KFKI-1979-13

SZŐKE J.
MÉSZÁROS GY.
HARGITAI CS.

KOMPUTERES ADATFELDOLGOZÁS

15.

FÜGGVÉNYEK KÖZELÍTŐ ÉRTÉKEINEK KISZÁMÍTÁSA ORTOGONÁLIS POLINÓMOKKAL

Hungarian Academy of Sciences

CENTRAL RESEARCH INSTITUTE FOR PHYSICS

BUDAPEST

2017

PAPERS PUBLISHED IN THIS SERIES:

1/ J. Szőke, L. Varga, I. Nagypál: Experimental and Computer Analysis of Spectral Fine Structure
XIV. Coll. Spectr. Internat. Debrecen 1967 Proc. Conf. 1205. old.

2/ Szőke J.: Komputeres mérés és adatfeldolgozás
1. Kis komputerek alkalmazása a kémiai méréstechnikában.
KFKI Report 1972-20

3/ Szőke J.: Komputeres mérés és adatfeldolgozás a kémiában.
KFKI Report 1972-6

4/ Szőke J.: Komputeres adatfeldolgozás.
Magyar Kémikusok Lapja. 1972, 27, 67

5/ J. Szőke: On-line Measurements and Computerized Data Processing of Spectra. KFKI Report 72-5

6/ J. Szőke: Computer Analysis of Spectra by Deconvolution. Chem. Phys. Lett. 1972, 15, 404

7/ J. Szőke, I. Horváth, I. Szilágyi: Determination of the Genuine Spectrum Measured by Grating Spectrometer. Proc. of Coll. Spectr. Internatl. XVII. Firenze 1973 440.old.

8/ E. Dudar, J. Szőke: Generation of UV spectra. Proc. of Coll. Spectr. Internat. Heidelberg 1971. 298. old.

9/ Follmann P., Heszberger I., Faludi Á., Szőke J.: Az oftalmodinamogram számitógépes értékelése.
Szemészet 1973, 110, 283

10/ Szőke J.: Program for elimination of instrument distortions and improvement of resolution.
KFKI Report 1972-74

11/ J. Szőke: Digital Spectroscopic Laboratory and Computerized Spectrum Library. Proc. XVI. Coll. Spectr. Internatl. Heidelberg 1971.
A. Hilger 1971, 321. old.

12/ Szőke J.: Komputeres adatfeldolgozás 12. Mérési eredmények legkisebb-négyzet fittelése polinomokkal.
KFKI Report 1977-3.

13/ Szőke J.: Komputeres adatfeldolgozás 13. Radiativ lecsengési görbék értékelése.
KFKI Report 1978-66.

14/ J. Szőke: Computerized evaluation of radiative decay curves /in Russian/
KFKI Report 1978-78.

KFKI-1979-13

A D A T F E L D O L G O Z Á S

15.

FÜGGVÉNYEK KÖZELÍTŐ ÉRTÉKEINEK KISZÁMÍTÁSA ORTOGONÁLIS POLINÓMOKKAL

Szőke J., Mészáros Gy., Hargitai Cs.
Magyar Tudományos Akadémia
Központi Fizikai Kutató Intézete
1525. Budapest 114. pf. 49.

HU ISSN 0368 5330
ISBN 963 371 516 4

KIVONAT

Az ortogonális polinom-fittelés elvi alapjainak tárgyalása után az ORTHOFIT program szerkezetét, algoritmusait és listáját ismertetjük. A program használatát egy valós mintapéldán mutatjuk be.

АННОТАЦИЯ

После обсуждения теоретических основ согласования ортогональных многочленов описывается структура, алгоритмы и список программы ORTHOFIT. Дается конкретный пример применения программы.

ABSTRACT

Discussing the basis of the orthogonal polynomial fitting procedure the structure, algorythms and listing of the ORTHOFIT program is described. The usage of the program is demonstrated by a real task.

TARTALOM

A közleményben alkalmazott jelölések

Nagy betükkel és egyszer aláhuzva jelöltük a matematikai részben a vektorokat és ugyancsak nagybetükkel, kétszer aláhuzva a mátrixokat. A vektor- és mátrix-elemeket a megfelelő kisbetük jelölik, jobb alsó index/ek/ utal/nak/ az elemszámra. A mátrixok oszlopvektorait ugyancsak a mátrixot jelölő nagybetü azonositja, azonban ekkor a szimbólumot egyszer huzzuk alá és jobb alsó indexben megadjuk, hogy melyik oszlopvektorról van szó. A mátrix transzponálást a szimbólum mellé jobb felső indexbe tett ^{T} jelzi.

Jelölések a matematikai részben

$\underline{A}$, a_k	az együttható vektor és k-adik eleme
$\underline{C}$, c_k	a számitott vektor és k-adik eleme
$\underline{D}$, d_k	a hibavektor és k-adik eleme
H_m	m-edrendü Hilbert determináns
m	a polinom használt, maximális fokszáma
n	az adatpontok száma
$\underline{\underline{P}}$, $p_{k,j}$	a GRAM-féle variációs mátrix és k,j-edik eleme
$\underline{\underline{P}}^T$, $p^T_{k,j}$	a $\underline{\underline{P}}$ mátrix transzponáltja és k,j-edik eleme
$\dot{\underline{\underline{P}}}^T$, $\dot{p}^T_{k,j}$	a normált $\underline{\underline{P}}^T$ mátrix és k,j-edik eleme
$\underline{\underline{Q}}$, $q_{k,j}$	az $\underline{\underline{X}}^T \cdot \underline{\underline{X}}$ illetve $\underline{\underline{P}}^T \cdot \underline{\underline{P}}$ szorzatmátrixok és k,j-edik elemei
s_j	a j-edik permutációs együttható
$\underline{\underline{X}}$, $x_{k,j}$	az egyszerü polinom-közelités variációs mátrixa és k,j-edik eleme
$\underline{\underline{X}}^T$, $x^T_{k,j}$	az $\underline{\underline{X}}$ mátrix transzponáltja és k,j-edik eleme
x'	a független változó abszolut értékei
x	a független változó GRAM polinomoknál használt relativ értékei a /14/ egyenlet szerint
$\underline{Y}$, y_k	a kisérleti adatvektor és k-adik eleme
δ_{ij}	Kronecker szimbólum

Jelölések a számitástechnikai részben

A(I)	az együttható vektor és elemei
B	az ORTHOFIT program átmeneti változója
C(I)	a számitott adatvektor és elemei
D	A FOKAL nyelv DO utasitása
DX	a direkt fittelés független változójának lépésköze
DZ	az inverz fittelés független változójának lépésköze
F	adatmező az FNEW-ban
G	a FOKAL nyelv GO utasitása
G'	a P(I,K-2) a rekurziós formulában
g	az adott számitógép konfiguráció sebesség faktora ORTHOFIT-nél
H	a P(I,K-1) a rekurziós formulában
K	az aktuális polinom fokszám /= a $\underline{\underline{P}}$ mátrix aktuális oszlopvektora/
M	a polinom használt, maximális fokszáma
M_{max}	az ORTHOFIT jelen változatában és konfiguráció mellett használható maximális polinom fokszám
N	az adatpontok szám
P	a $\underline{\underline{P}}$ mátrix tárolására kijelölt mező az FNEW-ban
P(I,J)	a $\underline{\underline{P}}$ mátrix és elemei
R	a FOKAL nyelv RETURN utasitása
S	adatmező az FNEW-ban a szórástömb tárolására
s_j	a j-edik permutációs együttható
T(I)	az inverz függvény egyenlőközü, független változó vektora és elemei
X(I)	a kisérleti adattömb egyenlőközü, független változó vektora és elemei
Y(I)	a kisérleti adattömb mért értékeinek vektora és elemei
Z(I)	az inverz függvény függő változó vektora és elemei
Ø	adatmező az FNEW-ban a C(I) vektor tárolására
σ	kisérleti szórásérték /S mezőben tárolva/
ρ	jósági faktor a /28/ egyenlet szerint
γ	$= 3 \times \sigma$

1. BEVEZETÉS

A közelitő polinomok definicója szerint egy /pl. kisérletileg/ adott $y = f(x)$ függvény k pontjait véges $x_o \ldots x_n$ intervallumban d_k hibával közelithetjük, ha ismerjük a polinom fokszámát és együtthatóit

$$y_k = a_o + a_1 x_1 + a_2 x_2 + \ldots + a_m x_m + d_k \qquad /1/$$

ahol

$$k = 0, 1, 2, \ldots, n \quad \text{az adatpontok száma} \qquad /2a/$$

$$j = 0, 1, 2, \ldots, m \quad \text{a polinom fokszáma} \qquad /2b/$$

és mindig igaz, hogy

$$\underline{Y} = \underline{\underline{X}}.\underline{A} + \underline{D} \qquad /3/$$

ahol $\underline{Y}$ a függő változó, $\underline{A}$ az együttható, mig $\underline{D}$ a közelités hiba-oszlopvektora, mindegyik $(m + 1)$ elemü, és $\underline{\underline{X}}$ a független változó $(m + 1) \times (n + 1)$ méretü u.n. variációs mátrixa.

A $\underline{D}$ hibavektor-elemek eltérésnégyzetösszege a legkisebb négyzetek kritérium szerint

$$\sum_{k=o}^{n} d_k^2 = \sum_{k=o}^{n} (y_k - c_k)^2 = \text{minimális} \qquad /4/$$

Jó közelitést feltételezve, a $\underline{D}$ hibavektort elhanyagolhatjuk, de az $\underline{Y}$ közelitő-/számitott/-vektorát - megkülönböztetésül - $\underline{C}$-vel jelölve kapjuk:

$$\underline{C} = \underline{\underline{X}} . \underline{A} \qquad /5/$$

Fitteléskor ismerjük az $\underline{Y}$ vektort és az $\underline{\underline{X}}$ mátrixot. Az $\underline{A}$ együttható-vektor kiszámitása a mátrixaritmetika szabályai szerint történik

$$\underline{\underline{X}}^T . \underline{Y} = \underline{\underline{X}}^T . \underline{\underline{X}} . \underline{A} \qquad /6/$$

Bevezetve a

$$\underline{\underline{Q}} = \underline{\underline{X}}^T \cdot \underline{\underline{X}} \qquad /7/$$

jelölést a normálási faktorra, nyerjük

$$\underline{\underline{Q}} \cdot \underline{A} = \underline{\underline{X}}^T \cdot \underline{Y} \qquad /8/$$

ahol az $\underline{\underline{X}}^T \cdot \underline{Y}$ skalárszorzat n-elemü vektort eredményez:

$$\underline{\underline{X}}^T \cdot \underline{Y} = \begin{bmatrix} \sum_{k=o}^{m} x_{o,k} \cdot y_k \\ \sum_{k=o}^{m} x_{1,k} \cdot y_k \\ \sum_{k=o}^{m} x_{2,k} \cdot y_k \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ \sum_{k=o}^{m} x_{n,k} \cdot y_k \end{bmatrix} \qquad /9/$$

Az (n + 1) x (m + 1)-es méretü $\underline{\underline{Q}}$ mátrix pedig

$$\underline{\underline{Q}} = \begin{bmatrix} x_{o,k} \cdot x_{k,o} & x_{o,k} \cdot x_{k,1} & x_{o,k} \cdot x_{k,2} & \cdots & x_{o,k} \cdot x_{k,m} \\ x_{1,k} \cdot x_{k,o} & x_{1,k} \cdot x_{k,1} & x_{1,k} \cdot x_{k,2} & \cdots & x_{1,k} \cdot x_{k,m} \\ x_{2,k} \cdot x_{k,o} & x_{2,k} \cdot x_{k,1} & x_{2,k} \cdot x_{k,2} & \cdots & x_{2,k} \cdot x_{k,m} \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ x_{m,k} \cdot x_{k,o} & x_{m,k} \cdot x_{k,1} & x_{m,k} \cdot x_{k,2} & \cdots & x_{m,k} \cdot x_{k,m} \end{bmatrix} \qquad /10/$$

A /8/ egyenlet (n + 1) egyenletből álló lineáris egyenletrendszert definiál

$$\begin{aligned} a_o \cdot q_{o,1} + a_1 \cdot q_{o,1} + a_2 \cdot q_{o,2} + \ldots + a_m \cdot q_{o,m} - x^T \cdot y_{\,o} &= 0 \\ a_o \cdot q_{1,o} + a_1 \cdot q_{1,1} + a_2 \cdot q_{1,2} + \ldots + a_m \cdot q_{1,m} - x^T \cdot y_{\,1} &= 0 \\ a_o \cdot q_{2,o} + a_1 \cdot q_{2,1} + a_2 \cdot q_{2,2} + \ldots + a_m \cdot q_{2,m} - x^T \cdot y_{\,2} &= 0 \\ \cdot \\ \cdot \\ a_o \cdot q_{m,o} + a_1 \cdot q_{m,1} + a_2 \cdot q_{m,2} + \ldots + a_m \cdot q_{m,m} - x^T \cdot y_{\,m} &= 0 \end{aligned} \qquad /11/$$

amelynek megoldása mátrix inverzióval a keresett együttható-vektort eredményezi.

Az /1/ egyenlet szerint közelitő polinomok* esetén az $\underline{\underline{X}}$ mátrix elemei:

$$x_{k,j} = x_k^j \qquad /12/$$

A $\underline{\underline{Q}}$ mátrix ebben az esetben nemcsak négyzetes, hanem szimmetrikus is. Ilyen módszert ismertet egy korábbi közleményünk [1].

A $\underline{\underline{Q}}$ mátrix determinánsa polinom közelités esetén Hanning [2] szerint - a konstans szorzó kivételével - ugy viselkedik, mint egy H_m-ed rendü Hilbert determináns, amelynek értéke

$$H_m = \frac{(1!2!3!....(m-1)!)^3}{m!(m+1)!....(2m-1)!} \, . \qquad /5/$$

A H_m értéke gyorsan zéróra csökken, azaz a determináns igen kicsivé válik a polinom fokszámának növekedtével, ami a mátrix közel szingularitását okozza, vagyis a probléma gyengén meghatározottá /ill-conditioning/ válik. Ennek kikerülésére használjuk az ortogonális polinom közelitést, amely közvetlenül a koefficiensvektort állitja elő. Mint a későbbiekben látni fogjuk, számos egyéb számitástechnikai előnye is van, ezért alkalmazása a numerikus adatfeldolgozásban egyértelmüen indokolt.

Az anyag tárgyalásánál arra törekedtünk, hogy a téma teljesen tisztázott, elvi matematikai vonatkozásaiból csak annyit ismertetünk, amennyire a gyakorlati alkalmazáshoz feltétlenül szükség van és megadjuk azokat a forrásmunkákat [2,3,4,5], amelyek az elvi problémákat behatóan tárgyalják, illetve a jelen munka alapjául szolgáltak. Célunk tehát az, hogy a kisérleti kutatómunkát végző szakemberek - lehetőleg gyakorlati példákon szemléltetve - lássák az ortogonális polinomoknak az információszerzésben nyujtott lehetőségeit.

Az ortogonális polinomokat eredményesen használhatjuk a függvény közelitések /fittelés és interpoláció/ mellett más feladatok /pl. simitás, differenciálás, integrálás/ megoldására is. Ezeket nagy gyakorlati jelentőségük miatt külön közleményekben tárgyaljuk.

---

* A /12/ egyenlettel meghatározott polinomokat az irodalom egyszerüen polinomoknak nevezi, megkülönbözetető jelző nélkül. Ezt a szóhasználatot követjük mi is. Minden más esetben megfelelő jelzővel pontositjuk a fogalmat.

A programban és a blokkvázlatban angolnyelvü kifejezéseket használunk. Ezek egy része számitástechnikai /vagy számitástechnikus számára nem ismeretlen/ kifejezés, amely lehetővé teszi, hogy a program listát nem-magyar nyelvterületen is lehessen használni, s blokkdiagramok segitségével a funkciót is meg lehessen érteni. Ahol az idegen kifejezések zavarják a megértést, ott megadjuk /a szövegben/ a magyar forditást is.

A 7. pontban ismertetünk egy feldolgozott példát. Ez a fejezet azonban nem egyszerü alkalmazása az elvi részeknek, hanem igyekszünk bemutatni a program /és az ortogonális polinom módszer/ gyakorlati felhasználásának különféle meggondolásait.

Az ortogonális polinomok viselkedésének és tulajdonságainak megértéséhez segitenek azok a részletszámitások, amelyeket - a szokástól eltérően - részletesen ismertetünk a feldolgozott feladat kapcsán és a Függelékben. Ugyancsak a Függelékbe kerültek azok a részletszámitások is, amelyeket a program vezérlőutasitásaival nem lehet előállitani, hanem külön e célra készült - a programban nem szereplő - utasitásokkal /szubrutinokkal/ irattunk ki.

Magyar nyelvi szempontból meg kell emliteni a közleményben használt "fittelés" szót, amely az angol fitting megmagyarositott változata. Annak ellenére, hogy az "illesztés" szó jó magyar megfelelőnek tünik, a mindennapos gyakorlatban annyira elterjedt, hogy már jövevényszónak tekinthetjük, amely árnyaltabb kifejezési lehetőséget biztosit a függvények közelitő leirásának jelölésére.

2. Fittelés ortogonális GRAM-polinomokkal

Az ortogonális polinom függvényközelitésének is az /1/ és /2/ egyenletek képezik az alapját, de az $\underline{\underline{X}}$ mátrix oszlopvektoraitól megkivánjuk, hogy ortogonálisak legyenek egymásra. Célszerünek látszik az ortogonális $\underline{\underline{X}}$ mátrixot megkülönböztetésül $\underline{\underline{P}}$-vel jelölni. Igy az ortogonális feltétel szerint

$$\underline{P}_{\ell} \cdot \underline{P}_j = \delta_{\ell j} \qquad /13/$$

ahol a $[\delta_{\ell j}]$ az u.n. Kronecker szimbólum azt jelenti, hogy az abszcisszasoron értelmezett, különböző foku függvények /vektorok/ belső szorzata zéró, önmagával képezett szorzata /négyzete/ pedig 1 /ortonormált eset/, vagy ennél nagyobb /ortogonális eset/ érték.

A $\underline{\underline{P}}$ mátrixnak n sora és (m + 1) oszlopa van, a fittelendő függvény n elemének és a közelités m fokszámának megfelelően. Mivel (m + 1) rendszerint kisebb, mint n, a $\underline{\underline{P}}$ mátrix általában téglalap alaku. Az n-dimenziós ortogonális vektortérben értelmezett függvények lineárisan függetlenek egymástól és teljes rendszert képeznek, ha $j_{max} = n - 1$. Ekkor a $\underline{\underline{P}}$ mátrix négyzetes és nem-szimmetrikus.*

Előrebocsájtjuk, hogy csak egyenlőközü x_k abszcissza sorral fogunk foglalkozni, valamint azt is, hogy ezen x_k-k csak a 0, 1, 2, ..., n értékeket vehetik fel. Ez utóbbi választás nem jelent korlátozást, mert az egyszerü

$$x = n\,(x' - x'_o)/(x'_n - x'_o) \qquad /14/$$

koordináta transzformációval mindig át lehet térni erre a skálára, bármilyen x'_o, x'_1, x'_2, ..., x'_n skáláról.

A fittelés feladata tehát az, hogy meghatározzuk a közelitő $\underline{C}$ függvény paramétereit, amely az /5/ egyenlet szerint ortogonális polinomokkal kifejezve:

---

* A gyakorlatban m mindig lényegesen kisebb, mint n, mert ha m = n-1, akkor a $\underline{Y}$ és $\underline{C}$ adatpontjai tökéletesen megegyeznek. Ezt két okból kerüljük. Tökéletes közelitésnél egyrészt nagyon magas fokszámu polinomokkal kell dolgoznunk, ami sok esetben numerikus bizonytalanságot okoz, másrészt a fittelt függvény random hibáját csak függvényközelitéssel tudjuk csökkenteni. Ennek pedig alapfeltétele, hogy m ≪ n. /További részleteket lásd a "Fittelés jósága" és a "Futtatási mintapélda" cimü fejezetben./

$$c_k = \sum_{j=o}^{m} a_j \cdot p_{k,j} \qquad /15/$$

Ehhez ismernünk kell az a_j polinomkoefficienseket és a $\underline{\underline{P}}$ polinom mátrix k-adik sorvektorának elemeit.

2.1 A P mátrix felépitése

A $\underline{\underline{P}}$ mátrixot is az x-koordináták értékeinek segitségével épitjük fel, mint az $\underline{\underline{X}}$ mátrixot az egyszerü polinomok esetén. Eltérést jelent az, hogy a valódi koordináták helyett a /8/ egyenletben definiált relativ koordinátákat használjuk, és a mátrixelemek nem az x-koordináták hatványösszegeként állnak elő, hanem - Gram szerint - permutációs algoritmussal számolhatók:

$$p_{k,m} = \sum_{j=o}^{m} s_j \frac{\prod_{\ell=o}^{j-1} (k-\ell)}{\prod_{\ell=o}^{j-1} (n-\ell)} \qquad /16/$$

ahol

$$s_j = (-1)^j \binom{m}{j} \binom{m+j}{j} \qquad /16a/$$

A mátrix-elemek számitására előnyösen használható a rekurziós 6 technika /részleteket lásd a számitástechnikai részben/. A számos rendelkezésre álló formula közül a gyakorlati számitásokban használt algoritmust közöljük:

$$p_{k,j+1} = \frac{2.n(m+1)}{(m+1)(n-m)} \left(1 - \frac{2.k}{n}\right) p_{k,j} - \frac{m(n+m+1)}{(m+1)(n-m)} p_{k,j-1} \qquad /17/$$

A /16/ vagy /17/ algoritmussal számitott $\underline{\underline{P}}$ mátrix tehát

$$\underline{\underline{P}} = \begin{bmatrix} p_{o,o} & p_{o,1} & p_{o,2} & \cdots\cdots & p_{o,m-1} & p_{o,m} \\ p_{1,o} & p_{1,1} & p_{1,2} & \cdots\cdots & p_{1,m-1} & p_{1,m} \\ p_{2,o} & p_{2,1} & p_{2,2} & \cdots\cdots & p_{2,m-1} & p_{2,m} \\ . & & & & & \\ . & & & & & \\ . & & & & & \\ p_{n-1,o} & p_{n-1,1} & p_{n-1,2} & \cdots\cdots & p_{n-1,m-1} & p_{n-1,m} \\ pn,o & p_{n,1} & p_{n,2} & \cdots\cdots & p_{n,m-1} & p_{n,m} \end{bmatrix} \qquad /18/$$

A /16/ vagy /17/ összefüggések csak az (n + 1)-dimenziós, (n + 1)-elemü vektorteret értelmezik. Minden $p_{k,j}$ mátrixelem, amely e vektortéren kivül fekszik, zéró értékü.

2.2 A polinom együtthatók meghatározása

A legkisebb négyzetek fittelési feladat megoldásához most is a /8/ egyenletből kell kiindulni, ahol a

$$\underline{\underline{Q}} = \underline{\underline{P}}^T \cdot \underline{\underline{P}} = \begin{bmatrix} P_o P_o & P_o P_1 & P_o P_2 \dots & P_o P_m \\ P_1 P_o & P_1 P_1 & P_1 P_2 \dots & P_1 P_m \\ P_2 P_o & P_2 P_1 & P_2 P_2 \dots & P_2 P_m \\ \cdot & & & \\ \cdot & & & \\ \cdot & & & \\ P_m P_o & P_m P_1 & P_m P_2 \dots & P_m P_m \end{bmatrix} \qquad /19/$$

A $\underline{\underline{Q}}$ mátrix elemeit tehát a $\underline{P}_i$ és a $\underline{P}_j$ oszlopvektorok skalárszorzatai képezik. Kifejezve:

$$q_{i,j} = \sum_{k=1}^{n} p_{i,k} \cdot p_{j,k} \qquad /20/$$

A /13/ ortogonalitási feltétel miatt nyilvánvaló, hogy a $\underline{\underline{Q}}$ mátrix összes nem-diagonális eleme zéró, és a diagonális elemek nagyobbak vagy egyenlők 1-gyel.

A $\underline{\underline{P}}^T \cdot \underline{Y}$ mátrix skalárszorzat egy n-elemü oszlopvektort eredményez, amelynek elemei a $\underline{P}_j$ és az $\underline{Y}$ vektorok skalárszorzatai:

$$\underline{\underline{P}}^T \cdot \underline{Y} = \begin{bmatrix} \underline{P}_o \cdot \underline{Y} \\ \underline{P}_1 \cdot \underline{Y} \\ \underline{P}_2 \cdot \underline{Y} \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ \underline{P}_m \cdot \underline{Y} \end{bmatrix} \qquad /21/$$

A $\underline{\underline{P}}^T \cdot \underline{Y}$ mátrix elemei tehát

$$(p^T \cdot y)_j = \sum_{k=o}^{m} p_{k,j} \cdot y_k \qquad /21a/$$

A mátrix szorzás disztributivitása miatt elvégezhető a

$$\underline{\underline{Q}}^{-1} \quad \underline{\underline{P}}^T = \underline{\underline{\dot{P}}}^T \qquad /22/$$

egyenlet szerint értelmezett müvelet, amely a $\underline{\underline{\dot{P}}}^T$ normált, ortogonális $\underline{\underline{P}}$ mátrix transzponáltját definiálja. A $\underline{\underline{P}}$ mátrix oszlopvektorainak 0-12-ed foku függvényalakjait az 1. ábrán tüntettük fel. A különböző fokszámokat az ábrán a megfelelő számok jelzik.

Az $\underline{A}$ polinom koefficiensvektor tehát az ortonormált $\underline{\underline{P}}$ mátrix transzponáltja és a fittelendő függvény /$\underline{Y}$-vektor/ skalárszorzata

$$\underline{A} = \underline{\underline{\dot{P}}}^T \cdot \underline{Y} \qquad /23/$$

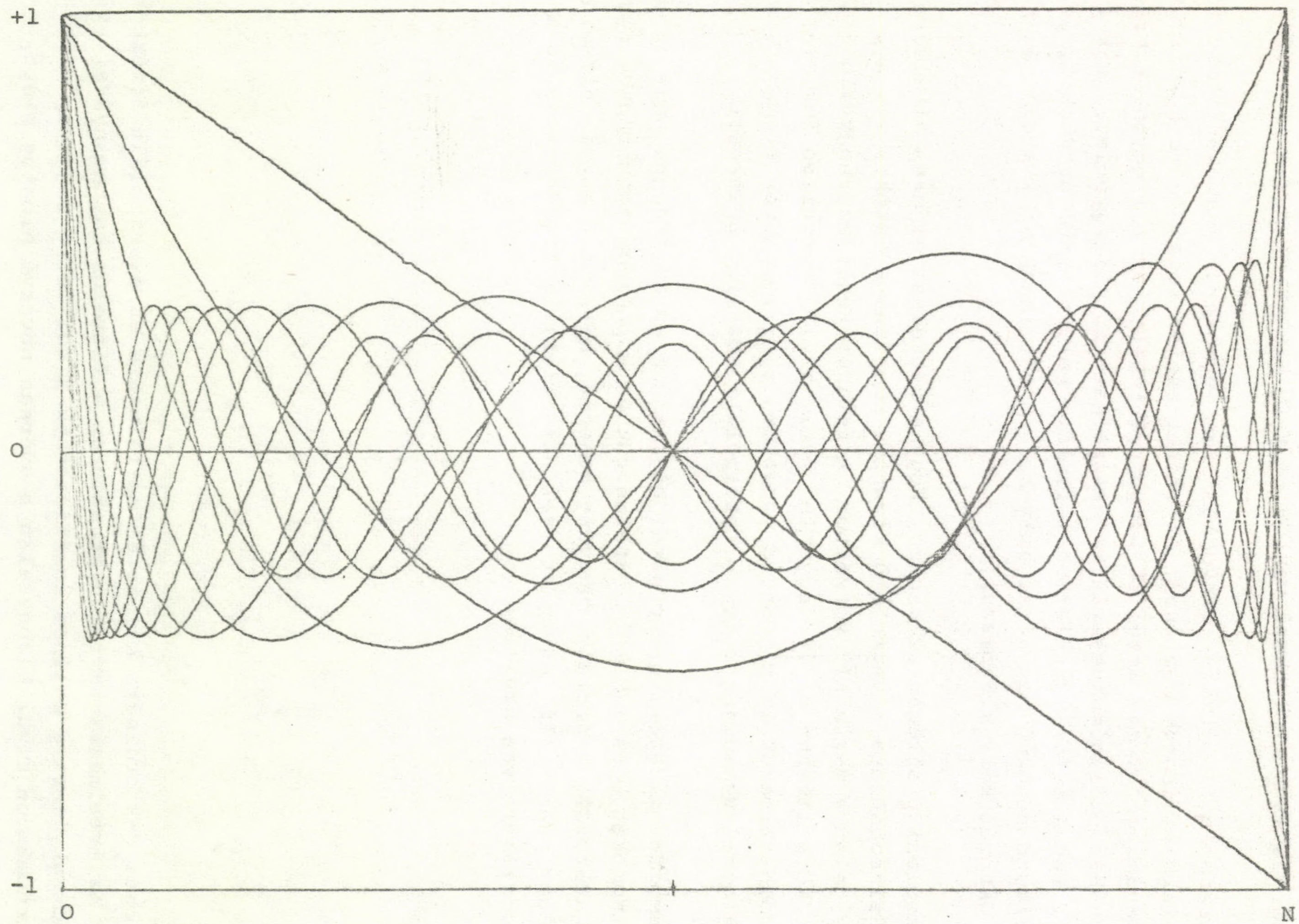
2.3 A közelitő függvényértékek kiszámitása

Miután felépitettük a fittelés /18/ alapegyenletében definiált $\underline{\underline{P}}$ és $\underline{A}$ mátrixokat, a kisérleti $\underline{Y}$ vektor elemeinek $\underline{C}$ közelitő értékeit - az /5/ egyenlet értelmében a

$$\underline{C} = \underline{\underline{P}} \cdot \underline{A} \qquad /24/$$

skalárszorzat adja. A $\underline{C}$ vektor elemei tehát

$$c_k = \sum_{k=o}^{m} p_{k,j} \cdot a_j \qquad /24a/$$



1. ábra A $\underline{\underline{P}}$ mátrix 0-12-ed foku ortogonális vektorainak függvény-alakjai /N = 25/

3. Interpoláció

Interpoláció alatt az x_k pontokban adott függvény közbülső - nem ismert - értékeinek meghatározását értjük. Ortogonális polinom közelitésnél /24/ egyenlet értelmében ismernünk kell a $\underline{\underline{P}}$ mátrixnak a kiválasztott pontokhoz tartozó sorvektor és az $\underline{A}$ együttható vektor (m + 1) elemét.

Az interpolációs eljárás lényegében igen egyszerü, csak korlátozottabb, mint az egyszerü polinomok esetében. Az utóbbi esetén tetszőleges x koordinátához hozzárendelhetünk egy közelitő függvényértéket,* az /1/ egyenlet értelmében. Ortogonális polinomok esetén is használható az /1/ egyenlet, csak figyelembe kell venni a /6/ egyenletben definiált helyettesitő értékeket, azaz a független változó növekvő hatványai helyébe a $\underline{\underline{P}}$ mátrixnak az x koordinátához tartozó sorvektorát kell alkalmazni.

A számolási problémát az okozza, hogy a fittelési eljárás alkalmával nem áll rendelkezésünkre a megfelelő kivánt x koordináta értéke, igy a $\underline{\underline{P}}$ mátrixban nincs jelen a megfelelő sorvektor. A feladat tehát az, hogy adott j-ed foku polinom közelitésben a /16/ egyenlet /vagy a /17/ rekurziós formula/ segitségével meghatározzuk az x_k pontra vonatkozó $p_{k,j}$ sorvektor elemeket, majd a /24/ egyenlettel számoljuk a $\varphi_{k,j}$ interpolált közelitő értékeket.

Az ismertetett számitástechnikai eljárásnak az az alapja, hogy az ortogonális polinomokat 0 és 1 között értelmezzük és a polinom együtthatók egyértelmüen meghatározzák a fittelt függvény menetét, mivel a $\underline{\underline{P}}$ mátrix elemeinek konstruálásához csak a /15/ egyenlet szerinti relativ x koordinátára és a közelités m fokszámára van szükség.

---

* A tetszőleges x-koordináta kifejezés tartalmazza az extrapolált értékkészletet is. Az értelmezés tartományát azonban a fittelés tartományával veszszük azonosnak, mert a polinom koefficiensek által leirt függvény viselkedése a tartományon kivül bizonytalan a gyorsan növekvő hibatag miatt.

4. Számitástechnikai rész

Az ORTHOFIT program tartalmazza mindazon matematikai eljárásokat, amelyeket a 2. és 3. pontokban tárgyaltunk. Az egyes eljárások megfogalmazásánál - ha volt választási lehetőség - mindig a gyorsabb megoldást részesitettük előnyben a rövidebb, esetleg elegánsabb megoldás helyett. A gyakorlatban felhasznált programban az időigényesebb számitástechnikai eljárásokat gépi kódban /SLANG-ben/ irtuk meg, ezáltal a számolás időigényét nagymértékben sikerült lecsökkenteni. A közleményben csak a FOKAL nyelvü programot ismertetjük. A SLANG nyelvü eljárásokat tartalmazó programváltozat a KFKI Mérés- és Számitástechnikai Kutató Intézetétől vásárolható.

Az ORTHOFIT programot lényegében két feladattipus megoldására használhatjuk: fittelésre és interpolációra. Programszervezési szempontból fontos, hogy csak fittelt függvényt lehet interpolálni.

A számolások kivitelezéséhez a TPA-i kisszámitógépet használtuk 16K memóriával, minimális perifériakészlettel /Teletype, gyors lyukszalagolvasó, gyors szalaglyukasztó/, de a futtatáshoz elegendő a konzolirógép önmagában is. Annak ellenére, hogy a program viszonylag kevés helyet foglal el az első két modulban, a FOKAL nyelv szervezése miatt célszerü a második 8K-t is használni, mert a fittelés és az interpoláció is nagy adatmezőket igényelnek.

4.1 Az FNEW mezőkre osztása

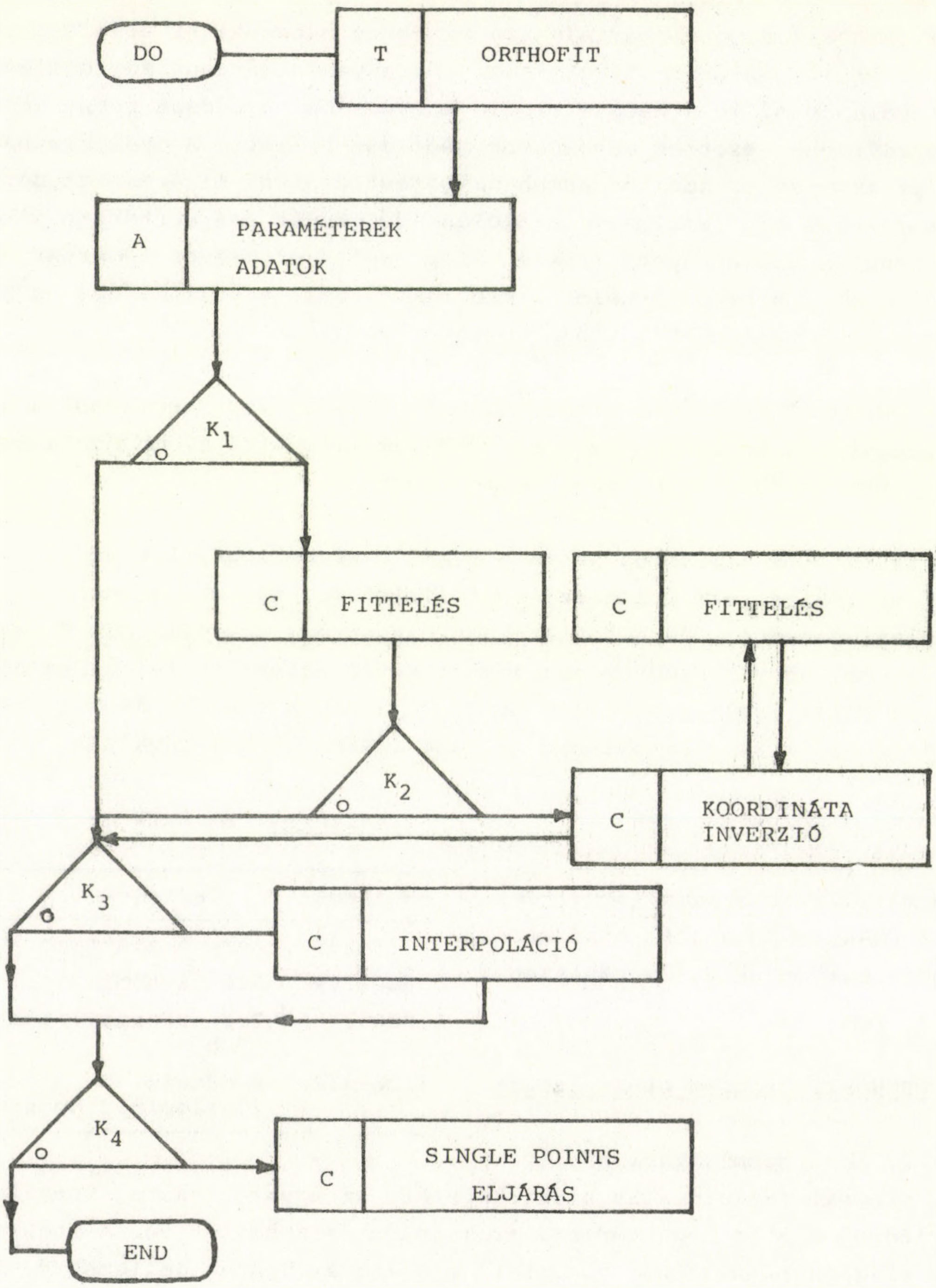
A második 8K-s memóriabővitést, amelyet a FOKAL FNEW-adattárként kezel, négy részre osztottuk az 1. táblázat szerint.

1. táblázat: Az FNEW mező felosztása

Határok	Tartalom	Mezőnév
0-399	Bemenő adattömb	F
400-799	Szórás tömb	S
800-1199	Transzformált adattömb	Ø
1200-2729	P-mátrix /oszlopfolytonosan/	P

4.2 Az ORTHOFIT program blokkvázlata

A 2. ábra szemlélteti az ORTHOFIT program funkcionális blokkvázlatát. Az egyes, vastag vonallal határolt sikidomok alakja meghatározza azok jelentéstartalmát is. A logikai müveletek az elágazások számának megfelelő sokszöggel vannak jellemezve. A háromszögeknél a Ø és 1-et használjuk vezérlő paraméterként. A 2. ábrán a Ø feltétel haladási irányát jelöltük.



2. ábra Az ORTHOFIT program blokkvázlata
Jelölések: T = TYPE; A = ASK;
C = COMPUTATION

4.3 Eljárások

Az eljárások megfogalmazásánál igyekeztünk kihasználni a FOKAL nyelv interpretativ jellegét, de óvakodtunk attól, hogy formális, időigényes kiiratásokkal növeljük a futtatási időt. Az 1. utasitáscsoportot "MASTER"-ként használjuk. Ez vezérli az egész futtatás menetét, s a végére érve befejeződik a futtatás is. A futtatás inditása a szokásos G Ⓡ * és D Ⓡ mellett D 1 Ⓡ is lehet. A futtatás során a program minden szükséges információt kér és a folyamatban lévő CPU müveletekről informálja az operátort. A részleteket a program futtatásával foglalkozó fejezetben ismertetjük.

4.31 A fittelés

A fittelő eljárás az alábbi jóldefiniált feladatok elvégzését jelenti:

- a $\underline{\underline{P}}$ mátrix felépitése;
- a polinom koefficiensek kiszámitása;
- a jósági kritérium vizsgálata;
- a közelitő függvényértékek kiszámitása.

Az alábbiakban az egyes feladatok megoldásával kapcsolatban fellépő problémákkal foglakozunk, de nem térünk ki azokra a müveletekre, amelyeket a 2. és 3. fejezetben matematikai formulával egyértelmüen meghatároztunk.

A fittelési eljárás meglehetősen időigényes, amit elsősorban a nyomtatási idő határoz meg. A fokszám növelése mindig egy ujabb, teljes eredmény kiiratást igényel, igy a fittelési eljárás futtatási idejének becslésére a következő formulát használhatjuk:

$$t(sec) = g \, . \, N \, . \, M \qquad /25/$$

ahol a g faktor értéke az adott konfigurációnkra: g = 9.38 sec.

A FNEW F-fel jelölt adatmezőjében 400 adatpont tárolására van hely. Ugyanekkora a transzformált /fittelt/ adattömb részére fenntartott Ø-mező is. A gyakorlatban 400 adatpont fittelése nem szokott előfordulni, mert rendkivül időigényes. Ilyen nagy adattömbök esetén a következő közleményben tárgyalt, u.n. simitási eljárást célszerü alkalmazni a véletlenszerü kisérleti hibák kiküszöbölésére.

---

* Az Ⓡ jelölés a RETURN jelet jelenti.

A P mátrix felépitése

A FNEW P-mezőjében 1529 mátrix-elem tárolására van lehetőség. A mátrix-elemek számát a fittelendő függvény elemszáma és a közelités fokszáma határozza meg a következő összefüggés szerint:

$$M_{max} = 1529/(N + 1) \qquad /26/$$

Ha a rendelkezésre álló teljes adatmező fel van töltve a fittelendő függvénnyel, akkor a $\underline{\underline{P}}$ mezőben csak a 0,1 és 2. foku közelités mátrixelemeinek van hely. Mivel rendszerint a fittelendő függvény lényegesen kisebb elemszámu, a fittelés fokszáma sokkal nagyobb is lehet. A /26/ összefüggés segitségével már a futtatás előtt meghatározhatjuk a közelités maximális fokszámát, amelyet nem szabad tullépni, mert katasztrofális hibajelzéssel megáll a program futtatása.

A $P_{i,j}$ mátrix-elemek kiszámitás kétféle eljárással történhet:

- permutációs, vagy
- rekurziós technikával.

Mindkét eljárást beprogramoztuk,és tanulmányoztuk a futtatási időviszonyokat. Az alábbiakban értékeljük a tapasztalatokat.

A <u>permutációs módszert</u> a /16/ egyenletben fogalmaztuk meg, amelyet a következőképeen egyszerüsitettünk:

$$s_j = (-1)^j \cdot \binom{m}{j}\binom{m+j}{j} \qquad /16a/$$

kifejtve ßs egyszerüsitve

$$s_j = (-1)^j \cdot \frac{(m+j)!}{(m-j)!} \cdot \frac{1}{(j!)^2} \qquad /16b/$$

A s_j és a ${}_{o}^{j-1}(n-j)$ értékek a ${}_{o}^{j-1}(x-j)$ értékektől függetlenül is kiszámolhatók. Számitástechnikai szempontból fontos hangsulyozni, hogy a kis szóhosszuságu gépeken ezzel az eljárással nem lehet megbizható eredményeket nyerni, mert mindhárom mennyiség könnyen tullépheti a szóhosszal reprezentálható /TPA-i, háromszavas FOKAL esetén a 6 értékes jegyü számot/. Ezért a számolásoknál mindig a binomiális faktorból indultunk ki, amelyet először elosztottunk, majd megszoroztunk a relativ koordináta résztényezőkkel. Az eljárás forrásnyelvi listája a következő:

```
Ø5.2Ø F K=Ø,M; S A(K)=Ø; S B(K)=Ø; D 5.3, 5.6
Ø5.3Ø F I=Ø,K; S S=1; S T=1; D 5.4, 5.5; S D(I)=(-1)↑I*S/T/T
Ø5.4Ø F J=K-I+1,K+I; S S=S*J
Ø5.5Ø F J=2,I; S T=T*J
Ø5.6Ø F X=Ø,W; S G=Ø; D 5.7; S A(K)=A(K)+G*G; D 5.65
Ø5.65 S H=FNEW(22ØØ+K*(W+1)+X,G); S B(K)=B(K)+G*FNEW(X)
Ø5.7Ø F I=Ø,K; S E=D(I); D 5.8; S G=G+E
Ø5.8Ø F J=Ø,I-1; S E=E/(W-J/R)*(X-J/R)
Ø5.9Ø F K=Ø,M; S C(K)=B(K)/A(K)
```

A jelen számitásoknál /a 6 számjegyes pontosság mellett/ a polinom fokszámot nem emelhetjük 10 fölé, mert ekkor a permutációs együtthatók értéke már meghaladja a 10^6 értéket, s a tárolt értékek már tartalmaznak jelentős kerekitési hibát.

A <u>rekurziós eljárás</u> a $\underline{P}$ mátrix egy sorának kiszámitására biztosit lehetőséget. A soronkövetkező mátrix-elem kiszámitásához szükség van a sorvektor két előző elemére és a legmagasabb sorindexre - természetesen az aktuális sor- és oszlop-index mellett. Emiatt a sorvektort csak a másodfoku tagtól kezdve célszerü számolni, a nulladfoku tag konkrét értékének és az elsőfoku tag eltérő algoritmusának birtokában. A rekurziós formula tehát:

$$P(I,K) = ((K+K-1) * (N-I-I) * H - (K-1) * (N+K) * G) /(N-K+1)/K \qquad /27/$$

ahol

$$P(I,O) = 1 \qquad /27a/$$

és

$$P(I,1) = 1 - 2 * I/N \qquad /27b/$$

A /27/ egyenletekben használt szimbólumok jelentése pedig: (I,K) a sor- illetve oszlopindex; K az aktuális polinóm fokszám; N az adatpontok száma; H a P(I,K-1)--edik elem értéke; G a P(I,K-2)-edik elem értéke.

Összehasonlítva a kétféle $\underline{P}$ mátrix felépitési eljárás használata során szerzett tapasztalatainkat, megállapithatjuk:

a/ A mátrix elemeknek a permutációs technikával történő számitásakor - mint emlitettük - aritmetikai tulcsordulások léphetnek fel, amelyek a fittelési eredményeket teljesen tönkretehetik. Ilyen hibák a rekurziós eljárásnál nem mutathatók ki.

b/ A két módszert összehasonlitottuk számolási sebesség tekintetében. A 2. táblázatban két adatpárt tüntettünk fel, egy kisebb és egy nagyobb számolási idő igényüt. Mindkét esetben mértük a $\underline{P}$ mátrix felépitéséhez szükséges időt és külön megmértük a mátrix-elemek FNEW mezőben történő tárolási idejét. Az összehasonlitás alapján megállapithatjuk,hogy
- A rekurziós technika lényegesen gyorsabb eljárás, mint a permutációs;

- A sebesség-különbség a fokszámmal arányosan nő /a rekurziós technika ötödfok esetén kb. ötször, 12-ed fok esetén már tizszer gyorsabb eljárás/.

A felsorolt vizsgálati eredmények alapján egyértelmüen megállapitható, hogy a rekurziós eljárást szabad csak használni a számitástechnikai munkákban.

2. táblázat A permutációs és rekurziós $\underline{P}$ mátrix számitási eljárások összehasonlitása

Eljárás	Elem-szám	Fok-szám	Szám.idő	Tárol.idő
Permutációs	10	5	48''	3''
Rekurziós	10	5	9''	3''
Permutációs	25	12	3'37''	10''
Rekurziós	25	12	32''	10''

A $\underline{P}$ mátrixot a 6-os szubrutin épiti fel, egyidejüleg kiszámolva a /19/ egyenlet szerinti $\underline{Q}$ normálási faktorokat és a /21/ egyenlet szerinti $\underline{P}^T \cdot \underline{Y}$ skalárszorzatot, majd a /23/ egyenlet segitségével képezi a megfelelő fokszámu polinom együtthatókat. Ezután a 4-es szubrutin szolgáltatja a /24/ egyenlet szerinti fittelt értékeket, a $\underline{C}$ vektor elemeit. Ugyanez a szubrutin képezi a $\underline{C}$ vektorelemekkel egyidejüleg az input és fittelt értékek eltérés-négyzetösszegét, s megvizsgálja a fittelés jóságát.

A fittelés jósága

A fittelés jóságának megitélése fontos a felhasználó számára. A fittelési eljárást ugyanis addig folytatjuk, amig az eltérés-négyzetösszegből számitott ρ-érték csökkenése nem vált át növekedéssé. Egy másik - ettől független - jósági kritérium a fittelési eredmények megitélése az inputként megadott szórástömb alapján.

A ρ-értékeket a /28/ egyenlet definiálja. Az eltérés-négyzetösszeget osztjuk az 1-gyel és a közelités K fokszámával csökkentett N adatpontok számával:

$$\rho = \left[\sum_{I=1}^{M} (Y(I) - C(I))^2 \right] / (N - 1 - K) \qquad /28/$$

A /28/ egyenlet arról ad felvilágositást, hogy az adott közelités, mint null-hipotézis, elfogadható-e. Ha a null-hipotézis helyes, akkor a ρ-érték függetlennél válik a közelités fokszámától [4].

Annak ellenére, hogy a null-hipotézis lehetőséget biztosit az optimális közelités fokszámának megitélésére, az analitikus szivesebben használja a közelités jóságának értékelésére a saját méréseiből származó szórásértékeket. A feladatot megoldottnak tekintjük, ha a fittelt adatpontok a háromszoros szórásértéken belül közelitik a mért értékeket.

$$|Y(I) - C(I)| < 3 * \sigma \qquad /29/$$

Ennek a mérőszáma

$$\gamma = (Y(I) - C(I)) / \sigma \qquad /30/$$

amely előjelesen mutatja, hogy a kisérleti és számitott érték eltérése az I pontban hányszorosa az I-edik kisérleti adat szórásának.

A program interaktiv jellege lehetővé teszi, hogy ha a /29/-ben megfogalmazott jósági fokot nem is sikerült elérni, de a ρ-érték változási tendenciája megváltozott, vagy a racionális polinom fokszámot tulléptük, akkor mérlegelhetjük: a fokszám növelésével akarjuk-e tovább javitani a közelités jóságát /ekkor az eredményt analitikai szempontból nem tartjuk kielégitőnek/, vagy a számitásokat befejezzük és a kapott eredményeket elfogadjuk jó közelitésnek.

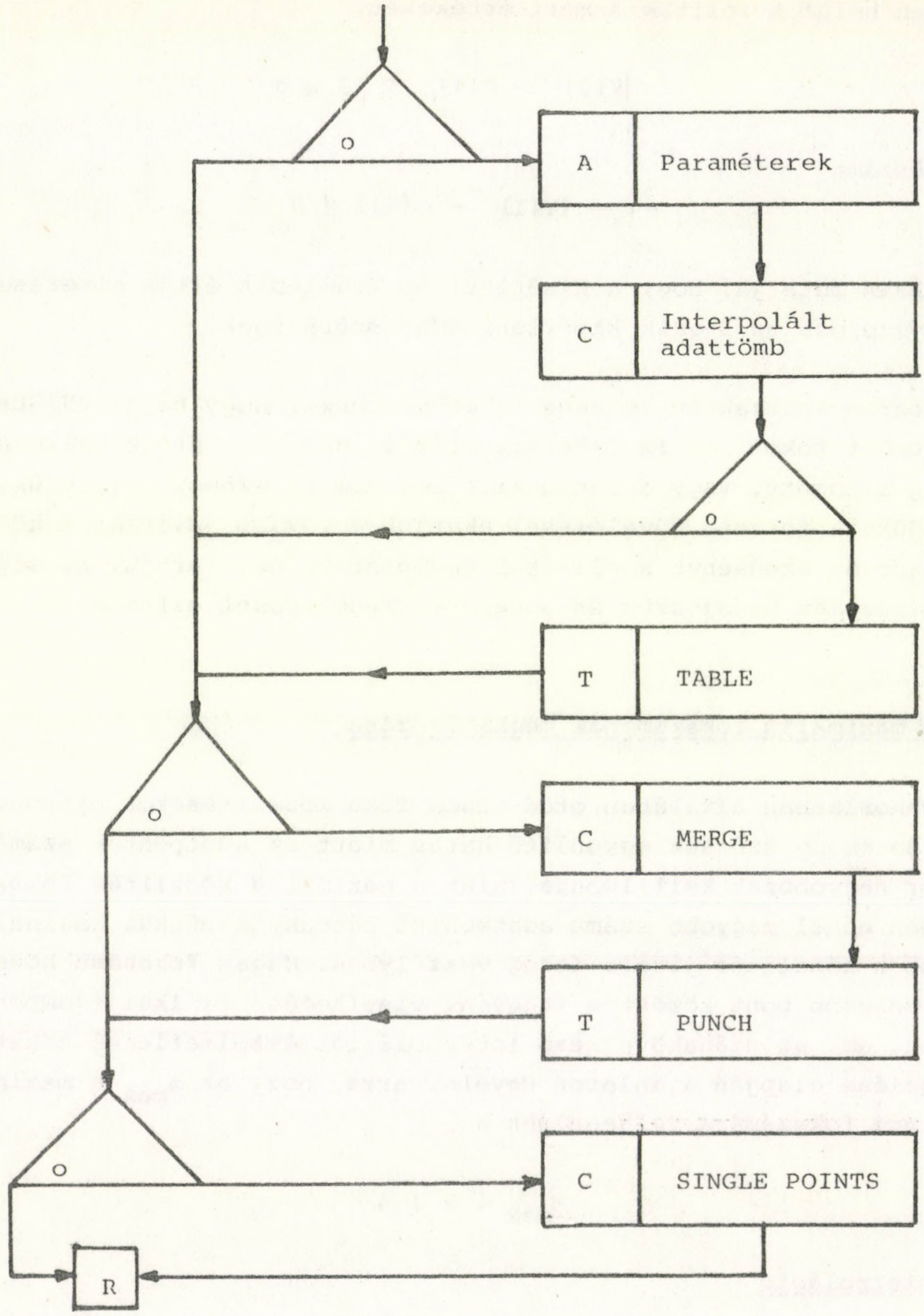
A közelités maximális fokszámának meghatározása

A gyakorlatban általában ötöd-tized-foku közelitéseket tartunk elfogadhatónak. A hatékony szóráskiegyenlitő hatás miatt az adatpontok számának azonban 4-5-ször nagyobbnak kell lennie, mint a maximális közelités fokszámának. Természetesen ennél nagyobb számu adatpontot hátrányok nélkül használhatunk - legfeljebb a közelités jósága forog veszélyben. Magas fokszámu közelités esetén két szomszédos pont között a függvény viselkedése fizikai szempontból irreális lehet, ami az utánakövetkező interpolációt értelmetlenné teheti. Mindezek mérlegelése alapján ajánlatos ügyelni arra, hogy az M_{max} a maximális közelitő polinom fokszámára teljesüljön a

$$M_{max} < N / 4 \qquad /31/$$

4.32 Az interpoláció

A 3. pontban ismertettük az interpolációs számitások matematikai alapjait. A számitástechnikai megoldás blokkvázlatát a 3. ábra szemlélteti. A program - a gyakorlati számitások igényeinek megfelelően - szétágazik és két feladattipus megoldására biztosit lehetőséget: interpolált adattömb készitésére és tárolására; és egyes interpolált adatpontok kiszámitására. A következőkben ismertetjük az eljárások alapelveit.



3. ábra

Az interpolációs eljárás blokkvázlata

Interpolált adattömb készitése

A fittelés értelmezési tartományán belül maximálisan 2730 elemből álló, ekvidisztáns x-koordinátáju adathalmazt állithatunk elő. /Ez az adat természetesen az általunk használt 8K-s FNEW-mezőre vonatkozik. Ettől eltérő FNEW-mező esetén az adatpontok száma az FNEW memória-elemek számának 1/3-ával egyenlő./ Futtatáskor a program kéri az X(1) kezdőpont /FIRST POINT/, az X(N) végpont /LAST POINT/ és a DX = (X(N) - X(1))/N lépésköz /RESOLUTION/ értékét. Ennek megadásánál figyelembe kell venni a következő egyenlőtlenséget

$$(X(N) - X(1)) \,/\, DX \leq 1530 \qquad /32/$$

A számolásokat a 2-es utasitásblokk végzi. A kiszámolt adatokat az FNEW mezőben tároljuk - felülirva az előző tartalmat. A tárolt adatokat a 10-es utasitástömb segitségével kitabelláztathatjuk, standard formátumban. /A részleteket lásd a program futtatásánál./

Interpolációs adattömböt készitünk az FNEW mezőben akkor is, ha a számitások eredményét standard formában ki akarjuk rajzoltatni. Ekkor rendszerint 1K adatpontot állitunk elő, amelyet - minthogy a rendelkezésünkre álló TPA-i közvetlen plotter perifériával nem rendelkezik - a 13-as utasitástömb segitségével lyukszalagon analizátorkódban /5 szám-karakter : terminátorral/ rögzitjük, és ICA-70 analizátoron keresztül x-y regisztrálóval rajzoltatjuk ki.

Egyes interpolált adatok számitása

Az értelmezési tartományon belül tetszőleges x-koordinátához kiszámolhatjuk az interpolált értéket. Ebben az esetben a program az interpolált értéket nem tárolja. Mivel az adatpontokat konzolirógépen kell bevinni és ugyanott jelenik meg a kiszámitott érték is - vessző terminátor alkalmazása esetén - az X(I) és a közelitő C(I)-koordináta egymás mellé kerül egy sorban /lásd a futtatási mintapéldát/.

Ugy érezzük, hogy magyarázatot kell adnunk arra, hogy miért kell közölni a programmal - mindkét interpolációs eljárás előtt - a használni kivánt közelités fokszámát, hiszen a fittelés során már előállitottuk a maximálisan használható elem-/fok/számu A I koefficiens-vektort. A fittelés alapgondolata szerint ugyanis az eljárást addig folytatjuk, amig optimális /a legnagyobb fizikai tartalommal rendelkező/ közelitést el nem értük. Erről a felhasználó két irányból tájékozódhat: a /28/ egyenlet szerinti ρ érték az optimális közelitésnél minimumot mutat, a szignifikancia érték megmutatja, hogy az egyes pontokra számitott érték hányszorosa a hozzátartozó szórásértéknek /vagy az egész adattömbre vonatkoztatva: az átlagos szórásérték hányadrésze az egy pontra vonatkoztatott RMS /root mean square/ értéknek/. A felhasználó tehát megválaszthatja a közelités fokszámát - a fittelés maximális fokszámán belül - ha ugy iténi meg, hogy az adott fokszámon felül már nincs szignifikáns javulás.

A MERGE eljárás

A kisérleti eredmények grafikus ábrázolásánál megköveteljük, hogy a mérési adatpontok és azok szórása fel legyenek tüntetve. A konvencionális eljárás alkalmazása esetén a mért adatpontokat egyenes vagy becsült görbeszakaszokkal szoktuk összekötni. Az előbbi a mért adatpontok kihangsulyozására szolgál, az utóbbinál pedig feltételezzük, hogy "manuális" becslésünk "jó közelitése" a mért adatpontok közötti szakasznak.

A számitógépes eljárások nyujtotta technikai előnyök /tabellázás, grafikus megjelenités stb./ értékesek a felhasználó számára. A jelen munkában az interpolált adattömböt olyan finomságu felbontással állitjuk elő, hogy a plotter /vagy x-y rekorder/ folytonos vonalat rajzoljon. A MERGE eljárás lehetőséget biztosit arra is, hogy a kisérleti eredményeket és azok szórását is beépitsük az interpolált adattömbbe és ilymódon a konvencionális módszerekkel nyert ábrákkal egyenértékü ábrát nyerhetünk.

A MERGE eljárás lényegében az interpolált adattömb értékeit irja felül olymódon, hogy a mérési adatpontnak megfelelő tároló elembe betárolja a mérési eredményt, az ezt megelőző tároló elembe a mérési eredménynek a 3σ szórásértékkel növelt értékét, mig az utána következő eleme a 3σ szórásértékkel csökkentett mérési eredményt tölti. Az ábra x tengely menti felbontása általában olyan kicsi, hogy a mérési eredményt és szórását reprezentáló három adat egy függőleges vonalnak tünik. Az y-koordináta mentén a mérési eredmények jelzései általában könnyen felismerhetők, bár a modern méréstechnika olyan kisszórásu eredményeket szolgáltat, amelynél ez gyakorlatilag beleolvad a rajzolt vonalszélességbe. /A jelen esetben is egy szándékosan megnövelt zaju mérést használtunk fel./

Az inverz függvény előállitása

A gyakorlatban csak az adatpontok DX ekvidisztancia feltételét tudjuk biztositani, pl. az oldatkoncentrációk egyenlőközü megválasztásával. Igy a mérési eredmény - hacsak nem lineáris a minta és a müszerparaméter közötti kapcsolat - nem egyenlőközü. Analitikai, s általában egyéb munkáknál is azért fitteljük meg a függvényt, hogy a mérési eredményekből "visszafelé" a mintaparaméterek értékét meghatározhassuk. Ehhez azonban a mérési eredményeket kellene ekvidisztáns módon előállitani, s a mintaparamétert hozzárendelni.

A rendelkezésre álló y = f(x) függvényből a szükséges x = f(y) függvényt számítástechnikai módszerekkel állitjuk elő. A jelen programban ezt a 12-es szubrutin végzi, amelynek a müködését az alábbiakban foglalhatjuk össze:

a/ A fittelt és inverz függvény független és függő változóira a következő megfeleltetések érvényesek:

	fittelt fv.	inverz fv.
függő változó	Y	Z
független változó	X	T

b/ A T inverz függvény adatpontjainak számát azonosnak vesszük a fittelt függvényével. Tehát N változatlan marad.

c/ Az inverz függvény első és utolsó pontja legyen azonos a fittelt függvény első és utolsó pontjával:

$$T(1) = X(1) \quad \text{ill.} \quad Z(1) = Y(1) \qquad /33a/$$

$$T(N) = X(N) \quad \text{ill.} \quad Z(N) = Y(N) \qquad /33b/$$

d/ Az inverz függvény DZ lépésköze ennek alapján

$$DZ = (Z(N) - Z(1)) / N \qquad /34/$$

e/ Az inverz függvény független változói tehát a

$$Z(I) = Z(1) + I * DZ \qquad /35/$$

ahol I = 0, 1, 2, ..., N-1.

f/ Az iteráció feladata az, hogy megkeressük a fittelt függvénynek azt az x-koordinátáját, amelyhez tartozó függvényérték éppen a következő Z(I) változó.

g/ Az iteráció első lépésében az I-edik T érték első közelitése /a programban átmeneti változóként e célra B-t használjuk/

$$B = T(1) + DX \qquad /36/$$

és ehhez, mint x-koordinátához kiszámoljuk az interpolált értéket.

h/ A következő lépésekben az alábbi algoritmussal javitjuk a B értékét:

$$B_{uj} = T(1) + (B_{régi} - T(1))/(C(I) - 1)/(DT - I + 1) \qquad /37/$$

i/ Az iterációt addig folytatjuk, amig

$$|Z(I) - C(B)| < \varepsilon \qquad /38/$$

ahol $\varepsilon = DZ/10^4$. A /37/ egyenlőtlenséggel meghatározott feltétel az inverz függvény értéket kb. egy nagyságrenddel nagyobb pontossággal állitja elő, mint a legkedvezőbb mérési pontosság.

A kivánt pontosságu inverz érték előállitásához kb. 3-5 iterációs lépés szükséges.

j/ A J-edik iterációs lépésben elfogadott B érték lesz az inverz függvény I-edik eleme.

$$T(I) = B\langle J\rangle \qquad /39/$$

/A < > arra utal, hogy B nem vektor, csak a J-edik felülirásról van szó./

4.4 Az ORTHOFIT program listája

```
C-FOKAL, 1971 KE

Ø1.1Ø T !"ORTHOFIT",!!,"TITLE:"!;O K,X,C;S YE=1;S NO=Ø;S K=-1
Ø1.2Ø A B;I (B-192)1.2,1.3,1.2
Ø1.3Ø O I;S U=3ØØ;S V=12ØØ;T !"CLEAR #";F I=Ø,2729;S H=FNEW(I,Ø)
Ø1.35 D 1Ø;C   INPUT
Ø1.39 D 12.7;C FIRST FIT;WITHOUT THIS WILL BE FINISHED
Ø1.4Ø A !"INVERZ FIT? ",K1;I (K1-1)1.5;D 1.7,12;G 1.5
Ø1.42 T !"COEFFICIENTS"!;D 4.4;S KT=1;D 1.45
Ø1.45 D 1.7;I (D)1.9;D 4;G 1.45
Ø1.5Ø A !"INPOL ARRAY? ",K1;I (K1-1)1.6;D 1.75,2
Ø1.6Ø A !"INPOL POINTS? ",K1;I (K1-1)1.8;D 1.75,1.7,1.65
Ø1.65 A !"X=",X; I (X)1.8Ø;D 5;T %,"Y=",B;G 1.65
Ø1.7Ø A !!"DEGREE=",D
Ø1.75 S N2=N*2;S P(N2+1)=1
Ø1.8Ø T !"FINISHED #";Q
Ø1.9Ø R

Ø2.1Ø A !"RESOLUTION=",DT,"FIRST POINT=",X1,"LAST POINT=",X2;D 1.7
Ø2.3Ø T !"CALCN #";S J=V-1;F M=X1,DT,X2;S J=J+1;S X=M;D 5;S H=FNEW(J,B)
Ø2.6Ø S N1=V;S N2=J;A !"TABLE? ",K1;I (K1-1)2.7;D 9
Ø2.7Ø A !"PUNCH? ",K1;I (K1-1)1.9;D 14

Ø4.1Ø S G=Ø;S E=1;D 4.2,4.5,4.9;R
Ø4.2Ø F I=Ø,N;S B=Ø;D 4.3;S H=FNEW(U+T+I,B);S G=G+(B-FNEW(I))↑2
Ø4.3Ø F J=Ø,D;S B=B+FNEW(V+J*(N+1)+I)*P(J)
Ø4.4Ø F J=Ø,5,D;S K1=4;I (J+4-D)4.8,4.8;S K1=D-J;D 4.8
Ø4.5Ø I (KT)4.7;T !!"RESULTS OF FITTING ";D 9.8,4.6,9.8,4.7;T !!
Ø4.6Ø T !&8,"X",&22,"Y",&34,"FIT",&46,"Y-FIT",&58,"I",&65,"SIGNIF"
Ø4.7Ø F I=Ø,N;I (KT)4.75;T !,%,X1+I*DX,"  ",FNEW(T+I);D 4.75,4.77
Ø4.75 S B=FNEW(I)-FNEW(U+I);S M=B/FNEW(4ØØ+I);S E=E+M↑2
Ø4.77 T "  ",FNEW(U+I),"  ",B,%4,I,"  ",%,M
Ø4.8Ø T !%5,J,":",&8;F I=J,J+K1;T %,P(I)
Ø4.9Ø I (N-D-1)1.9;T &25,"RO =",G/(N-D),&45,"AV. SIGNIF.=",FSQT(E/N)

Ø5.1Ø S X=X/DX;S P(N2+2)=1-2*X/N;S B=Ø;D 5.2,5.3;S X=X*DX;R
Ø5.2Ø F K=2,D;S H=P(N2+K);S G=P(N2+K-1);D 6.8;S P(N2+1+K)=E
Ø5.3Ø F I=Ø,D;S B=B+P(I)*P(N2+1+I)

Ø6.1Ø T !!!%2,K+1;I (N-K-1)1.9;A "TH DEGREE? ",K1;
Ø6.11 I(K1-1)6.12,6.19,6.19
Ø6.12 I(K+.5)1.8Ø,1.9Ø,1.9Ø
Ø6.19 S K=K+1
Ø6.2Ø S T=Ø;S D=K;S P(K)=Ø;S KN=K+1+N;S P(KN)=Ø;S L=V+K*(N+1);S E=1
Ø6.3Ø D 6.4,6.9;T  !%,"COEFF.=",P(K);D 4;G 6.1
Ø6.4Ø F X=Ø,N;D 6.5,6.7;S H=FNEW(L+X,E)
Ø6.5Ø I (K-1)1.9,6.6;S H=FNEW(L-N-1+X);S G=FNEW(L-N-N-2+X);D 6.8
Ø6.6Ø S E=1-2*X/N
Ø6.7Ø S P(KN)=P(KN)+E*E;S P(K)=P(K)+E*FNEW(T+X);R;D 6.95
Ø6.8Ø S E=((K+K-1)*(N-X-X)*H-(K-1)*(N+K)*G)/K/(N-K+1)
Ø6.9Ø S P(K)=P(K)/P(KN)
Ø6.95 I (P(KN)-1.E6)1.9;T !"ARITHMETIC OVERFLOW"

Ø7.1Ø O P,C;F I=Ø,2ØØ;T O
Ø7.2Ø W A
Ø7.3Ø D 7.1;O I,T
```

```
Ø9.1Ø T !"TITLE:",!;O C;D 9.2;O I;S M=21;D 9.9,9.4;R
Ø9.2Ø A B;I (B-192)9.2,1.9,9.2
Ø9.3Ø T !&5,"X  ";F K1=Ø,4;T "          ",%1,K1,"/",%1,K1+5
Ø9.4Ø S M=Ø;F I=N1,1Ø,N2;S M=M+1;D 9.9,9.5,9.6;T !
Ø9.5Ø T !%6,X1+(I-V)*DT;F J=Ø,4;I (N2-I-J)1.9;T "  ",%8.3,FNEW(I+J)
Ø9.6Ø T !&8;F J=5,9;I (N2-I-J)1.9;T "  ",FNEW(I+J)
Ø9.8Ø T !;F K1=Ø,72;T "-"
Ø9.9Ø I (M-18)1.9;S M=Ø;T !!!;D 9.8,9.3,9.3

1Ø.1Ø O K;A !"DATA POINTS=",N,"  FIRST X=",X1,"  DX=",DX;S N=N-1
1Ø.2Ø D 1Ø.3,1Ø.25,1Ø.4;T !"MODIFY";D 1Ø.7;R
1Ø.25 S K1=FITR(1529/N);I (K1-N)1Ø.6;S K1=N;D 1Ø.6
1Ø.3Ø T !!"DATA INPUT"!;F I=Ø,N;T %5,I*DX;D 1Ø.35
1Ø.35 A &1Ø,,"Y=",B,&2Ø,"SD=",D,!;S H=FNEW(I,B);S H=FNEW(4ØØ+I,D)
1Ø.4Ø S XL=DX*N;A !"PRINT INPUT? ",K1;I (K1-1)1.9;D 1Ø.45,1Ø.5
1Ø.45 T !&5,"NR",&15,"X",&25,,"Y",&35,"SD",!;F I=1,4Ø;T "-"
1Ø.5Ø F I=Ø,N;T !%5,I,&9,%8.3,I*DX,FNEW(I),&32,%5.4,FNEW(4ØØ+I)
1Ø.6Ø T !"MAXIMUM DEGREE=",%2,K1," TABLING TIME=",%5,9.38*N,"SEC";D 1Ø.65
1Ø.65 T !,"  FITTING TIME",Ø,12*N,"  SEC"
1Ø.7Ø A !"NO(Ø) - Y(1) - VAR(2)? ",K1;I (K1-1)1Ø.4,1Ø.8,1Ø.9
1Ø.8Ø A "I=",I,"   Y=",B;S H =FNEW(I,B);G 1Ø.7
1Ø.9Ø A "I=",I,"   SD=",B;S H=FNEW(4ØØ+I,B);D 1Ø.7

11.1Ø F I=Ø,N;S H=FNEW(6ØØ+I,P(I))
11.2Ø F I=Ø,N;S P(I)=FNEW(6ØØ+I)

12.1Ø S G=Ø;S E=1;D 12.2,12.3;S H=FNEW(N,XL);S X1=FNEW(Ø)
12.15 D 12.9,12.7;R
12.2Ø T !"WAIT #";F I=Ø,N;S H=FNEW(4ØØ+I,FNEW(4ØØ+I)*XL/(FNEW(N)-FNEW(Ø))
12.3Ø S H=FNEW(Ø,X1);S DT=(FNEW(N)-FNEW(Ø))/N;D 12.4;S DX=DT
12.4Ø F J=1,N-1;S X1=FNEW(J-1);S X=X1+DX;T !!,X;D 1.75,5,12.5,12.45;
12.45 S H=FNEW(J,X)
12.5Ø I(FABS(DT*J-B)-DT/1ØØØØ)1.9;G 12.6
12.6Ø S X=X1+(X-X1)/(B/DT-J+1);T !%5,J,%,X;D 1.75,5;G 12.5
12.7Ø A !"TYPE RESULTS? ",KT;S KT=KT-1;S K=-1;S E=1;D 6,1.42
12.9Ø T !!"INVERZ INPUT",!;D 1Ø.45,1Ø.5;T !"MODIFY";D 1Ø.7

13.Ø5 C ANALYSER
13.12 S P(Ø)=43;S P(1)=177;S P(2)=178;S P(3)=51;S P(4)=18Ø
13.14 S P(5)=53;S P(6)=54;S P(7)=183;S P(8)=184;S P(9)=57;S P(1Ø)=58
13.15 A !"FACTOR=",G;D 7.1,13.2,7.3;R
13.2Ø F I=N1,N2;S C=1ØØØØØ;S B=FITR(FNEW(I)*G);D 13.4;T P(1Ø)
13.4Ø F J=1,5;S C=C/1Ø;S D=FITR(B/C);T P(D);S B=B-C*D

14.1Ø A !"MERGE? ",K1;I (K1-1)1.9;D 14.2,13;R
14.2Ø F I=Ø,N;S M=FNEW(I);S J=FNEW(4ØØ+I);S B=FITR(I*DX/DT+V);D 14.3
14.3Ø S H=FNEW(B,M);S H=FNEW(B-1,M+J);I (M-J)1.9;S H=FNEW(B+1,M-J)

15.1Ø F I=Ø,N;S H=FNEW(4ØØ+I,FNEW(5ØØ+I));S H=FNEW(I,FNEW(1ØØ+I))
15.2Ø F I=Ø,N;S H=FNEW(1ØØ+I,FNEW(I));S H=FNEW(5ØØ+I,FNEW(4ØØ+I))
15.5Ø F I=Ø,N;S L=6;T !!%;F J=Ø,N;S L=L+1;D 15.6;T FNEW(12ØØ+I*(N+1)+J)
15.6Ø I (L-6)1.9;S L=1;T !,%
15.9Ø F I=Ø,N;A B;S H=FNEW(4ØØ+I,B)
←
```

4.5 Az ORTHOFIT program használata

4.5.1 Általános információk

A program interpretativ módban dolgozik. Ez azt jelenti, hogy a futó feladat adatait és vezérlő paramétereit mindig akkor kérdezi az operátortól, amikor szüksége van rá. A vezérlő paraméterekkel rendszerint a program futásának aktuális irányát szabjuk meg. A program az információközlésnek ötféle

- kérdőjeles;
- felkiáltójeles;
- egyenlőségjeles;
- kettőspontos;
- # -jeles

formáját használja, amelyek a következőket jelentik:

A kérdőjeles közlésnek két tipusa van. Az egyiknél a program azt kérdezi, hogy a most következő - kérdőjel előtt álló - funkciót végrehajtsa-e? Ennél a tipusnál a válasz kétféle lehet:

NO Ⓡ * ne hajtsa végre /lépje át/

YES Ⓡ hajtsa végre

a kérdéses utasitás.

A másik kérdőjeles információközlésnél több választási lehetőség van. Ekkor az egyes azonositó jelek után zárójelben kigépeli az egyes kérdésekhez adekvát válaszokat is. Pl. A, B és C választási lehetőség esetén a kérdés:

A(∅) - B(1) - C(2) ?

Azaz ∅ Ⓡ válasz esetén az A; 1 Ⓡ válasz esetén a B és 2 Ⓡ válasz esetén a C müveletet hajtja végre.

A felkiáltójeles információközlés figyelmeztetés a gép részéről, hogy az operátornak a felkiáltójel előtt megnevezett müveletet el kell végeznie a program továbbfolytatása előtt. A gép a program futását ezért leállitja, hogy időt hagyjon a felhasználónak a müvelet elvégzésére. Ezután a program továbbinditható Ⓡ -rel.

---

* A továbbiakban a Ⓡ jel a klaviaturán bevitt "return" karaktert jelenti.

Az egyenlőségjeles közlés tipusnál a gép adatot vár. Az adat jellegét az egyenlőségjel előtt álló szöveg egyértelmüen meghatározza. A válasz tehát: szám Ⓡ .

A kettőspontos közléstipusnál a gép tetszőleges alfanumerikus karaktert vár, amelyek sorozatát ⑥ terminátorral fejezünk be. A terminátor után nem szabad a Ⓡ jelet beütni!

A # -jeles közléstipusnál a program valamely időigényes müveletéről informál bennünket azért, hogy az operátor ne legyen türelmetlen /pl. vélt hibára gondolva, ne állitsa le a futtatást/.

4.5.2 A szubrutinok feladatköre

A FOKAL nyelv az indirekt utasitások sorait 1.00 és 15.99 közötti sorszámokkal látja el. Az interpreter az egésszámu utasitásokat "szubrutinszerü"-en kezeli, ezért célszerü volt egy-egy jóldefiniált feladatkört azonos, egésszámu utasitáscsoportba rendezni. A 3. táblázat ezeket értelmezi.

3. táblázat Az ORTHOFIT program szubrutin-szerkezete

Szubr. sorszám	A szubrutin feladatköre	Hivott szubr.-ok
1	MASTER	2,4,5,6,10,12
2	INPOL ARRAY eljárás	9,13,14
3 4	az adott fokszámu közelités értékelése	9
5	INPOL POINTS eljárás	6
7	program lelyukasztás	
9	táblázatkészités	
10	vezérlő paraméterek és adatok bevitele	
12	az inverz függvények előállitása	5,6,10
13	analizátor lyukszalag előállitása	7
14	MERGE eljárás	13

4.5.3 Az ORTHOFIT program futtatása

A/ A programot D Ⓡ , G Ⓡ , vagy D 1 Ⓡ klaviatura utasitással inditjuk. A program erre

B/ kiirja: ORTHOFIT
TITLE:
és ujra sorban várja

C/ a feladat azonositó szövegét klaviaturán. A szöveg tetszőleges alfanumerikus karaktersorozat lehet, esetleg több sorban is, csupán a ⑥ jel nem fordulhat elő benne, amely az azonositó szöveg terminátora. A ⑥ jel után nem szabad Ⓡ jelet ütni, mert azt már a következő kérdésre adott feleletnek értelmezi a program!!!

D/ A program kiirja: CLEAR #, ami azt jelenti, hogy a program most az FNEW mező törlését végzi.

E/ Input-információk.
A program kéri a következő információkat:

DATA POINTS = ...	az adatpontok számát
1ST POINT = ...	az 1. x-koordináta értékét
DX = ...	az x-koordináta lépésközét

Mindhárom kérdésre numerikus választ adunk Ⓡ terminátorral. Ezután a program kiirja a

MAXIMUM DEGREE = ... és a DEGREE TIME = ... SEC értékét.

F/ Adatbevitel Teletype-on.
A program generálja a következő x-koordináta értékét és kéri a hozzátartozó y-koordináta és szórás értékét /standard deviationben/ a következő formátum szerint:

X = O   Y = ...,   SD = ...,

A pontok helyén meg kell adni a kért numerikus értéket vessző terminátorral lezárva! / Ⓡ terminátort alkalmazva mindig uj sort kezd./

G/ Az input adatok kiiratása.
A program kiirja: PRINT INPUT? A válasz - igényünknek megfelelően NO Ⓡ vagy YE Ⓡ. NO Ⓡ esetén I/-nél; YE Ⓡ esetén H/-nál folytatja.

H/ A fittelési eredmények kiiratása paraméter.
A program kiirja: TYPE RESULTS?
A kérdés arra utal, hogy a későbbi számolások során a program kiirja-e az egyes /különböző fokszámu/ fittelésekhez tartozó részeredményeket.

I/ Az input adatok javitása.
A program megkérdezi: MODIFY? - azaz akarjuk-e javitani az input adatokat? A válasz - igényeinknek megfelelően NO Ⓡ vagy YE Ⓡ lehet. NO Ⓡ esetén G/-hez tér vissza, mig YE Ⓡ esetén kiirja:
NO(∅) - Y(1) - SD(2)?, amely azt jelenti, hogy melyik adatot akarjuk javitani? NO = egyiket sem /ez lényegében a javitási ciklusból való kilépésre szolgál/, Y vagy az SD értéket. Kivánságunk szerint a zárójelben lévő megfelelő számot ütjük le, amelyre a program uj sorban kigépeli:

I = ... és Y = ... vagy
I = ... és SD = ... kérdéseket. Az előbbire /I=/ a javitandó sor számát adjuk meg, az utóbbira /Y= vagy SD=/ a javitott értéket ütjük be. Minden érték után vessző terminátort alkalmazunk, mert ekkor az összetartozó adatpárok egy sorba kerülnek!

Megjegyzés: Bármely sort, sorrendiségtől függetlenül hivhatunk és ujrahivhatunk - javitás céljából. A javitás befejeztével az uj NO(Ø) - Y(1) - SD(2)? kérdésre Ø, vagy Ø Ⓡ választ adjuk, amelyre a program G/-hez tér vissza.

J/ A fittelés.
A fittelés menete ugy van felépitve, hogy a program minden fokszámu közelités kiszámitása előtt megkérdezi, hogy végrehajtsa-e a következő fokszámu közelitést? Ezért kigépeli a kérdést:
...TH DEGREE ?
és megáll. A válasz NO Ⓡ vagy YES Ⓡ lehet értelemszerüen. NO Ⓡ válasz esetén P/-nél folytatja, YES Ⓡ esetén - rövid számolási idő után - uj sorban kiirja
COEFF. = és sorfolytonosan a kiszámitott együttható értékét E specifikációban.

K/ Ha a H/ pontban a TYPE RESULTS ? kérdésre adott válasz YES Ⓡ , akkor L/-nél, ha NO Ⓡ , akkor M/-nél folytatja.

L/ A fittelés eredményének kiiratása.
A program ezután közbeavatkozás nélkül kiirja
RESULTS OF FITTING

X	Y	FIT	Y-FIT	I	SIGNIF

fejlécet, majd utána soronként az adattömb egyes koordinátapárjaihoz tartozó fittelési eredményeket a fejlécben megadott sorrend és elrendezés szerint. A FIT a számitott értékeket, az Y-FIT a kisérleti és a számitott értékek különbségét, az I a relativ koordinátát, mig a SIGNIF értékét a /30/ egyenlet definiálja.

M/ A "jósági paraméterek" kiiratása.
A következő sor felénél kezdi kiirni a RO, majd ezután sorfolytonosan az AV. SIGNIF. értékét E specifikációban.
A különös formátumnak az az oka, hogy ha a H/ pontban a TYPE RESULTS?-ra adott válasz NO Ⓡ volt, akkor a polinom együttható és a két "jósági paraméter" egy sorba kerül.

N/ A program visszatér J/-hez.
Megjegyzés: Ha a számolások során az egyik Q(I,J) elem eléri a 10^6 értéket, akkor a program ARITHMETIC OVERFLOW kiiratás erre felhivja a felhasználó figyelmét.
A program a "fittelési ciklus"-ból csak a J/-nél tud kilépni.

P/ A polinom együtthatók kiiratása.
Külön utasitás nélkül irja ki:
COEFFICIENTS,
majd uj sorban, a sorban szereplő első együttható sorszámát, utána öt együtthatót E specifikációban. A sorok száma attól függ, hogy az együtthatók hány sorban férnek ki. A sorszámot és a sor első együtthatóját : választja el.

Q/ A fittelési eredmények kiiratása.
Erre a kiiratásra akkor lehet szükség, ha a H/-nál a TYPE RESULTS? kérdésre NO Ⓡ választ adtunk. Itt most tetszőleges fokszámu közelités fittelési eredményét kiirathatjuk. A program a következő sor elejére kiirja:
DEGREE =
amelyre a kiirandó fittelés fokszámát várja. Ez az érték tetszőleges lehet a maximális fittelési fokszám alatt. A fokszám beütése után L/ és M/ szerint történik a kiiratás. A kiiratás befejezte után visszatér Q/ elejére egy ujabb közelités eredményének kiiratására. A program ebből a ciklusból csak ugy tud kilépni, ha a DEGREE = értékéül negativ számot adunk meg.

R/ Az "inverz fittelés".
A program megkérdezi: INVERZ FIT? - azaz fel akarjuk-e cserélni az x és y koordinátákat. Nemleges válasz NO Ⓡ esetén S/-nél folytatja. Igenlő válasz YE Ⓡ esetén meglehetősen sok számolást végez, ezért kiirja, hogy WAIT!. A számolások befejezte után kiirja az INVERZ INPUT adatokat és végrehajtja I/ szerint a fittelést.

S/ Az interpolációs tömb előállitása és tabellázása.
A program megkérdezi: INPOL ARRAY? - azaz elő akarunk-e állitani interpolációs adattömböt. Nemleges válasz NO Ⓡ esetén T/-nél folytatja. Igenlő válasz YES Ⓡ esetén három kérdést tesz fel:
RESOLUTION = ... FIRST POINT = ... LAST POINT = ...
Mindhárom kérdésre megadjuk a választ Ⓡ terminátorral. A válaszadásnál a következőképpen kell gondolkoznunk:

A RESOLUTION értéke az interpolált adattömb két szomszédos elemének x-koordináta különbsége. Ezt célszerü decimális értékben kifejezni, hogy a táblázat készitésénél ne legyenek problémák. A FIRST POINT kezdő és a LAST POINT végértéket is célszerü kerek decimális számként megadni, s ügyeljünk arra, hogy az input adatok értelmezési tartományán belül maradjunk. A kiszámitandó adatpontok N2 számát a

N2 = (LAST POINT - FIRST POINT) / DX

összefüggéssel számolja a program. Ezután megkérdezi az adattömb számitásához felhasználandó közelités fokszámát:

DEGREE =

amely tetszőleges lehet a maximális fittelési fokszámon belül, majd a

WAIT

kiirása után kiszámolja az interpolált adattömböt, és megkérdezi

TABLE ?

azaz kitabellázza-e az adattömböt? A válasz lehet nemleges /NO ® /, ekkor a V/ feladat végrehajtásával folytatja. Igenlő válasz esetén /YES ® / kiirja:

TITLE:

és várja a táblázat azonositó szövegét karakteres formában Teletypeon, a C/ pontban leirtaknak megfelelően. Ezután elkésziti a táblázat fejlécét:

X	0 / 5	1 / 6	2 / 7	3 / 8	4 / 9

és értelemszerüen kiirja a táblázat adatait. Az X koordináta értékeit decimálisan növeli, de soronként csak 5 adatot ir ki. Igy minden sorkezdő x-koordinátához két sor adat tartozik, az első sorba az X+0, ..., X+4, mig a második sorba az X+5, ..., X+9 sorszámu adat. A táblázat cimoldalán 34 sort, a többi oldalakon 36 sort ir ki. Természetesen minden oldal fejléccel kezdődik.

T/ Az interpolált adattömb lelyukasztása analizátor kódban.

A program megkérdezi:

PUNCH? - azaz akarunk-e késziteni lyukszalagot az interpolált adattömbről analizátor kódban /5 szám karakter : terminátorral/. Nemleges válasz /NO ® / esetén M/-nél folytatja, igenlő válasz /YES ® / esetén megkérdezi

FACTOR = ...

A válaszadásnál /szám ® / a számfaktor értékét ugy állapitjuk meg, hogy a legnagyobb numerikus érték ne lépje tul a 60000-et. /A szóhossz 16 bit./ A lyukasztás időtartama 1K szó esetén kb. 100 sec. /Kb. 60 karakter/sec./

U/ Egyes, közelitő adatpontok számitása.
A program megkérdezi:
INPOL POINTS? - Nemleges válasz /NO Ⓡ / esetén N/-nél folytatja.
Igenlő válasz /YES Ⓡ / esetén megkérdezi:
DEGREE? - a közelités fokszámát, amelyet tetszőlegesen választhatunk meg a fittelésnél használt legmagasabb értéken belül. Ezzel a program számolásra kész. Felteszi az első kérdést:
X = ... és várja a kiszámitandó pont x-koordinátáját. Ez a szám ugyancsak tetszőleges lehet - az input /vagy inverz/ adatok értelmezési tartományán belül. Az x-koordináta terminátora vessző!, igy a kiszámitott közelitő y-értéket az x-koordináta értékével egy sorban irja a Teletype.
A diszkrét pontok interpolációs közelitését befejezi a program, ha negativ x-koordináta értékét kérjük /az értelmezési tartomány ugyanis Ø és n közé esik/, s V/-nél folytatja.

V/ A futtatás befejezését és a feladat elvégzését jelzi a FINISHED kiirás Teletype-on.

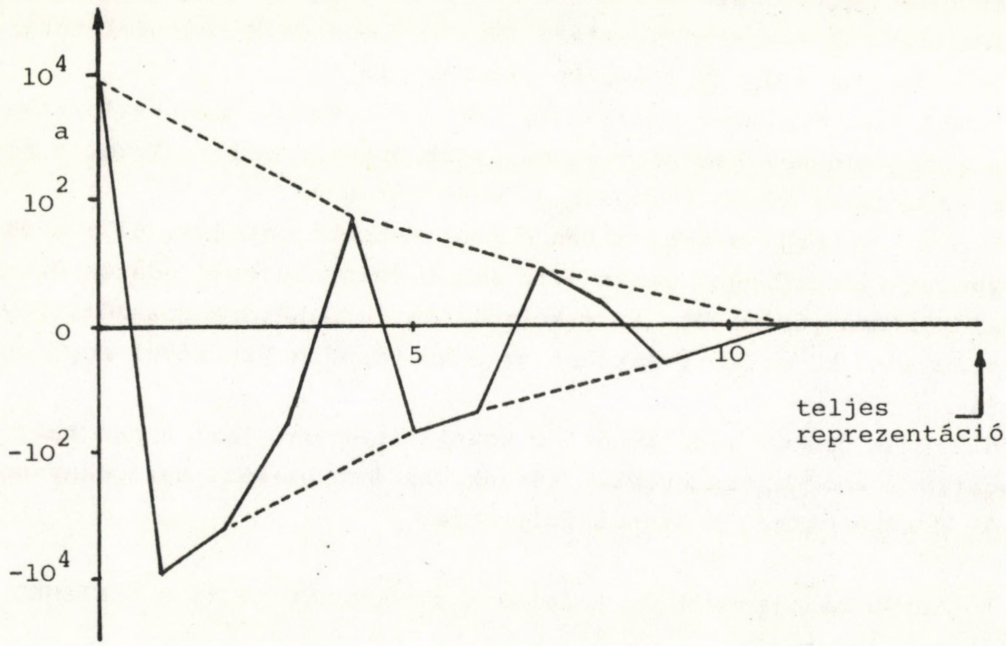
4.6 Futtatási mintapélda

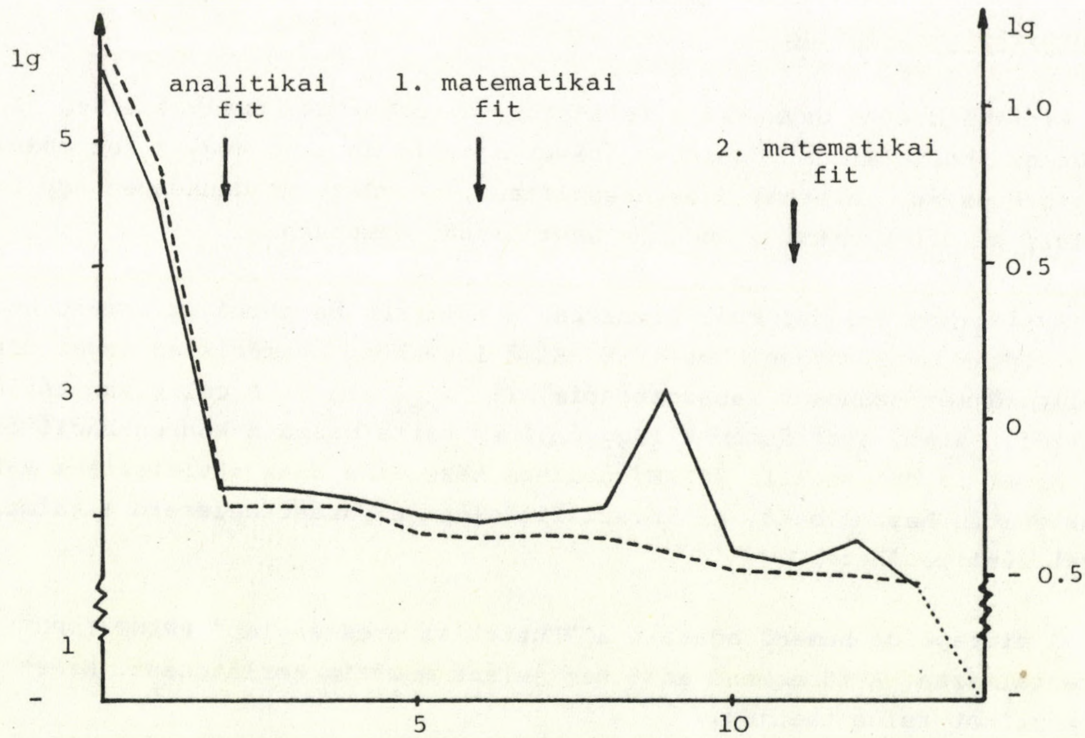
Mintapéldaként ugyanazt a feladatot választottuk, amelyet előző 1 közleményünkben használtunk. Ennek egy részt az volt az oka, hogy a két módszer teljesitőképességét akartuk összehasonlitani, másrészt mindenképpen egy reális /nem elvi/ példán akartuk a módszer használatát bemutatni.

Analitikai feladatoknál általában a kalibrációs görbéket ismert koncentrációju minták segitségével készitik. Első lépésként megmérik az egyes mintákat jellemző mérőszámokat /abszorbancia, T%, I_{rel} stb./. A cél olyan táblázat előállitása, amely a mérőszámok függvényében tartalmazza a koncentráció-értékeket. Mivel az ortogonális /GRAM/ polinom közelités csak ekvidisztáns x-koordináták esetén használható, az inverz fittelési eljárást célszerü alkalmazni a táblázat készitéséhez.

A mintapélda bemenő adatait a "Futtatási eredménylap" PRINT INPUT táblázata tartalmazza. A 16 bemenő adat nem jelent memória korlátozást. Ezért a teljes $\underline{\underline{P}}$ mátrixot felépithetjük.

A 4. ábrán tüntettük fel a polinom együtthatókat és a ρ ill. γ értékeket a polinom fokszám függvényében a teljes vektortérre kiterjedően. Az ábra alapján a következő általános megállapitásokat tehetjük:





4. ábra: A direkt fittelés polinom együtthatói /felső ábra/ a ρ és γ paraméterek /alsó ábra —— ill. ---- görbe/ változása a fokszám függvényében

(i) Az együttható értékek oszcillációja a fokszám függvényében az ortogonális polinomok sajátsága. A fokszám növekedtével az oszcillációk amplitudója csökken /lásd a 4. ábra felső részén a szaggatott vonalakat/.

(ii) Az 1. ábra polinom függvény-alakja és a 4. ábra együttható vektorának görbéje alapján világos, hogy egy adott fokszámu polinom vektor relativ hozzájárulása a fittelt értékhez az x-koordináta értékének függvénye. Ha $m \ll n$, akkor +a és -a között változik a hozzájárulás, mivel az ortonormált $\underline{P}_j$ vektorok szélső értékei +1 és -1 /de nem éri el a -1-et, ha j páros szám/.

A ρ függvény lefutásában rendszerint 4 kitüntetett pontot különböztethetünk meg:

<u>Analitikai közelités</u>: A ρ függvény meredeken csökken az analitikai fit fokszámáig, majd a változás lelassul /nem szignifikáns/. A 4. ábrán ez a másodfoku polinomnál lokalizálható.

<u>1. matematikai közelités</u>: Ujabb kevésbé meredek csökkenés után minimum vagy ismételt ellaposodás jön létre, amelyet kis amplitudóju /rendszerint nem szignifikáns/ oszcillációk követhetnek. A 4. ábrán a 6-odfoku polinomnál jelölhetjük ki a helyét.

<u>2. matematikai közelités</u>: Az a pont, ahonnan a hibapraméterek értéke gyorsan zéróra csökken. A 4. ábrán ezt a pontot a 12-ed foknál találjuk.

<u>Tökéletes közelités</u>: A teljes reprezentációhoz tartozik, amely az input-adatokat hibátlanul megadja.

A ρ - és γ -függvények általában hasonló lefutásuak. Az utóbbin rendszerint kisebbek az oszcillációk és talán az analitikus /vagy gyakorlati felhasználó/ számára többet mond, mint a ρ-függvény, mivel a szórásértékben a jósági kritériumot erősen torzitó hatásokat is figyelembe lehet venni.

A másodfoku fittelés eredményét kiiratva /RESULTS OF FITTING táblázat a futtatási eredménylapon/, láthatjuk, hogy γ-értékek mindenütt a szignifikancia határon belül vannak, azaz a fittelt és a mért értékek a kisérleti szóráson belül megegyeznek. Ennél jobb eredményt nem lehet sem várni, sem elérni, amit igazol is a γ-függvény másodfok feletti lassu, jelentéktelen változása.

A vázolt meggondolások alapján a másodfoku közelitést fogadjuk el megoldásnak. Ebben a közelitésben kiszámoltuk az interpolált adattömböt, s a kis koncentrációk tartományát /ahol a legrosszabb az egyezés/ kitabelláztunk a "Tesztfeladat direkt fittelése" cimü táblázatban.

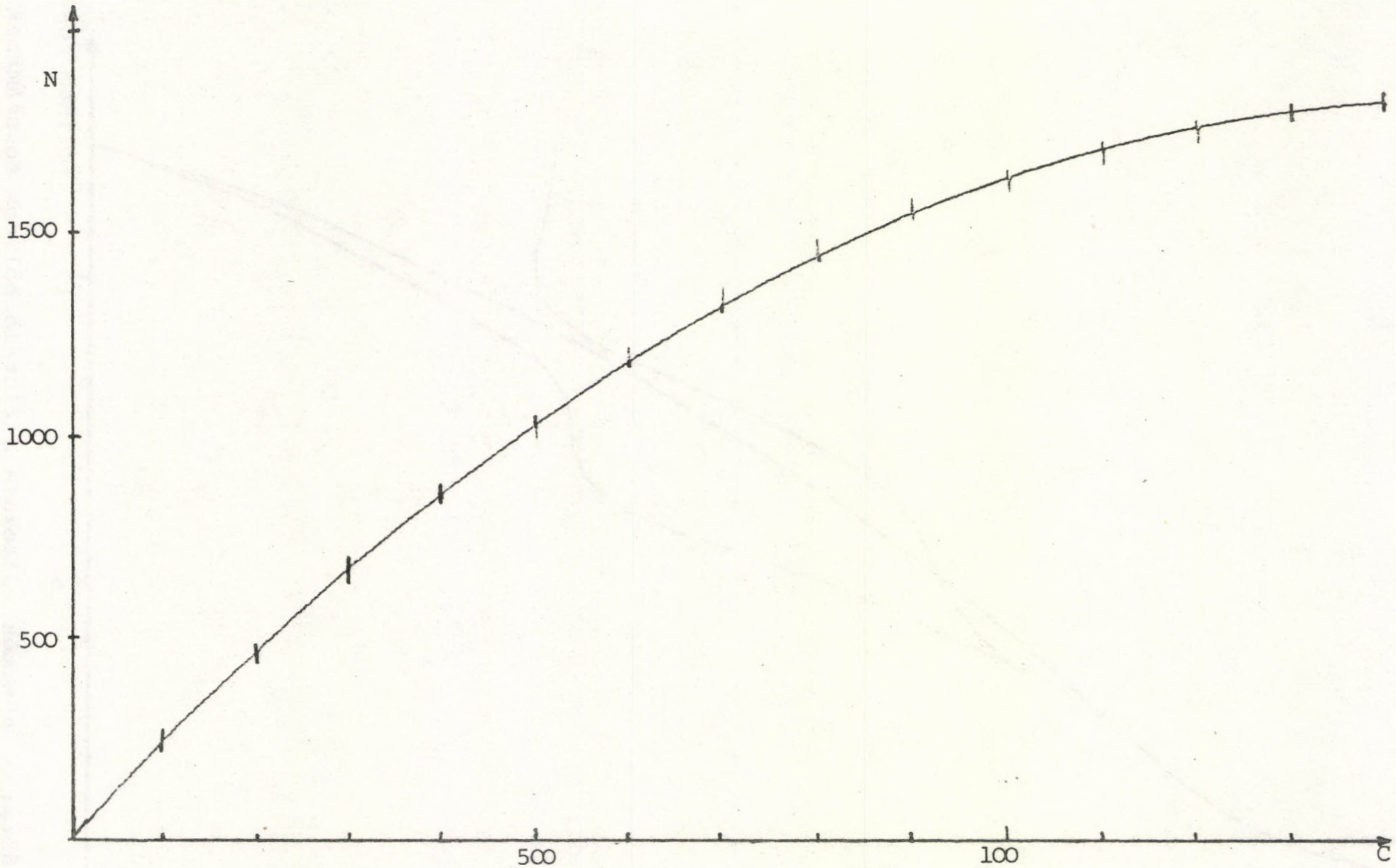
Ugyancsak a másodfoku közelités számitott adattömbjét rajzoltattuk ki az ICA-70 plotterével /5. ábra/, amely a teljes fittelt függvényt tartalmazza 0.1-es felbontásban /RESOLUTION = 0.1/. A számitott értékeket a mérési eredményekkel felülirtuk a MERGE eljárás segitségével. A fittelő egyenletet az 5. ábra alapján tökéletes megoldásnak tekinthetjük, mivel a számitott görbe mindenütt a $\pm 3\sigma$ értékek között halad, s igy a mért és számitott értékek eltérése sehol sem szignifikáns.

A direkt fittelés interpolációs táblázatából látható, hogy a 0.1-es felbontás nem elegendő ahhoz, hogy a táblázatban minden lehetséges - szignifikánsan különböző értékekhez tartozó - müszer koordináta érték előforduljon. A felbontás további növelése célszerütlen, mert a magasabb értékeknél feleslegesen finom ez a lépésköz /több független változóhoz ugyanazok a számitott értékek tartoznak/. Ezért előnyös az inverz függvény fittelését előállitani, amellyel biztositani lehet, hogy minden szignifikánsan különböző mérési adathoz hozzárendeljük a fittelt értéket.

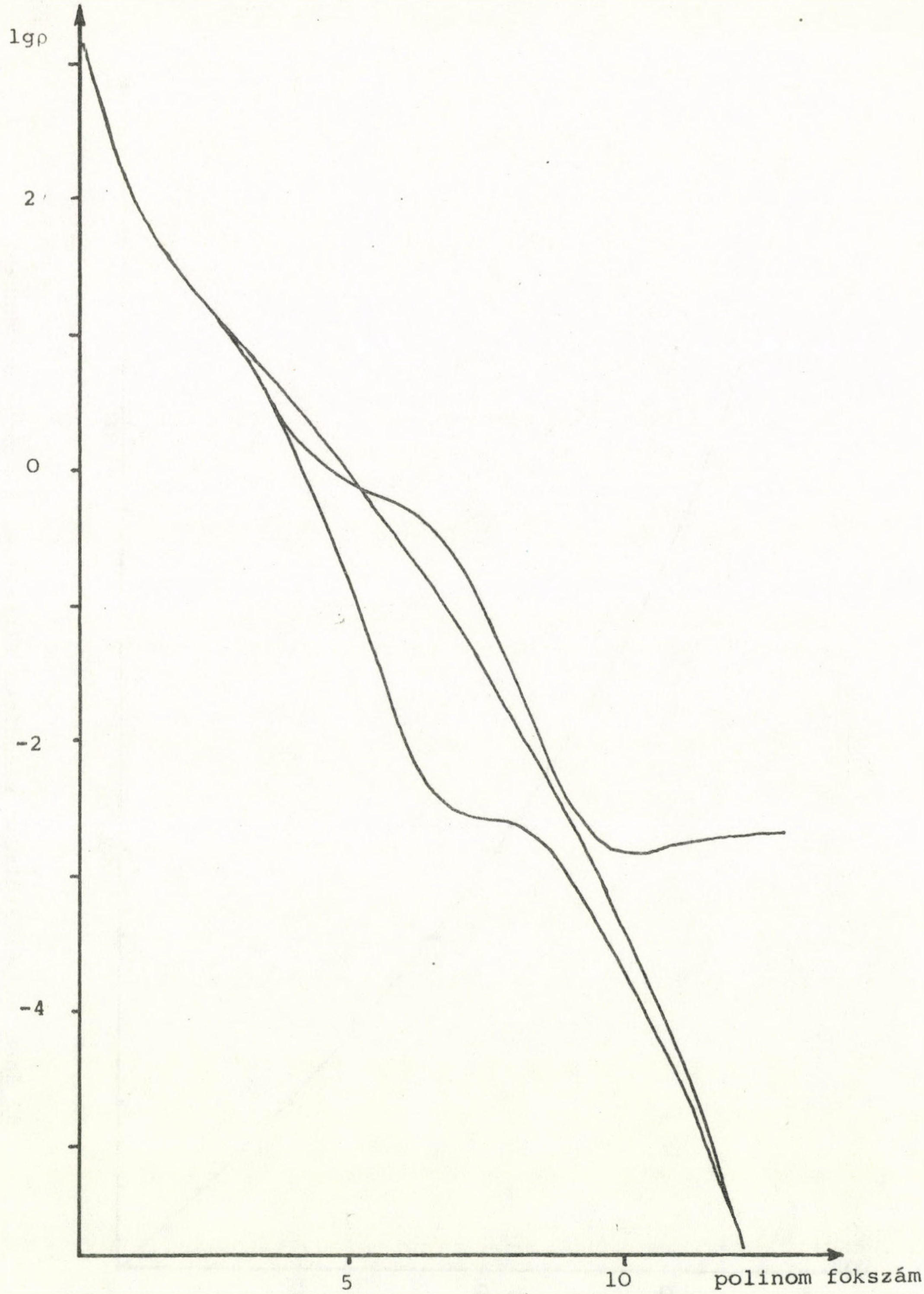
Példafeladatunknak előállitottuk az inverz függvényét a másod-, 6-od- és 11-ed-foku közelitésből nyert polinommal az input-adatoknak megfelelő számu pontban. Mindhárom inverz függvényt közöljük /lásd a 4.62-4.65 pontokat/. Az INVERSE INPUT táblázatokban láthatjuk, hogy a magasfoku közelitések erős torzitásokat tartalmaznak a kisérleti görbe kezdeti - kvázi-lineáris - szakaszán, amit a legjobban a másodfoku közelités ir le a legjobban. Magasabbfoku függvények inverzeit interpolálva ezen a szakaszon negativ értékeket kapunk. /A negativ szakasz hossza arányos az inverz függvény előállitására szolgáló polinom fokszámával./

Mindhárom, előállitott inverz függvényt megfitteltük. A ρ-függvényeket a 6. ábrán tüntettük fel, amelyről megállapithatjuk, hogy ezek sokkal kevésbé tagoltak, mint a direkt fittelés ρ-függvényéé. A 6. ábra mindhárom görbéje - a harmadfoku közelitésig lényegében együtthalad. A három közelitésből a legcélszerübbnek látszik elfogadni a másodfoku inverz függvény negyed-/vagy ötöd-/ foku közelitését.

Az inverz fittelés rész-számitásait nem közöljük, csupán az interpolációs táblázatot, amelynek értékei igy összehasonlithatók a direkt fittelés táblázatos értékeivel. Az eredmény analitikai szempontból kifogástalannak minősithető.



<u>5. ábra</u> A példafeladat másodfoku fittelése, a szórás értékekkel
/A = abszorbancia, C = koncentráció/



6. ábra: A ρ érték változása a fittelő polinom fokszámának függvényében 2 /——/, 6 /---/ és 11 /-.-.-/-edfoku közelitések invertálása esetén.

Az inverz fittelés tapasztalatait a következőkben foglalhatjuk össze:

(i) Az inverz függvényt lehetőleg az analitikai vagy az 1. matematikai közelités-ből állitsuk elő. Nagy adatpontszám esetén se lépjük tul a tizedfoku közelitést.

(ii) Ha a direkt fittelés analitikai szempontból nem elfogadható, akkor inverz fittelés esetleg célravezető lehet.

(iii) Az inverz függvény fittelési fokszámát igyekezzünk minél kisebbre venni a nem szignifikáns eltérésen belül.

4.61 Futtatási eredménylap

Direkt-fittelés:

```
G

ORTHOFIT

TITLE:
ORTHOFIT GO TEST
@
CLEAR #
DATA POINTS= 15
  FIRST X= 0,   DX= 10


DATA INPUT
     0    Y= 0,         SD= 20,
    10    Y= 270,       SD= 23,
    20    Y= 483,       SD= 25,
    30    Y= 714,       SD= 27,
    40    Y= 900,       SD= 27,
    50    Y= 1000,      SD= 31,
    60    Y= 1250,      SD= 33,
    70    Y= 1400,      SD= 34,
    80    Y= 1525,      SD= 335,
    90    Y= 1525,      SD= 36,
   100    Y= 1700,      SD= 37,
   110    Y= 1770,      SD= 38,
   120    Y= 1824,      SD= 38,
   130    Y= 1870,      SD= 39,
   140    Y= 1910,      SD= 39

MAXIMUM DEGREE= 14 TABLING TIME=    131SEC
  FITTING TIME       0   168   SEC
PRINT INPUT? YES

    NR          X            Y            SD
-------------------------------------------------
     0        0.000        0.000       20.000
     1       10.000      270.000       23.000
     2       20.000      483.000       25.000
     3       30.000      714.000       27.000
     4       40.000      900.000       27.000
     5       50.000     1000.000       31.000
     6       60.000     1250.000       33.000
     7       70.000     1400.000       34.000
     8       80.000     1525.000      335.00
     9       90.000     1525.000       36.000
    10      100.000     1700.000       37.000
    11      110.000     1770.000       38.000
    12      120.000     1824.000       38.000
    13      130.000     1870.000       39.000
    14      140.000     1910.000       39.000
```

```
MODIFY
NO(Ø) - Y(1) - VAR(2)? 5\1
I=5,    Y=106Ø

NO(Ø) - Y(1) - VAR(2)? 2
I=4,    SD=29

NO(Ø) - Y(1) - VAR(2)? 2
I=3,    SD=35

NO(Ø) - Y(1) - VAR(2)? 1
I=9,    Y=1625

NO(Ø) - Y(1) - VAR(2)? Ø

PRINT INPUT? YES
```

NR	X	Y	SD
Ø	Ø.ØØØ	Ø.ØØØ	2Ø.ØØØ
1	1Ø.ØØØ	27Ø.ØØØ	23.ØØØ
2	2Ø.ØØØ	483.ØØØ	25.ØØØ
3	3Ø.ØØØ	714.ØØØ	27.ØØØ
4	4Ø.ØØØ	9ØØ.ØØØ	29.ØØØ
5	5Ø.ØØØ	1Ø6Ø.ØØØ	31.ØØØ
6	6Ø.ØØØ	125Ø.ØØØ	33.ØØØ
7	7Ø.ØØØ	14ØØ.ØØØ	34.ØØØ
8	8Ø.ØØØ	1525.ØØØ	35.ØØØ
9	9Ø.ØØØ	1625.ØØØ	36.ØØØ
1Ø	1ØØ.ØØØ	17ØØ.ØØØ	37.ØØØ
11	11Ø.ØØØ	177Ø.ØØØ	38.ØØØ
12	12Ø.ØØØ	1825.ØØØ	38.ØØØ
13	13Ø.ØØØ	187Ø.ØØØ	39.ØØØ
14	14Ø.ØØØ	191Ø.ØØØ	39.ØØØ

```
TYPE RESULTS? NO

 ØTH DEGREE? YES,
COEFF.= .122Ø13E+Ø4      RO = .386141E+Ø6    AV.SIGNIF.= .242772E+Ø2

 1TH DEGREE? YES,
COEFF.=-.942725E+Ø3      RO = .251938E+Ø5    AV.SIGNIF.= .545748E+Ø1

 2TH DEGREE? YES,
COEFF.=-.269473E+Ø3      RO = .162197E+Ø3    AV.SIGNIF.= .459571E+ØØ

 3TH DEGREE? YES,
COEFF.=-.567782E+Ø1      RO = .162364E+Ø3    AV.SIGNIF.= .45Ø231E+ØØ
```

```
4TH DEGREE? YES,
COEFF.= .737986E+01      RO = .144005E+03     AV.SIGNIF.= .449057E+00

5TH DEGREE? YES,
COEFF.=-.687303E+01      RO = .104580E+03     AV.SIGNIF.= .383354E+00

6TH DEGREE? YES,
COEFF.=-.304900E+01      RO = .934233E+02     AV.SIGNIF.= .368609E+00

7TH DEGREE? YES,
COEFF.= .959638E+00      RO = .100231E+03     AV.SIGNIF.= .364559E+00

8TH DEGREE? YES,
COEFF.= .361530E+00      RO = .113799E+03     AV.SIGNIF.= .367493E+00

9TH DEGREE? YES,
COEFF.=-.617341E+00      RO = .972667E+02     AV.SIGNIF.= .331985E+00

10TH DEGREE? YES,
COEFF.=-.351723E+00      RO = .494342E+02     AV.SIGNIF.= .291050E+00

11TH DEGREE? YES,
COEFF.=-.746711E-01      RO = .401967E+02     AV.SIGNIF.= .282531E+00

12TH DEGREE? YES,
COEFF.=-.123034E-02      RO = .602051E+02     AV.SIGNIF.= .282672E+00

13TH DEGREE? YES,
COEFF.= .787380E-02      RO = .280747E+02     AV.SIGNIF.= .270544E+00

14TH DEGREE? YES,
COEFF.= .846351E-03

15
COEFFICIENTS
      0: .122013E+04-.942725E+03-.269473E+03-.567782E+01 .737986E+01
      5:-.687303E+01-.304900E+01 .959638E+00 .361530E+00-.617341E+00
     10:-.351723E+00-.746711E-01-.123034E-02 .787380E-02 .846351E-03
```

DEGREE= 2,

RESULTS OF FITTING

X	Y	FIT	Y-FIT	I	SIGNIF
.000000E+00	.000000E+00	.793524E+01	-.793524E+01	0	-.396762E+00
.100000E+02	.270000E+03	.258099E+03	.119012E+02	1	.517443E+00
.200000E+02	.483000E+03	.490495E+03	-.749463E+01	2	-.299785E+00
.300000E+02	.714000E+03	.705123E+03	.887695E+01	3	.328776E+00
.400000E+02	.900000E+03	.901984E+03	-.198401E+01	4	-.684141E-01
.500000E+02	.106000E+04	.108108E+04	-.210774E+02	5	-.679916E+00
.600000E+02	.125000E+04	.124240E+04	.759644E+01	6	.230195E+00
.700000E+02	.140000E+04	.138596E+04	.140374E+02	7	.412863E+00
.800000E+02	.152500E+04	.151175E+04	.132463E+02	8	.378467E+00
.900000E+02	.162500E+04	.161978E+04	.522241E+01	9	.145067E+00
.100000E+03	.170000E+04	.171003E+04	-.100339E+02	10	-.271187E+00
.110000E+03	.177000E+04	.178252E+04	-.125230E+02	11	-.329551E+00
.120000E+03	.182500E+04	.183724E+04	-.122446E+02	12	-.322227E+00
.130000E+03	.187000E+04	.187420E+04	-.419849E+01	13	-.107653E+00
.140000E+03	.191000E+04	.189339E+04	.166145E+02	14	.426013E+00

RO = .162197E+03   AV. SIGNIF.= .459571E+00

DEGREE= 6,

RESULTS OF FITTING

X	Y	FIT	Y-FIT	I	SIGNIF
.000000E+00	.000000E+00	-.284751E+00	.284751E+00	0	.142375E-01
.100000E+02	.270000E+03	.268078E+03	.192230E+01	1	.835783E-01
.200000E+02	.483000E+03	.494166E+03	-.111662E+02	2	-.446648E+00
.300000E+02	.714000E+03	.700101E+03	.138992E+02	3	.514784E+00
.400000E+02	.900000E+03	.894597E+03	.540283E+01	4	.186305E+00
.500000E+02	.106000E+04	.107805E+04	-.180525E+02	5	-.582338E+00
.600000E+02	.125000E+04	.124670E+04	.330347E+01	6	.100105E+00
.700000E+02	.140000E+04	.139580E+04	.419971E+01	7	.123521E+00
.800000E+02	.152500E+04	.152195E+04	.305347E+01	8	.872419E-01
.900000E+02	.162500E+04	.162437E+04	.629639E+00	9	.174900E-01
.100000E+03	.170000E+04	.170535E+04	-.534766E+01	10	-.144531E+00
.110000E+03	.177000E+04	.176966E+04	.341309E+00	11	.898130E-02
.120000E+03	.182500E+04	.182310E+04	.189551E+01	12	.498818E-01
.130000E+03	.187000E+04	.187009E+04	-.895996E-01	13	-.229743E-02
.140000E+03	.191000E+04	.191027E+04	-.266602E+00	14	-.683594E-02

RO = .934233E+02   AV. SIGNIF.= .368609E+00

DEGREE= 11,

RESULTS OF FITTING

X	Y	FIT	Y-FIT	I	SIGNIF
.000000E+00	.000000E+00	-.731930E-02	.731930E-02	0	.365965E-03
.100000E+02	.270000E+03	.270093E+03	-.932617E-01	1	-.405486E-02
.200000E+02	.483000E+03	.482467E+03	.533386E+00	2	.213354E-01
.300000E+02	.714000E+03	.715807E+03	-.180725E+01	3	-.669352E-01
.400000E+02	.900000E+03	.895969E+03	.403076E+01	4	.138992E+00
.500000E+02	.106000E+04	.106607E+04	-.606689E+01	5	-.195706E+00
.600000E+02	.125000E+04	.124404E+04	.595947E+01	6	.180590E+00
.700000E+02	.140000E+04	.140303E+04	-.303467E+01	7	-.892549E-01
.800000E+02	.152500E+04	.152580E+04	-.803467E+00	8	-.229562E-01
.900000E+02	.162500E+04	.162205E+04	.295142E+01	9	.819838E-01
.100000E+03	.170000E+04	.170273E+04	-.273291E+01	10	-.738624E-01
.110000E+03	.177000E+04	.176853E+04	.147437E+01	11	.387991E-01
.120000E+03	.182500E+04	.182549E+04	-.493164E+00	12	-.129780E-01
.130000E+03	.187000E+04	.186990E+04	.983887E-01	13	.252279E-02
.140000E+03	.191000E+04	.191001E+04	-.805664E-02	14	-.206580E-03

RO = .401967E+02 AV. SIGNIF.= .282531E+00

DEGREE=-1

4.62 Másodfoku fittelésből számitott inverz függvény

```
INVERZ FIT? YES

DEGREE= 2

WAIT #

.100000E+02
   1 .523590E+01
   1 .506484E+01
   1 .504383E+01
   1 .504769E+01

.150477E+02
   2 .107040E+02
   2 .106149E+02
   2 .106131E+02

.206131E+02
   3 .165112E+02
   3 .164197E+02
   3 .164177E+02

.264177E+02
   4 .225911E+02
   4 .224976E+02
   4 .224953E+02

.324953E+02
   5 .289359E+02
   5 .283910E+02
   5 .283885E+02

.383885E+02
   6 .357493E+02
   6 .356549E+02
   6 .356520E+02

.456520E+02
   7 .429547E+02
   7 .428622E+02
   7 .428591E+02

.528591E+02
   8 .506991E+02
   8 .506136E+02
   8 .506102E+02

.606102E+02
   9 .591240E+02
   9 .590544E+02
   9 .590512E+02

.690512E+02
  10 .684440E+02
  10 .684093E+02
  10 .684073E+02

.784073E+02
  11 .790142E+02
  11 .790588E+02
  11 .790621E+02

.890621E+02
  12 .915001E+02
  12 .917506E+02
  12 .917769E+02
  12 .917796E+02

.101780E+03
  13 .107445E+03
  13 .108405E+03
  13 .108580E+03
  13 .108612E+03
  13 .108618E+03
```

INVERZ INPUT

NR	X	Y	SD
0	0.000	0.000	1.4660
1	136.429	5.048	1.6859
2	272.857	10.613	1.8325
3	409.286	16.418	1.9791
4	545.714	22.495	2.1257
5	682.143	28.888	2.2723
6	818.571	35.652	2.4188
7	955.000	42.859	2.4921
8	1091.430	50.610	2.5654
9	1227.860	59.051	2.6387
10	1364.290	68.407	2.7120
11	1500.710	79.062	2.7853
12	1637.140	91.780	2.7853
13	1773.570	108.618	2.8586
14	1910.000	140.000	2.8586

4.63 6-odfoku fittelésből számitott inverz függvény

```
INVERZ FIT? YES

DEGREE=6

WAIT #

.100000E+02
      1 .503914E+01
      1 .483432E+01
      1 .482052E+01
      1 .481977E+01

.148198E+02
      2 .104076E+02
      2 .102079E+02
      2 .101982E+02

.201982E+02
      3 .162472E+02
      3 .161071E+02
      3 .161018E+02

.261018E+02
      4 .225327E+02
      4 .224406E+02
      4 .224381E+02

.324381E+02
      5 .291673E+02
      5 .291038E+02
      5 .291026E+02

.391026E+02
      6 .360340E+02
      6 .360299E+02
      6 .360289E+02

.460289E+02
      7 .432803E+02
      7 .432209E+02
      7 .432197E+02

.532197E+02
      8 .508328E+02
      8 .507609E+02
      8 .507588E+02

.607588E+02
      9 .589124E+02
      9 .588316E+02
      9 .588282E+02

.688282E+02
     10 .678267E+02
     10 .677626E+02
     10 .677585E+02

.777585E+02
     11 .781357E+02
     11 .781714E+02
     11 .781747E+02

.881747E+02
     12 .909649E+02
     12 .913596E+02
     12 .914167E+02
     12 .914249E+02

.101425E+03
     13 .108859E+03
     13 .110327E+03
     13 .110612E+03
     13 .110667E+03
     13 .110677E+03
     13 .110679E+03

INVERZ INPUT
```

NR	X	Y	SD
0	0.000	0.000	1.4660
1	136.429	4.820	1.6859
2	272.857	10.198	1.8325
3	409.286	16.102	1.9791
4	545.714	22.438	2.1257
5	682.143	29.103	2.2723
6	818.571	36.029	2.4188
7	955.000	43.220	2.4921
8	1091.430	50.759	2.5654
9	1227.860	58.828	2.6387
10	1364.290	67.759	2.7120
11	1500.710	78.175	2.7853
12	1637.140	91.425	2.7853
13	1773.570	110.679	2.8586
14	1910.000	140.000	2.8586

```
MODIFY
NO(0) - Y(1) - VAR(2)? NO

PRINT INPUT? NO

TYPE RESULTS? NO
```

4.64 11-edfoku fittelésből számitott inverz függvény

```
INVERZ FIT? YES

DEGREE= 11

WAIT #

.100000E+02
      1 .505116E+01
      1 .350961E+01
      1 .294971E+01
      1 .275276E+01
      1 .268483E+01
      1 .266158E+01
      1 .265365E+01
      1 .265095E+01
      1 .265002E+01
      1 .264971E+01

.126497E+02
      2 .102830E+02
      2 .101954E+02
      2 .101323E+02
      2 .101304E+02

.201804E+02
      3 .165518E+02
      3 .171149E+02
      3 .170030E+02
      3 .170245E+02
      3 .170203E+02
      3 .170211E+02

.270211E+02
      4 .226400E+02
      4 .225325E+02

.325325E+02
      5 .287402E+02
      5 .284190E+02
      5 .283937E+02
      5 .283918E+02

.383918E+02
      6 .356917E+02
      6 .354731E+02
      6 .354536E+02
      6 .354518E+02

.454518E+02
      7 .435336E+02

.535336E+02
      8 .513744E+02
      8 .514325E+02
      8 .514308E+02

.614308E+02
      9 .591275E+02
      9 .590746E+02
      9 .590737E+02

.690737E+02
     10 .674930E+02
     10 .673614E+02
     10 .673501E+02
     10 .673492E+02

.773492E+02
     11 .776663E+02
     11 .777104E+02
     11 .777166E+02

.877166E+02
     12 .912371E+02
     12 .916312E+02
     12 .917357E+02
     12 .917424E+02

.101742E+03
     13 .109210E+03
     13 .110559E+03
     13 .110300E+03
     13 .110343E+03
     13 .110350E+03

INVERZ INPUT
```

NR	X	Y	SD
0	0.000	0.000	1.4660
1	136.429	2.650	1.6859
2	272.357	10.180	1.8325
3	409.236	17.021	1.9791
4	545.714	22.533	2.1257
5	682.143	28.392	2.2723
6	818.571	35.452	2.4188
7	955.000	43.539	2.4921
8	1091.430	51.431	2.5654
9	1227.360	59.274	2.6387
10	1364.290	67.349	2.7120
11	1500.710	77.717	2.7853
12	1637.140	91.742	2.7853
13	1773.570	110.350	2.8586
14	1910.000	140.000	2.8586

```
MODIFY
NO(0) - Y(1) - VAR(2)? NO

PRINT INPUT? NO

TYPE RESULTS? NO

DEGREE=-1
```

4.65 Az inverz függvény fittelésével nyert értéktáblázat

```
MODIFY
NO(0) - Y(1) - VAR(2)? NO

PRINT INPUT? NO

TYPE RESULTS? NO


 0TH DEGREE? YES,
COEFF.= .506334E+02       RO = .165715E+04      AV.SIGNIF.= .184781E+02

 1TH DEGREE? YES,
COEFF.=-.617713E+02       RO = .107402E+03      AV.SIGNIF.= .414995E+01

 2TH DEGREE? YES,
COEFF.= .155753E+02       RO = .257150E+02      AV.SIGNIF.= .139254E+01

 3TH DEGREE? YES,
COEFF.=-.670203E+01       RO = .843725E+01      AV.SIGNIF.= .106220E+01

 4TH DEGREE? YES,
COEFF.= .318713E+01       RO = .272566E+01      AV.SIGNIF.= .609714E+00

 5TH DEGREE? YS\ES,
COEFF.=-.134111E+01       RO = .918170E+00      AV.SIGNIF.= .406910E+00

 6TH DEGREE? NO,
COEFFICIENTS

    0: .506334E+02-.617713E+02 .155753E+02-.670203E+01 .318713E+01
    5:-.134111E+01

DEGREE= 5
```

RESULTS OF FITTING

X	Y	FIT	Y-FIT	I	SIGNIF
.000000E+00	.000000E+00	-.418577E+00	.418577E+00	0	.285529E+00
.136429E+03	.504769E+01	.579613E+01	-.748446E+00	1	-.443954E+00
.272857E+03	.106131E+02	.108856E+02	-.272465E+00	2	-.148683E+00
.409286E+03	.164177E+02	.160554E+02	.362358E+00	3	.183096E+00
.545714E+03	.224953E+02	.218901E+02	.605267E+00	4	.284744E+00
.682143E+03	.288385E+02	.285218E+02	.366699E+00	5	.161381E+00
.818571E+03	.356520E+02	.357990E+02	-.147003E+00	6	-.607740E-01
.955000E+03	.428591E+02	.434557E+02	-.596642E+00	7	-.239409E+00
.109143E+04	.506102E+02	.512796E+02	-.669434E+00	8	-.260942E+00
.122786E+04	.590512E+02	.592816E+02	-.230423E+00	9	-.873230E-01
.136429E+04	.684073E+02	.678640E+02	.543228E+00	10	.200302E+00
.150071E+04	.790621E+02	.779899E+02	.107217E+01	11	.384935E+00
.163714E+04	.917796E+02	.913515E+02	.428101E+00	12	.153693E+00
.177357E+04	.108613E+03	.110539E+03	-.192128E+01	13	-.672096E+00
.191000E+04	.140000E+03	.139210E+03	.789764E+00	14	.276273E+00

RO = .918170E+00   AV.SIGNIF.= .406910E+00

5. Köszönetnyilvánitás

A szerzők ezuton mondanak köszönetet Hegedüs Csaba matematikusnak a kézirat lektorálása során nyujtott hasznos észrevételeiért és Nagy Zsuzsának a kézirat gondos nyomdai előkészitéséért.

6. Irodalom

[1] Szőke J.: Adatfeldolgozás 12. Mérési eredmények legkisebb négyzet fittelése polinomokkal. KFKI-Report 1977-3

[2] M.E.Magar: Analysis in Biochemistry and Biophysics. Academic Press, New York, 1972. 119. old.

[3] Cs.J.Hegedüs: Fitting with Orthogonal Functions. KFKI-Report 1974-34

[4] A.Ralston: Bevezetés a numerikus analizisbe. Müszaki Könyvkiadó, Budapest, 1969.

[5] W.E.Milne: Numerical Calculus. Princeton University Press, Princeton, 1949.

[6] M.Abramowitz and I.A.Stegun: Handbook of Mathematical Functions. Dover Publications Inc., New York, 1968. 171. old.

[7] Szőke J., Mészáros Gy. és Hargitai Cs.: Adatfeldolgozás 15. Kisérleti szinképek jel/zajviszonyának javitása ortogonális polinom simitással. KFKI-Report 1979-(Előkészületben)

7. FÜGGELÉK

F-1 A 15 elemes vektor teljes P-mátrixa

P MATRIX

L / X	0	1	2	3	4
0	.100000E+01	.100000E+01	.100000E+01	.100000E+01	.100000E+01
1	.100000E+01	.857143E+00	.571428E+00	.142857E+00	-.428572E+00
2	.100000E+01	.714286E+00	.208791E+00	-.384615E+00	-.868132E+00
3	.100000E+01	.571429E+00	-.879121E-01	-.637362E+00	-.703296E+00
4	.100000E+01	.428571E+00	-.318681E+00	-.670329E+00	-.248751E+00
5	.100000E+01	.285714E+00	-.483516E+00	-.538461E+00	.250749E+00
6	.100000E+01	.142857E+00	-.582417E+00	-.296703E+00	.620379E+00
7	.100000E+01	.000000E+00	-.615385E+00	.000000E+00	.755245E+00
8	.100000E+01	-.142857E+00	-.532417E+00	.296703E+00	.620379E+00
9	.100000E+01	-.285714E+00	-.483517E+00	.538461E+00	.250749E+00
10	.100000E+01	-.428571E+00	-.318681E+00	.670329E+00	-.248751E+00
11	.100000E+01	-.571429E+00	-.879121E-01	.637362E+00	-.703296E+00
12	.100000E+01	-.714286E+00	.208791E+00	.384616E+00	-.863132E+00
13	.100000E+01	-.857143E+00	.571428E+00	-.142857E+00	-.428572E+00
14	.100000E+01	-.100000E+01	.100000E+01	-.100000E+01	.100000E+01

P MATRIX

L / X	5	6	7	8	9
0	.100000E+01	.100000E+01	.100000E+01	.100000E+01	.100000E+01
1	-.114286E+01	-.200000E+01	-.300000E+01	-.414285E+01	-.542855E+01
2	-.978021E+00	-.384614E+00	.130769E+01	.456044E+01	.990108E+01
3	-.439558E-01	.123077E+01	.238461E+01	.172527E+01	-.378022E+01
4	.750249E+00	.137762E+01	.230768E+00	-.341758E+01	-.724175E+01
5	.999001E+00	.349650E+00	-.192308E+01	-.302198E+01	.274725E+01
6	.674325E+00	-.874125E+00	-.192303E+01	.137363E+01	.741757E+01
7	.000000E+00	-.139860E+01	.000000E+00	.384615E+01	.000000E+00
8	-.674325E+00	-.874126E+00	.192308E+01	.137363E+01	-.741757E+01
9	-.999001E+00	.349650E+00	.192308E+01	-.302197E+01	-.274725E+01
10	-.750249E+00	.137762E+01	-.230768E+00	-.341758E+01	.724175E+01
11	.439558E-01	.123077E+01	-.238461E+01	.172527E+01	.378022E+01
12	.978021E+00	-.384614E+00	-.130769E+01	.456044E+01	-.990109E+01
13	.114286E+01	-.200000E+01	.300000E+01	-.414285E+01	.542855E+01
14	-.100000E+01	.100000E+01	-.100000E+01	.100000E+01	-.100000E+01

P MATRIX

L / X	1Ø	11	12	13	14
Ø	.1ØØØØØE+Ø1	.1ØØØØØE+Ø1	.1ØØØØØE+Ø1	.1ØØØØØE+Ø1	.1ØØØØØE+Ø1
1	-.6857Ø8E+Ø1	-.842832E+Ø1	-.1Ø1415E+Ø2	-.119871E+Ø2	-.137383E+Ø2
2	.17923ØE+Ø2	.292356E+Ø2	.447138E+Ø2	.64997ØE+Ø2	.9Ø9545E+Ø2
3	-.18945ØE+Ø2	-.5Ø8571E+Ø2	-.1Ø9428E+Ø3	-.2Ø7999E+Ø3	-.363988E+Ø3
4	-.174724E+Ø1	.361428E+Ø2	.152428E+Ø3	.428999E+Ø3	.1ØØØ99E+Ø4
5	.1723Ø8E+Ø2	.172857E+Ø2	-.927142E+Ø2	-.571999E+Ø3	-.2ØØ2ØØE+Ø4
6	-.2967Ø5E+ØØ	-.424235E+Ø2	-.51857ØE+Ø2	.429ØØØE+Ø3	.3ØØ299E+Ø4
7	-.166154E+Ø2	.ØØØØØØE+ØØ	.132ØØØE+Ø3	.ØØØØØØE+ØØ	-.3432ØØE+Ø4
8	-.2967Ø8E+ØØ	.424235E+Ø2	-.51857ØE+Ø2	-.429ØØØE+Ø3	.3ØØ299E+Ø4
9	.1723Ø8E+Ø2	-.172857E+Ø2	-.927142E+Ø2	.571999E+Ø3	-.2ØØ2ØØE+Ø4
1Ø	-.174724E+Ø1	-.361428E+Ø2	.152428E+Ø3	-.428998E+Ø3	.1ØØØ99E+Ø4
11	-.18945ØE+Ø2	.5Ø8571E+Ø2	-.1Ø9428E+Ø3	.2Ø7999E+Ø3	-.363988E+Ø3
12	.17923ØE+Ø2	-.292356E+Ø2	.447139E+Ø2	-.649974E+Ø2	.9Ø9595E+Ø2
13	-.6857Ø9E+Ø1	.842336E+Ø1	-.1Ø1417E+Ø2	.119891E+Ø2	-.137776E+Ø2
14	.1ØØØØØE+Ø1	-.1ØØØØØE+Ø1	.1ØØØØØE+Ø1	-.1ØØØØØE+Ø1	.1ØØØØØE+Ø1

F-2 <u>A 15 elemes vektor Q-mátrixának diagonális elemei</u>

DIAGONAL ELEMENTS OF Q MATRIX

L	Q(L,L)
Ø	.15ØØØØE+Ø2
1	.571428E+Ø1
2	.448351E+Ø1
3	.48Ø376E+Ø1
4	.645354E+Ø1
5	.1Ø56Ø3E+Ø2
6	.2Ø8499E+Ø2
7	.496922E+Ø2
8	.144Ø66E+Ø3
9	.5156Ø3E+Ø3
1Ø	.233249E+Ø4
11	.133428E+Ø5
12	.114618E+Ø6
13	.148579E+Ø7
14	.4Ø1164E+Ø8←

F-3 A 15 elemes vektor teljes ortogonális P-mátrixa

ORTH.NORM. P MATRIX

L / X	0	1	2	3	4
0	.258199E+00	.418330E+00	.472270E+00	.456257E+00	.393642E+00
1	.258199E+00	.358569E+00	.269869E+00	.651793E-01	-.168704E+00
2	.258199E+00	.298807E+00	.986059E-01	-.175483E+00	-.341733E+00
3	.258199E+00	.239046E+00	-.415183E-01	-.290801E+00	-.276847E+00
4	.258199E+00	.179284E+00	-.150504E+00	-.305842E+00	-.979188E-01
5	.258199E+00	.119523E+00	-.228350E+00	-.245677E+00	.987053E-01
6	.258199E+00	.597615E-01	-.275059E+00	-.135373E+00	.244207E+00
7	.258199E+00	.000000E+00	-.290628E+00	.000000E+00	.297296E+00
8	.258199E+00	-.597614E-01	-.275059E+00	.135373E+00	.244207E+00
9	.258199E+00	-.119523E+00	-.228351E+00	.245677E+00	.987054E-01
10	.258199E+00	-.179284E+00	-.150504E+00	.305842E+00	-.979187E-01
11	.258199E+00	-.239046E+00	-.415183E-01	.290801E+00	-.276847E+00
12	.258199E+00	-.298807E+00	.986058E-01	.175483E+00	-.341733E+00
13	.258199E+00	-.358569E+00	.269869E+00	-.651794E-01	-.168704E+00
14	.258199E+00	-.418330E+00	.472270E+00	-.456257E+00	.393642E+00

ORTH.NORM. P MATRIX

L / X	5	6	7	8	9
0	.307724E+00	.219002E+00	.141859E+00	.833144E-01	.440395E-01
1	-.351684E+00	-.438004E+00	-.425575E+00	-.345159E+00	-.239071E+00
2	-.300960E+00	-.842313E-01	.185508E+00	.379950E+00	.436039E+00
3	-.135263E-01	.269541E+00	.338278E+00	.143740E+00	-.166479E+00
4	.230370E+00	.301702E+00	.327365E-01	-.284733E+00	-.318923E+00
5	.307416E+00	.765741E-01	-.272805E+00	-.251774E+00	.120988E+00
6	.207506E+00	-.191435E+00	-.272805E+00	.114443E+00	.326666E+00
7	.000000E+00	-.306296E+00	.000000E+00	.320440E+00	.000000E+00
8	-.207506E+00	-.191435E+00	.272805E+00	.114443E+00	-.326666E+00
9	-.307416E+00	.765740E-01	.272805E+00	-.251774E+00	-.120988E+00
10	-.230370E+00	.301702E+00	-.327364E-01	-.284734E+00	.318923E+00
11	.135263E-01	.269541E+00	-.338278E+00	.143740E+00	.166479E+00
12	.300960E+00	-.842312E-01	-.185508E+00	.379950E+00	-.436039E+00
13	.351684E+00	-.438004E+00	.425575E+00	-.345159E+00	.239071E+00
14	-.307724E+00	.219002E+00	-.141859E+00	.833144E-01	-.440395E-01

ORTH.NORM. P MATRIX

X \ L	10	11	12	13	14
0	.207057E-01	.849940E-02	.295375E-02	.820391E-03	.157884E-03
1	-.141981E+00	-.716356E-01	-.299553E-01	-.983414E-02	-.216906E-02
2	.371109E+00	.248910E+00	.132073E+00	.533230E-01	.143603E-01
3	-.392271E+00	-.432254E+00	-.323223E+00	-.170640E+00	-.574681E-01
4	-.361779E-01	.307192E+00	.450234E+00	.351947E+00	.158041E+00
5	.356775E+00	.146918E+00	-.273854E+00	-.469263E+00	-.316084E+00
6	-.614349E-02	-.360617E+00	-.153172E+00	.351947E+00	.474126E+00
7	-.344033E+00	.000000E+00	.389894E+00	.000000E+00	-.541859E+00
8	-.614355E-02	.360617E+00	-.153172E+00	-.351948E+00	.474126E+00
9	.356775E+00	-.146918E+00	-.273854E+00	.469263E+00	-.316084E+00
10	-.361778E-01	-.307192E+00	.450234E+00	-.351947E+00	.158041E+00
11	-.392271E+00	.432254E+00	-.323223E+00	.170640E+00	-.574681E-01
12	.371109E+00	-.248910E+00	.132073E+00	-.533233E-01	.143611E-01
13	-.141981E+00	.716360E-01	-.299559E-01	.983573E-02	-.217527E-02
14	.207057E-01	-.849940E-02	.295375E-02	-.820391E-03	.157884E-03

62.640

Kiadja a Központi Fizikai Kutató Intézet
Felelős kiadó: Krén Emil
Szakmai lektor: Kósa Somogyi István
Nyelvi lektor: Kósa Somogyi István
Példányszám: 390 Törzsszám: 79-133
Készült a KFKI sokszorosító üzemében
Budapest, 1979. március hó