

METODO DEI MINIMI QUADRATI

GIUSEPPE GIUDICE

SOMMARIO. Il metodo dei minimi quadrati è trattato in tutti i testi di statistica e di elaborazione dei dati sperimentali, ma non sempre col rigore necessario. In attesa di ulteriori approfondimenti, propongo qui una sintesi di recenti lavori sull'argomento. Comincio a notare che anche la scelta di un opportuno formalismo è di importanza non trascurabile.

Quest'articolo discende soprattutto dai lavori di Deming, Press et al. (Numerical Recipes) e Jefferys.

1. TRATTAZIONE GENERALE

Il caso ordinario, presentato in tutti i testi, in cui entra in gioco il metodo dei minimi quadrati è il seguente:

Siano dati n punti sperimentali, di cui l'ascissa x si considera nota senza errori, mentre l'ordinata y è soggetta a errori di misura. Si suppone che esista una relazione, in genere ipotizzata lineare, ma comunque dipendente da parametri, tra x e y . Si vuole ottenere una stima dei parametri della relazione.

Consideriamo però un caso più generale:

Siano dati N valori misurati (che potrebbero corrispondere, a coppie, alle x e y del caso precedente; questa volta anche le x sono soggette a errore) e venga imposta una relazione, dipendente da k parametri, tra ciascuna coppia.

Particolarizzando la relazione per ciascuna coppia si ottiene una relazione di condizione. Si hanno quindi tante relazioni di condizione quante sono le coppie di misure, cioè quanti sono i punti sperimentali. È ovvia l'estensione a spazi di dimensionalità superiore (tre, quattro, eccetera, dimensioni): in tre dimensioni ogni punto sperimentale corrisponde ad una terna di valori, per cui, se imponiamo che i punti debbano giacere su una superficie troviamo tante equazioni di condizione quante sono le terne di valori, mentre se imponiamo che debbano giacere su una linea si hanno due equazioni di condizione per ogni terna di valori; e così per gli spazi di dimensione superiore.

Più in generale, siano date ν equazioni di condizione, dipendenti da k parametri e dalle N osservazioni.

In alcuni casi le equazioni di condizione non dipendono da parametri aggiustabili, ma da condizioni geometriche (p.e. la somma degli angoli interni di un triangolo è di 180 gradi); questo caso viene molto sottolineato da Deming.

In altri casi (Jefferys) si hanno relazioni tra i parametri, i quali quindi non sono più indipendenti.

Siano quindi date le N osservazioni, con le quali si costruisce il vettore \mathbf{x}_0 . Sia data anche una stima iniziale dei parametri \mathbf{a}_0 (nel caso lineare si può porre $\mathbf{a}_0 = \mathbf{0}$) e una matrice di covarianza $\boldsymbol{\sigma}$ che indichi gli errori probabili delle misure sperimentali.

Siano \mathbf{x} i valori veri delle quantità misurate. Se la misura fosse senza errori, allora $\mathbf{x}_0 = \mathbf{x}$, ma ciò non si verifica mai. Inoltre non è possibile conoscere i valori veri \mathbf{x} , ma al più dei valori ‘verisimili’ o ‘aggiustati’ $\hat{\mathbf{x}}$. I valori veri rispondono alle ν relazioni

$$\mathbf{f}(\mathbf{x}, \mathbf{a}) = \mathbf{0}$$

in cui entrano i valori veri dei parametri; i valori aggiustati rispondono alle ν relazioni

$$\mathbf{f}(\hat{\mathbf{x}}, \hat{\mathbf{a}}) = \mathbf{0}$$

in cui entrano i valori stimati o verisimili o aggiustati dei parametri (gli unici che possiamo determinare).

Nei punti sperimentali, e coi valori iniziali dei parametri, si ha invece

$$\mathbf{f}(\mathbf{x}_0, \mathbf{a}_0) = \mathbf{f}_0;$$

la quantità a destra si può chiamare residuo delle equazioni di condizione.

Definisco inoltre i residui (o il vettore dei residui, a N componenti) delle variabili indipendenti

$$\mathbf{v} = \mathbf{x}_0 - \hat{\mathbf{x}};$$

questa definizione, ossia: *residuo uguale al valore sperimentale meno valore teorico o al valore sperimentale meno il valore aggiustato* è universale in astronomia. Jefferys adotta il segno opposto ossia pone $\mathbf{v} = \hat{\mathbf{x}} - \mathbf{x}_0$.

Per la determinazioni dei parametri e dei valori aggiustati delle misure, applico un criterio di massima verosimiglianza. Se gli errori di misura sono distribuiti secondo una gaussiana multivariata a N dimensioni si ragiona in questo modo:

Data una distribuzione gaussiana multivariata, con punto centrale $\hat{\mathbf{x}}$ e matrice di correlazione $\boldsymbol{\sigma}$, la probabilità che i punti sperimentali siano estratti da tale distribuzione è

$$P \propto e^{-\frac{1}{2}(\mathbf{x}_0 - \hat{\mathbf{x}})^T \boldsymbol{\sigma}^{-1} (\mathbf{x}_0 - \hat{\mathbf{x}})}$$

(il vettore dei punti sperimentali è un punto in uno spazio N dimensionale in cui vale la distribuzione gaussiana che abbiamo scritto).

Occorre massimizzare la P e quindi minimizzare la quantità

$$S_0 = \frac{1}{2} \mathbf{v}^T \boldsymbol{\sigma}^{-1} \mathbf{v}$$

col vincolo che valgano le equazioni di condizione.

Se con Deming scriviamo queste ultime, linearizzandole nel punto $(\mathbf{x}_0, \mathbf{a}_0)$ (il che mi sembra lecito)¹ si ha, sviluppando in serie di Taylor limitata ai termini lineari,

$$\mathbf{f}(\hat{\mathbf{x}}, \hat{\mathbf{a}}) = \underbrace{\mathbf{f}(\mathbf{x}_0, \mathbf{a}_0)}_{\mathbf{f}_0} - \mathbf{f}_x(\mathbf{x}_0, \mathbf{a}_0) \mathbf{v} + \mathbf{f}_a(\mathbf{x}_0, \mathbf{a}_0) \boldsymbol{\delta} = \mathbf{0}$$

¹Naturalmente se si potesse linearizzare a partire dal punto $(\hat{\mathbf{x}}, \hat{\mathbf{a}})$ sarebbe tutto più semplice, in particolare non occorrerebbe mai cambiare le matrici derivate; ma ciò non è possibile, perché $(\hat{\mathbf{x}}, \hat{\mathbf{a}})$ è un punto *da determinare*.

essendo $\boldsymbol{\delta} = \hat{\mathbf{a}} - \mathbf{a}_0$. Questa definizione viene adottata per aderire al concetto intuitivo di ‘correzione’ ossia termine che deve essere aggiunto al valore iniziale per ottenere il valore aggiustato.

Adoperando il metodo di Lagrange, il funzionale da minimizzare è

$$S = \frac{1}{2} \mathbf{v}^T \boldsymbol{\sigma}^{-1} \mathbf{v} - \boldsymbol{\lambda}^T \mathbf{f}_x(\mathbf{x}_0, \mathbf{a}_0) \mathbf{v} + \boldsymbol{\lambda}^T \mathbf{f}_a(\mathbf{x}_0, \mathbf{a}_0) \boldsymbol{\delta} + \boldsymbol{\lambda}^T \mathbf{f}_0,$$

essendo $\boldsymbol{\lambda}$ un vettore di parametri, detti moltiplicatori di Lagrange, da determinare.

Derivando rispetto a \mathbf{v} e uguagliando a zero, si ha

$$\mathbf{v}^T \boldsymbol{\sigma}^{-1} - \boldsymbol{\lambda}^T \mathbf{f}_x(\mathbf{x}_0, \mathbf{a}_0) = \mathbf{0}^T$$

ossia, visto che $\boldsymbol{\sigma}^{-1}$ è simmetrica,

$$\boldsymbol{\sigma}^{-1} \mathbf{v} = \mathbf{f}_x^T(\mathbf{x}_0, \mathbf{a}_0) \boldsymbol{\lambda}; \quad (1)$$

derivando rispetto a $\boldsymbol{\delta}$ e uguagliando a zero, si ha inoltre

$$\boldsymbol{\lambda}^T \mathbf{f}_a(\mathbf{x}_0, \mathbf{a}_0) = \mathbf{0}^T$$

ossia

$$\mathbf{f}_a^T(\mathbf{x}_0, \mathbf{a}_0) \boldsymbol{\lambda} = \mathbf{0} \quad (2)$$

mentre valgono sempre le equazioni di condizione linearizzate

$$\mathbf{f}_x(\mathbf{x}_0, \mathbf{a}_0) \mathbf{v} - \mathbf{f}_a(\mathbf{x}_0, \mathbf{a}_0) \boldsymbol{\delta} = \mathbf{f}_0. \quad (3)$$

Le (1), (2) e (3) corrispondono, salvo piccole differenze di notazione, alle (10a,b,c) di Jefferys, e alle (3a,b,c) di Jefferys II.

La soluzione del sistema (1)-(3) è abbastanza diretta, salvo complicazioni algoritmiche: si ricava la \mathbf{v} dalla (1)

$$\mathbf{v} = \boldsymbol{\sigma} \mathbf{f}_x^T(\mathbf{x}_0, \mathbf{a}_0) \boldsymbol{\lambda}$$

si sostituisce nella (3)

$$(\mathbf{f}_x(\mathbf{x}_0, \mathbf{a}_0) \boldsymbol{\sigma} \mathbf{f}_x^T(\mathbf{x}_0, \mathbf{a}_0)) \boldsymbol{\lambda} - \mathbf{f}_a(\mathbf{x}_0, \mathbf{a}_0) \boldsymbol{\delta} = \mathbf{f}_0 \quad (1')$$

e si fa sistema con la (2). Le (1') corrispondono alle (15) di Deming e le (2) alle sue (13). Le stesse equazioni sono in Eichhorn (dovrebbe essere 1978MNRAS etc.) e in Brown.

Ponendo

$$\mathbf{W} = (\mathbf{f}_x(\mathbf{x}_0, \mathbf{a}_0) \boldsymbol{\sigma} \mathbf{f}_x^T(\mathbf{x}_0, \mathbf{a}_0))^{-1}$$

si ricava $\boldsymbol{\lambda}$ dalla (1')

$$\boldsymbol{\lambda} = \mathbf{W} \mathbf{f}_0 + \mathbf{W} \mathbf{f}_a(\mathbf{x}_0, \mathbf{a}_0) \boldsymbol{\delta}$$

e si sostituisce nella (2) ottenendosi

$$[\mathbf{f}_a^T(\mathbf{x}_0, \mathbf{a}_0) \mathbf{W} \mathbf{f}_a(\mathbf{x}_0, \mathbf{a}_0)] \boldsymbol{\delta} = -\mathbf{f}_a^T(\mathbf{x}_0, \mathbf{a}_0) \mathbf{W} \mathbf{f}_0 \quad (4)$$

e quindi

$$\boldsymbol{\delta} = -[\mathbf{f}_a^T(\mathbf{x}_0, \mathbf{a}_0) \mathbf{W} \mathbf{f}_a(\mathbf{x}_0, \mathbf{a}_0)]^{-1} \mathbf{f}_a^T(\mathbf{x}_0, \mathbf{a}_0) \mathbf{W} \mathbf{f}_0$$

che permette di trovare i valori aggiustati dei parametri; ricalcolando all'indietro la $\boldsymbol{\lambda}$ e la \mathbf{v} si ottengono alla fine anche i valori aggiustati dei punti. Le (4) vanno sotto il nome di equazioni normali.²

²In vari testi la matrice $\mathbf{f}_a^T(\mathbf{x}_0, \mathbf{a}_0) \mathbf{W} \mathbf{f}_a(\mathbf{x}_0, \mathbf{a}_0)$ è chiamata la matrice normale \mathbf{N} e la sua inversa è chiamata matrice di covarianza o di varianza-covarianza; invece la \mathbf{W} è chiamata la matrice dei pesi.

C'è tuttavia da fare una notevole avvertenza: il calcolo qui fatto vale per le equazioni di condizione *linearizzate* e non per quelle originali; cosicché non siamo sicuri che il punto trovato soddisfi queste ultime. Occorre quindi calcolare il valore di $\mathbf{f}(\mathbf{x}_1, \mathbf{a}_1)$ essendo \mathbf{x}_1 e \mathbf{a}_1 i punti e i parametri aggiustati risultati dalla procedura ora conclusa; se tale quantità è il vettore nullo, allora possiamo porre

$$\hat{\mathbf{x}} = \mathbf{x}_1 \quad \hat{\mathbf{a}} = \mathbf{a}_1,$$

altrimenti la procedura va ripetuta utilizzando come punto di partenza la stima corrente $(\mathbf{x}_1, \mathbf{a}_1)$ dei punti e dei parametri; si otterrà così una ulteriore stima $(\mathbf{x}_1, \mathbf{a}_1)$ e così via fino a convergenza.

2. APPLICAZIONI

Consideriamo un esempio preso pari pari da Jefferys:

Sia dato un insieme di punti sperimentali (y_i, t_i) , e sia prevista tra essi una relazione $a_1 + a_2 t$ i cui parametri sono da adattare. Entrambe le variabili siano soggette a errori. Le equazioni di condizione sono

$$y_i - a_1 - a_2 t_i = 0$$

che si possono riscrivere, con le posizioni

$$\begin{aligned} y_i &= x_{2i-1} \\ t_i &= x_{2i} \\ i &= 1, 2, \dots, n \end{aligned}$$

nella forma

$$\mathbf{f}(\mathbf{x}, \mathbf{a}) = \begin{pmatrix} x_1 - a_1 - a_2 x_2 \\ x_3 - a_1 - a_2 x_4 \\ \dots \\ x_{2n-1} - a_1 - a_2 x_{2n} \end{pmatrix} = \mathbf{0}. \quad (5)$$

Le derivate di tale vettore sono:

$$\mathbf{f}_{\mathbf{x}}(\mathbf{x}, \mathbf{a}) = \begin{pmatrix} 1 & -a_2 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & -a_2 & \dots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 1 & -a_2 \end{pmatrix}$$

(tale matrice di fatto non dipende da \mathbf{x}) e

$$\mathbf{f}_{\mathbf{a}}(\mathbf{x}, \mathbf{a}) = \begin{pmatrix} -1 & -x_2 \\ -1 & -x_4 \\ \vdots & \vdots \\ -1 & -x_{2n} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1 & -t_1 \\ -1 & -t_2 \\ \vdots & \vdots \\ -1 & -t_n \end{pmatrix}$$

(questa matrice di fatto non dipende da \mathbf{a}).

Inoltre, la matrice di covarianza delle osservazioni sia tale da consentire una correlazioni tra ciascun paio di osservazioni (y_i, t_i) ma non tra paia di osservazioni diverse, cioè sia della forma

$$\boldsymbol{\sigma} = \text{diag}(\boldsymbol{\sigma}_0, \boldsymbol{\sigma}_0, \dots, \boldsymbol{\sigma}_0)$$

con

$$\boldsymbol{\sigma}_0 = \begin{pmatrix} \sigma_{yy} & \sigma_{yt} \\ \sigma_{ty} & \sigma_{tt} \end{pmatrix}, \quad \sigma_{yt} = \sigma_{ty}.$$

In queste ipotesi

$$\mathbf{W} = (\mathbf{f}_x \boldsymbol{\sigma} \mathbf{f}_x^T)^{-1} = \frac{\mathbf{I}}{\sigma_{yy} - 2\sigma_{yt}a_2 + \sigma_{tt}a_2^2}$$

e le equazioni normali (4) diventano, semplificando il fattore $\sigma_{yy} - 2\sigma_{yt}a_2 + \sigma_{tt}a_2^2$, che compare al denominatore sia nel primo che nel secondo membro,

$$\begin{pmatrix} n & \sum t \\ \sum t & \sum t^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \delta_1 \\ \delta_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sum f_0 \\ \sum t f_0 \end{pmatrix}.$$

Ponendo nella (5) $\mathbf{a}_0 = \mathbf{0}$ si ha $\mathbf{f}_0 = \mathbf{y}$, essendo \mathbf{y} il vettore delle ordinate sperimentali, mentre $\delta_i = \hat{a}_i$, per cui si ritrovano le equazioni consuete del metodo dei minimi quadrati

$$\begin{pmatrix} n & \sum t \\ \sum t & \sum t^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{a}_1 \\ \hat{a}_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sum y \\ \sum ty \end{pmatrix}. \quad (4')$$

In questo caso, quindi, si arriva direttamente alle \hat{a}_i in quanto l'algoritmo è lineare rispetto ad entrambe le variabili.

Ciò non succede se le σ_0 relative ai diversi punti sono disuguali tra di loro. In questo caso, la \mathbf{W} è ancora diagonale, ma ha la forma

$$\mathbf{W} = \text{diag}(w_1, w_2, \dots, w_n), \quad w_i = \frac{1}{\sigma_{yy}^i - 2\sigma_{yt}^i a_2 + \sigma_{tt}^i a_2^2}$$

e le equazioni normali si scrivono

$$\begin{pmatrix} \sum w & \sum wt \\ \sum wt & \sum wt^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \delta_1 \\ \delta_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sum w f_0 \\ \sum w t f_0 \end{pmatrix}. \quad (5)$$

Apparentemente è cambiato ben poco; invece va notato che le w_i sono funzioni della a_2 , per cui:

- (1) non si può partire da $a_2 = 0$ ma occorre partire da un valore 'ragionevole' di tentativo;
- (2) ad ogni passo occorre aggiornare le matrici che compaiono nelle equazioni normali ricalcolando i pesi per il nuovo valore di a_2 .

Una volta che la a_2 è arrivata a convergenza, non occorre controllare che le equazioni di condizione siano soddisfatte in quanto esse sono lineari nei parametri.

Un caso particolare di questo secondo esempio si ha quando gli errori sono tutti a carico della variabile y mentre la variabile t è considerata senza errori. Si tratta del caso che viene preso come base di quasi tutte le trattazioni teoriche e della pressoché totalità delle implementazioni al calcolatore. In questo caso $w_i = 1/\sigma_{yy}^i$ per cui le equazioni normali rimangono formalmente le (5), ma non occorre ricalcolare la matrice normale, onde si arriva alla soluzione in un sol passo.

Se poi gli errori sulla y sono tutti uguali per ogni punto, valgono di nuovo le (4'), la cui soluzione è la seguente:

$$\begin{pmatrix} \hat{a}_1 \\ \hat{a}_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} n & \sum t \\ \sum t & \sum t^2 \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} \sum y \\ \sum ty \end{pmatrix} = \frac{1}{\Delta} \begin{pmatrix} \sum t^2 & -\sum t \\ -\sum t & n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \sum y \\ \sum ty \end{pmatrix}$$

in cui Δ è il determinante della matrice da invertire, ossia

$$\Delta = n \sum t^2 - \left(\sum t \right)^2.$$

In forma esplicita la soluzione è

$$\begin{pmatrix} \hat{a}_1 \\ \hat{a}_2 \end{pmatrix} = \frac{1}{n \sum t^2 - (\sum t)^2} \begin{pmatrix} \sum t^2 \sum y - \sum t \sum ty \\ - \sum t \sum y + n \sum ty \end{pmatrix}$$

Un altro caso assai importante per le applicazioni è quello in cui le equazioni di condizione siano lineari nei parametri, anche se non nelle coordinate dei punti: per esempio se sono della forma

$$y_i = a_1 + a_2 t_i + \cdots + a_k t_i^{k-1}.$$

Convieni traslare il problema in uno spazio a $k + 1$ dimensioni, ponendo:

$$\begin{aligned} y_1 &= x_1, \\ t_1 &= x_2 \\ &\dots \\ t_1^{k-1} &= x_k \\ y_2 &= x_{k+1} \\ &\dots \\ y_n &= x_{(n-1)k+1} \\ t_n &= x_{(n-1)k+2} \\ &\dots \\ t_n^j &= x_{(n-1)k+j+1} \\ &\dots \\ t_n^{k-1} &= x_{nk} \end{aligned}$$

in modo che risulti, come è giusto, $N = nk$. Tratto qui solo il caso in cui gli errori sono solo sulle y_i , per aggirare, almeno momentaneamente, il problema delle covarianze.

Le equazioni di condizione sono:

$$\mathbf{f}(\mathbf{x}, \mathbf{a}) = \begin{pmatrix} x_1 - a_1 - a_2 x_2 - \cdots - a_k x_k \\ x_{k+1} - a_1 - a_2 x_{k+2} - \cdots - a_k x_{2k} \\ \dots \\ x_{(n-1)k+1} - a_1 - a_2 x_{(n-1)k+2} - \cdots - a_k x_{nk} \end{pmatrix} = \mathbf{0},$$

la cui derivata rispetto al vettore dei parametri è

$$\mathbf{f}_\mathbf{a}(\mathbf{x}, \mathbf{a}) = \begin{pmatrix} -1 & -t_1 & -t_1^2 & \cdots & -t_1^{k-1} \\ -1 & -t_2 & -t_2^2 & \cdots & -t_2^{k-1} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ -1 & -t_n & -t_n^2 & \cdots & -t_n^{k-1} \end{pmatrix}$$

che è, a parte il segno, una matrice di Vandermonde.

Per risparmiare spazio, non riporto la derivata rispetto al vettore \mathbf{x} ; e siccome essa serve solo a costruire la matrice dei pesi, basta dire che nel caso esaminato la matrice dei pesi si riduce ad una matrice diagonale, i cui elementi non nulli non sono necessariamente uguali tra loro.

Le equazioni normali si scrivono

$$\begin{pmatrix} \sum w & \sum wt & \sum wt^2 & \cdots & \sum wt^{k-1} \\ \sum wt & \sum wt^2 & \sum wt^3 & \cdots & \sum wt^k \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \sum wt^{k-1} & \sum wt^k & \sum wt^{k+1} & \cdots & \sum wt^{2k-2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \delta_1 \\ \delta_2 \\ \vdots \\ \delta_k \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sum wf_0 \\ \sum wt f_0 \\ \vdots \\ \sum wt^{k-1} f_0 \end{pmatrix}.$$

3. MATRICI DI COVARIANZA

Questo paragrafo è ripreso pari pari da Jefferys

Riprendiamo l'intero ragionamento del primo paragrafo, scrivendo la funzione da minimizzare in riferimento al punto aggiustato $\hat{\mathbf{x}}$. Nel far ciò ridefiniamo il simbolo del residuo così :

$$\mathbf{v} = \mathbf{x}_0 - \mathbf{x},$$

cioè con riferimento al punto vero, che resta incognito, mentre il simbolo precedente sarà ora distinto dal cappuccio:

$$\hat{\mathbf{v}} = \mathbf{x}_0 - \hat{\mathbf{x}},$$

Inoltre immaginiamo che il punto vero, rispetto a quello aggiustato, risponda ad un criterio di massima verosimiglianza, il che ovviamente non è affatto rigoroso.

Si ha allora:

$$S = \frac{1}{2} \mathbf{v}^T \boldsymbol{\sigma}^{-1} \mathbf{v} - \boldsymbol{\lambda}^T \mathbf{f}_{\mathbf{x}}(\hat{\mathbf{x}}, \hat{\mathbf{a}})(\mathbf{v} - \hat{\mathbf{v}}) - \boldsymbol{\lambda}^T \mathbf{f}_{\mathbf{a}}(\hat{\mathbf{x}}, \hat{\mathbf{a}}) \mathbf{d}$$

essendo $\mathbf{d} = \hat{\mathbf{a}} - \mathbf{a}$ e tenendosi conto che $\mathbf{f}(\hat{\mathbf{x}}, \hat{\mathbf{a}}) = \mathbf{0}$.

Derivando rispetto a $\hat{\mathbf{v}}$, a \mathbf{d} e a $\boldsymbol{\lambda}$ e uguagliando a zero, si ha

$$\boldsymbol{\sigma}^{-1} \hat{\mathbf{v}} - \mathbf{f}_{\mathbf{x}}^T(\hat{\mathbf{x}}, \hat{\mathbf{a}}) \boldsymbol{\lambda} = \mathbf{0}$$

$$\mathbf{f}_{\mathbf{a}}^T \boldsymbol{\lambda} = \mathbf{0}$$

$$\mathbf{f}_{\mathbf{x}}(\hat{\mathbf{x}}, \hat{\mathbf{a}}) \hat{\mathbf{v}} - \mathbf{f}_{\mathbf{a}}(\hat{\mathbf{x}}, \hat{\mathbf{a}}) \mathbf{d} = \mathbf{f}_{\mathbf{x}}(\hat{\mathbf{x}}, \hat{\mathbf{a}}) \mathbf{v},$$

e le equazioni normali diventano

$$(\mathbf{f}_{\mathbf{a}}^T(\hat{\mathbf{x}}, \hat{\mathbf{a}}) \mathbf{W} \mathbf{f}_{\mathbf{a}}(\hat{\mathbf{x}}, \hat{\mathbf{a}})) \mathbf{d} = -\mathbf{f}_{\mathbf{a}}^T(\mathbf{x}_0, \mathbf{a}_0) \mathbf{W} \mathbf{f}_{\mathbf{x}}(\hat{\mathbf{x}}, \hat{\mathbf{a}}) \mathbf{v};$$

il segno meno dipende dalla convenzione del segno qui adottata per \mathbf{v} , opposta a quella di Jefferys. Risolvendo queste ultime si ha

$$\mathbf{d} = -(\mathbf{f}_{\mathbf{a}}^T(\hat{\mathbf{x}}, \hat{\mathbf{a}}) \mathbf{W} \mathbf{f}_{\mathbf{a}}(\hat{\mathbf{x}}, \hat{\mathbf{a}}))^{-1} \mathbf{f}_{\mathbf{a}}^T(\mathbf{x}_0, \mathbf{a}_0) \mathbf{W} \mathbf{f}_{\mathbf{x}}(\hat{\mathbf{x}}, \hat{\mathbf{a}}) \mathbf{v}.$$

Analogamente al caso precedente si ricava pure:

$$\hat{\mathbf{v}} = \boldsymbol{\sigma} \mathbf{f}_{\mathbf{x}}^T(\hat{\mathbf{x}}, \hat{\mathbf{a}}) \mathbf{W} (\mathbf{f}_{\mathbf{x}}(\hat{\mathbf{x}}, \hat{\mathbf{a}}) \mathbf{v} + \mathbf{f}_{\mathbf{a}}(\hat{\mathbf{x}}, \hat{\mathbf{a}}) \mathbf{d})$$

A questo punto, seguendo Jefferys, è elementare ricavare le matrici di covarianza. Per esempio, la matrice di covarianza tra i parametri è data da

$$\boldsymbol{\sigma}_{\mathbf{d}\mathbf{d}} = \langle \mathbf{d}\mathbf{d}^T \rangle = (\mathbf{f}_{\mathbf{a}}^T(\hat{\mathbf{x}}, \hat{\mathbf{a}}) \mathbf{W} \mathbf{f}_{\mathbf{a}}(\hat{\mathbf{x}}, \hat{\mathbf{a}}))^{-1} = \mathbf{N}^{-1}$$

in cui per la dimostrazione rimando allo stesso Jefferys. Noto che Numerical Recipes arriva alla stessa conclusione, ma non accenna esplicitamente alla forma della matrice di covarianza (che è appunto l'inversa della matrice delle equazioni normali).

Invece la covarianza tra i residui dei parametri e i residui veri è data da

$$\boldsymbol{\sigma}_{\mathbf{d}\mathbf{v}} = \langle \mathbf{d}\mathbf{v}^T \rangle = \mathbf{N}^{-1} \mathbf{f}_{\mathbf{a}}^T(\hat{\mathbf{x}}, \hat{\mathbf{a}}) \mathbf{W} \mathbf{f}_{\mathbf{a}}(\hat{\mathbf{x}}, \hat{\mathbf{a}}) \langle \mathbf{v}\mathbf{v}^T \rangle = \mathbf{N}^{-1} \mathbf{f}_{\mathbf{a}}^T(\hat{\mathbf{x}}, \hat{\mathbf{a}}) \mathbf{W} \mathbf{f}_{\mathbf{a}}(\hat{\mathbf{x}}, \hat{\mathbf{a}}) \boldsymbol{\sigma},$$

che rende possibile calcolare l'importante risultato

$$\boldsymbol{\sigma}_{\mathbf{d}\hat{\mathbf{v}}} = \langle \mathbf{d}\hat{\mathbf{v}}^T \rangle = \mathbf{0}$$

(per i passaggi vedi Jefferys II), cioè che *i residui e le correzioni dei parametri sono scorrelati*.

E infine, citando alla lettera da Jefferys II, la matrice delle covarianze delle osservazioni aggiustate $\hat{\mathbf{x}}$ è

$$\boldsymbol{\sigma}_{\hat{\mathbf{x}}\hat{\mathbf{x}}} = \boldsymbol{\sigma} - \boldsymbol{\sigma}_{\hat{\mathbf{v}}\hat{\mathbf{v}}}$$

(questa è la (15) di Jefferys II), in cui

$$\sigma_{\hat{v}\hat{v}} = \sigma \mathbf{f}_x^T \mathbf{W} (\mathbf{f}_x \sigma \mathbf{f}_x^T - \mathbf{f}_x \mathbf{N}^{-1} \mathbf{f}_x^T) \mathbf{W} \mathbf{f}_x \sigma \approx \sigma \mathbf{f}_x^T \mathbf{W} \mathbf{f}_x \sigma$$

(queste sono le (14) e (16) di Jefferys II), che in definitiva permette di stimare il miglioramento che si ottiene grazie all'aggiustamento.

Tutte queste matrici di covarianza dovrebbero essere calcolati utilizzando i valori veri dei vettori \mathbf{x} e \mathbf{a} , che naturalmente sono inaccessibili, per cui devono essere calcolati utilizzando i valori aggiustati $\hat{\mathbf{x}}$ e $\hat{\mathbf{a}}$. L'errore che si commette è $O(v^3)$.

Come applicazione si possono trovare le formule per la media pesata.

Vale la pena di trascrivere in forma esplicita la matrice di covarianza tra i parametri nel caso dell'adattamento di una retta. La matrice normale è

$$\mathbf{N} = \begin{pmatrix} \sum w & \sum wt \\ \sum wt & \sum (wt^2) \end{pmatrix}$$

e, se i pesi sono uguali e pari a $w = 1/\sigma$,

$$\mathbf{N} = w \begin{pmatrix} n & \sum t \\ \sum t & \sum (t^2) \end{pmatrix};$$

in questo caso

$$\mathbf{N}^{-1} = \frac{1}{n} \frac{1}{\Delta} \begin{pmatrix} \sum (t^2) & -\sum t \\ -\sum t & n \end{pmatrix};$$

essendo

$$\Delta = n - \left(\frac{\sum t}{n} \right)^2.$$

L'errore sulla pendenza è

$$\sigma \sqrt{\frac{n}{\Delta}}$$

e quello sull'intercetta

$$\sigma \sqrt{\frac{\sum (t^2)}{\Delta}}.$$

4. BIBLIOGRAFIA

- Press W., et al., 1992, *Numerical Recipes*, 2nd edition, Cambridge Univ. Press.
 Deming, W.E., 1943, *Statistical Adjustment of Data*, reprint 1964.
 Jefferys, W. H., 1988, *Astronomical Journal*, 85, 177 (citato come Jefferys)
 Jefferys, W. H., 1988, *Astronomical Journal*, 86, 149 (citato come Jefferys II)