



P.R. 贝文顿 著

数据处理和误差分析

仇维礼 徐根兴 赵恩广 陈生忠 译



知 识 出 版 社

数据处理和误差分析

P. R. 贝文顿 著

仇维礼 徐根兴 赵恩广 陈生忠 译
徐根兴 赵恩广 校

知 识 出 版 社

数据处理和误差分析

仇维礼 徐根兴等译

知 识 出 版 社 出 版

(北京阜成门北大街17号)

新华书店总店北京发行所发行 三河县印刷厂印刷

开本787×1092 1/32 印张10.25 字数213千字

1986年6月第1版 1988年8月第二次印刷

印数: 8,701—10,200

ISBN7-5015-0216-1/TP·4

定价: 2.60元

序 言

信息时代，数据如海。它们来自实验室中的测量，工程技术现场的采集和计算机的模拟。大量数据的统计处理，函数拟合和误差估计，始终是自然科学和工程技术工作者的基本功。由于缺少这方面的基础知识而发生错误甚至闹出笑话的事例，曾经屡见不鲜。往往又没有足够的时间或数学准备来钻研大本的数理统计专著，而希望在必要时能随手拈来所需的公式曲线，数学用表或实用程序。

本书译者，两位是实验家，两位是理论工作者。他们都曾在各自的领域中，遇到误差估计和数据处理问题，却殊途同归地从这一本书中得到帮助，于是产生了把它译为中文，以饕同行的想法。他们终于挤工作余暇，完成了这件很好的工作。我们希望这本书很快成为广大科技工作者书桌上的常备手册之一。

国庆三十五周年前夕

柏林序于北京

前 言

本书的目的是介绍误差分析和数据处理技术，这些技术是从物理科学研究的工作者普遍采用的。为了适应大学生和研究生的要求，本书对这些技术的介绍力求全面和详细。内容的表达立足于实用，虽然为验证结果而作了详尽的推导，但仍然着重于方法，而不是理论。

本书的内容主要考虑到大学中、高年级实验室的水平。在这些实验室里，系统地学习这些技术是很有必要的。所论述的问题相当全面，可以满足进行实验研究的研究生的要求。他们可以从线性和非线性最小二乘拟合的普遍方法以及从定义和技术的概述中获得益处。

而且，本书所介绍的内容自成体系，不要求读者具备统计计算方法方面的预备知识。每一部分的内容都是从基本原理出发推导的。附录中讨论了微分计算和矩阵及行列式的运算，以便补充这些计算方法在正文中的应用。

然而，本书所强调的技术应用比在大学实验室中通常遇到的更普遍一些。随着计算机及其在实验室中的应用日益普及，引入更完备的数据处理概念是很重要的。书中每一部分都给出了完整的计算程序，以便使用它们具体说明所讨论的概念和过程。

开始五章介绍了误差、不确定度、概率分布，以及对表征单变量观测值参数估计值的优化方法等方面的概念。第六章到第九章处理以解析方法拟合复杂函数与多变量观测值，

其中包括对所产生的不确定度的估计以及对优化拟合函数的检验。最后三章描述了寻求数据与任意函数的最佳拟合的技术。此外，对处理数据与提取信息的技术也进行了讨论。

计算机程序 列出计算机程序的主要目的是使所表达的内容更加清楚，但是这些程序也可以用于计算。这些程序都写成子程序和函数子程序的形式，使用者可以灵活地用它们处理自己的数据。程序的格式与用于IBM 360 计算机系统的“IBM科学子程序包”的格式相似，其中包括对所用参数的定义及程序流程的说明所做的详细注释。

程序是用Fortran IV写的，但是从程序说明可以看出，除了使用双精度以及略去库存函数名的前缀之外，它们与Fortran II兼容。大部分数组的大小由使用者指定，程序中标出的大小都是1。对大多数Fortran文本，对一维数组，数组大小是虚宗量，它不一定要和实际用到的大小相对应。对于二维数组，总是标示出它们的大小。对这些数组以及完全出现在子程序中的数组所标示的大小使子程序能处理高达10项的拟合函数和100个数据点。对于处理更大的输入数据体，数组的大小可以增大；为了更有效地利用内存，也可以减小数组的大小。所有输入输出变量都指定为调用语句的宗量。

这些程序都以Fortran IV和Fortran II两种文本在小型和大型计算机上进行过调整，目的是使这些程序可供使用并且相当有效。但是，这些程序的最重要的功能是提供一个框架，按照这个框架，使用者可以根据自己的特殊要求编制和修改自己的程序。

目 录

序

前 言

第一章 系统误差和随机误差	1
1-1 误差	1
1-2 不确定度	6
本章小结	8
习题	9
第二章 平均值和标准偏差	10
2-1 母体	10
2-2 样本参数	16
本章小结	22
习题	23
第三章 常用分布	25
3-1 二项分布	25
3-2 泊松分布	33
3-3 高斯(或正态)误差分布	40
3-4 洛伦兹分布	46
本章小结	49
习题	50
第四章 误差的传播	53
4-1 一般方法	53

4-2 特殊公式	57
本章小结	61
习题	61
第五章 平均值和误差的估计	63
5-1 最小二乘法	63
5-2 仪器的不确定度	67
5-3 统计涨落	73
5-4 分布的 χ^2 检验	76
本章小结	83
习题	84
第六章 直线的最小二乘拟合	86
6-1 自变量和因变量	86
6-2 最小二乘法	93
6-3 仪器不确定度	95
6-4 统计涨落	101
6-5 误差的估计	106
本章小结	111
习题	112
第七章 相关概率	113
7-1 线性相关系数	113
7-2 多变量之间的相关	121
本章小结	125
习题	126
第八章 多项式的最小二乘拟合	127
8-1 分析方法	127
8-2 独立参数	136
8-3 矩阵求逆	141
本章小结	153
习题	155

第九章 多重回归	156
9-1 线性多重回归	156
9-2 多项式	168
9-3 非线性函数	172
本章小结	176
习题	173
第十章 拟合优度	179
10-1 χ^2 检验	179
10-2 F 检验	187
本章小结	193
习题	194
第十一章 任意函数的最小二乘拟合	196
11-1 一般方法	196
11-2 在参数空间寻优	199
11-3 χ^2 的抛物线外推法	219
11-4 函数的线性化	221
11-5 误差的确定	232
本章小结	234
习题	236
第十二章 复杂曲线的拟合	237
12-1 面积的确定	237
12-2 除去背景	240
本章小结	243
第十三章 数据处理	245
13-1 平滑化	245
13-2 内插与外推	250
13-3 面积积分	257
本章小结	265
习题	266

附录 A 计算法	268
A-1 偏微分	268
A-2 函数的极小化	272
附录 B 矩阵	277
B-1 行列式	277
B-2 联立方程组	285
B-3 矩阵求逆	287
附录 C 图和表	294
C-1 高斯概率分布	294
C-2 高斯分布的积分	296
C-3 线性相关系数	298
C-4 χ^2 分布	301
C-5 F分布	305
奇数号习题答案	312

计算机程序目录

程序 3-1	PBINOM	二项概率分布 $P_B(x, n, q)$	29
程序 3-2	FACTOR	阶乘函数 $n!$	30
程序 3-3	PPOISS	泊松概率分布 $P_P(x, \mu)$	37
程序 3-4	PGAUSS	高斯概率分布 $P_G(x, \mu, \sigma)$	42
程序 3-5	AGAUSS	积分高斯概率函数 $A_G(x, \mu, \sigma)$	45
程序 3-6	PLOREN	洛伦兹概率分布 $P_L(x, \mu, \sigma)$	47
程序 5-1	XFIT	单变量的最小二乘拟合	72
程序 6-1	LINFIT	直线的最小二乘拟合	98
程序 7-1	PCORRE	积分线性相关系数	118
程序 7-2	GAMMA	整数和半整数的伽玛函数 $\Gamma(n)$	120
程序 8-1	POLFIT	多项式的最小二乘拟合	133
程序 8-2	LEGFIT	勒让德多项式的最小二乘拟合	147
程序 9-1	REGRES	多重线性回归拟合	165
程序 9-2	FCTN	用于REGRES的幂级数拟合函数	169
程序 9-3	FCTN	用于REGRES的勒让德	

		多项式拟合函数	171
程序10-1	PCHISQ	超越 χ^2 的积分概率函数 $P_{\chi}(\chi^2, \nu)$	183
程序10-2	FCHISQ	拟合的约化 χ^2 , χ^2_{ν}	185
程序11-1	GRIDLS	非线性函数网格寻优最 小二乘拟合	202
程序11-2	FUNCTN	(高斯函数+二次多项式) 非线性拟合函数	204
程序11-3	GRADLS	非线性函数的梯度寻优 最小二乘拟合	209
程序11-4	CHIFIT	采用 χ^2 抛物线外推法的 最小二乘拟合	218
程序11-5	CURFIT	拟合函数线性化的最小 二乘拟合	227
程序11-6	FDERIV	(高斯函数+二次多项式) 拟合函数的导数	230
程序11-7	FDERIV	无解析形式的拟合函数 的导数	231
程序13-1	SMOOTH	平滑化过程	249
程序13-2	INTERP	数据的内插与外推	255
程序13-3	AREA	面积的数值积分	262
程序13-4	INTEG	面积积分分子程序	264
程序B-1	DETERM	方矩阵的行列式	284
程序B-2	MATINV	矩阵求逆	291

第一章 系统误差和随机误差

1-1 误 差

第一次做一项实验，其结果往往不象所要寻求的“真值”，这是在科学研究中常见的现象。当用几经改进的技术和方法重复这个实验时，实验结果将逐渐地趋近于我们可以接受的结果，也就是说，我们相信这些结果可靠地描述了相应的事件。有人甚至于断言：如果不付出相当大的气力，大自然是不会轻易地放弃它的奥秘的，实验的开始阶段往往失败就是生活中的一个基本事实。不管原因是什么，在所有的物理实验中，确实存在着误差和不确定度。我们必须通过改进实验技术和设计思想来降低误差和不确定度，然后对它们进行估计，以便确定实验结果的有效程度。

韦伯斯特把误差定义为“计算值或观测值与真值之间的偏离”。当然，通常我们并不知道“真”值，否则就没有必要做实验了。然而，从先前做过的同一类型的实验，或者从别的理论或实验途径，往往确实能近似地知道真值应当是什么。这种估计可以表明所得到的结果在数量级上是否正确。尽管如此，我们仍然需要某种系统的方法从数据本身确定实验

结果能有多大置信度。

有一类误差是可以直接处理的，它们是由于计算或测量中的错误或疏忽造成的。幸运的是，这些误差源通常是显而易见的，它们或者表现为数据点明显地不正确，或者表现为得到的结果过分地接近预期的值。这类误差属于不合理误差。用正确的方式重新完成原先错误的测量或计算，可以校正这类误差。

系统误差 另一类误差不象不合理误差这么容易发现，统计分析通常对这类误差无济于事，这就是系统误差。例如，由于设备标定不准或者观察者的偏倚引起的反复出现的误差。这些误差必须由分析实验条件和实验技术来加以估计。在某些情况下，我们可以对数据进行校正，以便补偿类型和大小已知的系统误差。在另一些情况下，必须对由这些误差造成的不确定度进行估计，并将它们与由统计涨落造成的不确定度合并。

例1-1 一位学生用一把钢米尺测量桌面的尺寸。由测量值的平均值得到桌面的长度为 1.982 米。其后他得知，该米尺是在 25°C 下标定的，米尺的膨胀系数为 $0.0005/^{\circ}\text{C}$ 。由于他是在 20°C 的温度下进行测量的，所以他把他的测量结果乘以 $1 - 5 \times 0.0005 = 0.9975$ ，这样，重新得到的长度测定值为 1.977 米。

当这位学生反复进行测量时，他发现他的读数方法有问题：他并不一定从正上方读尺子的刻度。通过实验，发现由此引起的后果是使读数总是短 2 毫米。对此进行校正后，其最后测量结果是 1.979 米。

精确度和精密度 人们往往对精确度和精密度这两个词的含义和它们之间的差别混淆不清。韦伯斯特给予这两个词

以相同的定义，这样就更加剧了这种混淆。然而，在科学研究中，这两个词具有完全不同的含义，这是必须加以区分的。

实验的精确度是衡量实验结果接近真值到何种程度的尺度，因而，它也是衡量实验结果的正确性的尺度。实验的精密度是衡量测定结果的严格程度的尺度，它不涉及这个结果表示什么意义，它还是衡量实验结果可复验性的尺度。绝对精密度表示实验结果的不确定度的幅度，其单位与实验结果的单位相同。相对精密度是以绝对精密度与实验结果值之比表示其不确定度的。

例如，在例1-1的实验中，第一个结果具有相当高的精密度。测得的桌面长度为1.982米，这个结果表示1毫米量级的绝对精密度和1/2000量级的相对精密度。对这个结果进行校正是企图通过补偿第一个结果与最好的可能估计值之间的已知偏差来改进精确度。事实上，这些校正根本没有改进精密度，反而损害了原来估计的精密度，因为这种校正本身仅是严格校正的估计值。

显然，对任何实验，我们必须同时考虑精确度和精密度。假如已经知道实验结果是很不精确的，那么，以高精密度测定这个结果就是白白浪费时间和精力。反之，如果精密度很低，就不能把实验结果看作是很精确的。例如，如果已经标明桌子的长度是2.米，答案无疑是精确的，但是它所提供的信息量是有限的：这样的精密度充其量不过表示桌子的长度在1.5米到2.5米之间。同样，如果已知桌子的长度严格的是2.000米，只要允许保留约20毫米的精确度，则继续改进实验的精密度就毫无意义。

有效数字和舍入法 实验结果的精密度是由实验结果的

书写方式暗示出来的,但一般它也应该明确地标明。为了表示精密度,我们按有效数位的多少书写一个数。实验结果中的有效数字定义如下:

1. 最左边的非零数位是最大的有效数位;
2. 如果没有小数点,最右边的非零数位是最小有效数位;
3. 如果有小数点,最右边的数位是最小有效数位,即使这位数字是零;
4. 最大和最小有效数位之间的所有数位都算作有效数位。

例如,下列数字各有四位有效数字: 1,234; 123,400; 123.4; 1.001; 1.000; 10.10; 0.0001010; 100.0。如果没有小数点,当最右边的一位数是零时就会发生混淆。例如,1,010这个数,即使最后一位数可能是有物理意义的,我们也只把它看做只有三位有效数字。为了避免引起混淆,最好附上小数点,或者用指数形式写成一个小数与相应的10的幂的乘积。这样,如果1,010这个数的所有四位数都是有效的,我们应当把它写成1,010. 或 1.010×10^3 。

当标列实验结果时,给出的有效数字应当近似地比按实验精密度确定的数字多一位。计入附加数位的原因是在计算过程中有时会丢失一位有效数字。由于计算精密度不够而引入的误差属于不合理误差。如果对计算中用到的所有数字都规定一位附加数位,这将会在很大程度上保留了原来的精密度。例如,在例 1-1 的实验中,如果实验结果的绝对精密度是10毫米,那么就可以知道第三位数字带有 ± 1 的不确定度,第四位数字根本不可能真正知道。我们几乎没有理由把四位数字都用于计算。如果精密度是2毫米,我们可以清楚地知

道第三位数，近似地知道第四位数。我们有理由标列四位数，但是或许没有理由标列五位数，因为我们甚至对第四位数字的值也没有多大把握。

当从一个数字中剔除无效数位时，保留下来的最后一位数字应当是以最好的精度舍入的。为了把一个数字舍入成比原来给定的位数更少的有效位数，应当把该数字截到所要求的有效数位。多余的数位当作一个小数按下列规则处理：

1. 如果这个小数大于 $1/2$ ，则将最小位有效数字增加1；
2. 如果这个小数小于 $1/2$ ，则不增加最小位有效数字；
3. 如果这个小数等于 $1/2$ ，则仅当最小位有效数字为奇数时才将它增加1，否则不予增加。

用这种舍入方式，最后结果的值总是精确到原来数字的最小一位有效数字的一半的范围之内。第三条规则的理由是：在很多情况下，这个小数或者等于零，或者等于 $1/2$ ，对小数为 $1/2$ 的情况始终增加最小位有效数字将会导致系统误差。例如，当要舍入成三位有效数字时，1.235和1.245都舍入成1.24，而1.2451则舍入成1.25。

随机误差 按照定义，实验的精确度一般依赖于对系统误差能控制或补偿的程度。系统误差使实验结果与“真”值之间存在重复出现的偏差。实验的精密度是与我们能消除或分析随机误差的程度有关的。随机误差是观测值的涨落，这种涨落使每次实验给出不同的结果。为了得到精密的结果，需要反复进行实验。一个给定的精确度意味着精密度至少与该精确度一样高。因而，精确度在某种程度上也依赖于随机误差。

除了简单地重复实验之外，减小随机误差的方法主要依靠改进实验和改革测量技术。如果随机误差是由于仪器的不