LINEÁRIS ÉS LINEARIZÁLT FÜGGVÉNYKAPCSOLATOK KIÉRTÉKELÉSE

RAJKÓ RÓBERT

Élelmiszeripari Műveletek és Berendezések Tanszék

ÖSSZEFOGLALÓ

Az élelmiszertudomány területén előszeretettel használnak lineáris és linearizált függvényeket bizonyos fizikai, kémiai, biológiai összefüggések leírására. A függvények segítségével jósolni lehet az előzőleg meg nem mért tartományokra, ha a függvények paramétereit, legtöbbször a legkisebb négyzetek módszerével, már meghatároztuk előzetes mérések alapján.

A közlemény a lineáris és linearizált függvénykapcsolatok paraméterbecsléseinek buktatóival és azok kiküszöbölési lehetőségeiről számol be a Főiskolán folyó kutatásokhoz igazodó példákkal illusztrálva.

1. PARAMÉTERBECSLÉS A LEGKISEBB NÉGYZETEK MÓDSZERÉVEL

*A legkisebb négyzetek módszere (LKNM) által becsült paraméterek torzítatlanok és az ilyen becslések között minimális szórásúak akkor és csak akkor, ha a következő feltételek teljesülnek (Gauss tétel, **Cramér, 1946** és **Kendal et al., 1965**):*

- *az összefüggést leíró függvénykapcsolat paraméterekben lineáris:*

$$\tilde{y}_i = a_0 + \sum_{j=1}^{p} a_j \cdot \tilde{x}_{ij},$$

- *a mérési hiba szuperponált (additív hiba):* $y_i = \tilde{y}_i + \varepsilon_i$,
- *az* x_{ij} *független változó hibamentesen mérhető:* $x_{ij} = \tilde{x}_{ij}$,
- *az* ε_i *mérési hiba várható értéke zérus:* $E[\varepsilon_i] = 0$,

- *az ε_i mérési hiba ismert, véges varianciával rendelkezik: $0 < D^2[\varepsilon_i] = \sigma_i^2 < \infty$,*
- *a mérési hibák korrelálatlanok: $COV\{\varepsilon_i, \varepsilon_j\} = 0$, ha $i \neq j$.*

Ekkor a LKNM-vel az $\hat{a}_j$ becslés a következő függvény minimalizálásával nyerhető:

$$QF = \sum_{i=1}^{n} \frac{\left(y_i - \hat{a}_0 - \sum_{j=1}^{p} \hat{a}_j \cdot x_{ij}\right)^2}{\sigma_i^2}. \qquad (1)$$

*Amennyiben a $\sigma_i^2 = \sigma_j^2$ feltevés minden i,j-re helytálló (homoszkedasztikus mérési hibák), akkor a fentebb említett QF függvény megoldása még egyszerűbbé válik. A becsült paraméterek jellemzésére konfidencia intervallumot is szerkeszthetünk, ha a mérési hibák eloszlása Gauss-eloszlású (normális eloszlású) (**Vincze, 1968, Lukács, 1987, Kemény et al., 1990**).*

2. BECSLÉS EGYVÁLTOZÓS LINEÁRIS FÜGGVÉNYKAPCSOLAT ESETÉN

Egyváltozós lineáris függvénykapcsolat esetén az egyenes $\hat{a}_1$ meredekségét és $\hat{a}_0$ tengelymetszetét kell becsülnünk az n db mérési pontból, majd Gauss-eloszlású mérési hiba feltételezésével konfidencia intervallumokat is megadhatunk a jósolt értékekre:

$$\hat{a}_1 = \frac{\sum w_i \sum w_i \cdot x_i \cdot y_i - \sum w_i \cdot x_i \sum w_i \cdot y_i}{\sum w_i \sum w_i \cdot x_i^2 - \left(\sum w_i \cdot x_i\right)^2}$$
$$\hat{a}_0 = \frac{\sum w_i \cdot x_i^2 \sum w_i \cdot y_i - \sum w_i \cdot x_i \sum w_i \cdot x_i \cdot y_i}{\sum w_i \sum w_i \cdot x_i^2 - \left(\sum w_i \cdot x_i\right)^2}, \qquad (2)$$

ahol $w_i = \frac{1}{\sigma_i^2}$ azaz a szórásnégyzetek reciprokával súlyozunk. Homoszkedasztikus hibák esetén $w_i = \frac{1}{\sigma^2}$, ekkor (2) az $\hat{a}_1 = \frac{\sum (x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y})}{\sum (x_i - \bar{x})^2}$ és $\hat{a}_0 = \bar{y} - \hat{a}_1 \cdot \bar{x}$ formulákra egyszerűsödik, ahol $\bar{x} = \sum x_i / n$, $\bar{y} = \sum y_i / n$, valamint a következő konfidencia intervallumokat számíthatjuk:

az a_1 meredekségre
$$a_1 < \left| \frac{t_\varepsilon \sigma}{\sqrt{\sum (x_i - \bar{x})^2}} \right| + \hat{a}_1$$

az a_0 tengelymetszetre
$$a_0 < \left| t_\varepsilon \sigma \sqrt{\frac{1}{n} + \frac{\bar{x}^2}{\sum (x_i - \bar{x})^2}} \right| + \hat{a}_0$$

az ismeretlen y változóra adott x-nél
$$y < \left| t_\varepsilon \sigma \sqrt{1 + \frac{1}{n} + \frac{(x - \bar{x})^2}{\sum (x_i - \bar{x})^2}} \right| + \hat{a}_0 + \hat{a}_1 \cdot \bar{x}$$

az ismeretlen x változóra $\hat{y}$-nál (m az ismeretlen x-re vonatkozó mérések száma)
$$x < \left| \frac{\sqrt{1-\gamma}}{\gamma} \sqrt{\left(\frac{1}{m} + \frac{1}{n}\right) \gamma \sum (x_i - \bar{x})^2 + \frac{(\hat{y} - (\hat{a}_0 + a_1 \bar{x}))^2}{\hat{a}_1^2}} \right| + \bar{x} + \frac{\hat{y} - (\hat{a}_0 + a_1 \bar{x})}{\hat{a}_1 \gamma},$$

ahol $\gamma = 1 - \dfrac{t_\varepsilon^2 \sigma^2}{\hat{a}_1^2 \sum (x_i - \bar{x})^2}$ és t_ε az $(1 - \varepsilon) \cdot 100\%$ biztonsági szinthez, az $n - 2$ szabadsági fokhoz tartozó Student-féle t-eloszlás táblázatból kikeresett értéke.

Ha a σ szórás előzetesen nem ismert, értékét a következő kifejezéssel becsülhetjük
$\sigma \approx s^* = \sqrt{\dfrac{\sum (y_i - (\hat{a}_0 + \hat{a}_1 \cdot x_i))^2}{n-2}}$. Az összegzés ebben a fejezetben mindenütt $i=1$-től n-ig történik.

3. BECSLÉS LINEARIZÁLHATÓ FÜGGVÉNYKAPCSOLATOK ESETÉN

3.1 Enzimreakciót leíró és nem Carman-típusú szűrési egyenlet linearizálása

Vizsgáljuk meg Michaelis és Menten klasszikus egyenletét, mely az egy szubsztrátos enzimreakciók leírását adja a kezdeti sebesség és a szubsztrát koncentráció alapján ***(Keleti, 1991)****:*

$$v_0 = v_{\max} \frac{[S]}{K_M + [S]}, \qquad (3)$$

ahol v_0 *: kezdeti reakciósebesség,*

v_{max} *: az elvileg elérhető maximális kezdeti reakciósebesség,*

$[S]$ *: szubsztrát koncentráció,*

K_M *: Michaelis állandó.*

A (3) egyenlet matematikai alakja természetesen számos más tudományterületen is alkalmazásra kerül, főleg ott ahol valamilyen egyenletesen növekvő, telítettséghez vezető folyamatot kell leírnunk, így megemlíthetjük a gázok adszorpcióját leíró Langmuir-izotermát is.

Mostanában került bevezetésre a tömény szuszpenzió ill. zagy fázisszétválasztására alkalmazott, a Carman-féle modell érvényességi tartományán kívül eső szűrési művelet leírására szolgáló egyenlet ***(Horváth, 1986, Horváth, 1991)****:*

$$V_{sz} = V_{\max} \frac{t}{t_{sz} + t}, \qquad (4)$$

ahol V_{sz} *: szűrlettérfogat,*

V_{max} *: maximális szűrlettérfogat,*

t *: szűrés ideje,*

t_{sz} *: szűrőállandó, felezési idő.*

Mivel (3) és (4) matematikai alakja azonos, ezért a továbbiakban az egyszerűség kedvéért az ezinmreakciónál használt jelölésekkel dolgozunk tovább. A (3) egyenlet linearizálására számos szerző tett javaslatot ***(Keleti, 1991, Valkó et al., 1987)****:*

1. *Lineweaver-Burk módszere*
$$\frac{1}{v_0} = \frac{K_M + [S]}{v_{max}[S]} = \frac{1}{v_{max}} + \frac{K_M}{v_{max}}\frac{1}{[S]}$$

2. *Hanes módszere*
$$\frac{[S]}{v_0} = \frac{K_M}{v_{max}} + \frac{1}{v_{max}}[S]$$

3. *Eadie-Hofstee módszere*
$$v_0 = v_{max} - K_M \frac{v_0}{[S]}$$

4. *Scatchard módszere*
$$\frac{v_0}{[S]} = \frac{v_{max}}{K_M} - \frac{1}{K_M} v_0$$

5. *Eisenthal-Cornish-Bowden és De Miguel Merino-Tamarit módszere (a két módszer csak grafikus megvalósításaiban tér el egymástól, algebrailag a kettő azonosan kezelhető)*
$$v_{max} = \underset{i,j}{T}\left\{ \frac{v_{0j} - v_{0i}}{v_{0i}[S]_j - v_{0j}[S]_i}[S]_i[S]_j \right\}$$
$$K_M = \underset{i,j}{T}\left\{ \frac{[S]_j - [S]_i}{v_{0i}[S]_j - v_{0j}[S]_i} v_{0i} v_{0j} \right\}$$

A felsorolt linearizálási módszerekkel kapott összefüggések használata során sajnos az 1. fejezetben felsorolt feltételek némelyike sérül, így az LKNM nem fog optimális becslést nyújtani, torzított eredményt ad. Ennek oka többek között az is, hogy az eredeti függő változó megjelenik a transzformált független változóban. Megfelelő súlyokat alkalmazva (2)-ben w_i helyén, a következő pontban részletezett eljárással legalább aszimptotikusan torzítatlan becslést nyerhetünk.

*Megemlítjük még, hogy az 5. módszer , pld. T helyén a medián operátort szerepeltetve, egy újabb alternatív lehetőség a probléma áthidalására, ugyanis így robusztus becslőt kapunk, mely kevésbé érzékeny a használatához szükséges feltételek enyhe megsértésére (**Horváth et al., 1989, Rajkó, 1994**).*

3.2 Dimenzió nélküli kifejezések összefüggéseit leíró egyenletek linearizálása

*Ebben a pontban a mikrohullámú hőkezelés folyamatának leírásánál jelentkező probléma (**Szabó, 1994**) általános megoldását ismertetjük. A módszer gyakorlatban történő felhasználására komoly igény merült fel (**Szabó et al., 1994**).*

Dimenzió nélküli kifejezések dimenzióanalízissel levezetett kapcsolatából írjuk fel az egyik komplexet a többi függvényeként, rögtön a linearizált formát megjelenítve:

$$\ln \pi_1 = \ln C + \sum_{j=2}^{p} \alpha_j \cdot \ln \pi_j \; . \tag{5}$$

*A feladat a C állandó és az α_j állandók (kitevők) meghatározása a következő súlyozott négyzetes függvény minimalizálásával (**Kemény et al., 1990**):*

$$QF' = \sum_{i=1}^{n} \frac{\left(\ln \pi_1^{(i)} - \left(\ln C + \sum_{j=2}^{p} \ln \pi_j^{(i)}\right)\right)^2}{\left(\frac{1}{\pi_1^{(i)}}\right)^2 \sigma^2_{\Delta\pi_1^{(i)}}}, \tag{6}$$

ahol $\sigma^2_{\Delta\pi_1^{(i)}} = \sigma^2_{\pi_1} + \sum_{j=2}^{p}\sum_{j=2}^{p}\left(\frac{\partial\pi_1}{\partial\pi_j}\right)\left(\frac{\partial\pi_1}{\partial\pi_k}\right) \mathrm{COV}\{\pi_j, \pi_k\}$, *ami a hibaterjedés törvénye alapján vezethető le. A (6) egyenletet a következő okoskodással nyerhetjük.*

A $QF_{nl} = \sum_{i=1}^{n}\left(y_i - \hat{f}(\underline{x}_i, \underline{\hat{\alpha}})\right)^2$ *minimálizálása általában nemlineáris egyenletrendszerhez vezet, de alkalmasan választott F(.) transzformációval paraméterekben lineárissá tehető az eredeti f(.) függvénykapcsolat. Mivel a linearizált formával általában torzított becsléseket kapunk – az eredeti mérési hibák is transzformálódnak –, alkalmasan választott súlyok segítségével kell a torzítást elhanyagolhatóvá tenni:*

$$QF_{nl} = \sum_{i=1}^{n}\left(y_i - \hat{f}(\underline{x}_i, \underline{\hat{\alpha}})\right)^2 \approx QF' = \sum_{i=1}^{n}\left(\frac{F(y_i) - F\left(\hat{f}(\underline{x}_i, \underline{\hat{\alpha}})\right)}{\left(\frac{\partial F}{\partial y}\right)_{y_i} \sigma_{y_i}}\right)^2 . \tag{7}$$

Térjünk vissza a (6) egyenlethez, melyben a súlyok kiszámításához szükségünk van az éppen becsülendő α_j paraméterekre, így olyan iterációs eljárást kell alkalmazni, ahol a paraméterek kezdő közelítéséből a normál-egyenletrendszert – melyet (6) deriváltjának nullával egyenlővé tétele során nyertünk – megoldjuk, majd a kapott paraméterekből újabb súlyokat számítunk. Ezt az eljárást addig folytatjuk, míg a paraméterek változása egy előírt küszöbérték alatt marad.

4. KÖVETKEZTETÉSEK

Jelen tanulmányban a mérések kiértékeléséhez leggyakrabban alkalmazott lineáris és linearizált függvénykapcsolatok paramétereinek meghatározásának módszereit korrekt módon, matematikai statisztikai eredményekkel alátámasztva ismertettük. Javaslatot tettünk az irodalomban oly gyakran használt, telítés jellegű folyamatokat leíró linearizált függvénykapcsolatok paramétereinek közel optimális becslésére, az egyébként széleskörben helytelenül alkalmazott közönséges LKNM alkalmazása helyett.

Részletesen ismertettük a dimenzió nélküli kifejezések összefüggéseit leíró linearizált egyenelet paramétereinek becslésére szolgáló eljárást.

Nyomatékosan hangsúlyozzuk, még ha az eredeti változók hibaeloszlására érvényes is a Gauss-eloszlás, a linearizálás eredményeképpen, a transzformálás után rendszerint ez már nem áll fenn, így a kapott paraméterek jellemzése a 2. fejezetben ismertetett konfidencia intervallumokkal nem végezhető el, ill. az így számolt eredmények matematikai statisztikai értelemben semmitmondóak lesznek.

Végül felhívjuk az olvasó figyelmét a nem matematikai statisztikai elveken alapuló regressziós modellekre is, melyek a szubjektív jellegű a priori információk hatékonyabb felhasználásával jelenthetik a valóság előnyösebb megközelítését ***(Rajkó et al., 1989, Rajkó, 1994).***

FELHASZNÁLT IRODALOM

Cramér, H. (1946): Mathematical methods of statistics. Princeton University Press, Princeton

Horváth, I. (1986) szerk.: Élelmiszeripari műveletek és gépek példatár. KÉE, Budapest, 99–102.

Horváth, I. (1991) szerk.: Élelmiszeripari műveletek és gépek, laboratóriumi mérési gyakorlatok. KÉE, Budapest, 60–65.

Horváth, I., Rajkó, R. és Huhn, P. (1989): Robusztus regressziós módszerek alkalmazása a lineáris kalibrációs modellben, I. Magy. Kém. Foly., (7-8) 95, 327–335.

Keleti, T. (1991): Enzimkinetika. Tankönyvkiadó, Budapest, 136–151.

Kemény, S. és Deák, A. (1990): Mérések tervezése és eredményeik értékelése. Műszaki Könyvkiadó, Budapest

Kendal, M.G. and Stuart, A. (1965): The advanced theory of statistics, Vol 1-3. Griffin, London

Lukács, O. (1987): Matematikai statisztika példatár. Műszaki Könyvkiadó, Budapest

Rajkó, R. (1994):Treatment of model error in calibration by robust and fuzzy procedures. Anal. Lett., 27(1), 215–228

Rajkó, R., Horváth, I. és Huhn, P. (1989): Paraméterbecslés a fazzi halmazok segítségével. Magy. Kém. Foly., (7-8) 95, 323–326.

Szabó, G. (1994): A mikrohullámú melegítés hőtranszport modelljének kidolgozása dimenzióanalízissel. Élelmiszeripari Főiskola, Tudományos Közlemények. 17

Szabó, G., Rajkó, R., Kovács, E., Papp, T. és Hotya, Zs. (1994): A mikrohullámú termikus kezelés hatása a szójabab minőségére. Élelmiszeripari Főiskola, Tudományos Közlemények. 17

Valkó, P. és Vajda, S. (1987): Műszaki tudományos feladatok megoldása személyi számítógéppel. Műszaki Könyvkiadó, Budapest, 179–182.

Vincze, I. (1968): Matematikai statisztika ipari alkalmazásokkal. Műszaki Könyvkiadó, Budapest

EVALUATION OF LINEAR AND LINEARIZED FUNCTIONAL RELATIONSHIPS

R.RAJKÓ

University of Horticulture and Food Industry
College of Food Industry
H-6701. Szeged, P.O.Box 433.

ABSTRACT

In food science the linear and linearized functions are frequently used for describing some physical, chemical and biological relationships. Unknowns can be predicted with help of these functions, provided that their parameters were previously estimated mostly based on the least sum of squares method.

The paper shows the difficulties of using linearity and linearization and shows the possible solutions tackling the problems through examples selected from the research activities of the College.