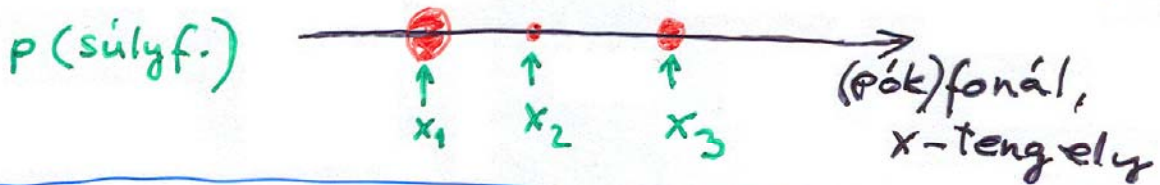
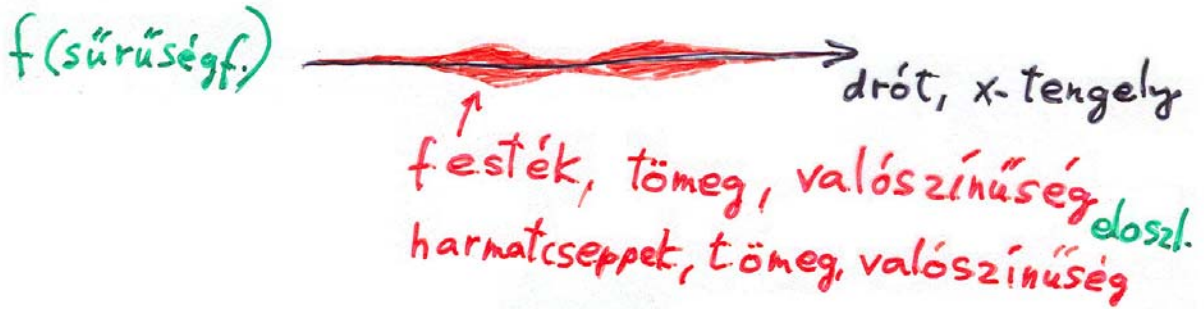


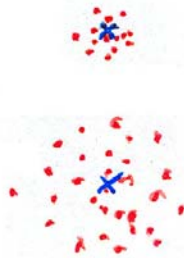
TARTALOMJEGYZÉK

1. EGYVÁLTOZÓS ELOSZLÁSOK JELLEMZÉSE	4
1.1. Eloszlások "centrumára" jellemző paraméterek	4
Várható érték.....	4
Medián	4
Módusz.....	4
A centrális jellemzők kapcsolata.....	5
1.2. Eloszlások "szóródására" jellemző paraméterek.....	5
Variansia/szórásnégyzet.....	5
Standard deviáció/szórás.....	5
Relatív szórás	5
Abszolút közepes eltérés.....	5
Kvantilis/percentilis terjedelem	6
Félértékszélesség, FWHM	6
1.3. Várható érték és variancia becslése.....	6
A várható érték becslése	6
A várhatóérték-becslés pontossága	6
A variancia becslése.....	7
Súlyozott átlag	7
2. TÖBBVÁLTOZÓS ELOSZLÁSOK JELLEMZÉSE	8
2.1. Együttes eloszlás, peremeloszlás, feltételes eloszlás.....	8
Peremeloszlások.....	8
Feltételes eloszlások.....	8
A sűrűségfüggvény tényezőkre bontása.....	9
2.2. Függetlenség, korrelálatlanság	9
Valószínűségi változók függetlensége.....	9
Kovariancia	9
Korrelációs együttható	9
Függetlenség és korreláció kapcsolata.....	9
2.3. Összeg és szorzat várható értéke	10
Valószínűségi változók összegének várható értéke	10
Független valószínűségi változók szorzatának várható értéke.....	10
2.4. Hibaterjedésre (szórásra) vonatkozó formulák.....	10
Független valószínűségi változók összegének variáciája.....	10
Standardizált	11
Független valószínűségi változók szorzata/hányadosa	11
A hibaterjedés általános közelítő formulái.....	11
3. NÉHÁNY FONTOS ELOSZLÁS ÖSSZEFOGLALÓ TÁBLÁZATA	12
3.1. Diszkrét eloszlások	12
3.2. Folytonos eloszlások.....	13
4. NÉHÁNY HASZNOS ÖSSZEFÜGGÉS ELOSZLÁSOKRÓL.....	15
4.1. Valószínűségi változó szigorúan monoton függvényének eloszlása	15

Közepes élettartam becslése néhány élettartam-adatból	17
$\gamma(1, \tau^{-1})$ eloszlású véletlen számok előállításáa $U(0, 1)$ eloszlásúból.....	19
A Compton-kontinuum alakja és a <i>Klein–Nishina</i> -formula.....	21
4.2. Konvolúció és dekonvolúció	25
A konvolúció és a független valószínűségi változók összege.....	25
Dekonvolúció.....	27
5. SPEKTRUMILLESZTÉS	28
6. FÜGGELÉK.....	32
6.1. Az átlag és a mintavariancia mint torzítatlan becslés.....	32
Mintaátlag	32
Mintavariancia	32
6.2. A kinetikus gázelmélet és a nevezetes eloszlások.....	34
Egydimenziós gáz sebességeloszlása (a mozgásirány megkülönböztetésével).....	34
Valószínűségi változó abszolút értékének eloszlása	34
Energiaeloszlás és dimenziószám: a χ^2 -eloszlás bevetése	35
Sebességeloszlás és dimenziószám: a χ -eloszlás bevetése.....	37



Várható érték:
(hol a közepe?)

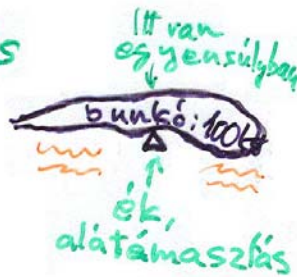
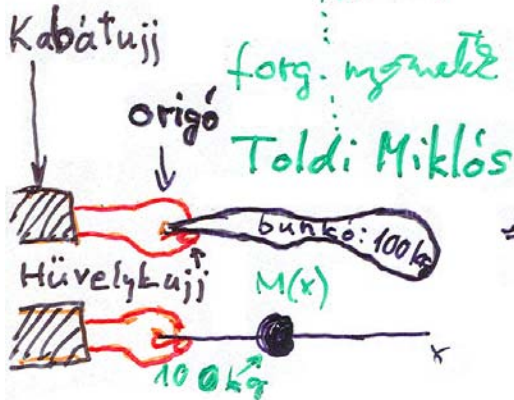


Szórás

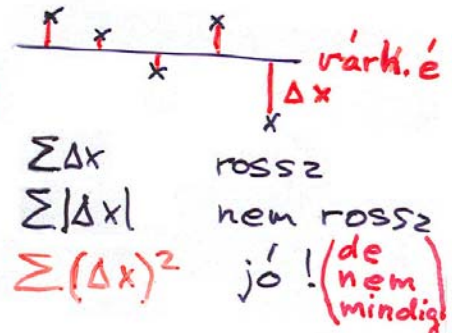
(mennyire terhet el a közepétől?)

mint a súlypont,

Milyen értelemben?



Nézzetesen



Eloszlások jellemzéséről szemléletesen.

Autodidaktáknak ajánlom a következő műveket:

- Vetier András: Szemléletes mérték- és valószínűségelmélet (Tankönyvkiadó, 1991)
- Reimann József: Valószínűségelmélet és matematikai statisztika mérnököknek (Tankönyvkiadó, 1992)

1. Egyváltozós eloszlások jellemzése

1.1. Eloszlások "centrumára" jellemző paraméterek

Várható érték

A centrális jellemzők között a várható érték jelenti a standardot. Ha ez létezik, akkor többnyire ezt szokás megadni. Az X valószínűségi változó várható értéke

$$\mu \equiv E(X) \equiv \begin{cases} \sum_i x_i p(x_i) \\ \int_{-\infty}^{+\infty} x f(x) dx \end{cases} \quad (1)$$

ahol p a súlyfüggvény, x_i -k a spektrumpontok (diszkrét eloszlás) és f a sűrűségfüggvény (folytonos eloszlás).

Itt jegyezzük meg, hogy a $g(X)$ függvény várható értéke teljesen analóg módon számítandó:

$$E(g(X)) \equiv \begin{cases} \sum_i g(x_i) p(x_i) \\ \int_{-\infty}^{+\infty} g(x) f(x) dx \end{cases} \quad (2)$$

Medián

Folytonos eloszlás esetében a medián az az $x_{1/2}$ érték, melynél:

$$P(X \leq x_{1/2}) \equiv P(X \geq x_{1/2}) \equiv \frac{1}{2} \quad (3)$$

vagyis amelynek ismeretében bármely eloszlás segítségével igazságos fej vagy írás játékot lehet játszani. Más szóval: ez az a pont, ahol az eloszlásfüggvény eléri az 1/2 értéket:

$$F(x_{1/2}) = \frac{1}{2} \quad (4)$$

Diszkrét eloszlás esetében a medián nem feltétlenül egyértelmű:

$$P(X < x_{1/2}) < \frac{1}{2} \quad \text{és} \quad P(X > x_{1/2}) < \frac{1}{2} \quad (5)$$

Módusz

Az m módusz a sűrűségfüggvény, ill. súlyfüggvény maximumhelyét/helyeit jelenti. (Diszkrét eloszlás esetében csak a spektrumpontokat vesszük figyelembe, mert különben minden

spektrumpontot maximumnak tekinthetnénk.) Ha csak egy módusz van, akkor az eloszlás unimodális, ha kettő, akkor bimodális stb.

A centrális jellemzők kapcsolata

A várható érték létezése az azt definiáló szumma, ill. integrál konvergenciáján múlik. Ha nincs várható érték, akkor a többi centrális jellemző afféle várhatóérték-pótlóként is felfogható az unimodális eloszlások esetében. (Bimodális eloszlások esetében a módusz többet elárul az eloszlásról, mint a várható érték, tehát még hasznosabb is.)

Szimmetrikus unimodális eloszlások esetén a centrális jellemzők egybeesnek az eloszlás c szimmetria-középpontjával:

$$\mu = x_{1/2} = m = c \quad (6)$$

Aszimmetrikus, unimodális eloszlások esetében a következő közelítő "szabályra" szokás hivatkozni: A medián kb. 2:1 arányban osztja fel a módusz és a várható érték közötti szakaszt, azaz

$$(x_{1/2} - m) : (\mu - x_{1/2}) \approx 2 : 1 \quad (7)$$

1.2. Eloszlások "szóródására" jellemző paraméterek

Variancia/szórásnégyzet

X varianciája/szórásnégyzete

$$\sigma^2 \equiv \text{Var}(X) \equiv D^2(X) \equiv E((X - \mu)^2) = M_2 - \mu^2 \quad (8)$$

ahol $M_2 \equiv E(X^2)$ a X második momentuma. (Az első momentum: $M_1 \equiv \mu$.)

Standard deviáció/szórás

X standard deviációja/szórása

$$\sigma \equiv D(X) \equiv \sqrt{D^2(X)} \quad (9)$$

Relatív szórás

A relatív szórás (relatív hiba) a szórás és a várható érték hányadosa:

$$\sigma_{\text{rel}} \equiv \frac{\sigma}{\mu} \quad (10)$$

Abszolút közepes eltérés

X (abszolút) közepes eltérése

$$\text{Abs}D(X) \equiv E(|X - \mu|) \quad (11)$$

Ha a várható érték létezik, akkor ez is. (A standard deviáció nem mindig létezik, még ha van is várható érték.)

Kvantilis/percentilis terjedelem

Ez a "mérce" akkor is működik, ha nincs várható érték.

A kvantilis/percentilis azt a helyet jelenti az x tengelyen, ahol az eloszlásfüggvény egy megadott hányadot/százalékot ér el a maximumhoz képest.

Ezek segítségével úgy lehet behatárolni az eloszlást, hogy megmondjuk, teszem azt: milyen távol esik egymástól az a két pont, amelyik alá (10 percentilis: $x_{0,1}$), ill., amelyik fölé (90 percentilis: $x_{0,9}$) várhatóan csak 10-10 százaléka fog esni a megfigyelt értékeknek. Ez a 10 percentilis terjedelem: $x_{0,9}-x_{0,1}$.

A kvartilis terjedelem ugyanakkor az alsó és a felső kvartilis $x_{3/4}-x_{1/4}$ távolságával jellemzi a "szóródást". (Az alsó, középső és felső kvartilis rendre a 25, 50 és 75 percentilist jelenti.)

A medián – a fenti terminológia szerint – akár középső kvartilisnek ($x_{2/4}$), akár 50 percentilisnek ($x_{0,5}$) is felfogható.

Félértékszélesség, FWHM

Unimodális eloszlások "szóródását" szokták ezzel jellemezni olykor. A kifejezés a sűrűségfüggvény (csúcs) szélességét jellemzi ott, ahol a magassága fele a maximálisnak. Innen a rövidítés: Full Width at Half Maximum.

1.3. Várható érték és variancia becslése

Az alábbi formulák közt számos olyan szerepel, melyet csak a többváltozós eloszlások segítségével lehet bizonyítani. Minthogy azonban bizonyításra nem kerül sor, gyakorlati szempontból megfelelőbbnek találtam ezt a helyet számukra.

A várható érték becslése

A várható érték becslésére az átlag (mintaközép) szolgál:

$$\hat{\mu} = \bar{X} \equiv \langle X \rangle \equiv \frac{1}{n} \sum_{k=1}^n X_k \quad (12)$$

ahol a " $\hat{\mu}$ " olvasata: " μ becslült értéke". A fenti becslés torzítatlan, azaz:

$$E(\hat{\mu}) = E(\bar{X}) = \mu \quad (13)$$

A várhatóérték-becslés pontossága

$$D^2(\bar{X}) = \frac{1}{n} D^2(X) \equiv \frac{1}{n} \sigma^2 \quad (14)$$

$$D(\bar{x}) = \frac{1}{\sqrt{n}} D(X) = \frac{1}{\sqrt{n}} \sigma \quad (15)$$

azaz kétszer akkora pontossághoz négyszer annyi, háromszor akkorához pedig kilenceszer annyi adatot kell átlagolnunk.

A variancia becslése

A variancia becslésére a korrigált empirikus szórásnégyzet (mintavariancia) szolgál:

$$\hat{\sigma}^2 = s^2 \equiv \frac{1}{n-1} \sum_{k=1}^n (X_k - \bar{X})^2 \quad (16)$$

A fenti becslés kissé meglepítő alakú (hiszen "elrontott" átlagról van szó). A formula használatát az indokolja, hogy az így kapott becslés torzítatlan¹, azaz:

$$E(s^2) = \sigma^2 \quad (17)$$

A fenti becslés $n/(n-1)$ arányban tér el a korrigálatlan formulával kapott becsléstől. Ez kis minta esetében számíthat valamit, bár kis mintából nem igazán ildomos varianciát számolni.

Megjegyzés: Amennyiben az eloszlás μ várható értéke pontosan ismert, akkor kis mintákra is a "logikusabb":

$$\hat{\sigma}^2 = \frac{1}{n} \sum_{k=1}^n (X_k - \mu)^2 \quad (18)$$

formula adja a variancia torzítatlan becslését (úgy, ahogy azt józan paraszti ésszel gondolnánk).

A standard deviáció becslése bármelyik esetben:

$$\hat{\sigma} = \sqrt{\hat{\sigma}^2} \quad (19)$$

Súlyozott átlag

Fizikai stb. mérések esetén előfordul, hogy ugyanazt a fizikai mennyiséget más-más módszerekkel más-más pontossággal határozzák meg. Ha mindegyik mérés hibaeloszlása normális, akkor a várható érték maximum likelihood becslését az alábbi súlyozott átlag adja:

$$\hat{\mu} = \frac{\sum_{k=1}^n \frac{1}{\sigma_k^2} X_k}{\sum_{k=1}^n \frac{1}{\sigma_k^2}} \quad (20)$$

A fenti várhatóérték-becslés varianciája:

$$D^2(\hat{\mu}) = \frac{1}{\sum_{k=1}^n \frac{1}{\sigma_k^2}} \quad (21)$$

¹ Egy kémia BSc-s hallgató javasolta, hogy adjam meg a (16) formula indoklását. Betettem a Függelékbe.

2. Többváltozós eloszlások jellemzése

A formulákat többnyire csak a kétváltozós esetre adjuk meg, mert az általánosítás n változóra meglehetősen kézenfekvő. A diszkrét esetet is mellőzzük, s csak a folytonos eloszlásokra vonatkozó formulákat tüntetjük fel.

2.1. Együttes eloszlás, peremeloszlás, feltételes eloszlás

Peremeloszlások

Ha $f(x, y)$ az X és az Y valószínűségi változó együttes sűrűségfüggvénye, akkor az

$$f_1(x) \equiv \int_{-\infty}^{+\infty} f(x, y) dy \quad (22)$$

függvény az X valószínűségi változó Y -ra vonatkozó peremeloszlásának (marginális eloszlás) sűrűségfüggvénye². Hasonlóképpen, az $Y|X$ -re vonatkozó peremeloszlásának sűrűségfüggvénye:

$$f_2(y) \equiv \int_{-\infty}^{+\infty} f(x, y) dx \quad (23)$$

Feltételes eloszlások

Az X valószínűségi változó Y -ra vonatkozó feltételes eloszlásának sűrűségfüggvénye:

$$f_{1|2}(x|y) \equiv \frac{f(x, y)}{f_2(y)} \quad (24)$$

Itt a feltételt úgy kell érteni, hogy az együttes (kétdimenziós) eloszlást az $Y=y$ egyenes mentén vizsgáljuk, azaz rögzített y mellett x függvényének tekintve. A peremeloszlás sűrűségfüggvényével azért kell osztani, hogy olyan (x szerinti) egydimenziós függvény legyen az eredmény, mely a paraméterként tekintett y bármely értéke mellett 1-re van normálva⁴. Ezt hívjuk feltételes sűrűségfüggvénynek, mely segítségével feltételes várható értéket és feltételes varianciát definiálhatunk. Pl. a megfelelő feltételes várható érték egy kétváltozós $g(X, Y)$ függvény esetében a következő:

² Az f_1 indexe arra emlékeztet, hogy az első változó maradt „kiátlagolatlanul” a kettő közül. A 2. változó szerinti integrálás eredménye ugyanis lényegében azt fejezi ki, hogy az 1-es változónak „általában véve” – vagyis a 2-es konkrét értékétől függetlenül – milyen súlya van az eloszlásban. Ezt itt úgy próbáljuk jellemezni, hogy a 2-es tengellyel párhuzamos $X=x$ egyenes mentén a „fal tövébe” (vagyis az eloszlás peremére) söprünk mindent, amit az eloszlásból a vonal mentén találunk. Ennek az eljárásnak az eszköze az integrálás. A „söpredékből” x függvényében egy eloszlás rajzolódik ki a peremen: ez az $f_1(x)$ sűrűségfüggvény. Az indexet azért szokás feltüntetni, mert az x helyett más betűt, pl. z -t vagy akár y -t is írhatnánk, ám az index ilyenkor is elárulja, hogy az integrálás a 2-ik változó szerint történt, s ezért az argumentumban lévő y csak az első változót jelentheti.

³ Vegyük észre, hogy a formula emlékeztet a feltételes valószínűséget definiáló $P(A|B) = P(AB)/P(B)$ formulára (A és B események).

⁴ Integráljuk az egyenlet jobb oldalát x szerint, és látni fogjuk, hogy csakugyan így van.

$$E(g(X, Y)|y) \equiv \int g(x, y)f_{1|2}(x|y)dx \quad (25)$$

amiből látszik, hogy a feltételes várható érték (és ugyanígy a feltételes variancia is) a feltételként szereplő valószínűségi változó – ezúttal tehát az y – konkrét felvett értékének függvénye, míg a másik változó kiátlagolódik.

Hasonlóképpen, az Y valószínűségi változó X -re vonatkozó feltételes eloszlásának sűrűségfüggvénye:

$$f_{2|1}(y|x) \equiv \frac{f(x, y)}{f_1(x)} \quad (26)$$

A sűrűségfüggvény tényezőkre bontása

A fentiek alapján mindig felírható, hogy:

$$f(x, y) = f_1(x)f_{2|1}(y|x) = f_2(y)f_{1|2}(x|y) \quad (27)$$

2.2. Függetlenség, korrelálatlanság

Valószínűségi változók függetlensége

Az X és az Y valószínűségi változók függetlenség azt jelenti, hogy közös sűrűségfüggvényük az egyes sűrűségfüggvények szorzataként adódik.

$$f(x, y) = f_1(x)f_2(y) \quad (28)$$

A szorzatszabályra gondolva ilyenkor azt mondhatjuk, hogy a peremeloszlás, a feltételes eloszlás és a megfelelő egyszemélyes eloszlás ilyenkor ugyanazt jelenti.

Kovariancia

Az X és az Y valószínűségi változó kovarianciája

$$Cov(X, Y) = E((X - \mu_1)(Y - \mu_2)) = E(XY) - \mu_1\mu_2 \quad (29)$$

Korrelációs együttható

Az X és az Y valószínűségi változó korrelációs együtthatója

$$\sigma_{12} \equiv R(X, Y) \equiv \frac{Cov(X, Y)}{D(X)D(Y)} = \frac{Cov(X, Y)}{\sigma_1\sigma_2} \quad (30)$$

A korrelációs együttható a $[-1, +1]$ intervallumba eső szám.

Függetlenség és korreláció kapcsolata

Ha X és Y független, akkor korrelálatlan is, azaz:

$$\sigma_{12} = 0 \quad (31)$$

Ha viszont $Y = aX$, akkor

$$\sigma_{12} = \pm 1 \quad (32)$$

aszerint, hogy a pozitív-e vagy negatív.

Másrészt ki lehet találni olyan szoros összefüggést X és Y közt (pl. $Y = X^2$) és olyan sűrűségfüggvényt, melyre X és Y korrelálatlannak bizonyul.

Ennek alapján csak annyit mondhatunk biztosan, hogy ha X és Y korrelál, akkor nem lehet független.

2.3. Összeg és szorzat várható értéke

Valószínűségi változók összegének várható értéke

Akármilyen a és b_k konstansokra, továbbá tetszőleges (nem feltétlenül független) X_k valószínűségi változókra áll, hogy:

$$E\left(a + \sum_{k=1}^n b_k X_k\right) = a + \sum_{k=1}^n b_k \mu_k \quad (33)$$

Ebből kiolvasható, hogy:

$$E(a + X) = a + \mu \quad (\text{eltolás}) \quad (34)$$

$$E(bX) = b\mu \quad (\text{nyújtás/zsugorítás}) \quad (35)$$

$$E(X \pm Y) = E(X) \pm E(Y) \quad (\text{összeadás/kivonás}) \quad (36)$$

Független valószínűségi változók szorzatának várható értéke

Független valószínűségi változókra teljesül, hogy:

$$E(XY) = E(X)E(Y) \quad (37)$$

2.4. Hibaterjedésre (szórásra) vonatkozó formulák

Független valószínűségi változók összegének varianciája

Független valószínűségi változókra teljesül, hogy:

$$D^2\left(a + \sum_{k=1}^n b_k X_k\right) = \sum_{k=1}^n b_k^2 D^2(X_k)$$

Ebből kiolvasható, hogy:

$$D(a + X) = D(X) \quad (\text{eltolás}) \quad (38)$$

$$D(bX) = |b|D(X) \quad (\text{nyújtás/zsugorítás}) \quad (39)$$

$$D^2(X \pm Y) = D^2(X) + D^2(Y) \quad (\text{összeadás/kivonás}) \quad (40)$$

Megjegyzések: Az eltolás és a nyújtás/zsugorítás formulájához nem kell függetlenség, mert egyetlen változóról van szó. Vegyük észre, hogy kivonásnál is „+” van jobb oldalt, nem pedig „-”. Magyarul független hibás adatok kivonása nem kompenzálja a hibát, hanem ugyanúgy növeli, mint az összeadás.

Standardizált

A standardizálás az eltolás és a nyújtás/zsugorítás speciális alkalmazása

$$Y = \frac{X - E(X)}{D(X)} = \frac{X - \mu}{\sigma} \quad (\text{standardizálás}) \quad (41)$$

A fentiek szerint a kapott Y -nak (az X standardizáltjának) 0 a várható értéke és 1 a szórása. Ha tehát X történetesen normális eloszlású, akkor Y standard normális – azaz $N(0,1)$ – eloszlású.

Független valószínűségi változók szorzata/hányadosa

Független valószínűségi változókra

$$\left[\frac{D\left(\frac{XY}{Z}\right)}{E\left(\frac{XY}{Z}\right)} \right]^2 = \left[\frac{D(X)}{E(X)} \right]^2 + \left[\frac{D(Y)}{E(Y)} \right]^2 + \left[\frac{D(Z)}{E(Z)} \right]^2 \quad (42)$$

Megjegyzés: Szorzásnál és osztásnál a relatív hibák négyzetei adódnak össze

A hibaterjedés általános közelítő formulái

Tetszőleges valószínűségi változók esetén az ezekből számított $f(X_1, X_2, \dots, X_n)$ formula hibájára a következő **közelítő** összefüggést kapjuk:

$$D^2(f) \approx \sum_{i=1}^n \left[\left(\frac{\partial f}{\partial x_i} \right)_{x=\mu}^2 D^2(x_i) \right] + 2 \sum_{i < j} \left[\left(\frac{\partial f}{\partial x_i} \right)_{x=\mu} \left(\frac{\partial f}{\partial x_j} \right)_{x=\mu} \text{Cov}(x_i, x_j) \right] \quad (43)$$

Ha a valószínűségi változók **függetlenek**, akkor a kovarianciákat tartalmazó második összeg kiesik, azaz:

$$D^2(f) \approx \sum_{i=1}^n \left[\left(\frac{\partial f}{\partial x_i} \right)_{x=\mu}^2 D^2(x_i) \right] \quad (44)$$

Az $x = \mu$ index azt jelenti, hogy a deriváltakat a változók várható, ill. „beállítani szándékozott” értékénél kell kiszámítani. A fenti képletek az $f(X_1, X_2, \dots, X_n)$ függvény differenciáljából – tehát a függvény lineáris közelítéséből – származnak. Emiatt gyakorlatilag teljesen általánosan használhatók ugyan **folytonos változókra**, de csak **viszonylag kis hibák esetében adnak jó közelítést**. Ezzel szemben az összegre kapott szórási formulák egzaktak.

3. Néhány fontos eloszlás összefoglaló táblázata

A következő táblázatokban E a várható értéket, D a szórást (standard deviációt), D/E a relatív szórást, D^2 pedig a varianciát (szórásnégyzetet) jelöli.

3.1. Diszkrét eloszlások

Jelölés	Elnevezés	Súlyfüggvény	$E(X)$	$D^2(X)$	Egyéb jellemzők stb.
$B(1, p)$	Bernoulli-eloszlás	$P(X = x; p) = \begin{cases} p & \text{ha } x = 1 \\ q & \text{ha } x = 0 \end{cases}, q = 1-p$	p	pq	módusz = $\begin{cases} 1 & \text{ha } p \geq q \\ 0 & \text{ha } p \leq q \end{cases}$ $D/E = \sqrt{\frac{q}{p}}$
$B(n, p)$	binomiális eloszlás	$P(X = x; n, p) = \binom{n}{x} p^x q^{n-x} \quad (x = 0, 1, \dots, n), q = 1-p$	$np \equiv \mu$	$npq = \mu q$	módusz = $\begin{cases} \mu - q \text{ és } \mu + p \\ [\mu + p] \end{cases}$ ha $\mu + p$ egész ha $\mu + p$ nem egész $D/E = \sqrt{\frac{q}{\mu}} = \sqrt{\frac{q}{pn}}$
$\Pi(\mu)$	Poisson-eloszlás	$P(X = x; \mu) = \frac{\mu^x}{x!} e^{-\mu} \quad (x = 0, 1, 2, \dots)$	μ	μ	módusz = $\begin{cases} \mu - 1 \text{ és } \mu \\ [\mu] \end{cases}$ ha μ egész ha μ nem egész $D/E = \frac{1}{\sqrt{\mu}}$

3.2. Folytonos eloszlások

Jelölés	Elnevezés	Sűrűségfüggvény (f), eloszlásfüggvény (F)	$E(X)$	$D^2(X)$	Egyéb jellemzők stb.
$U(a, b)$	folytonos egyenletes eloszlás	$f(x) = \frac{1}{b-a}, \text{ ha } x \in (a, b), \text{ egyébként } 0$ $F(x) = \frac{x-a}{b-a}, \text{ ha } x \in (a, b); 0, \text{ ha } x \leq a; 1, \text{ ha } x \geq b$	$\frac{a+b}{2}$	$\frac{(b-a)^2}{12}$	medián = E
$\chi(1, \lambda)$	exponenciális eloszlás	$f(t) = \lambda e^{-\lambda t}, \text{ ha } t > 0, \text{ egyébként } 0$ $F(t) = 1 - e^{-\lambda t}, \text{ ha } t > 0, \text{ egyébként } 0$	$\frac{1}{\lambda} \equiv \tau$	$\frac{1}{\lambda^2} = \tau^2$	módusz = 0 medián = $T_{1/2} \equiv \frac{\ln 2}{\lambda} \approx \frac{0,7}{\lambda}$ $D/E = 1$
$\chi(r, \nu)$	gamma eloszlás (l. 2. megj.)	$f_r(t) = \frac{(\nu t)^{r-1}}{\Gamma(r)} \nu e^{-\nu t}, \text{ ha } t > 0, \text{ egyébként } 0,$ <p>ahol $\Gamma(r)$ a gamma függvény (l. 1. megj.)</p>	$\tau_r \equiv \frac{r}{\nu}$	$\frac{r}{\nu^2}$	módusz = $\frac{r-1}{\nu}$ $D/E = \frac{1}{\sqrt{r}}$ közepes jelfrekvencia = $\tau_r^{-1} = \frac{\nu}{r}$
$N(\mu, \sigma^2)$	normális eloszlás (Gauss-eloszlás)	$f(x) = \frac{1}{\sigma} f_{01}\left(\frac{x-\mu}{\sigma}\right) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{x-\mu}{\sigma}\right)^2\right]$ $F(x) = F_{01}\left(\frac{x-\mu}{\sigma}\right) = \frac{1}{2}\left[1 + \operatorname{erf}\left(\frac{1}{\sqrt{2}}\frac{x-\mu}{\sigma}\right)\right], \text{ ahol}$ $\operatorname{erf} x = -\operatorname{erf}(-x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x \exp(-t^2) dt$	μ	σ^2	medián, módusz = μ várható abszolút eltérés = $\sqrt{2/\pi} \sigma \approx 0,798\sigma$ kvartilis terjedelem = $1,348\sigma$ FWHM = $2\sqrt{2 \ln 2} \sigma \approx 2,355\sigma$ $D/E = \frac{\mu}{\sigma}$ f inflexió pontja = $\mu \pm \sigma$

$\chi^2(k)$	χ^2 (khi-négyzet) eloszlás (l. 3. megj.)	$f_k(x) = \begin{cases} \frac{x^{k/2-1} e^{-x/2}}{2^{k/2} \Gamma(k/2)} & \text{ha } x > 0 \\ 0 & \text{ha } x \leq 0 \end{cases}$	k	$2k$	módusz = $k-2$ $D/E = \sqrt{\frac{2}{k}}$
$\chi(k)$	χ (khi-) eloszlás (l. 4. megj.)	$f_k(x) = \begin{cases} \frac{x^{k-1} e^{-x^2/2}}{2^{k/2-1} \Gamma(k/2)} & \text{ha } x > 0 \\ 0 & \text{ha } x \leq 0 \end{cases}$	E	D^2	$E = \sqrt{2} \frac{\Gamma((k+1)/2)}{\Gamma(k/2)}$ $D^2 = k - E^2$
$C(m, \gamma)$	Cauchy- eloszlás (Lorentz- eloszlás, Breit- Wigner- eloszlás)	$f(x) = \frac{1}{\pi\gamma} \frac{1}{1 + \left(\frac{x-m}{\gamma}\right)^2}$ $F(x) = \frac{1}{2} + \frac{1}{\pi} \operatorname{arctg} \frac{x-m}{\gamma}$	⊗	⊗	medián, módusz = m FWHM, kvartilis terjed. = 2γ f inflexiós pontja = $m \pm \gamma/\sqrt{3}$

Megjegyzések:

1. A gamma-függvény a faktoriális függvény általánosítása (komplex számokra is), melyet valós számokra a következő integrál állítja elő: $\Gamma(r) \equiv \int_0^{\infty} e^{-x} x^{r-1} dx$. A következő rekurziós formula érvényes rá: $\Gamma(r+1) = r \Gamma(r)$. Speciálisan $\Gamma(1) = 1$ és $\Gamma(1/2) = \sqrt{\pi}$. Ebből következik, hogy természetes számokra $\Gamma(n) = (n-1)!$ ($n=1, 2, \dots$), míg pozitív feles értékekre $\Gamma(1/2) = \sqrt{\pi}$, $\Gamma(3/2) = (1/2)\sqrt{\pi}$, $\Gamma(5/2) = (3/2)(1/2)\sqrt{\pi}$, $\Gamma(7/2) = (5 \times 3 \times 1) \times 2^{-3} \sqrt{\pi}$, ill. általában $\Gamma((2k+1)/2) = (2k-1)! \times 2^{-k} \sqrt{\pi}$ ($k=0, 1, 2, \dots$).
2. A gamma-eloszlású változó egész n -re n db független, egyforma exponenciális eloszlású változó összegeként interpretálható.
3. A $\chi^2(k)$ -eloszlású változó k db független standard normális eloszlású változó négyzetösszegeként interpretálható.
4. A $\chi(k)$ -eloszlású változó egy $\chi^2(k)$ -eloszlású változó négyzetgyökeként interpretálható. (Web[link](#).)

4. Néhány hasznos összefüggés eloszlásokról

A következő két pontban egy-egy kicsi „levezetés” is szerepel emlékeztetőül, hogy aki már elfelejtette, lássa a kapcsolatot a P valószínűség, az F ... eloszlásfüggvény és az f ... sűrűségfüggvény között. A diszkrét eloszlásokkal most nem foglalkozunk.

4.1. Valószínűségi változó szigorúan monoton függvényének eloszlása

Mondjuk, hogy van egy X valószínűségi változó, amelynek folytonos eloszlása az $F(x)$ eloszlásfüggvénnyel, ill. az

$$f(x) = \frac{dF(x)}{dx} \quad (45)$$

sűrűségfüggvénnyel jellemezhető.

Tegyük fel, hogy valamely okból kíváncsiak vagyunk az

$$Y = \varphi(X) \quad (46)$$

valószínűségi változó eloszlására, ahol φ egy szigorúan monoton függvény.

A szigorú monotonitás kölcsönösen egyértelmű kapcsolatot létesít a megfelelő X & Y értékek között, ezért létezik egy φ^{-1} inverz függvény, amellyel „visszafelé lehet számolni”, azaz

$$X = \varphi^{-1}(Y). \quad (47)$$

Az Y valószínűségi változó $g(y)$ sűrűségfüggvényét a következő formula segítségével kapjuk meg:

$$g(y) = \frac{dG(y)}{dy} = f[\varphi^{-1}(y)] \times \left| \frac{d\varphi^{-1}(y)}{dy} \right| \quad (48)$$

ahol $G(y)$ az Y eloszlásfüggvénye.

Kitérő

Akinek a (46)–(48) egyenlet túl „valszamos”, gondoljon így a dologra:

1. Bevezetünk egy új y változót, mely a régi x függvénye: $y = y(x)$. (Ez volt a φ .)
2. Mondjuk, hogy a kapcsolat kölcsönösen egyértelmű, ezért: $x = x(y)$. (Ez volt a φ^{-1} .)

Ezzel a jelöléssel (48) így fest:

$$g(y) = f(x(y)) \times \left| \frac{dx(y)}{dy} \right| \quad (49)$$

A recept tehát a következő:

① Alakítsuk át helyettesítéssel az f sűrűségfüggvényt úgy, hogy az x mindenhol eltűnjön, és csak az y látszódjon. Ehhez nincs okvetlenül szükség az $x(y)$ inverz explicit alakjára. Ezzel a $g(y)$ első tényezőjével végeztünk is. A (49) második tényezője: ② deriváljuk az explicite megadott $x(y)$ inverzet; ③ ha a derivált negatív értékeket is felvesz (≤ 0), szorozzuk meg -1 -gyel.

Érvelés

Definíció szerint igaz, hogy

$$G(y) = P(Y < y) = P[\varphi(X) < y] \quad (50)$$

Mielőtt továbbmegyünk, vegyük a szigorúan monoton függvényeknek két „prototípusát”, azaz a



lineáris növekedés
grafikonját.

, ill. csökkenés

Az ábrák jól érzékeltetik, hogy ha a φ monoton növekvő/csökkenő pozitív/negatív deriválttal, akkor az inverze, φ^{-1} , is pontosan olyan tulajdonságú.

Óvatosságból kezeljük külön először a monoton növekvő φ esetét a monoton csökkenőtől.

Ha φ monoton növekvő, akkor (50) értelemszerűen ezt adja:

$$G(y) = P(Y < y) = P[\varphi(X) < y] \equiv P[X < \varphi^{-1}(y)] = F[\varphi^{-1}(y)], \quad (51)$$

hiszen nagyobb φ -hez nagyobb φ^{-1} tartozik. Ilyenkor a g sűrűségfüggvény a láncszabály szerint:

$$g(y) = \frac{dG(y)}{dy} = \frac{dF[\varphi^{-1}(y)]}{d\varphi^{-1}(y)} \times \frac{d\varphi^{-1}(y)}{dy}. \quad (52)$$

Természetesen φ monoton növekedése miatt φ^{-1} deriváltja pozitív, ezért mindegy, hogy az abszolút értékét vesszük-e vagy sem, tehát a bekeretezett (48) formula ebben az esetben „működik”.

Ha viszont φ monoton csökkenő, akkor (50) ezt adja:

$$G(y) = P(Y < y) = P[\varphi(X) < y] \equiv P[X > \varphi^{-1}(y)] = 1 - P[X \leq \varphi^{-1}(y)] = 1 - F[\varphi^{-1}(y)], \quad (53)$$

mert nagyobb φ -hez kisebb φ^{-1} tartozik. (Az utolsó egyenlőségénél kihasználtuk, hogy a folytonosság miatt a \leq helyett $<$ a reláció is írható.) A sűrűségfüggvény a láncszabály szerint most:

$$g(y) = \frac{dG(y)}{dy} = \frac{d\{1 - F[\varphi^{-1}(y)]\}}{d\varphi^{-1}(y)} = -f[\varphi^{-1}(y)] \times \frac{d\varphi^{-1}(y)}{dy} = f[\varphi^{-1}(y)] \times \left| \frac{d\varphi^{-1}(y)}{dy} \right| \quad (54)$$

Az abszolút érték beírásával azért tüntethettük el a negatív előjelet, mert φ monoton csökkenése miatt φ^{-1} deriváltja negatív volt. A kapott formula megegyezik a bekeretezett [(48)], tehát az a szigorúan monoton φ függvények mindkét fajtájára érvényesnek bizonyult.

A későbbiek miatt érdemes egy kis időt szentelni a „prototípusként” aposztrofált lineáris esetnek:

$$Y = \varphi(X) \equiv aX + b \quad (55)$$

azon belül is annak az aletnek, amikor $a > 0$. (Ilyen transzformáció pl. a standardizálás is $a = 1/\sigma$ és $b = -\mu/\sigma$ szereposztással.) A (48) eredmény alapján most ezt kapjuk:

$$g(y) = f[\varphi^{-1}(y)] \times \frac{d\varphi^{-1}(y)}{dy} = f\left[\frac{y-b}{a}\right] \times \frac{d\frac{y-b}{a}}{dy} = \frac{1}{a} f\left[\frac{y-b}{a}\right] \quad (56)$$

ami arányosság esetében (amikor is $b = 0$) még egyszerűbb alakot ölt:

$$g(y) = \frac{1}{a} f\left[\frac{y}{a}\right] \quad (57)$$

Az utóbbi alkalmat ad arra, hogy egy kis geometriai értelmezést adjunk annak, mért úgy változik a „nyújtás” hatására a sűrűségfüggvény, ahogy változik. Amikor ugyanis az X változót az a konstanssal megszorozzuk, a kapott Y sűrűségfüggvénye a -szoros „tartományban” terpszkedik szét az abszcisszán. Ha nem igazítunk az ordinátaértékeken, akkor a görbe alatti terület az eredeti a -szorosára változik. Ha pl. az f sűrűségfüggvény normált volt (ami esetünkben az alapértelmezés), akkor a g alatti terület 1 helyett $1 \times a$ lenne. Az a -val való osztás értelme tehát az, hogy g is 1-re normált legyen.

A következőkben két érdekes alkalmazását adjuk példaképp a (48) eredménynek. Mindkettő az exponenciális élettartam-eloszlással kapcsolatos. Hogy a (48) formulát kényelmesebben használhassuk, az időtengelyt egyszer x -szel, másszor y -nal fogjuk jelölni.

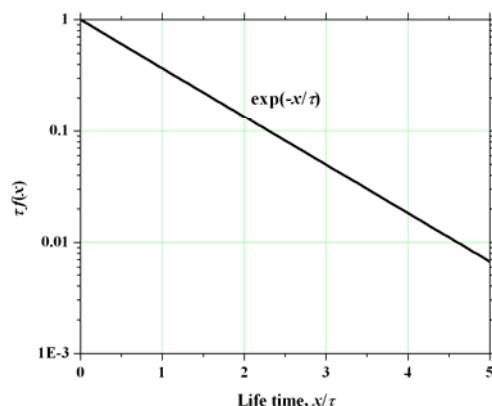
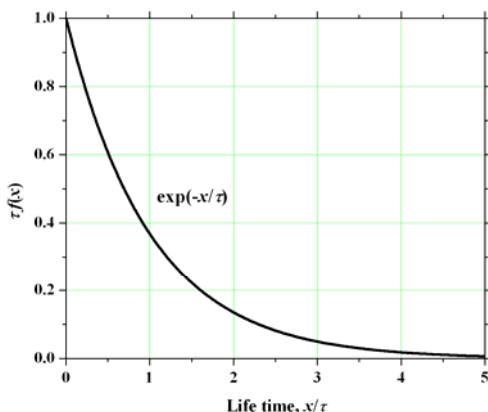
Közepes élettartam becslése néhány élettartam-adatból

A radionuklidok élettartam-eloszlása exponenciális

$$f(x) = \frac{1}{\tau} \exp\left(-\frac{x}{\tau}\right), \text{ ha } x \geq 0 \text{ (egyébként } 0) \quad (58)$$

sűrűségfüggvénnyel, ahol τ a közepes élettartam és x az idő.

A sűrűségfüggvény speciális alakja miatt kézenfekvő, hogy a közepes élettartamot közvetlenül az egyes élettartamok gyakoriságából határozzuk meg, pl. féllogaritmikus ábrázolás segítségével, amikor is az $\ln(\text{gyakoriság}) - x$ grafikonnak $-1/\tau$ meredekségű egyenest illik mutatnia a következő ábra mintájára.



A szupernehéz atomok előállításánál azonban csak néhány bomlást lehet megfigyelni. Ilyenkor sokkal előnyösebb az élettartam-eloszlás helyett az élettartamok logaritmusának eloszlását vizsgálni. Ez az adott esetben az

$$Y = \varphi(X) \equiv \ln X \quad (59)$$

nyilvánvalóan szigorúan monoton növekvő összefüggés alkalmazását jelenti, melynek inverze:

$$X = \varphi^{-1}(Y) \equiv \exp(Y). \quad (60)$$

Az új változó sűrűségfüggvénye:

$$g(y) = f[\varphi^{-1}(y)] \times \frac{d\varphi^{-1}(y)}{dy} = f[\exp(y)] \times \frac{d\exp(y)}{dy} = f[\exp(y)] \times \exp(y), \quad (61)$$

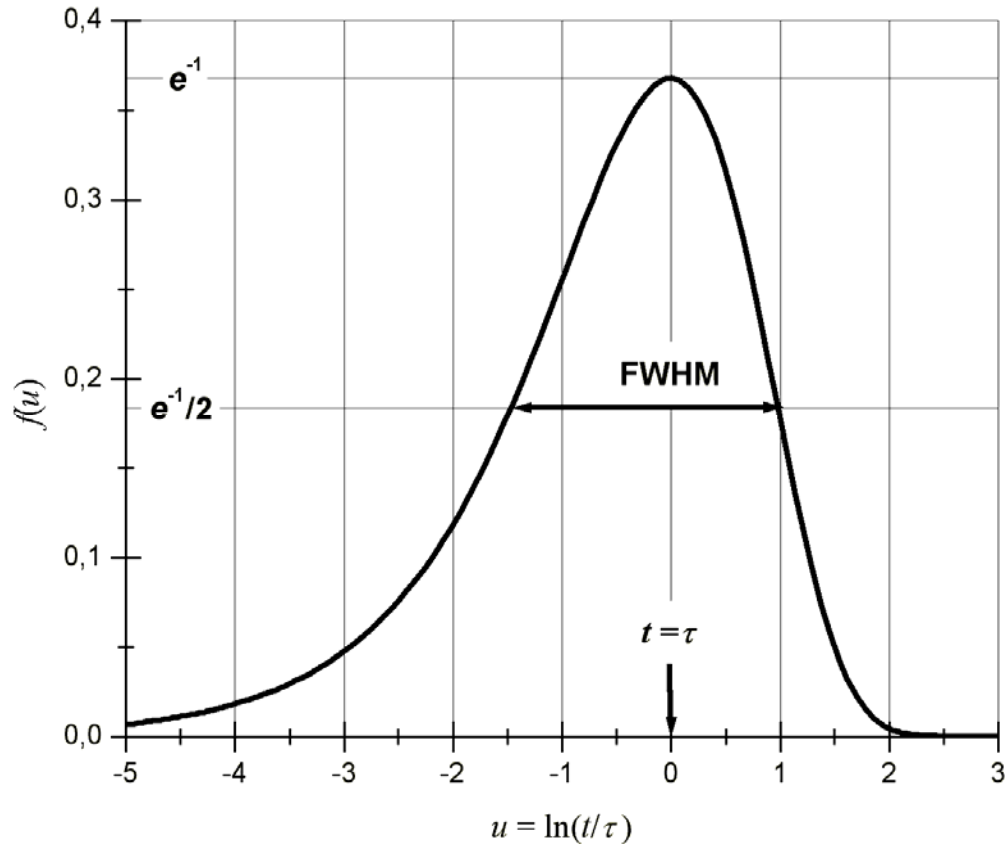
vagyis:

$$g(y) = \frac{1}{\tau} \exp\left(-\frac{\exp y}{\tau}\right) \times \exp(y) = \frac{1}{\tau} \exp\left(y - \frac{\exp y}{\tau}\right). \quad (62)$$

Ez így elég csúnyán néz ki, de deriválással rögtön látszik, hogy a g sűrűségfüggvénynek éppen az

$$y = \ln \tau \quad (63)$$

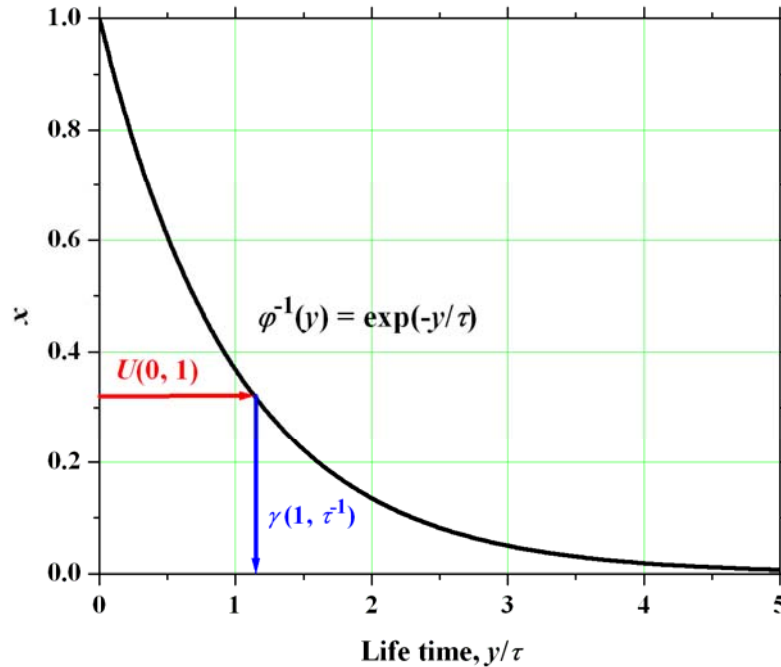
helyen van a maximuma, ami egy gyengécske hisztogram alapján is segít becslést adni a közepes élettartamra. A kivitelezés pedig roppant egyszerű, hiszen csak arról van szó, hogy a vízszintes élettartamtengely nem lineáris, hanem logaritmikus skálájú (l. a lenti ábrát).



Exponenciális eloszlású élettartamértékek logaritmusának sűrűségfüggvénye. Ezzel a trükkal egy hisztogram móduszának (maximumhelyének) meghatározására vezethető vissza a közepes élettartam becslése. Olyankor szoktak ehhez a módszerhez folyamodni, amikor túl kevés élettartam adatot lehet csak mérni, s ezért az exponenciális illesztésen alapuló τ -meghatározás ($\tau = 1/\lambda$) reménytelen.

$\gamma(1, \tau^{-1})$ eloszlású véletlen számok előállítása $U(0, 1)$ eloszlásából

Az exponenciális eloszlás sűrűségfüggvényére pillantva eléggé kézenfekvő intuitíve, hogy ha van egy olyan véletlenszám-generátorunk, amely 0 és 1 közötti (kvázi)folytonos véletlen számokat állít elő, akkor nincs más dolgunk, mint hogy ezeket a véletlen X értékeket a szigorúan monoton sűrűségfüggvény-görbe segítségével a most y -nal jelölt időtengelyre vetítsük, s a kapott véletlen Y értékek éppen ilyenek lesznek.



Hogy ez csakugyan így van, azt most is a (48) formula segítségével láthatjuk be a következő „szereposztás” alapján:

$$Y = \varphi(X) \equiv -\tau \ln X, \quad (64)$$

illetve

$$X = \varphi^{-1}(Y) \equiv \exp\left(-\frac{Y}{\tau}\right). \quad (65)$$

Ezúttal $f(x)$ a 0 és 1 között folytonos egyenletes $U(0, 1)$ eloszlás ($\mu = 1/2$ és $\sigma^2 = 1/12$) sűrűségfüggvénye, mely:

$$f(x) = \begin{cases} 0 & \text{ha } x < 0 \\ 1 & \text{ha } 0 \leq x < 1. \\ 0 & \text{ha } 1 \leq x \end{cases} \quad (66)$$

Mint hogy az (65) exponenciális függvény minden nemnegatív y értékez 0 és 1 közötti x értéket rendel, a (48) formulát most így írhatjuk:

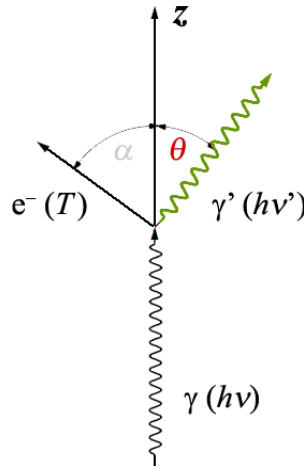
$$g(y) = 1 \times \left| \frac{d\varphi^{-1}(y)}{dy} \right| = \frac{1}{\tau} \exp\left(-\frac{y}{\tau}\right), \quad (67)$$

vagyis az Y csakugyan $\gamma(1, \tau^{-1})$ exponenciális eloszlású, ahogy kezdettől fogva sejtettük.

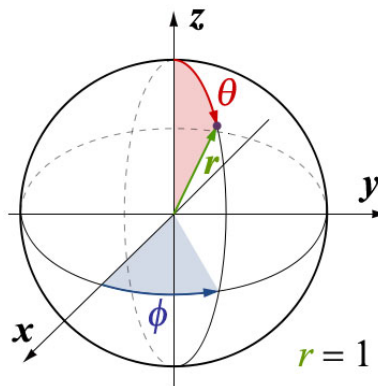
Vagyis az (64) egyenletbe táplált egyenletes eloszlású véletlen számok csakugyan exponenciális eloszlású számokat generálnak.

A Compton-kontinuum alakja és a Klein–Nishina-formula

Az alábbi ábra egy Compton-eseményt mutat. A sztori a következő: Egy $h\nu$ energiájú foton (γ) kvázirugalmasan szóródik egy kezdetben nyugvó elektronon (e^-). Az impulzusmegmaradás miatt a szóródás természetesen síkban történik. A szórt foton (γ') θ szöggel eltérül az eredeti iránytól, és az energiája $h\nu'$ -re csökken. A meglökött elektron $T = h\nu - h\nu'$ kinetikus energiára tesz szert, és a másik félsíkba szóródik az impulzusmegmaradásnak megfelelően.



1. ÁBRA. Compton-szóródás esetében az α és a θ szög az impulzusmegmaradás miatt kölcsönösen meghatározza egymást. Ezért választhatunk, hogy melyik segítségével írjuk fel az egyenleteket. Mi a θ szöveget választjuk, mely pontosabban mérhető. Az elektronhoz és a fotonokhoz rendelt nyilak hossza az impulzusokkal arányos. A fotonok esetében ez egyben az energiával való arányosságot is jelenti. Intuitíve kézenfekvő, hogy az eredeti fotonirány által meghatározott z tengelyhez képest forgási szimmetria van, vagyis *minden szóródási sík egyenértékű*, mely tartalmazza a z tengelyt. Ezért a diagram számtalan egybevágó és azonos valószínűségű térbeli esetet reprezentál.



2. ÁBRA. Az 1. ábrához tartozó különböző térbeli eseteket gömbi koordinátákkal adhatjuk meg a legegyszerűbben ([http://en.wikipedia.org/wiki/File:Spherical_Coordinates_\(Colatitude,_Longitude\).svg](http://en.wikipedia.org/wiki/File:Spherical_Coordinates_(Colatitude,_Longitude).svg)). A $0 \leq \phi \leq 2\pi$ „azimut” (a θ polárszöggel együtt) már egyértelműen azonosít egy konkrét Compton-eseményt, melynek az egységsugarú gömbön egyetlen pont felel meg. Amikor a θ -hoz tartozó $d\Omega$ térszögről beszélünk, valójában ennek a felületi pontnak egy szűk környezetére gondolunk, ill. olyasmire, amit a 3. ábra mutat.

Az alább egyenletek alapjául W.R. Leo könyvének (Techniques for Nuclear and Particle Physics Experiments, Springer-Verlag, Berlin, 1994) 2.7.2. fejezete szolgál. A legfontosabb egyenleteket dupla számozással láttam el, hogy aki akarja, könnyebben utána tudjon nézni.

A *Klein–Nishina*-formula lényegében a fenti ábrán megkülönböztethető Compton-események eloszlásáról szól. Ezt az eloszlást a $d\sigma/d\Omega$ differenciális hatáskeresztmetszettel jellemzi, amely a $d\Omega$ térszögbe szóródott fotonokkal kapcsolatos. A tengelyszimmetria miatt csak a θ polárszög jelenik meg a képletben, a differenciális hatáskeresztmetszet független a ϕ azimutttól:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{r_e^2}{2} \frac{1}{(1 + \Theta)^2} \left(1 + \cos^2 \theta + \frac{\Theta^2}{1 + \Theta} \right) \quad (2.103) \quad (68)$$

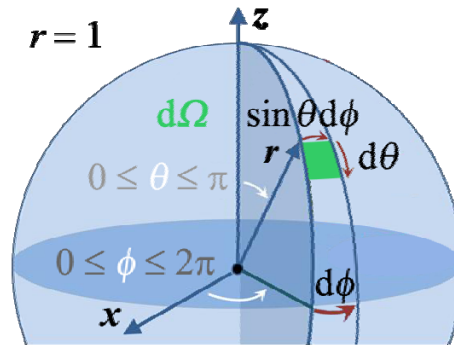
Itt Θ az alábbi kifejezés rövidítése:

$$\Theta \equiv \gamma(1 - \cos \theta) \quad (69)$$

ahol

$$\gamma \equiv \frac{h\nu}{m_e c^2} \quad (70)$$

a foton eredeti energiája az elektron nyugalmi energiájában (511 keV) mint egységben megadva.



3. ÁBRA. A $d\Omega$ térszög, melyről a szövegben szó esik, egy olyan (általában) gömbi négyszöghöz hasonló felületelem területe (csak kisebb), mint a zöld tartomány az ábrán látható egységsugarú gömbön. Tehát: $d\Omega = \sin \theta d\phi d\theta$.
http://en.wikipedia.org/wiki/File:Volume_element_spherical_coordinates.JPG

A (68) egyenletet már csak az alábbi faktoriall kell megszorozni

$$\frac{d\Omega}{d\phi d\theta} = \sin \theta, \quad (71)$$

hogy megkapjuk ϕ és θ normálatlan kétdimenziós sűrűségfüggvényét:

$$\frac{d\sigma}{d\phi d\theta} = \frac{d\sigma}{d\Omega} \frac{d\Omega}{d\phi d\theta} = \frac{r_e^2}{2} \frac{1}{(1 + \Theta)^2} \left(1 + \cos^2 \theta + \frac{\Theta^2}{1 + \Theta} \right) \sin \theta. \quad (72)$$

Amint látjuk, a sűrűségfüggvényben most sem szerepel a ϕ azimut, ezért integrálással ebben az alakban kapjuk meg a θ polárszög egydimenziós sűrűségfüggvényét:

$$\frac{d\sigma}{d\theta} = \int_0^{2\pi} \frac{d\sigma}{d\phi d\theta} d\phi = r_e^2 \pi \frac{1}{(1 + \Theta)^2} \left(1 + \cos^2 \theta + \frac{\Theta^2}{1 + \Theta} \right) \sin \theta. \quad (73)$$

A (73) egyenlet közbülső lépés ahhoz, hogy a Compton-elektron energiaeloszlását meghatározzuk. Ehhez azonban szükség van az elektronenergia szögfüggését leíró összefüggésre is. A levezetést l. a Bantu (<http://nasa.web.elte.hu/lne/index.html>) függelékében:

$$\varepsilon = \frac{\Theta}{1 + \Theta} \quad (2.102) \quad (74)$$

ahol ε az elektron kinetikus energiája az eredeti fotonenergiához mint egységhez viszonyítva:

$$\varepsilon \equiv \frac{T}{h\nu}. \quad (75)$$

Könnyű belátni, hogy az elektron $\varepsilon(\theta)$ kinetikus energiája *szigorúan monoton növekvő* függvénye a θ polárszögnek. Az elektronenergia tehát legfeljebb a következő értéket veheti fel:

$$\varepsilon_{\max} = \frac{\gamma(1 - \cos \pi)}{1 + \gamma(1 - \cos \pi)} = \frac{2\gamma}{1 + 2\gamma} < 1. \quad (76)$$

Fizikailag ez azzal függ össze, hogy a 180° -kal visszaszórt fotonnak a legnagyobb az energiavesztesége. Az a tény, hogy

$$\varepsilon_{\max} < 1 \quad (77)$$

azt jelenti, hogy ebben a folyamatban a foton nem adhatja át a teljes energiáját egy (rugalmasan meglökött Compton-) elektronnak. (Ezzel szemben a rugalmatlan fotoeffektusban a teljes energiáját átadhatja, és ezzel meg is szűnik létezni.)

Fentebb azért hangsúlyoztam a szigorúan monoton növekedést a (74) egyenlettel kapcsolatban, mert ez kell ahhoz, hogy a (49) egyenletben foglalt receptet használni tudjuk arra, hogy a θ változóról áttérjünk az ε változóra a $\theta(\varepsilon)$ függvény alapján, mely az $\varepsilon(\theta)$ inverze:

$$\frac{d\sigma}{d\varepsilon} = r_e^2 \pi \frac{1}{[1 + \Theta(\theta(\varepsilon))]^2} \left(1 + \cos^2 \theta(\varepsilon) + \frac{\Theta(\theta(\varepsilon))^2}{1 + \Theta(\theta(\varepsilon))} \right) \sin \theta(\varepsilon) \times \frac{d\theta(\varepsilon)}{d\varepsilon}. \quad (78)$$

A kijelölt behelyettesítések elvégzése és a derivált kiszámítása áttekinthetőbb, ha (magyarázat nélkül) felírok néhány egyszerű összefüggést az előzőek alapján.

$$\Theta = \frac{\varepsilon}{1 - \varepsilon} \quad (79)$$

$$1 + \Theta = \frac{1}{1 - \varepsilon} \quad (80)$$

$$\frac{\Theta}{1 + \Theta} = \varepsilon \quad (81)$$

$$\cos \theta = 1 - \frac{\varepsilon}{\gamma(1 - \varepsilon)} \quad (82)$$

$$\cos^2 \theta = 1 - \frac{2\varepsilon}{\gamma(1 - \varepsilon)} + \frac{\varepsilon^2}{\gamma^2(1 - \varepsilon)^2} \quad (83)$$

$$\sin \theta = \sqrt{\frac{2\varepsilon}{\gamma(1-\varepsilon)} - \frac{\varepsilon^2}{\gamma^2(1-\varepsilon)^2}} \quad (84)$$

Ezekkel könnyen elvégezhetők a (78) egyenlet első (tehát az \times szorzójel előtti) tényezőjének helyettesítései, továbbá explicite is megadható a $\theta(\varepsilon)$ inverz függvény:

$$\theta = \arccos\left(1 - \frac{\varepsilon}{\gamma(1-\varepsilon)}\right) \quad (85)$$

Az utóbbiból a (78) egyenletben szereplő második tényezőre ezt kapjuk:

$$\frac{d\theta}{d\varepsilon} = \frac{1}{\sqrt{\frac{2\varepsilon}{\gamma(1-\varepsilon)} + \frac{\varepsilon^2}{\gamma^2(1-\varepsilon)^2}}} \frac{1}{\gamma(1-\varepsilon)^2} \quad (86)$$

Behelyettesítések, egyszerűsítések és átrendezés után végül is a (78) egyenletből ezt kapjuk:

$$\frac{d\sigma}{d\varepsilon} = \frac{\pi r_e^2}{\gamma} \left[2 + \frac{\varepsilon}{\gamma^2(1-\varepsilon)} + \frac{\varepsilon}{1-\varepsilon} \left(\varepsilon - \frac{2}{\gamma} \right) \right] \quad (87)$$

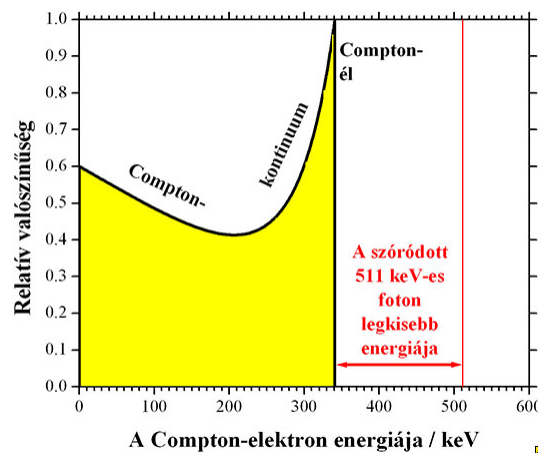
ami a T változóra visszatérve a következőt adja:

$$\frac{d\sigma}{dT} = \frac{\pi r_e^2}{m_e c^2 \gamma^2} \left[2 + \frac{\varepsilon^2}{\gamma^2(1-\varepsilon)^2} + \frac{\varepsilon}{1-\varepsilon} \left(\varepsilon - \frac{2}{\gamma} \right) \right] \quad (2.109) \quad (88)$$

Az utóbbi két egyenlet lényeges része az

$$f(\varepsilon) = 2 + \frac{\varepsilon}{\gamma^2(1-\varepsilon)} + \frac{\varepsilon}{1-\varepsilon} \left(\varepsilon - \frac{2}{\gamma} \right) \quad (89)$$

normálatlan sűrűségfüggvény, melyet az alábbi ábra szemléltet speciálisan $\gamma = 1$ -re, ami éppen az 511 keV-es annihilációs sugárzásnak felel meg:



4. ÁBRA. A sárgával kitöltött zóna a Compton-elektron számára lehetséges energiaértékek fölött húzódik. Az ordináta értékek az elektronenergiák gyakoriságát tükrözik. A piros függőleges | az eredeti foton energiáját jelzi.

4.2. Konvolúció és dekonvolúció

A konvolúció és a független valószínűségi változók összege

Ha X és Y független (folytonos) valószínűségi változók f_X és f_Y sűrűségfüggvénnyel, ill. F_X és F_Y eloszlásfüggvénnyel, akkor a $Z = X + Y$ valószínűségi változó f_{X+Y} sűrűségfüggvényét, ill. F_{X+Y} eloszlásfüggvényét f_X és f_Y , ill. F_X és F_Y konvolúciója adja meg:

$$f_{X+Y}(z) = f_X * f_Y(z) \equiv \int_{-\infty}^{+\infty} f_X(z-u)f_Y(u)du \quad (90)$$

$$F_{X+Y}(z) = F_X * F_Y(z) \equiv \int_{-\infty}^{+\infty} F_X(z-u)dF_Y(u) = \int_{-\infty}^{+\infty} F_X(z-u)f_Y(u)du \quad (91)$$

Az f_{X+Y} -t meghatározó integrál neve a **sűrűségfüggvények konvolúciója**, az F_{X+Y} -t meghatározó pedig röviden az **eloszlások konvolúciója**. (Az utóbbi kiszámítható akkor is, ha X diszkrét, véges sok spektrumponnal. Ezután már csak egy deriválás kell, hogy a sűrűségfüggvényt is megkapjuk.) A konvolúcióképzés **kommutatív művelet**, akárcsak az összeadás. Ha az eloszlások olyanok, hogy $f_i(u) = 0$, ha $u \leq a_i$, akkor:

$$f_1 * f_2(z) = \int_{a_2}^{z-a_1} f_1(z-u)f_2(u)du \quad (92)$$

Ha tehát speciálisan $a_1 = a_2 = 0$, akkor az integrálás 0 és z között történik.

Egy tanulságos példa

Tekintsük a 0 és 1 között folytonos egyenletes $U(0, 1)$ eloszlást ($\mu = 1/2$ és $\sigma^2 = 1/12$), melynek sűrűségfüggvénye nyilván:

$$f(x) = 1, \text{ ha } 0 \leq x < 1 \text{ (egyébként pedig } 0). \quad (93)$$

Például ilyen „kvázifolytonos” véletlen számokat produkál legtöbb kalkulátor. Mi van, ha az ilyen számokat párosával összeadjuk? Az eredmény (z) nyilván 0 és 2 közé esik, de milyen lesz az összegek eloszlása? Az $U * U$ eloszlás sűrűségfüggvényét a következő „konvolúcióhatvány” adja:

$$f * f(z) = \int_0^z f(z-u)f(u)du \quad (94)$$

Válasszuk külön a $0 \leq z < 1$ és az $1 \leq z < 2$ eseteket.

Ha $0 \leq z < 1$, akkor:

$$f * f(z) = \int_0^z f(z-u)f(u)du = \int_0^z 1 du = z, \quad (95)$$

mert mind $f(u)$, mind pedig $f(z-u)$ azonosan egyenlő 1-gyel az integrálás intervallumában.

Ha $1 \leq z < 2$, akkor:

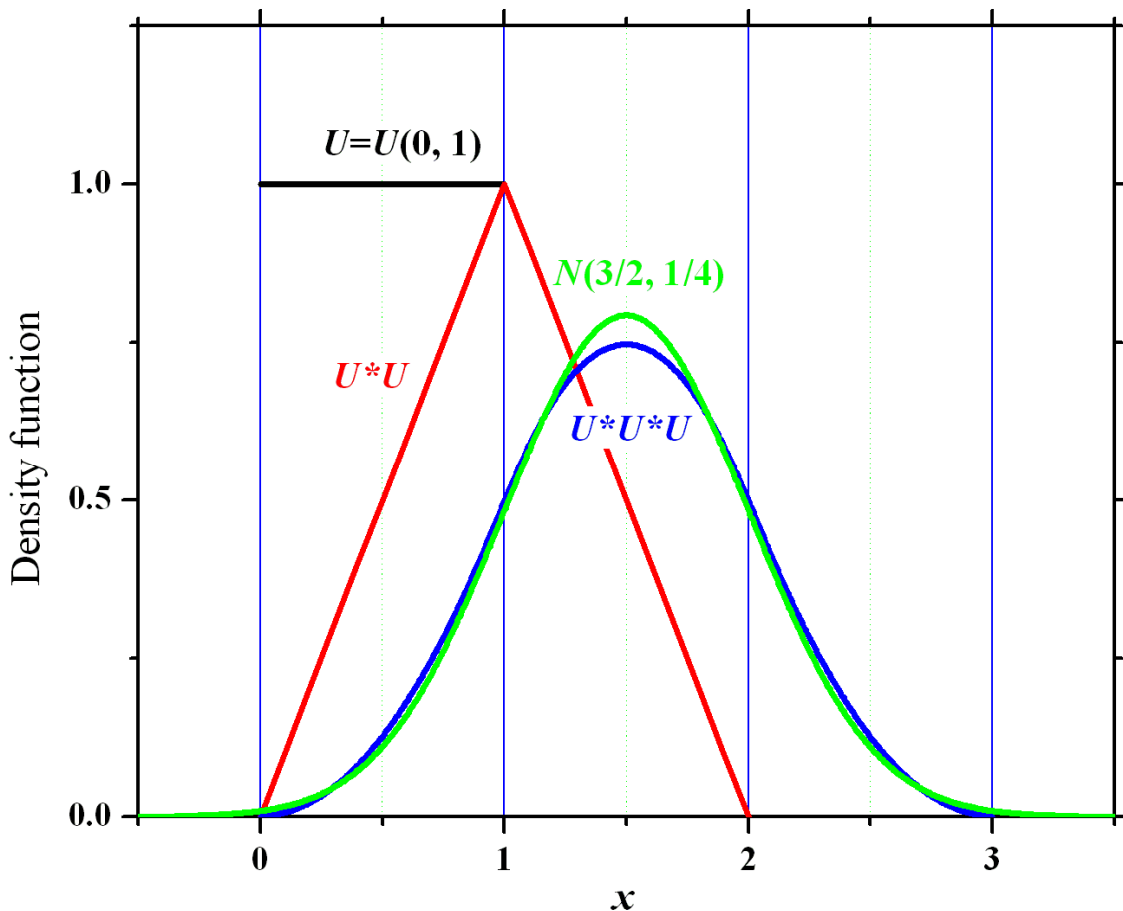
$$f * f(z) = \int_0^1 f(z-u)1 \, du + \int_1^z f(z-u)0 \, du = \int_0^1 f(z-u) \, du = \int_{z-1}^z f(t) \, dt = \int_{z-1}^1 1 \, dt + \int_1^z 0 \, dt = 2-z. \quad (96)$$

Vegyük észre, hogy amit kaptunk:

$$f * f(x) = \begin{cases} x & \text{ha } 0 \leq x < 1 \\ 2-x & \text{ha } 1 \leq x < 2 \end{cases}, \text{ egyébként pedig } 0, \quad (97)$$

egy olyan egyenlő szárú háromszöget határoz meg, melynek alapja 0 és 2 között terpszkedik el a számegeyenesen, a magassága pedig éppen 1 (l. az alábbi ábra piros alakzatát). Az ilyen háromszög területe pontosan 1, mutatva, hogy csakugyan normált sűrűségfüggvény az, amit kaptunk.

Aki kíváncsi, némi izzadság árán kiszámolhatja az $f * f * f(z)$ konvolúcióhatványt is a fenti eredmény segítségével. Amint az alábbi ábrán látjuk, az $U * U * U$ eloszlásra már Gauss-görbeszerű sűrűségfüggvény jön ki, jól érzékeltetve a centrális határeloszlás-tétel érvényesülési tendenciáját. [Az ábrán az $N(3/2, 1/4)$ címke az $U * U * U$ várható értékével és szórásával rendelkező – tehát $\mu = 3/2$ és $\sigma = 1/2$, ill. $\sigma^2 = 1/4$ jellemzőjű – normális eloszlásra utal.]



Ha valaki ellenőrizni szeretné magát, elárulom a számítás végeredményét is:

$$f * f * f(x) = \begin{cases} \frac{x^2}{2} & \text{ha } 0 \leq x < 1 \\ -x^2 + 3x - \frac{3}{2} & \text{ha } 1 \leq x < 2, \text{ egyébként pedig } 0. \\ \frac{(x-3)^2}{2} & \text{ha } 2 \leq x < 3 \end{cases} \quad (98)$$

Amint látjuk, a Gauss-görbeszerű függvény három másodfokú parabolából van összetákolva. A kapott görbe nemcsak folytonos, de az első deriváltja is az. Viszont a „simaság” kritériumát nem elégíti ki, mert a második deriválnak szakadása van az „összeragasztás” helyein ($x = 1$ és 2).

Megjegyzés: A nevezetes eloszlások közül több is konvolúcióhatványként értelmezhető:

- A $B(n, p)$ binomiális eloszlás a $B(1, p)$ Bernoulli-eloszlás n -edik konvolúcióhatványa.
- A $\gamma(n, \nu)$ gamma-eloszlás a $\gamma(1, \nu)$ exponenciális eloszlás n -edik konvolúcióhatványa (persze csak ha n egész).
- A $\chi^2(n)$ ká-négyzet eloszlást úgy kapjuk, hogy veszünk egy $N(0, 1)$ standard normális eloszlású változót, azt négyzetre emeljük, majd a kapott eloszlás n -edik konvolúcióhatványát képezzük.

Dekonvolúció

A karakterisztikus függvény (azaz a Fourier-transzformáció) érdekes tulajdonságát kihasználva elvileg egyszerű recept kínálkozik az egyik komponens kifejezésére – más szóval a dekonvolúcióra – egy konvolúció jellegű (sűrűség)függvényből. Tudniillik:

$$\varphi(f_{X+Y}) = \varphi(f_X * f_Y) = \varphi(f_X)\varphi(f_Y) \quad (99)$$

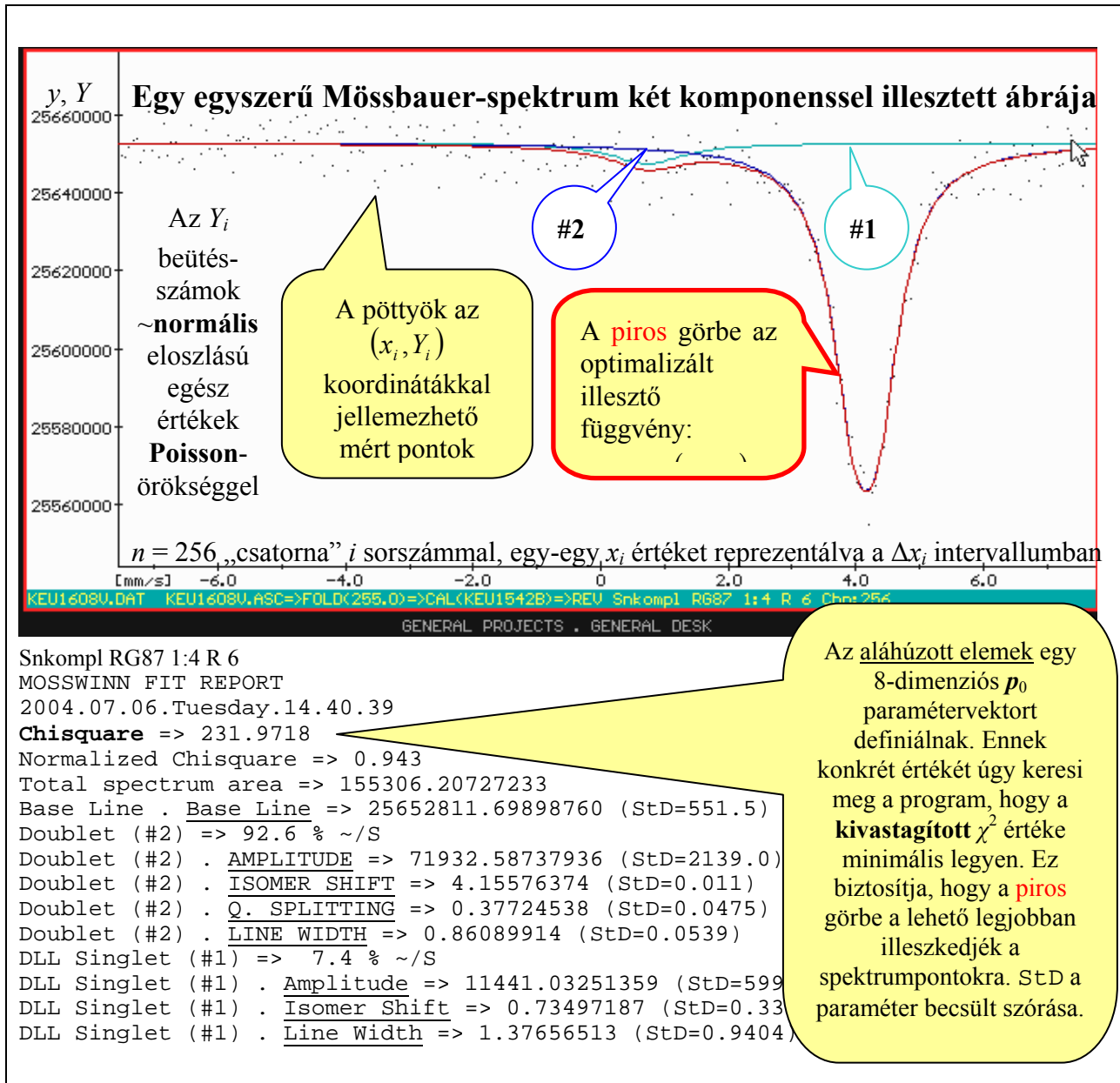
Emiatt pl. az X sűrűségfüggvénye így fejezhető ki az inverz transzformáció segítségével:

$$f_X = \varphi^{-1}\left(\frac{\varphi(f_X * f_Y)}{\varphi(f_Y)}\right) \quad (100)$$

A konvolúció/dekonvolúció jelentősége túlmutat a valószínűség-számításon, ti. a **nukleáris spektrumok** egy része konvolúció alakú integrállal írható le. Pl. a **transzmissziós Mössbauer-spektrum** olyan két függvény konvolúciójaként adódik, amelyek egyike a sugárforrásra, míg a másika az abszorbensre (mintára) jellemző. Az utóbbi paraméterként tartalmazza a spektroszkópust érdeklő valamennyi mennyiséget, ezért a **spektrumkiértékelés** bizonyos módszerei a dekonvolúció kiszámítását is magukban foglalják.

5. Spektrumillesztés

Az alább bekeretezett blokkot egy egyszerű Mössbauer-spektrum számítógépes illesztésének output adataiból állítottam össze, és az alább kifejtett terminológia jelöléseivel láttam el utólag.



Spektrumillesztés alatt annak a konkrét p_0 paramétervektornak a meghatározását értjük, amelynél az elméleti

$$y = y(x; p) \tag{101}$$

illesztő függvény által definiált

$$(x_i, y(x_i; \mathbf{p})) \quad (102)$$

ponthalmaz – vagyis az elméleti spektrum – a lehető legjobban rásimul – illeszkedik – a mért spektrum

$$(x_i, Y_i) \quad (103)$$

pontjaira. Az x_i az i -edik „csatornához” tartozó elvileg pontosan ismert függetlenváltozó-érték (pl a Doppler-sebesség egy Mössbauer-spektrum esetében), az Y_i pedig a csatornában tárolt beütésszám, mely az adott esetben egy Poisson→normális eloszlású valószínűségi változó konkrétan felvett értéke.

Az illeszkedés jóságát többféle kritérium alapján lehet jellemezni. Nukleáris mérések esetén azonban egyértelműen az ún. **súlyozott legkisebb négyzetek** módszere a legelőnyösebb, ezért csak azzal foglalkozunk. Ehhez az illesztési eljáráshoz a szemléletes **maximum-likelihood** (a. m. *legnagyobb esély*) elvének segítségével juthatunk el.

Egy jó illesztő függvénytől elvárható, hogy a \mathbf{p}_0 optimális paraméterértéknél minden i -re az illető Y_i beütésszám várható értékét szolgáltatassa:

$$E(Y_i) = y(x_i; \mathbf{p}_0) \quad (104)$$

Itt a várható értéket úgy értjük, hogy ha a spektrumot nagyon sokszor, azonos feltételek mellett felvesszük, akkor az Y_i értékek az $y(x_i; \mathbf{p}_0)$ értékek körül szóródnak.

A feladat tehát a fenti egyenletet kielégítő optimális \mathbf{p}_0 vektor meghatározása.

Ha most csak egyetlen spektrumot tekintünk, akkor annak minden (x_i, Y_i) pontjához hozzárendelhetünk egy-egy

$$P(Y_i) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_i} \exp\left(-\frac{(Y_i - y(x_i; \mathbf{p}_0))^2}{2\sigma_i^2}\right) \times \Delta Y \quad (105)$$

normális valószínűséget, ahol a $\Delta Y = 1$ szorzó az egész értékeket felvevő Y_i beütésszámok „természetes” növekménye, mely ahhoz kell, hogy a normális sűrűségfüggvényt valószínűséggé konvertáljuk. (Nevezetlen számról lévén szó, melynek értéke 1, a további képletekből ezt a szorzót nyugodtan elhagyhatjuk.)

Az egész spektrumhoz nyilván a (függetlennek tekintett) spektrumpontok valószínűségeinek produktumát, vagyis az

$$L(\mathbf{p}_0) = \prod_{i=1}^n P(Y_i) = \frac{1}{\prod_{i=1}^n (\sqrt{2\pi}\sigma_i)} \exp\left(-\frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \frac{(Y_i - y(x_i; \mathbf{p}_0))^2}{\sigma_i^2}\right) \quad (106)$$

likelihood-függvényt kell rendelnünk, ahol a produktumot, ill. a szummázást az összes csatornára (n) ki kell terjeszteni.

A maximum-likelihood módszer – amint a neve is mutatja – abból az eléggé kézenfekvő elgondolásból indul ki, hogy a mérési adatok (vagyis a konkrét spektrum) alapján azt a \mathbf{p} vektort

kell az optimális \mathbf{p}_0 legjobb becsléseként elfogadni, amelyiknél az $L(\mathbf{p})$ függvény *maximumot vesz fel*, vagyis amelyik a legnagyobb valószínűséget rendeli az adott spektrumhoz⁵.

Mivel a logaritmus monoton növekvő függvény, az $\ln L(\mathbf{p})$ függvénynek ugyanott van maximuma, ahol az $L(\mathbf{p})$ -nek. Az $L(\mathbf{p})$ függvény viszont csupán az exponensen keresztül függ \mathbf{p} -től (ott viszont negatív előjel van). Mindezeket figyelembe véve a feladat a

$$\chi^2(\mathbf{p}) = \sum_{i=1}^n \frac{(Y_i - y(x_i; \mathbf{p}))^2}{\sigma_i^2} \quad (107)$$

kifejezés (az ún. *célfüggvény*) \mathbf{p} szerinti *minimumának* meghatározása. Ezzel el is jutottunk a súlyozott legkisebb négyzetek módszeréhez.

A fenti $\chi^2(\mathbf{p})$ jelölés nem véletlen. Az $1/\sigma_i^2$ súlyokkal való szorzás és a várható értéket reprezentáló $y(x_i; \mathbf{p})$ értékek levonása ugyanis standardizálja a normális eloszlású Y_i -ket. Minthogy a

$$Z_i \equiv \frac{Y_i - y(x_i; \mathbf{p})}{\sigma_i} \quad (108)$$

valószínűségi változók már standard normális eloszlásúak, ezért a négyzetösszegük χ^2 -eloszlású valószínűségi változó lesz, elvileg n szabadságfokkal. Minthogy azonban az Y_i -k mégiscsak összefüggnek az illesztő függvényt jellemző \mathbf{p} paraméteren keresztül, az eloszlás f szabadságfoka valamivel kisebb lesz, mint az n csatornaszám (mely jellemzően legalább 256), nevezetesen:

$$f = n - \dim \mathbf{p} \quad (109)$$

ahol $\dim \mathbf{p}$ a \mathbf{p} vektor dimenziója (a példában éppen 8).

Konkrét számításoknál az ún. *célfüggvény* alábbi közelítését szokták használni:

$$\chi^2(\mathbf{p}) \approx \sum_{i=1}^n \frac{(Y_i - y(x_i; \mathbf{p}))^2}{Y_i} \Rightarrow \text{minimum (közelítő célfüggvény)} \quad (110)$$

ami a Poisson-eloszlás „öröksége”, melynél a variancia megegyezik a várható értékkel, és ezért

$$\sigma_i^2 = y(x_i; \mathbf{p}_0) \approx Y_i, \quad (111)$$

ahol – jobb híján – maga az Y_i érték szerepel mint a saját várható értékének becslése. Az okokat nem részletezve megjegyzem, hogy a fenti közelítés sok szempontból is előnyösebb, mintha a kézenfekvőbbnek tűnő

$$\sigma_i^2 \approx y(x_i; \mathbf{p}) \quad (112)$$

⁵ Ez megfelel annak az optimista kísérletezői hozzáállásnak, mely szerint egy jól elvégzett mérés a lehető legjobban tükrözi a „valóságot”. Ez ugyan nincs garantálva, ha a véletlen szerephez jut, de mégis a legjobb tipp. Gondoljunk arra, hogy ha 10 darab egyforma érmét feldobna valaki, és meg kéne tippelni a kapott fejek konkrét számát, akkor az 5 volna a legésszerűbb választás akkor is, ha tudjuk, hogy a dobott érték kisebb valószínűséggel lesz éppen 5 (24,6%), mint 5-től különböző érték (75,4%). Természetesen azért ez a legjobb tipp, mert a többi kimenetelnek még kisebb az esélye (pl. a 4-é, ill. a 6-é már csak 20,5%).

helyettesítést alkalmaztuk volna.

A közelítő célfüggvény minimalizálásához meg kell határoznunk a következő egyenletrendszer nemtriviális megoldását:

$$\frac{\partial}{\partial p_k} \left(\sum_{i=1}^n \frac{(Y_i - y(x_i; \mathbf{p}))^2}{Y_i} \right) = 0 \quad k = 1, 2, \dots, \dim \mathbf{p}. \quad (113)$$

A fenti egyenletrendszer megoldására nem térünk ki, hiszen számtalan kész programot találunk akár lineáris, akár nemlineáris egyenletrendszerek megoldására. Érdekes viszont meggondolni, hogyan értelmezzük azt a legkisebb χ^2 -értéket, amelyet az illesztő programok többnyire meg szoktak adni a futás végén.

Annak ellenére, hogy a konkrét χ^2 -érték minimalizáló eljárás eredménye, nem okvetlenül a legkisebb χ^2 -et adó illesztés a legjobb, hanem az, amelyik a legközelebb van a χ^2 -eloszlás várható értékét reprezentáló f szabadságfokhoz, bár kétségtelen, hogy 100 eset közül 99-ben azért nem vagyunk elégedettek az illesztéssel, mert túl nagyok találjuk a χ^2 -értéket. Ennek az az oka, hogy a felhasznált illesztő függvény többé-kevésbé mindig tökéletlen. Durva hiba pl., ha a \mathbf{p} vektor dimenzióját túl kicsire becsüljük (pl. amikor Mössbauer-spektrumot túl kevés komponenssel próbáljuk illeszteni), de hibát okoz az is, ha az elemi illesztő függvények nem pontosan olyan alakúak, mint amilyenek feltételezzük őket (pl. a Mössbauer-spektrum csúcsai nem mindig írhatók le tökéletesen Lorentz-görbékkel – azaz Cauchy-eloszlással).

A túl kicsi χ^2 potenciális veszélyét az ismert **Lagrange-féle interpoláció** esete érzékelteti. Lényegében arról van szó, hogy n darab síkbeli pontot annál precízebben lehet közelíteni egy polinommal, minél nagyobb a polinom fokszáma. Olyannyira igaz ez, hogy a legfeljebb $(n-1)$ -ed fokú polinomok között biztosan akad egy, amelyik az összes ponton átmegy. Ekkor természetesen a $\chi^2 = 0$ volna, ami – nemnegatív függvényről lévén szó – az abszolút minimumot jelenti. Az illeszkedés tehát a lehető legtökéletesebb lesz, holott az ilyen polinomos illesztésnek az égvilágon semmi fizikai tartalma sincs egy Mössbauer-spektroszkópus szempontjából.

Ebből az extrém példából leszűrhetünk egy általánosan használható következtetést is: túl kicsi χ^2 arra is utalhat, hogy \mathbf{p} valóságos dimenziója kisebb, mint feltételeztük. (Pl. az elemi illesztő függvények – a Lorentz-görbék – inadekvát volta miatt általában kisebb χ^2 -et kapunk, ha a Mössbauer-spektrumot a ténylegesen jelenlévőknél nagyobb számú vonallal próbáljuk illeszteni.)

Megjegyezzük, hogy némelyik illesztő program a

$$\chi_{\text{rel}}^2 = \frac{\chi^2}{f} \quad (114)$$

relatív (vagy normalizált) χ^2 -et szolgáltatja. Ennek várható értéke éppen 1, szórása pedig $\sqrt{2/f}$, vagyis annál közelebb illik esnie 1-hez, minél nagyobb volt az illesztett pontok száma ($n \approx f$). Hogy mennyire közel a közel, azt az $N(1, 2/f)$ eloszlás mondja meg, ti. a $\chi^2(f)$ eloszlás aszimptotikusan egyenlő az $N(f, 2f)$ eloszlással, ezért f arányú „zsugorítottja” – a χ_{rel}^2 – az $N(1, 2/f)$ eloszlásba megy át a zsugorítás szabályai szerint.

6. Függelék

6.1. Az átlag és a mintavariancia mint torzítatlan becslés

Mintaátlag

Idézzük fel a (12) formulát:

$$\hat{\mu} = \bar{X} \equiv \langle X \rangle \equiv \frac{1}{n} \sum_{k=1}^n X_k \quad (115)$$

Eredetileg nem hangsúlyoztam külön azt a tényt, hogy az átlagolásban szereplő X_k -kat független, egyforma eloszlású valószínűségi változónak kell tekinteni. Ezért mindegyiknek ugyanaz a μ a várható értéke. Emiatt:

$$E(\bar{X}) = E\left(\frac{1}{n} \sum_{k=1}^n X_k\right) = \frac{1}{n} \sum_{k=1}^n E(X_k) = \frac{1}{n} \sum_{k=1}^n \mu = \frac{1}{n} n\mu = \mu \quad (116)$$

Vagyis a mintaátlag csakugyan torzítatlan becslést szolgáltat a várható értékre.

Mintavariancia

Idézzük fel most a (16) formulát:

$$\hat{\sigma}^2 = s^2 \equiv \frac{1}{n-1} \sum_{k=1}^n (X_k - \bar{X})^2 \quad (117)$$

Ha a józanésznek megfelelő közönséges számtani közepet használnánk becslésre a fenti formula helyett (amely egyébként megegyezik az aszimptotikusan torzítatlan maximum likelihood becsléssel), akkor a (18) egyenlethez hasonló képletet kapnánk, amelyet nyomban átalakítunk:

$$\begin{aligned} s'^2 &\equiv \frac{1}{n} \sum_{k=1}^n (X_k - \bar{X})^2 = \frac{1}{n} \sum_{k=1}^n [(X_k - \mu) - (\bar{X} - \mu)]^2 = \\ &= \frac{1}{n} \sum_{k=1}^n (X_k - \mu)^2 - \frac{2}{n} \sum_{k=1}^n (X_k - \mu)(\bar{X} - \mu) + \frac{1}{n} \sum_{k=1}^n (\bar{X} - \mu)^2 = \\ &= \frac{1}{n} \sum_{k=1}^n (X_k - \mu)^2 - \frac{2(\bar{X} - \mu)}{n} \sum_{k=1}^n (X_k - \mu) + (\bar{X} - \mu)^2 \end{aligned} \quad (118)$$

Itt az átalakításnál figyelembe vettük, hogy az \bar{X} átlag a szummázás szempontjából állandónak tekinthető, ezért abból kiemelhető. Az utolsó sor közepén szereplő szumma egy átlag része, ezért:

$$\begin{aligned} s'^2 &\equiv \frac{1}{n} \sum_{k=1}^n (X_k - \mu)^2 - 2(\bar{X} - \mu)(X_k - \mu) + (\bar{X} - \mu)^2 = \\ &= \frac{1}{n} \sum_{k=1}^n (X_k - \mu)^2 - 2(\bar{X} - \mu)^2 + (\bar{X} - \mu)^2 = \frac{1}{n} \sum_{k=1}^n (X_k - \mu)^2 - (\bar{X} - \mu)^2 \end{aligned} \quad (119)$$

Innen:

$$\begin{aligned} E(s'^2) &= E\left(\frac{1}{n} \sum_{k=1}^n (X_k - \mu)^2 - (\bar{X} - \mu)^2\right) = \frac{1}{n} \sum_{k=1}^n E[(X_k - \mu)^2] - E[(\bar{X} - \mu)^2] = \\ &= \frac{1}{n} \sum_{k=1}^n \sigma^2 - E[(\bar{X} - \mu)^2] = \sigma^2 - D^2(\bar{X} - \mu) = \sigma^2 - D^2(\bar{X}) \end{aligned} \quad (120)$$

Már csak a $D^2(\bar{X})$ kifejezés vár kiértékelésre, és kész is vagyunk:

$$D^2(\bar{X}) = D^2\left(\frac{1}{n} \sum_{k=1}^n X_k\right) = \frac{1}{n^2} \sum_{k=1}^n D^2(X_k) = \frac{1}{n^2} \sum_{k=1}^n \sigma^2 = \frac{1}{n^2} n \sigma^2 = \frac{1}{n} \sigma^2 \quad (121)$$

Ebből:

$$E(s'^2) = \sigma^2 - \frac{1}{n} \sigma^2 = \frac{n-1}{n} \sigma^2 \quad (122)$$

Vagyis az s'^2 becslés valóban csak aszimptotikusan (ti. $n \rightarrow +\infty$ esetén) torzítatlan. Ha azt akarjuk, hogy minden n -re torzítatlan becslést kapjunk, akkor a torzítást „vissza kell csinálnunk”, azaz:

$$\frac{n}{n-1} s'^2 = \frac{n}{n-1} \frac{1}{n} \sum_{k=1}^n (X_k - \bar{X})^2 = \frac{1}{n-1} \sum_{k=1}^n (X_k - \bar{X})^2 = s^2 \quad (123)$$

Amit így kaptunk, az nem más, mint a mintavarianca, vagyis a korrigált empirikus szórásnégyszet. A furcsa átlagolásra nyilvánvalóan azért volt szükség, mert a várható értéket ugyanabból a mintából becsültük (ti. az \bar{X} mintaátlaggal). Ha a Mindentudó elárulná nekünk a μ várható értéket, akkor a (18) formula szimpla átlagolása szerinti becslés:

$$\hat{\sigma}^2 = \frac{1}{n} \sum_{k=1}^n (X_k - \mu)^2 \quad (124)$$

már eleve torzítatlan lenne, ahogy ezt már lényegében láttuk a (120) formula egyik részletében:

$$E(\hat{\sigma}^2) = \frac{1}{n} \sum_{k=1}^n E[(X_k - \mu)^2] = \frac{1}{n} \sum_{k=1}^n \sigma^2 = \sigma^2 \quad (125)$$

6.2. A kinetikus gázelmélet és a nevezetes eloszlások

Egydimenziós gáz sebességeloszlása (a mozgásirány megkülönböztetésével)

Az egyatomos molekulájú ideális gáz kinetikus elméletével foglalkozó könyvek majdnem mindegyike idéz vagy levezet egy ehhez hasonló képletet:

$$f(u_1) = \sqrt{\frac{m}{2\pi kT}} \exp\left(-\frac{mu_1^2}{2kT}\right), \quad (126)$$

ahol u_1 az egydimenziós sebességvektor (másképpen egy háromdimenziós \mathbf{u} sebességvektor 1. vektorkomponense, mely természetesen előjellel bír), m a gázatom tömege, k a Boltzmann-állandó, T pedig a termodinamikai hőmérséklet. Idézzük fel a normális eloszlás sűrűségfüggvényét az u_1 -gyel kapcsolatos U_1 valószínűségi változóra alkalmazva:

$$f(u_1) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{u_1 - \mu}{\sigma}\right)^2\right]. \quad (127)$$

Nem kell hozzá nagy találékonyság, hogy felfedezzük: egy olyan $N(\mu, \sigma^2)$ normális eloszlással van dolgunk, melynek várható értéke $\mu = 0$, varianciája, ill. szórása pedig a következő:

$$\sigma^2 = \frac{kT}{m}, \text{ ill. } \sigma = \sqrt{\frac{kT}{m}}. \quad (128)$$

A sebességkomponens V_1 standardizáltja:

$$V_1 = \frac{U_1}{\sqrt{\frac{kT}{m}}} = \sqrt{\frac{m}{kT}} U_1 \quad (129)$$

már $N(0, 1)$ standard normális eloszlású valószínűségi változó lesz:

$$f(v_1) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{v_1^2}{2}\right). \quad (130)$$

Vegyük észre, hogy a fenti képletben szereplő kifejezés exponensében – implicit módon – ott rejlik a kinetikus energia és a kT aránya, de a képlet maga mégsem az energiaeloszlásról szól, hanem a sebességeloszlásról. Ideje olyan lépéseket tenni, amelyek az energia eloszlását tárják elénk. De előbb egy kis kitérőre lesz szükség.

Valószínűségi változó abszolút értékének eloszlása

Elégké kézenfekvő dologról van szó, ezért akinek minden világos, bátran továbbléphet. Mi, többiek, a következő transzformációt fogjuk megvizsgálni:

$$Y = \varphi(X) \equiv |X|. \quad (131)$$

Mint hogy φ nem monoton, Y sűrűségfüggvénye nem határozható meg a (48) formula segítségével (a triviális eseteket kivéve, amikor is X tartója a pozitív félegyenesre esik). Itt jobb, ha a valószínűségi változóra nem a „mérnöki” definíciót használjuk (véletlenszerű számérték), hanem azt, amelyik a valószínűségi változó olyan halmazfüggvénynek tekinti, mely egyértelműen rendel számokat egy bizonyos megfigyelhető eseményhalmaz elemeihez. (A véletlen itt úgy jön be, hogy nem tudható előre, melyik eseményt fogjuk éppen megfigyelni a következő „kísérletben”.) Az Y sűrűségfüggvényét (g) a következő utasítások szerint kapjuk X súlyfüggvényéből (f):

- Fogd az f -et ábrázoló síkot, hajtsd össze az ordinátatengely mentén, és borítsd a bal félsíkot a jobb félsíkra.
- Add össze az összehajtott sűrűségfüggvény azonos abszcisszához tartozó értékeit a jobb oldalon – tehát a $(0, +\infty)$ félegyenes mentén –, baloldalt pedig – vagyis a $(-\infty, 0]$ félegyenesen – nullázd ki az ordinátaértékeket.
- Amit kaptál, az egy $(0, +\infty)$ -be eső tartójú eloszlás normált sűrűségfüggvénye. Ez az a g , amit kerestél.

Az eljárás közben az történt, hogy a $+|x|$ és a $-|x|$ értékek ösképét egyesítettük, majd az egyesítéshez az $|x|$ értéket rendeltük.

Ha az eredeti eloszlás sűrűségfüggvénye véletlenül szimmetrikus az ordinátatengelyre – mint pl. az $N(0, 1)$ eloszlásé –, akkor a fenti utasítások második pontja egyenértékű azzal, hogy:

- Nullázd ki a sűrűségfüggvényt az origótól balra, jobbra pedig szorozd meg 2-vel az ordinátaértékeket.

Az $N(0, 1)$ eloszlású X valószínűségi változó $|X|$ abszolút értékét tehát a következő sűrűségfüggvény jellemzi:

$$f(x) = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{\pi}} \exp\left(-\frac{x^2}{2}\right) & \text{ha } x > 0 \\ 0 & \text{ha } x \leq 0 \end{cases} . \quad (132)$$

Energiaeloszlás és dimenziószám: a χ^2 -eloszlás bevetése

Ahhoz, hogy a χ^2 -eloszlást bevethessük, át kell térnünk a sebességeloszlásról a sebesség négyzetének eloszlására. A következő transzformációt használjuk az új változóra való áttéréshez:

$$W_1 = \varphi(V_1) \equiv V_1^2 = |V_1|^2, \quad (133)$$

ahol a dupla vé (W) jelölés arra akar emlékeztetni, hogy vészer vé (VV) van a háttérben.

Nyilván nem igényel magyarázatot, hogy egy változó négyzete ugyanaz, mint a változó abszolút értékének a négyzete. Az abszolút érték eloszlásának tartója viszont (132) szerint a $(0, +\infty)$ félegyenes, ahol a négyzetfüggvény monoton növekvő, és így a (48) formula közvetlenül alkalmazható a (132) a sűrűségfüggvényre, míg a (130)-re nem. (Most már látjuk, mért kellett az iménti kitérő.) A (48) formula szerint (132) értelemszerűen helyettesített alakjából ezt kapjuk:

$$g(w_1) = f[\varphi^{-1}(w_1)] \times \frac{d\varphi^{-1}(w_1)}{dw_1} = f[\sqrt{w_1}] \times \frac{d\sqrt{w_1}}{dw_1} = f[\sqrt{w_1}] \times \frac{1}{2\sqrt{w_1}}, \quad (134)$$

mely szerint:

$$g(w_1) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \exp\left(-\frac{(\sqrt{w_1})^2}{2}\right) \times \frac{1}{2\sqrt{w_1}} = \frac{\exp\left(-\frac{w_1}{2}\right)}{\sqrt{2\pi w_1}}. \quad (135)$$

Az [eloszlások táblázata](#) segítségével – a $\sqrt{\pi} = \Gamma(1/2)$ egyenlőséget figyelembe véve – könnyen ellenőrizhetjük, hogy amit kaptunk, az éppen a $\chi^2(1)$ -eloszlás sűrűségfüggvénye.

Meglepetés ez?

Nem, ha arra gondolunk, hogy a W_1 változó olyan – egyetlen tagból álló – összegnek tekinthető, mely független $N(0, 1)$ eloszlású változók négyzeteiből tevődik össze. Az ilyen összegek ugyanis mind χ^2 -eloszlású változót generálnak; az összeg tagszáma pedig – mely a jelen esetben 1 – megadja a szabadsági fokot.

Megjegyzések:

- A w_1 mennyiség visszafejtve az egydimenziós mozgás kinetikus energiájának és a kT -nek a hányadosa. Maga az eloszlás is erről szól, nem a sebességeloszlásról.
- Ha az egydimenziós mozgást egy magasabb dimenziós (2D, 3D) euklideszi térből nézzük, akkor az 1D-s sebességet a magasabb dimenziós térben való mozgás egyik sebességkomponensének kell tekinteni. Kézenfekvő feltételezés, hogy a magasabb dimenziós térben az u_1, u_2, u_3 , ill. a v_1, v_2, v_3 sebességkomponensek, valamint a kapcsolatos w_1, w_2, w_3 energiaösszetevők egymástól független, egyforma eloszlású valószínűségi változókkal kapcsolatosak.
- Az összenergia pl. 3D-ben: $w = w_1 + w_2 + w_3$. Ez azért van így, mert a kinetikus energia a sebességvektor abszolút értékének négyzetével arányos, azt pedig a sebesség komponenseinek négyzetösszege adja (püthagoraszai összegzés: $w = v^2 = v_1^2 + v_2^2 + v_3^2$).
- A fenti levezetés joggal bátorít fel minket arra, hogy a két-, ill. háromdimenziós gáz energiaeloszlását a $\chi^2(2)$ -, ill. a $\chi^2(3)$ -eloszlás sűrűségfüggvényeként állapítsuk meg az [eloszlások táblázata](#) segítségével.

Ezek szerint 1D-ben az energiaeloszlás sűrűségfüggvénye:

$$f_1(w) = \frac{w^{k/2-1} e^{-w/2}}{2^{k/2} \Gamma(k/2)} \Big|_{k=1} = \frac{e^{-w/2}}{\sqrt{2\pi w}}. \quad (136)$$

2D-ben ugyanez így fest:

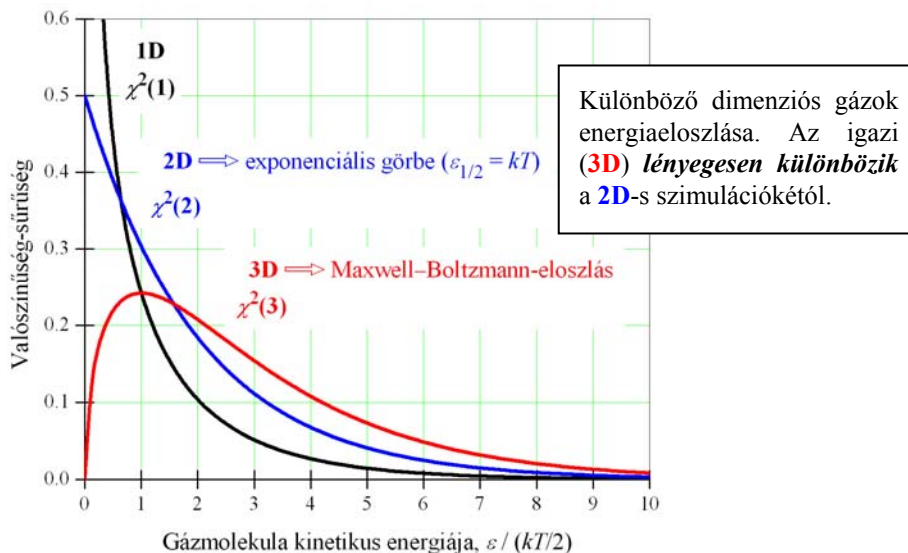
$$f_2(w) = \frac{w^{k/2-1} e^{-w/2}}{2^{k/2} \Gamma(k/2)} \Big|_{k=2} = \frac{e^{-w/2}}{2}, \quad (137)$$

tehát egy szimpla exponenciális eloszlással van dolgunk!

3D-ben ezt kapjuk:

$$f_3(w) = \frac{w^{k/2-1} e^{-w/2}}{2^{k/2} \Gamma(k/2)} \Big|_{k=3} = \frac{\sqrt{w} e^{-w/2}}{\sqrt{2\pi}}. \quad (138)$$

Az eredményeket szemléltető ábrán különösen a 2D és 3D eset grafikonját érdemes összevetni, mert markánsan különböznek. Fontos tudni, hogy a 2D-s gázmodellt használják általában az oktatási célú szimulációs algoritmusok is. (Lásd pl. azt a [PhET szimulációt](#), amelynek furcsa viselkedése egyik motiválója volt annak, hogy megírjam ezt a fejezetet.)



A 3D-s modell visszaadja a Maxwell-féle sebességeloszlásból adódó energiaeloszlási formulát (ezt egyesek Boltzmann-eloszlásnak, mások Maxwell–Boltzmann-eloszlásnak hívják). Ehhez $w/2$ helyett $\varepsilon/(kT)$ -t írunk, és a transzformáció kompenzálásaképp beírunk még egy $2/(kT)$ szorzót is:

$$f(\varepsilon) = \frac{2}{\sqrt{\pi kT}} \sqrt{\frac{\varepsilon}{kT}} \exp\left(-\frac{\varepsilon}{kT}\right), \quad (139)$$

ti. az „átírás” a W változó $kT/2$ arányú nyújtását jelenti, miközben áttérünk a gázmolekula ε kinetikus energiáját jellemző E valószínűségi változóra. A nyújtást az (57) egyenlettel kapcsolatban magyaráztam el.

Megjegyzések:

- Volt két további motivációm is ennek a fejezetnek a megírásához. Az egyik, hogy közelebb hozzam a hallgatósághoz ezeket a furcsa eloszlásokat. (Az a gyanúm, hogy minél jobban igyekeztem, annál kevésbé sikerült :-)
- A másik célom: megmutatni, milyen belső összefüggések vannak az eloszlások között. Nézzük meg pl. a gamma-eloszlás sűrűségfüggvényét a [táblázatban](#), majd alkalmazzuk a következő helyettesítéseket: $t = w$, $\nu = 1/2$, $r = 1/2$. Hasonlítsuk össze az eredményt a (138) egyenlettel. Ezek szerint a (139) Maxwell–Boltzmann-energiaeloszlás nemcsak χ^2 -eloszlásnak, hanem gamma-eloszlásnak is tekinthető!

Sebességeloszlás és dimenziószám: a χ -eloszlás bevetése

A χ -eloszlás teljesen természetes módon kerül a képbe, ha a gázmolekulák sebességeloszlását keressük – sebesség alatt a sebességvektor abszolút értékét, tehát a sebesség nagyságát értve. A következők segítenek a továbblépésben:

- A W nemcsak az energia valószínűségi változója, hanem a sebességnégyzeté is. (Emlékezzünk a jelölés háttérére: W mint VV , azaz V^2 .)

- A $W \chi^2$ -eloszlású valószínűségi változó, tehát a [táblázat](#)ban szereplő interpretáció szerint, négyzetgyöke, V, χ -eloszlású.

És ennyi elég is. Az 1D-s sebességeloszlás:

$$f_1(v) = \frac{v^{k-1} e^{-v^2/2}}{2^{k/2-1} \Gamma(k/2)} \Big|_{k=1} = \sqrt{\frac{2}{\pi}} e^{-v^2/2}. \quad (140)$$

Ez az eredmény egyrészt nem meglepő, másrészt megnyugtató, hiszen visszakaptuk a (132) egyenletet, mely az egydimenziós mozgás sebességéről szól, tekintet nélkül a mozgás irányára.

A 2D-s sebességeloszlás:

$$f_2(v) = \frac{v^{k-1} e^{-v^2/2}}{2^{k/2-1} \Gamma(k/2)} \Big|_{k=2} = v e^{-v^2/2}. \quad (141)$$

És végül az igazi, a 3D-s sebességeloszlás:

$$f_3(v) = \frac{v^{k-1} e^{-v^2/2}}{2^{k/2-1} \Gamma(k/2)} \Big|_{k=3} = \sqrt{\frac{2}{\pi}} v^2 e^{-v^2/2}. \quad (142)$$

A 3D-s modell a Maxwell-féle sebességeloszlást szolgáltatja. Ehhez csak „vissza kell csinálnunk” a (129) transzformációt:

$$v = \sqrt{\frac{m}{kT}} u, \quad (143)$$

nem feledkezve meg a nyújtás miatt alkalmazandó – és az (57) egyenlettel kapcsolatban elmagyarázott – szorzóról, mely biztosítja, hogy 1-re normált sűrűségfüggvényt kapjunk:

$$f(u) = \sqrt{\frac{m}{kT}} \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{mu^2}{kT} e^{-mu^2/(2kT)} = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \left(\frac{m}{kT}\right)^{3/2} u^2 \exp\left(-\frac{mu^2}{2kT}\right). \quad (144)$$

