

OBZORNIK ZA MATEMATIKO IN FIZIKO



**LJUBLJANA
1957-58
VI. št. 3**

VSEBINA

Članki:

	Stran
Osnovni pojmi teorije informacij (Rajko Jamnik)	97
O metodi najmanjših kvadratov (Milan Čopič)	108
Jedrska magnetna resonanca (Ivan Zupančič)	120

Novice:

Cestne krivine (Janez Strnad)	133
Mednarodni fizikalni kolokviji v letu 1959	137

Domače vesti:

XII. plenum Zveze društev matematikov in fizikov FLRJ (Jože Povšič)	138
Občni zbor Društva matematikov in fizikov LRS (J. Grasselli)	139
Krožki iz matematike (Stanko Uršič)	140

Nove knjige	141
-----------------------	-----

Odgovori	143
--------------------	-----

Dopisi	144
------------------	-----

CONTENTS

Articles:

	Page
Elements of Information Theory (Rajko Jamnik)	97
On the Method of Least Squares (Milan Čopič)	108
Nuclear Magnetic Resonanc (Ivan Zupančič)	120

News:

Road Curves (Janez Strnad)	133
International Physical Colloquia in 1959	137

Home News:

12 th Session of the Association of Mathematicians and Physicists of Yugoslavia	138
General Meeting of the Society of Mathematicians and Physicists of Slovenia	139

New Books	141
---------------------	-----

Answers	143
-------------------	-----

Letters	144
-------------------	-----

OSNOVNI POJMI TEORIJE INFORMACIJ

RAJKO JAMNIK

(Fakulteta za agronomijo, gozdarstvo in veterinarstvo, Ljubljana)

Teorija informacij je najmlajša veja verjetnostnega računa. Za njeno rojstvo lahko štejemo izid dveh sestavkov, ki jih je objavil C. E. SHANNON leta 1948 pod naslovom »A mathematical theory of communication«. Shannonovo delo je sicer v matematičnem oziru nepopolno, toda kljub temu nadvse pomembno. Spada namreč med tista razmeroma redka dela, ki utirajo nove poti. Res se je nova teorija v nekaj letih po izidu teh dveh sestavkov matematično utrdila in razširila. Posebne zasluge pri tem imajo B. McMillan, A. Feinstein, J. L. Doob, A. J. Hinčin in A. N. Kolmogorov, da naštejemo le nekaj imen. Tako je teorija informacij po desetih letih svojega razvoja že prav pomembna matematična zgradba z veliko praktično vrednostjo. V našem, zgolj informativnem sestavku bomo mogli očitati le del njenih temeljev in na kratko skicirati njene najpreprostejše uporabe.

1. Entropija

Dan naj bo popoln sistem dogodkov

$$A_1, A_2, \dots, A_n \quad (1)$$

torej taka množica dogodkov, da pri vsakem poskusu nastopi natančno eden od njih. Pri metanju kovanca n . pr. tvorita popoln sistem dva dogodka: dogodek, da pade grb, in dogodek, da pade številka.

Naj bodo znane še verjetnosti dogodkov v sistemu (1):

$$p_1, p_2, \dots, p_n \quad (2)$$

Ker je sistem popoln, je seveda $p_1 + p_2 + \dots + p_n = 1$. Dogodke (1) in njihove verjetnosti (2) združimo v verjetnostno shemo

$$A = \begin{pmatrix} A_1 & A_2 & \dots & A_n \\ p_1 & p_2 & \dots & p_n \end{pmatrix} \quad (3)$$

Pri metanju kovanca, ki smo ga omenili zgoraj, je verjetnostna shema

$$A = \begin{pmatrix} A_1 & A_2 \\ 0,5 & 0,5 \end{pmatrix}$$

S shemo A je v verjetnostnem smislu natančno opredeljen neki poskus. Tega bomo tudi označevali z A , besedi shema in poskus pa uporabljali kot sinonima.

Oglejmo si poskus A ! Če v shemi A ni gotovega dogodka, je pred poskusom nemogoče vnaprej napovedati, kateri izmed dogodkov popolnega sistema (1)

bo nastopil. Shemi A je torej lastna neka nedoločenost. Ta nedoločenost je pri različnih shemah različna. Naj bo n . pr.

$$A = \begin{pmatrix} A_1 & A_2 \\ 0,5 & 0,5 \end{pmatrix} \quad \text{in} \quad B = \begin{pmatrix} B_1 & B_2 \\ 0,999 & 0,001 \end{pmatrix} \quad (4)$$

Pri poskusu A je izid povsem negotov, pri poskusu B pa je skoraj gotovo, da bo nastopil dogodek B_1 . Torej je nedoločenost sheme A večja od nedoločenosti sheme B . Primerjajmo še shemi

$$A = \begin{pmatrix} A_1 & A_2 \\ 0,5 & 0,5 \end{pmatrix} \quad \text{in} \quad B = \begin{pmatrix} B_1 & B_2 \dots B_{10} \\ 0,1 & 0,1 \dots 0,1 \end{pmatrix} \quad (5)$$

V obeh shemah nastopajo samo dogodki, ki so med seboj enako verjetni, toda v drugi shemi jih je petkrat več kot v prvi. Zato je lažje predvideti izid pri poskusu A kot pri poskusu B in je potemtakem nedoločenost sheme A manjša od nedoločenosti sheme B .

Pri zgledih (4) in (5)) smo lahko brez težav ugotovili, katera izmed shem je bolj nedoločena. V primeru

$$A = \begin{pmatrix} A_1 & A_2 & A_3 \\ 0,5 & 0,25 & 0,25 \end{pmatrix} \quad \text{in} \quad B = \begin{pmatrix} B_1 & B_2 & B_3 \\ 0,4 & 0,4 & 0,2 \end{pmatrix} \quad (6)$$

pa to ni več mogoče. Če hočemo primerjati tudi nedoločenost takih shem, moramo uvesti mero za nedoločenost sheme.

Priredimo torej vsaki shemi A neko število $H(A)$, ki bo merilo njeno nedoločenost! $H(A)$ je funkcija sheme A . To funkcijo bomo najprej definirali za sheme, v katerih so vsi dogodki enako verjetni. Na primeru (5) smo videli, da je za take sheme iskana funkcija odvisna le od števila dogodkov. Če je v shemi A število dogodkov k , je torej $H(A) = H(k)$. Funkcija $H(k)$ pa naj zadošča še naslednjim pogojem:

I. Na primeru (5) smo videli, da je med shemami, v katerih so sami med seboj enako verjetni dogodki, najbolj nedoločena tista, v kateri je največ dogodkov. Zato mora biti funkcija $H(k)$ strogo naraščajoča; za poljubni naravni števili m in n torej velja:

$$H(m) < H(n) \quad \leftrightarrow \quad m < n \quad (7)$$

II. Naj bo

$$A = \begin{pmatrix} A_1 & A_2 \dots A_m \\ p & p \dots p \end{pmatrix} \quad B = \begin{pmatrix} B_1 & B_2 \dots B_n \\ q & q \dots q \end{pmatrix}$$

shemi A in B pa naj bosta med seboj neodvisni! Tedaj je verjetnost v dogodka $A_i B_j$, da se zgodi v shemi A dogodek A_i ($i = 1, 2, \dots, m$) in hkrati v shemi B dogodek B_j ($j = 1, 2, \dots, n$), enaka $v = p \cdot q$. Dogodki $A_i B_j$ tvorijo novo shemo, ki jo imenujemo produkt shem A in B in jo označimo z znakom AB . V produktu AB je $m \cdot n$ enako verjetnih dogodkov. Zaradi relacije (7) mora torej biti $H(AB) > H(A)$ in $H(AB) > H(B)$. Med $H(A)$, $H(B)$ in $H(AB)$ pa lahko predpišemo še natančnejšo zvezo: Očitno je realizacija sheme AB ekvivalentna hkratni realizaciji shem A in B in je zato

$$H(AB) = H(A) + H(B) \quad (8)$$

To zahtevo lahko zapišemo tudi v obliki:

$$H(mn) = H(m) + H(n) \quad (9)$$

Če postavimo v formuli (9) $m = n = 1$, dobimo $H(1) = 2H(1)$ in od tod $H(1) = 0$. Tako tudi mora biti: Če je v shemi en sam dogodek, je ta dogodek gotov; shema ni nedoločena in mora biti mera za njeno nedoločenost enaka nič.

Iskana funkcija $H(k)$ mora biti torej strogo naraščajoča in mora zadoščati pogoju (9). Edina funkcija, ki ustreza postavljenim zahtevam, ima obliko

$$H(k) = C \log k \quad (10)$$

kjer je C pozitivna konstanta.¹

Vrednost konstante C v definiciji (10) je odvisna od izbire logaritemskega sistema in od tega, v kakšni enoti merimo nedoločenost. V teoriji informacij se navadno uporablja logaritemski sistem z osnovo 2, za enoto nedoločenosti pa se vzame nedoločenost sheme z dvema enako verjetnima dogodkoma. Po tem dogovoru je

$$1 = H(2) = C \log_2 2 = C.$$

Potemtakem je nedoločenost sheme A s k enako verjetnimi dogodki enaka $H(k) = \log_2 k$ »dualnih enot«.²

Ker je v shemi A k enako verjetnih dogodkov, lahko smatramo, da vsak dogodek enako prispeva k nedoločenosti sheme. Na vsakega izmed njih odpade prispevek

$$k^{-1} \log k = -k^{-1} \log k^{-1} = -p \log p \quad (11)$$

Zdaj pa lahko mero za nedoločenost sheme tudi takole tolmačimo: Če ima dogodek A_i verjetnost p , mu pripišimo nedoločenost

$$H(A_i) = -\log p$$

ki jo imenujemo zaradi fizikalnih analogij³ entropijo dogodka A_i . Za količino $H(A_i)$ vemo, kakšne vrednosti more zavzeti in s kakšno verjetnostjo; torej je $H(A_i)$ slučajna spremenljivka na shemi A . V našem primeru je ta slučajna spremenljivka očitno enakomerno porazdeljena. Izračunajmo njeno srednjo vrednost $MH(A_i)$:

$$MH(A_i) = -p \log p - p \log p - \dots - p \log p = -k \cdot p \log p$$

Če to srednjo vrednost primerjamo z relacijo (11), vidimo, da je srednja vrednost $MH(A_i)$ entropij vseh dogodkov v shemi enaka meri za nedoločenost sheme $H(A)$:

$$H(A) = MH(A_i) \quad (12)$$

Zato bomo količino $H(A)$ odslej imenovali entropijo sheme A .

¹ Primerjaj vprašanje 3 v Obzorniku V/2 in odgovor v Obzorniku VI/2!

² To enoto imenuje Shannon »bit«, kar je okrajšava za »binary digit«.

³ Po Boltzmannu je entropija stanja fizikalnega sistema proporcionalna logaritmu njegove verjetnosti.

Relacija (12) nam kaže smer, v kateri lahko razširimo definicijo entropije na poljubne sheme. Naj bodo v shemi

$$A = \begin{pmatrix} A_1 & A_2 \dots A_n \\ p_1 & p_2 \dots p_n \end{pmatrix}$$

verjetnosti $p_1, p_2, \dots, p_n$ kakršne koli, da je le njihova vsota enaka 1. Dogodku A_i pripišimo entropijo

$$H(A_i) = -\log p_i \quad (i = 1, 2, \dots, n)$$

Srednjo vrednost slučajne spremenljivke $H(A_i)$

$$H(A) = -\sum_{i=1}^n p_i \log p_i \quad (13)$$

spet imenujemo entropijo sheme A in jo vzamemo za mero nedoločenosti sheme.

Funkcija $H(A)$ v splošnem primeru ni več odvisna le od števila dogodkov, ampak jo določajo verjetnosti dogodkov v shemi:

$$H(A) = H(p_1, p_2, \dots, p_n)$$

Videli bomo, da ima ta funkcija vse lastnosti, ki jih mora imeti mera za nedoločenost.

1. Funkcija (13) je sestavljena iz členov oblike $y = x \log x$. Funkcija $y = x \log x$ je definirana in zvezna pri $x > 0$. Ker je razen tega

$$\lim_{x \rightarrow +0} (x \log x) = 0$$

postavimo še $y(0) = 0$, pa je funkcija y definirana in zvezna za vsak $x \geq 0$. Po tem dogovoru je tudi funkcija (13) zvezna na polju

$$0 \leq p_i \leq 1 \quad (i = 1, 2, \dots, n)$$

Tako tudi mora biti, saj je očitno, da se nedoločenosti dveh shem malo razlikujeta, če so si njune verjetnosti blizu.

2. Na primeru (4) smo videli, da je shema pri enakem številu dogodkov tem bolj nedoločena, čim manj se med seboj razlikujejo verjetnosti njenih dogodkov. Temu dejstvu ustreza naslednja lastnost funkcije (13):

Funkcija $H(p_1, p_2, \dots, p_n)$ ima največjo vrednost, če je

$$p_1 = p_2 = \dots = p_n = n^{-1}$$

Da to uvidimo, upoštevajmo, da je funkcija H sestavljena iz samih konveksnih členov. Za vsako konveksno funkcijo $f(x)$ in za poljubna pozitivna števila $a_1, a_2, \dots, a_n$ pa velja neenačba

$$f\left(n^{-1} \sum_{i=1}^n a_i\right) \leq n^{-1} \sum_{i=1}^n f(a_i)$$

Če vzamemo, da je $a_i = p_i$ in $f(x) = x \log x$, ter upoštevamo, da je $p_1 + p_2 + \dots + p_n = 1$, dobimo:

$$f(n^{-1}) = n^{-1} \log n^{-1} \leq n^{-1} \sum_{i=1}^n p_i \log p_i = -n^{-1} H(p_1, p_2, \dots, p_n)$$

Od tod sledi:

$$H(p_1, p_2, \dots, p_n) \leq \log n = H(n^{-1}, n^{-1}, \dots, n^{-1}) \quad (14)$$

in dokaz je končan.

3. Funkcija H zadošča tudi posplošeni zahtevi (8): Pri poljubnih, med seboj neodvisnih shemah A in B je

$$H(AB) = H(A) + H(B) \quad (15)$$

Res, naj bo

$$A = \begin{pmatrix} A_1 & A_2 & \dots & A_m \\ p_1 & p_2 & \dots & p_m \end{pmatrix} \quad \text{in} \quad B = \begin{pmatrix} B_1 & B_2 & \dots & B_n \\ q_1 & q_2 & \dots & q_n \end{pmatrix}$$

Verjetnost v_{ij} dogodka $A_i B_j$ je enaka

$$v_{ij} = p_i q_j \quad (i = 1, 2, \dots, m; j = 1, 2, \dots, n)$$

Tedaj je

$$\begin{aligned} -H(AB) &= \sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^n v_{ij} \log v_{ij} = \sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^n v_{ij} (\log p_i + \log q_j) = \\ &= \sum_{i=1}^m p_i \log p_i \sum_{j=1}^n q_j + \sum_{j=1}^n q_j \log q_j \sum_{i=1}^m p_i = -H(A) - H(B) \end{aligned}$$

in trditev je dokazana.

Zdaj pa opustimo zahtevo, da sta shemi A in B med seboj neodvisni! Če označimo verjetnost dogodka B_j pri pogoju, da se je zgodil dogodek A_i , s q_{ij} , je verjetnost v_{ij} dogodka $A_i B_j$ enaka

$$v_{ij} = p_i q_{ij} \quad (i = 1, 2, \dots, m; j = 1, 2, \dots, n)$$

Potem je

$$\begin{aligned} -H(AB) &= \sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^n p_i q_{ij} (\log p_i + \log q_{ij}) = \\ &= \sum_{i=1}^m p_i \log p_i \sum_{j=1}^n q_{ij} + \sum_{i=1}^m p_i \sum_{j=1}^n q_{ij} \log q_{ij} \end{aligned}$$

Vsota $\sum_j q_{ij}$ je za vsak i enaka 1, vsoto $-\sum_j q_{ij} \log q_{ij}$ pa lahko smatramo za pogojno entropijo $H(B/A_i)$ sheme B pri pogoju, da se je zgodil v shemi A dogodek A_i . Tako je

$$H(AB) = H(A) + \sum_{i=1}^m p_i H(B/A_i) \quad (16)$$

Pogojna entropija $H(B/A_i)$ je slučajna spremenljivka v shemi A , saj vemo, katerih vrednosti je zmožna in s kakšno verjetnostjo. Izraz

$$\sum_{i=1}^m p_i H(B/A_i)$$

je očitno srednja vrednost te slučajne spremenljivke. Imenovali ga bomo pogojna entropija sheme B glede na shemo A in označili z znakom $H(B/A)$. Tako dobi relacija (16) dokončno obliko

$$H(AB) = H(A) + H(B/A) \quad (17)$$

Če sta shemi A in B med seboj neodvisni, je $H(B/A) = H(B)$; v tem primeru je enačba (17) identična s (15). Vselej pa je

$$H(B/A) \leq H(B) \quad (18)$$

Relacija (18) se dokaže na podoben način kot (14), njena utemeljenost pa je očitna: Nedoločenost poskusa B se prav gotovo ne poveča, če pred njim napravimo poskus A .

Preostane nam še vprašanje, ali razen funkcije (13) še kakšna druga funkcija zadošča zahtevam (7), (8), (14) in (17). Izkaže se, da ima vsaka funkcija z zahtevanimi lastnostmi obliko

$$H(A) = -C \sum_{i=1}^n p_i \log p_i$$

kjer je C pozitivna konstanta.

2. Informacija

Napravimo poskus A , katerega izid ni vnaprej gotov! Shema A je imela pred poskusom neko nedoločenost, po poskusu pa nedoločenosti ni več, ker vemo, kateri izmed možnih dogodkov se je v resnici zgodil. Torej smo z realizacijo sheme A dobili o tej shemi neko informacijo. Ker smo uvedli mero za nedoločenost sheme, seveda lahko merimo tudi to informacijo. Označimo mero za informacijo z znakom $I(A)$ in jo na kratko imenujmo kar informacija! Očitno je količina $I(A)$ tem večja, čim bolj nedoločena je bila shema A pred poskusom, to se pravi, čim večja je entropija $H(A)$. Informacija $I(A)$ mora biti potem-takem strogo naraščajoča funkcija entropije. Najpreprosteje je, če vzamemo, da sta obe količini med seboj proporcionalni:

$$I(A) = C \cdot H(A) \quad (19)$$

Ta dogovor je tudi najustreznejši: Z realizacijo produkta neodvisnih shem A in B gotovo dobimo prav toliko informacije, kot če napravimo poskusa A in B vsakega posebej. Torej mora biti

$$I(AB) = I(A) + I(B)$$

Tej zahtevi pa dogovor (19) res zadošča, saj je

$$I(AB) = C \cdot H(AB) = C [H(A) + H(B)] = C \cdot H(A) + C \cdot H(B) = I(A) + I(B)$$

Faktor C v definiciji (19) je odvisen od tega, kakšno enoto izberemo za informacijo. Če se domenimo, da bomo merili informacijo v isti enoti kot entropijo, je $C = 1$, informacija, ki jo dobimo z realizacijo sheme A , pa je enaka entropiji sheme.

Zdaj si pa vzemimo shemi A in B ! Shema B ima nedoločenost $H(B)$. Če pred poskusom B napravimo še poskus A , je zaradi relacije (18) $H(B/A) \leq H(B)$. V skrajnem primeru je poskus B povsem določen z izidom poskusa A in je zato $H(B/A) = 0$. Vso možno informacijo o shemi B dobimo zdaj že s poskusom A , obenem pa ima razlika $H(B) - H(B/A)$ največjo možno vrednost $H(B)$. V nasprotnem skrajnem primeru, ko sta shemi A in B med seboj neodvisni, pa se pogoji poskusa B ne spremenijo, če pred njim napravimo poskus A . O shemi B ne dobimo zdaj s poskusom A nobene informacije. Obenem pa je tu $H(B/A) = H(B)$ in zato $H(B) - H(B/A) = 0$. Tako vidimo, da je v shemi A tem več informacije o shemi B , čim večjo vrednost ima razlika

$$I(B/A) = H(B) - H(B/A) \quad (20)$$

Količino $I(B/A)$ imenujemo zato kar informacijo o shemi B v shemi A .

Zveza (20) med entropijo in informacijo nas spominja na odnos med potencialom in napetostjo. Potencial je funkcija kraja brez neposrednega fizikalnega pomena; pač pa ima fizikalni pomen razlika potencialov, torej napetost. Prav tako je entropija nekako od zunaj vnesena mera za nedoločenost sheme, njen pomen pa je prav v dejstvu, da lahko z njo po formuli (20) številsko izrazimo vpliv poskusa A na poskus B . Pojem informacije $I(B/A)$ je torej nekako aktivnejši od pojma entropije. Sicer pa tudi entropijo $H(B)$ lahko definiramo kot največjo informacijo, ki jo je mogoče dobiti o shemi B .

Oglejmo si še neko lastnost informacije $I(B/A)$! Iz relacije

$$H(AB) = H(A) + H(B/A) = H(B) + H(A/B)$$

sledi, da je

$$H(B) - H(B/A) = H(A) - H(A/B)$$

Izraz na levi strani zadnje enačbe je informacija o shemi B v shemi A , izraz na desni strani pa je informacija o shemi A v shemi B . Zato lahko pišemo

$$I(B/A) = I(A/B) \quad (21)$$

Povezanost med dvema shemama je torej simetrična: V vsaki izmed njih je enako mnogo informacije o drugi.

Pojem informacije nam bo postal bolj domač, ko si ogledamo tale primer:

Na kupu je 40 kovancev enake vrednosti. Med temi je en kovanec ponarejen, in sicer tako dobro, da se razlikuje od pravih le po nekoliko manjši teži. Ponarejeni kovanec torej lahko poiščemo s tehtanjem. Najpametneje je, če pri tem uporabljamo enakoravno tehtnico, ker na njej ne potrebujemo uteži, ampak lahko primerjamo kar kovance med seboj. Ugotoviti je treba, koliko tehtanj je na taki tehtnici najmanj potrebnih, da v vsakem primeru ugotovimo, kateri kovanec je ponarejen. »V vsakem primeru« pravimo zato, ker je v najboljšem primeru možno, da ugotovimo kovanec že s prvim tehtanjem: Izberemo si n. pr. dva kovanca in ju primerjamo na tehtnici; če tehtnica ni v ravnovesju, je gotovo lažji kovanec ponarejen.

Skraja moramo vzeti v poštev, da je vsak izmed 40 kovancev lahko ponarejen. Opraviti imamo tako s 40 enako verjetnimi dogodki, ki naj tvorijo shemo B . Entropija te sheme je $H(B) = \log 40$. To nedoločenost je treba odpraviti z zaporednimi tehtanji. Poljubno tehtanje imenujmo poskus A_1 . Pri tem

poskusu so možni trije izidi: ali je težja desna stran tehtnice ali leva ali pa sta obe strani v ravnovesju. Zato je po formuli (14) $H(A_i) \leq \log 3$. Vzemimo, da smo izvršili k tehtanj! Za vsako izmed njih je $H(A_i) \leq \log 3$ ($i = 1, 2, \dots, k$). Če upoštevamo še formuli (17) in (18), ugotovimo, da velja za entropijo sestavljenega poskusa $A_1 A_2 \dots A_k$ neenačba

$$H(A_1 A_2 \dots A_k) \leq k \log 3$$

Da bo naša naloga rešena, moramo s tehtanji dobiti vsaj toliko informacije, kolikor znaša nedoločenost sheme B . Torej mora biti

$$H(B) \leq H(A_1 A_2 \dots A_k)$$

Če vstavimo v to relacijo rezultate, ki smo jih ugotovili zgoraj, dobimo, da mora biti $\log 40 \leq k \log 3$ oziroma

$$k \geq \frac{\log 40}{\log 3} \approx 3,36$$

Ker je k celo število, moramo potemtakem tehtati najmanj štirikrat.

Pojma entropije in informacije pa nam ne pomagata le do tega rezultata, ampak nam tudi kažeta, kako se je treba naloge lotiti, da jo s štirimi tehtanji v resnici rešimo.

Vsako tehtanje mora biti tako, da dobimo iz njega največjo možno informacijo. Iz te zahteve najprej sledi, da moramo na tehtnici zmeraj primerjati enako število kovancev. V nasprotnem primeru je izid že vnaprej gotov in je tehtanje povsem odveč. Ker je entropija strogo naraščajoča funkcija števila dogodkov, moramo tehtanje izvršiti tako, da bodo vselej možni vsi trije izidi. To pomeni, da je treba kovance, ki pridejo v poštev, vselej razdeliti v tri skupine: Če bi jih razdelili le v dve in ti dve skupini primerjali ta tehtnici, bi bilo namreč ravnovesje izključeno. Vse tri skupine morajo imeti zaradi lastnosti (14) kar najbolj enako število kovancev.

Zdaj je pot razumljiva brez razlage: Najprej razdelimo kovance v skupine po 13, 13 in 14 novcev. Obe prvi skupini primerjamo na tehtnici, zadnja pa ostane. Če je tehtnica v ravnovesju, je ponarejeni novc v skupini s 14 kovanci, sicer pa v eni izmed prvih dveh. Vzemimo slabši primer, da je ponarejeni kovanec v večji skupini! Teh 14 novcev razdelimo v skupine po 5, 5 in 4 kovanice. Spet vzemimo slabšo možnost, da je ponarejeni kovanec v skupini s 5 novci! To skupino razdelimo na 2, 2 in 1 novc in naj bo ponarejenec spet v večji skupini. S četrtnim tehtanjem pa potem res ugotovimo, kateri izmed prizadetih dveh kovancev je ponarejen.

3. Entropija markovskih verig

Za uporabo pri vprašanih telekomunikacij, ob katerih je teorija informacij dejansko nastala, doslej opisana sredstva še ne zadoščajo. Vsi dosedanji pojmi so se nanašali na poskus, torej na neki trenuten akt. Dogajanja pri prenosu obvestil pa potekajo v času in se s časom spreminja tudi njihov verjetnostni značaj, skratka, ta dogajanja so verjetnostni ali — tako jih tudi imenujemo — stohastični procesi. Zato je nujno, da razširimo osnovne pojme teorije informacij tudi na te objekte.

Najpreprostejši verjetnostni proces je homogena markovska veriga.⁴ Ta shema je zaporedje poskusov s končnim številom možnih izidov, pri čemer so verjetnosti izidov v poskusu z indeksom k odvisne od tega in samo od tega, kakšen je bil izid poskusa z indeksom $k-1$ ($k = 2, 3, 4, \dots$).

Definirajmo zdaj entropijo homogene markovske verige! Veriga naj ima stanja $A_1, A_2, \dots, A_n$, verjetnosti teh stanj naj bodo $p_1, p_2, \dots, p_n$, prehod iz stanja v stanje pa naj karakterizira matrika prehodnih verjetnosti p_{ij} ($i, j = 1, 2, \dots, n$)! Matrika prehodnih verjetnosti je pri homogeni verigi seveda konstantna. Med verjetnostmi p_i in prehodnimi verjetnostmi p_{ij} velja zveza

$$p_j = \sum_{i=1}^n p_i p_{ij} \quad (22)$$

Če je veriga v stanju A_i , tvorijo njeni prehodi v stanja A_j ($j = 1, 2, \dots, n$) končno shemo

$$\begin{pmatrix} A_1 & A_2 & \dots & A_n \\ p_{i1} & p_{i2} & \dots & p_{in} \end{pmatrix}$$

Entropija te sheme

$$H_i = - \sum_{j=1}^n p_{ij} \log p_{ij}$$

je odvisna od indeksa i in jo lahko vzamemo za mero informacije, ki jo dobimo, če gremo v markovski verigi od stanja A_i za en korak naprej. Količina H_i , ki je popolnoma analogna entropiji posameznega dogodka v končni verjetnostni shemi, je slučajna spremenljivka na množici možnih stanj dane markovske verige. Srednjo vrednost te slučajne spremenljivke:

$$H = - \sum_{i=1}^n p_i H_i = - \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n p_i p_{ij} \log p_{ij} \quad (23)$$

imenujemo entropijo markovske verige. Količina H karakterizira verigo v celoti in jo lahko smatramo za srednjo vrednost informacije, ki jo dobimo, če gremo v verigi za en korak naprej. Iz definicije (23) vidimo, da je entropijo H mogoče izračunati, če so znane verjetnosti p_i in prehodne verjetnosti p_{ij} .

Markovske verige, s katerimi ima opraviti teorija informacij, niso le homogene, ampak zadoščajo poleg tega še Bernoullijevemu zakonu velikih števil: Če je število s zaporednih prehodov v verigi dovolj veliko, je verjetnost, da se relativna frekvenca m_i/s dogodka A_i poljubno malo razlikuje od njegove verjetnosti p_i , poljubno blizu 1. Pri poljubnem $\varepsilon > 0$ in $\delta > 0$ velja torej pri dovolj velikem s neenačba

$$P \{ |(m_i/s) - p_i| > \delta \} < \varepsilon$$

Verigo s to lastnostjo imenujemo ergodijsko.

Množico s zaporednih prehodov v verigi lahko pišemo v obliki niza

$$C = A_{i_1} \cdot A_{i_2} \cdot \dots \cdot A_{i_s}$$

kjer so $i_1, i_2, \dots, i_s$ števila iz zaporedja $1, 2, \dots, n$. Verjetnost takega niza je

$$p(C) = p_{i_1} \cdot p_{i_1 i_2} \cdot p_{i_2 i_3} \cdot \dots \cdot p_{i_{s-1} i_s}$$

Pri homogenih verigah verjetnost $p(C)$ ni odvisna od tega, kje v verigi se niz nahaja.

⁴ Glej članek »Verige in procesi Markova«, Obzornik VI/2!

4. Prenos sporočil s telegrafom

Omenili smo že, da je nastala teorija informacij ob problemih telekomunikacij. V tej točki bomo na kratko očrtili najpreprostejši problem te vrste — vprašanje kodiranja.

Telekomunikacijski sistem je sestavljen v bistvu iz petih delov: izvora informacij, oddajnika, kanala, sprejemnika in naslova. V izvoru informacij nastaja sporočilo, ki naj ga sistem posreduje naslovu. Sporočilo je lahko zaporedje črk (pri telegrafu), funkcija časa (pri telefonu in radiu), funkcija kraja in časa (pri črno-beli televiziji), lahko pa je še bolj komplicirano. Oddajnik spremeni sporočilo v primeren signal. (Pri telegrafu je signal zaporedje krajših in daljših tokovnih sunkov, pri telefonu električni tok spremenljive jakosti, pri radiu pa visokofrekventno elektromagnetno valovanje, modulirano z zvočno frekvenco.) Kanal je sredstvo, po katerem potuje signal od oddajnika do sprejemnika. (Pri telegrafu in telefonu je kanal žica, pri brezžičnem prenosu pa kar prostor.) Sprejemnik spremeni signal spet v sporočilo, naslov pa je oseba ali reč, ki ji je sporočilo namenjeno.

Od vseh telekomunikacij je edino pri telegrafu sporočilo diskretna množica. Z našimi sredstvi so nam torej dostopni le problemi pri telegrafskem prenosu.

Pri telegrafskem prenosu je sporočilo pisan tekst, recimo v slovenskem jeziku. V njem nastopa 25 črk slovenske abecede in presledek med besedami, torej v celoti 26 znakov. V verjetnostnem smislu je tekst zaporedje poskusov. V vsakem od njih lahko nastopi eden izmed 26 dogodkov: ali ena od črk $a, b, c, \dots, \dot{z}$ ali presledek. Ti dogodki niso vsi enako verjetni. Znano je, da nastopa v slovenskem besedilu črka o zelo pogosto, črka f pa prav poredko. Verjetnosti vseh znakov lahko določimo tako, da ugotovimo relativne frekvence posameznih črk in presledka v kakem dovolj dolgem besedilu. Toda z relativnimi frekvencami vseh znakov verjetnostni značaj teksta še ni dovolj natančno popisan. Očitno je namreč verjetnost, da na določenem mestu v besedilu stoji določena črka, odvisna od tega, katera črka stoji neposredno pred tem mestom. Tako na primer za črko b precej pogosto sledi črka r , kombinacija bp pa je po glasovnih zakonih slovenskega jezika nemogoča. Verjetnost, da za črko b stoji črka p , je torej enaka nič, čeprav je verjetnost, da je črka p kjer koli v tekstu, precej velika. Na verjetnost, da stoji določena črka na določenem mestu v tekstu, vplivajo tudi prejšnje črke in ne le zadnja pred določenim mestom. (Ta vpliv izvira pri smiselnem besedilu iz vsebine teksta po slovničnih zakonih jezika.) V prvem približku lahko vpliv prejšnjih črk zanemarimo in smatramo tekst za markovsko verigo. Ta veriga je homogena in ergodijska.⁵

Telegrafski oddajnik spremeni besedilo v zaporedje signalov, običajno daljših in krajših tokovnih sunkov ter presledkov med njimi. Teh »elementarnih signalov« je manj kot različnih znakov v tekstu. Vsakemu znaku v tekstu ustreza zato neka kombinacija elementarnih signalov. Predpis, po katerem prirejamo znakom v tekstu kombinacije elementarnih signalov, se imenuje ključ ali koda, prirejanje pa kodiranje. Prvotnemu besedilu ustreza tako kodiran tekst, dolžina katerega je v precejšnji meri odvisna od načina kodiranja.

⁵ Shannonova poenostavitev, da je tekst markovska veriga, na srečo ni prehuda, ker ni bistvena. Poznejše preiskave (McMillan, Feinstein, Hinčin) so namreč pokazale, da veljajo Shannonovi rezultati za vsak ergodijski tekst. Ergodijsko pa je besedilo v resnici in ne le približno. Dokazovanje je v splošnem primeru seveda veliko težavnejše kot pri markovski verigi.

Vsekakor je z gospodarskega gledišča pomembno, da je kodirani tekst čim krajši. Očitno je namreč, da ima kanal omejeno propustnost, to se pravi, v časovni enoti more prevesti le določeno število elementarnih signalov. Propustnost kanala se še zmanjša, če prenos ovirajo motnje. Tako pri določenem načinu kodiranja ni mogoče poljubno skrajšati čas za prenos danega besedila. Uporaba telegrafске linije pa je draga in v danih okoliščinah tudi časovno omejena. Zato je vprašanje po najugodnejšem ključu res gospodarsko zanimivo.

Vprašanje je pravzaprav dvojno: 1. kako lahko s kodiranjem skrajšamo tekst; 2. kolikšno je skrajšanje v najugodnejšem primeru.

Vzemimo najpreprostejši primer, da ima kodirano besedilo enako abecedo kot prvotno, to se pravi, v obeh besedilih je enako mnogo različnih znakov oziroma kombinacij znakov. Potem je odgovor na prvi del vprašanja vsaj načelno zelo preprost: Skrajšanje dosežemo tako, da kodiramo znake, ki nastopajo najpogosteje, čim krajše, daljše kombinacije v ključu pa prihranimo za znake, ki imajo majhno relativno frekvenco.

Preden odgovorimo na drugi del vprašanja, moramo uvesti količine, ki nam skrajšanje merijo. Vsakemu nizu C z s znaki v danem tekstu je prirejena določena verjetnost $p(C)$ in dolžina $\sigma(C)$ ustreznega niza v kodiranem tekstu. Razmerje $\sigma(C)/s$ lahko smatramo za koeficient skrajšanja danega niza C . Srednja vrednost tega razmerja

$$\mu_s = s^{-1} \sum_c p(C) \sigma(C)$$

(sumirano po vseh nizih z dolžino s) je srednje skrajšanje nizov z dolžino s . Količino

$$\mu = \limsup \mu_s, \quad s \rightarrow \infty$$

imenujemo koeficient skrajšanja danega teksta pri danem ključu in jo lahko vzamemo za mero skrajšanja teksta pri danem ključu. Zanima nas, kakšna je najmanjša vrednost količine μ , ki jo je mogoče doseči s primerno izbranim ključem. Odgovor na to vprašanje nam daje naslednji izrek:

Če je entropija danega teksta enaka H in je m število različnih znakov, ki v tekstu nastopajo, je natančna spodnja meja koeficienta skrajšanja pri vseh mogočih ključih enaka $H/\log m$.

Ker je $\log m$ največja možna entropija pri m različnih znakih, imenujemo količino $H/\log m$ relativno entropijo danega teksta. Kot vidimo, je relativna entropija določena z entropijo teksta in številom različnih znakov, ki v njem nastopajo, ni pa odvisna od podrobne statistične strukture besedila.

Seveda je še vprašanje, kako naj dejansko sestavimo ključ, za katerega je koeficient skrajšanja enak relativni entropiji teksta. Metodo sta izdelala 1949 Shannon in Fano. Prostor nam žal ne dovoljuje, da bi jo opisali.

Literatura:

1. C. E. Shannon — W. Weaver, The mathematical theory of communication, Urbana 1949.
2. A. J. Hinčin, Ponjatie entropii v teorii verojatnostej, Uspehi matematičeskikh nauk VIII/3, Moskva 1953.
3. A. J. Hinčin, Ob osnovnyh teoreмах teorii informacii, Uspehi matematičeskikh nauk XI/1, Moskva 1956.
4. A. M. Jaglom — I. M. Jaglom, Verojatnost i informacija, Moskva 1957.

O METODI NAJMANJŠIH KVADRATOV

MILAN ČOPIČ

(Institut Jožef Stefan, Ljubljana)

Pri obdelavi merskih rezultatov naletimo pogosto na nalogo, da je treba iz množice enačb izračunati neznanke, ki jih je manj kot enačb. Enačbam sploh ni mogoče natančno ustreči; treba je poiskati tiste vrednosti neznank, ki se enačbam »najbolje«¹ prilegajo. Besedica »najbolje«¹ pa je sama po sebi zelo nedoločen poj. Šele ko imamo kriterij, na podlagi katerega lahko ugotovimo, katera izmed dveh vrednosti je boljša, lahko izdelamo metodo, s katero rešimo omenjeni problem. Ena izmed takih metod je metoda najmanjših kvadratov. Oglejmo si kriterije, na katerih ta metoda sloni!

Primer: Da določimo prožnostni modul žice, merimo podaljške $s_1, s_2, s_3, \dots, s_n$ pri obremenitvah $F_1, F_2, F_3, \dots, F_n$. Hookov zakon pravi, da je $F = ks$. Če bi to točno veljalo in če bi bile meritve absolutno natančne, bi za vsak par F_i, s_i res veljalo $F_i = ks_i$. Koeficient k , iz katerega potem računamo prožnostni modul, bi lahko izračunali iz katerega koli para. Toda zaradi neizogibnih naključnih napak da v resnici vsak par malo drugačno vrednost k . Katera je »najboljša«²? Drugače povedano: kateri k je takšen, da bo enačbam $F_i = ks_i$ »najbolje«³ ustrezno, čeprav ne čisto natančno? Tu imamo n enačb ($i = 1, 2, 3, \dots, n$), toda eno samo neznanko (k).

Prevedimo vprašanje na geometrijski jezik!

Vsaka meritev da po eno točko (F_i, s_i). Katera premica te točke »najbolje«⁴ povezuje? Za tistega, ki je navajen eksaktne geometrije, se vprašanje čudno sliši. Tam je namreč premica določena že z dvema točkama. V eksperimentalnih vedah pa sta običajno dve točki premalo; premica je zadosti natančno določena šele z nizom točk.

Še ena opomba je potrebna, preden poskusimo rešiti ta problem z risanjem. Ker je zelo težko dovolj natančno izmeriti dolžino neobremenjene žice in nato določiti absolutne vrednosti podaljškov s_i in ker nimamo nobene pravice izbrati eno izmed meritev kot izhodišče, moramo v splošnem pisati našo enačbo $F_i = k(z_i - z_0)$, kjer je z_i kar odčitek na noniju pri obremenitvi F_i , z_0 pa moramo šele določiti iz samih meritev. V diagram rišemo torej koordinate z_i v odvisnosti od obremenitev F_i . Brž ko imamo diagram narisane, nam roka že seže po trikotniku, s katerim potegnemo »na oko«⁵ premico skozi točke (F_i, z_i). Kriterij, ki ga pri tem zavestno ali podzavestno uporabimo, je zahteva, da se točke »čim bolje«⁶ prilegajo izbrani premici. Toda vprašanje je, ali smo s takim približnim postopkom res izkoristili vso natančnost meritev, vse delo, ki je bilo v meritve vloženo. Narišimo diagram v večjem merilu in uporabimo naslednji postopek! Vse točke razdelimo v dve skupini: v prvi so točke, katerih z_i je manjši kot povprečni $\langle z \rangle$, ki je enak $(1/n) \sum_i z_i$, v drugi pa so točke, katerih z_i je večji od $\langle z \rangle$. Poiščimo težišči obeh skupin točk ter potegnimo premico skozi obe težišči! Strmina tako določene premice je neodvisna od »očesne«⁷ spretnosti eksperimentatorja. Pri tem pa je še zagotovljeno, da je vsota odmikov točk od premice kar enaka nič, ako štejemo odmike v eno stran pozitivno, v drugo pa negativno. Toda ta premica ni edina, pri kateri je ta pogoj izpolnjen. — Ako hočemo še upoštevati, da so za določitev strmine skrajne točke niza važnejše kot točke v sredini, lahko to dosežemo s tem, da pri iskanju težišč obeh skupin pripišemo vsaki točki težo sorazmerno razdalji $|z_i - \langle z \rangle|$. Premica skozi na ta način določeni težišči, ki jo nato še paralelno premaknemo tako, da gre skozi skupno težišče vseh točk (F_i, z_i), ima to lastnost, da je vsota kvadra-

tov razdalj posameznih točk od premice najmanjša. Taka rešitev je le ena! Zadovoljili smo torej nekemu ekstremalnemu pogoju; zato smemo tako rešitev imenovati »najboljšo«. Strmina premice določa k , odsek na ordinatni osi pa z_0 .

Našli smo torej tri postopke, kako z risanjem določimo iskane vrednosti k in z_0 . Prvi postopek je najenostavnejši in se zato največkrat uporablja, zadnji postopek pa praktično nikoli, ker je preneroden za risanje. Poskusimo izraziti kriterije, kdaj se točke »najbolje« prilegajo premici, tako da lahko iz njih izpeljemo metode analitično. Ako zahtevamo, da mora biti algebraična vsota odmikov najmanjša, ne dobimo enolične rešitve, ker lahko vedno izberemo neskončno premic, pri katerih je taka vsota enaka nič. Uporabna bi bila zahteva, da mora biti vsota absolutnih vrednosti odmikov najmanjša. Toda tudi ta metoda nam ne da vedno enolične rešitve in je poleg tega še zelo nerodna v analitični obliki. Veliko lažje računamo s kvadrati razlik; zato se je v numeričnem računu udomačila le metoda najmanjših kvadratov, ki pa je, kot smo videli, za risanje neprimerna.

Preden preidemo na njeno obravnavanje, pogledjmo še nekaj primerov! Poiskati hočemo začetno aktivnost in razpolovni čas radioaktivnega izotopa, kateremu smo izmerili aktivnost v odvisnosti od časa, $A(t_i) = A_0 \exp(-\lambda t_i)$. Ako narišemo aktivnost A v odvisnosti od časa t na semilogaritemski papir, nam strmina premice omogoča, da izračunamo razpolovni čas, odsek na ordinati pa nam da začetno aktivnost. Teže rešimo grafično naslednji problem: nevtronski fluks φ eksponencialne kope smo izmerili v točkah z_i . Po teoriji mora veljati $\varphi(z_i) = A \sinh \beta(H - z_i)$. Iščemo β in H , toda ker ne poznamo A , imamo v resnici tri neznanke. Deloma si tudi tu lahko pomagamo s semilogaritemskim papirjem ali pa iščemo neznanke s sukcesivnimi aproksimacijami, toda s tem nam je že šla enostavnost grafične metode po vodi.

Risanje nas hitro privede do cilja, kadar lahko funkcijsko odvisnost z uporabo posebnega papirja prevedemo v premico. V praksi je to zelo pogosto. Ker so običajno grafične metode tudi dovolj natančne, se zato največkrat uporabljajo pri obdelavi eksperimentalnih rezultatov. Še eno dobro lastnost risanja je vredno omeniti: očitne napake veliko hitreje odkrijemo in odpravimo kot pri kateri koli drugi metodi. Pomanjkljivost risanja pa je subjektivnost, ker pač vsi ljudje niso enako kritični. Težnja po objektivnosti, predvsem pa možnost reševanja sistemov enačb z modernimi računskimi stroji, daje danes prednost numeričnim metodam, od katerih je — zaradi enostavnosti — najvažnejša metoda najmanjših kvadratov.

Metoda najmanjših kvadratov je že zelo stara, saj izvira od Legendra, Gaussa in Laplacea. Ti so postavili tri kriterije, iz katerih je možno izpeljati metodo najmanjših kvadratov. V zadnjih stopetdesetih letih je bilo o metodi mnogo napisanega, toda kriteriji so ostali isti. Uporabnost kriterijev in metode same bomo najlažje spoznali, ako jih obravnavamo kar po vrsti. Najenostavneje je, da povemo kar naravnost, tako kot zgoraj in tako kot je to storil Legendre:

I. Najboljše vrednosti neznank so tiste, za katere je vsota kvadratov razlik najmanjša.

Uporabimo ta kriterij na našem primeru prožnostnega modula. Kriterij torej zahteva

$$\sum_{i=1}^n (F_i - kz_i + kz_0)^2 = \min. (k, z_0) \quad (1)$$

kjer je z indeksom (k, z_0) označeno, da iščemo minimum izraza na levi strani z ozirom na spremenljivki k in z_0 . Ako odvajamo (1) parcialno po k in po kz_0

ter postavimo oba odvoda enaka nič, smo s tem dobili dva pogoja, iz katerih določimo k in z_0 , ki zadoščata zgornji zahtevi. Obe linearni nehomogeni enačbi prav lahko rešimo in dobimo za k , ki nas predvsem zanima,

$$k = (n \sum_i z_i F_i - \sum_i z_i \sum_j F_j) / [n \sum_i z_i^2 - (\sum_i z_i)^2] \quad (2)$$

Z majhnim pregrupiranjem vsot lahko zapišemo rezultat v nekoliko bolj prikladni obliki

$$k = \sum_i F_i (z_i - \langle z \rangle) / \sum_i z_i (z_i - \langle z \rangle); \quad \langle z \rangle = (1/n) \sum_i z_i \quad (2')$$

iz katere takoj sledi geometrična konstrukcija metode najmanjših kvadratov, ki smo jo omenili zgoraj.

Že enostavno razmišljanje pa nam pokaže pomanjkljivosti kriterija I. Dokler ne vemo ničesar o zanesljivosti posameznih meritev ali pa, ako smo prepričani, da so vse meritve enakovredne, ne moremo postopku prav nič očitati. Toda vzemimo, da je vrednost z_j iz kakršnega koli vzroka nezanesljiva. V enačbi (1) in torej tudi v (2) pa smo vse z_i enako upoštevali. Ugodno bi bilo vpeljati dodatne faktorje — »uteži«, ki bi upoštevali zanesljivost posameznih meritev. Še bolj postane ta problem očiten pri našem drugem primeru, določanju razpolovnega časa iz merjene aktivnosti. Ako štejemo sunke vedno v enakem intervalu Δt , bo število sunkov padalo s časom približno eksponentialno. Zaradi statističnih fluktuacij, ki so sorazmerne kvadratnemu korenu iz števila sunkov, bodo relativne napake, posebno če še upoštevamo ozadje, s časom močno naraščale. Tako postanejo meritve po preteku nekaj razpolovnih časov lahko popolnoma nezanesljive. Najti moramo kriterij, pri katerem lahko upoštevamo, kako zanesljive so posamezne meritve. Že iz primera samega je razvidno, da imamo tu opravka s statističnimi količinami, zato moramo najprej navesti nekaj osnovnih pojmov iz verjetnostnega računa.

Ako merimo pod vedno enakimi pogoji neko količino y , bomo pri skoraj vsaki meritvi dobili drugo vrednost. Obstaja torej skupnost vrednosti $\{y\}$ in meritev pomeni izbiro nekega y iz te skupnosti. Ako našo meritev zadostikrat ponovimo, lahko določimo verjetnostno gostoto $p(y)$ tako, da predstavlja $p(y) dy$ verjetnost, da bo rezultat kake meritve ležal med y in $y + dy$. Bolj kot »najverjetnejša« vrednost y_p , t. j. vrednost y , pri kateri ima gostota verjetnosti absolutni maksimum, nas zanimata povprečna vrednost $\langle y \rangle$ in povprečni kvadrat $\langle y^2 \rangle$, ki sta takole definirana:

$$\langle y \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} y p(y) dy \quad (3)$$

in

$$\langle y^2 \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} y^2 p(y) dy \quad (4)$$

V splošnem najverjetnejša vrednost y_p ni enaka povprečni vrednosti $\langle y \rangle$. Izjemoma se pa lahko zgodi, da je $y_p = \langle y \rangle$; tako imamo n. pr. pri Gaussovi porazdelitvi

$$p(y) dy = (1/\sqrt{2\pi}\sigma) \exp [-(y - y_p)^2/2\sigma^2] dy \quad (5)$$

Definirajmo še povprečni kvadrat odmika σ^2

$$\sigma^2 = \langle (y - \langle y \rangle)^2 \rangle = \langle y^2 \rangle - \langle y \rangle^2 \quad (6)$$

kar ustreza Steinerjevemu stavku v mehaniki. Količino σ imenujemo tudi standardni odmik. Gaussovo porazdelitev smo že zapisali tako, da nastopa σ kot parameter porazdelitve.

Sedaj se lahko vrnemo k našemu drugemu problemu. Ako je število sunkov dovolj veliko, tedaj je verjetnost, da dobimo pri neki meritvi N sunkov, podana približno z Gaussovo porazdelitvijo. Vnaprej pa ne poznamo najverjetnejšega števila sunkov N_p ; pomagamo si tako, da gledamo na Gaussovo porazdelitev kot na porazdelitev odmkov ΔN od neke, sicer nepoznane vrednosti N_p . Ker so naše meritve aktivnosti med seboj neodvisne — to, da merimo aktivnost istega vzorca, medsebojne neodvisnosti meritev prav nič ne spremeni — je verjetnost, da dobimo pri n meritvah $N_1, N_2, N_3, \dots, N_n$ sunkov, enaka kar produktu verjetnosti $p_i(N_i) dN_i$, torej sorazmerna $\exp(-\sum_i \Delta N_i^2 / 2 \sigma_i^2)$. Verjetnost bo največja, kadar bo vsota kvadratov razmerij odmika proti standardnemu odkliku najmanjša. Najti moramo še, kakšni so odmiki. V toku naših meritev pada aktivnost s časom eksponentialno, $N_p = N_0 \exp(-\lambda t)$; ker merimo v enakih časih Δt , je $A = aN_p$, pri čemer smo predpostavili, da je Δt majhen proti razpolovnemu času. Poleg tega vemo, da je povprečen kvadrat odmika σ_i^2 kar enak N_i . Sedaj pa že lahko izračunamo, kdaj bo verjetnost največja: poiskati moramo N_0 in λ tako, da bo vsota $\sum_i (N_i - N_{pi})^2 / N_i$ najmanjša, kjer je $N_{pi} = N_0 \exp(-\lambda t_i)$.

Gornji postopek lahko posplošimo. Kriterij se sedaj glasi:

II. Najboljše vrednosti neznank so tiste, ki so najbolj verjetne.

To je Gaussov »kriterij največje verjetnosti«. Da pa smo iz njega lahko izpeljali metodo najmanjših kvadratov, je bilo potrebno: Prvič, da smo že vnaprej nekaj vedeli o verjetnosti, da nam bo neka meritev dala dani rezultat, ali vsaj, da smo poznali porazdelitev odmkov od najverjetnejše vrednosti; drugič, da so meritve med seboj stohastično neodvisne, kar po domače pomeni, da rezultat ene meritve prav nič ne vpliva na druge meritve, zaradi česar je verjetnost, da bomo pri n meritvah dobili dane rezultate, kar enaka produktu verjetnosti posameznih meritev; in tretjič, da so porazdelitve odmkov od najverjetnejše vrednosti Gaussove. Gornje predpostavke so zelo zahtevne, posebno tretja vzbuja resne pomisleke proti splošnosti metode najmanjših kvadratov. Tako je imela — in še ima — metoda najmanjših kvadratov mnogo nasprotnikov, ki so se najraje zataknili v postulat o aritmetični sredini, iz katerega je Gauss izpeljal porazdelitev (5) ter preko nje metodo najmanjših kvadratov.² Postulat pravi: Ako je dano kakršno koli število enako dobrih, neposrednih meritev $M, M', M'', \dots$ neke neznanke x , tedaj je najverjetnejša vrednost njihova aritmetična sredina.

Postulat seveda ni splošen, ker vnaprej ne moremo trditi, da je edino aritmetična sredina najboljša. V določenih primerih moramo uporabiti geometrično sredino; ako meritve niso enakovredne, pa ni uporabna ne ena ne druga. Poleg tega mnogokrat sploh ne moremo govoriti o najverjetnejši vrednosti, ker je bodisi ne poznamo ali pa je sploh ne moremo definirati pri nekaterih porazdelitvah (n. pr. $p(\Delta y) = 1/2a$ za $-a \leq \Delta y \leq a$, drugje je pa nič). Tudi zahteva po stohastični neodvisnosti meritev nam je včasih v napoto in bi se je radi iznebili. Prva zahteva, da moramo poznati porazdelitev odstopanj, pa je najhujša, ker zahtevamo veliko več, kot v resnici potrebujemo. Potrebna nam je le neka ocena napak posameznih meritev in na koncu bi seveda tudi radi vedeli, kakšne so napake neznank, ki smo jih dobili z metodo najmanjših kva-

dratov. Ker vedno stremimo za tem, da so napake čim manjše, postavimo kriterij takole:

III. Najboljše vrednosti neznank so tiste, katerih napake so najmanjše.

Ta kriterij je uporabil Laplace in kasneje tudi Gauss. Iz kriterija III je mogoče izpeljati metodo najmanjših kvadratov pri zelo minimalnih predpostavkah. Zedinimo se, da je standardni odmik naše merilo za velikost napake! Ker hočemo obravnavati napake, moramo torej poznati standardne odmike. Zahtevamo naslednje: Prvič, porazdelitve odmikov so take, da obstajajo za vse spremenljivke njihove povprečne vrednosti in njihovi povprečni kvadrati, in drugič, da poznamo ali da lahko vsaj ocenimo povprečne produkte odmikov $\langle \Delta y_i \Delta y_k \rangle$. Prva zahteva, ki je enakovredna zahtevi, da sta integrala v enačbah (3) in (4) končna, je potrebna za obstoj standardnega odmika, ki je definiran z enačbo (6). Druga zahteva je potrebna za to, da lahko izračunamo napake iskanih neznank. Zanimiva je v toliko, da dopušča končne povprečne produkte odmikov $\langle \Delta y_i \Delta y_k \rangle$ in ne samo povprečne kvadrate $\sigma_i^2 = \langle \Delta y_i^2 \rangle$, kar pomeni, da so spremenljivke y_i in y_k lahko stohastično odvisne. Verjetnost, da dobimo v seriji n meritev rezultate $y_1, y_2, y_3, \dots, y_n$, sedaj v splošnem ni več produkt posameznih verjetnosti $p_i(y_i) dy$, ker lahko nastopajo v njej tudi faktorji, odvisni istočasno od spremenljivk y_i in y_k . Preden pa preidemo na izvajanje te — posplošene — metode najmanjših kvadratov, izračunajmo neznanke in predvsem njihove standardne odmike po metodi, ki sledi iz kriterija II, tako da bomo na koncu lahko primerjali obe metodi.

Ker nas zanima metoda sama, lahko za trenutek pozabimo na njeno konkretno fizikalno vsebino. Izrazimo problem kar za splošni primer! Imamo množico n vrednosti y_i . Najti moramo q neznank α , tako, da bo kar »najbolje« zadoščeno sistemu

$$y_i = f_i(\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_q); \quad i = 1, 2, \dots, n \quad (7)$$

pri čemer je $n > q$. Da lahko uporabimo kriterij II, moramo poznati verjetnost, da dobimo pri izbiri n vrednosti prav $y_1, y_2, \dots, y_n$. Ker smo zahtevali, da so vsi y_i stohastično neodvisni in da so verjetnosti za nastop posameznih y_i podane z Gaussovo porazdelitvijo, je gostota verjetnosti enaka

$$p(y_1, y_2, \dots, y_n) = \prod_j (1/\sqrt{2\pi}\sigma_j) \exp[-\sum_i (y_i - y_{pi})^2/2\sigma_i^2] \quad (8)$$

Po kriteriju II so »najboljše« vrednosti neznank α , tiste, pri katerih je f_i enak y_{pi} , ker je po enačbi (7) to najverjetnejši f_i . Ako vstavimo sedaj v enačbo (8) izbrane vrednosti $y_1, y_2, \dots, y_n$ ter f_i namesto y_{pi} , postane gostota verjetnosti posredno funkcija neznank α . Verjetnost bo največja, kadar bo vsota v eksponentu najmanjša. Neznanke moramo torej izbrati tako, da bo

$$\sum_{i=1}^n [y_i - f_i(\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_q)]^2 \sigma_i^{-2} = \min. (\alpha) \quad (9)$$

Ker so naše funkcije f_i običajno dovolj pohlevne, ne bo težko najti ekstrem gornje vsote, ki je funkcija q spremenljivk α . Pojemovno pa je zanimiva geometrična interpretacija enačbe (9), ki nas bo kasneje tudi hitreje pripeljala do standardnih odmikov neznank α , kot če bi ubrali popolnoma formalno pot. Leva stran enačbe (9) je skalarni produkt v n dimenzionalnem prostoru. V tem prostoru določa vektor y , ki ima komponente y_i , točko P (slika 1). Razen tega

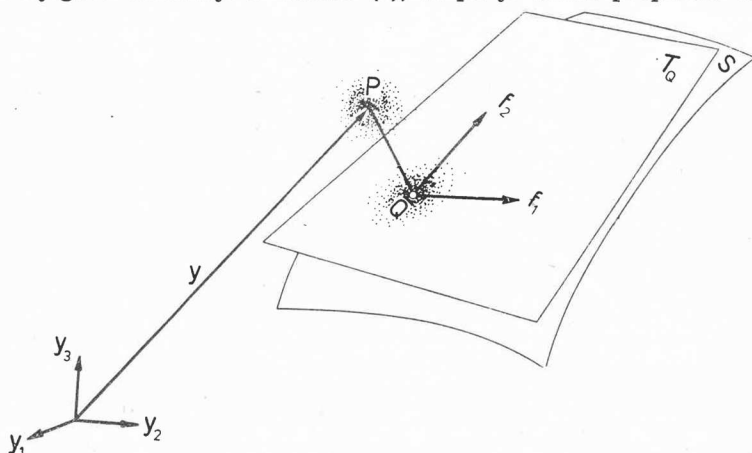
imamo še q dimensionalno ploskev S , ki jo popiše vektor $\mathbf{f}$, kadar zavzamejo parametri α_v vse mogoče vrednosti. Desna stran enačbe (9) pa pove, da moramo določiti na ploskvi S točko $Q(\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_q)$ tako, da bo razdalja PQ najmanjša. Kadar je razdalja najmanjša, je vektor $\mathbf{y} - \mathbf{f}$ pravokoten na tangencialno hiper-ravnino v točki Q . Vektor $\mathbf{y} - \mathbf{f}$ mora biti torej pravokoten na q tangencialnih vektorjev

$$\mathbf{f}_v = \frac{\partial \mathbf{f}}{\partial \alpha_v} \quad (10)$$

Tako dobimo q ekstremalnih pogojev

$$\mathbf{f}_v \cdot (\mathbf{y} - \mathbf{f}) = 0 \quad v = 1, 2, \dots, q \quad (11)$$

iz katerih lahko izračunamo vse α_v . Skalarni produkt moramo seveda razumeti v smislu njegove definicije z enačbo (9), ki pa jo lahko preprosto tolmačimo



Sl. 1. Geometrična ponazoritev metode najmanjših kvadratov v primeru, da je $n = 3$ in $q = 2$. Vektor $\mathbf{y}$ določa točko P , vektorja $\mathbf{f}_1$ in $\mathbf{f}_2$ pa sta tangencialna vektorja na koordinatne krivulje ploskve S v točki Q in torej določata tangencialno ravnino T_Q .

tako, da merimo vse dolžine v smereh koordinatnih osi y_i v enotah pripadajočih standardnih odmikov σ_i , s čimer preide skalarni produkt enačbe (9) v navaden skalarni produkt.

Ako sistem (11) ni linearen, ga največkrat rešujemo iterativno, s tem da ga najprej lineariziramo. To dosežemo na ta način, da izberemo na ploskvi S neko točko R , za katero pričakujemo, da je blizu Q , in razvijemo vektor $\mathbf{f}$ v okolici točke R v potenčno vrsto po spremenljivkah $x^\mu = \alpha_\mu - \alpha_\mu(R)$. Ako zanemarimo v tej vrsti vse kvadratne in višje člene v x^μ , dobimo, ko vstavimo tak $\mathbf{f}$ v enačbo (11), linearen sistem za pomožne neznanke x^μ

$$g_{\mu\nu} x^\mu = \mathbf{f}_\nu \cdot [\mathbf{y} - \mathbf{f}(R)] \quad v = 1, 2, \dots, q \quad (12)$$

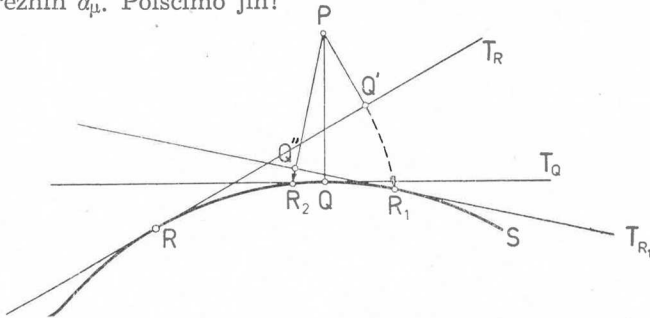
kjer velja dogovor o avtomatičnem sumiranju, ki pravi, da je treba sešteti vse možne člene, kadar nastopi isti indeks zgoraj in spodaj. Koefficienti

$$g_{\mu\nu} = \mathbf{f}_\mu \cdot \mathbf{f}_\nu \quad (13)$$

so elementi kovariantnega merilnega tensorja na ploskvi S . Pomnožimo enačbo (12) zapovrstjo z elementi kontravariantnega merilnega tensorja $g^{\mu\rho}$ in jih seštejmo! Elementi kontravariantnega merilnega tensorja so poddeterminante enakoležečih elementov kovariantnega tensorja, daljene z determinanto $|g_{\mu\nu}|$, tako da velja $g^{\mu\rho} g_{\mu\nu} = \delta_{\rho\nu}$. Rešitev se tedaj glasi

$$x^{\mu} = g^{\mu\nu} f_{\nu} \cdot [y - f(R)] \quad \mu = 1, 2, \dots, q \quad (14)$$

Dobljeni x^u nam dajo novo točko R_1 , ki je bliže točki Q , kot je bila točka R (slika 2). Pokazati se da, da konvergira zaporedje točk R_s proti Q , če smo le izbrali točko R dovolj blizu točke Q . Ker je ugodno, da izberemo začetni R čim bliže Q , s čimer si prihranimo mnogo dela, rešimo problem najprej s kako bolj približno metodo, n. pr. z risanjem, ter šele nato, ako potrebujemo rezultat z večjo natančnostjo, uporabimo metodo najmanjših kvadratov. Največkrat je v takem primeru že ena sama iteracija dovolj, kajti nikakega pomena nima računanje nadaljnjih približkov, kadar postanejo vsi x^u manjši od standardnih odmikov ustreznih a_u . Poiščimo jih!



Sl.2. Prerez skozi točke P , Q in R , ki ponazarja iterativni postopek, s katerim najdemo točko Q .

Vzemimo, da smo že v točki Q . Odmiki Δx_i , ki jih povročajo statistične fluktuacije Δy_i , so podani že z enačbo (14), kjer seveda stoji Δy namesto $y - f(R)$. V povprečju je torej njihov produkt

$$\langle \Delta \alpha_\mu \Delta \alpha_\nu \rangle = g^{\mu\rho} g^{\nu\pi} \langle (\mathbf{f}_\rho \cdot \Delta \mathbf{y}) (\mathbf{f}_\pi \cdot \Delta \mathbf{y}) \rangle \quad (15)$$

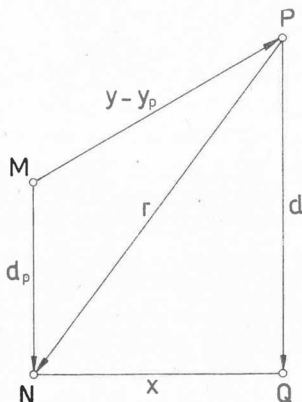
Zaradi naše normalizacije dolžin je gostota verjetnosti odklikov Δy krogelno simetrična. Torej lahko vzamemo, da projekcija vektorja Δy opiše v povprečju enoten krog v ravnini vektorjev $\mathbf{f}_\rho$ in $\mathbf{f}_\pi$. Zato je v povprečju produkt obeh skalar-
 narnih produktor $\mathbf{f}_\rho \cdot \Delta y$ in $\mathbf{f}_\pi \cdot \Delta y$ enak skalar-
 nemu produktu $\mathbf{f}_\rho \cdot \mathbf{f}_\pi$, ki pa je po definiciji enak $g_{\rho\pi}$, iz česar takoj sledi

$$\langle \Delta\alpha_\mu \Delta\alpha_\nu \rangle = g^{\mu\nu} \quad \mu, \nu = 1, 2, \dots, q \quad (16)$$

Omenimo naj, da so neznanke α_ν med seboj stohastično odvisne, ker merilni tensor v splošnem ni diagonalen, čeprav smo predpostavili, da so spremenljivke y_i med seboj neodvisne. Nekaj več o tem kasneje. Za zdaj naj nam zadostuje, da smo našli standardne odmake neznank α_ν , ki so podani z $\sigma_{\alpha_\nu} = (g^{\nu\nu})^{1/2}$. Tako smo dobili oceno, kdaj prenehamo z iteracijami.

Geometrijska slika nam pomaga ugotoviti še eno važno lastnost metode najmanjših kvadratov. Standardni odmiki σ_{α} , neznank α , določeni z enačbo (16), so pogojeni le z velikostjo standardnih odmikov σ_i spremenljivk y_i , ki so pa zaradi naše definicije skalarne produkta skriti v elementih merilnega ten-

sorja, enačba (13). Standardni odmik $\sigma_{\alpha y}$ nam ne povedo ničesar o tem, kako dobro smo aproksimirali vrednosti y_i z izbranimi funkcijami f_i . Vzemimo samo naš prvi primer! Dokler so raztezki s_i majhni, velja Hookov zakon $F_i = ks_i$. Pri večjih raztezkih, kjer ta zakon ni več veljaven, lahko razvijemo F v potenčno vrsto po s , toda vprašanje je, koliko členov v potenčni vrsti naj upoštevamo, da bo naša reprezentacija po eni strani verna, po drugi strani pa smiselna; namreč, da ne bomo tlačili naše krivulje $F(s)$ bolj natančno skozi eksperimentalne točke, kot ima to smisel z ozirom na mersko točnost. Podoben problem nastopi pri izglajevanju eksperimentalnih krivulj. Ker pa to že presega okvir članka, poskusimo rešiti le vprašanje, kdaj je naša reprezentacija množice y_i s funkcijami f_i verna. Prvo indikacijo o nekonsistentnosti aproksimacije nam da že kvadrat razdalje PQ , ki ga označimo kar z d^2 . Najti moramo



Sl. 3. Posteriorna ocena povprečnih produktov odstopanj neznank α_v . Točka P je določena z vektorjem y , točka M pa z vektorjem y_p , t. j. z najverjetnejšim vektorjem y , ki ga pa ne poznamo. Točki Q in N sta pripadajoči rešitvi na ploskvi S . Vektorja d in d_p sta pri dovolj majhnih x pravokotna na vektor x .

njegovo povprečno vrednost. Na začetku smo molče predpostavili, da ima y maksimum verjetnosti v točki P . Dejansko pa je P rezultat ene same skupine n meritev. Da bi ugotovili, kje ima y maksimum verjetnosti, bi morali meritve mnogokrat ponoviti, poiskati $p(y)$ in najti maksimum gostote verjetnosti $p(y)$. Naj nam ta maksimum predstavlja točka M , ki je pa sicer ne poznamo! Njej pripadajoče rešitve naj bodo podane s točko N na ploskvi S (slika 3)! Predpostavimo, da se N le malo razlikuje od Q ! Tedaj lahko pišemo

$$r^2 = d^2 + x^2 \quad (17)$$

kjer je x razdalja QN . Zanimarili smo torej ukrivljenost ploskve S na razdalji x . S slike pa je razvidno, da je $r = d_p - (y - y_p)$, iz česar sledi takoj, da je povprečna vrednost r^2 enaka

$$\langle r^2 \rangle = d_p^2 + n \quad (18)$$

ker merimo vse dolžine v enotah standardnih odmikov σ_i . Povprečna vrednost x^2 je iz istih vzrokov kar enaka q , t. j. številu dimenzij ploskve S . Za povprečno vrednost kvadrata razdalje PQ dobimo torej

$$\langle d^2 \rangle = d_p^2 + (n - q) \quad (19)$$

Razliko $n - q$ imenujemo število prostotnih stopenj našega problema. Ako je reprezentacija verna, mora zajeti naša ploskev S tudi točko M , kar pomeni, da je d_p^2 enak nič. Pri verni reprezentaciji lahko torej pričakujemo, da je razmerje kvadrata razdalje PQ in števila prostotnih stopenj enako ena. V praksi pa je seveda težko ločiti, ali je razmerje večje od ena zaradi večjih eksperimentalnih napak, kot smo jih ocenili s standardnimi odmiki σ_i , ali pa zaradi nezadovoljive aproksimacije s funkcijami f_i . Zato popravimo našo prejšnjo oceno povprečnih produktov odmičkov $\langle \Delta a_\mu \Delta a_\nu \rangle$, enačba (16), s tem da pomnožimo desno stran z razmerjem $d^2/(n - q)$. To oceno imenujemo »posteriorno«, da jo razlikujemo od »apriorne ocene«, podane z enačbo (16). Ker je udomačen tudi izraz »zunanja« ocena, bomo za posteriorno oceno povprečnih produktov odmičkov neznank a_ν pisali

$$\langle \Delta a_\nu \Delta a_\mu \rangle_{\text{ext}} = [d^2/(n - q)] g^{\nu\mu} \quad (20)$$

iz česar sledi za standardne odmike $\sigma_{a_\nu}^{\text{ext}} = [g^{\nu\nu} d^2/(n - q)]^{1/2}$, kar se tudi največkrat uporablja. Število prostotnih stopenj pa je v mnogih primerih tako veliko v primeri s številom neznank, da običajno vzamemo kar n namesto $n - q$.

*

Vrnimo se h kriteriju III in izpeljimo posplošeno metodo najmanjših kvadratov!

Članek E. R. Cohena¹ »The Basis for the Criterion of Least Squares«, ki obravnava posplošenje metode, je poleg strokovne vsebine zanimiv še iz dveh razlogov. Prvič, notica,* dodana pri korekturah, dokazuje, da je težko napisati o metodi najmanjših kvadratov nekaj, česar ni v delih matematičnih genijev prejšnjega stoletja. Drugič, da je bil članek objavljen v Reviews of Modern Physics kljub temu, da ni prinesel nič bistveno novega. Tehten je zaradi kritične ocene kriterijev, na katerih sloni metoda najmanjših kvadratov, ter zaradi jasnosti primera, na katerem pokaže splošnost in smiselnost kriterija III, ki ga je Gauss imenoval »kriterij najmanjše napake«. Cohenova izvajanja posplošene metode bomo tu malce spremenili, predvsem pa bomo uporabili vseskozi zapisavo z matrikami,** da bodo lastnosti posplošene metode najmanjših kvadratov še bolj očitne.

Prav tako kot prej imamo dano množico n vrednosti y_i , ki tvorijo vektor y , ter n funkcij $f_i(a_1, a_2, \dots, a_q)$, ki so komponente vektorja f ; vrednosti neznank a_ν moramo izbrati tako, da bo kar »najbolje« zadoščeno sistemu enačb (7), a sedaj v smislu kriterija III, ki ga izrazimo v nekoliko bolj določeni obliki: Sistemu

* V prevodu se notica glasi: »Profesor J. W. Tukey s princetonske univerze je prijazno sporočil avtorju, da ta posplošeni sistem najmanjših kvadratov ni nov. R. L. Plackett, Biometrika 36, 458 (1949) je našel začetke že pri Laplaceu in Markoffu ter pri Gaussu. A. C. Aitken, Proc. Roy. Soc. Edinburgh 55, 42 (1938) je tudi objavil posplošenje ekvivalentno sedanjemu izvajanju.«

** Glej F. Križanič, Izbrana sredstva linearne analize za tehnike in fizike, I. del, Teorija Matrik, Inštitut »Jožef Stefan«, Ljubljana 1957; ali E. Bodewig, Matrix Calculus, North-Holland Publishing Co. — Amsterdam 1956. — Zadostuje, da si zapomnimo tole: dve matriki lahko množimo le takrat, kadar ima drugi faktor toliko vrstic, kolikor ima prvi faktor stolpcev. Nadalje razlikujemo med vektorjem-stolpcem v in vektorjem-vrstico v' , ki ga dobimo s transponiranjem vektorja v . Pri transponiranju produkta se vrstni red faktorjev zamenja, $(AB)' = B'A'$. Produkt vektorja-vrstice z vektorjem-stolpcem, $v'u$, je skalarni produkt obeh vektorjev; produkt vektorja-stolpca z vektorjem-vrstico, uv' , ki ga včasih imenujejo tudi diadni produkt, pa je pravokotna $(m \cdot n)$ matrika, ako ima u m komponent in v n komponent.

enačb (7) bo »najbolje« zadoščeno takrat, ko bo vsota povprečnih kvadratov odmikov $\langle \Delta a_v^2 \rangle$ najmanjša. Povprečni kvadrati $\langle \Delta a_v^2 \rangle$ so funkcije ne samo povprečnih kvadratov $\langle \Delta y_i^2 \rangle$, temveč v splošnem tudi povprečnih produktov odmikov $\langle \Delta y_i \Delta y_k \rangle$, $i \neq k$, ki so lahko od nič različni, ker ne zahtevamo več, da so spremenljivke y_i stohastično neodvisne. Da lahko uporabimo kriterij III, moramo torej poznati vse povprečne produkte $\langle \Delta y_i \Delta y_k \rangle$, $i, k = 1, 2, \dots, n$, ki jih je $n(n+1)/2$. Tako kot smo iz vrednosti y_i sestavili n -dimenzionalni vektor $\mathbf{y}$, združimo vse povprečne produkte v matriko $\mathbf{S}$, ki je očitno simetrična, ker je $\langle \Delta y_i \Delta y_k \rangle = \langle \Delta y_k \Delta y_i \rangle$. Zaradi enostavnosti imenujemo matriko $\mathbf{S}$ kar matriko napak, čeprav je v splošnem definirana z

$$\mathbf{S} = \langle (\mathbf{y} - \langle \mathbf{y} \rangle) (\mathbf{y} - \langle \mathbf{y} \rangle)' \rangle \quad (21)$$

in je torej posplošitev enačbe (6) za povprečni kvadrat odmika.

Dejstvo, da je $\mathbf{S}$ simetrična matrika in da jo zato lahko geometrično ponazorimo z elipsoidom, $\xi' \mathbf{S} \xi = \text{konst.}$, ki je — tako kot v enodimenzionalnem primeru standardni odmik — mera za razširjenost porazdelitve odmikov Δy_i od povprečnih $\langle y_i \rangle$, t. j. okoli točke P , nam narekuje že eno možnost rešitve našega problema. S primerno transformacijo je možno prevesti $\mathbf{S}$ v diagonalno obliko, s čimer se znebimo mešanih produktov. V novem koordinatnem sistemu, v katerem je točka P podana z vektorjem $\mathbf{u}$, naj sovpadajo glavne osi elipsoida s koordinatnimi osmi u_i . Transformacija, ki prevede vektor $\mathbf{y}$ v vektor $\mathbf{u}$, je

$$\mathbf{u} = \mathbf{S}^{-1/2} \mathbf{y} \quad (22)$$

Matrika napak vektorja $\mathbf{u}$ je po definiciji matrike napak, enačba (21),

$$\langle (\mathbf{u} - \langle \mathbf{u} \rangle) (\mathbf{u} - \langle \mathbf{u} \rangle)' \rangle = \mathbf{S}^{-1/2} \langle (\mathbf{y} - \langle \mathbf{y} \rangle) (\mathbf{y} - \langle \mathbf{y} \rangle)' \rangle \mathbf{S}^{-1/2} = \mathbf{I} \quad (23)$$

torej kar matrika enote, kar pomeni, da so standardni odniki komponent vektorja $\mathbf{u}$ enaki ena, povprečni mešani produkti $\langle \Delta u_i \Delta u_k \rangle$, $i \neq k$, pa so enaki nič. Prav tak rezultat pa dobimo, ako predpostavimo, da so porazdelitve odmikov Δu_i Gaussove in med seboj neodvisne, t. j. ako vzamemo za gostoto verjetnosti $p(u_1, u_2, \dots, u_n)$ kar $(2\pi)^{-n} \exp[-\sum_i (u_i - \langle u_i \rangle)^2/2]$. Zato lahko uporabimo za vektor $\mathbf{u}$ in njemu prirejeni vektor $\mathbf{S}^{-1/2} \mathbf{f}$ kar metodo namanjših kvadratov v obliki, ki smo jo dobili iz kriterija II. Potrebno pa je dokazati, da ta metoda najboljše vrednosti za neznanke a_v tudi v smislu kriterija III. Ker so povprečni kvadrati odstopanj neznanek a_v podani z enačbo (16), bi bilo torej treba dokazati, da je sled kontravariantnega merilnega tensorja $g^{\mu\nu}$ najmanjša.

Ubrali pa bomo nekoliko drugačno pot, ker bomo tako dobili rezultate, ki so bolj pregledni in uporabnejši kot splošni rezultati, ki smo jih dobili prej. Ker sistem enačb (7) pri reševanju skoraj vedno lineariziramo, ne izgubimo prav nič na splošnosti, ako že od vsega začetka predpostavimo, da je sistem linearen. Poznamo torej n dimenzionalni vektor $\mathbf{y}$ in njegovo matriko napak $\mathbf{S}$, enačba (21). Poleg tega je dana matrika $\mathbf{A}$, ki ima n vrstic in q stolpcev. Iščemo q dimenzionalni vektor $\mathbf{x}$, ki naj bo tak, da bo v smislu kriterija III kar najboljše zadostil sistemu

$$\mathbf{Ax} = \mathbf{y} \quad (24)$$

Ako gledamo na matriko $\mathbf{A}$ kot na matriko, ki nam določa neko transformacijo, je takoj očitno, da enačba (24) v splošnem nima rešitve, kajti v n dimenzional-

nem prostoru vektorja y se nahaja q dimenzionalni podprostor vektorja x in A naj bi bila transformacija, ki prevede vektor x v obsežnejši prostor vektorja y . Obratna transformacija, ki naj bo podana z matriko B in ki prevede vektor y v vektor x , ni enolično določena, saj nam definicija obratne matrike

$$BA = I \quad (25)$$

daje samo q^2 pogojev za nq elementov matrike B , ki ima q vrstic in n stolpcev. Da bo torej vektor x , ki je podan z

$$x = By \quad (26)$$

enolično določen, moramo uporabiti še dodatne pogoje, ki sledijo iz kriterija III. Iz enačbe (26) sledi, da so odmiki Δx , ki jih povzročajo statistične fluktuacije Δy , dani z $B\Delta y$, torej je matrika napak vektorja x enaka

$$\langle \Delta x \Delta x' \rangle = BSB' \quad (27)$$

Kriterij III zahteva, da moramo elemente matrike B izbrati tako, da bo sled matrike napak vektorja x , enačba (27), minimalna. Ker pa mora B zadoščati tudi enačbi (25), vpeljemo q^2 Lagrangevih faktorjev, ki tvorijo matriko L , in zahtevamo, da je

$$\text{Sp} \{ BSB' - 2(BA - I)L' \} = \min_{(B)} \quad (28)$$

kar nam da nq pogojev, ker moramo odvajati po nq elementih matrike B . Skupaj z enačbo (25) imamo torej $q(n + q)$ pogojev, iz katerih lahko določimo vse elemente matrik B in L .

Z odvajanjem enačbe (28), ki je skalarna enačba (!), po elementih matrike B dobimo

$$SB' - AL' = 0 \quad (29)$$

iz česar sledi

$$B = LA'S^{-1} \quad (30)$$

Ako vstavimo B v enačbo (25), dobimo še L , ki je

$$L = (A'S^{-1}A)^{-1} \quad (31)$$

Tako dobimo, da je najboljši x v smislu kriterija III podan z

$$x = (A'S^{-1}A)^{-1}A'S^{-1}y \quad (32)$$

kar je prav isti rezultat, kot če bi najprej uporabili transformacijo koordinat, enačba (22), na linearen sistem (24) ter nato uporabili metodo najmanjših kvadratov, kot sledi iz kriterija II. Rešitev (32) je namreč rešitev tako imenovanega »normalnega sistema«, ki ga z matrikami zapišemo takole

$$A'S^{-1}Ax = A'S^{-1}y \quad (33)$$

V primeru, da je S kar enak konstanti kI , je to sistem, ki ga dobimo iz kriterija I; ako je S diagonalna matrika, dobimo sistem (33) z uporabo kriterija II, če je izhodni sistem (7) linearen v neznankah α_v , ki so tedaj kar komponente

vektorja $\mathbf{x}$. V splošnem pa sta ekvivalentna sistema (12) in (33), pri čemer pa je potrebno upoštevati, da je vektor $\mathbf{y}$ v enačbi (33) to, kar je vektor $\mathbf{y} - \mathbf{f}(R)$ v enačbi (12). Matrika $\mathbf{L}$, enačba (31), je kontravariantni merilnih tensor $g^{\mu\nu}$ v primeru linearnega izhodnega sistema (7). »Apriorna ocena« povprečnih produktov odmikov vektorja $\mathbf{x}$ je torej

$$\langle \Delta \mathbf{x} \Delta \mathbf{x}' \rangle = (\mathbf{A}' \mathbf{S}^{-1} \mathbf{A})^{-1} \quad (34)$$

kar takoj sledi tudi iz enačb (27), (30) in (31). Za »posteriorno oceno« povprečnih produktov odmikov vektorja $\mathbf{x}$ pa dobimo, ako izrazimo d^2 z vektorjema $\mathbf{y}$ in $\mathbf{x}$,

$$\langle \Delta \mathbf{x} \Delta \mathbf{x}' \rangle_{\text{ext}} = [\mathbf{y}' \mathbf{S}^{-1} (\mathbf{y} - \mathbf{A}\mathbf{x}) / (n - q)] (\mathbf{A}' \mathbf{S}^{-1} \mathbf{A})^{-1} \quad (35)$$

kar sledi iz enačbe (20), ako upoštevamo, da sta vektorja $\mathbf{d} = \mathbf{y} - \mathbf{A}\mathbf{x}$ in $\mathbf{A}\mathbf{x}$ med seboj pravokotna. Seveda moramo sedaj uporabiti posplošeno definicijo skalarnega produkta, ki je že nakazana s transformacijo $\mathbf{S}^{-1/2}$, enačba (22), in ki je tudi implicitno uporabljena v enačbah (27) do (34). Namreč, skalarni produkt dveh vektorjev $\mathbf{u}$ in $\mathbf{v}$ je enak $\mathbf{u}' \mathbf{S}^{-1} \mathbf{v}$, kar pomeni, da je skalarni produkt vedno definiran z ozirom na prostor, v katerem sta porazdelitev odmikov, oziroma matrika napak, krogelno simetrična in v katerem so torej vse smeri enakovredne.

S tem pa tudi lahko zaključimo. Kajti sedaj je očitno, da lahko vektor $\mathbf{y}$ ali vektor $\mathbf{x}$ transformiramo s kakršno koli neizprijeno transformacijo $\mathbf{T}$, pa bo pri tem lastnost »najmanjše napake« ohranjena, če se le držimo gornje zahteve pri definiciji skalarnega produkta. Seveda ne smemo pozabiti pri določitvi povprečnega kvadrata odmika spremenljivke z_i , da je v splošnem odvisen od vseh povprečnih produktov $\langle \Delta y_j \Delta y_k \rangle = S_{jk}$, kajti matrika napak vektorja $\mathbf{z}$ je enaka $\mathbf{TST}'$, ako je $\mathbf{z} = \mathbf{T}\mathbf{y}$; isto velja za poljuben vektor $\mathbf{v} = \mathbf{U}\mathbf{x}$, kjer je $\langle \Delta \mathbf{v} \Delta \mathbf{v}' \rangle = \mathbf{U} \langle \Delta \mathbf{x} \Delta \mathbf{x}' \rangle \mathbf{U}'$. Brez težav lahko vse to prenesemo na splošen, nelinearen primer, ki smo ga obravnavali pri kriteriju II.

ON THE METHOD OF LEAST SQUARES

(Summary)

Different criteria on which the method of least squares is based are reviewed. The method is geometrically interpreted in n -dimensional space.

Cohen's generalization of the method is formulated by the matrix calculus. According to the principle of Minimum Error the spur of the error matrix of unknowns has to be minimized with respect to all elements of the inverse matrix $\mathbf{B}$, Eq. (28), subject to the condition (25). The property of Minimum Error is invariant with respect to all non-singular transformations of vector $\mathbf{y}$ or vector $\mathbf{x}$.

Literatura:

1. E. R. Cohen: The Basis for the Criterion of Least Squares, Rev. Mod. Phys. 25, 709 (1953).
2. E. Whittaker i G. Robinson: Tečaj Numeričke Matematike, Naučna Knjiga, Beograd 1951, str. 196.

JEDRSKA MAGNETNA REZONANCA

IVAN ZUPANČIČ

(Institut Jožef Stefan, Ljubljana)

I. UVOD

Mnoga atomska jedra (vsa z lihim številom nukleonov) imajo vrtilno količino in zato tudi magnetni moment. Energijski nivoji atomov s takšnimi jedri se zaradi sklopljenja med magnetnimi momenti jedra in elektronov razcepijo. To vodi do hiperfine strukture spektralnih črt. Opazujemo pa lahko tudi direktne prehode med posameznimi nivoji multiplleta. Energijske razlike med njimi so tako majhne, da pade ustrezna frekvenca sevanja v radio-frekvenčno področje. Te prehode opazujemo pri jedrski magnetni resonanci.

Spin in magnetni moment jedra ponazorimo z modelom, ki nam olajša razumevanje, čeprav ni točen. Jedro si predstavljamo kot vrtavko z električnim nabojem. Vrteči se naboj predstavlja električni tok, ki ustvarja dipolno magnetno polje. Pri togi vrtavki je dipolni moment μ proporcionalen vrtilni količini Γ . Kvocijent obeh količin je tako imenovano giromagnetno razmerje: $\gamma = \mu/\Gamma$.

Po pravilih kvantne mehanike more imeti komponenta vrtilne količine v določeni smeri največjo vrednost $I\hbar/2\pi$, kjer je I »spinsko« kvantno število, $\hbar$ pa Planckova konstanta. Število I je pri jedrih s sodim številom nukleonov lahko enako 0, 1, 2, ..., pri lihem številu nukleonov pa $\frac{1}{2}$, $\frac{3}{2}$, $\frac{5}{2}$... V polju zunanjih sil (n. pr. v magnetnem polju) lahko zavzame komponenta vrtilne količine v smeri polja $2I + 1$ raznih vrednosti $m\hbar/2\pi$, pri čemer ima m lahko vrednosti I , $I-1$, $I-2$, ... $-(I-1)$, $-I$. Število m se imenuje magnetno kvantno število.

Elektron ima spin $\frac{1}{2}$, lastna vrednost komponente njegovega magnetnega momenta pa je po velikosti skoraj natančno enaka Bohrovemu magnetonu $\beta_B = \hbar e/4\pi m_e = 9,27 \cdot 10^{-24} \text{ Am}^2$. To vrednost dobimo iz Diracove enačbe. Analogno vpeljemo jedrski magneton β_I tako, da maso elektrona m_e nadomestimo z maso protona m_p . Za proton in jedra pa Diracova enačba ne velja; jedrski magneton nam da le velikostni red magnetnega momenta jedra (μ). Na splošno pišemo $\mu = gI\beta_I$, pri čemer je g tako imenovani Landéjev faktor. Elektroni imajo Landéjev faktor $g = 2$, proton 5,6..., nevtron pa $-3,8$... Zapisani μ predstavlja največjo vrednost, ki jo lahko zavzame komponenta magnetnega momenta v kaki smeri. Ta komponenta lahko zavzame vse vrednosti $m\mu/I$, ki ustrezajo vrednostim komponente vrtilne količine. Kvocijent komponente magnetnega momenta in komponente vrtilne količine je enak giromagnetnemu razmerju:

$$\gamma = \mu/\Gamma = 2\pi g \beta_I/\hbar = \frac{1}{2} g (e/m_p)$$

Še pred desetimi leti je bila optična spektroskopija, in sicer hiperfina struktura črt, edini vir informacij o jedrskem magnetizmu. Druga možnost bi bila, da bi merili statični jedrski paramagnetizem. V magnetnem polju se namreč jedrski dipoli poskušajo postaviti v smer polja. Toda zaradi toplotnega gibanja se samo zelo majhen del jeder preusmeri in samo ta prispeva k maskoskopski magnetizaciji. Po Langevinovi statistični formuli dobimo za statično jedrsko susceptibilnost $\chi_0 = 4\pi\mu_0 N g^2 \beta_I^2 I(I+1)/3kT$, kjer pomeni N število jeder na enoto volumna, k Boltzmanovo konstanto in T temperaturo. Jedrski momenti so okrog tisočkrat manjši od elektronskih in zato je jedrski paramagnetizem okrog milijonkrat manjši od navadnega in ga je nemogoče meriti.

Zato je bilo treba preiti k dinamičnim metodam, pri katerih ima magnetno polje izmenično komponento tako izbrane frekvence, da se ujema s karakteristično frekvenco precesije jedra. Tedaj se pojavi resonanca.

Poskus poteka takole: Snov, ki vsebuje jedra z magnetnim momentom, damo v tuljavo, ki jo napajamo z visokofrekvenčnim tokom, da ustvarimo izmenično magnetno polje (B_1). To tuljavo postavimo med pola velikega magneta, katerega polje (B_0) naj bo pravokotno na osi tuljave. S spreminjanjem frekvence polja B_1 ali s spreminjanjem gostote polja B_0 poiščemo resonanco. Pri prehodu skozi resonanco opazimo absorpcijo v tuljavi. Efekt pa je tako majhen, da ga moremo zaznati le s skrbno izdelano in precizno aparaturo.

Poskušajmo na kratko razložiti pojav jedrske resonance! Preiskovana snov je v polju B_0 z gostoto nekaj tisoč gaussov. Jedra s spinom I se porazdelijo na $2I + 1$ energijskih nivojev z razmakom po $\Delta E = g \beta_I B_0$. Prehodi med posameznimi nivoji so zvezani z absorpcijo ali emisijo kvanta elektromagnetnega sevanja. Te prehode lahko vzbudimo z radiofrekvenčnim magnetnim poljem (B_1) prave frekvence.

Pojav lahko primerjamo z Zeemanovim efektom, ki ga tolmačimo takole*: Komponenta vrtilne količine atoma v smeri zunanega magnetnega polja ima $2I + 1$ diskretnih lastnih vrednosti. Energijski nivo atoma se tako razcepi v multiplet z enakimi razmaki po $\Delta E = g \beta_B B$. Pri Zeemanovem efektu nastopi razcepitev zaradi magnetnega momenta atoma, pri jedrski resonanci pa zaradi magnetnega momenta jedra. Razlika je še ta, da opazujemo pri Zeemanovem efektu razcepitev optičnih spektralnih črt, ki nastanejo zaradi prehodov med nivoji, ki so se razcepili v multiplete. Pri jedrski magnetni resonanci pa opazujemo prehode med samimi nivoji istega multipleta. Kot pri Zeemanovem efektu velja tudi za prehode med nivoji multipleta izbirno pravilo $\Delta m = \pm 1$. Dovoljeni so torej samo prehodi med sosednjimi nivoji. Po Bohrovem postulatu ($\Delta E = h\nu$) dobimo ustrezno frekvenco sevanja, to je tako imenovano resonančno frekvenco, iz naslednje enačbe:

$$h\nu = \mu B_0/I = g \beta_I B_0, \text{ torej } \omega = 2 \pi g \beta_I B_0/h = \gamma B_0$$

Za protone, ki imajo izmed vseh jeder največji magnetni moment, znaša resonančna frekvenca pri magnetnem polju 10 000 gaussov 42,6 Mc/s; je torej v radiofrekvenčnem območju.

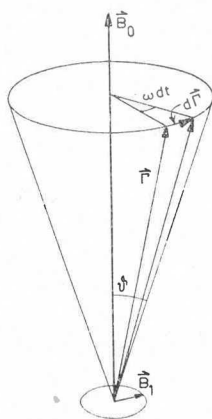
Ta resonančni pojav ne opazimo samo pri prostih atomih (z metodo molekulskih žarkov), ampak tudi pri trdih in tekočih snoveh, če so diamagnetne, torej če je rezultanta elektronskih magnetnih momentov enaka nič. Tudi v takšnih snoveh se spin jedra lahko neovirano orientira. Vplivi sosednjih jeder in molekulske mreže so majhni in jih v prvem približku zanemarimo. Ti vplivi se poznajo le pri strukturi resonančne krivulje in ravno iz tega se da sklepati na mnoge fizikalne in kemične lastnosti snovi.

Pojav jedrske magnetne resonance sta odkrila leta 1940 Bloch in Purcell neodvisno drug od drugega in sta za to odkritje dobila Nobelovo nagrado. Teoretično je bil pojav napovedan že prej; že leta 1942 je Gorter delal prve eksperimente, ki pa se niso posrečili. V začetku so se za jedrsko magnetno resonanco zanimali le fiziki; v kratkem pa se je izkazalo, da je to izvrstno sredstvo pri raziskovanjih v fizikalni kemiji in pri določanju molekulske strukture. Iz tega se je razvila radiofrekvenčna spektrometrija, ki jo lahko smatramo za logičen podaljšek infrardeče in mikrovalovne spektrometrije.

* I. Supek: Teorijska fizika II, str. 138.

II. KLASIČNA TEORIJA

Teorijo jedrske magnetne resonance si zelo poenostavimo, če si vzamemo na pomoč klasičen model. Jedro si predstavljamo kot majhno vrtavko z magnetnim dipolom. Ko jo postavimo z nagnjeno osjo v magnetno polje B , precesira okrog smeri tega polja s tako imenovano Larmorjevo frekvenco, ki jo bomo takoj izračunali. Magnetno polje B_0 deluje na magnetni dipol z vrtilnim momentom, ki je enak $\mu \times B$. Velikost tega vrtilnega momenta je torej $\mu B_0 \sin \vartheta$, če je ϑ kot med osjo vrtavke in smerjo polja. Po izreku o vrtilni količini je sprememba vrtilne količine enaka sunku vrtilnega momenta, torej $d\Gamma = \mu \times B_0 dt$ (1). Z upoštevanjem giromagnetnega razmerja $\gamma = \mu/\Gamma$ lahko zapišemo $d\mu/dt = \gamma \mu \times B_0$. Velikost vrtilne količine se pri precesiji ne spreminja, pač pa njena smer. Vektor Γ opisuje plašč stožca. Slika 1 kaže, da je



Sl. 1. Larmorjeva precesija

$d\Gamma = \Gamma \sin \vartheta \cdot \omega dt$, pri čemer je ω precesijska frekvenca. Iz enačbe $\Gamma \sin \vartheta \cdot \omega dt = \mu B_0 \sin \vartheta dt$ razberemo, da je precesijska frekvenca sorazmerna z gostoto magnetnega polja B_0 in neodvisna od kota ϑ , namreč $\omega = \mu B_0/\Gamma = \gamma B_0$. To se ujema s prej izračunano resonančno frekvenco.

Da nastopi resonančna absorpcija, potrebujemo dodatno majhno nihajoče magnetno polje B_1 , ki je pravokotno na B_0 (glej sliko 1). V bistvu je vseeno, če bomo vzeli namesto nihajočega vrteče se magnetno polje; računi pa se bodo s tem poenostavili. Tudi to polje deluje z vrtilnim momentom, in sicer $\mu \times B_1$, na magnetni dipol in skuša spremeniti kot ϑ med B_0 in μ . Če je frekvenca vrtilnega polja B_1 enaka precesijski in če je to polje tako obrnjeno, da je kot med B_1 in μ oster, se kot ϑ stalno večja; potencialna energija dipola v polju B_0 se s tem večja. Dipol torej absorbira energijo na račun polja B_1 . Nasprotno pa velja, če B_1 zaostane za 180° , tako da je kot med B_1 in μ top. Če obe frekvenci nista enaki, vrtilni moment venomer spreminja svoj predznak, v skladu z medsebojnim spreminjanjem faze; povprečje je enako nič.

Do sedaj smo spin šteli za izoliran, kajti vplivov okolja nismo upoštevali. Kljub temu pa smo pravilno dobili energijske nivoje. Okolje vpliva namreč le na obliko resonančne črte. To si bomo ogledali v naslednjem, pri čemer bomo predpostavili, da snov nima prostih elektronskih magnetnih momentov, da je torej diamagnetna. Zaradi enostavnosti bomo računali le s spinom $I = \frac{1}{2}$.

Razlikujemo dva vzroka motenj, ki delujejo na posamezno jedro. Prvi je termično gibanje, drugi pa magnetni vpliv sosednih jeder. Izdatnost teh motenj opišemo z dvema relaksacijskima časoma, longitudinalnim in transverzalnim.

Za jedro s spinom $\frac{1}{2}$ si predstavljamo, da sta možni le dve orientaciji v magnetnem polju: paralelna in antiparalelna. Po Boltzmanovi statistiki je razmerje števila jeder v enem in drugem stanju $N_+/N_- = \exp(2\mu B_0/kT)$. Ta kvocient ima pri $T = 300^\circ\text{K}$ in $B = 1\text{ Vs/m}^2 = 10^4\text{ gauss}$ vrednost okrog $1 + 10^{-5}$. Relativni presežek jeder v nižjem stanju torej ni večji kot 10^{-5} . Pri jedrski magnetni resonanci z absorpcijo neprestano spravljamo jedra z nižjega nivoja v višji (s paralelne orientacije v antiparalelno), z inducirano emisijo pa z višjega v nižji. Če bi bila oba nivoja natančno enako zasedena, bi se ravno toliko energije absorbiralo kot emitiralo, tako da bi bil »neto« učinek enak nič. Samo presežek na nižjem nivoju, to je stotisoči del vseh jeder v opisanem primeru, povzroči »neto« absorpcijo, ki jo zaznamo pri jedrski magnetni resonanci. Absorpcija zmanjšuje omenjeni presežek. Po absorpciji je torej presežek takšen, kot bi bil pri višji temperaturi; sistem ni več v toplotnem ravnotežju. Relaksacijski mehanizem, to je mehanizem prenosa energije med sistemom jedrskih spinov in molekulsko mrežo, skuša oba sistema spet spraviti v toplotno ravnotežje, ki ustreza temperaturi snovi. Ravnotežje se doseže eksponencialno s časovno konstanto T_1 , ki se imenuje termični ali longitudinalni relaksacijski čas. Vrednosti T_1 so od 10^4 do 10^{-4} sec. Pri tekočinah so krajše kot pri trdnih telesih. Čim manjši je T_1 , tem hitreje se doseže toplotno ravnotežje; tem večji je tedaj, kljub absorpciji, presežek jeder v nižjem energijskem nivoju.

Oglejmo si še pomen transverzalnega relaksacijskega časa T_2 ! Z njim opisujemo vpliv sosednjih spinov med seboj. Vsak jedrski magnet se ne nahaja le v stalnem zunanjem magnetnem polju B_0 , ampak tudi v lokalnem polju sosednjih jedrskih magnetnih dipolov. Smer in jakost tega lokalnega polja pa variirata od mesta do mesta in povzročata razširitev resonančne črte. Polje sosednjega jedra ima lahko največ vrednost $\Delta B = \mu_0 \mu / 2\pi r^3$. Pri razdalji $r = 2\text{ \AA}$ je to približno 5 gaussov. To polje se vektorsko prišteje zunanjemu polju B_0 in ker je statistično porazdeljeno po vseh smereh, pomeni to, da se resonančna črta razširi za vrednost, ki ustreza ΔB . V frekvenčnem merilu zneso to $\Delta\omega = \gamma\Delta B = 1/T_2$. Lokalno polje povzroči, da dva spina, ki v začetku precesirata v fazi, fazno zvezo izgubita v času T_2 , ki se imenuje transverzalni relaksacijski čas. Po nenatančnosti relaciji se s tem razširi energijski nivo za vrednost, ki ustreza frekvenčni širini $\Delta\omega = 1/T_2$.

Pri trdnih telesih je T_2 velikostnega reda 10^{-4} s in več. Pri tekočinah pa je termična reorientacija jeder hitrejša od Larmorjeve periode in se zato lokalno polje v časovnem povprečju izgladi na zelo majhno vrednost. Črta se zoži; $T_2 = 1/\gamma \Delta B$ znaša pri tekočinah več kot eno sekundo. Zmanjšanje T_2 pa poveča širino resonančne črte, tako da se jakost signala ustrezno zmanjša, kajti ploščina pod resonančno črto ostane nespremenjena. Zato je ugodno imeti čim večji T_2 .

Do sedaj obravnavane pojave moremo povezati v matematično obliko s pomočjo Blochovih enačb, ki so izvedene samo z makroskopskimi količinami in s klasično mehaniko. Ta račun je posebno pripraven za študij prehodnih pojavov.

Za izhodišče vzamemo enačbo (1), ki smo jo že izvajali: $d\mu/dt = \gamma(\mu \times B)$. K magnetnemu polju B_0 , ki naj ima smer osi z, privzamemo sedaj še rotira-

joče polje $\mathbf{B}_1$ v ravnini xy . Komponente celotne magnetne poljske gostote $\mathbf{B} = \mathbf{B}_0 + \mathbf{B}_1$ so torej $(B_1 \cos \omega t, -B_1 \sin \omega t, B_0)$. B_1 je mnogo manjši od B_0 .

Vprašati se moramo, ali je pravilno, če računamo po klasični mehaniki in ne po kvantni. Bloch je izkoristil princip, da povprečne vrednosti kvantno-mehanskih količin sledijo klasičnim zakonom gibanja. Iz tega sledi, da je s stališča kvantne mehanike pravilneje, če ne računamo z magnetnim momentom posameznega jedra, ampak z njihovo vektorsko vsoto, to je z makroskopsko polarizacijo. Enačba (1) velja torej, če nadomestimo μ z makroskopsko jedrsko magnetno polarizacijo $\mathbf{M}$.

$$d\mathbf{M}/dt = \gamma (\mathbf{M} \times \mathbf{B}) \quad (2)$$

Ta enačba velja, če ni nobenih motenj. Te pa upoštevamo z dodatnimi členi, ki izražajo časovne spremembe magnetizacije zaradi vplivov okolice jedra.

Komponenta M_z predstavlja magnetizacijo, ki je proporcionalna presežku jeder v nižjem energijskem stanju in ima zato v termičnem ravnotežju vrednost $M_{z0} = \chi_0 B_0$. Pri tem pomeni χ_0 statično jedrsko susceptibilnost. Ako pa sistem ni v termičnem ravnotežju, se M_z eksponentno približuje k M_{z0} , in sicer s karakterističnim časom T_1 . Diferencialna enačba za M_z je v tem primeru:

$$dM_z/dt = (M_{z0} - M_z)/T_1 \quad (3)$$

Vidimo, da odloča čas T_1 o vedenju komponente magnetizacije, ki je paralelna s poljem $\mathbf{B}_0$. Zato se T_1 imenuje longitudinalni relaksacijski čas.

Transverzalni komponenti M_x in M_y predstavljata rotirajoči del magnetizacije. Lokalne neregularnosti magnetnega polja, povzročene od sosednjih spinov ali nehomogenosti polja B_0 , razdrejo fazno zvezo med posameznimi spini v času T_2 . Če ni visokofrekvenčnega polja, pomeni to, da komponenti M_x in M_y v času T_2 izgineata. Bloch je predpostavil, da padata eksponentialno:

$$dM_x/dt = -M_x/T_2 \text{ in } dM_y/dt = -M_y/T_2 \quad (4)$$

Da dobimo enačbo, ki upošteva vse tri vplive, to je vpliv polja B_1 in obojne motnje, moramo sešteti desne strani enačbe (2), (3) in (4). Tako dobimo Blochove enačbe, ki se v komponentni obliki glase:

$$\begin{aligned} dM_x/dt &= \gamma [M_y B_0 + M_z B_1 \sin \omega t] - M_x/T_2 \\ dM_y/dt &= \gamma [M_x B_0 - M_z B_1 \cos \omega t] - M_y/T_2 \\ dM_z/dt &= \gamma [-M_x B_1 \sin \omega t - M_y B_1 \cos \omega t] + (M_{z0} - M_z)/T_1 \end{aligned} \quad (5)$$

To je sistem linearnih diferencialnih enačb, ki se da prevesti v sistem s konstantnimi koeficienti. Pomagamo si z naslednjo substitucijo, ki ustreza vpeljavi rotirajočega koordinatnega sistema:

$$u = M_x \cos \omega t - M_y \sin \omega t; v = -(M_x \sin \omega t + M_y \cos \omega t) \quad (6)$$

Po daljšem času, ko preneha lastno nihanje, preide vsaka rešitev enačbe v naslednjo rešitev, ki opisuje stacionarno stanje, v katerem so $du/dt = 0$, $dv/dt = 0$ in $dM_z/dt = 0$:

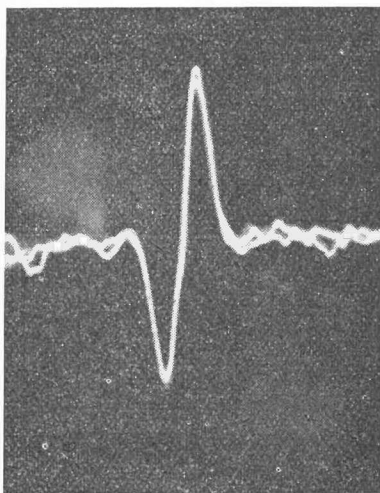
$$v = \frac{-\gamma B_1 M_{z0} T_2}{1 + (\Delta\omega)^2 T_2^2 + (\gamma B_1)^2 T_1 T_2}$$

$$u = \frac{\gamma B_1 M_{z0} \Delta\omega T_2^2}{1 + (\Delta\omega)^2 T_2^2 + (\gamma B_1)^2 T_1 T_2} \quad (7)$$

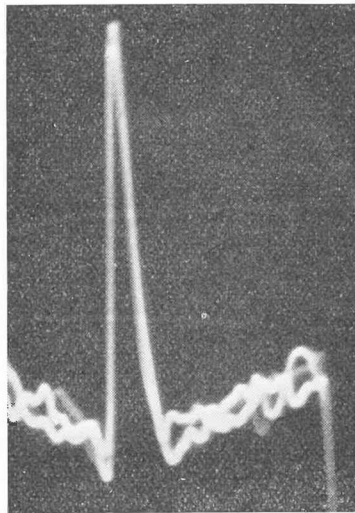
$$M_z = M_{z0} - \gamma v B_1 T_1$$

Pri tem je $\Delta\omega = \gamma B_0 - \omega$; to je razlika med resonančno krožno frekvenco in danim ω .

Izraz v predstavlja komponento magnetizacije, ki je v fazi z visokofrekvenčnim poljem B_1 (glej enačbo 5 in 6). Ta komponenta ustreza absorpciji



Sl. 2. Disperzijski signal, posnet na osciloskopu



Sl. 3. Absorpcijski signal

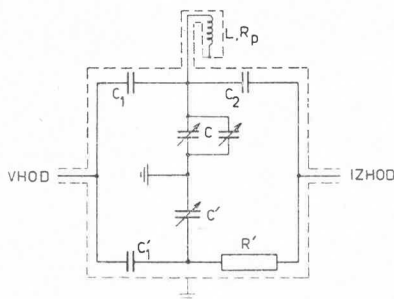
visokofrekvenčne energije (primerjaj sliko 1). Ko merimo to komponento, dobimo tako imenovani absorpcijski signal (slika 3). Komponenta u , ki zaostaja za poljem B_1 za četrto nihaja, pa predstavlja disperzijo (slika 2). (Pod disperzijo razumemo tu pojav, da je susceptibilnost odvisna od frekvence.)

Po analogiji z vsiljenim nihanjem dušenega nihala se iz enačbe (7) vidi, da predstavlja T_1^{-1} merilo za dušenje in s tem merilo za širino resonance. Člen $(\gamma B_1)^2 T_1 T_2$ je brezdimenzionalen parameter nasičenja. Kot vidimo iz enačb 6, sta magnetizacija in s tem resonančni signal proporcionalna visokofrekvenčni gostoti polja B_1 , vse dotlej, dokler so daleč od nasičenja, torej dokler je $(\gamma B_1)^2 T_1 T_2 \ll 1$. Ta pogoj kaže, da zmanjšanje T_1 dovoljuje zvečanje B_1 , ne da bi nastopilo nasičenje, kar pomeni jačji signal.

Da moremo resonančni signal jasno opazovati, na primer na osciloskopu, po navadi uporabljamo metodo, pri kateri spreminjamo magnetno polje B_0 magneta. To polje moduliramo s pomočjo dodatnih navitij z nizkofrekvenčnim modulatorskim poljem B_m , katerega jakost znaša nekaj gaussov, frekvenca ν_m pa okrog 50 c/s. Ako je resonančna vrednost magnetnega polja v območju modulacije, dobimo v periodi dvakrat signal. Prehod skozi resonanco mora biti dovolj počasen, da še velja stacionarna rešitev. Pogoji zato je $dB_0/dt \ll \gamma (\Delta B)^2$, kjer je ΔB širina črte. Če ta pogoj ni izpolnjen, poljske gostote B_0 v enačbah 5 ne smemo smatrati za konstanto. Tedaj dobimo veliko raznolikost prehodnih pojavov; rešitve se zelo skomplicirajo in diskusija rezultatov je otežena, ker so ti odvisni od 5 parametrov: T_1 , T_2 , B_1 , B_m , ω_m .

III. EKSPERIMENTALNE METODE

Jedrsko magnetno resonanco merimo tako, da damo od $0,01 \text{ cm}^3$ do 1 cm^3 preiskane snovi v tuljavo, ki jo napajamo z visokofrekvenčnim tokom in ki se nahaja v prečnem magnetnem polju B_0 . Meriti je treba zelo majhne spremembe induktivnosti; absorpcija pa se kaže v navideznem povečanju ohmskega upora tuljave. Oboje lahko merimo na dva načina: z radiofrekvenčnim mostičkom ali pa z regenerativnim oscilatorjem.



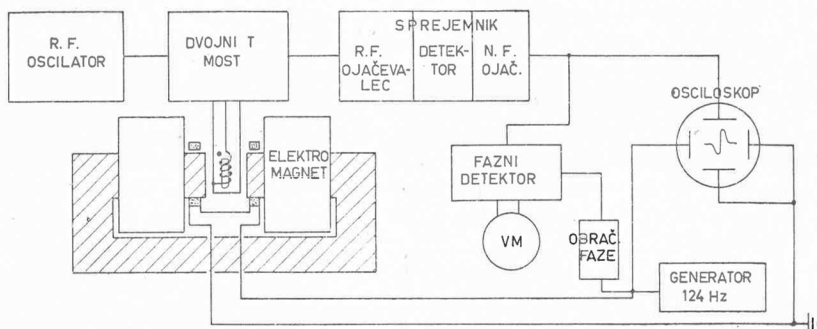
Sl. 4. Dvojni T mostiček. Pogoji za ravnotežje so: a) Amplitudno ravnotežje $\omega^2 C_1 C_2 (1 + C'/C_1) R' R_p = 1$; b) Fazno ravnotežje $C + C_1 + C_2 (1 + C_1/C_1') = 1/\omega^2 L$. R_p pomeni tu ekvivalentni paralelni upor tuljave pri frekvenci ω . Ako je preostalo neravnotežje amplitudno, prepušča mostiček absorpcijski signal, pri faznem neravnotežju pa disperzijski.

Pri mostični metodi uglasimo tuljavo, v kateri se nahaja merjenec, s paralelnim kondenzatorjem. Tako nastali nihajni krog napajamo z oscilatorjem in merimo impendanco kroga s sprejemnikom, za kar lahko služi vsak boljši radijski sprejemnik. Dvakrat v nihajnem času polja B_m dobimo signal, ki se pojavi kot amplitudna modulacija izhodnega radiofrekvenčnega nihanja. Po detekciji v sprejemniku lahko opazujemo signal na osciloskopu. Polje B_1 v tuljavi ima jakost okrog stotinke gaussa, zunanje polje B_0 pa nekaj tisoč gaussov. Stopnja modulacije, ki jo dosežemo s signalom jedrske resonance, je zelo majhna (0,1 %) in ne moremo doseči mnogo visokofrekvenčnega pojačanja. Zato imamo velik šumni faktor in majhno razmerje signala s šumom. Zato se uporabljajo mostični stiki, ki izravnavajo večji del nosilnega nihanja. Namesto enostavnega uglasenega kroga vzamemo radiofrekvenčni mostiček

(običajno dvojni T most; glej sliko 4), katerega del je tuljava z merjencem. Mostiček se nahaja v ravnotežnem stanju, tako da je propustnost nič. To stanje pa ni dovolj stabilno; zato dopustimo toliko odstopanja od ravnotežnih pogojev, da je propustnost okrog ene tisočinke (60 db). Resonančni signal spremeni impedanco tuljave, tako da se propustnost mostička zveča ali zmanjša. Amplituda dobljenega signala je ravno tolikšna kot brez mostička, nosilno nihanje pa smo z mostičkom tisočkrat zmanjšali, toda da je stopnja modulacije ustrezno zvečana.

V glavnem se uporabljata dve vrsti mostičkov: dvojni T, katerega gradnja je zelo enostavna, ker vsebuje le električne elemente, in Blochov z navzkrižnimi tuljavami. Izravnavo nosilnega nihanja se doseže tu z izbiro primerne lege tuljav. Stopnja ravnotežja in stabilnost je tu mnogo večja. Zato se Blochova metoda uporablja pri meritvah, kjer je potrebna velika natančnost. Gradnja pa je seveda bolj komplicirana.

Pri tekočinah je črta ozka in signal dovolj močan, da je viden na osciloskopu: širina črte (signala) je v praksi odvisna le od homogenosti magnetnega polja B_0 . Nehomogenost polja znotraj merjenca deluje namreč podobno kot



Sl. 5. Bločna shema celotne aparature s faznim detektorjem

lokalne variacije magnetnega polja zaradi sosednjih jeder; ta nehomogenost torej zmanjša T_2 . Pri tekočinah je naravna širina signala manjša kot tisočinka gaussa. Nehomogenost polja B_0 , ki meri pri dobrih magnetih nekaj tisočink gaussa, torej znatno razširi črto. Črte trdnih snovi so široke (okrog 10 gaussov) in zato šibke, tako da se skrijejo v šumu in na osciloskopu niso vidne. Kvadrat efektivne napetosti šuma je enak $E_s^2 = 4 R k T \Delta f$, kjer je k Boltzmanova konstanta, T temperatura, R vhodni upor ojačevalca oziroma ekvivalentni paralelni upor tuljave in Δf frekvenčni pas ojačevalca. (Tu ni upoštevan šumni faktor ojačevalca, ki se pri dobri izdelavi ne razlikuje mnogo od 1.) Če hočemo zmanjšati šum in tako napraviti črte trdnih snovi opazljive, nam preostane samo, da zmanjšamo frekvenčni pas Δf . V ta namen se uporablja fazni detektor.

Ko uporabljamo fazni detektor pri merjenju širokih črt, zmanjšamo amplitudo modulacije polja B_0 tako, da je precej manjša kot širina črte. V tem primeru ima dobljeni signal čisto sinusno obliko; amplituda signala pa je pro-

porcionalna strmini resonančne krivulje, to je prvemu odvodu. Magnetno polje počasi spreminjamo, tako da v vsaki točki krivulje izmerimo odvod.

Fazni detektor deluje kot mešalec. Vanj vodimo skupaj s šumom že usmerjeni signal, ki ima frekvenco modulacije (ν_m) in ga mešamo s primerjalnim signalom. Tega jemljemo iz vira za modulacijo magnetnega polja, zato da ima isto frekvenco ν_m . Fazni detektor v resnici pomnoži oba signala. Šum ima zvezan spekter in vse frekvence so precej enako zastopane. Produkt dveh sinusnih signalov z različno frekvenco pa nam da signal, ki se sestoji iz dveh komponent, katerih frekvenci sta enaki vsoti in razliki prvotnih; $\sin \omega_1 t \cdot \sin \omega_2 t = \frac{1}{2} [\cos (\omega_1 - \omega_2) t - \cos (\omega_1 + \omega_2) t]$. Če sta pa frekvenci obeh signalov enaki, dobimo seveda eno istosmerno komponento ($\sin^2 \omega t = \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \cos 2 \omega t$). Signal torej daje istosmerno komponento, šum pa ne, razen kolikor ga pade v neposredno okolico frekvence ν_m . Izhod faznega detektorja merimo z galvanometrom ali rekorderjem, ki meri le istosmerno komponento. Frekvenčni pas tistega šuma, katerega vkljub temu še registrira fazni detektor, je podan s časovno konstanto inštrumenta, ki je določena s členom RC. Običajno znaša okrog 10 sekund, kar pomeni širino pasu 0,1 c/s. Da je meritev točna, moramo polje B_0 spreminjati zelo počasi v primeri s to časovno konstanto. Širino črte običajno preidemo v nekaj minutah.

Na kratko naj opišemo še merjenje jedrske resonance z regenerativnim oscilatorjem. Ta metoda je sicer enostavna in lažja za upravljanje, toda nima potrebne stabilnosti za precizne meritve. Mnogo se uporablja pri meritvah na trdnih snoveh.

Preiskovana snov je tudi tokrat v tuljavi, katera tvori s kondenzatorjem uglaseni resonančni krog visokofrekvenčnega oscilatorja. Oscilacije so zmanjšane na najmanjšo možno mero, tako da so zelo občutljive za spremembe impedance tuljave. Pri prehodu skozi resonančno lego se absorpcija v tuljavi zveča; amplituda oscilacij se zmanjša, kar se pozna kot modulacija oscilatorjevega izhoda. Signal nato ojačimo in usmerimo. Lahko ga opazujemo na osciloskopu ali pa ga vodimo v fazni detektor kot pri prejšnji metodi.

IV. UPORABA

Jedrska magnetna resonanca lahko služi za merjenje magnetnih momentov jeder, za meritve magnetnih polj, pri radiofrekvenčni spektrometriji v kemiji in fiziki trdnih teles, pri izotopski analizi ter za kemijsko analizo (n. pr. za določanje koncentracije vode v organskih snoveh) itd.

Merjenje magnetnih momentov jeder se da s to metodo izvesti z veliko natančnostjo. Resonančni pogoj je podan z enačbo (2) $h\nu = \mu B_0/I$, iz katere izračunamo magnetni moment μ , če poznamo spin I. Ker merimo frekvenco lahko z natančnostjo 1:10⁶, je natančnost absolutne meritve omejena z natančnostjo, s katero poznamo Planckovo konstanto h in gostoto magnetnega polja B_0 , ki jo moremo meriti kvečjemu z natančnostjo 1:1000. Druga stvar pa je, če merimo samo razmerje momentov dveh jeder v istem polju. To razmerje je enako razmerju resonančnih frekvenc, tako da dosežemo tu enako natančnost kot pri merjenju frekvenc. Tudi poznanje teh razmerij, n. pr. razmerja momenta protona in devterona, je velikega teoretičnega pomena.

Namesto da bi primerjali resonančni frekvenci dveh jeder, lahko primerjamo resonančno frekvenco jedra, na primer protona, z njegovo ciklo-

tronsko frekvenco, to je s frekvenco kroženja v istem polju. Iz enačbe $evB_0 = mv^2/r$ dobimo, da je ciklotronska krožna frekvenca $\omega_c = v/r = (e/m_p)B_0$. Če upoštevamo, da je resonančna krožna frekvenca $\omega = \gamma B_0 = \frac{1}{2}g(e/m_p)B_0$ (enačbi 1 in 2), dobimo za kvocient obeh frekvenc tale rezultat: $\omega/\omega_c = \frac{1}{2}g$. Tako torej zelo natančno izmerimo Landéjev faktor in dobimo s tem magnetni moment protona izražen v jedrskih magnetnih magnetonih.

Namesto ciklotronske frekvence protona lahko merimo ciklotronsko frekvenco elektrona v istem polju. Ta frekvenca pade pri običajnih poljskih gostotah v mikrovalovno območje. Tako dobimo magnetni moment protona izražen v Bohrovih magnetonih.

Natančno so bili izmerjeni momenti okrog 70 jeder. Nekaj najvažnejših, ki se najbolj pogosto uporabljajo v radiofrekvenčni spektrometriji, je v naslednji tabeli:

Tabela magnetnih momentov nekaterih najvažnejših jeder

Jedro	Magnetni moment v jedrskih magnetonih	Spin	Resonančna frekvenca v Mc/s pri 10 000 gaussih
H ¹	2,79270	$\frac{1}{2}$	42,577
H ²	0,85738	1	6,536
Li ⁷	3,2560	3/2	16,547
B ¹¹	2,688	3/2	13,660
F ¹⁹	2,6237	$\frac{1}{2}$	40,055
Na ²³	2,2161	3/2	11,262
Al ²⁷	3,6385	5/2	11,094
P ³¹	1,1305	$\frac{1}{2}$	17,235
Cl ³⁵	0,82089	3/2	4,172
Cl ³⁷	0,68329	3/2	3,472

Natančno merjenje magnetnega polja. Po raznih metodah moremo precej natančno določiti magnetni moment protona in s tem njegovo giromagnetno razmerje γ . Z metodo jedrske resonance se po enačbi $\omega = \gamma B$ merjenje magnetnega polja prevede na merjenje frekvence. Ta način merjenja je zelo natančen; natančnost je po navadi omejena le z nehomogenostjo polja znotraj merilne tuljave.

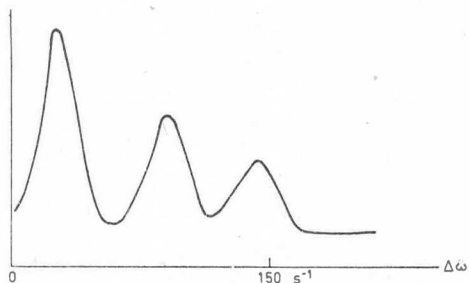
Natančna meritev magnetnega polja je potrebna za absolutno meritev energijske skale pri spektrografih za težke delce (p, d in α), pri spektrografih za delce β in pri masnih spektrografih. Signal jedrske resonance lahko izkoristimo za stabiliziranje velikih elektromagnetov za te spektrografe. Pri tem krmili ojačeni signal dodatne napajalce magnetov.

Jedrska magnetna resonančna spektrometrija ima zelo raznovrstno uporabo v kemiji in fizikalni kemiji. Stvar je preobsežna, da bi ta članek mogel podati izčrpen pregled, zato bo omenjenih le nekaj glavnih primerov.

Jedro se nahaja v sestavi molekule. Razumljivo je, da molekulske okolje vpliva na magnetno resonanco, in sicer vsaka molekula na drug način. Ker so energijske spremembe, ki so zvezane s pojavom jedrske resonance, zelo

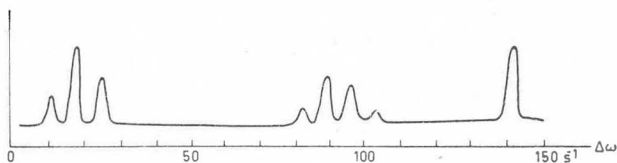
majhne, lahko zaznamo vplive najneznatnejših sprememb v molekularni strukturi in moremo dobiti mnoge podatke o preiskovani snovi.

Radiofrekvenčni spektrometer z veliko ločljivostjo uporabljamo pri tekočinah, kjer so črte zelo ozke. Eksperimentalna tehnika je precej različna za tekočine in trdne snovi. Kmalu po odkritju jedrske resonance so ugotovili, da je resonančna frekvenca malenkostno odvisna od kemične sestave spojine, ki vsebuje resonančna jedra. Ta pojav se imenuje »kemični premik«, ki pa je seveda zelo majhen in znaša pri vodiku nekaj milijonink, pri drugih jedrih pa



Sl. 6. Spekter vodikovih jedrskih resonanc etilnega alkohola $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OH}$

do 10^{-4} . Ugotovljeno je tudi, da je ta premik proporcionalen gostoti polja B_0 . Razlaga za vzrok tega pojava je v tem, da se magnetni momenti elektronov v molekuli ne kompenzirajo popolnoma. Elektronska lupina povzroča na mestu jedra magnetno polje, ki se odšteva od B_0 . Ako ima molekula več enakih resonančnih jeder, ki pa so različno kemijsko vezana (to pomeni, da je elektronsko okolje različno), je kemični premik za vsako jedro drugačen. V tekočinah, kjer je naravna širina črte zelo ozka in ki so v dovolj homogenem polju B_0 , ne bomo dobili le ene resonančne črte, ampak več. Prvi tak spekter je dobil



Sl. 7. Spekter kemijskega premika etilnega alkohola pri zvečani ločljivosti spektrografa. Zaradi sklopljenja spinov se posamezne črte razcepijo v multiplete

leta 1951 Arnold, drugega pa pri vodikovi resonančni črti etilnega alkohola (slika 6). Dobili so tri črte namesto ene, kar ustreza formuli $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OH}$. Vsaka grupa protonov da svojo črto. Ploščina pod vsako črto je približno v razmerju 3 : 2 : 1, kar ustreza številu protonov v vsaki grupi. Razmak med črtami ustreza približno 0,001 % poljske gostote B_0 , pri 5000 gaussih, torej 50 miligaussov.

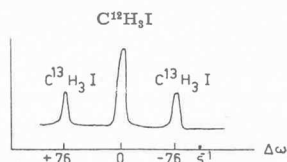
Če še nadalje zvečamo ločljivost spektrometra, se te črte še naprej razcepijo v multiplete (slika 7). Razcep ni odvisen od B_0 . Razmak črt v multipletu je velikostnega reda 1 miligauss. Vzrok je sklopljenje spinov v skupinah CH_3 in CH_2 . Število črt in relativno intenziteto spinskih multipletov moremo

izračunati le pri zelo enostavnih molekulah. Za primer multipleta zaradi sklop-ljenja spinov vzemimo $P^{31}F_3$! Fluorjeva resonanca ima obliko simetričnega dubleta, v katerem ustreza ena črta paralelni, druga pa antiparalelni orien-taciji jedra P^{31} v magnetnem polju B_0 . Fosforjeva resonanca pa je kvartet z razmerjem intenzitet 1:3:3:1. To ustreza 4 možnim komponentam rezul-tante spinov F_3 vzdolž polja B_0 , in sicer $m = -3/2, -1/2, +1/2, +3/2$.

Iz teh spektrov je mogoče dobiti mnoge podatke o strukturi molekul (zlasti organskih), ki vsebujejo H^1 , F^{19} in še nekatera druga jedra. Za primer vzemimo propilni in izopropilni alkohol! Različna struktura obeh molekul povzroči popolnoma različna spinska multipleta. Iz teh spektrov se jasno vidi možnost razlikovanja izomerov.

Jedrski magnetni spektrograf se uporablja tudi za izotopske analize. Z njim določajo procent devterija v vodi, ker je jakost signala devterija pro-porcionalna koncentraciji. Naslednja slika nam kaže nekoliko drugačno metodo (slika 8). Preizkuje se procent C^{13} v CH_3J . V spektru vodikovih jeder dobimo tri črte. $C^{12}H_3J$ da singlet (to je srednja črta na sliki), ker je spin C^{12} enak nič. C^{13} s spinom $\frac{1}{2}$ pa razcepi signal v simetričen dublet. Razmerje med ampli-tudo srednje proti vsoti stranskih črt nam daje iskano izotopsko razmerje.

Aparatura je bila principialno že opisana. Za spektrograf z veliko ločljivi-vostjo je potrebna v prvi vrsti zelo dobra homogenost magnetnega polja, kajti ravno ta določa ločljivost. Po vsej prostornini merjenja sme magnetno polje variirati kvečjemu za 0,001 gaussa, to je za $1:10^{-7}$ pri jakosti polja 5000 do



Sl. 8. Spekter kemijskega premika metilnega jodida (CH_3J). Izotop ogljika C^{13} je obogačen na približno 50 %

10 000 gaussov, ki se navadno uporablja. Zgrajeni so že spektrografi z ločljivi-vostjo $1:10^{-8}$. Da dosežejo magneti to homogenost, morajo imeti veliko raz-merje premera polov proti širini reže. Ker mora reža znašati najmanj 3 cm, nanese potem premer več kot 20 cm. Tako postane magnet velik in drag. Pri elektromagnetih je potrebna tudi stabilizacija toka s tolikšno natančnostjo. V ostalem je treba pri izdelavi paziti na absolutno gladkost in paralelnost polovih čevljev, ki morajo biti še posebno termično obdelani, da se odstranijo notranje napetosti. Seveda mora imeti tudi elektronska aparatura najmanj tolikšno stabilnost. Najbolj kritičen del je oscilator; ta mora imeti v času meritve frekvenco konstantno z boljšo natančnostjo, kot znaša homogenost polja. Zgraditi se da oscilator s stabilnostjo frekvence $1:10^9$.

Poleg merjenja strukture resonančne črte nam daje mnoge podatke tudi merjenje relaksacijskih časov T_1 in T_2 .

Spektrometer za široke črte. Za merjenje jedrske magnetne resonance pri trdnih snoveh mora aparatura ustreči drugačnim zahtevam. Črta resonančne absorpcije je široka (približno 10 gaussov). Zato ni potrebna tolikšna stabilnost in homogenost magnetnega polja. Zadostujejo tudi manjši in cenejši magneti.

Zaradi razširitve črte se jakost signala sorazmerno zmanjša in ga ne moremo več opazovati na osciloskopu, ker se skriva v šumu. Uporabljati moramo fazni detektor, ki riše odvod resonančne krivulje na rekorder. Običajno uporabljamo tu metodo z regenerativnim oscilatorjem, ki precej poenostavi elektronsko aparaturo.

Razširitev resonančne črte povzroči tu statično magnetno polje sosednjih jeder. Lokalno magnetno polje, ki ga ustvari jedro, pojema v vsaki smeri s tretjo potenco razdalje. Zato zadošča, če upoštevamo samo najbližja jedra.

Pri tekočinah je molekulsko gibanje tako, da se lokalno polje v časovnem povprečju v času ene Larmorjeve periode uniči in ne razširi črte. V kristalih ni tako, ker so amplitude nihanja atomov majhne v primeru z medsebojnimi razmaki.

Pri kristalih sklepamo iz oblike resonančne črte na lokalno polje in iz tega v enostavnejših primerih na strukturo kristala. Pri mnogih trdnih snoveh lahko grupe atomov rotirajo okrog določene osi. Frekvenca rotacije narašča s temperaturo. Z jedrsko magnetno resonanco lahko odkrivamo, kako je ta rotacija odvisna od temperature. Ko se vzbudi rotacija, se precej skokoma zmanjša širina črte. Vzrok temu je, da se lokalno polje sedaj v času spreminja in se zato časovno povprečje zmanjša. Vzbuditev rotacije včasih spremljata anomalija specifične toplote in sprememba kristalne strukture.

Literatura:

1. F. Bloch, Phys. Rev. 70, 460 (1946).
2. N. Bloembergen, E. M. Purcell, R. V. Pound, Phys. Rev. 73, 679 (1948).
3. G. E. Pake, Amer. J. Phys., 18, 438, 473 (1950).
4. E. R. Andrew, Nuclear Magnetic Resonance, Cambridge Monographs on Physics, 1956.
5. Information Technicals from the Radio-frequency Spectroscopy Laboratories of Varian Associates, Vol. 1
6. W. A. Anderson, Nuclear Magnetic Resonance Spectra of some Hydrocarbons, CERN 55—18 (1955).

ALI NI TOLE ŠE VEDNO RES?

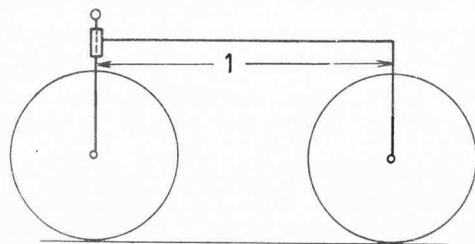
Če se dandanes zbere družba fizikov, zato da bi razpravljala o vprašanjih teoretične fizike, se bo razgovor slej ko prej zasukal v prav določeno smer. Morda si zapustil družbo, ko so se ravno pogovarjali o svojih posebnih problemih ali o najnovejših fizikalnih odkritjih. Toda če prideš uro kasneje nazaj, lahko staviš, kar hočeš, da so medtem prišli do teme, ki vselej preraste vse druge, namreč do teme o obupnem stanju lastnega neznanja.

A. S. Eddington: The nature of the Physical World. Cambridge, 1929.

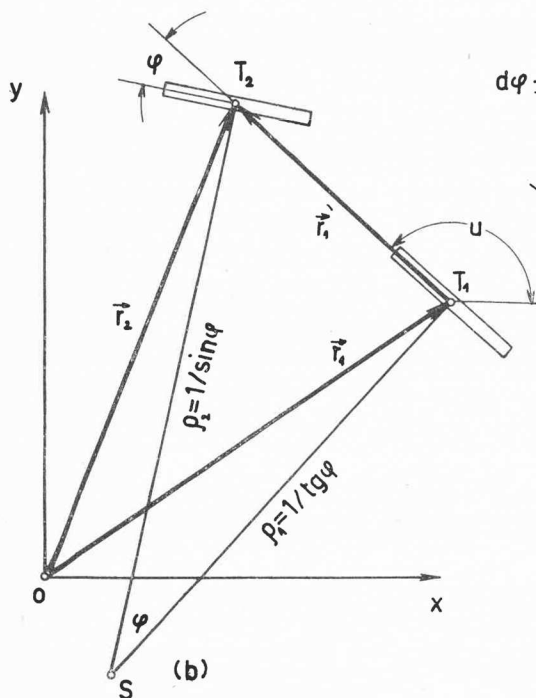
NOVICE

CESTNE KRIVINE

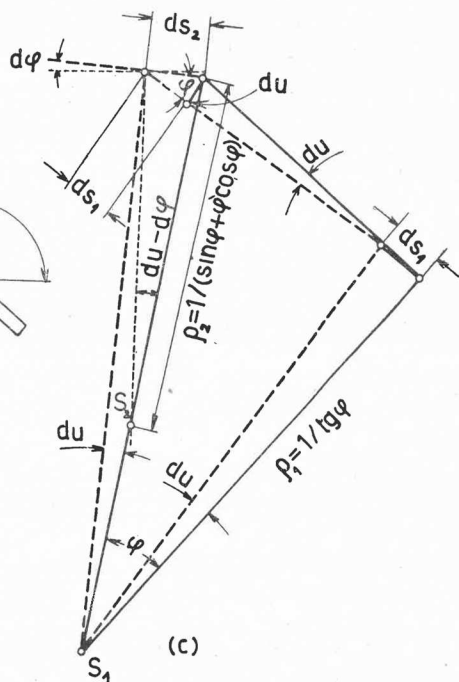
Za prehodne cestne krivine* priporočajo obliko Cornujeve spirale (klotoide)¹, pri kateri je ukrivljenost sorazmerna z ločno dolžino. Obliko prehodne krivine pa lahko določimo z bolj splošno zahtevo: podobna naj bo poti vozila, pri katerem na predpisan način sučemo krmilo. Krivulje, ki jih tako



(a)



(b)



(c)

Sl. 1. Gibanje vozila (a) pri konstantnem φ (b) in pri spremenljivem φ (c)

* Ovinek je običajno sestavljen iz osrednjega krožnega dela in prehodnih krivin.

dobimo, najbrž nimajo praktičnega pomena. Z njimi povezani računi pa utegnejo bralce zanimati.

Mislino si preprosto, biciklu podobno vozilo (slika 1 a) na cesti, ki leži v ravnini! Izberemo si takšno merilo, da znaša razdalja med osema 1 enoto. Nadalje predpostavimo, da se vozilo ne nagiba² in ne drsi.** Količinam, ki se tičejo zadnjega kolesa, damo indeks 1, onim, ki se tičejo sprednjega, pa indeks 2.

Sedaj predpišemo odklon sprednjega kolesa φ (slika 1 b) v odvisnosti od poti, ki jo preteče zadnje kolo: $\varphi = \varphi(s_1)$. Določiti hočemo krivuljo, po kateri se giblje zadnje kolo. — Če se kot φ ne spreminja, se vozilo togo vrti okrog središča S . S slike 1 b razberemo, da imata tedaj poti obeh koles radija $\varrho_1 = 1/\operatorname{tg} \varphi$ in $\varrho_2 = 1/\sin \varphi$. V primeru, ko φ ni konstanten, na napravimo z vozilom infinitezimalno majhen premik (sl. 1 c). Na osnovi slike lahko izračunamo ϱ_1 in ϱ_2 . Izkaže se, da ostane izraz za ϱ_1 nespremenjen. Ukrivljenost krivulje, ki jo opiše zadnje kolo, je torej takole odvisna od prevožene poti:

$$1/\varrho_1 = \operatorname{tg} \varphi(s_1) \quad (1)$$

Enačba, ki povezuje ukrivljenost in ločno dolžino, to je tako imenovana lastna enačba,³ že določa krivuljo. Moremo pa jo izraziti tudi v parametrični obliki. Naj bo v začetnem položaju zadnje kolo v izhodišču, sprednje pa na osi x . Potem je³

$$x_1 = \int_0^{s_1} \cos \left(\int_0^{s_1} \varrho_1^{-1} ds_1 \right) ds_1, \quad y_1 = \int_0^{s_1} \sin \left(\int_0^{s_1} \varrho_1^{-1} ds_1 \right) ds_1 \quad (2)$$

Enačbi (1) in (2) rešujeta zastavljeni problem za vsako dano odvisnost $\varphi(s_1)$. Posebej nas zanima primer, ko je hitrost zadnjega kolesa stalna in vozač enakomerno vrti krmilo. To se pravi, da je kot φ sorazmeren s potjo s_1 , torej $\varphi = ks_1$. Lastna enačba krivulje 1 se v tem primeru glasi

$$1/\varrho_1 = \operatorname{tg} ks_1 \quad (3)$$

iz enačbe (2) pa sledi

$$x_1 = \int_0^{s_1} \cos \left(\frac{1}{k} \ln \cos ks_1 \right) ds_1 = s_1 (1 - k^2 s_1^4/40 - k^4 s_1^6/168 - \dots),$$

$$y_1 = - \int_0^{s_1} \sin \left(\frac{1}{k} \ln \cos ks_1 \right) ds_1 = \frac{1}{8} ks_1^3 (1 + k^2 s_1^2/10 + \dots) \quad (3')$$

Funkciji sta smiselni na območju $-\frac{1}{2}\pi < ks_1 < \frac{1}{2}\pi$, ker kot φ ne sme narasti do pravega kota.

** Bicikli in motorna kolesa dokaj dobro izpolnjujejo postavljene pogoje. Tudi za avtomobile s pogonom na zadnja kolesa dobimo z modelom na sliki 1 dober približek, če je $d\varphi/ds_1$ majhen in če postavimo točko 1 v sredino zadnje, točko 2 pa v sredino sprednje osi.

Za majhne vrednosti ks_1 preide (3) v lastno enačbo Cornujeve spirale³

$$1/\varrho_1 = ks_1 \quad (4)$$

(3') pa v njeno parametrično izražavo

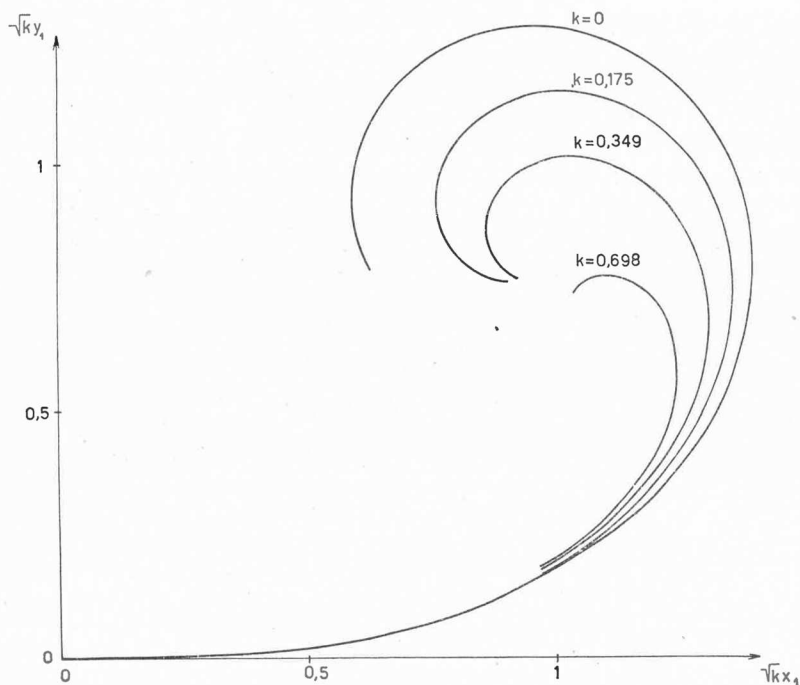
$$x_1 = \int_0^{s_1} \cos\left(\frac{1}{2} ks_1^2\right) ds_1 = \sqrt{\pi/k} C(\sqrt{k/\pi} s_1)$$

$$y_1 = \int_0^{s_1} \sin\left(\frac{1}{2} ks_1^2\right) ds_1 = \sqrt{\pi/k} S(\sqrt{k/\pi} s_1) \quad (4')$$

Oba Fresnelova integrala C in S najdemo v tabelah.⁵

V praksi se včasih uporablja kot bolj grob približek kubična parabola, ki jo dobimo, če vzamemo samo prvi člen vrst (3').

*



Sl. 2. Krivulje (3) za razne k

Zaradi lažje medsebojne primerjave krivulj sta kot koordinati na sliki vpeljana $\sqrt{k}x_1$ in $\sqrt{k}y_1$ namesto x_1 in y_1 . Krivulje so dobljene z grafično integracijo, ki je splošno uporabna, če je znana naravna enačba. Najprej za ne prevelik s_1 z vrstama (3') izračunamo x_1 in y_1 in še $\tan u = dy_1/dx_1$. Od tu potegnemo s šestilom 10° dolg kos krivinskega kroga, ki smo mu iz (3) izračunali polmer. V končni točki tega loka izračunamo novi vrednosti s_1 in ϱ_1 ter podaljšamo krivuljo z 10° dolgim lokom novega krivinskega kroga itd. Postopek je skoraj trikrat hitrejši kot numerična integracija. Preizkušnja pri Cornujevi spirali (enačba 4, krivulja $k=0$ na sliki) in primerjava s tabelami⁵ kaže, da je v tem primeru napaka grafične integracije v odseku na sliki dosegla največ 3%.

Do istih rezultatov pa pridemo tudi po naslednji, bolj abstraktni poti. Ugotovimo, da veljajo za krajevna vektorja $\mathbf{r}_1$ in $\mathbf{r}_2$ in njuna odvoda $d\mathbf{r}/ds_1 = \mathbf{r}'$ naslednje enačbe:

$$|\mathbf{r}_1'| = 1, \quad \mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1 = \mathbf{r}_1', \quad |\mathbf{r}_2'| = 1/\cos \varphi$$

Prva je trivialna, drugo razberemo s slike 1 a. Da dobimo tretjo, pa moramo najprej kvadrirati in nato odvajati drugo enačbo, kar da $\mathbf{r}_1' \cdot \mathbf{r}_2' = 1$. Ker oklepata $\mathbf{r}_1'$ in $\mathbf{r}_2'$ kot φ , je obenem $\mathbf{r}_1' \cdot \mathbf{r}_2' = |\mathbf{r}_1'| \cdot |\mathbf{r}_2'| \cos \varphi$, tako da je res $|\mathbf{r}_2'| = 1/\cos \varphi$.

Z dano funkcijo $\varphi(s_1)$ in danima vektorjema $\mathbf{r}_1(0)$ in $\mathbf{r}_1'(0)$, ki opisujeta začetno lego in smer vozila, izrazimo krivulji $\mathbf{r}_1(s_1)$ in $\mathbf{r}_2(s_1)$ takole:

$$\mathbf{r}_1(s_1) = \mathbf{r}_1(0) + \int_0^{s_1} \mathbf{r}_1' ds_1$$

$$\mathbf{r}_2(s_1) = \mathbf{r}_1(s_1) + \mathbf{r}_1'(s_1)$$

Smerni vektor $\mathbf{r}_1$ in njegova začetna vrednost $\mathbf{r}_1'(0)$ sta povezana z ortogonalno transformacijo⁴

$$\mathbf{r}_1' = \begin{vmatrix} \cos u & -\sin u \\ \sin u & \cos u \end{vmatrix} \mathbf{r}_1'(0)$$

kjer je u kot med $\mathbf{r}_1'(0)$ in $\mathbf{r}_1'$, torej kot, za katerega se je vozilo zasukalo. Za u velja diferencialna enačba $u' = \tan \varphi$. To dobimo z računom v komponentah, vendar lahko zadnjo enačbo preberemo kar s slike 1 c. Iskani kot u je potem

$$u = \int_0^{s_1} \tan \varphi ds_1$$

Za izbrani primer $\mathbf{r}_1(0) = (0, 0)$ in $\mathbf{r}_1'(0) = (1, 0)$ sledi

$$\mathbf{r}_1 = (x_1, y_1) = \left(\int_0^{s_1} \cos u ds_1, \int_0^{s_1} \sin u ds_1 \right)$$

$$\mathbf{r}_2 = (x_2, y_2) = (x_1 + \cos u, y_1 + \sin u)$$

Z znano formulo⁴ dobimo končno obe ukrivljenosti

$$1/\rho_1 = \tan \varphi \quad \text{in} \quad 1/\rho_2 = \sin \varphi + (d\varphi/ds_1) \cos \varphi = \sin \varphi + d\varphi/ds_2.$$

Janez Strnad

(Fizikalni inštitut univerze, Ljubljana)

Literatura:

1. B. Žnideršič: Priručnik za polarno iskolčevanje prelaznih krivina u obliku klotoide. Izd. pred. min. građ. FNRJ, Beograd 1949.
2. Handbuch der Physik, Band V. Springer, Berlin 1927, str. 556 (o nagibanju in stabilnosti bicikla).
3. O. Sajovic: Oblikovanje togih krivuljnikov. Obz. mat. fiz. **2**, 107 (1952).
4. I. Vidav: Višja matematika, I. del. DZS, Ljubljana 1948, str. 94, 501.
5. Jahnke-Emde: Tafeln höherer Funktionen. Teubner, Leipzig 1948.

MEDNARODNI FIZIKALNI KOLOKVIJI V LETU 1959

Pod pokroviteljstvom Internacionalne unije za fiziko bodo v tem in prihodnjem letu naslednji sestanki in kolokviji:

Kraj	Verjetni datum	Predmet	Organizator
Cambridge Anglija	29. junija do 3. julija 1959	Supraprevodnost	Prof. D. SCHÖNBERG, Mond Laboratory, Cambridge
Pariz	konec junija 1959	Teorija gravitacije	Institut H. Poincaré, 11 rue P. Curie, 5 ^o
Moskva	v začetku julija 1959	Jedrska fizika visokih energij	Akademija nauk SSSR ter prof. B. ROSSI, M. I. T. Cambridge, Mass.
Moskva	konec julija 1959	Kozmični žarki	Akademija nauk SSSR ter prof. R. E. MARSHAK, University of Rochester, N. Y.
Stockholm	24.—29. avgusta 1959	Moderne priprave za detekcijo in merjenje svetlobe	Prof. E. INGELSTAM, Institutionen for Fysik, Kungl. Techniska, Hogskolon, Valhallavägen, Stockholm
Stuttgart	2.—3. septembra 1959	Akustika	Prof. C. W. KOSTEN, Mijnbouwplein 11, Delft, ter dr. MEYER, Bürgerstrasse, Göttingen
Ženeva	septembra 1959	Akceleratorji	C. E. R. N., Genève
Utrecht	12.—16. junija 1960	Termodinamika	Prof. VAN HOVE, Universite, Utrecht
Kingston (Ontario)	29. avgusta do 3. septembra 1960	Struktura jeder	Dr. L. C. ELLIOT, Atomic Energy, Chalk, River
Toronto (Ontario)	29. avgusta do 3. septembra 1960	Zelo nizke temperature	Prof. A. C. G. HALLETT, University of Toronto
Hamilton (Ontario)	29. avgusta do 3. septembra 1960	Atomske mase izotopov	Mr. F. E. DUCKWORTH, McMaster, University, Hamilton
Praga	Datum bo določen kasneje	Polprevodniki	Československa akademija věd
Bruxelles	Datum bo določen kasneje	Tanke kovinske plasti	Académie des Sciences Belge
Basel	Datum bo določen kasneje	Fizika nevtrona	Prof. P. HUBER, Klingerbergstrasse 82, Basel
Rochester (N. Y.)	Datum bo določen kasneje	Fizika visokih energij	

Prihodnja generalna skupščina Internacionalne unije za fiziko bo v Ottawi od 7. do 9. septembra 1960.

Internacionalna unija za čisto in uporabno fiziko, 3, Bd. Pasteur, Paris, 15^e

DOMAČE VESTI

XII. PLENUM ZVEZE DRUŠTEV MATEMATIKOV IN FIZIKOV FLRJ

Dne 23. septembra tega leta je v Prištini zasedal XII. plenum Zveze društev matematikov in fizikov FLRJ. Na dnevnem redu so bila poročila izvršnega odbora in komisij Zveze, poročila o delu republiških društev, poročilo blagajnika in predlog proračuna za leto 1959, poročila o izdajateljski delavnosti Zveze in društev, informativna referata o vprašanju reforme pouka matematike in fizike ter določitev datuma, kraja in vsebine III. kongresa matematikov in fizikov Jugoslavije.

Poročila izvršnega odbora in komisij Zveze ter uredniških odborov časopisov so obsegala v kratkih potezih sledeče glavne momente: Odbor je sklenil, da bo oktobra tega leta v Zagrebu sestanek komisije za pouk matematike in fizike, na katerem bo predmet razprave učni načrt matematike in fizike v srednji šoli; dnevni red bo torej posvečen temu, kar naj da vsebino novemu karakterju naše šole. — Komisija za organizacijo znanstvenega dela in zveze z inozemstvom je preteklo leto v decembru organizirala v Beogradu uspel simpozij iz diferencialnih enačb, na katerem je bilo 6 referatov znanih inozemskih strokovnjakov in 9 referatov naših članov. To gradivo bo tiskano v naslednji številki Vesnika. — Časopis Matematičko-fizički list redno izhaja, se je lepo uveljavil pri svojih čitateljih in se je materialno popolnoma osamosvojil. Sedaj ima 13 540 naročnikov. Število naročnikov v naši republiki se je sicer v zadnjem letu dvignilo za 289, toda še vedno znaša le nekaj nad 5 % vseh naročnikov. — Pri Nastavi pa se društvom in Zvezi še ni posrečilo, da rešijo vprašanje, kako bi pridobili širši krog stalnih sodelavcev, kako bi si zagotovili potrebna materialna sredstva za redno izhajanje in povečali število čitateljev. — Gradivo za knjigo Nastava matematike i fizike u Jugoslaviji bo izročeno tiskarni ob koncu tega leta, tako da bo knjiga dotiskana do III. kongresa. — Da bi omogočila članom strokovno in pedagoško izpopolnjevanje, je Zveza tudi letos organizirala posvetovanje za učitelje in profesorje srednjih šol in to v Prištini od 24. do 27. septembra. Gradivo tega seminarja bo izšlo v eni prihodnjih številok Nastave. — Da bi izdala celotna dela naših vidnejših matematikov, je komisija za znanstveno delo že pričela z izborom in urejanjem glavnih del M. Petrovića. Zveza priporoča in prosi vsa republiška društva, da prično s pripravami za izdajo del ostalih, že predlaganih matematikov.

Po poročilih in po razgovoru o njih je bilo ugotovljeno in sklenjeno tole: Zaradi pravilnega vodenja kadrovske politike in povečanja števila članov naj vsa republiška društva zberejo podatke o matematikih in fizikih v vseh vrstah zaposlitev. Neorganizirani so še zlasti tisti fiziki, ki so zaposleni v raznih inštitutih in v industriji. — Sistematično je treba seznanjati našo javnost z različnimi oblikami dela, z aktivnostjo in z uspehi naših društev ter tako doseči večji vpliv naše organizacije v današnji družbi. — Plenum ugotavlja veliko aktivnost naših društev v vprašanju strokovnega in pedagoškega izpopolnjevanja članov, priporoča pa, da bi se v prihodnje seminarji in druge takšne delavnosti za delo bolj povezali z obstoječimi zavodi za napredek pouka in šolstva; nadalje priporoča nove simpozije z različnih področij matematike in fizike. — Organizacija krožkov in tekmovanj učencev srednjih šol obsega vedno večje število naših prosvetnih središč; dosedanje izkušnje je treba izmenjati. —

Z zakonom o organizaciji znanstvenega dela so ustvarjeni pogoji za pravilno reševanje vrste vprašanj, ki so v prid našim organizacijam; zato je potrebno sodelovanje naših društev s sveti za znanost. — Po republikah naj se s pomočjo komisije za organizacijo znanstvenega dela izvrši bibliografska dokumentacija del vseh matematikov in fizikov. — Komisija za pouk matematike in fizike na vseučiliščih naj organizira v najkrajšem času s predstavniki vseh naših društev v Ljubljani razširjeni sestanek, ki naj ima na dnevnem redu važna vprašanja naših univerz: učna načrta iz matematike in fizike ter organizacijo in izvajanje postdiplomskega študija; vsa republiška društva naj pripravijo referate. — Z organizacijami, ki izdajajo časopise za učitelje in profesorje srednjih šol, je treba izdelati konkreten predlog za republiške in okrajne svete za prosveto, kako pridobiti med naročnike časopisov vse šole, biblioteke itd. — Treba je koordinirati in izmenjati načrte za izdajateljsko delavnost med društvi ter vzpostaviti sodelovanje z ustreznimi zavodi. — Izvršni odbor naj si prizadeva preko Zveznega sveta za znanost, da bo ustanovljena tiskarna z matematičnim stavkom, kar bi omogočalo izdajanje matematične literature.

Na osnovi informativnih referatov o stanju in pripravi, ki so do sedaj izvršene za reformo pouka matematike in fizike, je bilo sklenjeno, da je treba na sestanku komisije v Zagrebu postaviti na dnevni red tudi vprašanja o uvedbi astronomije v srednje šole in izvedbi akcije za enotne učbenike za vse republike.

V zvezi s III. kongresom je bilo sklenjeno, da bo kongres od 14. do 19. septembra 1959 v Beogradu; da bodo na kongresu plenarni sestanki posvečeni delu Zveze in, če bo potrebno, vprašanjem reforme pouka; da se naj delo kongresa odvija po sekcijah, med katerimi naj bo tudi sekcija za pouk; da se organizirajo enourna in polurna predavanja, posvečena aktualnim širšim vprašanjem posameznih področij, za katera bodo naprosili tudi inozemske strokovnjake; da se v okviru kongresa organizira simpozij, posvečen vprašanjem matematične vzgoje in pouka matematike. Ta simpozij bi moral razvijati in obdelati ideje, poudarjene na mednarodnem matematičnem kongresu v Edinburgu, ter jih prenesti na naše razmere in konkretizirati za potrebe naših šol v reformi, ki se pri nas uvaja; da se že pred kongresom tiskajo povzetki referatov; da se društva že sedaj pobrigajo, kako bi omogočila udeležbo na kongresu kar največjemu številu profesorjev in predmetnih učiteljev. Stroške naj nosijo društva, šole, ustanove, občine in okraji.

Jože Povšič

OBČNI ZBOR DRUŠTVA MATEMATIKOV IN FIZIKOV LRS

Društvo matematikov in fizikov LRS je imelo redni občni zbor dne 25. oktobra 1958 na poljanski gimnaziji v Ljubljani. O delu v pretekli poslovni dobi so poročali predsednik in vodje posameznih sekcij.

Društvo šteje 362 članov in je vzdrževalo redne stike z Zvezo društev matematikov in fizikov FLRJ v Beogradu. Delo društva je bilo organizirano po sekcijah.

Lepé uspehe je dosegla lani osnovana sekcija za popularizacijo. Za ljubljanske srednješolce je organizirala matematične krožke, ki so se jih dijaki z zanimanjem in v velikem številu udeleževali. Izvedla je tekmovanje ljubljanskih višješolcev v matematiki. K dejavnostim te sekcije je šteti tudi izdajanje matematične knjižnice, ki bo skrbela za širjenje matematične izobrazbe. Z založbo Mladinska knjiga je bil v tem smislu sklenjen dogovor in so prvi rokopisi že v tiskarni.

Srednješolski aktiv je prirejal mesečno sestanke s predavanji; ekskurzija v maju je vodila udeležence v Šoštanj in v Velenje, kjer so si ogledali termoelektrarno in rudnik.

Sekcija za tisk je izdajala Obzornik za matematiko in fiziko. Zaradi obremenjenosti tiskarne je list v zaostanku, uredniki pa želijo tudi več prispevkov. Število naročnikov se je ustalilo na približno 950.

Bibliografska sekcija je sodelovala s sestavki pri Slovenskem biografskem leksikonu in posredovala podatke o naših starejših matematikih ruskim zgodovinarjem matematike.

Društvo je dobilo podporo pri Svetu za kulturo in prosveto LRS, pa tudi pri Svetu za šolstvo OLO Ljubljana, ki je kril stroške srednješolskih krožkov.

Diskutanti so naglašali, da je treba v bodoče pri društvnem delu dati več poudarka fiziki. Osnovali naj bi se fizikalni krožki za srednješolce. Poživiti bi bilo treba delovanje nekaterih komisij in spet začeti z javnimi predavanji.

V novi upravni odbor so bili izvoljeni: dr. A. Vadnal, predsednik; dr. I. Vidav, podpredsednik; J. Grasselli, tajnik; F. Plevnik, blagajnik; kot odborniki pa: F. Ahlin, dr. F. Dominko, dr. F. Križanič, dr. I. Kuščer, J. Povšič, N. Prijatelj, V. Rupnik, I. Štalec, F. Šušteršič, G. Tomšič, S. Uršič. V nadzorni odbor so bili izvoljeni: F. Čemažar, M. Potiskova, O. Sajovic. Častno razsodišče bodo tvorili I. Molinaro, dr. A. Peterlin, dr. A. Vakselj.

J. Grasselli

KROŽKI IZ MATEMATIKE

Društvo matematikov in fizikov LRS je priredilo tudi v letošnjem šolskem letu krožke iz matematike za dijake vseh ljubljanskih srednjih šol. Z delom smo pričeli 4. novembra in zaključili konec decembra 1958. V teh osmih tednih so dijaki poslušali naslednja predavanja z vajami: Niko Prijatelj — Popolna indukcija; Milan Ziegler — Metoda nedoločenih koeficientov; dr. Alojzij Vadnal — Linearno programiranje; dr. France Križanič — Eksponentna funkcija v matematiki in v fiziki; dr. Ivan Vidav — Evklidov algoritem in verižni ulomki; France Ahlin — Polarni koordinatni sistem in spirale; Jože Grasselli — Kongruenca števil.

Tečaj se je vršil dvakrat tedensko, in sicer ob torkih in ob petkih zvečer. Število udeležencev je bilo kar primerno, čeprav se mnogi niso mogli udeleževati krožka zaradi tedenske menjave šolskega pouka in drugih obveznosti. Povprečna tedenska udeležba je bila 60 dijakov. Od teh jih je bilo največ s IV. gimnazije (22) in s III. gimnazije (13), manj z ostalih ljubljanskih gimnazij in strokovnih šol. Največ udeležencev je bilo iz 2. in 3. razreda gimnazij ali strokovnih šol. Zelo malo jih je bilo letos iz 1. in 4. razreda.

Kakor lani, je tudi letos prevzela pokroviteljstvo nad krožki Naravoslovna fakulteta, ki nam je dala na razpolago prostore.

Kratko razlago predavanj in vaje bo društvo razmnožilo in skripta razdelilo med udeležence.

Podobne krožke namerava društvo organizirati tudi v drugih večjih krajih Slovenije. Prvo ali drugo nedeljo v mesecu aprilu pa bo priredilo tekmovanje najboljših dijakov-matematikov iz vseh gimnazij in strokovnih šol v Sloveniji. Tekmovanje bo po razredih, naloge bodo predvsem iz snovi 2. semestra lanskega leta in 1. semestra tekočega šolskega leta. K tekmovanju se lahko prijavi vsak redni dijak gimnazije ali strokovne šole. Najboljši dijaki bodo nagrajeni. Podrobna navodila bodo prejele tudi posamezne šole.

Stanko Uršič

NOVE KNJIGE

MATEMATIČKA BIBLIOTEKA

D. S. Mitrinović: Savremene tendencije u nastavi matematike. Matematička biblioteka 1. Beograd 1957. Strani 31.

Kvalifikacioni ispit iz matematike. Redigiral D. Mihailović. Matematička biblioteka 2. Beograd 1957. Strani 70.

D. S. Mitrinović: Referati o srednješkolskim udžbenicima iz matematike. Matematička biblioteka 3. Beograd 1957. Strani 98.

D. S. Mitrinović: Metod matematičke indukcije. Matematička biblioteka 4. Beograd 1957. Strani 46.

Navedene brošure so prvi štirje zvezki iz zbirke Matematička biblioteka, ki jo je začela lani izdajati katedra za matematiko na elektrotehniški fakulteti univerze v Beogradu. Namen te zbirke je, obravnavati v posameznih majhnih zvezkih problematiko iz metode, zgodovine in filozofije matematike. Program je zasnovan široko in zajema tudi nekatera področja sodobne matematike, kakor so to elementi topologije, moderna algebra, matrični račun itd. Zgodovinska dela naj bi obravnavala tudi jugoslovanske matematike. Med drugim bo en zvezek posvečen življenju in delu prof. dr. J. Plemlja. Vse knjižice iz te zbirke bodo pisane na znanstveni višini, vendar tako, da bodo razumljive čim širšemu krogu bralcev, predvsem srednješolcev.

Prva brošura govori o današnjih težnjah, in sicer doma in po svetu, da bi organizirali in reformirali pouk matematike na srednjih šolah tako, da bi ustrezal zahtevam sodobnega časa. Bralec bo iz nje zvedel o stanju pcuka in poizkusih modernizacije v najpomembnejših državah: ZDA, Sovjetski zvezi, Angliji, Franciji, Nemčiji in Italiji. V tej zvezi so zanimive izjave in mnenja raznih vodilnih matematikov, predvsem francoskih.

Druga brošura vsebuje analizo sprejemnih izpitov, ki so bili jeseni leta 1956 na raznih tehniških fakultetah v Beogradu. Naloge na teh izpitih so izbrali v glavnem iz teoretične matematike. Precej so zastopane enačbe, med njimi trigonometrične enačbe. Ni pa uporabnih nalog (problemov). Uspehi (bolje neuspehi) teh izpitov so bili porazni: Na elektrotehniški fakulteti je n. pr. komisija pozitivno ocenila le 40 kandidatov od skupnega števila 411 prijavljenih.

Problem učbenikov je tudi pri nas v Sloveniji pereč. Napisati dober srednješolski učbenik je morda v nekaterih ozirih lažje kakor kako znanstveno razpravo, v mnogo ozirih pa gotovo težje. V tretji brošuri so referati D. S. Mitrinovića o nekaterih srednješolskih učbenikih iz matematike, ki se uporabljajo v LR Srbiji. To so referati o knjigah M. Živkovića, N. Čepinca, A. Bilimovića in T. Andželića, nadalje o zbirki nalog za višji tečajni izpit B. Derasimovića in logaritemskih tablicah V. V. Milkovića.

Popolna indukcija je važno dokazovalno sredstvo v matematiki. Šele z njo lahko dokažemo osnovne lastnosti vsote in produkta pri naravnih številih in še mnogo drugih težjih formul. Četrta brošura je posvečena tej metodi. Avtor najprej razloži bistvo popolne indukcije in razliko med njo in empirično indukcijo. Nato obravnava nekatere probleme, ki jih je moč rešiti s to metodo, med njimi dokaz binomske formule. Na koncu so še zgodovinski podatki, Peanovi aksiomi naravnih števil in tabela praštevil do 6 000. Knjižica je razumljiva vsem srednješolcem v zadnjih razredih in jim jo zato priporočam.

Vse štiri knjižice so natisnjene v latinici.

I. Vidav

Franc Kvaternik, Fizika za višje razrede I, II, III

Vzrok za slabe uspehe pri pouku fizike v višjih razredih gimnazije je brez dvoma tudi v tem, da dijaki vsa povojna leta niso imeli na razpolago dovolj učbenikov. Zato so bile omenjene tri težko pričakovane knjige nad vse toplo sprejete. Prva dva dela, eden obravnava mehaniko, drugi kaloriko, nihanje, valovanje, akustiko in optiko, sta izšla že pred dobrim letom. Tretji del, elektrika in atomistika, je izšel pred kratkim.

Snov je razdeljena po še veljavnem učnem načrtu, ter obsega preko 600 strani, okrog 1000 slik in tabel. Avtor se drži dosledno vrstnega reda: eksperiment, razlaga fizikalnih zakonitosti, njihova uporaba in vaje. Zbirka eksperimentov je bogata ter ne zahteva preveč kompliciranih aparatov.

V težnji, da bi bila snov čim bolj razumljiva, pa je razlage ponekod kar preveč. Izostali bi lahko n. pr. podrobni opisi nekaterih poskusov, pri katerih takoj vidimo, za kaj gre. Nekateri štvari se ponavljajo. Strmina, po novem klanec, je v prvi knjigi kar na sedmih mestih. Tako imenovani Hookov zakon je obdelan v prvi knjigi, nato pa še enkrat v drugi knjigi pred nihanjem. Za vsak optični aparat bi bila dovolj slika, pri kateri je oko akomodirano na neskončnost. Konstrukcija navidezne slike predmeta ni v teh primerih prav nič važna, ker jo lahko narišemo kjerkoli med normalno vidno razdaljo in neskončnostjo, odvisno od tega, kako naj se oko akomodira.

Čas učinkovanja sile ne spada k podatkom o sili. Mesto prirastka hitrosti pri pospešku bi bila dovolj samo sprememba hitrosti. Sil si ne predočamo s puščicami, temveč z daljicami, ki jim na enem koncu narišemo puščico. Masa je v Giorgijevem sistemu osnovna količina, zato je treba stavke: »Masa je količina za množino snovi« in »Masa je mera za vztrajnost« razumeti kot opisovanje mase in ne kot definicijo.

Pri splošnem plinskem zakonu ne bi bilo treba računati najprej s specifično plinsko konstanto, dovolj je, če dijaki znajo uporabljati eno obliko splošnega plinskega zakona in sicer ono, ki je najbolj enostavna in uporabna. V izvajanju Avogadrovega zakona ni nikjer povedano, zakaj sta kinetični energiji molekul dveh različnih plinov pri navedenih pogojih enaki. S tem seveda izgubi omenjeno izvajanje svoj smisel.

Pri Meissnerjevem stiku je omenjen vrtilni kondenzator s kapaciteto $15 \mu\text{F}$. Verjetno je mišljena kakšna kondenzatorska baterija, pri kateri z vrtenjem ročice spreminjamo kapaciteto.

Gornje pripombe pa so kljub vsemu le malenkosti, ki ne vplivajo na vrednost celotnega dela. Še posebej je treba pohvaliti elektriko, v kateri avtor na zelo prijeten način vpelje električne enote. Prav tako je v tem učbeniku prvič zbrano vse gradivo iz atomske fizike, ki je za to stopnjo primerno. Škoda je le, da vsega, kar je v teh knjigah, ne bo mogoče obdelati že v srednji šoli. V zagovor našim dijakom je treba povedati, da je fizika le eden od desetih vsaj formalno enakovrednih predmetov. Če bi imeli za vsak predmet tako obsežne učbenike, bi morali dijaki v zadnjih treh letih predelati in znati ogromno gradivo kakih 6000 strani. Zlasti težko bo natančno predelati III. del, saj je k tej tvarini potrebnih ogromno eksperimentov in vaj, na koncu leta pa bi moralo ostati nekaj časa tudi za pregledno ponavljanje cele fizike.

Franc Plevnik

ODGOVORI

UPOR SATELITA

(Odgovor na vprašanje 1 iz VI. letnika)

Ker je zrak tako redek, se gibljejo molekule pred trkom s kroglo ravno tako, kot če krogle ne bi bilo. Po trku pa odletijo daleč stran in jih ni treba več upoštevati. Če je več vrst molekul, je treba za vsako poznati maso (m) in število v enoti prostornine (n). Računali bomo kar za eno vrsto, ker je račun za vse enak. Gostota plina je $\varrho = nm$ (ali splošno $\varrho = \sum n_i m_i$).

Problem je zelo olajšan, če je temperatura zraka dovolj nizka; potem lahko temperaturno gibanje molekul zanemarimo. Krogla pometa mirujoče molekule. Če ima polmer r in leti s hitrostjo v_0 , pomete na sekundo $n \pi r^2 v_0$ molekul. Ne vemo pa natančno, kakšni so trki molekul s satelitom. Oglejmo si zato le tri idealne primere!

1. Pri popolnoma plastičnem trku molekule obtičijo na krogli (plin se adsorbira). Vsaka molekula da sunek mv_0 , torej upor, ki je enak vsoti vseh sunkov na sekundo: $F = nmv_0^2 \pi r^2$, torej

$$F = \varrho v_0^2 \pi r^2 \quad (1)$$

Lahko rečemo, da je koeficient upora $c = 2$, če pišemo $F = c \cdot \frac{1}{2} \varrho v_0^2 \cdot \pi r^2$.

2. Naj bo trk idealno prožen, površje krogle pa tudi v molekulskih izmerah gladko. Opazujmo rajši v sistemu, ki se giblje s satelitom! V njem krogla miruje, molekule pa ji letijo nasproti s hitrostjo v_0 . V smer, iz katere prihajajo molekule, naj kaže iz srede krogle os z . Po trku odleti vsaka molekula od satelita s hitrostjo v_0 , a s smerjo, ki oklepa z osjo z kot 2ϑ , če je ϑ kot med osjo z in polmerom, ki sega v točko trka na površju krogle. Na krogelni pas med ϑ in $\vartheta + d\vartheta$ prileti vsako sekundo $nv_0 dS \cos \vartheta$ molekul, kjer je $dS = 2\pi r^2 d(\cos \vartheta) =$ površina pasu. Za kolikor spemeni molekula pri trku svojo gibalno količino, tolikšen sunek da satelitu. K upor prispeva le komponenta tega sunka v smeri osi z . Vsaka molekula, ki zadene omenjeni pas, spremeni komponento gibalne količine v smeri osi z za $mv_0 (1 + \cos 2\vartheta)$. K upor prispevajo pasovi vse prednje polkrogle. Torej je

$$F = 2nmv_0^2 \pi r^2 \int_0^1 (1 + \cos 2\vartheta) \cos \vartheta d(\cos \vartheta).$$

Integral ima vrednost $\frac{1}{2}$, tako da je

$$F = \varrho v_0^2 \pi r^2 \quad (2)$$

To je ravno toliko kot pri popolnoma plastičnem trku.

3. Naj bo trk idealno prožen, a vzemimo, da je površje krogle hrapavo in da se molekule odbijajo tako kot svetloba na hrapavi ploskvi (Lambertov zakon)! Hitrost molekule po trku pa naj bo tudi zdaj v_0 .

Mislmo si najprej, da padajo molekule na ravno ploskev in izračunajmo povprečje gibalne količine, ki jo imajo molekule po trku! Smer tega povprečja je normalna na ploskvi. Verjetnost, da se odkloni molekula za kot, ki je med θ in $\theta + d\theta$, je $2 \cos \theta d(\cos \theta)$ (primerjaj podobne račune v optiki, v zvezi z Lambertovim zakonom!). Povprečna gibalna količina po odboju je torej

$$\int_0^1 mv_0 \cos \theta \cdot 2 \cos \theta d(\cos \theta) = \frac{2}{3} mv_0.$$

Vzemimo spet molekulo, ki trči ob kroglo v točki, ki je določena s polarnim kotom ϑ ! Komponenta gibalne količine v smeri osi z se spremeni za $mv_0 + \frac{2}{3}mv_0 \cos \vartheta$. Z integracijo pa sprednji polkrogli dobimo upor: $F =$

$$= 2nmv_0^2 \pi r^2 \int_0^1 (1 + \frac{2}{3} \cos \vartheta) \cos \vartheta d(\cos \vartheta), \text{ torej}$$

$$F = \frac{1}{9} \rho v_0^2 \pi r^2 \quad (3)$$

Koeficient upora je sedaj $c = \frac{2}{9}$.

Pričakovati smemo, da je rezultat (3) nekoliko previsok; saj trk ni idealno prožen. Nekaj razpoložljive energije v težiščnem sistemu gre v toploto. Spomnimo se, da satelit zažari, če je molekul dovolj! Rezultat (2) pa tudi ni dober; saj površina za molekule ni idealno gladka. Zgornje poenostavitve so torej precej hude; spričo tega smo gibanje molekul pri zmerni temperaturi in pri hitrosti satelita po več kilometrov na sekundo lahko brez škode zanemarili.

Bojan Povh

Dodatno vprašanje. Kolikšen pa je upor krogle v razredčenem plinu, kadar njena hitrost ni velika v primeri s povprečno hitrostjo molekul? Prikaže koeficient upora kot funkcijo Machovega števila!

DOPISI

AMPLITUDA SVETLOBNEGA VALOVANJA

V šoli zvedo dijaki, da je svetloba valovanje in da je to elektromagnetno valovanje. Ali ne bi bilo dobro tudi povedati, približno kolikšne so amplitude tega valovanja, na primer pri svetlobi, kakršno rabimo za razsvetljavo? Recimo, da meri gostota svetlobnega toka 100 luksov!

S. Ž.

Zaznamujmo amplitudo električne poljske jakosti z E_0 , magnetne poljske gostote pa z B_0 ! Tam, kjer sta obe količini ravno maksimalni, je gostota energije enaka $\frac{1}{2} \epsilon_0 E_0^2 + (1/2 \mu_0) B_0^2$. Zapisali smo ϵ_0 in μ_0 , kar velja za vakuum, približno pa tudi za zrak. Iz Maxwellovih enačb se da razbrati, da sta oba člena v tej vsoti enako velika, tako da je maksimalna gostota energije tudi enaka $\epsilon_0 E_0^2 = (1/\mu_0) B_0^2$. Povprečna gostota energije je pri sinusnem valovanju le pol tolikšna (primerjaj račun povprečne moči pri sinusnem izmeničnem toku!), torej enaka $\frac{1}{2} \epsilon_0 E_0^2 = (1/2 \mu_0) B_0^2$. Gostoto svetlobnega toka dobimo iz tega, če izračunamo energijo, ki pride v 1 sekundi skozi 1 m² velik okvir:

$$j = \frac{1}{2} c \epsilon_0 E_0^2 = (c/2 \mu_0) B_0^2.$$

Iz teh enačb lahko izračunamo amplitudi E_0 in B_0 , če je gostota svetlobnega toka podana v energijskem merilu (v wattih na m²). Podatek v fiziološkem merilu (v luksih) pa ne zadošča, ampak bi bilo treba še povedati valovno dolžino svetlobe, kajti razmerje med enotama luks in W/m² je za različne valovne dolžine različno. Denimo, da imamo svetlobo z valovno dolžino 5550 Å, pri katerih je oko najbolj občutljivo! Tu je 1 W = 640 lumnov, tako da ustreza 100 luksom gostota energijskega toka $j = 0,156 \text{ W/m}^2$. Tedaj je

$$E_0 = \sqrt{2j/c \epsilon_0} = 10,8 \text{ V/m}, \quad B_0 = E_0/c = 3,6 \cdot 10^{-8} \text{ Vs/m}^2.$$

I. K.

Iščemo fizike!

Sprejememo več fizikov za delo v razvojnih laboratorijih in proizvodnji v redno ali honorarno zaposlitev, s polnim ali s skrajšanim delovnim časom. V poštev pridejo tudi študentje zadnjih letnikov in absolventi. Plača po dogovoru.

Delovna področja: Proizvodnja GM števecov, razvoj polvodnikov, razvoj magnetnih materialov, električne in fizikalne meritve na radijskih sestavnih delih, razvoj visokofrekvenčne keramike itd.

Zaradi dogovora se čimprej zglasite v Razvojnem sektorju Industrije za elektrozveze, Ljubljana, Vegova 2, tel. 22-675!

INDUSTRIJA ZA ELEKTROZVEZE LJUBLJANA

UREDNIŠTVO JE PREJELO V ZAMENO

- Bulletin scientifique, Zagreb 1958, Tome 4, No. 2.
Elektrotehniški vestnik, Ljubljana 1958, št. 7—8.
Farmaceutski vestnik, Ljubljana 1958, št. 5, 6.
Fotokemijska industrija, Zagreb 1958, št. V/3, V/4.
Glasnik mat.-fiz. i astr., Zagreb 1958, T. 13, No. 2, 3.
Gospodarski vestnik, Ljubljana 1958, št. 84—100, 1959, št. 1—15.
Idrijski razgledi, Idrija 1958, št. 3.
Matematičko fizički list, Zagreb 1958—59, št. 2.
Philip's Technische Rundschau, Eindhoven 1958/59, No. 5.
Physics Today, New York 1958, Vol. 3, 4, 5, 6, 7.
Proceedings of the Mathematical and Physical Society of Egypt 1958, No. 4, 1958, No. 21.
Proteus, Ljubljana 1958—59, št. 2, 3, 4—5.
Sodobna pedagogika, Ljubljana 1958, št. 9, 10.
Ukrajinskij matematičeskij žurnal, Kijev 1958, T. X, No. 3.
Uspehi matematičeskikh nauk, Moskva 1958, T. XIII, Vyp. 5, 6.
Varilna tehnika, Ljubljana 1958, št. 1, 2.
Vestnik Moskovskogo Universiteta, Moskva 1958, No. 1, 2.
Zdravstveni vestnik, Ljubljana 1958, št. 9—10, 11, 12.

Zveza Društev matematikov in fizikov FLRJ izdaja časopis:

Nastava matematike i fizike

Naročnina je za člane vseh republiških društev matematikov in fizikov 300 din, za ostale naročnike, šole in biblioteke 400 din. Naročila in naročnino pošiljajte na žiro-račun Nastave 101-701-5-1262 z oznako »za Nastavu«.

Društvo matematikov in fizikov NRS izdaja

Vesnik Društva matematičara i fizičara NRS

Letno izide v dveh dvojnih številkah, letna naročnina je 400 din. Naročnino pošiljajte na ček, račun 101-707-3-119 Društvu matematičara i fizičara NRS pod oznacbo »Za Vestnik«. Dopise pošiljajte na naslov društva Beograd pošt. fah 791.

Društvo matematikov in fizikov NRH izdaja za vso državo

MATEMATIČKO FIZIČKI LIST

za učence srednjih šol. Letnik ima 4 številke, med počitnicami ne izhaja. Letna naročnina je 240 din, posamezna številka 60 din.

Profesorji srednjih šol, priporočajte list dijakom! Naročila in naročnino pošiljajte na naslov:

Matematičko-fizički list, Zagreb, Ilica 16/III, p. p. 165 ali na čekovni račun št. 400-73-5-1884.

Društvo matematikov in fizikov LR Hrvatske izdaja časopis

Glasnik matematičko-fizički i astronomski

Naročnina za leto 1958 znaša 480 din. Časopis naročite pri administraciji Glasnika: Hrvatsko prirodoslovno društvo, Zagreb, Ilica št. 16-III. Čekovni račun 400-73-3-1077 za Društvo matematičara i fizičara NRH.

Obzornik za matematiko in fiziko izhaja vsak tretji mesec. Izdaja ga Društvo matematikov in fizikov LRS. Urejujejo ga: A. Kuhelj, I. Kuščer, A. Moljk, N. Prijatelj, I. Vidav. Odgovorni in tehnični urednik: I. Štalec. Upravo vodi T. Skubic. — Tiska tiskarna ČZP »Ljudska pravica« v Ljubljani. — Naročnina je 250 din, za podjetja in ustanove, ki plačajo po računu in za naročnike, ki plačajo po terjatvi 280 din. Posamezna številka 100 din. Naročnino nakažite na naš čekovni račun 600 — 70.

Dopise pošiljajte in list naročajte na naslov:

3 — 207

Obzornik za matematiko in fiziko, Ljubljana, poštni predal 253, tel. št. 23-304