteni. Egy ilyen polinom illesztését nevezzük simításnak. Természetesen nem csak polinommal, hanem más illeszthető függvénnyel is lehet simítani.

Simítás

Jelöljük az illesztőfüggvénynek az illesztett paraméterek szerinti deriváltjait F_{ik} -val:

$$F_{ik} = \frac{\partial f(x_i, \mathbf{a})}{\partial a_k}, \quad k = 1, 2, \dots, m; i = 1, 2, \dots, n.$$

Ebből képezzük a $n \times m$ méretű \mathbf{F} mátrixot. Polinomillesztés esetében

$$[\mathbf{F}]_{ik} = F_{ik} = x_i^{k-1}, \quad k = 1, 2, \dots, m; i = 1, 2, \dots, n. \quad (7.39a)$$

A w_i súlyokból képezzük a diagonális \mathbf{W} mátrixot. Ekkor a (7.24) képleteket a következőképpen írhatjuk át vektori alakba:

$$\mathbf{R} = \mathbf{F}^T \mathbf{W} \mathbf{F}, \quad (7.39b)$$

$$\mathbf{g} = \mathbf{F}^T \mathbf{W} \vec{\xi}, \quad (7.39c)$$

ahol $\vec{\xi}$ a mért $\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_n$ mennyiségekből képezett (n -elemű) vektor. A paraméterek becült értékét a (7.5) képlet adja meg.

A mért értékek várható értékét úgy becsülhetjük, hogy a paraméterek becült értékét behelyettesítjük az illesztőfüggvénybe:

$$\tilde{y}_i = \sum_{k=1}^m \tilde{a}_k x_i^{k-1} = \sum_{k=1}^m F_{ik} \tilde{a}_k, \quad (7.40a)$$

amit az alábbi módon írhatunk át vektori alakba:

$$\tilde{\mathbf{y}} = \mathbf{F} \tilde{\mathbf{a}} = \mathbf{F} \mathbf{R}^{-1} \mathbf{F}^T \mathbf{W} \vec{\xi}. \quad (7.40b)$$

Az \tilde{y}_i értékeket tekintjük a mért adatok simításának. Mielőtt továbbmennénk, kiszámítjuk e vektor kovarianciamátrixát. Abból indulunk ki, hogy a w_i súlyok fordítva arányosak a mért mennyiségek szórásnégyzetével:

$$\mathbf{B}_{\vec{\xi}} = \sigma^2 \mathbf{W}^{-1},$$

amivel

$$\mathbf{B}_{\tilde{\mathbf{y}}} = \sigma^2 \mathbf{F} \mathbf{R}^{-1} \mathbf{F}^T \mathbf{W} \mathbf{W}^{-1} \mathbf{W} \mathbf{F} \mathbf{R}^{-1} \mathbf{F}^T = \sigma^2 \mathbf{F} \mathbf{R}^{-1} \mathbf{F}^T, \quad (7.41)$$

amint ez egyszerűen belátható.

Az alábbiakban – az egyszerűség kedvéért – feltesszük, hogy méréseink azonos pontosságúak, vagyis $\mathbf{W} = \mathbf{E}_{n,n}$ (az $n \times n$ -es egységmátrix). Ekkor

$$\tilde{\mathbf{y}} = \mathbf{F} \tilde{\mathbf{a}} = \mathbf{F} \mathbf{R}^{-1} \mathbf{F}^T \vec{\xi} = \mathbf{S} \vec{\xi}, \quad (7.42)$$

[vö. (7.40b)]. Vegyük észre, hogy az itt definiált \mathbf{S} mátrix arányos a simított értékek kovarianciamátrixával. Ez az észrevétel azonban csak a polinomillesztésre vonatkozik.⁷

7.3. táblázat. Aktivitásmérő berendezés kalibrálása

⁷ Pontosabban: az olyan illesztőfüggvényekre, amelyek az illesztett paraméterekben lineárisak.

x_i	ξ_i	x_i	ξ_i
1,1	35,144	52,3	9,131
4,2	23,823	100,7	8,017
12,6	17,145	152,1	7,326
19,1	13,692	204,5	7,339
30,9	11,775	253,5	7,311

A 7.2. táblázatban szereplő adatokra sikeresen illesztettünk egy másodfokú polinomot, sőt arról is meggyőződünk, hogy nincs szükség magasabb fokszámú polinomra. Ilyen körülmények között az illesztett parabola helyettesítési értékei tekinthetők az adatok simításának is. Nem minden eset ilyen egyszerű azonban. Az alábbiakban egy bonyolultabb esetet elemzünk. A 7.3. táblázat egy aktivitásmérő berendezés kalibrációját mutatja. Itt x_i a minta tömege mg-ban, ξ_i pedig a ^{40}K izotóp mért és számított aktivitásának a hányadosa %-ban. Simítás céljából először azzal a módszerrel próbálkozunk, mint a 7.2. táblázat adataival is tettük a 7.2. alfejezetben. Harmadfokú polinomot illesztve ($m = 4$) a következő konfidenciaintervallumokat kapjuk az ortogonális polinomok együtthatóira 99% konfidenciaszinten:

$$8,73 \leq c_1 \leq 19,41; \quad -0,1345 \leq c_2 \leq -0,0063;$$

$$-2,41 \cdot 10^{-4} \leq c_3 \leq 2,07 \cdot 10^{-3}; \quad -3,10 \cdot 10^{-5} \leq c_4 \leq 0,72 \cdot 10^{-5}.$$

Az illesztésben $Q_{\min} = 123,7$ adódott. Ebből következik, hogy c_3 -at és c_4 -et 0-nak vehetjük, vagyis elegendőnek tűnik a lineáris polinom. Elég egy pillantás az adatokra (vö. 7.6. ábra), és látjuk, hogy erről szó sem lehet. Ezért csak c_4 -et hagyjuk el, vagyis másodfokú polinomot illesztünk ($m = 3$). A kapott konfidenciaintervallumok ($Q_{\min} = 234,7$):

$$7,67 \leq c_1 \leq 20,47; \quad -0,1477 \leq c_2 \leq 0,0069;$$

$$-4,77 \cdot 10^{-4} \leq c_3 \leq 2,30 \cdot 10^{-3}.$$

Itt már c_2 is 0-nak tűnik, ami abszurdum. A helyzet egyre romlik, Q_{\min} értéke majdnem a kétszeresére nőtt. Levonhatjuk tehát a következtetést, hogy a 7.3. táblázatban található adatsort *nem lehet egyetlen polinommal simítani*.

Ezért megpróbálkozunk a két részletben való simítással: az adatokat két ötös csoportra bontjuk, és mindkettőre külön illesztünk egy-egy polinomot. Az első csoport illesztéséhez nem elég a másodfokú polinom, így ott harmadfokú polinommal ($m = 4$) dolgozunk. A simított görbék a 7.6. ábrán láthatók – az első rész folytonos vonallal, a második rész pedig szaggatottal. Az első rész simítására kapott polinom együtthatói:

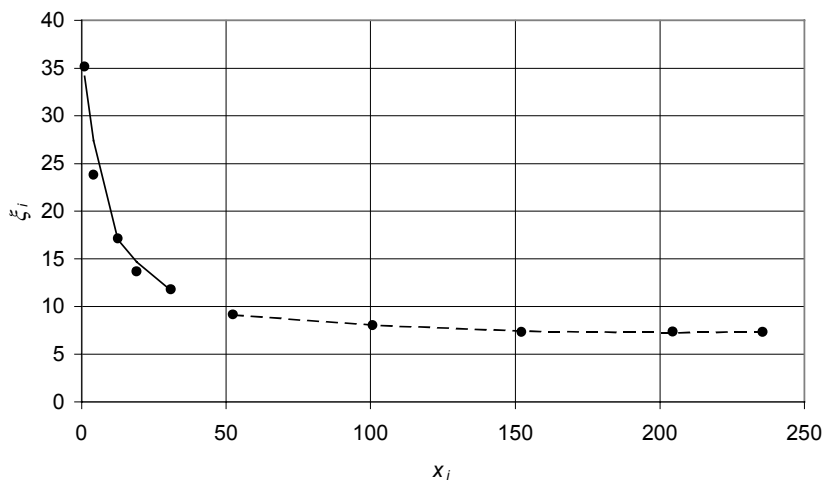
$$a_1 = 37,87; \quad a_2 = 3,608; \quad a_3 = 0,183; \quad a_4 = -0,00305;$$

a második részére pedig

$$a_1 = 10,78; \quad a_2 = -0,0368; \quad a_3 = 9,48 \cdot 10^{-5}.$$

Látható, hogy az első részben a görbület nem írja le kifogástalanul a pontokat. Interpolációs célból így egy negyedfokú polinom lenne kívánatos, de ennek az

együtthatóit nem írjuk fel. Mivel itt az együtthatók száma megegyezne a pontok számával, a polinom egzaktul átmenne a mért pontok mindegyikén.⁸



7.6. ábra. A 7.3. táblázatban található adatok simítása

Simítás egyenletes alappontok esetében

Mért görbék simítása egyszerű képletekbe foglalható, amikor az x_i alappontok egyenletesek:

$$x_i = x_0 + (i - 1)\Delta x.$$

Ebben az esetben (7.42) szerint a simított értékeket az $n \times n$ méretű S mátrix segítségével számíthatjuk ki. Az alábbiakban megadjuk S elemeit m és n néhány jellegzetes értékére. A félreértések elkerülése érdekében feltüntetjük a mátrixok rendjét.

Lineáris simításra ($m = 2$):

$6S_{33}$			$6S_{44}$				$6S_{55}$					
5	2	-1	7	4	1	-2	6	4	2	0	-2	
2	2	2	4	3	2	1	4	3	2	1	0	
-1	2	5	1	2	3	4	2	2	2	2	2	
			-2	1	4	7	0	1	2	3	4	
							-2	0	2	4	6	
$105S_{66}$						$28S_{77}$						
55	40	25	10	-5	-20	13	10	7	4	1	-2	-5
40	31	22	13	4	-5	10	8	6	4	2	0	-2
25	22	19	16	13	10	7	6	5	4	3	2	1
10	13	16	19	22	25	4	4	4	4	4	4	4
-5	4	13	22	31	40	1	2	3	4	5	6	7
-20	-5	10	25	40	55	-2	0	2	4	6	8	10
						-5	-2	1	4	7	10	13

⁸ Mivel valójában erre kényszerülnénk, azt látjuk, hogy az első részben sűríteni kellett volna a mérési pontokat. Ez azonban a jelen alfejezet témájától messze vezető kérdés, így tovább nem foglalkozunk vele.

Kvadratikus simításra ($m = 3$):

20S ₄₄					10S ₅₅				
19	3	-3	1		31	9	-3	-5	3
3	11	9	-3		9	13	12	6	-5
-3	9	11	3		-3	12	17	12	-3
1	-3	3	19		-5	6	12	13	9
					3	-5	-3	9	31

140S ₆₆						42S ₇₇						
115	45	0	-20	-15	15	32	15	3	-4	-6	-3	5
45	43	36	24	7	-15	15	12	9	6	3	0	-3
0	36	52	48	24	-20	3	9	12	12	9	3	-6
-20	24	48	52	36	0	-4	6	12	14	12	6	-4
-15	7	24	36	43	45	-6	3	9	12	12	9	3
15	-15	-20	0	45	115	-3	0	3	6	9	12	15
						5	-3	-6	-4	3	15	32

Harmadfokú simításra ($m = 4$):

70S ₅₅				
69	4	-6	4	-1
4	54	24	-16	4
-6	24	34	24	-6
4	-16	24	54	4
-1	4	-6	4	69

126S ₆₆						42S ₇₇						
121	16	-14	-4	11	-4	39	8	-4	-4	1	4	-2
16	73	52	2	-28	11	8	19	16	6	-4	7	4
-14	52	58	32	2	-4	-4	16	19	12	2	-4	1
-4	2	32	58	52	-14	-4	6	12	14	12	6	-4
11	-28	2	52	73	16	1	-4	2	12	19	16	-4
-4	11	-4	-14	16	121	4	-7	-4	6	16	19	8
						-2	4	1	-4	-4	8	39

E mátrixok alkalmazására mutatunk egy példát. Tegyük fel, hogy öt egyenletes alappontban mért értékeket simítunk egy másodfokú polinommal ($n = 5, m = 3$). Ekkor a következőképpen kapjuk a simított értékeket:

$$\begin{aligned}\tilde{y}_1 &= \frac{31\xi_1 + 9\xi_2 - 3\xi_3 - 5\xi_4 + 3\xi_5}{10}, \\ \tilde{y}_2 &= \frac{9\xi_1 + 13\xi_2 + 12\xi_3 + 6\xi_4 - 5\xi_5}{10}, \\ \tilde{y}_3 &= \frac{-3\xi_1 + 12\xi_2 + 17\xi_3 + 12\xi_4 - 3\xi_5}{10}, \\ \tilde{y}_4 &= \frac{-5\xi_1 + 6\xi_2 + 12\xi_3 + 13\xi_4 + 9\xi_5}{10}, \\ \tilde{y}_5 &= \frac{3\xi_1 - 5\xi_2 - 3\xi_3 + 9\xi_4 + 31\xi_5}{10}.\end{aligned}$$

Differenciálás

A simítás eredményeképpen kapott polinom használható a mért (és ezért hibával terhelt) függvénykapcsolat differenciálására. Nem kell mást tennünk, mint a (7.40a) szerint simított függvényt deriválni:

$$\partial\tilde{y}_i = \sum_{k=1}^m \tilde{a}_k (k-1)x_i^{k-2} = \sum_{k=1}^m (k-1)F_{ik}\tilde{a}_k = \sum_{k=1}^m \partial F_{ik}\tilde{a}_k. \quad (7.43a)$$

Azt, hogy valamilyen, a derivált függvényhez tartozó mennyiségről van szó, egy elé írt ∂ jellel tüntetjük fel. (7.40b) mintájára ezt átírjuk vektori alakba:

$$\partial\tilde{\mathbf{y}} = \partial\mathbf{F}\tilde{\mathbf{a}} = \partial\mathbf{F}\mathbf{R}^{-1}\mathbf{F}^T\mathbf{W}\tilde{\boldsymbol{\xi}}, \quad (7.43b)$$

ahol

$$\partial F_{ik} = (k-1)F_{ik}, \quad k = 1, 2, \dots, m. \quad (7.43c)$$

Egyszerűen kapjuk a deriváltak kovarianciamátrixát [vö. (7.41)]:

$$\mathbf{B}_{\partial\tilde{\mathbf{y}}} = \sigma^2 \partial\mathbf{F}\mathbf{R}^{-1}\mathbf{F}^T\mathbf{W}\mathbf{W}^{-1}\mathbf{W}\mathbf{F}\mathbf{R}^{-1}(\partial\mathbf{F})^T = \sigma^2 \partial\mathbf{F}\mathbf{R}^{-1}(\partial\mathbf{F})^T. \quad (7.44)$$

Amikor a méréseket egyenletes alappontokban végeztük, a deriválás képletei egyszerűsíthetők. (7.42) mintájára a deriváltakat a

$$\partial \tilde{\mathbf{y}} = \partial \mathbf{F} \tilde{\mathbf{a}} = \partial \mathbf{F} \mathbf{R}^{-1} \mathbf{F}^T \tilde{\boldsymbol{\xi}} = \partial \mathbf{S} \tilde{\boldsymbol{\xi}} \quad (7.45)$$

alakban írjuk fel, ahol feltettük, hogy a mérések pontossága azonos, vagyis $\mathbf{W} = \mathbf{E}_{n,n}$. A fentiekhez hasonlóan n és m néhány értékére felírjuk a deriváláshoz használható $\partial \mathbf{S}$ mátrixokat.

$m = 2$ esetében egyenest illesztünk, tehát a derivált minden pontban azonos. Az alábbi együtthatókkal lehet kiszámítani n néhány értékére:

n								
3	$6\partial \mathbf{S}$	-1	0	1				
4	$10\partial \mathbf{S}$	-3	-1	1	3			
5	$10\partial \mathbf{S}$	-2	-1	0	1	2		
6	$35\partial \mathbf{S}$	-5	-3	-1	1	3	5	
7	$28\partial \mathbf{S}$	-3	-2	-1	0	1	2	3

Ha például $n = 5$ pontban végeztünk méréseket, a deriváltat a

$$\partial \tilde{\mathbf{y}}_5 = \frac{-2\xi_1 - \xi_2 + \xi_4 + 21\xi_5}{10}$$

képlet adja meg mindegyik mérési pontban.

$m = 3$ és $m = 4$ esetében valóságos mátrixokat kell használnunk, amelyeket n -nek ugyanazokra az értékeire adjuk meg, mint korábban.

Kvadratikus simításra ($m = 3$):

$20\partial \mathbf{S}_{44}$				$70\partial \mathbf{S}_{55}$				
-21	13	17	-9	-54	13	40	27	-26
-11	3	7	1	-34	3	20	17	-6
-1	-7	-3	11	-14	-7	0	7	14
9	-17	-13	21	6	-17	-20	-3	34
				26	-27	-40	-13	54

$280\partial \mathbf{S}_{66}$						$84\partial \mathbf{S}_{77}$						
-165	1	92	108	49	-85	-39	-6	15	24	21	6	-21
-115	-9	52	68	39	-35	-29	-6	9	16	15	6	-11
-65	-19	12	28	29	15	-19	-6	3	8	9	6	-1
-15	-29	-28	-12	19	65	-9	-6	-3	0	3	6	9
35	-39	-68	-52	9	115	1	-6	-9	-8	-3	6	19
85	-49	-20	-108	-1	165	11	-6	-15	-16	-9	6	29
						21	-6	-21	-24	-15	6	39

Harmadfokú simításra ($m = 4$):

$84\partial \mathbf{S}_{55}$				
-125	136	48	-88	29
-38	-2	24	26	-10
7	-56	0	56	-7
10	-26	-24	2	38
-29	88	-48	-136	125

756 ∂S_{66}					
-925	674	632	-92	-539	250
-370	59	188	136	22	-35
-25	-262	-88	196	289	-110
110	-289	-196	88	262	25
35	-22	-136	-188	-59	370
-250	539	92	-632	-674	925

252 ∂S_{66}						
-257	122	185	72	-77	-122	77
-122	17	62	48	10	-17	2
-29	-46	-19	24	55	46	-31
22	67	-58	0	58	67	-22
31	-46	-55	-24	19	46	29
-2	17	-10	-48	-62	-17	122
-77	122	77	-72	-185	-122	257

7.4. Kiegyenlítés

Az 1.3. alfejezetben említettünk egy *kiegyenlítési* problémát. Először azt oldjuk meg, majd megmutatjuk, hogy ugyanez a módszer alkalmazható a simítás javítására is.

A háromszög szögei

Az 1.3. alfejezetben kifejtetteket előbb átírjuk a jelen fejezett jelöléseire. Mért értékeink:

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

amelyek várható értékét a szokás szerint jelöljük:

$$M(\xi_i) = a_i, \quad i = 1, 2, 3.$$

Tudjuk azonban, hogy összegük 180° :

$$a_1 + a_2 + a_3 = 180.$$

Ha ebből a_3 -at a másik kettővel kifejezzük, akkor a következő kétparaméteres illesztésre jutunk:

$$Q = (\xi_1 - a_1)^2 + (\xi_2 - a_2)^2 + (\xi_3 - 180 + a_1 + a_2)^2 = \text{minimum}.$$

A normálegyenleteket a keresett paraméterek szerinti deriválással kapjuk:

$$-\frac{1}{2} \frac{\partial Q}{\partial a_1} = \xi_1 + \xi_3 - 180 + a_2 = 0,$$

$$-\frac{1}{2} \frac{\partial Q}{\partial a_2} = \xi_2 + \xi_3 - 180 + a_1 = 0,$$

aminek a megoldása

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

Egy ad hoc módszerrel ugyanezt kaptuk az 1.3. alfejezetben. A kiegyenlítési problémák általános megoldását a 6.5. alfejezetben tárgyaljuk, aminek az áttanulmányozását azonban csak haladó olvasóinknak ajánljuk.

Simítás kiegyenlítéssel

Ezt a módszert alkalmazhatjuk a simítás javítására is. Korábban a 7.3. táblázat adatait két csoportra osztottuk, és egymástól függetlenül illesztettünk rájuk polinomokat. Felvetjük a következő ötletet: lehet-e javítani a simított görbét úgy, hogy a két polinomot egy közbelső pontban egymáshoz illesztjük? Megkövetelhetjük például, hogy a két rész közötti $x_0 \approx 40$ mg pontban a két polinom helyettesítési értéke és deriváltja egymással megegyezzen. Ha az elsőre $(m-1)$ -edfokú, a másodikra pedig másodfokú polinomot illesztünk, és ezeket az

$$\sum_{k=1}^m a_k x^{k-1},$$

illetve

$$a_{m+1} + a_{m+2}x + a_{m+3}x^2$$

alakban írjuk fel, akkor a polinomok együtthatóira az

$$\sum_{k=1}^m a_k x_0^{k-1} = a_{m+1} + a_{m+2}x_0 + a_{m+3}x_0^2, \quad (7.43a)$$

$$\sum_{k=1}^m (k-1)a_k x_0^{k-2} = a_{m+2} + 2a_{m+3}x_0 \quad (7.43b)$$

feltételeket szabjuk. Valójában tehát csak $(m+1)$ paramétert kell illeszteni, a fennmaradó kettőt ki tudjuk velük fejezni:

$$a_{m+2} = -\frac{2a_{m+1}}{x_0} - \sum_{k=1}^m (k-3)a_k x_0^{k-2}, \quad (7.44a)$$

$$a_{m+3} = \frac{a_{m+1}}{x_0^2} + \sum_{k=1}^m (k-2)a_k x_0^{k-3}. \quad (7.44b)$$

Ebben az esetben a (7.39) képletek a következőképpen módosulnak. Az *első csoportban* nincs változás:

$$F_{ik} = x_i^{k-1}, \quad k \leq m, \quad F_{ik} = 0, \quad k > m. \quad (7.45a)$$

A *második csoportban* azonban a mátrix a következőképpen módosul:

$$F_{ik} = x_i^2(k-2)x_0^{k-3} - x_i(k-3)x_0^{k-2}, \quad k = 1, 2, \dots, m, \quad (7.45b)$$

$$F_{i,m+1} = 1 - \frac{2x_i}{x_0} + \frac{x_i^2}{x_0^2}.$$

Ha ezt a 7.3. táblázatban szereplő mérési adatokra alkalmazzuk, a következő eredményeket kapjuk. Először vesszük az $m = 4$ esetet, amelyre vonatkozik a 7.6. ábra is. Az illesztett paraméterek a következők az első részben:

$$a_1 = 35,68; \quad a_2 = -2,399; \quad a_3 = 0,0795; \quad a_4 = -0,00088;$$

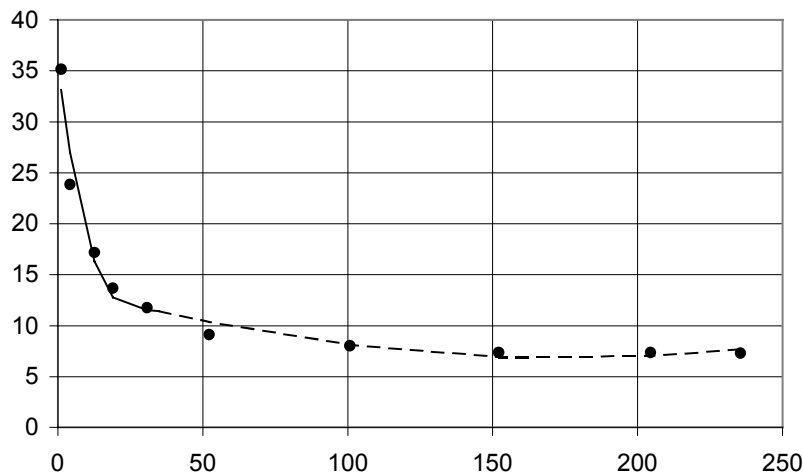
a második részben pedig

$$a_5 = 14,02; \quad a_6 = -0,08270; \quad a_7 = 2,4 \cdot 10^{-4}.$$

x_0 értékét 35-nek választottuk. Érdeemes megnézni, hogyan változott Q_{\min} a feltétel nélküli értékhez képest. A 7.6. ábrán mutatott görbének megfelelő két illesztésben kapott értékek összege:

$$Q_{\min}^{(1)} + Q_{\min}^{(2)} = 8,52 + 0,02 = 8,54.$$

A kiegyenlített illesztésben ezzel szemben $Q_{\min} = 17,28$ adódik, vagyis az illesztés romlott. Ebben nincs semmi meglepő: eredetileg hét paramétert illesztettünk, viszont a kiegyenlítésben a paraméterek száma a feltételek számával csökkent, tehát csak öt paramétert illesztettünk. Természetes, hogy az illesztés romlott ettől. Ez látszik a 7.7a. ábrán is: az illesztett görbe sokkal rosszabbul illeszkedik a mért pontokra a második részben.



7.7a. ábra. A 7.6. táblázatban található adatok simítása kiegyenlítéssel ($m = 4$)

Az $m = 5$ mellett végzett simítás kiegyenlítés nélkül olyan polinomot ad, amelynek a görbéje egzaktul átmegy a mért pontokon. Jóllehet ezt – formálisan – lehet illesztésként is végrehajtani, de a lényegét jobban megközelítjük, ha nem simításról, hanem *interpolációról* beszélünk. Amikor azonban a simítást kiegyenlítéssel végezzük, a művelet valóságos illesztéssé válik. Az illesztett paraméterek a következők az első részben:

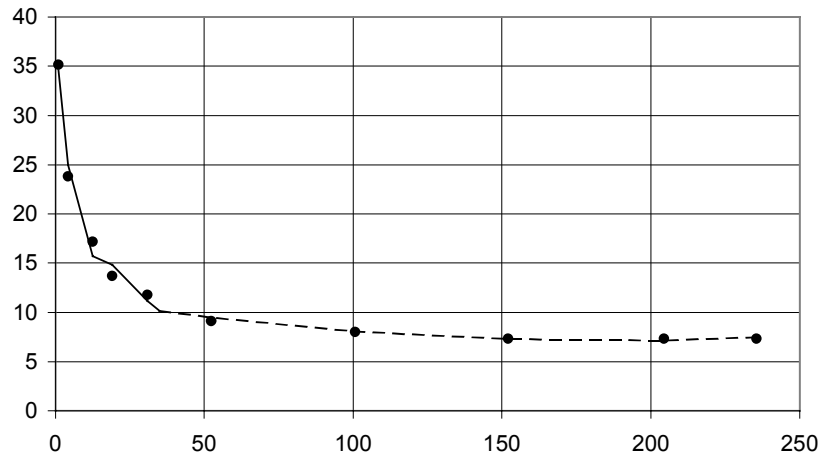
$$a_1 = 39,27; \quad a_2 = -4,609; \quad a_3 = 0,3273;$$

$$a_4 = -0,01010; \quad a_5 = 1,3 \cdot 10^{-4};$$

a második részben pedig

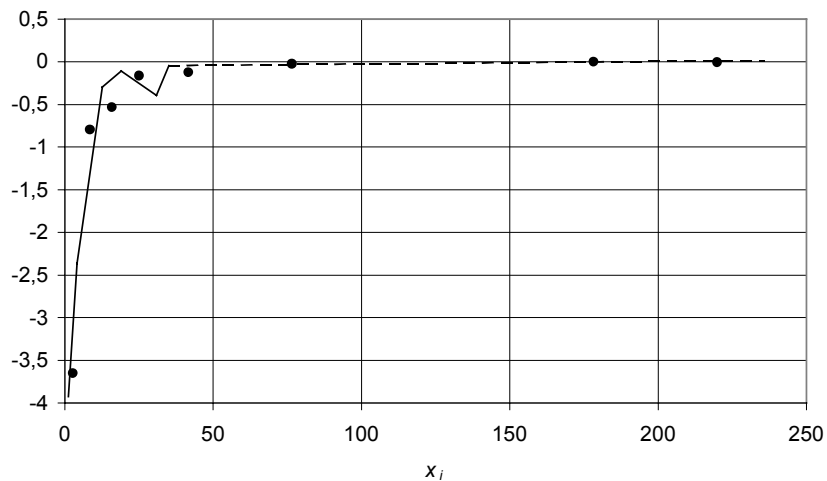
$$a_6 = 11,726; \quad a_7 = -0,04990; \quad a_8 = 1,3 \cdot 10^{-4}.$$

x_0 értékét most is 35-nek választottuk. Q_{\min} értéke 5,52, ami lényegesen kisebb, mint a kiegyenlítés nélküli simításban, tehát az illesztés javult. Ez látszik a 7.7.b ábrán is.



7.7b. ábra. A 7.6. táblázatban található adatok simítása kiegyenlítéssel ($m = 5$)

A mutatott példából látszik, hogy a kiegyenlítés annyiban javítja a simítást, hogy a polinomok fokszámát növelhetjük, és ezzel javul az illesztés.



7.8. ábra. A 7.6. táblázatban található adatok deriváltja kiegyenlítéssel ($m = 5$)

Differenciálás kiegyenlítéssel

Az előző alfejezetben részletesen tárgyaltuk a simított görbe deriválását. Ezt meg lehetne ismételni a kiegyenlítéssel simított görbékre vonatkozóan. A dolgot

nem tárgyaljuk teljes általánosságban. Megelégszünk az előbbi példával való illusztrációval.

Az illesztésből ($m = 5$) kapott paraméterekkel az első részben az

$$a_2 + 2a_3x + 3a_4x^2 + 4a_5x^3,$$

a második részben pedig az

$$a_7 + 2a_8x$$

képlet adja a deriváltat. Az eredményt a 7.8. ábrán mutatjuk be. A berajzolt pontok a közvetlen

$$\frac{\xi_{i+1} - \xi_i}{x_{i+1} - x_i}$$

numerikus deriválással kapott értékeket ábrázolják az $(x_{i+1}+x_i)/2$ mennyiségek függvényében. A 7.8. ábrán látszik, hogy ezek a pontok lényegesen simább görbét adnak, mint a simított görbe deriváltja. Ennek az az oka, hogy az első részre illesztett negyedfokú polinom túlságosan kihangsúlyozza az eredeti mért értékek mérési hibáit. Ezért az $x = 25$ körüli ingadozásoknak nincs sem matematikai, sem fizikai tartalmuk.

7.5. Hibaterjedés

Gyakran fordul elő, hogy valamilyen mennyiséget közvetlen mérésekből vagy illesztésből származó valószínűségi változók függvényében számítjuk ki. Az eredmény szintén valószínűség változó. Ahhoz, hogy vele tovább tudjunk dolgozni, ismernünk kell várható értékét és szórását. Több mennyiség számítása esetében szükség lehet a kovariancia kiszámítására is.

Az eddigi alfejezetekben tekintett illesztésekben tulajdonképpen már ezt tettük, hiszen a közvetlenül mért ξ_i ($i = 1, 2, \dots, n$) mennyiségek függvényében becsültük a keresett a_1, a_2, \dots paramétereket, és határoztuk meg rájuk vonatkozóan a várható értéket, szórás és kovarianciát. Azt is mondhatnánk tehát, hogy a vizsgálandó függvénykapcsolatot illesztőfüggvénynek tekintve közvetlenül alkalmazhatjuk korábbi képleteinket. Ilyesmit mégsem mondunk, mert szeretnénk a gyakorlatban közvetlenül használható módszereket és képleteket levezetni. Vizsgálni fogjuk tehát az

$$\eta_k = g_k(\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_n) = g_k(\vec{\xi}), \quad k = 1, 2, \dots, m \quad (7.46)$$

alakú függvényeket. Többnyire csak az $m = 1$ esettel foglalkozunk. Ilyenkor elhagyjuk a k indexet.

Várható érték

Legyen először $n = 1$. Fejtsük a g -függvényt az $y = M(\xi)$ várható érték körül Taylor-sorba:

$$g(\xi) = g(y) + g'(y)(\xi - y) + \frac{1}{2} g''(y)(\xi - y)^2 + \dots \quad (7.47a)$$

Itt a páratlan kitevőjű tagok várható értéke eltűnik, vagyis

$$M[g(\xi)] = g(y) + \frac{1}{2} g''(y) D^2(\xi) + \dots, \quad (7.47b)$$

ahol a ki nem írt tagok közül az első a g -függvény negyedik deriváltjával és negyedik centrális momentumával arányos (vö. 3.1. alfejezet).

Amikor a $g(\xi)$ függvényt kiszámítjuk, a $g(y)$ mennyiségre szeretnénk becslést kapni. Látható, hogy ez csak akkor torzítatlan, amikor a (7.47b)-ben kiírt második tag az első mellett elhanyagolható. Az alábbiakban ezt mindig fel fogjuk tételezni. Ekkor azonban a Csebisev-egyenlőtlenségből (3.3. TÉTEL) következik, hogy a (7.47a) sorfejtésben a négyzetes tag nagy valószínűséggel elhanyagolható. Más szóval: a $g(\xi)$ függvény linearizálható. A továbbiakban tehát a

$$\Delta g = g(\xi) - g(y) \cong g'(y)(\xi - y) \quad (7.48a)$$

közelítést alkalmazzuk. Ha nem egy, hanem több valószínűségi változó szerepel, akkor ennek az analogonja a

$$\Delta g = g(\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_n) - g(y_1, y_2, \dots, y_n) \cong \sum_{i=1}^n \frac{\partial g}{\partial \xi_i} (\xi_i - y_i) \quad (7.48b)$$

képlet. Könnyű ezt átvinni az $m > 1$ esetre is.

A jobb oldalon szereplő $(\xi_i - y_i)$ különbségek az egyes valószínűségi változók mérési (illesztési) hibája. A (7.48) képletek megadják, hogy ezek hatása hogyan terjed át a kiszámítandó függvényre. Ezért szoktunk *hibaterjedésről* beszélni. Mivel azonban a hibákat nem ismerhetjük, csak arra van lehetőségünk, hogy ezek legfőbb jellemzőjét, a szórást kiszámítsuk a közvetlenül mért mennyiségek szórásának a függvényében.

A kiszámított függvény szórása

Tegyük fel először, hogy a ξ_i valószínűségi változók *függetlenek*. Ekkor az 3.8. TÉTELT alkalmazhatjuk. Az eredmény annyira fontos, hogy tétel formájában mondjuk ki:

7.1. TÉTEL. Ha a ξ_i valószínűségi változók függetlenek ($i = 1, 2, \dots, n$) és g a valószínűségi változók olyan függvénye, amelyre alkalmazható a (7.48b) közelítés, a függvény helyettesítési értékének szórásnégyzete

$$D^2[g(\bar{\xi})] = M[(\Delta g)^2] = \sum_{i=1}^n \left(\frac{\partial g}{\partial \xi_i} \right)^2 D^2(\xi_i). \quad (7.49)$$

Ez az általánosan használt hibaterjedési képlet.

Példaképpen tekintjük a (7.20b) képletben szereplő a_2 paramétert. A linearizált illesztésből kapjuk az a'_1 és a'_2 paramétereket, amelyekből az

$$\tilde{a}_2 = g(\tilde{a}'_1, \tilde{a}'_2) = -\frac{\tilde{a}'_2}{\tilde{a}'_1}$$

képlet alapján kapjuk a keresett paramétert. Feltesszük egyelőre, hogy a vesszős paraméterek közötti kovariancia elhanyagolható. (7.49) szerint ennek a szórásnégyzete

$$D^2(\tilde{a}_2) = \left(\frac{\tilde{a}'_2}{\tilde{a}'_1}\right)^2 D^2(\tilde{a}'_1) + \left(\frac{1}{\tilde{a}'_1}\right)^2 D^2(\tilde{a}'_2).$$

A hasonló szorzat, illetve hányados alakú függvények esetében egyszerűbb, ha vesszük a g -függvény logaritmusát:

$$\ln|\tilde{a}_2| = \ln|\tilde{a}'_2| - \ln|\tilde{a}'_1|,$$

majd ennek vesszük a differenciálját:

$$\frac{\Delta|\tilde{a}_2|}{|\tilde{a}_2|} = \frac{\Delta|\tilde{a}'_2|}{|\tilde{a}'_2|} - \frac{\Delta|\tilde{a}'_1|}{|\tilde{a}'_1|},$$

és alkalmazzuk a szórásnégyzetek összeadási törvényét:

$$\frac{D^2(\tilde{a}_2)}{\tilde{a}_2^2} = \frac{D^2(\tilde{a}'_1)}{\tilde{a}'_1{}^2} + \frac{D^2(\tilde{a}'_2)}{\tilde{a}'_2{}^2},$$

amiből

$$D^2(\tilde{a}_2) = \tilde{a}_2^2 \left[\frac{D^2(\tilde{a}'_1)}{\tilde{a}'_1{}^2} + \frac{D^2(\tilde{a}'_2)}{\tilde{a}'_2{}^2} \right] = \left(\frac{\tilde{a}'_2}{\tilde{a}'_1}\right)^2 \left[\frac{D^2(\tilde{a}'_1)}{\tilde{a}'_1{}^2} + \frac{D^2(\tilde{a}'_2)}{\tilde{a}'_2{}^2} \right].$$

Könnyű belátni, hogy ez azonos a (7.49) képlet közvetlen alkalmazásával kapott eredménnyel. Két változó esetében talán bonyolultabbnak tűnik a logaritmuson alapuló számítás, de sok tényező esetében, főleg ha gyökök és hatványok is előfordulnak, a logaritmus képzése mindig egyszerűsítést jelent.

A (7.49) képlet nem érvényes, amikor a szereplő valószínűségi változók korreláltak. Egyszerűen bizonyítható a

7.2. TÉTEL. Ha g a ξ_i valószínűségi változók ($i = 1, 2, \dots, n$) változók olyan függvénye, amelyre alkalmazható a (7.48b) közelítés, a függvény helyettesítési értékének szórásnégyzete

$$D^2\left[g(\vec{\xi})\right] = M\left[(\Delta g)^2\right] = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \frac{\partial g}{\partial \xi_i} \frac{\partial g}{\partial \xi_j} \text{cov}(\xi_i, \xi_j). \quad (7.50)$$

Ennek a tételnek az alkalmazása elsősorban akkor jön szóba, amikor a szereplő valószínűségi változók illesztett paraméterek. Térjünk vissza a fenti példához, és ne hanyagoljuk el az illesztett paraméterek közötti kovarianciát! A (7.50) képlet ekkor a

$$D^2(\tilde{a}_2) = \left(\frac{\tilde{a}'_2}{\tilde{a}'_1} \right)^2 D^2(\tilde{a}'_1) + \left(\frac{1}{\tilde{a}'_1} \right)^2 D^2(\tilde{a}'_2) - 2 \frac{\tilde{a}'_2}{\tilde{a}'_1^3} \text{cov}(\tilde{a}'_1, \tilde{a}'_2).$$

Megjegyzendő, hogy itt is alkalmazható a logaritmálás, de nagyon kell vigyázni az előjelekre. Aki nem jártas a dologban, jobban teszi, ha a rögzösebb, de egyenes utat választja, vagyis közvetlenül a (7.50) képletet alkalmazza.

Függvények kovarianciája

Amikor (7.46) szerint egynél több függvényt számítunk ki ($m > 1$), a kiszámított függvényértékek korreláltak lesznek, hiszen ugyanazoktól a valószínűségi változóktól függenek. Ebben az esetben érdekes a különböző k indexekhez tartozó függvényértékek közötti kovariancia. Ezt (7.48b) alapján írhatjuk fel. Rögtön az általános esetet tekintjük, vagyis nem tételezzük fel, hogy a közvetlenül mért (illesztett) valószínűségi változók függetlenek. Egyszerűen bizonyítható a

7.3. TÉTEL. Ha a g_k függvények ($k = 1, 2, \dots, m$) a ξ_i valószínűségi változók ($i = 1, 2, \dots, n$) változók olyan függvényei, amelyekre alkalmazható a (7.48b) közelítés, a függvények helyettesítési értékének a kovarianciája

$$\text{cov}\left[g_k(\bar{\xi}), g_{k'}(\bar{\xi})\right] = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \frac{\partial g_k}{\partial \xi_i} \frac{\partial g_{k'}}{\partial \xi_j} \text{cov}(\xi_i, \xi_j). \quad (7.51)$$

E képletet a fent tekintett linearizált illesztés eredményeire alkalmazzuk. Kiszámítjuk a (7.20b)-ben szereplő a_1 és a_2 paraméterek kovarianciáját:

$$\text{cov}[a_1, a_2] = -\frac{2\tilde{a}'_2}{\tilde{a}'_1^4} D^2(\tilde{a}'_1) + \frac{2}{\tilde{a}'_1^3} \text{cov}(\tilde{a}'_1, \tilde{a}'_2).$$

Mint a kovarianciák esetében általában, itt is ügyelni kell az egyes tagok előjelére.

Konfidenciintervallumok

Amikor a közvetlenül mért (illesztett) valószínűségi változók mind Gauss-eloszlásúak, a vizsgált függvények helyettesítési értékéről ugyanezt lehet mondani. Ebben az esetben tehát nem okoz problémát a konfidenciintervallumok megszerkesztése.

Az illesztett paraméterek esetében azonban a szórások mindig csak véges szabadsági fokkal becsülhetők. Ilyenkor bonyolultabb feladattal állunk szemben, de – bonyolultsága miatt – ennek részleteibe nem megyünk bele.

7.6. Korrekciók

Az 5.3. alfejezetben tárgyaljuk a közvetlen mérésekhez alkalmazandó korrekciók figyelembevételének a módját. Ugyanezt áttekintjük függvényillesztés esetében is.

Az általános formalizmus

Leggyakrabban két fajta korrekcióval találkozunk: *additív* korrekciókkal és korrekciós *tényező*ekkel. Ez azt jelenti, hogy a közvetlenül mért mennyiségek várható értékét nem maga a korrekciók nélküli esetben használandó $f(x, \mathbf{a})$ illesztőfüggvény adja meg, hanem

$$M(\xi_i) = \mu_i f(x_i, \mathbf{a}) + \alpha_i. \quad (7.52)$$

Általában a μ_i tényező és az α_i korrekció mért adat, tehát maga is valószínűségi változó. Példák korrekcióra: a laboratórium háttérsugárzása, a hőmérséklet hatása stb. Példák korrekciós tényezőre: radioaktív bomlás, műszerek kalibrációs tényezője stb. Úgy képzeljük el, hogy μ_i az összes korrekciós tényezők szorzata, α_i pedig az összes korrekciók összege.

A maximális valószínűség elve alapján a

$$Q = \sum_{i=1}^n w_i (\xi_i - \mu_i f(x_i, \mathbf{a}) - \alpha_i)^2 \quad (7.53)$$

négyzetösszeg minimumát kell keresnünk az \mathbf{a} paramétervektor függvényében. Ha a korrekciók is valószínűségi változók, akkor a (6.39c) képlet alapján a súlyokat a

$$\frac{\sigma^2}{w_i} = \sigma_{\xi_i}^2 + \sigma_{\mu_i}^2 [f(x_i, \mathbf{a})]^2 + \sigma_{\alpha_i}^2 \quad (7.54)$$

képlettel kell kiszámítanunk. Vegyük észre, hogy ez éppen a (7.53) alatti összegben a $(\dots)^2$ tag zárójelében levő különbség szórásnégyzete. Ezzel a 6. fejezetben kimondott tételek érvényben maradnak. Ennek alapján méréseink kiértékelése a korábbiak alapján minden továbbiak alapján végrehajtható, ha az illesztőfüggvényt (7.52), a súlyokat pedig (7.54) szerint választjuk meg.

Az eddigi mondottak akkor érvényesek, amikor az i index különböző értékeihez tartozó korrekciók egymástól statisztikailag függetlenek, illetve amikor szórásuk elhanyagolható. Korrelált korrekciók esetében az eljárás lényegesen bonyolultabb. A kérdésre a jelen alfejezet végén térünk vissza.

Független korrekciók kezelése linearizálás esetén

Labormérések esetében – elsősorban az idő rövidege miatt – az $f(x, \mathbf{a})$ illesztőfüggvény linearizálására kényszerülünk. Ez azonban nem lehetséges, ha fenntartjuk a minimalizálandó Q funkcionál (7.53) szerinti alakját. Ezért egy közelítő eljárást alkalmazunk: a korrekciókat nem az illesztőfüggvényhez, ha-

nem a mért mennyiségekhez kapcsoljuk. Hangsúlyozzuk, hogy ez csak közelítő szükségmegoldás.

Arról van szó, hogy az illesztést a

$$\xi_i^c = \frac{\xi_i - \alpha_i}{\mu_i} \quad (7.55a)$$

korrigált mérésekre vonatkoztatjuk:

$$Q^c = \sum_{i=1}^n w_i^c (\xi_i^c - f(x_i, \mathbf{a}))^2. \quad (7.55b)$$

A súlyokat ebben az esetben a (7.49) hibaterjedési képlet alapján kell kiszámítanunk:

$$\frac{\sigma^2}{w_i^c} = \frac{\sigma_{\xi_i}^2 + \sigma_{\alpha_i}^2}{\mu_i^2} + \frac{\sigma_{\mu_i}^2}{\mu_i^2} \left[\frac{\xi_i - \alpha_i}{\mu_i} \right]^2. \quad (7.55c)$$

Ezekkel a képletekkel a korrigált mennyiségekre vonatkozóan már alkalmazható a linearizált illesztés módszere. Mindennek természetesen feltétele, hogy az $f(x, \mathbf{a})$ illesztőfüggvény linearizálható legyen. Mivel ez csak az illesztőfüggvényeknek egy speciális osztályára alkalmazható módszer, célszerű az általános eljárást beprogramozni, ha illesztő programot írunk.

Jól látható, hogy az adatoknak a (7.55) képletek szerinti korrekciója meglehetősen sok előkészítő számítást igényel – különösen akkor, amikor a korrekciók nem egyszerűek, hanem több tényező vagy tag szorzatai, illetve összegei. Semmiképpen nem ajánlhatjuk, hogy ezt bárki kézzel végezze el, mert méréseinek kiértékelése hibakereséssé degradálódik: a fizikai jelenségek megértése helyett az időt annak ellenőrzésével fogja tölteni, melyik i -re rontotta el a korrekció számítását és alkalmazását.

*Korrelált korrekciók

Ha akár a korrekció, akár a korrekciós tényezők különböző i -hez tartozó értékei korreláltak, a korrekt adatkezelés nagyon elbonyolódik. Nem való ebbe a jegyzetbe a kérdés átfogó tárgyalása. A szokástól eltérően most nem tudunk olyan irodalmi hivatkozást megadni, ahol ez megtalálható. A dolog oka abban rejlik, hogy egyrészt különös *elvi* problémát nem jelent, így a matematikusok nem érzik szükségét tárgyalni, másrészt súlyosan elbonyolítja az adatkezelés *formalizmusát*, így a fizikusok – akiknek pedig dolguk lenne mindezt korrektül kidolgozni – jobbnak látják a közelítő megoldásokat. A [3] riportok ugyan hozzászólnak a probléma tárgyalásához, de megállnak annál a közelítésnél, amely akkor érvényes, amikor a korrekciók mérési pontossága sokkal jobb, mint a ξ_i valószínűségi változóké. Az általánosan alkalmazható eljárást egy közönséges példával illusztráljuk: gyakran előfordul, hogy az α_i korrekciókra egyetlen mérési adatunk van, vagyis minden i -re ugyanazt a számot kell levonnunk (7.55a)-ban vagy (7.53)-ban.

Feltesszük tehát, hogy

$$\alpha_i \equiv \alpha \quad \text{és} \quad M(\alpha) = a_0. \quad (7.56)$$

Az egyszerűség kedvéért feltesszük, hogy $\mu_i \equiv 1$, vagyis nincs korrekciós tényező. Ennek a mérésnek a valószínűségi függvényét egyszerűen felírhatjuk az 5.3. alfejezetben követett gondolatmenet általánosításaként:

$$L(\mathbf{x}; \mathbf{a}, a_0) = \frac{\sqrt{w_0 \prod_{i=1}^n w_i}}{(2\pi\sigma^2)^{(n+1)/2}} \exp\left(-\frac{Q}{2\sigma^2}\right) \times \exp\left[-\frac{w_0(\alpha - a_0)^2}{2\sigma^2}\right],$$

ahol

$$Q = \sum_{i=1}^n w_i (\xi_i - f(x_i, \mathbf{a}) - a_0)^2$$

és

$$\sigma_\alpha^2 = \frac{\sigma^2}{w_0}.$$

A maximális valószínűségek elve alapján $\ln L$ deriváltjait kell zérussal egyenlővé tenni egyrészt az \mathbf{a} paramétervektor m komponense szerint, másrészt a_0 szerint. Az előbbieket a

$$G_k(\mathbf{a}) = -\frac{1}{2} \frac{\partial Q(\mathbf{a})}{\partial a_k} = \sum_{i=1}^n w_i [\xi_i - f(x_i, \mathbf{a}) - a_0] \frac{\partial f(x_i, \mathbf{a})}{\partial a_k} = 0 \quad (7.57a)$$

normálegyenletekhez vezetnek ($k = 1, 2, \dots, m$). Az utóbbi pedig egy további, $(m + 1)$ -edik egyenletre vezet:

$$G_0(\mathbf{a}) = \frac{\partial \ln L}{\partial a_0} = w_0(\alpha - a_0) + \sum_{i=1}^n w_i [\xi_i - f(x_i, \mathbf{a}) - a_0] = 0. \quad (7.57b)$$

Így tehát nem m , hanem $(m + 1)$ paramétert kell becsülnünk.

Az additív korrekcióhoz tartozó, $(m + 1)$ -edik paramétert természetesen ki lehet küszöbölni a (7.57) egyenletekből, és így azokat – formálisan legalábbis – vissza lehet vezetni m számú egyenletből álló egyenletrendszerre. (7.57b)-ből ugyanis kifejezhetjük az a_0 paramétert:

$$\tilde{a}_0 = \frac{w_0\alpha + \sum_{i=1}^n w_i [\xi_i - f(x_i, \tilde{\mathbf{a}})]}{w_0 + \sum_{i=1}^n w_i}, \quad (7.57c)$$

amit (7.57a)-ba helyettesítve egy m -ismeretlenes egyenletrendszert kapunk az eredeti \mathbf{a} paramétervektorra. Tekintve, hogy a_0 becslés értéke függ ennek az

utóbbi egyenletrendszernek a megoldásától, itt valójában egy iterációs eljárást definiáltunk.

Ezzel megtaláltuk annak a módját, hogy egy fajta korrelált korrekciót a legegyszerűbben figyelembe vegyünk. Az alábbiakban megnézzük, hogyan hat ez az eredetileg keresett paraméterek kovarianciájára. Áttérünk a 6.3. alfejezetben használt mátrixos formalizmusra, mert ez általánosítható bonyolultabban korrelált korrekciók kezelésére is. A (6.9a) képlettel definiált \mathbf{F} mátrix most kibővül az a_0 paraméternek megfelelő oszloppal, illetve az α mért adatnak megfelelő sorral. Mivel az $i = 1, 2, \dots, n$ mérési adatokra (7.52) alapján úgy képzelhetjük, hogy az illesztőfüggvény

$$M(\xi_i) = f(x_i, \mathbf{a}) + a_0,$$

az \mathbf{F} mátrix $(m+1)$ -edik oszlopa az a_0 paraméter szerinti deriváltakat, vagyis csupa 1-eseket tartalmaz. Az $(n+1)$ -edik mérési adat α , amelyre az illesztőfüggvény a_0 , tehát \mathbf{F} -nek ez a sora csupa 0-kat tartalmaz az első m oszlopban, viszont az $(m+1)$ -edik elem itt ismét 1. Legyen \mathbf{e} egy olyan n -elemű vektor, amelynek minden eleme 1. Ezzel az \mathbf{F} mátrix így írható:

$$\mathbf{F} = \begin{bmatrix} \mathbf{F}_a & \mathbf{e} \\ \mathbf{0} & 1 \end{bmatrix}, \quad (7.58a)$$

ahol \mathbf{F}_a az eredeti, az additív korrekció nélküli illesztéshez tartozó \mathbf{F} mátrix. Hasonló megfontolásokkal kapjuk a \mathbf{W} mátrixot is:

$$\mathbf{W} = \begin{bmatrix} \mathbf{W}_a & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & w_0 \end{bmatrix}. \quad (7.58b)$$

(6.9) szerint az \mathbf{R} mátrixot az

$$\mathbf{R} = \begin{bmatrix} \mathbf{F}_a^T & \mathbf{0} \\ \mathbf{e}^T & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{W}_a & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & w_0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{F}_a & \mathbf{e} \\ \mathbf{0} & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{F}_a^T \mathbf{W}_a \mathbf{F}_a & \mathbf{F}_a^T \mathbf{W}_a \mathbf{e} \\ \mathbf{e}^T \mathbf{W}_a \mathbf{F}_a & \mathbf{e}^T \mathbf{W}_a \mathbf{e} + w_0 \end{bmatrix} \quad (7.59)$$

alakban kapjuk. Látható, hogy a bal felső blokk éppen \mathbf{R}_a , vagyis az eredeti, az additív korrekció nélküli illesztéshez tartozó \mathbf{R} mátrix. (6.13) szerint az illesztett $(m+1)$ paraméter kovarianciamátrixát a (7.59) szerinti, teljes \mathbf{R} mátrix inverze adja, viszont az eredetileg keresett \mathbf{a} paramétervektor kovarianciamátrixa az \mathbf{R}^{-1} inverz bal felső blokkja alapján számítható. A 2.8. TÉTEL alapján ezt közvetlenül felírhatjuk. Esetünkben könnyebbség, hogy a tételben szereplő \mathbf{B} blokk most egy skalár, tehát inverze egyszerűen a (7.59) mátrix jobb alsó elemének a reciproka. Így tehát az $\tilde{\mathbf{a}}$ becslés kovarianciamátrixa

$$\mathbf{M}(\Delta \mathbf{a} \Delta \mathbf{a}^T) = \sigma^2 \left(\mathbf{F}_a^T \mathbf{W}_a \mathbf{F}_a - \frac{\mathbf{F}_a^T \mathbf{W}_a \mathbf{e} \mathbf{e}^T \mathbf{W}_a \mathbf{F}_a}{\mathbf{e}^T \mathbf{W}_a \mathbf{e} + w_0} \right)^{-1}. \quad (7.60)$$

Ennek a képletnek az elemzését az Olvasóra bízjuk. Mindössze annyit jegyzünk meg, hogy az elhanyagolható hibával mért korrekciónak a $w_0 \rightarrow \infty$ határeset felel meg.

Ez a korrelált korrekciók legegyszerűbb esete. Bonyolultabb esetekben ugyanezzel a módszerrel mindig levezethetjük az adekvát képleteket. Ezek gyakran olyan bonyolultak, hogy nagyon nehezen programozhatók. Amikor a korrekciók lényegesen pontatlanabbak, mint a ξ_i mérések, nincs más lehetőség. Szerencsére általában nem ez az eset fordul elő, így elég a korrekciók hatását (7.54) szerint a súlyokban figyelembe venni, ami első közelítésnek tekinthető, ugyanis elhanyagolja a korrekciók közötti korrelációt.

7.7. Normálás

Általános formalizmus

Az 1.3. alfejezetben említett *normálás* jó példa a 7.6. alfejezetben tárgyalt korrekciók alkalmazására. Tekintve, hogy ez semmilyen transzformációval sem vezethető vissza kétparaméteres lineáris regresszióra, jó példa arra is, hogyan lehet ilyen méréseket kezelni. A megfelelő illesztőfüggvényt (1.11)-ben írtuk fel. Az illesztés érdekében célszerű egy kicsit átalakítani. A mérés különböző ismétléseiben előforduló x_i koordináták értékeit egy közös halmazban összesítjük. Ebben ugyanazok az x_i értékek többször is előfordulhatnak. Nos, a különböző értékeket valahogy számozzuk meg: X_1, X_2, \dots, X_N . Bármelyik ξ_j mért értéket tekintjük, mindig található egy olyan I_j index, amelyre

$$x_i = X_{I_i}.$$

Az eloszlásnak az X_I koordinátához tartozó értékét jelöljük ψ_I -vel. Ezzel az (1.11) illesztőfüggvényt a következő alakban írhatjuk fel:

$$f(x_i, j; \mathbf{a}, \vec{\psi}) = a_j \psi_{I_i}. \quad (7.61)$$

A fenti jelölésekkel a legkisebb négyzetek módszere a

$$Q = \sum_{j=1}^J \sum_{i=1}^{n_j} w_{ji} (\xi_{ji} - \mu_{ji} a_j \psi_{I_i} - \alpha_{ji})^2 \quad (7.62)$$

négyzetösszeg minimumának a keresését jelenti, ha figyelembe vesszük a (7.52) szerinti korrekciókat is. n_j a j -edik ismétlésben mért értékek száma. Feltesszük, hogy a korrekciók függetlenek, vagyis mérési hibájuk (7.54) szerint figyelembe van véve a súlyokban. Deriváljuk Q -t mindkét fajta paraméter szerint:

$$-\frac{1}{2} \frac{\partial Q}{\partial a_j} = \sum_{i=1}^{n_j} w_{ji} \mu_{ji} \psi_{I_i} (\xi_{ji} - \mu_{ji} a_j \psi_{I_i} - \alpha_{ji}) = 0, \quad j=1, 2, \dots, J,$$

$$-\frac{1}{2} \frac{\partial Q}{\partial \psi_I} = \sum_{j=1}^J \sum_{i=1}^{n_j} w_{ji} \mu_{ji} a_j (\xi_{ji} - \mu_{ji} a_j \psi_I - \alpha_{ji}) = 0, \quad I=1, 2, \dots, N.$$

Ennek az egyenletrendszernek azonnal felírhatjuk a megoldását:

$$\tilde{a}_j = \frac{\sum_{i=1}^{n_j} w_{ji} \mu_{ji} \tilde{\psi}_{I_i} (\xi_{ji} - \alpha_{ji})}{\sum_{i=1}^{n_j} w_{ji} \mu_{ji}^2 \tilde{\psi}_{I_i}^2}, \quad (7.63a)$$

$$\tilde{\psi}_I = \frac{\sum_{j=1}^J \sum_{I_i=I} \sum w_{ji} \mu_{ji} \tilde{a}_j (\xi_{ji} - \alpha_{ji})}{\sum_{j=1}^J \sum_{I_i=I} \sum w_{ji} \mu_{ji}^2 \tilde{a}_j^2} = 0. \quad (7.63b)$$

A (7.63) képletek jól használhatók iterációra. Kezdetben felvehetjük például a $\psi_I \equiv 1$ eloszlást, amivel (7.63a) szerint becsülhetjük az a_j normálási tényezőket, majd (7.63b) segítségével javíthatjuk a ψ_I eloszlást, és így tovább, amíg az eljárás nem konvergál. Az 1.3. alfejezetben adott megoldást ezzel a módszerrel kaptuk – természetesen $\mu_{ji} \equiv 1$ és $\alpha_{ji} \equiv 0$ mellett.

A (7.63) iterációs képletek lassan konvergáló iterációra vezetnek. Különösen lassú az iteráció, amikor a $j = 1, 2, \dots, J$ ismétlésekhez tartozó x_i pozíciók között kevés átfedés van. Szerencsétlen esetben 300–400 iterációs lépésre is szükség lehet. A probléma abban rejlik, hogy ez nem Newton-iteráció. Definiálhatunk a (7.61) illesztőfüggvényre is Newton-iterációt, de ennek részleteibe nem megyünk bele.

A normálásnak az eredeti rendeltetésen kívül további alkalmazásai is vannak. Közülük kettőt említünk meg:

- Amikor az a_j normálási paraméterek mindegyikét rögzítjük, az illesztésben nem történik más, mint az azonos x_i pozíciókhoz tartozó mért értékek átlagolása. (A paraméterek rögzítése kiegyenlítésnek felel meg, amit részletesen tárgyalunk a 7.4. és 6.5. alfejezetekben.)
- Amikor vannak korrekciók, és az a_j normálási paraméterek mindegyikét rögzítjük, az azonos pozíciókhoz tartozó mérési adatok *korrigált* értékét átlagoljuk.

Mindkét alkalmazásban a (6.22) képlettel becsült s^2 empirikus szórásnégyzet megfelel annak, amit az 5.1. alfejezetben a “Csoportosított mérések” című részben ajánlunk: a szabadsági fokok száma nagy, és ezért az átlagolt értékek szórására nagyon megbízható becsléseket kapunk. Ez különösen előnyös az adatok statisztikai analízise szempontjából (vö. például 8. fejezet).

*Határozatlan illesztőfüggvények

A (7.61) illesztőfüggvény az ún. *határozatlan* illesztőfüggvények típusába tartozik. Tekintve, hogy gyakran fordulnak elő hasonló illesztési problémák, érdemes a kérdést közelebbről is megvizsgálnunk.

Az illesztőfüggvény alakjából következik, hogy ha az illesztendő paramétereknek egy a_1, a_2, \dots, a_J és $\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_N$ együttese megoldása az illesztési

problémának, akkor ezekkel – tetszőleges valós λ mellett – minden tekintetben egyenértékűek a $\lambda a_1, \lambda a_2, \dots, \lambda a_J$, illetve $\psi_1/\lambda, \psi_2/\lambda, \dots, \psi_N/\lambda$ paraméterek. Ezt értjük az illesztőfüggvény határozatlanságán. A (7.63) képletekkel definiált iteráció ettől függetlenül konvergál, de határértéke függ a kezdőértékektől. Ez természetesen nem baj, hiszen az illesztőfüggvény határozatlan.

Problémát okoz azonban a végeredményül kapott paraméterek kovarianciamátrixának a becslése. Az illesztett paraméterek száma $m = J + N$, viszont az illesztés minden lényeges tulajdonságát meghatározó, a 6.3. alfejezetben definiált \mathbf{F} mátrix rangja csak $(m - 1)$. Emiatt a (6.9) egyenlettel definiált \mathbf{R} mátrix szinguláris, tehát a 6. fejezet egyetlen tétele sem alkalmazható. Két kérdést kell tehát tisztáznunk: mi okozza \mathbf{F} rangjának a csökkenését? mit lehet tenni a probléma orvoslására?

Az \mathbf{F} mátrixnak két fajta oszlopa van, aszerint, hogy milyen fajta illesztett paraméter szerinti deriváltakat tartalmaznak. Az a_j normálási paraméterek szerinti deriváltak

$$F_{ij} = \mu_{ji} \psi_{li}, \quad j = 1, 2, \dots, J,$$

illetve a ψ_l szerintiek

$$F_{il} = \mu_{ji,l} a_{ji}, \quad I = 1, 2, \dots, N.$$

Bármely i -re érvényes a következő egyenlőség:

$$\sum_{j=1}^J a_j F_{ij} = \sum_{I=1}^N \psi_I F_{iI},$$

vagyis az \mathbf{F} mátrix oszlopai nem lineárisan függetlenek, köztük (legalább) egy lineáris kapcsolat van. A felírt összefüggés belátásához elég abból kiindulni, hogy bármely i -re csak egyetlen el nem tűnő F_{ij} és F_{iI} van, amelyekre (7.61) szerint fennáll a felírt egyenlőség. Így tehát $\text{rang}(\mathbf{F}) \leq m - 1$, amiből következik, hogy $\text{rang}(\mathbf{R}) \leq m - 1$.

A [3] riportokban megtalálható annak a bizonyítása, hogy ez a fajta szingularitás megszüntethető, ha az illesztett paraméterek közül az egyiket lerögzítjük.⁹ Legegyszerűbb, ha ez az a_1 normálási paraméter. Értékét úgy szoktuk megválasztani, hogy a ψ_l eloszlás normálása megfeleljen a céljainknak, például összehasonlítható legyen egy számított eloszlással. A [3] riportokból kiderül, hogy elsősorban az egyik paraméter rögzítése okozza a konvergencia lassulását.

Befejezésül megjegyezzük, hogy az ilyen fajta illesztésből kapott eloszlás komponensei között általában kicsi a korrelációs együttható. Ez azért jelentős, mert az így kapott ψ_l értékek jó közelítéssel úgy használhatók további illesztések bemenő adataiként, hogy statisztikailag függetlennek tekintjük őket.

⁹ A bizonyításban feltételként van kikötve, hogy a $j = 1, 2, \dots, J$ ismétlésekhez tartozó x_j értékek halmazai nem csoportosíthatók olyan részhalmazokba, amelyekben az X_j pozíciók különböző értékei fordulnak elő.

7.8. Szemelvények a laboratóriumi gyakorlatokból

A [9] jegyzetsorozat a legtöbb laboratóriumi mérés kiértékelését lineáris regresszióra vezeti vissza. Ennek a törekvésnek az a logikája, hogy olyan kiértékelést javasol a hallgatóknak, ami egy labormérés szűkre szabott időkeretében végrehajtható. Ez pedig a fizikai megfontolásokból levezethető illesztőfüggvény linearizálása. Van persze olyan mérés is, amelyben az illesztőfüggvény eleve lineáris. Ilyen például a rugalmassági együttható mérése (1.1. alfejezet). Néhány példa linearizálásra:

- Állóhullámok vizsgálatában a rezgő húrt megfeszítő T erő és a hosszegységre jutó μ tömeg a

$$c = \sqrt{\frac{T}{\mu}} \quad (7.64a)$$

képlet szerinti kapcsolatban van a hullámnak a húrban való c terjedési sebességével. Ekkor mind a $c(T)$, mind $c(\mu)$ függvénykapcsolat négyzetre emeléssel tehető lineáris.

- Torziós asztalhoz rögzített tárcsa rezgésének periódusidejét a

$$T = 2\pi \sqrt{\frac{\theta}{D^*}} \quad (7.64b)$$

képlet adja meg. Mivel a θ tehetetlenségi nyomaték a tárcsa középpontjának az asztal tengelyétől való r távolságától egy $\theta = \theta_0 + Cr^2$ alakú függvény szerint függ, a $T^2 = f(r^2)$ összefüggés lineáris.

- A dózisintenzitásnak a sugárforrás és a detektor közötti r távolságtól való függése $\dot{D} = \text{konst}/(r - r_0)^2$ alakú függvény. Így az $1/\sqrt{\dot{D}}$ mennyiség r -nek lineáris függvénye.

A linearizálás elméletét a 6.6. alfejezetben tárgyaljuk. Bár ezt csillaggal látuk el, az elsőéves hallgatók is megérthetik a lényegét, ami abban összegezhető, hogy a linearizált illesztésben a p_i súlyokat a (6.35) képlettel kell az eredeti illesztéshez tartozó w_i súlyokból kiszámítani. Ez azt jelenti, hogy a linearizált illesztés akkor is súlyozott illesztéssé válhat, amikor az eredeti illesztés súlyozatlan lett volna ($w_i \equiv 1$). Ha a független változó (a fenti példákban: μ , r stb.) mért értékeinek a szórása nem hanyagolható el, akkor a súlyokban ezt is figyelembe kell venni [vö. (6.39) képletek]. Annak érdekében, hogy a linearizált illesztést az eredetitől megkülönböztessük, megtartjuk a súlyok p_i jelölését, vagyis a

$$Q = \sum_{i=1}^n p_i (h(\xi_i) - b_1 - b_2 x_i)^2 \quad (7.65)$$

négyzetösszeg minimumát keressük a b_1 és b_2 paraméterek függvényében. A $h(y)$ az a transzformációs függvény, amely az eredeti illesztőfüggvényt lineárisra transzformálja:

$$h[f(x_i, \mathbf{a})] = b_1 + b_2 x_i. \quad (7.66)$$

Az is előfordul, hogy az eredeti x_i független változót is transzformálni kell, de ennek részleteibe nem megyünk bele.

Függvény alakjában megfogalmazott fizikai törvény kísérleti igazolása

Egy lineárisra transzformált fizikai törvény kísérleti igazolása minden esetben a kapott eredmények grafikus ábrázolásával kezdődik. Ha a kapott grafikonon látható pontok szemre egy egyenes körül szórnak, érdemes a mérésrel komolyabban is foglalkozni, vagyis a törvény igazolását matematikai statisztikai kritériumok formájában is megfogalmazni.

A (7.65) illesztésben szereplő súlyok minden esetben a transzformált mért értékek szórásnégyzetével vannak kapcsolatban:

$$D^2[h(\xi_i)] = \frac{\sigma^2}{p_i}. \quad (7.67)$$

Két esetet kell megkülönböztetnünk: (1) σ^2 ismert és (2) σ^2 nem ismert, vagyis becsülni kell [vö. (6.22)]:

$$\tilde{\sigma}^2 = s^2 = \frac{Q_{\min}}{n-2}. \quad (7.68)$$

Az előbbi esetben a fizikai törvény igazolása egyszerű, ugyanis a 6.2. TÉTELből tudjuk, hogy

$$Q_{\min} = \sigma^2 \chi_{n-2}^2. \quad (7.69)$$

Ennek alapján a fizikai törvény igazolása egy χ^2 -próba segítségével lehetséges. Választunk egy ε konfidencia-valószínűséget, és a 2. függelék táblázatából ki-keressük a

$$P\{\chi_{n-2}^2 < \gamma\} = 1 - \varepsilon$$

egyenletet kielégítő γ kvantilist, majd a fizikai törvényt akkor tekintjük igazolt-nak, amikor

$$Q_{\min} < \sigma^2 \gamma.$$

A másik esetben ilyen statisztikai próbát nem végezhetünk, mert Q_{\min} értékét (7.68)-ban felhasználjuk σ^2 becslésére. A fizikai törvény igazolása érdekében tehát egy újabb próbát kell keresnünk. Ez pedig nem lehet más, mint a 8.4. alfejezetben tárgyalt illeszkedési próbák egyike. A dolog lényege a következő. Kiszámítjuk az

$$\eta_i = h(\xi_i) - \tilde{b}_1 - \tilde{b}_2 x_i \quad (7.70)$$

különbségeket, ahol a \sim jellel a paraméterek illesztett (becsült) értékét jelöljük. Ha méréseink igazolják a fizikai törvényt, akkor a (7.70) szerinti különbségek zérus várható értékű Gauss-eloszlást követnek. Nos az említett illeszkedési próbák ennek a vizsgálatára szolgálnak. A felmerülő matematikai problémák miatt ennek részleteibe a jelen alfejezetben nem mehetünk bele.

Egyenlőség alakjában adott fizikai törvény kísérleti igazolása

Vegyük példaképpen a Kirchoff-törvények csomóponti törvényét, amely szerint egy csomópontba befolyó és onnan kifolyó áramok összege egymással egyenlő. Két mért mennyiség egyenlőségének a vizsgálatát az 5.2. alfejezet megfelelő szakaszában elemezzük. Az ott megfogalmazott módszerek általánosan alkalmazhatók. Célszerű azonban figyelembe venni a következő megjegyzést.

A mért értékek szórása mérésről mérésre változhat, de gyakran az a jellemző, hogy a relatív hiba többé-kevésbé állandó. Ha ez így van, akkor vigyázni kell arra, nehogy nagy abszolút értékű mért értékek egyenlőségét kelljen vizsgálnunk. Ilyenkor ugyanis ezek kis abszolút értékű különbségének az abszolút mérési hibája kellemetlenül nagy lehet, vagyis az alkalmazott matematikai statisztikai próba csak egészen szélsőséges esetekben vezethet negatív következtetésre. A kísérleti fizikában emiatt dolgozták ki a *differenciális méréseket*, amelyek a különbséget közvetlenül szolgáltatják, a statisztikai döntés által megkövetelt kellően kis mérési hibával.