

Regresja i niepewność linii prostej dla pomiarów obu zmiennych x i y ze wszystkimi korelacjami

Jacek Puchalski

Główny Urząd Miar, ul. Elektoralna 2, 00-001 Warszawa

Zygmunt Lech Warsza

Sieć Badawcza Łukasiewicz – Przemysłowy Instytut Automatyki i Pomiarów PIAP, Al. Jerozolimskie 202, 02-486 Warszawa

Streszczenie: Praca kontynuuje cykl publikacji o szacowaniu metodą regresji liniowej parametrów równania i granic pasma niepewności linii prostej $y = ax + b$ dopasowanej do wyników pomiarów obu współrzędnych punktów badanych. Rozpatrzono przypadek ogólny, gdy współrzędne te mają różne niepewności i występują wszystkie możliwe autokorelacje i korelacje wzajemne. Zastosowano opis równaniami macierzowymi. Wyniki pomiarów współrzędnych przedstawiono jako elementy wektorów w \mathbf{X} i \mathbf{Y} . Propagację niepewności opisano macierzą kowariancji \mathbf{U}_z o czterech macierzach składowych, tj. \mathbf{U}_x i \mathbf{U}_y – dla niepewności i autokorelacji zmiennych \mathbf{X} i \mathbf{Y} oraz \mathbf{U}_{xy} i jej transpozycja \mathbf{U}_{xy}^T – dla korelacji wzajemnych. Podano równanie linii prostej i granice jej pasma niepewności. Otrzymane je dla funkcji parametrów a i b spełniającej tzw. kryterium totalne WTLS, tj. minimum sumy kwadratów odległości punktów od prostej ważonych przez odwrotności niepewności współrzędnych. Przy nieskorelowaniu współrzędnych różnych punktów stosuje się uproszczone kryterium WLS. Kierunki rzutowania punktów wnikają z minimalizacji funkcji opisującej kryterium. W przypadku ogólnym istnieje tylko rozwiązanie numeryczne. zilustrowano to przykładem. Parametry a i b linii prostej wyznaczono numerycznie z powiększonych fragmentów wykresu funkcji kryterialnej wokół jej minimum. Podano też warunki wymagane dla niepewności i korelacji współrzędnych punktów, które umożliwiają uzyskanie rozwiązania analitycznego i jego przykład.

Słowa kluczowe: regresja liniowa, regresja linii prostej, pomiar współrzędnych punktu, niepewność, kryterium minimalizacji, prosta regresji, pasmo niepewności, autokorelacja, korelacja wzajemna

1. Wprowadzenie

Metodą regresji liniowej wyznacza się funkcję opisującą zależność między współrzędnymi zbioru badanych punktów, która spełnia określone kryterium. Dla dwu zmiennych x i y poszukuje się funkcji $y = F(P_0 + P_1x + P_2x^2 + \dots)$ liniowo zależnej od jej parametrów P_i . W najprostszym przypadku dwu zmiennych y i x oraz linii prostej, kryterium tym jest minimum sumy kwadratów odległości punktów badanych od tej funkcji w kierunku $0y$ lub $0x$. W metrologii i teorii działania systemów i przyrządów pomiarowych (wspólny ang. termin

*Measurement Science*¹⁾) funkcją wyznaczoną metodą regresji opisuje się wyniki pomiarów menzurandu, a dla aparatury pomiarowej – jej właściwości metrologiczne, np. charakterystykę przyrządu jako wynik jego wzorcowania. Do szacowania dokładności menzurandu korzysta się z zaleceń Przewodnika Wyznaczania Niepewności Pomiarów o angielskim akronimie GUM [31]. W pierwszej, międzynarodowo opracowanej wersji GUM z 1993 r. wprowadzono pojęcie: niepewność pomiaru i podano zasady jej wyznaczania. Uwzględniają one zarówno występujące w eksperymencie rozrzuty wyników pomiarów, ocenione przez niepewność u_A , jak i niezidentyfikowane i nie usunięte przez poprawki błędy systematyczne – przez niepewność u_B oraz ich sumę geometryczną jako niepewność złożoną u i niepewność rozszerzoną $U = k_p u$ o współczynniku pokrycia k_p dla określonego prawdopodobieństwa P , np. 0,95 %. Przewodnik GUM kilkakrotnie udoskonalano i ciągle uzupełnia się kolejnymi Supplementami. Używany jest on powszechnie w praktyce pomiarowej służb miar ponad 150 krajów, w nauce, technice i niemal we wszystkich innych dziedzinach oraz we współpracy międzynarodowej. z badań ekonometrycznych,

Autor korespondujący:

Jacek Puchalski, j.puchalski@gum.gov.pl

Artykuł recenzowany

nadesłany 16.03.2022 r., przyjęty do druku 19.05.2022 r.



Zezwala się na korzystanie z artykułu na warunkach licencji Creative Commons Uznanie autorstwa 3.0

¹⁾ Termin ten zaproponował w Acta IMEKO w 1970 r. prof. Ludwik Finkelsztein z City University w Londynie, pochodzący ze Lwowa.

socjologicznych i niektórych medycznych i przyrodniczych, a nawet fizycznych oraz w bogatej literaturze matematycznej [1, 7–15, 29] o różnych rodzajach regresji liniowej, chociaż obie niepewności składowe zwykle mogą mieć inne wartości dla każdej z mierzonych współrzędnych. Wpływa to na parametry prostej regresji i jej pasmo niepewności.

Równanie prostej regresji i jej pasmo niepewności tworzy się z uwzględnieniem wszystkich zmierzonych wartości współrzędnych y punktów, ich niepewności u_y i skorelowań. Dokładność współrzędnych każdego z punktów wzrośnie, gdy ich pomiary powtórzy się wielokrotnie. Jeśli przy tej samej wartości odciętej x_i występują rozrzuty wartości y_{ij} powtarzanych obserwacji rzędnej y , 1, to w dalszych obliczeniach prostej regresji stosuje się wartości średnie \bar{y}_i i ich niepewności standardowe \bar{u}_{y_i} uwzględniając funkcję autokorelacji dla wartości bliskich sobie. To podejście zainicjował w Polsce M. Dorozhovets i z Z. Warszą opisali je w [2–6, 16, 18], a A. Zięba jeszcze to udoskonalił [30, 17]. Autorzy zastosowali to dla serii powtórzonych pomiarów zmiennej losowej y_i pojedynczego punktu [25, 27]. Przy wyznaczaniu parametrów linii prostej metodą regresji uzyskuje się macierz kowariancji o istotnie mniejszym rozmiarze, niż wspólna dla wszystkich obserwacji.

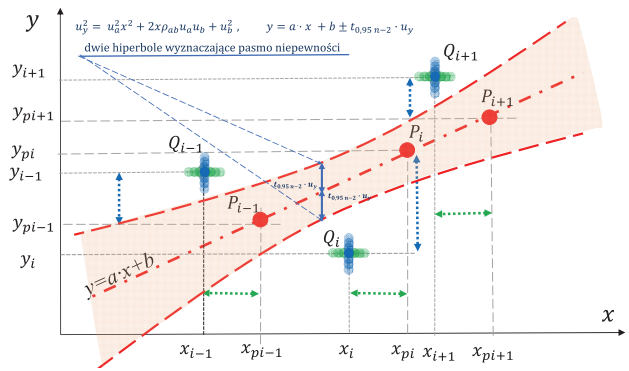
Wg koncepcji Z. Warszawy autorzy opracowali też szereg publikacji o ocenie niepewności wg zasad przewodnika GUM w pośrednich pomiarach wieloparametrowych z autokorelacją i korelacją wzajemną [19–23]. Problematykę tę kontynuowali też w serii prac [24–28] o parametrach i niepewnościach linii prostej wyznaczonej metodą regresji liniowej z pomiarów jednej zmiennej bez korelacji i przy różnym skorelowaniu współrzędnych punktów badanych [24, 25].

Poniżej przedstawia się podstawy teoretyczne szacowania parametrów i przebiegów granic pasm niepewności linii prostej o równaniu $y = ax + b$ wyznaczanym metodą regresji liniowej dla najbardziej ogólnego przypadku pomiarów zbiorów obu współrzędnych x_i i y_i punktów badanych o niejednakowych niepewnościach, występowaniu autokorelacji lokalnej pomiędzy obserwacjami wielokrotnie mierzonych współrzędnych y lub/ i x jednego punktu i różnych punktów oraz korelacji wzajemnej między zbiorami współrzędnych x i y . Parametry te wyznacza się dla minimum funkcji opisującej kryterium WTLS (ang. *Weighted Total Least Squares*) wynikające z maksymalizacji funkcji największej wiarygodności. Macierzowe prawo propagacji niepewności dla pomiarów współrzędnych punktów tylko y lub x stosuje się w kierunku rzutu $0y$ lub $0x$ na funkcję regresji, dla regresji ortogonalnej – w kierunku prostopadłym [6] oraz w ogólnym przypadku pomiarów x i y każdego z punktów – w różnych kierunkach wynikających z minimalizacji funkcji opisującej kryterium, jak omówił to J. Puchalski [13]. (patrz sekcja 4).

2. Prosta regresji dla pomiarów obu współrzędnych punktów badanych

Równanie prostej wyznaczone metodą regresji liniowej dla opisu zależności między współrzędnymi badanymi punktów, otrzymuje się z warunku minimalizacji funkcji kryterialnej. Pasma niepewności prostej regresji o prawdopodobieństwie P jest ograniczone dwoma hiperbolami $\pm U_y(x)$. Otrzymuje się je z równań propagacji niepewności. W przypadku ogólnym parametry równania tej prostej i granice jego pasma niepewności zależą od wartości badanymi współrzędnymi punktów, jak i od zbiorów ich błędów pomiaru opisanych niepewnościami, funkcjami autokorelacji i korelacją wzajemną. Rysunek 1 przedstawia prostą regresji $y = ax + b$ i rzuty na nią trzech z badanych punktów.

Zaznaczono szerokości rozkładów błędów obu mierzonych współrzędnych x_i i y_i tych punktów Q_{i-1} , Q_i i Q_{i+1} oraz ich rzuty



Rys. 1. Trzy z punktów pomiarowych z niepewnościami $u_i(x)$, $u_i(y)$, prosta regresji $y = ax + b$ i pasmo jej niepewności jako obszar pokrycia o określonym prawdopodobieństwie, np. $P = 0,95$
Fig. 1. Three of the measurement points with uncertainties $u_i(x)$, $u_i(y)$, the regression line $y = ax + b$ and its uncertainty band as the coverage area with a certain probability, e.g. $P = 0.95$

P_{i-1} , P_i i P_{i+1} na prostą regresji z uwzględnieniem składowych w kierunkach $0y$ i $0x$. Wykreślono też pasmo niepewności prostej, ograniczone dwoma hiperbolami. U góry rysunku 1 jako przykład podano równania dla niepewności standardowej u_y i rozszerzonej $U_y = t_{0,95, n-2} u_y$ o współczynniku pokrycia z prawdopodobieństwem 0,95 i o $n-2$ stopniach swobody. Na podstawie parametrów macierzy kowariancji U_{ab} dla prostej regresji, tj. niepewności standardowej dla współczynnika kierunkowego a , wyrazu wolnego b , oraz współczynnika korelacji między a i b , oznaczonych odpowiednio jako u_a , u_b i ρ_{ab} , pasmo niepewności prostej regresji wyznaczają dwie hiperbole

$$y = ax + b \pm t_{0,95, n-2} \sqrt{x^2 u_a^2 + 2\rho_{ab} x u_a u_b + u_b^2} \quad [24-28].$$

Kierunek rzutu w przypadku ogólnym wynika z minimalizacji funkcji kryterialnej. Zwykle dla regresji y względem x rzutuje się w kierunku $0y$, dla regresji x względem y – w kierunku $0x$ i w regresji ortogonalnej – w kierunku prostopadłym do prostej regresji z dodatkowym wymaganie spełniania określonej zależności między niepewnościami obu współrzędnych [6].

Dla pomiarów obu współrzędnych punktów $Q_i(x_i, y_i)$, mierzonych nawet z jednakowymi niepewnościami standardowymi u_x , u_y , parametry prostej regresji i rozstęp granic pasma niepewności prostej zależą od obu tych niepewności (sekcja 9).

Równania granic niepewności prostej wyznaczonej metodą regresji liniowej mają postać wyznaczalną analitycznie dla pomiarów jednej wielkości w regresji y na x oraz x na y , nawet wtedy, gdy zmienne te mają autokorelacje. Dla pomiarów obu zmiennych opracowano rozwiązanie analityczne tylko dla przypadków szczególnych. Dorozhovets wyznaczył je dla jednakowej niepewności obu nieskorelowanych współrzędnych [6]. Mieści się to w podanym przez Deminga przypadku stałego ilorazu

$$\frac{u^2(y_i)}{u^2(x_i)} \quad [13].$$

York rozwiązał to iteracyjnie przy kore-

lacji tylko między współrzędnymi x_i i y_i każdego z punktów [29].

Równania macierzowe dla wyników pomiarów wartości współrzędnych n punktów przedstawionych jako dwa losowe wektory: $\mathbf{X} = [x_1, \dots, x_p, \dots, x_n]^T$ i $\mathbf{Y} = [y_1, \dots, y_p, \dots, y_n]^T$, w przypadku ogólnym są rozwiązywalne tylko numerycznie. Postacie równań uproszczą się, jeśli zmienne \mathbf{X} i \mathbf{Y} oznaczyć wspólnie zmienną \mathbf{Z} o $2n$ wartościach z_i opisanych wektorem $\mathbf{Z} = [\mathbf{X}^T, \mathbf{Y}^T]^T$. Niepewności pomiarowe punktów oznacza się wówczas ogólnie przez $u(z_i)$, a korelację par zmiennych z_i i z_j współczynnikami korelacji ρ_{ij} – znanymi lub szacowanymi na podstawie współczynników Pearsona r_{ij} otrzymywanych z próbki. Już dla kilkunastu powtarzanych pomiarów $r_{ij} \approx \rho_{ij}$. Propagację niepewności pomiarów

zmiennej Z opisuje symetryczna macierz kowariancji U_Z (1) z niepewnościami $u(z_i)$ jako odchyleniami standardowymi w jednostkach takich, jak zmienna z_i , tj.:

$$U_Z = \begin{bmatrix} u^2(z_1) & \dots & \rho_{1,2n}u(z_1)u(z_{2n}) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \rho_{1,2n}u(z_1)u(z_{2n}) & \dots & u^2(z_{2n}) \end{bmatrix} \quad (1)$$

W metodzie regresji liniowej do tworzenia kryterium najmniejszych kwadratów dla zmiennej Z stosuje się wielowymiarowy rozkład Gaussa o gęstości prawdopodobieństwa:

$$f(Z_p) = \frac{1}{(2\pi)^n \sqrt{\det(U_Z)}} \cdot \exp\left(-\frac{1}{2} [Z - Z_p]^T U_Z^{-1} [Z - Z_p]\right) \quad (2)$$

gdzie: $Z, Z_p - 2 \times n$ -wymiarowe wektory współrzędnych punktów o wartościach z_i z pomiarów i wartościach z_p poszukiwanej funkcji regresji, które spełniają równanie

$$Y_p = F(X_p) \quad (3)$$

W przypadku ogólnym $Z = [X^T, Y^T]^T$, $Z_p = [X_p^T, Y_p^T]^T$. Macierz kowariancji U_Z i jej odwrotność U_Z^{-1} są następujące:

$$U_Z = \begin{bmatrix} U_X & U_{XY} \\ U_{XY}^T & U_Y \end{bmatrix} \quad (4a)$$

$$U_Z^{-1} = \begin{bmatrix} U_{11} & U_{12} \\ U_{12}^T & U_{22} \end{bmatrix} \quad (4b)$$

gdzie: U_X, U_Y – symetryczne macierze kowariancji rozmiaru $n \times n$ opisujące wariancje (kwadraty niepewności) i kowariancje auto-skorelowań każdej ze zmiennych X i Y ; U_{XY} część macierzy kowariancyjnej U_Z dla korelacji wzajemnej elementów wektorów X i Y .

Macierze składowe macierzy U_Z^{-1} są rozmiaru $n \times n$, macierze U_{11} i U_{22} są symetryczne i ogólnie macierz U_{12} jest niesymetryczna: $U_{12} \neq U_{12}^T$. Dla tylko jednej zmiennej losowej: $U_Z = U_Y$ dla $U_X = 0$ oraz $U_Z = U_X$ dla $U_Y = 0$.

Kryterium dla regresji liniowej o zmiennej uogólnionej Z wynika z wymagania, by funkcja (2) dla gęstości prawdopodobieństwa wielowymiarowego rozkładu Gaussa osiągała maksimum. Odpowiada temu minimum funkcji:

$$SK(Z_p) = -\ln(f(Z_p)) \rightarrow \min \quad (5)$$

Wartość bezwzględna wykładnika potęgi we wzorze (2) powinna być jak najmniejsza, tj.:

$$SK(Z_p) = [Z - Z_p]^T U_Z^{-1} [Z - Z_p] \rightarrow \min \quad (6)$$

W pomiarach stosuje się często regresję liniową dla minimum sumy kwadratów odległości punktów od wyznaczonej funkcji (3), np. prostej regresji, w określonym kierunku i znormalizowanych do niepewności pomiaru tych odległości, tj. dla regresji y od x – w kierunku $0y$, dla regresji x od y – w kierunku $0x$ oraz dla regresji ortogonalnej – w kierunku prostopadłym do funkcji (3). Dla pomiarów jednej tylko zmiennej Y lub X , są to przypadki szczególne kryterium (6) dla pomiarów obu tych zmiennych. Parametry i przebiegi prostych regresji dla kilku takich przypadków szczególnych o jednakowej niepewności bezwzględnej pomiarów porównał M. Dorozhovets [6].

3. Postać kryterium przy występowaniu autokorelacji i korelacji wzajemnej obu zmiennych

Wyznaczono kryterium dla losowo zmiennych X i Y . Wartości zmierzonych obu współrzędnych punktów badanych obarczone są błędami losowymi i zrandomizowanymi i błędami systematycznymi o wartościach, których nie można było wyeliminować przez poprawki. Wartości y_i lub \bar{y}_i (dla $i = 1, \dots, n$) wektora Y , mierzone jednokrotnie mają niepewności złożone $u_i(y_i) = u_{Byi}$, a mierzone wielokrotnie – niepewności złożone

$$u_i(\bar{y}_i) = \sqrt{(u_{Ayi}^2 + u_{Byi}^2)}. \text{ Wartości } x_i \text{ lub } \bar{x}_i \text{ (dla } i = 1, \dots, n)$$

wektora X są odpowiednio o niepewnościach $u_i(x_i)$ lub

$$u_i(\bar{x}_i) = \sqrt{(u_{Axi}^2 + u_{Bxi}^2)}. \text{ Dla linii prostej poszukiwanej metodą}$$

regresji, zwanej dalej prostą regresji, rozwiązania równania liniowego ma postać wektorową:

$$Y_p = F(X_p) = aX_p + b1 = aX_p + b, \quad (7)$$

gdzie: $1 = [1, \dots, 1]^T$ – wektor jednostkowy o wymiarze n , a – współczynnik kierunkowy poszukiwanej prostej, b – jej wyraz wolny, wektory X_p, Y_p zawierające współrzędne punktów P_i linii prostej, do których wyznacza się odległości punktów Q_i .

Dla zmiennych nieskorelowanych, funkcja kryterialna (6) jest sumą kwadratów odległości badanych punktów $Q_i(z_i)$ o parach współrzędnych $z_i = (x_i, y_i)$ dla $i = 1, \dots, n$, od punktów P_i na prostej regresji o współrzędnych $z_{pi} = (x_{pi}, y_{pi})$, znormalizowanych do wariancji $u^2(y_i)$ lub $u^2(x_i)$ w kierunkach $0x$ lub $0y$. Osiąga ona minimum dla równej zeru sumy kwadratów pochodnych względem parametrów a i b prostej regresji, tj., gdy obie pochodne jednocześnie są równe zeru. Dodatkowym warunkiem jest minimalizacja funkcji kryterialnej ze względu na wybór punktów x_{pi} . Prowadzi to do kierunku projekcji tych punktów na prostą

regresji o wartości $-\frac{1}{a} \frac{u^2(y_i)}{u^2(x_i)}$. Dla autokorelacji x_i, y_i i korelacji

wartości różnych punktów pomiarowych, wyznaczenie prostej regresji wymaga znajomości aż trzech macierzy składowych: U_Y, U_X i U_{XY} . Przedstawi się tu ujęcie z [21, 22, 24] dla pomiarów Y przy $X = \text{const}$ i rozwinięte dla pomiarów wektorów Y i X w [13].

Z postaci macierzy (4a, b) wynika, że dla wyznaczania minimum istotne znaczenie mają składowe odwrotnej macierzy kowariancji U_Z^{-1} , tj. U_{11}, U_{22} i U_{12} . Odległość wybranego punktu pomiarowego od prostej zależy od kierunku jego rzutu na prostą regresji. Zrzutowanie punktu pomiarowego Q , daje na prostej punkt P . Sumę znormalizowanych kwadratów odległości wraz z ich wagami uzyskuje się z macierzy odwrotnej U_Z^{-1} do macierzy kowariancji U_Z . Odległości punktów od prostej regresji opisuje wektor $\Delta Z = Z - Z_p$, a kryterium SK określa równanie w postaci zwartej i rozwiniętej:

$$SK(\Delta Z, a, b) = \Delta Z^T U_Z^{-1} \Delta Z = \Delta X^T U_{11} \Delta X + 2\Delta X^T U_{12} \Delta Y + \Delta Y^T U_{22} \Delta Y \quad (8)$$

Przyrost $\Delta X = X - X_p$ zmiennej X pomnożony przez współczynnik kierunkowy a prostej ukośnej do krzywej regresji wyznacza przyrost $\Delta Y = Y - Y_p$ zmiennej Y z uwzględnieniem wektora $Y - aX - b$, gdyż z równania prostej regresji otrzymuje się $\Delta Y = a\Delta X + Y - aX - b$ oraz:

$$SK(\Delta\mathbf{X}, a, b) = \Delta\mathbf{X}^T \mathbf{U} \Delta\mathbf{X} + 2[\mathbf{Y} - a\mathbf{X} - \mathbf{b}]^T (\mathbf{U}_{12}^T + a\mathbf{U}_{22}) \Delta\mathbf{X} + [\mathbf{Y} - a\mathbf{X} - \mathbf{b}]^T \mathbf{U}_{22} [\mathbf{Y} - a\mathbf{X} - \mathbf{b}] \quad (9)$$

gdzie macierz symetryczna:

$$\mathbf{U} = \mathbf{U}_{11} + a(\mathbf{U}_{12}^T + \mathbf{U}_{12}) + a^2 \mathbf{U}_{22}. \quad (9a)$$

Symetryczna macierz \mathbf{U} zawsze ma rzeczywiste wartości własne λ_{v_i} i powinna być dodatnio określona. Znormalizowane ortogonalne wektory własne \mathbf{R}_i (dla $i = 1, \dots, n$) spełniają warunki:

$$\mathbf{U}\mathbf{R}_i = \lambda_{v_i}\mathbf{R}_i, \quad \mathbf{R}_i^T \mathbf{R}_j = \begin{cases} 0 & \text{dla } i \neq j \\ 1 & \text{dla } i = j \end{cases} \quad (10)$$

Minimum wyrażenia (9) uzyskuje się analitycznie przez znalezienie lokalnego minimum dla wektora błędu $\Delta\mathbf{X}$. Jest to zależność kwadratowa hiper-paraboliczna. Następnie poszukuje się lokalnego minimum względem zmiennej b , aby ostatecznie otrzymać funkcję $SK(a)$ jako jednowymiarową zależność od a .

Jeśli skorelowanie nie występuje, to macierz kowariancji \mathbf{U} ma tylko przekątną główną i wówczas wyrażenie (9) można przedstawić jako sumę form kwadratowych. Dla wielkości skorelowanych macierz \mathbf{U} ma też różne od zera wartości poza przekątną. Aby ją zdiagnozować wprowadza się macierz ortogonalną $\mathbf{H}^T = \mathbf{H}^{-1}$ składającą się ze znormalizowanych wektorów własnych $\mathbf{H} = [\mathbf{R}_1, \dots, \mathbf{R}_n]$ i $\mathbf{H}^{-1} \mathbf{H} = \mathbf{H} \mathbf{H}^{-1} = \mathbf{I}$ i otrzymuje się postać:

$$\mathbf{H}^{-1} \mathbf{U} \mathbf{H} = \begin{bmatrix} \lambda_{v_1} & 0 & 0 \\ 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & \lambda_{v_n} \end{bmatrix} \quad (11)$$

Zależność (11) można użyć do diagonalizacji każdej macierzy \mathbf{U} z elementami niediagonalnymi.

Funkcję $SK(\Delta\mathbf{X}, a, b)$ dla zmiennych skorelowanych można przedstawić też jako sumę form kwadratowych. Po dwukrotnym wstawieniu macierzy jednostkowej $\mathbf{H} \mathbf{H}^T = \mathbf{I}$ dla diagonalizacji \mathbf{U} , otrzymuje się równanie (12):

$$SK(\Delta\mathbf{X}, a, b) = (\mathbf{H}^T \Delta\mathbf{X})^T \mathbf{H}^{-1} \mathbf{U} \mathbf{H} (\mathbf{H}^T \Delta\mathbf{X}) + 2(\mathbf{H}^T \Delta\mathbf{X})^T \mathbf{H}^{-1} (\mathbf{U}_{12} + a\mathbf{U}_{22}) [\mathbf{Y} - a\mathbf{X} - \mathbf{b}] + [\mathbf{Y} - a\mathbf{X} - \mathbf{b}]^T \mathbf{U}_{22} [\mathbf{Y} - a\mathbf{X} - \mathbf{b}] \quad (12)$$

oraz (13) w postaci sumy form kwadratowych:

$$SK(\Delta\mathbf{X}, a, b) = \sum_{i=1}^n h x_i^2 \lambda_{v_i} + 2h x_i h VDEL_i + [\mathbf{Y} - a\mathbf{X} - \mathbf{b}]^T \mathbf{U}_{22} [\mathbf{Y} - a\mathbf{X} - \mathbf{b}] \quad (13)$$

gdzie $\Delta\mathbf{X}$ jest przekształconym liniowo (przez translację, obrót) wektorem do nowego n -wymiarowego wektora, $h\mathbf{x} = \mathbf{H}^T \Delta\mathbf{X}$, a $hVDEL_i$ są elementami wektora $\mathbf{H}^{-1} (\mathbf{U}_{12} + a\mathbf{U}_{22}) [\mathbf{Y} - a\mathbf{X} - \mathbf{b}]$.

Dla wszystkich dodatnich wartości własnych $\lambda_{v_i} > 0$ (dla $i = 1, \dots, n$), funkcja SK osiąga minimum, gdy wszystkie formy kwadratowe mają minimum. Zatem macierz \mathbf{U} musi być dodatnio określona. Jest tak, jeśli wszystkie wartości własne macierzy \mathbf{U} są dodatnie. Wartość minimalna analizowanej funkcji wystąpi wtedy, gdy każda forma kwadratowa osiąga minimum, to jest dla wierzchołka hiper-paraboli (9). Można rozróżnić funkcję SK ze względu na wektor błędu $\mathbf{X} - \mathbf{X}_p$, tj. wybrać taki zestaw punktów \mathbf{X}_p dla regresji, która minimalizuje lokalnie tę funkcję. Według tego warunku uzyskuje się wyrażenie wektora błędu dla $\Delta\mathbf{X}$ i dla $\Delta\mathbf{Y}$. Dla zminimalizowania funkcji nie trzeba paramet-

tryzować i przeszukiwać ustawienia wektora \mathbf{X}_p . Hiper-funkcja ta ma minimum ze względu na $\Delta\mathbf{X}$ i występuje ono, gdy wyznaczmy n -wymiarowy gradient, który można zapisać symbolicznie

$$\frac{\partial SK(\Delta\mathbf{X}, a, b)}{\partial \Delta\mathbf{X}} = \frac{\partial SK(\mathbf{X} - \mathbf{X}_p, a, b)}{\partial (\mathbf{X} - \mathbf{X}_p)} = \frac{\partial SK(-\mathbf{X}_p, a, b)}{\partial (-\mathbf{X}_p)} = 0 \quad (14)$$

Wówczas: $\Delta\mathbf{X}^T = -[\mathbf{Y} - a\mathbf{X} - \mathbf{b}]^T (\mathbf{U}_{12}^T + a\mathbf{U}_{22}) \mathbf{U}^{-1}$. A stąd

$$SK(\Delta\mathbf{X}, a, b) \geq SK(a, b) = [\mathbf{Y} - a\mathbf{X} - \mathbf{b}]^T (\mathbf{U}_{22} - (\mathbf{U}_{12}^T + a\mathbf{U}_{22}) \mathbf{U}^{-1} (\mathbf{U}_{12} + a\mathbf{U}_{22})) [\mathbf{Y} - a\mathbf{X} - \mathbf{b}] \quad (15)$$

Macierz odwrotna \mathbf{U}_{Yeff}^{-1} do efektywnej symetrycznej macierzy kowariancji \mathbf{U}_{Yeff} odpowiada regresji y na x i opisana jest jako [13]:

$$\mathbf{U}_{Yeff}^{-1} = \mathbf{U}_{22} - (\mathbf{U}_{12}^T + a\mathbf{U}_{22}) \mathbf{U}^{-1} (\mathbf{U}_{12} + a\mathbf{U}_{22}) \quad (16)$$

Dla macierzy symetrycznej $\mathbf{U}_{12} = \mathbf{U}_{12}^T$ redukuje się ona do postaci

$$\mathbf{U}_{Yeff}^{-1} = (\mathbf{U}_{11} \mathbf{U}_{22} - \mathbf{U}_{12} \mathbf{U}_{12}) \mathbf{U}^{-1} \quad (17)$$

Gdy każda ze zmiennych x i y ma tylko autokorelację, tj. nie występują korelacje wzajemne, to $\mathbf{U}_{12} = \mathbf{U}_{12}^T = \mathbf{0}$, $\mathbf{U}_{11} = \mathbf{U}_X^{-1}$, $\mathbf{U}_{22} = \mathbf{U}_Y^{-1}$ oraz

$$\mathbf{U}_{Yeff}^{-1} = \mathbf{U}_{11} \mathbf{U}_{22} \mathbf{U}^{-1} = (\mathbf{U}_{11} \mathbf{U}_X \mathbf{U}_Y + a^2 \mathbf{U}_{22} \mathbf{U}_X \mathbf{U}_Y)^{-1} = (a^2 \mathbf{U}_X + \mathbf{U}_Y)^{-1} \quad (18)$$

Dla nieskorelowanych x i y , macierze \mathbf{U}_X , \mathbf{U}_Y są diagonalne i \mathbf{U}_{Yeff}^{-1} jest też diagonalna o następujących elementach:

$$[\mathbf{U}_{Yeff}^{-1}]_{ii} = (a^2 u^2(X_i) + u^2(Y_i))^{-1} \quad (\text{gdzie } i = 1, \dots, n) \quad (19)$$

Aby uprościć ostateczną postać kryterium $SK(a, b)$, wprowadza się następujące parametry pomocnicze:

$$S = \mathbf{1}^T \mathbf{U}_{Yeff}^{-1} \mathbf{1} = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n [u_{yeff}^{-1}]_{ij} \quad (20a)$$

$$S_x = \mathbf{X}^T \mathbf{U}_{Yeff}^{-1} \mathbf{1} = \mathbf{1}^T \mathbf{U}_{Yeff}^{-1} \mathbf{X} \quad (20b)$$

$$S_{xx} = \mathbf{X}^T \mathbf{U}_{Yeff}^{-1} \mathbf{X} \quad (20c)$$

$$S_{xy} = \mathbf{X}^T \mathbf{U}_{Yeff}^{-1} \mathbf{Y} = \mathbf{Y}^T \mathbf{U}_{Yeff}^{-1} \mathbf{X} \quad (20d)$$

$$S_y = \mathbf{Y}^T \mathbf{U}_{Yeff}^{-1} \mathbf{1} = \mathbf{1}^T \mathbf{U}_{Yeff}^{-1} \mathbf{Y} \quad (20e)$$

$$S_{yy} = \mathbf{Y}^T \mathbf{U}_{Yeff}^{-1} \mathbf{Y} \quad (20f)$$

Z równania (15), po użyciu parametrów (20a-f), otrzymuje się:

$$SK = [a\mathbf{X} + \mathbf{b} - \mathbf{Y}]^T \mathbf{U}_{Yeff}^{-1} [a\mathbf{X} + \mathbf{b} - \mathbf{Y}] = a^2 S_{xx} + 2ab S_x - 2a S_{xy} + b^2 S - 2b S_y + S_{yy} \quad (21)$$

Minimum SK ze względu na b występuje dla warunku:

$$\frac{\partial SK(a, b)}{\partial b} = 0, \quad (S > 0) \quad (22)$$

Lokalne minimum dla parametru b opisuje równanie

$$2bS - 2S_y + 2aS_x = 0 \quad \text{czyli } b = (S_y - aS_x)/S \quad (23)$$

Ogólna postać zależności $U_{Y_{eff}}^{-1}$ od współczynnika kierunkowego a prostej regresji jest złożona i warunkiem $\frac{\partial G(a,b)}{\partial a} = 0$ nie można wyznaczyć analitycznie, tak jak jest to dla regresji y na x przy stałej, niezmienniej macierzy U_Y^{-1} . Końcowym rezultatem tych rozważań dla parametru b określonego warunkiem (23), jest możliwość numerycznego wyznaczenia funkcji $SK(a)$ jako

$$SK(\Delta X, a, b) \geq SK(a, b) \geq SK(a) = a^2 \left(S_{xx} - \frac{S_x^2}{S} \right) + 2 \left(\frac{S_x S_y}{S} - S_{xy} \right) a + S_{yy} - \frac{S_y^2}{S} \quad (24)$$

Dokładne minimum funkcji $SK(a)$ wyznacza się przez gęste próbkowanie numeryczne funkcji (24) i odpowiednio powiększając (Zoom In) fragment wykresu z badanym przedziałem występowania minimum – rys. 4.

W ogólnym przypadku, minimum (24) nie można znaleźć analitycznie, gdyż $SK(a)$ zależy *explicite* od nachylenia a prostej regresji w pierwszej i drugiej potęgce. Dodatkowo występuje zależność macierzy $U_{Y_{eff}}^{-1}$ od macierzy odwrotnej U^{-1} , a macierz U zależy też od a w pierwszej i drugiej potęgce – równanie (16). Tylko w niektórych przypadkach, np. stałego stosunku niepewności/wariancji, lub stałych niepewności $u(x_i) = \text{const}$, $u(y_i) = \text{const}$ i współczynnika korelacji $\rho_{xy} = \text{const}$ (sekcja 9), rozwiązaniem są pierwiastki równania kwadratowego. W ogólnym przypadku można uzyskać przybliżone rozwiązanie analityczne stosując aproksymacje wielomianowe. Najszybciej otrzymuje się rozwiązanie wyznaczając numerycznie funkcję $SK(a)$ i powiększając jej wykres w obszarze wokół minimum (rys. 4a, b, w przykładzie w sekcji 8).

4. Konsekwencje proponowanego ujęcia

Należy zdefiniować macierz β współczynników wagowych [13], które można wykorzystać do identyfikacji rodzaju regresji x względem y lub odwrotnej. Między współczynnikami wagi macierzy β , lub jej odwrotności β^{-1} i nachyleniem a prostej regresji istnieje jednoznaczna zależność. Wyznaczy się ją dla macierzy liniowej wektorów błędów w kierunku $0x$ i $0y$. Z równań

$$\Delta X_{vertex} = -U^{-1}(U_{12} + aU_{22})[aX + b - Y]$$

$$\text{i } \Delta Y_{vertex} = U^{-1}(U_{11} + aU_{12}^T)[aX + b - Y]$$

otrzymuje się macierz współczynników wagowych, które transformują liniowo błędy zmiennej x w błędy zmiennej y i na odwrót. Gdy macierz ta jest diagonalna, to zawiera współczynniki nachylenia linii rzutów punktów badanych na prostą regresji. Odpowiadają one minimum (14) funkcji $SK(a, b)$ i są zdefiniowane jako:

$$\beta = \frac{\Delta Y_{vertex}}{\Delta X_{vertex}} = -(U_{11} + aU_{12}^T)(U_{12} + aU_{22})^{-1} \quad (25)$$

$$\beta^{-1} = \frac{\Delta X_{vertex}}{\Delta Y_{vertex}} = -(U_{11} + aU_{12}^T)^{-1}(U_{12} + aU_{22}) \quad (26)$$

Z (25) wynika, że współczynnik kierunkowy prostej regresji jest określony przez macierz współczynników wagowych β i części macierzy kowariancji odwrotnej do U_Z (jest to dokładnie macierz diagonalna aI)

$$a = -(U_{11} + \beta U_{12})(U_{12}^T + \beta U_{22})^{-1} \quad (27)$$

Regresję x względem y , lub y względem x , można zidentyfikować, gdy macierz $\beta = 0$, lub odpowiednio dla $\beta^{-1} = 0$. Wyznacznik macierzy U_Z równa się zeru w skrajnych przypadkach regresji y względem x lub x od y . Można tego uniknąć wstawiając do obliczeń odpowiednio małe wartości wariancji. Z (25) otrzyma się:

$$\Delta Y_{vertex} = \beta \Delta X_{vertex} \quad (28a)$$

lub

$$\Delta X_{vertex} = \beta^{-1} \Delta Y_{vertex} \quad (28b)$$

Regresję x względem y identyfikuje się za pomocą $\beta = 0$, ponieważ $\Delta Y = \Delta Y_{vertex} = 0$. W granicy, przy bliskich zera elementach macierzy diagonalnej $U_Y \rightarrow 0$ ($U_{XY} = U_{12} = 0$), $U_{22} \rightarrow \infty$ (elementy diagonalne) otrzymuje się:

$$\beta = -(U_{11} + aU_{12}^T)(U_{12} + aU_{22})^{-1} \rightarrow 0 \quad (29)$$

Podobnie regresję y względem x identyfikuje się dla

$$\beta^{-1} = 0, \text{ gdyż } \Delta X = \Delta X_{vertex} = 0.$$

W granicy, przy bliskich zera elementach macierzy diagonalnej $U_X \rightarrow 0$ ($U_{XY} = U_{12} = 0$), $U_{11} \rightarrow \infty$ (tylko elementy diagonalne) otrzymuje się

$$\beta^{-1} = -(U_{11} + aU_{12}^T)^{-1}(U_{12} + aU_{22}) \rightarrow 0 \quad (30)$$

Dla nieskorelowanych współrzędnych x i y , tj. gdy $U_{XY} = 0$, macierze U_X i U_Y są diagonalne, tj. $[U_X]_{ii} = u^2(x_i)$ oraz $[U_Y]_{ii} = u^2(y_i)$, $i = 1, \dots, n$. Jeśli wszystkie macierze zawierają różne od zera elementy tylko na głównej przekątnej, to $\beta = \beta_{diag}$ jest też macierzą diagonalną

$$\beta_{diag} = \begin{bmatrix} \beta_{11} & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots \\ 0 & \dots & \beta_{nn} \end{bmatrix} \quad (31a)$$

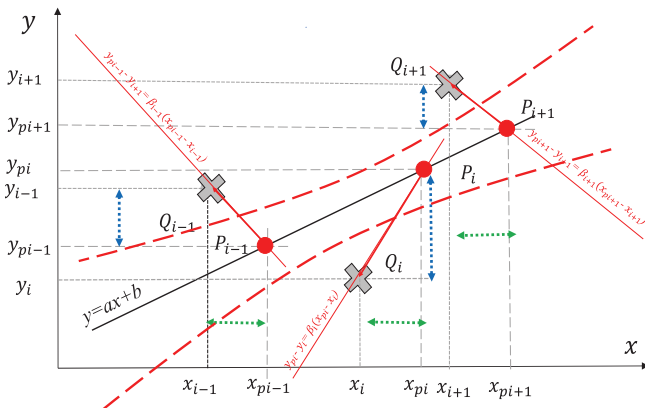
oraz

$$\beta_{diag}^{-1} = \begin{bmatrix} \beta_{11}^{-1} & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots \\ 0 & \dots & \beta_{nn}^{-1} \end{bmatrix} \quad (31b)$$

W tym przypadku linie przechodzące przez punkty badane i przecinające prostą regresji mają nachylenia

$$\beta_{ii} = \beta_i = -\frac{1}{a} \frac{u^2(Y_i)}{u^2(X_i)} \text{ (dla } i = 1, \dots, n). \text{ Efektywna macierz}$$

kowariancji odwrotnej jest też diagonalna – równanie (19), z którego wynika metoda efektywnej wariancji. Stosuje się ją do szacowania parametrów prostej regresji. Macierz β przy braku skorelowania jest diagonalna i pozostałe jej elementy są równe zeru. Rysunek 2 podaje geometryczną interpretację tego przypadku. Diagonalne elementy tej macierzy są nachyleniami linii przechodzących przez badane punkty $\dots, Q_{i-1}, Q_i, Q_{i+1}, \dots$ i przecinających prostą regresji w punktach $\dots, P_{i-1}, P_i, P_{i+1}, \dots$.



Rys. 2. Interpretacja elementów diagonalnych macierzy β_{diag} dla regresji liniowej bez korelacji otrzymanej z użyciem macierzy efektywnej U_{Yeff}^{-1}
 Fig. 2. Interpretation of diagonal elements of the β_{diag} matrix for linear regression without the correlation obtained with the effective matrix U_{Yeff}^{-1}

5. Parametry macierzy U_{ab} wynikające z macierzy efektywnej U_{Yeff}^{-1}

W przypadku skorelowanych obserwacji w próbkach pomiarowych o rozkładach gaussowskich, granice pasma niepewności prostej regresji wyznacza się bądź metodą numeryczną Monte Carlo, bądź metodą przybliżoną z macierzowego prawa propagacji wariancji niepewności macierzy kowariancyjnej U_Z , tj.:

$$U_{ab} = \begin{bmatrix} u_a^2 & \rho_{ab}u_a u_b \\ \rho_{ab}u_a u_b & u_b^2 \end{bmatrix} = C U_Z C^T \quad (32)$$

gdzie: U_{ab} – macierz kowariancji dla parametrów prostej regresji; u_a , u_b , ρ_{ab} – niepewności jej parametrów a i b oraz ich współczynnika korelacji, C – macierz współczynników wraz z postaciami o postaci:

$$C = \begin{bmatrix} \frac{\partial a}{\partial Z} & \frac{\partial b}{\partial Z} \end{bmatrix}^T = \begin{bmatrix} \frac{\partial a}{\partial z_1} & \dots & \frac{\partial a}{\partial z_{2n}} \\ \frac{\partial b}{\partial z_1} & \dots & \frac{\partial b}{\partial z_{2n}} \end{bmatrix} \quad (33)$$

Parametry macierzy C wyznacza się numerycznie korzystając z formuł:

$$\frac{\partial a}{\partial z_i} \cong \frac{a_N(z_i + h) - a_N(z_i - h)}{2h} \quad (34a)$$

$$\frac{\partial b}{\partial z_i} \cong \frac{b_N(z_i + h) - b_N(z_i - h)}{2h} \quad (34b)$$

gdzie a_N i b_N są wartościami wyznaczonymi z modyfikacji współrzędnych punktów pomiarowych o wartość $\pm h$.

W dalszej części podano przypadki szczególne, tj. pomiary Y lub X z autokorelacją jako zmiennej zależnej.

6. Regresja dla pomiarów zmiennej Y z autokorelacją w funkcji X

Mierzy się tylko zmienną zależną Y , a X jest zdeterminowaną zmienną niezależną i nie jej niepewność jest pomijalnie mała i nie ma korelacji wzajemnej obu zmiennych. Przy występowaniu funkcji autokorelacji Y otrzymuje się:

$$U_{XY} = 0, \quad U_{11} = U_X^{-1} = 0, \quad U_{22} = U_Y^{-1}, \quad \beta^{-1} \rightarrow 0$$

i funkcja kryterialna upraszcza się do postaci:

$$SK(a, b) = [aX + b - Y]^T U_{22} [aX + b - Y] \quad (35)$$

Parametry a , b opisane są wzorami:

$$a = \frac{\Delta_a}{\Delta} \quad (36a)$$

$$b = \frac{\Delta_b}{\Delta} \quad (36b)$$

gdzie: $\Delta_a = SS_{xy} - S_x S_y$, $\Delta_b = S_y S_{xy} - S_x S_{xy}$ i $\Delta = SS_{xx} - (S_x)^2$.

Zaś parametry macierzy U_{ab} są następujące:

$$u_a^2 = \frac{S}{\Delta} \quad (37a)$$

$$u_b^2 = \frac{S_{xx}}{\Delta} \quad (37b)$$

$$\rho_{ab} u_a u_b = -\frac{S_x}{\Delta} \quad (37c)$$

$$\rho_{ab} = -\frac{S_x}{\sqrt{SS_{xx}}} \quad (37d)$$

Parametry S zdefiniowano tak, jak w równaniach (20a-f), przy czym macierz U_{Yeff}^{-1} zastępuje się macierzą U_Y^{-1} .

7. Regresja dla pomiarów zmiennej X z autokorelacją jako zależnej od Y

Zdeterminowana jest teraz zmienna Y . Nie uwzględnia się jej niepewności oraz nie ma korelacji wzajemnej obu zmiennych. Stąd wynika:

$$U_{XY} = 0, \quad U_{22} = U_Y^{-1} = 0, \quad U_{11} = U_X^{-1}$$

i funkcja kryterialna redukuje się do postaci $\beta \rightarrow 0$

$$SK(a, b) = [aX + b - Y]^T \frac{U_{11}}{a^2} [aX + b - Y] \quad (38)$$

Rozwiązanie tego przypadku jest identyczne jak w pkt. 5, jeśli zastosuje się zamianę oznaczeń $X \rightarrow Y$ i $Y \rightarrow X$ i jednocześnie zamieni się macierz U_Y^{-1} na macierz U_X^{-1} oraz w oznaczeniach parametrów pomocniczych do wyznaczenia jej elementów, o postaciach jak w (20a-f) dla macierzy (U_Y^{-1}) , zamieni się symbol S na W . Wówczas otrzymuje się:

$$a_x = \frac{\Delta_{ax}}{\Delta_x} \quad (39a)$$

$$b_x = \frac{\Delta_{bx}}{\Delta_x} \quad (39b)$$

8. Przykład numerycznego wyznaczania parametrów prostej regresji dla jednakowych niepewności współrzędnych punktów badanych

Po wprowadzeniu nowych oznaczeń: $\Delta_{ax} = WW_{yx} - W_xW_y$, $\Delta_{bx} = W_xW_{yy} - W_yW_{yx}$, $\Delta_x = WW_{yy} - (W_y)^2$ ($\Delta_x \neq 0$), parametry linii prostej $y = ax + b$ w układzie xOy dla x jako zmiennej niezależnej, są następujące:

$$a = \frac{1}{a_x} = \frac{\Delta_x}{\Delta_{ax}} \tag{40a}$$

$$b = -\frac{b_x}{a_x} = -\frac{\Delta_{bx}}{\Delta_{ax}} \tag{40b}$$

Parametry macierzy kowariancji $U_{a_x b_x}$

$$u_{ax}^2 = \frac{W}{\Delta_x} \tag{41a}$$

$$u_{bx}^2 = \frac{W_{yy}}{\Delta_x} \tag{41b}$$

$$\rho_{ab}u_{ax}u_{bx} = -\frac{W_y}{\Delta_x} \tag{41c}$$

Z prawa propagacji wariancji wynika

$$U_{ab} = \begin{bmatrix} \frac{\partial a}{\partial a_x} & \frac{\partial a}{\partial b_x} \\ \frac{\partial b}{\partial a_x} & \frac{\partial b}{\partial b_x} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_{ax}^2 & \rho_{ab}u_{ax}u_{bx} \\ \rho_{ab}u_{ax}u_{bx} & u_{bx}^2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{\partial a}{\partial a_x} & \frac{\partial b}{\partial a_x} \\ \frac{\partial a}{\partial b_x} & \frac{\partial b}{\partial b_x} \end{bmatrix} = a_x^{-1} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ -b_x & a_x \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_{ax}^2 & \rho_{ab}u_{ax}u_{bx} \\ \rho_{ab}u_{ax}u_{bx} & u_{bx}^2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & -b_x \\ 0 & a_x \end{bmatrix} \tag{42}$$

Po wymnożeniu macierzy w równaniu (42), otrzymuje się

$$u_a = a^2 u_{ax} = a^2 \sqrt{\frac{|W|}{|\Delta_x|}} \tag{43a}$$

$$u_b = |a| \sqrt{\frac{|b^2 W + W_{yy} - 2W_y b|}{|\Delta_x|}} \tag{43b}$$

$$\rho_{ab}u_a u_b = \frac{a^3 (bW - W_y)}{\Delta_x} \tag{43c}$$

W następnych dwu sekcjach przedstawione są przykłady. W sekcji 8, dla minimum na fragmentach funkcji kryterialnej wykreślonych w powiększonej skali (rys. 3a, b) wyznaczono numerycznie wartości parametrów a i b prostej regresji oraz granice jej pasm niepewności standardowej i rozszerzonej. Zaś w sekcji 9 podano równania parametrów prostej regresji i jej niepewności dla jednakowego skorelowania obu mierzonych współrzędnych x , y każdego z punktów. Dla takiego przypadku równania te można wyznaczyć analitycznie. (Wzorów w tych krótkich przykładach nie numerowano).

Dla ilustracji omówionej metody, podano prosty przykład liczbowy dla pomiarów współrzędnych x i y pięciu punktów o jednakowej niepewności bezwzględnej. Wartości zmierzonych współrzędnych zawiera tabela 1, a uzyskane wyniki numeryczne parametrów prostej regresji, ich niepewności i współczynnika korelacji – tabela 2.

Tabela 1. Wyniki pomiarów współrzędnych punktów badanych
Table 1. Results of measurements of the coordinates of tested points

Numer punktu pomiarowego	x_i	y_i
1	1,0089	3,013
2	1,9905	5,0022
3	2,9896	6,9923
4	3,9907	9,0116
5	4,9695	10,9815

Macierze U_x i U_y oraz U_{XY} , czyli składniki macierzy U_z (4a) dla współrzędnych x_i , y_i badanych punktów:

$$U_x = U_y = (0,01)^2 \begin{bmatrix} 1 & 0,2 & 0,2 & 0,2 & 0,2 \\ 0,2 & 1 & 0,2 & 0,2 & 0,2 \\ 0,2 & 0,2 & 1 & 0,2 & 0,2 \\ 0,2 & 0,2 & 0,2 & 1 & 0,2 \\ 0,2 & 0,2 & 0,2 & 0,2 & 1 \end{bmatrix}$$

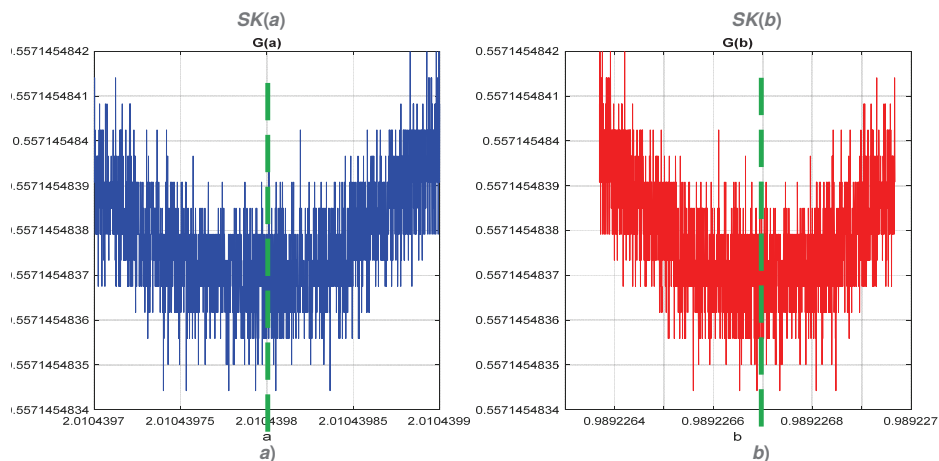
$$U_{XY} = U_{XY}^T = (0,01)^2 \begin{bmatrix} 0,2 & 0,1 & 0,1 & 0,1 & 0,1 \\ 0,1 & 0,2 & 0,1 & 0,1 & 0,1 \\ 0,1 & 0,1 & 0,2 & 0,1 & 0,1 \\ 0,1 & 0,1 & 0,1 & 0,2 & 0,1 \\ 0,1 & 0,1 & 0,1 & 0,1 & 0,2 \end{bmatrix}$$

Stąd wynikają jednakowe niepewności $u(x_i) = u(y_i) = 0,01$ jako elementy na przekątnych obu powyższych macierzy.

Powiększone fragmenty charakterystyk $SK(a, b)$ dla tego przykładu podano na rysunku 3 dla maksymalnej rozdzielczości programu obliczeniowego. Z nich wyznaczono wartości a i b dla minimum funkcji kryterialnej $SK(a, b)$. Wyniki obliczeń wykonanych za pomocą algorytmów podanych w [13], zawiera tabela 2.

Tabela 2. Parametry prostej uzyskane numerycznie metodą regresji x i y
Table 2. Straight line parameters in the regression method x and y obtained numerically

Parameter	Wyniki numeryczne według kryterium WTLS	Wartości błędów $\mathcal{E}_a, \mathcal{E}_b, \Delta u_a, \Delta u_b, \Delta \rho_{ab}$
a	2,01043980	$2 \cdot 10^{-8}$
b	0,98922667	$7 \cdot 10^{-8}$
u_a	0,00607379	$5 \cdot 10^{-8}$
u_b	0,02151805	$1,6 \cdot 10^{-7}$
ρ_{ab}	-0,84392235	$6,5 \cdot 10^{-5}$



Rys. 3. Wykresy fragmentów funkcji kryterialnej $SK(a)$ i $SK(b)$ wokół minimum funkcji kryterialnej dla parametrów prostej a i b przy znacznie powiększonej skali na obu osiach
Fig. 3. Graphs of fragments of the criterion function $SK(a)$ and $SK(b)$ around its minimum for parameters a and b with a significantly enlarged scale on both axes

Równanie prostej regresji, po zaokrągleniu a i b do 4 cyfr po przecinku, ma postać: $y = 2,0104x + 0,9892$. Prostą tę przedstawiono na rysunku 4a wraz z granicami pasma niepewności jako hiperbolami położonymi wokół niej o równaniach

$$y_u = ax + b \pm t_{0,95, n-2} \sqrt{x^2 u_a^2 + 2\rho_{ab} x u_a u_b + u_b^2}$$

Na rys. 4b, o powiększonej skali 0_y , przedstawiono same pasma niepewności $u_y(x)$ i $U_y(x) = k_p u_y(x)$ dla $P = 0,95$. Obliczono je dla częstych w praktyce pomiarowej jednakowych wartości bezwzględnych niepewności standardowych $u_{x_i} = u_{y_i} = 0,01$, czyli dla rozszerzonych niepewności względnych o około 1 % wartości maksymalnej zakresu x i około 2 % zakresu y .

9. Przykład analitycznego wyznaczania równania i pasma niepewności prostej regresji

W tej sekcji podano wzory analityczne, które istnieją dla jednako- kowego skorelowania wzajemnego zbiorów obserwacji pomiaro- wych obu współrzędnych, każdego z punktów, jako zmiennych losowych. Propagację ich niepewności opisuje się macierzą kowariancji (4a), tj.:

$$U_Z = \begin{bmatrix} U_X & U_{XY} \\ U_{XY}^T & U_Y \end{bmatrix}$$

Jeśli autokorelacje obu zmiennych nie występują, to macierz U_Z i jej macierze składowe U_X , U_Y i U_{XY} są diagonalne, tj.:

$$U_X = \begin{bmatrix} u^2(x_1) & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots \\ 0 & \dots & u^2(x_n) \end{bmatrix},$$

$$U_Y = \begin{bmatrix} u^2(y_1) & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots \\ 0 & \dots & u^2(y_n) \end{bmatrix},$$

$$U_{XY} = \begin{bmatrix} \rho u(x_1)u(y_1) & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots \\ 0 & \dots & \rho u(x_n)u(y_n) \end{bmatrix}.$$

Przy tym samym współczynniku korelacji ρ , macierz kowa- riancji U_{XY} ma jednakowe elementy na przekątnej. Wówczas efektywna odwrotna macierz kowariancji U_{Yeff}^{-1} jest również diagonalna o takich samych wartościach na przekątnej. W takim szczególnym przypadku istnieje rozwiązanie analityczne [13, 29], które jest pierwiastkiem odpowiedniego równania kwadratowego (jak w metodzie Deminga), zaś funkcja celu jest zdefinio- wana jako:

$$SK(a, b) = \sum_{i=1}^n \frac{(y_i - ax_i - b)^2}{u_{eff}^2}$$

gdzie niepewność efektywną opisuje równanie:

$$u_{eff}^2 = u_y^2 - 2\rho a u_x u_y + a^2 u_x^2,$$

$$u(x_i) = u_x \text{ i } u(y_i) = u_y, \quad i = 1, \dots, n.$$

Funkcja celu przyjmuje minimum, jeśli spełnione są razem dwa warunki dla pochodnych parametrów a i b :

$$1) \quad \frac{\partial SK(a, b)}{\partial a} = 0$$

oraz

$$2) \quad \frac{\partial SK(a, b)}{\partial b} = 0$$

Z warunku 2) wynika zależność:

$$\sum_{i=1}^n -2(y_i - ax_i - b) = 0$$

i z wyrażenia $\sum_{i=1}^n (y_i - ax_i) = nb$

$$b = \bar{y} - a\bar{x}$$

Wstawiając obie zależności do warunku 1) otrzymuje się:

$$\sum_{i=1}^n \frac{(y_i - ax_i - \bar{y} + a\bar{x})(\bar{x} - x_i)u_{eff}^2 - (au_x^2 - \rho u_x u_y)(y_i - ax_i - \bar{y} + a\bar{x})^2}{u_{eff}^4} = 0$$

Wyrażenie to można przedstawić jako równanie kwadratowe:

$$Aa^2 + Ba + C = 0$$

w którym współczynniki A , B , C są określone jako:

$$A = -u_x \sum_{i=1}^n (\bar{x} - x_i) [\rho u_y (\bar{x} - x_i) + u_x (y_i - \bar{y})]$$

$$B = \sum_{i=1}^n (\bar{x} - x_i)^2 u_y^2 - u_x^2 (y_i - \bar{y})^2$$

$$C = u_y \sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y}) [u_y (\bar{x} - x_i) + \rho u_x (y_i - \bar{y})]$$

Rozwiązaniem jest pierwiastek równania kwadratowego $Aa^2 + Ba + C = 0$ dla minimum $SK(a, b)$, tj., gdy zmienia się znak funkcji kwadratowej z (-) na (+). Zawsze należy wybrać znak (+), tj.:

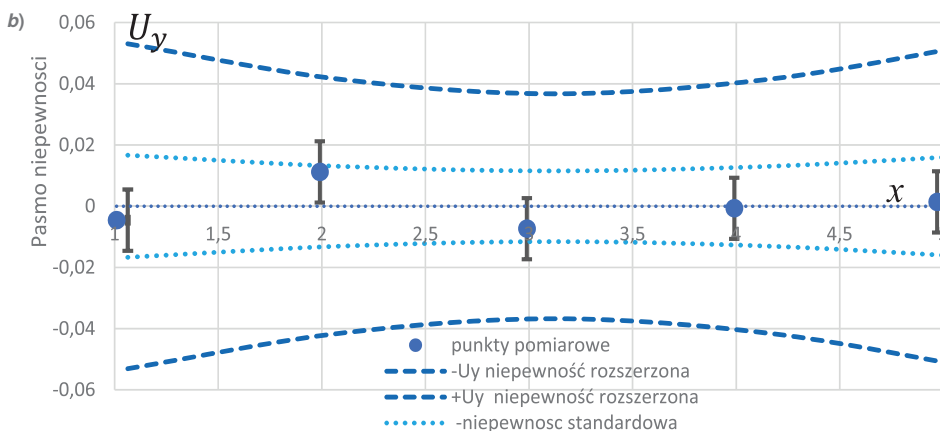
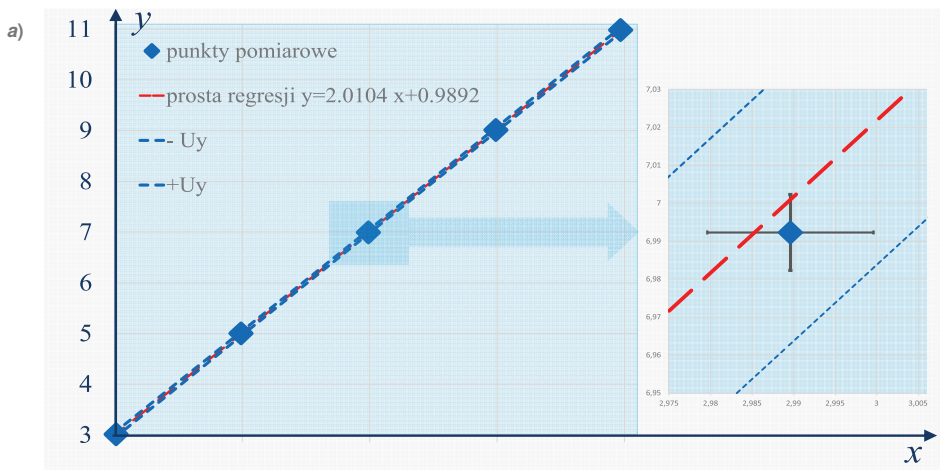
$$a = \frac{-B + \sqrt{B^2 - 4AC}}{2A} \text{ oraz } b = \bar{y} - a\bar{x}$$

10. Podsumowanie

Wyznaczono podstawowe równania macierowe i wynikające z nich zależności analityczne dla parametrów prostej regresji i granic pasma jej niepewności, gdy zbiory X i Y obu mierzonych zmiennych losowo współrzędnych punktów badanych o różnych niepewnościach, autokorelacji i skorelowaniu wzajemnym oraz przy braku korelacji. Stosowanie tych wzorów umożliwia algorytm cyfrowy opracowany przez J. Puchalskiego i opisany szczegółowo w [13].

Dla ilustracji numerycznego zastosowania omówionej metody w sekcji 8 podano prosty przykład liczbowy dla pomiarów współrzędnych x i y pięciu punktów o danych w tabeli 1 i wynikach numerycznych w tabeli 2. Sekcja 9 zawiera wzory analityczne, które można podać przy jednakowym skorelowaniu zbiorów obserwacji pomiarowych obu współrzędnych każdego z punktów.

Inne przykłady liczbowe będą omówione szczegółowo w kolejnej pracy cyklu o wyznaczaniu parametrów i pasm niepewności linii prostej metodami regresji stosowanymi w pomiarach z uwzględnieniem zasad estymacji niepewności według przewodnika GUM. Porówna się parametry prostych i ich pasma niepewności dla jednakowych współrzędnych x_i , y_i badanych punktów, które uzyska się z pomiarów samych tylko współrzędnych y_i przy zadanych wartościach x_i , bądź mierząc obie współrzędne x_i i y_i .



Rys. 4. a) Prosta regresji wraz z pasmem niepewności, b) Punkty pomiarowe z niepewnościami u_{y_i} oraz pasma niepewności standardowej i rozszerzonej w rozszerzonej skali $0y$
 Fig. 4. a) Regression line along with a band of uncertainty around it, b) Measurement points with uncertainties u_{y_i} and the standard and expanded uncertainty bands on the extended scale $0y$

Doświadczenia z analizy metrologicznej pomiarów dwu zmiennych losowych powiązanych prostą wyznaczaną metodą regresji wykorzystano też do szacowania niepewności pomiarów pośrednich w układach wieloparametrowych [26–29].

Bibliografia

- Amiri-Simkooei A.R., Zangeneh-Nejad F., Asgari J., Jazari S., *Estimation of straight-line parameters with fully correlated coordinates*. "Measurement", Vol. 48, 2014, 378–386, DOI: 10.1016/j.measurement.2013.11.005.
- Dorozhovets M., Warsza Z.L., *Udoskonalenie metod wyznaczania niepewności wyników pomiaru w praktyce*. „Przegląd Elektrotechniczny”, R. 83, Nr 1, 2007, 1–13.
- Dorozhovets M., Warsza Z.L., *Propozycje rozszerzenia metod wyznaczania niepewności wyniku pomiarów wg Przewodnika GUM (2)*, „Pomiary Automatyka Robotyka”, R. 11, Nr 2, 2007, 45–52.
- Dorozhovets M., Warsza Z.L., *Wyznaczanie niepewności typu A pomiarów o skorelowanych rezultatach obserwacji*. „Pomiary Automatyka Kontrola”, Nr 2, 2007, 20–25.
- Dorozhovets M., Warsza Z., *Methods of upgrading the uncertainty of type A evaluation, Part 2. Elimination of the influence of autocorrelation of observations and choosing the adequate distribution*, Proceedings of 15th IMEKO TC4 Symposium, Iasi Romania, 2007, 199–204.
- Dorozhovets M., *Uwzględnienie niepewności pomiaru obydwu wielkości w regresji liniowej*. „Pomiary Automatyka Kontrola”, Vol. 54, Nr 2, 2008, 3–5.
- Draper R.D., Smith H., *Applied Regression Analysis*, 3rd Edition Wiley New York 1998.
- Elster C., *Bayesian uncertainty analysis compared with the application of the GUM and its supplements*. "Metrologia", Vol. 51, No. 4, 2013, 159–166, DOI: 10.1088/0026-1394/51/4/S159.
- Fang X., *A structured and constrained total least-squares solution with cross-covariances*. "Studia geophysica et geodaetica", Vol. 58, 2014, 1–16, DOI: 10.1007/s11200-012-0671-z.
- Stuart A., *Kendall's Advanced Theory of Statistics*, Vol. 2. Charles Griffin Co Ltd., London, 3 ed. 1973.
- Krystek M., Anton M., *A weighted total least-squares algorithm for fitting a straight line*, "Measurement Science and Technology", Vol. 18, 2007, 3438–3442, DOI: 10.1088/0957-0233/18/11/025.
- Malengo A., Pennecci F., *A weighted total least-squares algorithm for any fitting model with correlated variables*. "Metrologia", Vol. 50, No. 6, 2013, DOI: 10.1088/0026-1394/50/6/654.
- Puchalski J., *A new algorithm for generalization of least square method for straight line regression in Cartesian System for fully correlated both coordinates*. "International Journal of Automation, Artificial Intelligence and Machine Learning", Vol. 2, No. 2, 2021, 20–54.
- Telnghuisen J., *Least squares methods of treating problems with uncertainty in x and y* . "Analytical chemistry" ACS publications, Vol. 19, No. 16, 2020, 10863–10871, DOI: 10.1021/acs.analchem.0c02178.
- Van Huffel S., Vandewalle J., *The Total Least Squares Problem*, Philadelphia, SIAM, 1991, DOI: 10.1137/1.9781611971002.
- Warsza Z.L., Dorozhovets M., *Uncertainty type A evaluation of autocorrelated measurement observations*. "Biuletyn WAT", Vol. LVII, Nr 2, 2008, 143–152.
- Warsza Z.L., Zięba A., *Niepewność typu A pomiaru o obserwacjach samoskorelowanych*. "Pomiary Automatyka Kontrola", R. 58, Nr 2, 2012, 157–161.
- Warsza Z.L., *Evaluation of the type A uncertainty in measurements with autocorrelated observations*. "Journal of Physics. Conference series", 2013, DOI: 10.1088/1742-6596/459/1/012035.
- Warsza Z.L., Puchalski J., *Udoskonalona metoda wyznaczania niepewności w pomiarach wieloparametrowych. Część 1. Podstawy teoretyczne dla skorelowanych wielkości mierzonych*. „Pomiary Automatyka Robotyka”, R. 23, Nr 1, 2019, 47–58, DOI: 10.14313/PAR_231/47.
- Warsza Z.L., Puchalski J., *Estimation of uncertainties in indirect parameter measurements of correlated quantities*. Proceedings of 12th International Conference "Measurement 2019", 51–57, DOI: 10.23919/MEASUREMENT47340.2019.8780042.
- Warsza Z.L., Puchalski J., *Rozszerzona metoda oceny niepewności pośrednich pomiarów wieloparametrowych i układów do tych pomiarów Cz. 1. Wpływ korelacji i niepewności funkcji przetwarzania – zależności podstawowe*. „Pomiary Automatyka Robotyka”, R. 23, Nr 3, 2019, 55–63, DOI: 10.14313/PAR_233/55.
- Warsza Z.L., Puchalski J., *Rozszerzona metoda oceny niepewności pośrednich pomiarów wieloparametrowych i układów do tych pomiarów Cz. 2. Przykład zastosowania -pomiaru za pośrednictwem czwórnika*. „Pomiary Automatyka Robotyka”, R. 23, Nr 4, 2019, 87–100, DOI: 10.14313/PAR_234/87.
- Warsza Z.L., Puchalski J., *Method of estimation uncertainties of indirect multivariable measurement including accuracy of processing function as extension of GUM-S2*. Advanced Mathematical and Computational Tools in Metrology and Testing AMCTM XII. Pavese F., Forbes A.B., Zhang N.F., Chunovkina A.G. (eds.): Series on Advances in Mathematics for Applied Sciences. Vol. 90, 2021, 451–463, DOI: 10.1142/9789811242380_0029.
- Warsza Z.L., Puchalski J., *Niepewności pomiarów w metodzie regresji liniowej. Cz. 1. Prosta i jej pasma niepewności dla nieskorelowanych danych pomiarowych*. „Pomiary Automatyka Robotyka”, R. 24, Nr 3, 2020, 79–91, DOI: 10.14313/PAR_237/79.
- Warsza Z.L., Puchalski J., *Niepewności pomiarów w metodzie regresji liniowej. Część 2. Niepewności prostej regresji dla zmiennej Y o skorelowanych danych*. „Pomiary Automatyka Robotyka”, R. 24, Nr 4, 2020, 61–72, DOI: 10.14313/PAR_238/61.
- Warsza Z.L., Puchalski J., *Uncertainty Bands of the Regression Line for Data with Type A and Type B Uncertainties of Dependent Variable Y* . Proceedings of 22nd Conference on Automation 2021, Vol. 1390, 342–363, DOI: 10.1007/978-3-03074893-7_32.
- Warsza Z.L., Puchalski J., *Uncertainty bands of the regression line for autocorrelated data of dependent variable Y* . Proceedings of 22nd Conference on Automation 2021, Vol. 1390, 364–386, DOI: 10.1007/978-3-03074893-7_33.
- Warsza Z.L., Puchalski J., *Ocena dokładności pomiarów w metodzie regresji liniowej z uwzględnieniem zasad przewodnika GUM*. „Metrologia Teoria i Praktyka” (Materiały 53. Międzyuczelnianej Konferencji Metrologów 53 MKM Warszawa Główny Urząd Miar 13–16 09. 2021) Politechnika Opolska 2021, 59–104.
- York D., Evensen M.N., Lopez Martinez M., De Basabe Delgado J., *Unified equations for the slope, intercept, and Standard errors for the best straight line*, "American Journal of Physics", Vol. 72, No. 3, 2004, 367–375,

DOI: 10.1119/1.1632486.

30. Zięba A., *Effective number of observations and unbiased estimators of variance for autocorrelated data – an overview*, “Metrology and Measurement Systems”, Vol. 17, Nr 1, 2010, 3–16.

- b. JCGM102:2011. Extension to any number of output quantities.
32. NEW04 “Novel mathematical and statistical approaches to uncertainty evaluation” (08/2012-07/2015) funded by the European Metrology Research Program (EMRP) 2015A “Guide to Bayesian Inference for Regression Problems”

Inne źródła

31. BIPM, IEC, IFCC, ILAC, ISO, IUPAC, IUPAP, OIML. Evaluation of measurement data – Guide to the expression of uncertainty in measurement. Joint Committee for Guides in Metrology, and
- a. JCGM 100, 2008. JCGM101:2008 Supplement 1. Propagation of distributions using a Monte Carlo method;

Regression and Uncertainty of a Straight-Line for Measurements of x and y Variables with All Correlations

Abstract: The work continues the series of publications on the estimation of the parameters of the equation and the limits of the uncertainty band of the straight-line $y = ax + b$ fitted to the measurement results of both coordinates of the tested points with the use of the linear regression method. A general case was considered when these coordinates have different uncertainties and there are all possible autocorrelations and cross-correlations. Description of matrix equations was used. The results of the coordinate measurements are presented as elements of the \mathbf{X} and \mathbf{Y} vectors. The propagation of their uncertainty was described by the \mathbf{U}_z covariance matrix with four component matrices, i.e., \mathbf{U}_x and \mathbf{U}_y – for the uncertainties and autocorrelations of \mathbf{X} and of \mathbf{Y} , and \mathbf{U}_{xy} and its transposition \mathbf{U}_{xy}^T – for the cross-correlations. The equation of a straight line and of the borders of its uncertainty band are given. Obtained them for the function of parameters a and b satisfying the so-called total criterion WTLS, i.e., the minimum sum of squared distances of points from the straight line weighted by the reciprocal of the coordinate uncertainty. When the coordinates of different points are not correlated, the simplified criterion WLS is used. The directions of projecting the points result from the minimization of the function describing the criterion. In the general case, there is only a numerical solution. This is illustrated by an example, in which the parameters a and b of the straight line were determined numerically from the enlarged fragments of the graph of the criterion function around its minimum. The conditions for the uncertainty and correlation of coordinates of points required to obtain an analytical solution and its example are also given.

Keywords: measurement of point coordinates, uncertainty, linear regression, minimization criterion, regression straight-line, uncertainty band, autocorrelation, cross-correlation

dr inż. Jacek Puchalski

j.puchalski@gum.gov.pl

ORCID: 0000-0002-5055-8550

Absolwent Wydziału Fizyki Technicznej i Matematyki Stosowanej (1986 r.) oraz Wydziału Elektroniki (1988 r.) Politechniki Warszawskiej. W latach 1987–1995 asystent na Politechnice Warszawskiej, w 1995 r. obronił pracę doktorską. Kolejne 10 lat pracował w branży nowych technologii w firmach produkujących i importujących kasy rejestrujące. Przygotowywał i uczestniczył w certyfikacji nowych modeli kas w Ministerstwie Finansów oraz prowadził szkolenia i serwis urządzeń fiskalnych. Od 2006 r. pracuje w Głównym Urzędzie Miar. Zajmował się zatwierdzeniem typu i oceną zgodności taksometrów elektronicznych i mierników prędkości w ruchu drogowym, a obecnie jako główny metrolog rozwija metody matematyczne szacowania niepewności pomiarowych.



doc. dr inż. Zygmunt Lech Warszawa

zlw1936@gmail.com

ORCID: 0000-0002-3537-6134

Absolwent Wydziału Elektrycznego Politechniki Warszawskiej 1959, doktorat 1967, docent od 1970. Praca: Instytut Elektrotechniki 1958–1963 i 1994–1995, Politechnika Warszawska 1960–1970, Politechnika Świętokrzyska 1970–1978 (organizator i dziekan Wydziału Transportu w Radomiu), Organizator i kierownik: Ośrodka Aparatury Pomiarowej w Instytucie Meteorologii i Gospodarki Wodnej 1978–1982 oraz Zakładu Automatykacji i Pomiarów w Instytucie Chemii Przemysłowej 1983–1992. Doradca Ministra Edukacji Narodowej 1992–1995, Politechnika Radomska 1983–2002. Obecnie główny specjalista w Przemysłowym Instytucie Automatyki i Pomiarów PIAP. Autor ponad 340 publikacji, 6 monografii, kilkudziesięciu prac badawczych i konstrukcyjnych, 11 patentów oraz promotor 2 doktorów. Prezes Polskiego Towarzystwa Metrologicznego. Członek stowarzyszenia PolSPAR oraz Akademii Metrologii Ukrainy.

