A LEGKISEBB NÉGYZETEK MÓDSZERE

A mérések elvégzése során gyakran előfordul, hogy két vagy több egymástól függő fizikai mennyiséget mérünk meg. Tegyük fel pl., hogy megmértük az y és x mennyiségeket, amelyek között a következő függvénykapcsolat van:

$$y = \mathrm{f}(x, a, b, \ldots)\,, \tag{1}$$

ahol $a, b, \ldots$ ismeretlen paraméterek. Hogyan határozhatók meg ezek a paraméterek? Mivel a mérések során kapott y_i és x_i mennyiségek értékei mérési hibával terheltek, ezért nem tudunk olyan $a, b, \ldots$ paramétereket választani, hogy a kapott függvény tökéletesen illeszkedjen a mérési pontokra. Találnunk kell tehát egy feltételt, aminek teljesülése esetén kapott paraméterekkel a legjobbnak ítéljük meg a görbe mérési pontokra való illesztését. A paraméterek meghatározására az egyik legegyszerűbb és leggyakrabban alkalmazott eljárás a legkisebb négyzetek módszere.

A legkisebb négyzetek módszere szerint az illesztés akkor a legjobb, ha az alábbi négyzetösszeg minimális:

$$S(a, b, \ldots) = \sum_{i=1}^{N} [y_i - \mathrm{f}(x_i, a, b, \ldots)]^2 = \min. \tag{2}$$

Itt N a mérési adatpárok száma, x_i és y_i a mérések során kapott értékek. A paramétereket tehát úgy kell meghatároznunk, hogy a (2) egyenletben szereplő négyzetösszeg minimális legyen.

A (2) egyenlet megoldása általános esetben igen bonyolult szélsőértékkeresési problémához vezet. Sok esetre léteznek kidolgozott elméleti és numerikus módszerek. Ezek közül az egyik legegyszerűbb és legfontosabb esetet, az egyenesillesztést ismertetjük. Ebben az esetben az f függvény alakja a következő lesz:

$$y = a \cdot x + b\,, \tag{3}$$

így tehát olyan a és b paramétereket kell keresnünk, hogy a

$$S(a, b) = \sum_{i=1}^{N} [y_i - (a \cdot x_i + b)]^2 \tag{4}$$

négyzetösszeg minimális legyen. A szélsőérték helyén az $S(a, b)$ összeg a és b szerinti parciális differenciálhányadosa nulla értéket vesz fel, így jutunk a következő egyenletekhez:

$$\frac{\partial S(a, b)}{\partial a} = \sum_{i=1}^{N} 2 \cdot [y_i - (a \cdot x_i + b)] \cdot (-x_i) = 0\,, \tag{5}$$

$$\frac{\partial S(a,b)}{\partial b} = \sum_{i=1}^{N} 2 \cdot [y_i - (a \cdot x_i + b)] \cdot (-1) = 0 \,. \tag{6}$$

Ebből a két egyenletből már kifejezhető a és b értéke:

$$a = \frac{\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} x_i \cdot y_i - \overline{x}_N \cdot \overline{y}_N}{\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} x_i^{\,2} - \overline{x}_N^{\,2}} \,, \tag{7}$$

$$b = \overline{y}_N - a \cdot \overline{x}_N \,. \tag{8}$$

Az illesztés minőségét szokás az ún. korrelációs együtthatóval, vagy annak négyzetével jellemezni, melynek definíciója a következő:

$$R^2 = \frac{\left[\sum_{i=1}^{N} (x - \overline{x}_N)(y - \overline{y}_N)\right]^2}{\sum_{i=1}^{N} (x - \overline{x}_N)^2 \sum_{i=1}^{N} (y - \overline{y}_N)^2} \,. \tag{9}$$

R értéke 0 és 1 között található. Tökéletes illeszkedés esetén értéke 1, és minél kisebb a pontok szórása, értéke annál közelebb esik 1-hez.

Fontos megkülönböztetnünk az origón át nem menő egyenest az origón biztosan átmenőtől. Ilyennel találkozunk pl., ha *Ohm* törvényét vizsgálva ábrázoljuk a feszültséget az áramerősség függvényében. A b paraméter értéke ekkor azonosan zérus, és elvi hibát követünk el, ha illesztési paraméterként kezeljük. A legjobb illesztés feltétele ekkor a következő alakú:

$$S(a) = \sum_{i=1}^{N} (y_i - a \cdot x_i)^2 \,. \tag{10}$$

Ebből kapjuk:

$$\frac{\mathrm{d}S(a)}{\mathrm{d}a} = \sum_{i=1}^{N} 2 \cdot (y_i - a \cdot x_i)(-x_i) = 0 \,, \tag{11}$$

tehát a értéke így adható meg:

$$a = \frac{\sum_{i=1}^{N} x_i \cdot y_i}{\sum_{i=1}^{N} x_i^{2}} \, . \qquad (12)$$

Az egyenes illesztését ma már célszerűen számítógépen elérhető adatfeldolgozó programok segítségével végezzük el. Ekkor is legyünk figyelemmel arra, hogy az origón átmenő illesztésnél a *b* paraméter azonosan nulla legyen.

Ajánlott irodalom:

1. Kemény S. - Deák A.: Mérések tervezése és eredmények értékelése, Műszaki Könyvkiadó, Budapest, 1993.