

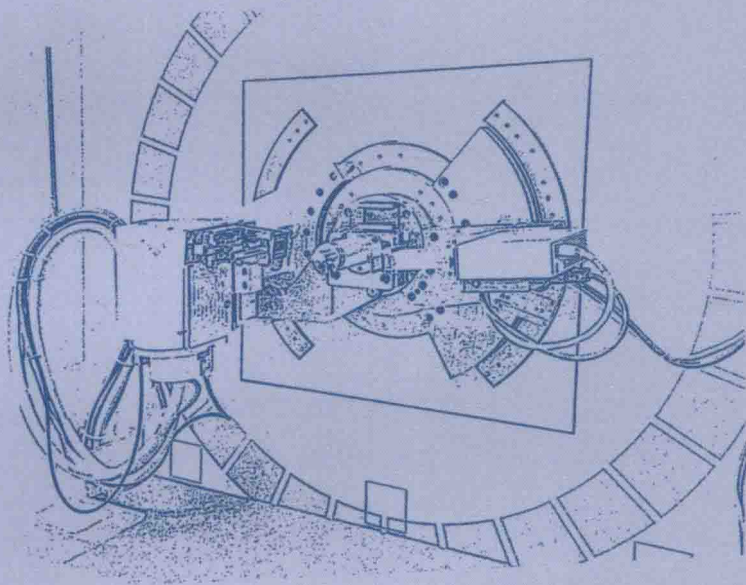


21世纪高等院校示范性实验系列教材

近代物理实验教程

JINDAI WULI SHIYAN JIAOCHENG

主编 唐一文 丁晓夏



教育部直属师范大学
华中师范大学出版社

近代物理实验教程

主 编	唐一文	丁晓夏		
副主编	段传喜	余 颖	谭 铭	高建明
编 委	唐一文	丁晓夏	段传喜	余 颖
	谭 铭	高建明	祝志宏	刘金平
	王碧霄			

华中师范大学出版社
2015 年·武汉

内 容 提 要

本书为作者在使用多年的近代物理实验讲义的基础上,结合凝聚态物理中纳米材料制备及应用技术,设计了若干综合性实验编写而成。近代物理实验内容涉及近代物理发展过程中起重要作用的著名实验,以及一些不可缺少的现代实验技术,包括原子分子物理、核探测技术及应用、激光与光学、真空技术、电子衍射、磁共振、微波和显微观察分析技术等领域;凝聚态物理的内容包括多种目前较成熟的有关纳米材料物理和化学法制备、表征及性能测试实验。本书可作为高等学校物理类专业本科生和其他专业本科生、研究生的近代物理实验课程教材,也可供从事实验物理的相关科技人员参考。

新出图证(鄂)字 10 号

图书在版编目(CIP)数据

近代物理实验教程 / 唐一文,丁晓夏 主编. —武汉:华中师范大学出版社,2015.7

(21 世纪高等院校示范性实验系列教材)

ISBN 978-7-5622-6934-2

I. ①近… II. ①唐… ②丁… III. ①物理学—实验—高等学校—教材 IV. ①O41-33

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2015)第 066194 号

近代物理实验教程

©唐一文 丁晓夏 主编

责任编辑:孙 森 张晶晶

编 辑 室:第二编辑室

出版发行:华中师范大学出版社有限责任公司

社址:湖北省武汉市珞喻路 152 号

电话:027-67863426/67863280(发行部) 027-67861321(邮购)

传真:027-67863291

网址:<http://www.cenupress.com>

印刷:虎彩印艺股份有限公司

字数:310 千字

开本:889mm×1194mm 1/16

版次:2015 年 7 月第 1 版

定价:25.00 元

责任校对:易 雯

电话:027-67867362

封面设计:罗明波

电子信箱:hscbs@public.wh.hb.cn

督印:王兴平

印张:13

印次:2015 年 7 月第 1 次印刷

欢迎上网查询、购书

前 言

近代物理实验是一门综合性强、涉及诸多理论和技术、多学科交叉的专业基础实验课程,教学内容包括一些在近代物理学发展中起到里程碑作用的经典实验以及在实验方法、技术上有代表性的实验。该课程能引导学生了解实验物理在物理学发展过程中的作用,培养学生对物理现象的洞察力,正确认识新物理概念的产生、形成和发展的过程,对提升学生综合素质、加强创新能力具有重要作用。

实验教学是一项集体事业。20 世纪 80 年代初,华中师范大学祁守仁老师、李来政老师等前辈即编著了《近代物理实验讲义》。随着科技的进步和教育改革的发展,几代教师长期积极开展科学研究和教学改革研究,多年来将丰富的理论与实践经验持续积累、总结,近代物理实验课程在教学体系、教学方法、实验技术和实验设备等方面都发生了很大变化,《近代物理实验讲义》也几经修改。为了适应新的教学要求和条件,我们对其重新进行了编写并作为教材出版。

本书内容涵盖了原子分子物理、核探测技术及应用、激光与光学、真空技术、X 射线衍射、电子衍射、磁共振、微波、低温、半导体、显微观察技术等领域;并结合华中师范大学材料研究学科优势,引入了纳米材料制备及其在能源领域中应用的实验内容。

本书各单元编写分工如下:绪论 实验误差及数据处理,段传喜、丁晓夏;第一单元 光谱技术,段传喜;第二单元 原子核物理及探测技术,唐一文、丁晓夏、王碧霄;第三单元 X 光及真空技术,谭铭、高建明;第四单元 磁共振及微波技术,余颖、祝志宏;第五单元 材料研究实验,余颖、谭铭、刘金平、祝志宏、唐一文。此外,黄林、孙森在插图和校对方面做了大量工作,全书由唐一文负责组织和统编工作,在此感谢实验中心各位老师和实验技术人员的辛勤劳动。

本书的出版,得到了华中师范大学教务处、实验室与设备管理处、物理学院领导和同事的大力支持与帮助,在编写过程中,曾参阅兄弟院校近代物理实验教材和讲义,在此一并表示衷心的感谢!书中难免尚存一些错误和不当之处,敬请各位读者批评指正。

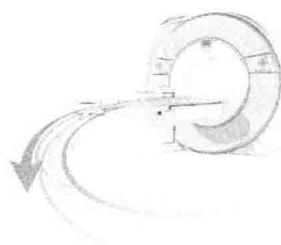
编 者

2015 年 6 月

目 录

绪论 实验误差及数据处理	1
第一单元 光谱技术	12
实验一 氢与氘原子光谱	12
实验二 塞曼效应	17
实验三 双原子分子光谱	24
实验四 激光拉曼光谱	28
实验五 半导体泵浦激光原理实验	42
实验六 铌酸锂晶体横向电光调制实验	46
第二单元 原子核物理及探测技术	53
实验一 盖革-弥勒(G-M)计数管特性及放射性衰变的统计规律的测量	55
实验二 γ 闪烁能谱测量	62
实验三 穆斯堡尔效应	68
实验四 验证快速电子的动量与动能的相对论关系	73
第三单元 X 光及真空技术	80
实验一 X 射线衍射技术及物相分析实验	91
实验二 真空镀膜	97
实验三 电子衍射	99
实验四 半导体常温霍尔系数及电导率测量	102
实验五 氦氛激光器的排气、充气特性研究	107
实验六 超导磁悬浮力测量实验	110
实验七 扫描隧道显微镜(STM)	118
第四单元 磁共振及微波技术	125
实验一 核磁共振	131
实验二 微波实验	138
实验三 电子自旋共振	153
实验四 光泵磁共振	159
实验五 用谐振腔微扰法测量介质材料的微波介电常数	166
实验六 铁磁共振	171
第五单元 材料研究实验	176
实验一 半导体薄膜磁控溅射法制备及其测试	176

实验二	金属纳米线的制备和表征	182
实验三	双电层超级电容器的设计及储能特性	186
实验四	生物传感器	191
实验五	染料敏化太阳电池	195
实验六	水热法合成光催化剂及其降解有机染料性能的研究	199



绪论

实验误差及数据处理

科学实验测量的任务是定量地测试自然现象反映的各种相关物理量,并通过对测量值的数学处理得到最接近真实值的待测量(平均值),再通过分析得到各物理量之间的定量关系,从而加深人们对客观世界的认识 and 了解。实验数据的数学处理是实验测量的必不可少的重要组成部分。指导数据处理的理论称为误差理论,现扼要介绍如下。

(一) 误差的分类和消除方法

1. 误差的分类

(1) 系统误差

系统误差又称为规律误差。它是在一定的测量条件下,对同一个被测量进行多次重复测量时,误差的绝对值和符号(正或负)保持恒定;或者在条件变化时,按某一确定规律变化的误差。

这种确定的规律是指,误差的产生可以归结为某一个或几个因素的函数,且函数一般可以用解析公式、曲线数值来表达。

(2) 随机误差

随机误差又称为偶然误差。它是在相同条件下多次测量同一量时,误差的绝对值和符号的变化没有确定的规律,也不可以预测但具有抵偿性的误差。

由于随机误差在实验测量中的单个无规律性,导致了它们的和有正负相消的可能。随着测量次数的增加,误差的平均值趋近于零。因此,多次测量的平均值的随机误差比单个测量的随机误差小,这种性质通常称为抵偿性。

(3) 粗差

粗差,是在一定条件下,测量的结果明显歪曲真值的误差。

由于在测量过程中对错了标志、读错数据、记录错误或实验条件未达到要求而强行进行实验等,都会产生粗差。

2. 误差的消除

为了使实验结果能准确地反映真实情况,需要尽量减小误差对实验结果的影响,这就是误差的消除。

(1) 系统误差的消除

① 以修正值的方式加入测量值中消除。

② 在实验过程中消除一切产生系统误差的因素。

③ 在测量过程中选择适当的测量方法,使系统误差可以抵消而不致带入测量值中。

(2) 粗差的消除

粗差的产生,人为因素是主要的。所以对实验者进行适当的技术培训、提高实验者的责任心是解决问题的主要方法。实验结果中含有粗差的测量值称为坏值或异常值,正确的结果不应包含粗差,即所有的坏值必须剔除。

(3) 随机误差的消除

实验过程中产生的误差多数为随机误差,因而随机误差的消除最为复杂与关键。单个的随机误差虽然无规律性,但其多次重复测量的误差遵从一定的统计规律,故首先必须了解随机变量的几点基本知识。

(二) 随机变量遵从的几种分布

1. 概率密度函数

(1) 随机样本

物理实验中,由于测量的随机(偶然)误差及物理现象本身的随机性,即使应用相同的仪器、仪表,在相同的实验条件下对某一物理量进行 n 次重复测量时,每次测量结果,其测量值 $x_1, x_2, x_3, \dots, x_n$ 不会完全相同,而具有随机性。这些随机数 $x_1, x_2, x_3, \dots, x_n$ 的集合 $\{x_i\} (i=1, 2, \dots, n)$,组成容量为 n 的随机样本(以下简称样本),它对应于随机变量 x 的一切可能取值。相同条件下测量的随机样本 $\{x_i\}$ 常称为等精度测量列。

随机变量又分为离散型随机变量和连续型随机变量。离散型随机变量仅取有限个可能值;而连续型随机变量在取值区间内具有无限个连续变化的可能取值。

从样本可求出平均值 $\bar{x}$ 、样本标准偏差 S_x 和平均值的标准偏差 $S_{\bar{x}}$:

$$\begin{aligned}\bar{x} &= \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x_i \\ S_x &= \frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2 \\ S_{\bar{x}} &= \frac{1}{n(n-1)} \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2\end{aligned}$$

(2) 随机变量的概率密度函数

对于随机变量 x 不仅要了解它的全部可能取值,而且要知道各个可能值 x_i 在样本中出现的概率 $P(x_i) = m(x_i)/n$ [$m(x_i)$ 表示 x_i 出现的次数; $m(x_i)/n$ 实为频率,当 $n \rightarrow \infty$ 时,频率趋近于某一稳定值,即概率,为方便起见,以下只用概率一词]以及 $P(x_i)$ 随 x_i 变化的规律性——即概率分布。

对于离散型随机变量 x ,由于它只具有有限个分立值 $x_1, x_2, \dots$,则概率分布如图0-1所示。很显然,各个取值 $x_1, x_2, \dots$ 的概率之和应等于1,即

$$\sum_{x_i} P(x_i) = 1 \quad (0-1)$$

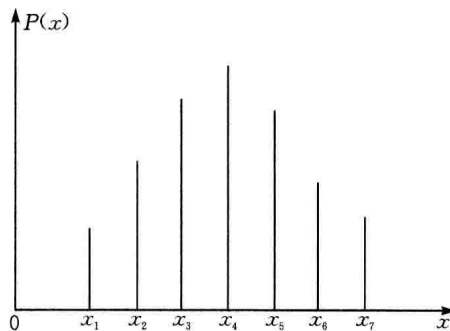


图 0-1 离散型随机变量的概率分布

随机变量 x 为连续型时,常将样本 $\{x_i\}$ 中的随机数 x_i 从小到大排列,取 dx 为微分小统计区间,统计样本随机数 x_i 落在区间 $(x_i, x_i + dx)$ 内的概率 $P(x_i)$ 。当 $dx \rightarrow 0$ 时,概率分布呈连续变化的光滑曲线,则 $P(x_i)$ 可写为

$$P(x_i) = \int_{x_i}^{x_i+dx} P(x) dx \quad (0-2)$$

其中 $P(x)$ 称为概率密度函数。同时有

$$\int_{-\infty}^{\infty} P(x) dx = 1 \quad (0-3)$$

式(0-2)和(0-3)称为归一化条件。在以后讨论的任何概率(密度)函数都必须满足归一化条件。随

机变量 x 遵从某一概率(密度)函数 $P(x)$, 简而言之, x 服从 $P(x)$ 分布。

(3) 期待值及概率积分

① 期待值

要确定一个随机变量 x 的概率函数 $P(x)$ 的具体数学形式, 必须给出式中各个参数(又叫分布参数)的数值, 而后者又往往是实验物理工作中需要研究的物理量。虽然 $P(x)$ 的函数形式各异, 但参数的求法要按共同定论的特征数字来表征, 如随机变量 x 的期待值的 $\langle x \rangle$ 定义为

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} xP(x)dx \quad (0-4)$$

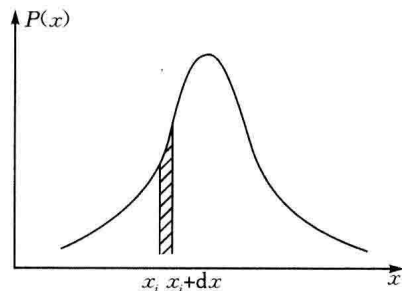


图 0-2 连续型随机变量的概率分布

$\langle x \rangle$ 是概率密度曲线重心的位置, 是样本的平均值 $\bar{x}$, 样本 $\{x_i\}$ 中的随机数围绕着它摆动, 对于单峰对称的概率密度分布曲线, $\langle x \rangle$ 为曲线峰值的位置。

常用的期待值是随机变量 x 的 n 阶矩 $\langle x^n \rangle$ 和方差 $\text{Var}(x)$, 它们的定义分别为

$$\langle x^n \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} x^n P(x)dx \quad (0-5)$$

$$\begin{aligned} \text{Var}(x) &= \langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} (x - \langle x \rangle)^2 P(x)dx = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2 \end{aligned} \quad (0-6)$$

对应于离散型随机分布, 式(0-5)及(0-6)为

$$\begin{aligned} \langle x^n \rangle &= \sum_{x_i} x_i^n P(x_i) \\ \text{Var}(x) &= \sum_{x_i} (x_i - \langle x \rangle)^2 P(x_i) \end{aligned}$$

若已知随机变量 x 的函数 y (亦为随机变量), 取 $y = f(x)$ 时, 则有

$$P(y)dy = P(x)dx \quad (0-7)$$

上式表明, 当 x 值落入区间 $[x, x+dx]$ 内的概率 $P(x)dx$ 应等于 y 值落入相应区间 $[y, y+dy]$ 内的概率。那么, y 的期待值及 n 阶矩可写为

$$\langle y \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} yP(y)dy = \int_{-\infty}^{\infty} y(x)P(x)dx \quad (0-8)$$

$$\langle y^n \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} y^n P(y)dy = \int_{-\infty}^{\infty} [y(x)]^n P(x)dx \quad (0-9)$$

因此, 求 $\langle y \rangle$ 及 $\langle y^n \rangle$, 不需要导出 y 的具体遵从某一分布的函数式, 而直接利用 x 的分布求出 y 方差 $\text{Var}(y) = \langle y^2 \rangle - \langle y \rangle^2$ 。

当随机变量 y 为两个或两个以上随机变量的函数时, 即 $y = f(x_1, x_2, \dots)$, $x_1, x_2, \dots$ 此时为随机变量, 它们服从各自的分布 $P(x_1), P(x_2), \dots$, y 的 n 阶矩为

$$\langle y^n \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \dots \int [f(x_1, x_2, \dots)]^n P(x_1, x_2, \dots) dx_1 dx_2 \dots$$

式中 $P(x_1, x_2, \dots)$ 称联合概率密度函数。为计算 y 的方差 $\text{Var}(y)$ 还需考虑试验中任意两个随机变量 x_i, x_j 之间的联系, 为此引入表征 x_i 及 x_j 相关程度的物理量——协方差 $\text{Cov}(x_i, x_j)$ 和相关函数 $\rho(x_i, x_j)$, 其定义为

$$\begin{aligned} \text{Cov}(x_i, x_j) &= \langle (x_i - \langle x_i \rangle)(x_j - \langle x_j \rangle) \rangle \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \dots \int (x_i - \langle x_i \rangle)(x_j - \langle x_j \rangle) P(x_1, x_2, \dots) dx_1 dx_2 \dots \end{aligned} \quad (0-10)$$

$$\rho(x_i, x_j) = \frac{\text{Cov}(x_i, x_j)}{\sigma(x_i)\sigma(x_j)} \quad (0-11)$$

显然, x_i 与 x_j 不相关时, $\text{Cov}(x_i, x_j) = 0, \rho(x_i, x_j) = 0$ 。那么, 对于同一随机变量 x_i , $\text{Cov}(x_i, x_j) = \sigma^2(x_i) = \text{Var}(x_i), \rho(x_i, x_j) = 1$ 。由 x_i 与 x_j 的相关程度不同, $\rho(x_i, x_j)$ 的取值范围为 $-1 \leq \rho(x_i, x_j) \leq 1$ 。

② 概率积分

若随机变量 x 的分布已知, 概率积分定义为

$$P(x_1, x_2) = \int_{x_1}^{x_2} P(x) dx \quad (0-12)$$

公式表示样本 $\{x_i\}$ 中随机变量 x 落入 $[x_1, x_2]$ 区间的概率大小, 如图 0-3 中的斜线所示的部分。人们对于不同的分布 $P(x)$, 应用一般定积分的近似计算方法, 计算出不同的区间 $[x_1, x_2]$ 内概率 $P(x_1, x_2)$ 的数值大小, 并制成各种分布的“数理统计表”供人们使用(见参考书目[4])。

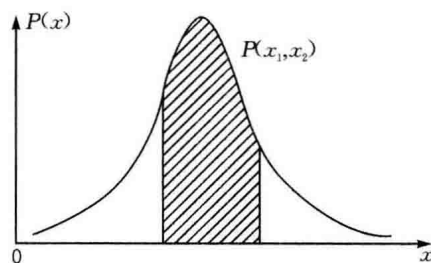


图 0-3 概率积分示意图

2. 常见的几个分布

(1) 正态分布 —— 高斯分布

它是最常用的连续型随机变量遵从的分布形式。大量实践证明, 只要随机变量 x 受到大量相互独立的微小随机因素的影响, n 次重复测量的随机样本 $\{x_i\}$ 容量 n 很大时, 样本(或者说随机变量 x) 一般服从正态分布, 分布曲线为单峰、对称型, 如图 0-4 所示。概率密度函数 $P(x)$ 的数学形式为

$$P(x) = n(x; \mu, \sigma^2) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \exp\left[-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}\right] \quad (0-13)$$

式中 $\frac{1}{\sqrt{2\pi}}$ 为归一化因子, μ, σ 为分布参数, 其中 $\sigma > 0, \mu - \sigma$ 及 $\mu + \sigma$ 为分布曲线的拐点; μ 是随机变量 x 的期待值 $\langle x \rangle$, 是分布曲线峰值的位置。

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} x n(x; \mu, \sigma^2) dx = \mu$$

$$\sigma^2(x) = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2 = \int_{-\infty}^{\infty} x^2 n(x; \mu, \sigma^2) dx - \mu^2 = \sigma^2 + \mu^2 = \sigma^2$$

可见, σ 为样本 $\{x_i\}$ 的标准误差, 即用 σ 来表征样本 $\{x_i\}$ 的离散性程度, σ 越小离散性程度越低, 曲线峰值越大; σ 越大时, $\{x_i\}$ 中随机数的离散性程度越大, 曲线峰值则越小(如图 0-4 中的虚线所示)。

当应用(0-12)式计算服从正态分布 $n(x; \mu, \sigma^2)$ 的随机变量 x 落入 $[x_1, x_2]$ 区间的概率大小时, 引用新的变量 $u = (x - \mu)/\sigma$ (数理统计中的 u 又称为统计量), 可证明 u 服从 $\mu = 0, \sigma = 1$ 的正态分布 $n(u; 0, 1)$, 后者称为标准正态分布, 其数学形式为

$$n(u; 0, 1) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{u^2}{2}\right) \quad (0-14)$$

其分布曲线为峰在 $u = 0$ 处的对称曲线, 如图 0-5 所示, 拐点为 $\sigma = \pm 1$, 利用标准正态分布的概率积分可写为

$$P(-u_\sigma, +u_\sigma) = \int_{-u_\sigma}^{+u_\sigma} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{u^2}{2}\right) du \quad (0-15)$$

例如, 计算 x 落入 $[\mu - \sigma, \mu + \sigma]$ 区间的概率时(如图 0-4 所示),

$$P(\mu - \sigma, \mu + \sigma) = \int_{\mu - \sigma}^{\mu + \sigma} n(x; \mu, \sigma^2) dx = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{\mu - \sigma}^{\mu + \sigma} \exp\left(-\frac{(x - \mu)^2}{2\sigma^2}\right) dx$$

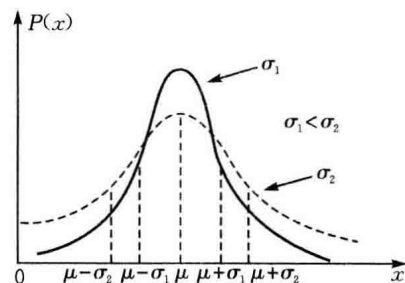


图 0-4 正态分布曲线

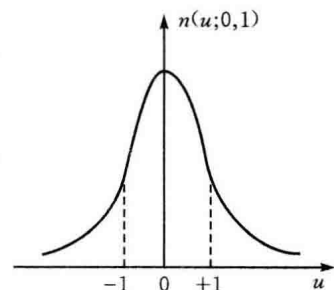


图 0-5 标准正态分布曲线

令 $u = \frac{x-\mu}{\sigma}$, 则 $du = \frac{dx}{\sigma}$; $x = \mu \pm \sigma$ 时, $u = \pm 1$

$$P(\mu - \sigma, \mu + \sigma) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-1}^{+1} \exp\left(-\frac{u^2}{2}\right) du = 0.6827 \approx 0.683 = 68.3\%$$

式中结果值 0.683, 是查标准正态分布的概率积分表 $0.8413 - (1 - 0.8413) \approx 0.683$ 所得。同理可求得:

$$P(\mu - 1.654\sigma, \mu + 1.654\sigma) = 0.90 = 90\%$$

$$P(\mu - 1.96\sigma, \mu + 1.96\sigma) = 0.95 = 95\%$$

$$P(\mu - 3\sigma, \mu + 3\sigma) = 0.9973 = 99.73\%$$

① 无论从实践还是从理论分析, 当样本容量 n 为无限大或其他极限情况时, 样本则服从或渐近服从正态分布。而且样本的平均值 $\bar{x} = \sum x_i / n$ (亦为统计量, 属随机变量) 总是服从或渐近服从正态分布 $n(\bar{x}; \mu, \sigma^2/n)$, 括号内的 n 为样本容量。所以正态分布被认为是误差理论中最基本的分布。

② $P(\mu - \sigma, \mu + \sigma) = 0.683$ 告诉我们, 服从正态分布的随机变量 x 取值有 63.8% 的可能性落入期待值之右左一倍标准误差范围内; 或者说, 此时样本 $\{x_i\}$ 中有 63.8% 个 x_i 落入用 $\mu \pm \sigma$ 所代表区间内, 63.8% 通常称为置信水平。

对于平均值 $\bar{x}$, 也可写出 $P\left(\mu - \frac{\sigma}{\sqrt{n}}, \mu + \frac{\sigma}{\sqrt{n}}\right) = 63.8\%$ 。此时说明, 样本平均值比样本中任一值 x_i 的可靠性程度大 (因为 $\sigma(\bar{x}) = \sigma/n < \sigma(x)$), 更靠近期待值 μ 。所以常用下式表示测量的最后结果

$$\mu = \bar{x} \pm \sigma(\bar{x}) \quad (P = 63.8\%) \quad (0-16)$$

上式的物理意义是期待值以 63.8% 的概率落入 $[\bar{x} - \sigma(\bar{x}), \bar{x} + \sigma(\bar{x})]$ 区间, 或者说, 期待值 μ 以 36.2% 的概率落在上述区间之外, 而不能说 μ 就在 $x \pm \sigma(x)$ 区间内。

(2) t 分布 —— 学生分布

当样本容量 n 较小 (测量次数有限) 时, 很难断言样本服从正态分布, 同时, 在不知期待值及标准误差的条件下, 用 $\bar{x}$ 代替 μ , 以 S_x 代替 σ , 引入新的随机变量 (即统计量) t , 令 $t = (x - \bar{x}) / S_x$, 从理论上可推得它服从自由度 $v = n - 1$ 的 t 分布 $P(t; v)$, 是一条峰值低于正态分布的对称型曲线, 见图 0-6。而概率密度函数为

$$P(t; v) = \frac{1}{\sqrt{v}} \frac{\Gamma^*\left(\frac{v+1}{2}\right)}{\Gamma\left(\frac{1}{2}\right)\Gamma\left(\frac{v}{2}\right)} \left(\frac{v}{v+t^2}\right)^{\frac{v+1}{2}} \quad (0-17)$$

因而有

$$\langle t \rangle = 0$$

$$\sigma^2(t) = \frac{v}{v-2} \quad \text{要求 } v > 2$$

随着样本容量 n 的增大, $P(t; v)$ 渐近地趋向标准正态分布 $n(u; 0, 1)$, 即

$$t = (x - \bar{x}) / S_x \rightarrow (x - \mu / \sigma(x)) = u, \langle t \rangle = 0; \sigma^2(t) = \frac{v}{v-2} \rightarrow 1$$

t 分布在误差理论中占有一定的地位, 数据处理时经常被引用。例如, 在报导小样本的数据处理结果时, 不能简单地应用 (0-16) 式。由图 0-6 不难看出, 在同样的置信水平 63.8% 条件下, 因 t 分布峰值较正态分布低, 所取相应区间的 $|t_\xi|$ 值是大于 1 的数值, 因而, 有 $x - \bar{x} = t_\xi S_x$, 则小样本的测量结果应报导为

$$\text{测量结果} = \bar{x} \pm t_\xi S_x \quad (P = 63.8\%)$$

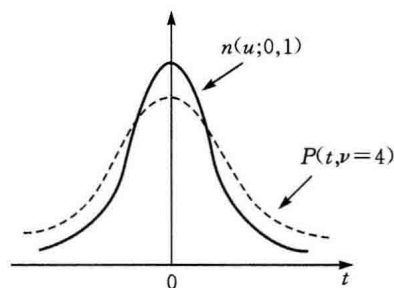


图 0-6 t 分布曲线与正态分布曲线比较图

式中 t_{ξ} 与自由度 $\nu = n - 1$ 有关, 由下式查表求出 t_{ξ} 。

表 0-1 $P = 0.683$ 的 t 值与自由度 ν 的对照表

ν	3	4	5	6	7	8	9	10	15	20	30	40
$t_{0.683}$	1.20	1.14	1.11	1.09	1.08	1.07	1.06	1.05	1.04	1.03	1.02	1.01

* 伽玛函数定论为: $\Gamma(r) = \int_0^{\infty} x^{r-1} e^{-x} dx$, 当 N 为正整数时,

$$\Gamma\left(N + \frac{1}{2}\right) = \frac{1 \cdot 3 \cdot 5 \cdots (2N-1)}{2^N} \sqrt{\pi}$$

$$\Gamma(N+1) = N!, \quad \Gamma\left(\frac{1}{2}\right) = \sqrt{\pi}, \quad \Gamma(1) = \Gamma(2) = 1$$

(3) 均匀分布

它是随机变量 x 服从的一种最简单的连续型分布。在指定的区间 $[a, b]$ 内 $P(x)$ 为常量, 在 $[a, b]$ 外 $P(x)$ 为零。如图 0-7 所示。 $P(x)$ 取如下数学形式

$$P(x) = \begin{cases} \frac{1}{b-a} & a < x < b \\ 0 & x < a, x > b \end{cases} \quad (0-18)$$

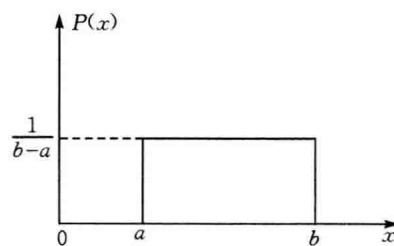


图 0-7 均匀分布

它是电子测量中一种很重要的分布, 其作用和地位不亚于正态分布。数字仪表的读数、仪器中的刻度盘或其他传动齿轮回差的影响而读得观测值, 都属于均匀分布。均匀分布的期待值 $\langle x \rangle$ 和方差 $\sigma^2(x)$ 分别为

$$\langle x \rangle = a + b$$

$$\sigma^2(x) = \langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle = \frac{1}{12}(b-a)^2$$

(4) 泊松分布

它是一种离散型分布, 随机变量 k 取正整数(含零), 例如核物理实验中, 放射源在单位时间内衰变的数目和探测器在时间 Δt 内探测到的脉冲数目均服从泊松分布 $P(k; m)$

$$P(k; m) = \frac{m^k}{k!} e^{-m} \quad (0-19)$$

式中 m 为分布参数, 等于样本平均值, 即 k 的期待值, 而方差 $\sigma^2(k)$ 也等于 m 。

$$\langle k \rangle = \sum_{k=0}^{\infty} k P(k; m) = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{m^k}{(k-1)!} e^{-m} = m e^{-m} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{m^{k-1}}{(k-1)!} = m$$

$$\sigma^2(k) = \sum_{k=0}^{\infty} (k - \langle k \rangle)^2 P(k; m) = m^2 + m - m^2 = m$$

相对误差

$$E = \frac{\sigma(k)}{\langle k \rangle} = \frac{1}{\sqrt{m}} \quad (0-20)$$

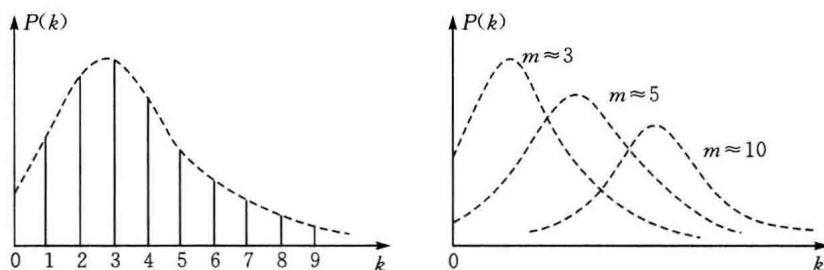


图 0-8 泊松分布

在做核物理实验时,为了保证相对误差 $E = 1\% \sim 5\%$ 的要求,在大多数情况下只是作长时间的单次测量,并将测得计数 k 看成为平均值 m 。例如,要求 $E = 1\%$ 时,则由 $E = \frac{1}{\sqrt{m}}$ 可知, k 应为 10000,若单位时间内(每秒)计数 n 较低时,为测 $k = 10000$ 计数则需较长的时间。

图 0-8 所示 $m \approx 3$ 的直方图和连续化后的曲线图,当 m 逐渐增大时,非对称型的单峰泊松分布曲线向单峰、对称性的正态分布曲线过渡。当 $m \rightarrow 10$ 时,泊松分布已趋向于正态分布。

误差理论中还有一些对数据处理很有用的分布形式,可根据需要查阅有关书籍。

3. 实验测量中可疑数据的取舍原则

实验测得的随机样本 $\{x_i\}$ 中,难免有因实验者的疏忽大意或实验条件突变而记录的偏离期待值甚大的数据,按常理这些数据应当弃而不用,这就是可疑数据取舍原则讨论的问题。

(1) 拉依达准则 —— 3σ 准则

由前面已知,服从正态分布的样本 $\{x_i\}$ 中,每个 x_i 值在 99.7% 的置信水平 $[\mu - 3\sigma, \mu + 3\sigma]$ 区间,即说容量为 n 的样本 $\{x_i\}$ 中应当有 99.7% 的测量值的误差小于 3σ ,只可能有 0.3% 数据的误差大于 3σ 。而由于实际测量的样本的容量 n 一般为 $50 \sim 100$,那么,该样本中不应当存在误差大于 3σ 的数据,否则该数据为可疑数据,在数据处理过程中求待测量平均值时,应将它弃而不用。这就是 3σ 准则的基本思想。

方法是:首先求出样本平均值 $\bar{x}$,计算样本的标准偏差 S_x ,继而检查样本中是否有偏差(误差)大于 $3S_x$ 的数据,若有则弃而不用,在对剩余的样本求 $\bar{x}$ 及 S_x ,重复上述过程,直到样本的数据均在 $[\bar{x} - 3S_x, \bar{x} + 3S_x]$ 之内为止。

3σ 准则只对大样本($n \geq 20$)才适用,而且与容量 n 大小无关,这使它具有较大的局限性。

(2) 肖维勒原则

该原则仍以正态分布为依据,但提出的置信水平与样本的容量 n 有关,定为 $1 - \frac{1}{2n} = P(\mu - \omega_n S_x, \mu + \omega_n S_x)$,再利用概率积分公式找出对应于 $(1 - \frac{1}{2n})$ 的系数 ω_n ,见表 0-2。如果样本中某一数据 x_i 满足下式时,则将 x_i 予以舍弃。

$$|x - x_i| > \omega_n S_x \quad (0-21)$$

表 0-2 系数 ω_n 与测量次数 n 对照表

n	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	20	30	50
ω_n	1.38	1.58	1.65	1.73	1.80	1.86	1.92	1.96	2.00	2.03	2.07	2.10	2.15	2.24	2.39	2.58

(3) 格拉布斯原则

与前两个原则相比,该原则处于较为中间地位,比 3σ 准则较严,而比肖维勒原则较宽,被认为是目前较好的原则之一。

首先从样本中找到最大值数据 $x_{(n)}$ 或最小值数据 $x_{(1)}$,建立新的随机变量 g

$$g = \frac{x_{(n)} - \bar{x}}{S_x} \text{ 或 } g = \frac{\bar{x} - x_{(1)}}{S_x}$$

可导出 g 服从的分布形式,在给出显著性水平 α (置信水平为 $1 - \alpha$) 后,计算对应于容量 n 和 α 条件下的 $g_0(n, \alpha)$ (称临界值),结果见表 0-3,若出现

$$|x_i - \bar{x}| > g_0(n, \alpha) \cdot S_x$$

则认为 x_i 是可疑数据而舍弃。

表 0-3 临界值 $g_0(na)$ 与 $a_0 n$ 的关系

$\begin{array}{c} a \\ \swarrow \searrow \\ g_0 \\ \swarrow \searrow \\ n \end{array}$	0.05	0.01	$\begin{array}{c} a \\ \swarrow \searrow \\ g_0 \\ \swarrow \searrow \\ n \end{array}$	0.05	0.01	$\begin{array}{c} a \\ \swarrow \searrow \\ g_0 \\ \swarrow \searrow \\ n \end{array}$	0.05	0.01
3	1.15	1.15	10	2.16	2.41	17	2.47	2.79
4	1.46	1.49	11	2.23	2.48	18	2.50	2.82
5	1.67	1.75	12	2.29	2.55	19	2.53	2.85
6	1.82	1.94	13	2.33	2.61	20	2.56	2.88
7	1.94	2.11	14	2.37	2.66	25	2.66	3.01
8	2.03	2.22	15	2.41	2.71	30	2.75	3.10
9	2.11	2.32	16	2.44	2.75	50	2.96	2.34

(三) 曲线拟合中的最小二乘法

物理实验中常遇到两个随机变量 x, y 之间存在函数关系, 函数关系形式为已知, 其理论曲线公式为

$$y = f(x; c_1, c_2, \dots, c_m) \quad (0-22)$$

式中 $c_1, c_2, \dots, c_m$ 为 m 个待求的未知参数。只要测得 N 对观测值 $(x_i^*, y_i^*) (N > m)$, 再根据这些数据应用最小二乘法寻找参数 $c_1, c_2, \dots, c_m$ 的最佳估计值 $c_1, c_2, \dots, c_m$, 就可得到 y 与 x 的具体函数关系式。

如果 y 与 x 之间的函数关系为未知, 但实验测量中它们之间又存在联系, 即 y 随 x 的改变而变化, 这时称 y 与 x 之间存在相关关系, 因此需要进行曲线拟合, 找出 y 与 x 函数关系的经验公式。对应于两个相关的随机变量 x 和 y , 先测量 N 组数据 (x_i^*, y_i^*) , 利用作图法(最简便、最直观)在直角(或单对数、双对数、极坐标及其他)坐标纸上作出相应的点, 如图 0-9, 通过这些点描绘一条平滑的曲线(如图中实线), 进而根据曲线的形状, 恰当地选择经验公式(函数关系式), 如选用多项式为

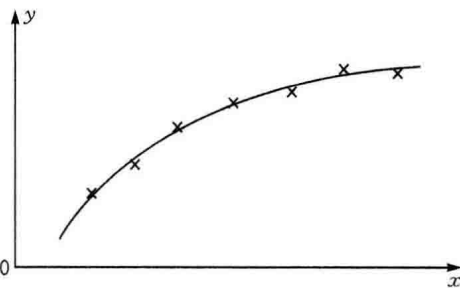


图 0-9 最小二乘法原理图

$$y = c_1 + c_2 x + c_3 x^2 + \dots + c_m x^{m-1} = f(x; c_1, c_2, \dots, c_m)$$

最后应用最小二乘法求出参数的最佳估计值。

1. 最小二乘法原理

最小二乘法是曲线拟合中应用得最广泛的一种方法, 而实际求参数最佳估计值时, 可直接使用计算机的最小二乘法标准程序, 此处只是介绍最小二乘法的基本思想和一系列公式的由来。

最小二乘法的基本思想如下: 依据图 0-9 中的 7 个数据点, 可人为地画出许多条曲线, 不言而喻, 其中必存在一条最接近实际变化关系的最佳曲线。换句话说, 存在一组决定该曲线的最佳参数 $c_1, c_2, \dots, c_m$ 值。最佳曲线的条件为: 测量值 y_i^* 与曲线上同一 x 值的 $y = f(x; c_1, c_2, \dots, c_m)$ 值之差(偏差) $v_i = y_i^* - f(x_i^*; c_1, c_2, \dots, c_m)$ 的平方之和为最小值。要注意, 此处认为自变量 x 的测量误差 $\sigma(x)$ 远小于函数 y 的测量误差 $\sigma(y)$, 即 $\sigma(x) \ll \sigma(y)$, x 的测量误差可忽略不计; 同时认为 y 值的测量误差均相等, 即 $\sigma(y_i) = \sigma(y_j)$ 。

$$Q = \sum_{i=1}^N v_i^2 = \sum_{i=1}^N [y_i^* - f(x_i^*; c_1, c_2, \dots, c_m)]^2 = \min \quad (0-23)$$

2. 求最佳估计值 $c_1, c_2, \dots, c_m$ 的公式

曲线不同, 偏差的平方和 $Q = \sum_{i=1}^N [y_i^* - f(x_i^*; c_1, c_2, \dots, c_m)]^2$ 也不同, 由于 x_i^* 与 y_i^* 为已知数值,

Q 值与参数的取值有关,当要求 Q 为最小值时,即要求 Q 对参数 $c_1, c_2, \dots, c_m$ 的偏导数为零。

$$\frac{\partial Q}{\partial c_k} = 2 \sum_{i=1}^N [y_i^* - f(x_i^*; c_1, c_2, \dots, c_m)] \frac{\partial f(x_i^*; c_1, c_2, \dots, c_m)}{\partial c_k} = 0 \quad (0-24)$$

$$k = 0, 1, 2, \dots, m$$

这样的方程式一共有 m 个,由它们解出 m 个参数 $c_1, c_2, \dots, c_m$ 值是唯一的,也就是所求得最佳估计值。

(1) 线性情况

在提出的经验公式或已知函数关系式中,未知参数 $c_1, c_2, \dots, c_m$ 是线性关系时,解(0-24)式代表的方程组就很容易。线性情况下的 $y = f(x; c_1, c_2, \dots, c_m)$ 可写为

$$y = y_0(x) + c_1 f_1(x) + c_2 f_2(x) + \dots + c_m f_m(x) \quad (0-25)$$

式中 $y_0(x)$ 及 $f_i(x)$ 是不含未知参数 $c_1, c_2, \dots, c_m$ 的 x 的已知函数,当 $y_0(x) = 0, f_n(x) = x^{n-1}$ 时

$$y = c_1 + c_2 x + c_3 x^2 + \dots + c_m x^{m-1} \quad (0-26)$$

上式为 x 的 $m-1$ 阶多项式。由(0-25)及(0-26)两式可知,所谓线性是对 $c_1, c_2, \dots, c_m$ 而言。将(0-25)式代入(0-24)式,经整理得

$$\sum_i^N \left\{ y_i^* - \left[y_0(x_i^*) - \sum_j^m c_j f_j(x_i^*) \right] \right\} f_k(x_i^*) = 0$$

$$k = 1, 2, 3, \dots, m \quad (0-27)$$

$$\sum_{j=1}^m c_j \sum_{i=1}^N f_j(x_i^*) f_k(x_i^*) = \sum_{i=1}^N [y_i^* - y_0(x_i^*)] f_k(x_i^*)$$

(0-27) 是 m 个方程式的方程组,每一方程式中含 m 个未知参数 $c_1, c_2, \dots, c_m$ 。

例如,在核磁共振实验中,要求绘制利用氢核的核磁共振现象测量电磁铁磁场 B 与 I 的关系呈线性关系:

$$B = c_1 + c_2 I \quad (0-28)$$

式中只有两个未知参数 c_1, c_2 ,对实验测得 10 组数据利用最小二乘法进行数据处理,见表 0-4。

表 0-4 最小二乘法处理实验数据

	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
$B \times 10^{-4} (\text{T})$	3.690	3.745	3.790	3.856	3.908	3.945	4.017	4.064	4.111	4.160
$I (\text{A})$	8.92	9.09	9.22	9.40	9.56	9.69	9.87	10.0	10.13	10.27

对应于(0-28)式,方程组(0-27)式中的

$f_1(x) = 1, f_2(x_i^*) = I_i^*, y_0(x_i^*) = 0, y_i^* = B_i^*$ 。因此有

$$\begin{cases} c_1 \sum_{i=1}^{10} 1 \times 1 + c_2 \sum_{i=1}^{10} I_i^* \times 1 = \sum_{i=1}^{10} B_i^* \times 1 \\ c_1 \sum_{i=1}^{10} 1 \times I_i^* + c_2 \sum_{i=1}^{10} I_i^* \times I_i^* = \sum_{i=1}^{10} B_i^* \times I_i^* \end{cases}$$

将实验数据代入上式,计算和整理后得到

$$10c_1 + 96.15c_2 = 39.291$$

$$96.15c_1 + 926.36c_2 = 378.44$$

最后求得参数的最佳估计值 c_1 和 c_2 分别为

$$c_1 = 0.565 \text{T}$$

$$c_2 = 0.350 \text{T/A}$$

将求出的 c_1 和 c_2 代入(0-28)式,为

$$B = 0.565 + 0.350I(\text{T})$$

按此线性公式绘制的函数曲线即为最佳曲线。

3. 最小二乘法的矩阵形式

仍然是线性情况,即式(0-25)所示情况,同时忽略自变量 x 的测量误差 $\sigma(x)$ 。但考虑到 y 值的测量为非等精度,即 $\sigma(y_i) \neq \sigma(y_j)$,为此,引入所谓偏差的加权平方之和 Q' :

$$Q' = \sum_{i=1}^N \omega_i v_i^2 = \sum_{i=1}^N \omega_i \left[y_i^* - y_0(x_i^*) - \sum_{j=1}^m c_j f_j(x_i^*) \right]^2$$

其中 ω_i 称为测量值 y_i 的权重因子,与测量误差的关系为 $\omega_i = 1/\sigma^2(y_i) = 1/\sigma_i$ 。应用最小二乘法 $\partial Q'/\partial c_k = 0$,可得下列方程组。

$$\sum_{j=1}^m c_j \sum_{i=1}^N \omega_i f_j(x_i^*) f_k(x_i^*) = \sum_{i=1}^N \omega_i [y_i^* - y_0(x_i^*)] f_k(x_i^*) \quad (0-29)$$

$$k = 1, 2, 3, \dots, m$$

上述线性方程组写为矩阵形式时,则有: $(F^T W_y F) C = F^T W_y (Y^* - Y_0)$ (0-30)

式中, C, Y^*, Y_0 为列矩阵; F 是 $m \times N$ 矩阵; W_y 是权重矩阵;它们分别为

$$C = \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_m \end{bmatrix} \quad Y^* = \begin{bmatrix} y_1^* \\ y_2^* \\ \vdots \\ y_N^* \end{bmatrix} \quad Y_0 = \begin{bmatrix} y_0(x_1^*) \\ y_0(x_2^*) \\ \vdots \\ y_0(x_N^*) \end{bmatrix} \quad W_y = \begin{bmatrix} \omega_1 & & & 0 \\ & \omega_2 & & \\ & & \ddots & \\ 0 & & & \omega_N \end{bmatrix}$$

$$F = (f_{ij}) = \begin{bmatrix} f_1(x_1^*) & f_2(x_1^*) & \cdots & f_m(x_1^*) \\ f_1(x_2^*) & f_2(x_2^*) & \cdots & f_m(x_2^*) \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ f_1(x_N^*) & f_2(x_N^*) & \cdots & f_m(x_N^*) \end{bmatrix}$$

定义 V_y 为 N 个测量值 y_i^* 的协方差矩阵,考虑到各个 y_i 的测量是独立的,即 $\text{Cov}(y_i^*, y_j^*) = 0$,则有

$$V_y = \begin{bmatrix} \sigma_1^2 & \text{Cov}(y_1^*, y_2^*) & \cdots & \text{Cov}(y_1^*, y_N^*) \\ \text{Cov}(y_2^*, y_1^*) & \sigma_2^2 & \cdots & \text{Cov}(y_2^*, y_N^*) \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ \text{Cov}(y_N^*, y_1^*) & \text{Cov}(y_N^*, y_2^*) & \cdots & \sigma_N^2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sigma_1^2 & & & 0 \\ & \sigma_2^2 & & \\ & & \ddots & \\ 0 & & & \sigma_N^2 \end{bmatrix}$$

因为 $\omega_i = 1/\sigma_i^2$,很显然, W_y 为 V_y 的逆矩阵,即 $W_y = V_y^{-1}$ 。

(1) 最佳估计值的矩阵公式,应用矩阵运算公式,由(0-30)式可得

$$\bar{C} = \begin{bmatrix} \bar{c}_1 \\ \bar{c}_2 \\ \vdots \\ \bar{c}_m \end{bmatrix} = (F^T W_y F)^{-1} F^T W_y (y_i^* - y_0) \quad (0-31)$$

这样,可直接应用计算机的最小二乘法标准编程程序,只需开始时逐一输入 $m, N, f_{ij}, y_i^*, y_0(x_i^*)$ 及 ω_i 后,即可打印输出参数的最佳估计值 $\bar{c}_1, \bar{c}_2, \dots, \bar{c}_m$ 。

(2) 参数最佳估计值的误差:由(0-31)式可以看出 c 为 y^* 的线性函数, y_i^* 的测量误差 σ_i 必然影响到 c ,利用误差传递公式, c 的协方差矩阵为

$$V_{\bar{C}} = [(F^T W_y F)^{-1} F^T W_y] V_y [(F^T W_y F)^{-1} F^T W_y]^T$$

利用矩阵公式 $(ABC)^T = C^T B^T A^T$,而 W_y 为对称矩阵,则 $W_y^T = W_y$, $(F^T W_y F)$ 亦为对称矩阵,再考虑 $W_y = V_y^{-1}$,即 $W_y V_y = 1$,所以有:

$$V_{\bar{C}} = (F^T W_y F)^{-1} F^T W_y V_y W_y (F^T W_y F)^{-1}$$

$$V_{\bar{C}} = (F^T W_y F)^{-1} \quad (0-32)$$

协方差矩阵 $V_{\bar{c}}$ 的对角线上第 j 个对角元的平方根即为参数估计值 c_i 的标准误差。

(3) 非线性情况

在一般情况下,待求参数 $c_1, c_2, \dots, c_m$ 在理论曲线公式或经验公式中,不是以类似于(0-25)式中线性关系出现,而是呈现非线性。

$$y = f(x; c_1, c_2, \dots, c_m) \quad (0-33)$$

处理的一般方法是利用泰勒展开,将(0-33)式线性化,并用逐次迭代法求参数的最佳估计值。

首先选取参数初值(零级近似值) $c_1^{(0)}, c_2^{(0)}, \dots, c_m^{(0)}$, 将函数 $y = f(x; c_1, c_2, \dots, c_m)$ 在初值附近做泰勒展开,只取一阶导数项,近似地简化为 $\delta_i^{(0)} = c_i - c_i^{(0)}$ 的线性函数:

$$y = f(x; c_1^{(0)}, c_2^{(0)}, \dots, c_m^{(0)}) + \sum_{i=1}^m \left(\frac{\partial f}{\partial c_i} \right)_{c_1^{(0)}, c_2^{(0)}, \dots, c_m^{(0)}} c_m^{(0)} \delta_i^{(1)} + \dots$$

然后利用(0-32)式求出 $\delta_i^{(1)}$, 可得到参数 c_i 的一级近似值:

$$\begin{aligned} \delta^{(1)} &= (F^T W_y F)^{-1} F^T W_y (y_i^* - y_0) \\ F &= (f_{ij}); f_{ij} = \frac{\partial f(x; c_1, c_2, \dots, c_m)}{\partial c_j} \bigg|_{c_1^{(0)}, c_2^{(0)}, \dots, c_m^{(0)}} \\ y_0 &= \begin{bmatrix} f(x_1; c_1^{(0)}, c_2^{(0)}, \dots, c_m^{(0)}) \\ f(x_2; c_1^{(0)}, c_2^{(0)}, \dots, c_m^{(0)}) \\ \vdots \\ f(x_m; c_1^{(0)}, c_2^{(0)}, \dots, c_m^{(0)}) \end{bmatrix} \\ c_i^{(1)} &= c_i^{(0)} + \delta_i^{(1)} \end{aligned}$$

把上述所有公式中的参数零级近似值 $c_i^{(0)}$ 换成参数的一级近似值 $c_i^{(1)}$, 计算 $\delta_i^{(2)}$, 求出二级近似值 $c_i^{(2)} = c_i^{(1)} + \delta_i^{(2)}$ 。如此反复迭代计算下去到 $(S+1)$ 级近似值 $c_i^{(S+1)} = c_i^{(S)} + \delta_i^{(S+1)}$, 如果对所有 $i = 1, 2, \dots, m$ 有 $|\delta_i^{(S+1)}| < \epsilon$ ($\epsilon \ll 1$, 如令 $\epsilon = 0.01$) 时, 则停止迭代过程, 将参数的第 $S+1$ 级近似值作为参数的最佳估计值:

$$\bar{c}_i = c_i^{(S+1)} \quad i = 1, 2, \dots, m$$

非线性情况下的迭代法寻找参数最佳估计值的过程也可以用计算机编程完成, 可参阅参考书目[1]。如果参数的零级初值选取恰当, 迭代次数可大为减少。

【参考书目】

- [1] 李惕碚. 实验的数学处理[M]. 北京: 科学出版社, 1980.
- [2] 龚镇雄. 普通物理实验中的数据处理[M]. 西安: 西北电讯工程学院出版社, 1983.
- [3] 林少宫. 基础概率与数理统计[M]. 北京: 人民教育出版社, 1978.
- [4] 中国科学院数学所概率统计室. 常用数理统计表[M]. 北京: 科学出版社, 1974.