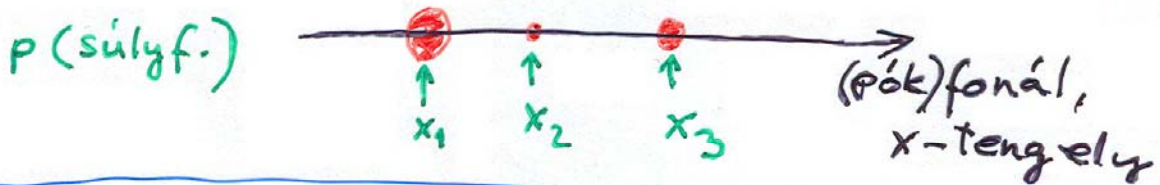
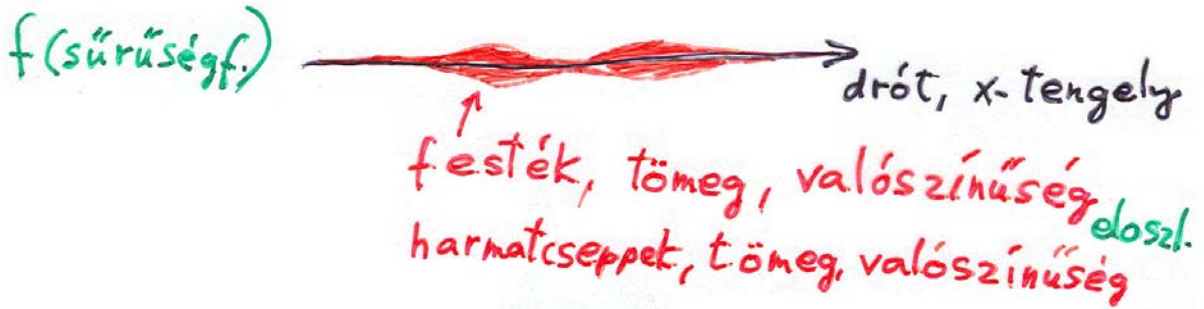


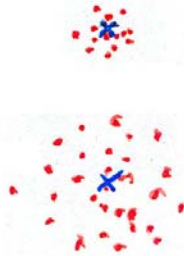
## TARTALOMJEGYZÉK

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

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
<b>4.2. Konvolúció és dekonvolúció .....</b>	<b>25</b>
A konvolúció és a független valószínűségi változók összege.....	25
Dekonvolúció.....	27
<b>5. SPEKTRUMILLESZTÉS .....</b>	<b>28</b>
<b>6. FÜGGELÉK.....</b>	<b>32</b>
<b>6.1. Az átlag és a mintavariancia mint torzítatlan becslés.....</b>	<b>32</b>
Mintaátlag .....	32
Mintavariancia .....	32
<b>6.2. A kinetikus gázelmélet és a nevezetes eloszlások.....</b>	<b>34</b>
Egydimenziós gáz sebességeloszlása (a mozgásirány megkülönböztetésével).....	34
Valószínűségi változó abszolút értékének eloszlása .....	34
Energiaeloszlás és dimenziószám: a $\chi^2$ -eloszlás bevetése .....	35
Sebességeloszlás és dimenziószám: a $\chi$ -eloszlás bevetése.....	37



Várható érték:  
(hol a közepe?)

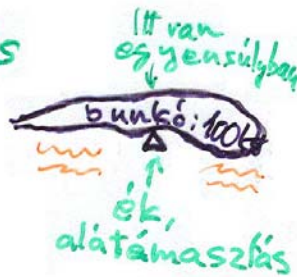
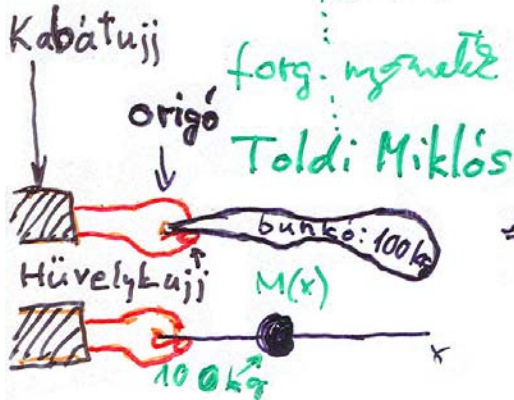


Szórás

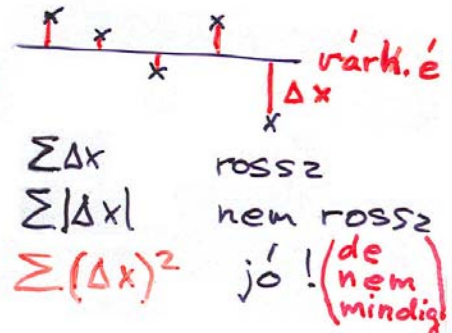
(mennyire terhet el a közepétől?)

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

spektrumponthoz 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:

$$\mu = x_{1/2} = m = c \tag{6}$$

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

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

## 1.2. Eloszlások "szóródására" jellemző paraméterek

### Variancia/szórásnégyzet

$X$  varianciája/szórásnégyzete

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

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

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

### Relatív szórás

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

$$\sigma_{\text{rel}} \equiv \frac{\sigma}{\mu} \tag{10}$$

### Abszolút közepes eltérés

$X$  (abszolút) közepes eltérése

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

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: " $\mu$  becsült 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 meglepő alakú (hiszen "elrontott" átlagról van szó). A formula használatát az indokolja, hogy az így kapott becslés torzítatlan<sup>1</sup>, 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  $\mu$  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:

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

---

<sup>1</sup> 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) sűrűségfüggvénye<sup>2</sup>. 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 normálva<sup>4</sup>. 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:

<sup>2</sup> 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.

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

<sup>4</sup> 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. Függtelenség, 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 egyszimmetrikus 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 variáciája

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 = $\begin{cases} 1 & \text{ha } p \geq q \\ 0 & \text{ha } p < q \end{cases}$ $D/E = \sqrt{\frac{q}{p}}$
$B(n, p)$	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	$P(X = x; \mu) = \frac{\mu^x}{x!} e^{-\mu} \quad (x = 0, 1, 2, \dots)$	$\mu$	$\mu$	módusz = $\begin{cases} \mu - 1 \text{ és } \mu \\ [\mu] \end{cases}$ ha $\mu$ egész ha $\mu$ 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 <math>\Gamma(r)</math> 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)	$f(x) = \frac{1}{\sigma} f_{01}\left(\frac{x-\mu}{\sigma}\right) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{x-\mu}{\sigma}\right)^2\right]$ $F(x) = F_{01}\left(\frac{x-\mu}{\sigma}\right) = \frac{1}{2}\left[1 + \operatorname{erf}\left(\frac{1}{\sqrt{2}}\frac{x-\mu}{\sigma}\right)\right], \text{ ahol}$ $\operatorname{erf} x = -\operatorname{erf}(-x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x \exp(-t^2) dt$	$\mu$	$\sigma^2$	medián, módusz = $\mu$ várható abszolút eltérés = $\sqrt{2/\pi} \sigma \approx 0,798\sigma$ kvartilis terjedelem = $1,348\sigma$ FWHM = $2\sqrt{2 \ln 2} \sigma \approx 2,355\sigma$ $D/E = \frac{\mu}{\sigma}$ $f$ inflexiós pontja = $\mu \pm \sigma$

$\chi^2(k)$	$\chi^2$ (khi-négyzet) eloszlás (l. <a href="#">3.</a> 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 = $k-2$ $D/E = \sqrt{\frac{2}{k}}$
$\chi(k)$	$\chi$ (khi-) eloszlás (l. <a href="#">4.</a> 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. = $2\gamma$ $f$ 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  $\varphi$  egy szigorúan monoton függvény.

A szigorú monotonitás kölcsönösen egyértelmű kapcsolatot létesít a megfelelő  $X$  &  $Y$  értékek között, ezért létezik egy  $\varphi^{-1}$  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  $\varphi$ .)
2. Mondjuk, hogy a kapcsolat kölcsönösen egyértelmű, ezért:  $x = x(y)$ . (Ez volt a  $\varphi^{-1}$ .)

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 ( $\leq 0$ ), 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  $\varphi$  monoton növekvő/csökkenő pozitív/negatív deriválttal, akkor az inverze,  $\varphi^{-1}$ , is pontosan olyan tulajdonságú.

Óvatosságból kezeljük külön először a monoton növekvő  $\varphi$  esetét a monoton csökkenőtől.

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

Ha viszont  $\varphi$  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  $\varphi$ -hez kisebb  $\varphi^{-1}$  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  $\varphi$  monoton csökkenése miatt  $\varphi^{-1}$  deriváltja negatív volt. A kapott formula megegyezik a bekeretezettel [(48)], tehát az a szigorúan monoton  $\varphi$  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.

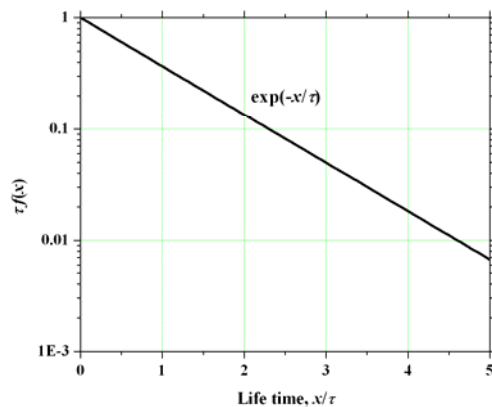
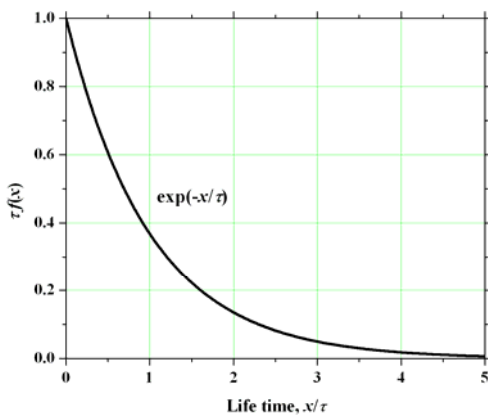
### Közepes élettartam becslése néhány élettartam-adatból

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  $\tau$  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:

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

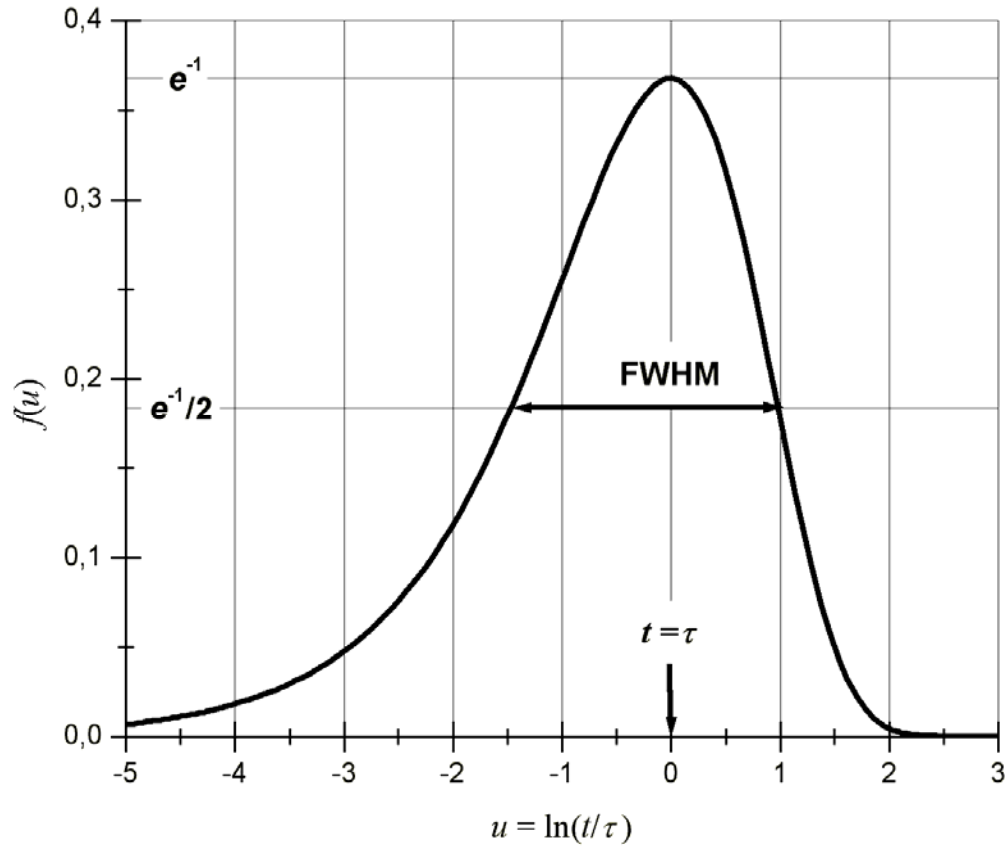
vagyis:

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

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

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

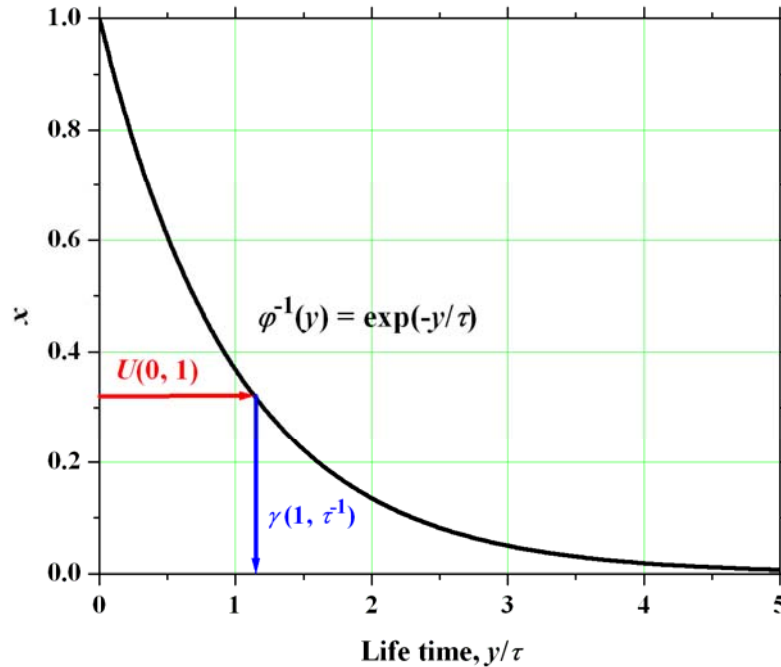
helyen van a maximuma, ami egy gyengécske hisztogram alapján is segít becslést adni a közepes élettartamra. A kivitelezés pedig roppant egyszerű, hiszen csak arról van szó, hogy a vízszintes élettartamtengely nem lineáris, hanem logaritmikus skálájú (l. a lenti ábrát).



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  $\tau$ -meghatározás ( $\tau = 1/\lambda$ ) reménytelen.

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

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:

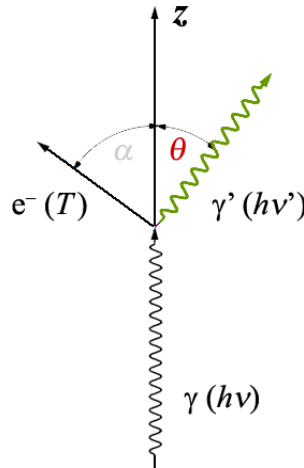
$$g(y) = 1 \times \left| \frac{d\varphi^{-1}(y)}{dy} \right| = \frac{1}{\tau} \exp\left(-\frac{y}{\tau}\right), \quad (67)$$

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

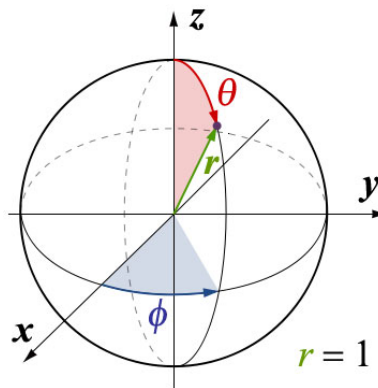
Vagyis az (64) egyenletbe táplált egyenletes eloszlású véletlen számok csakugyan exponenciális eloszlású számokat generálnak.

## 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 ( $\gamma$ ) kvázirugalmasan szóródik egy kezdetben nyugvó elektronon ( $e^-$ ). Az impulzusmegmaradás miatt a szóródás természetesen síkban történik. A szórt foton ( $\gamma'$ )  $\theta$  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  $\alpha$  és a  $\theta$  szög az impulzusmegmaradás miatt kölcsönösen meghatározza egymást. Ezért választhatunk, hogy melyik segítségével írjuk fel az egyenleteket. Mi a  $\theta$  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  $\theta$  polárszöggel együtt) már egyértelműen azonosít egy konkrét Compton-eseményt, melynek az egységsugarú gömbön egyetlen pont felel meg. Amikor a  $\theta$ -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  $\theta$  polárszög jelenik meg a képletben, a differenciális hatáskeresztmetszet független a  $\phi$  azimutttól:

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

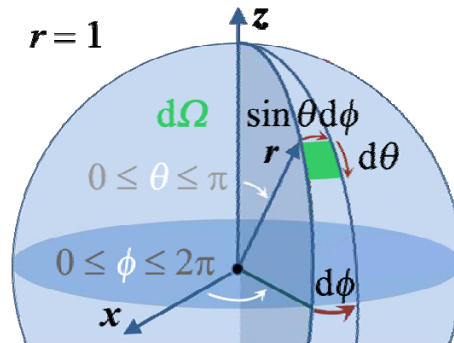
Itt  $\Theta$  az alábbi kifejezés rövidítése:

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

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](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  $\phi$  és  $\theta$  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  $\phi$  azimut, ezért integrálással ebben az alakban kapjuk meg a  $\theta$  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  $\varepsilon$  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  $\theta$  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  $180^\circ$ -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  $\theta$  változóról áttérjünk az  $\varepsilon$  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:

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

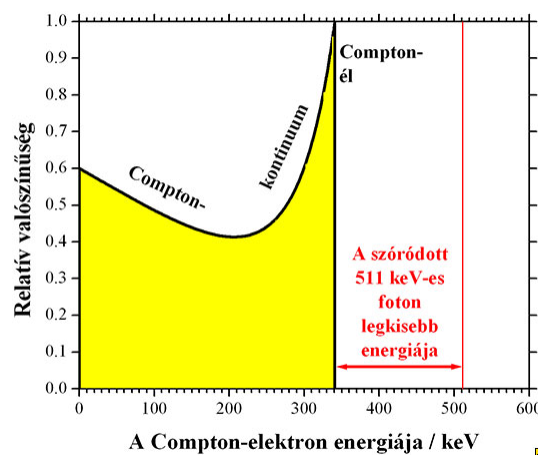
ami a  $T$  változóra visszatérve a következőt adja:

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

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:

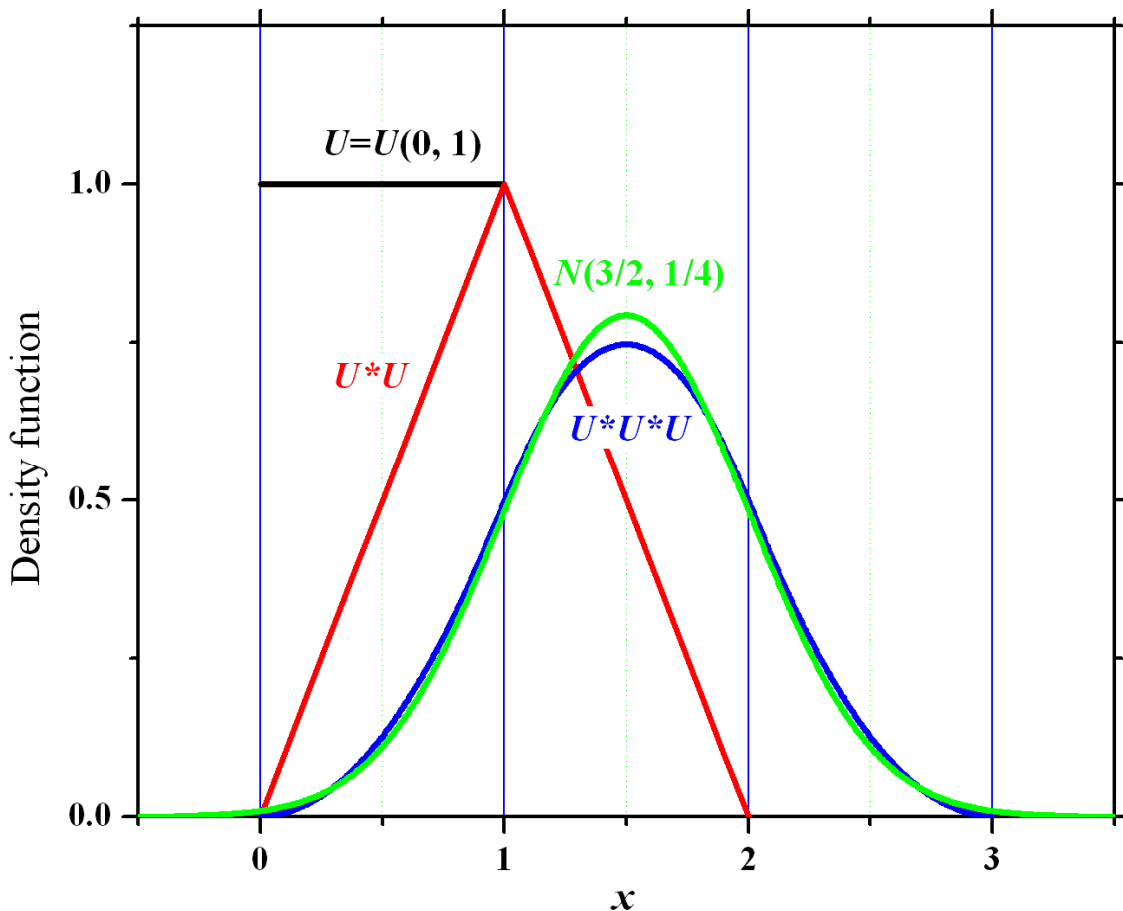
$$f * f(z) = \int_0^1 f(z-u)1 \, du + \int_1^z f(z-u)0 \, du = \int_0^1 f(z-u) \, du = \int_{z-1}^z f(t) \, dt = \int_{z-1}^1 1 \, dt + \int_1^z 0 \, dt = 2-z. \quad (96)$$

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:

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

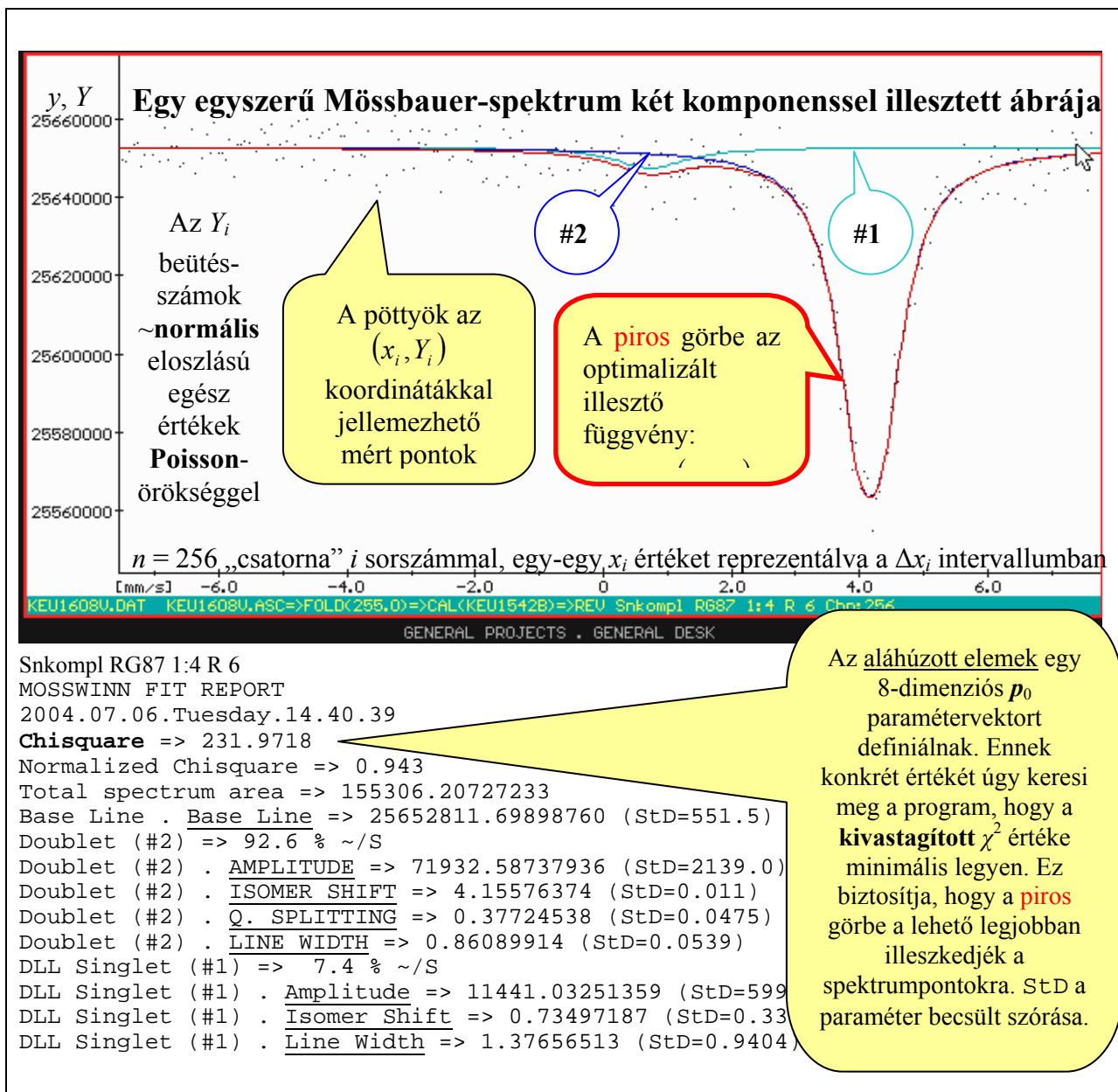
Emiatt pl. az  $X$  sűrűségfüggvénye így fejezhető ki az inverz transzformáció segítségével:

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

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-függvény** 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 spektrumhoz<sup>5</sup>.

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  $\chi^2$ -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

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

---

<sup>5</sup> 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  $\chi^2$ -értéket, amelyet az illesztő programok többnyire meg szoktak adni a futás végén.

Annak ellenére, hogy a konkrét  $\chi^2$ -érték minimalizáló eljárás eredménye, nem okvetlenül a legkisebb  $\chi^2$ -et adó illesztés a legjobb, hanem az, amelyik a legközelebb van a  $\chi^2$ -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  $\chi^2$ -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  $\chi^2$  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  $\chi^2$  arra is utalhat, hogy  $\mathbf{p}$  valóságos dimenziója kisebb, mint feltételeztük. (Pl. az elemi illesztő függvények – a Lorentz-görbék – inadekvát volta miatt általában kisebb  $\chi^2$ -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)  $\chi^2$ -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  $\chi_{\text{rel}}^2$  – 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  $\mu$  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  $\mu$  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

Eléggé 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  $\varphi$  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 $\chi^2$ -eloszlás bevetése

Ahhoz, hogy a  $\chi^2$ -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  $\chi^2$ -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:

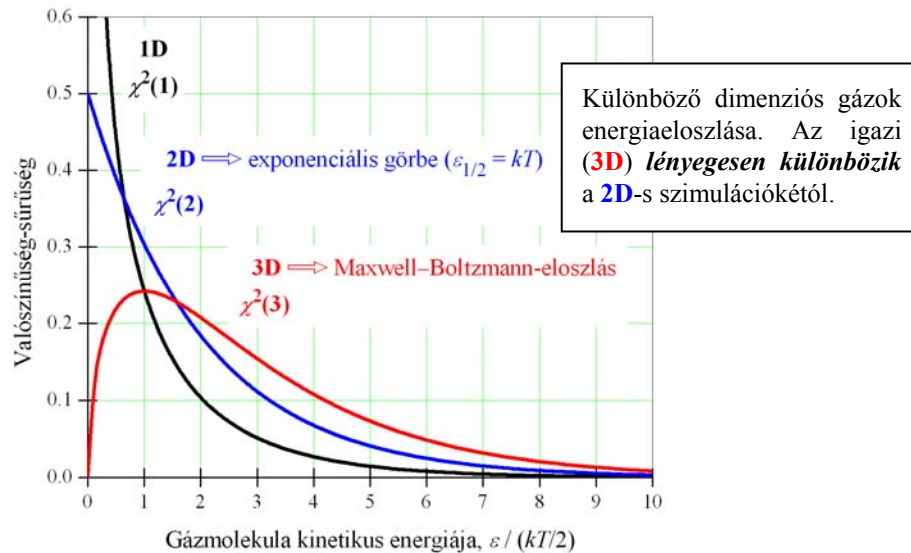
$$f_2(w) = \frac{w^{k/2-1} e^{-w/2}}{2^{k/2} \Gamma(k/2)} \Big|_{k=2} = \frac{e^{-w/2}}{2}, \quad (137)$$

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  $\varepsilon$  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 hallgatóságához 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  $\chi^2$ -eloszlásnak, hanem gamma-eloszlásnak is tekinthető!

### Sebességeloszlás és dimenziószám: a $\chi$ -eloszlás bevetése

A  $\chi$ -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,  $V, \chi$ -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:

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

