

实验误差与数据处理

物理实验时要对一些物理量进行测量。各个物理量在一定条件下具有一个不以人的意志为转移的真实大小，称此值为被测量的真值。但是在测量中，通过实验方法来求被测量的真值时，由于对客观规律认识的局限性，测量仪器不准确，测量手段不完善，测量条件发生变化以及测量工作中的疏忽或错误等原因，都会使测量结果与真值不同，这个差别称为测量误差。

随着科学技术的发展和生产水平的提高，对减小测量误差提出了越来越高的要求。对很多测量来说，其价值完全取决于测量的准确程度。当测量误差超过一定限度时，测量结果不但没有意义，甚至会给工作带来危害。

误差理论和数据处理知识，是物理实验的重要内容之一，也是实验工作者应该具备的基本素质之一。我们研究误差的目的，一是根据误差的规律，在一定条件下尽力设法减小误差，保证实验课题的质量。二是根据误差理论合理地设计和组织实验，正确地选用测量方法和测量仪器。三是根据误差理论确切地评价测量结果中所包含误差的大小，以便更好地应用测量数据。

误差问题在普通物理实验课程中已经讲过一些。与普通物理实验相比，近代物理实验的实验技术和手段更加综合，实验仪器更加复杂，测量对象本身的统计涨落现象更加明显，因而对实验人员的误差知识提出了更高的要求。在这一部分中我们将对实验误差和数据处理的常用知识作一回顾和简单介绍，希望读者能在统计概率的基础上理解它。

一、误差的基本概念

(一) 误差的定义与表示

测量误差定义为测量值 x 与真值 x_0 之差。即

$$\Delta x = x - x_0 \quad (0-1)$$

上面定义的误差是绝对误差。绝对误差 Δx 是一个代数值，当 $x \geq x_0$ 时， $\Delta x \geq 0$ ；当 $x \leq x_0$ 时， $\Delta x \leq 0$ ；它表示了测量值偏离真值的程度和方向。

有些问题用相对误差表示则更有意义。相对误差是指绝对误差与真值之比，常用百分数表示。即；

$$\gamma = \frac{\Delta x}{x_0} \times 100\% \quad (0-2)$$

相对误差表示了测量结果的准确程度。

（二）测量误差的分类

按照测量误差的来源和性质，通常可把误差分为系统误差和随机误差两大类。

1. 系统误差

在相同条件下多次测量同一物理量时，误差的绝对值和符号保持恒定或按某一确定规律变化的，这种误差称为系统误差。

产生系统误差的原因主要有以下几个方面：仪器误差（测量设备的缺陷、测量仪器不准、测量仪表安装放置和使用不当所引起的误差）；实验条件误差（测量环境变化，如温度、湿度、电源电压、周围电磁场的影响等所带来的误差）；理论与方法误差（测量时使用的方法不完善，所依据的理论不严密或采用了某些近似公式等造成的误差）；人身误差（测量人员感觉器官的不完善、生理上最小分辨能力的限制、一些不正确的测量习惯等造成的误差）。系统误差的特点是具有确定性和规律性，因此可以根据系统误差产生的原因，采取一定的措施，设法消除或减弱它。

2. 随机误差

在相同条件下多次测量同一物理量时，尽管系统误差已经消除或不存在，但每次测量结果也并不完全相同。这种不同表明测量值与真值之间的误差，其符号时正时负，其绝对值时大时小，不可预知也不可控制，这种带有随机性或偶然性的误差称为随机误差，亦称为偶然误差。

随机误差是由那些对测量结果影响很微小、且互不相关的多种因素共同作用造成的。例如周围环境的无规起伏、仪器性能的微小波动、实验测量人员感觉器官无规律的微小变化以及一些尚未发现的因素等。随机误差对每次测量来说没有必然的规律性，好像纯属偶然，但进行多次重复测量时会呈现出统计规律性。因此可以用统计方法来处理随机误差。

除了上述两类误差之外，还有一类误差称为粗大误差。超出在一定条件下预期的误差叫粗大误差。也就是说，在一定的测量条件下，测量结果明显地偏离了真值。它主要是由于读错数、记错数或环境条件发生了突然跃变等原因造成的。由于粗大误差明显地歪曲了测量结果，因此含有粗大误差的测量结果称为坏值，应该剔除不用。

（三）测量结果的评价

在相同条件下对同一物理量进行多次测量时，测量结果中不可避免地同时包含有系统误差和随机误差。我们通常用精密度、正确度和精确度这三个指标来衡量测量结果的优劣。

精密度：反映随机误差的大小。精密度高说明多次测量值的重复性好，测量数据比较集中。

正确度：正确度亦称准确度，反映系统误差的大小。正确度高说明多次测量的平均值接近真值的程度好。

精确度：反映随机误差和系统误差的综合结果。精确度高说明多次测量值不仅重复性好，而且平均值又接近真值，即测量值集中分布在真值附近。

(四) 测量结果的不确定度

在误差理论中，与误差联系紧密而又不完全相同的另一重要概念是不确定度。由于测量误差不可避免，以致真值无法求得。而真值不知道，也就无法确定误差的大小。因此，实验数据处理只能求出实验的最佳估计值及其不确定度。把实验结果表示为

$$\text{测量值} = \text{最佳估计值} \pm \text{不确定度} \quad (0-3)$$

通常取算术平均值作为测量值的最佳估计值；用平均值的标准偏差来表示不确定度。真值以一定的概率处在上式所给定的量值范围之内。

二、处理系统误差的一般方法

系统误差是在相同条件下多次测量某一物理量时，绝对值和符号保持恒定或在测量条件改变时按某种确定规律而变化的误差。其中在某些条件改变时仍保持不变的称为恒值系差；随测量条件而变化的叫变值系差。可以看出，系统误差具有固定性和规律性，不具有抵偿性。通常不能用处理随机误差的方法来处理。我们在讨论随机误差时是以测量数据中不包含系统误差为前提的。可是系统误差与随机误差往往同时存在于测量数据中，有时系统误差对测量结果的影响比随机误差还要严重。因此我们应该采取措施来限制、减弱或消除系统误差。对待系统误差，很难说有什么通用的处理方法，主要取决于实验工作者的经验、学识和技巧，这里我们只对处理系统误差的思路和方法作概要的介绍。

对系统误差的处理，一般包括以下几方面的内容：第一，设法检验系统误差是否存在。第二，分析产生系统误差的原因，并在测量之前尽量消除。第三，在测量过程中采取某些技术措施，来减弱它的影响。第四，估计出残存的系统误差的大小。对已知大小和方向的系统误差予以修正，对不能确切知道大小和方向的系统误差，要尽可能估计出大体范围，以便掌握它对测量结果的影响。

(一) 系统误差的发现

在讨论误差的基本概念时曾经指出，产生系统误差的可能原因存在于仪器、环境、方法和人身等方面。但通过什么途径和方法可以判断系统误差的存在及其大小呢？

对比检验是判断系统误差最常用的方法。所谓对比，包括把要判断的实验结果跟标准值、理论值相比较；或者是跟用精确度较高的仪器得到的测量值相比较；还可以跟采用不同方法测得的结果相比较。应该注意的是，由于随机误差不可避免，在系统误差与随机误差同时存在的条件下，应进行多次测量以减小随机误差的影响，才能更有效地判断系统误差的存在。在多次测量中，分析测量数据随条件变化的规律（特别是偏差 $v_i = x_i - \bar{x}$ 的变化），往往会有助于发现线性变化的系统误差（即累进性系差）和周期变化的系统误差（周期性系差）。

直接分析实验原理、方法以及实验条件的变化，也是判断系统误差的一种有效方法。如果实验方案本身就存在着不完备性，比如说计算公式是近似的，测量方法受到某种副效应或某种干扰的影响，则这个实验必然存在着系统误差。另外，有些实验所研究的物理现

象存在着统计涨落, 测量仪器产生零点漂移, 控制的实验条件随时间而明显变化等, 这些因素都会带来系统误差。对实验本身的分析研究, 常常会使我们直接找出系统误差, 并可估计其大小。

分析测量数据的变化是判断系统误差的一种重要方法。当实验中的随机误差较大时, 变值系统误差很难发现。常用下面两个判据来发现系统误差:

(1) 马利科夫判据 马利科夫判据是用来判别累进性系统误差的常用方法。在使用这种方法时, 把 N 次等精度测量的残差 $v_i = x_i - \bar{x}$ 按测量条件变化的顺序 (例如按时间的先后次序) 排列为 $v_1, v_2, \dots, v_N$, 然后把 N 个残差分成两部分并求其差值。

即当 N 为偶数时求

$$M = \sum_{i=1}^{N/2} v_i - \sum_{i=N/2+1}^N v_i \quad (0-4)$$

当 N 为奇数时求

$$M = \sum_{i=1}^{(N-1)/2} v_i - \sum_{i=(N+3)/2}^N v_i \quad (0-5)$$

若测量中含有累进性系统误差, 则前后两部分残差明显不同, 因而 M 明显地异于零。通常 M 的绝对值不小于最大残差的绝对值时, 则可以认为有累进性系统误差。

(2) 阿卑—赫梅特判据 阿卑—赫梅特判据常用来判别周期性系统误差。在使用这种判据时先按顺序把残差两两相乘, 然后取和的绝对值, 并求出测量数据的方差估计值, 若

$$\left| \sum_{i=1}^{N-1} v_i v_{i+1} \right| \geq \sqrt{N-1} \sigma^2(x) \quad (0-6)$$

则可认为测量中存在着周期性的系统误差。

(二) 消除产生系统误差的根源

针对产生系统误差的原因, 在测量开始之前尽量发现和消除这些误差来源或防止测量受这些误差来源的影响, 这是减弱或消除系统误差最好的方法。

在测量中, 除从测量原理和方法上尽力作到正确、严格之外, 还要对测量仪器定期检定和校准, 注意仪器的使用条件和方法。例如仪器的放置位置、工作状态、使用频率范围、电源供给、接地方式、附件的使用与导线的连接都要注意符合规定并正确合理。

要注意周围环境对测量的影响。精密测量要注意恒温或采取散热、空气调节等措施。为避免周围电磁场及有害震动的影响, 必要时可采取屏蔽或减震措施。加装稳压电源即可减小电源波动的影响。

对实验人员主观原因造成的系统误差, 在提高业务水平和工作责任心的同时, 还可以从改变设备方面尽力避免。例如用数字式仪表代替指针式仪表在很大程度上会减弱读数误差。用自动打印设备代替手抄数据则会避免抄错数据。必要时变换实验人员重新测量, 也有利于避免测量人员因过度疲劳所导致的错误判断。

(三) 采用典型测量技术限制和消除系统误差

虽然在实验之前注意分析和避免产生系统误差的来源, 但仍然很难消除产生系统误

差的全部因素。因此在测量过程中，可以采用一些专门的测量技术和测量方法，来限制和消除系统误差。

(1) 零示法 这种方法主要是为了消除指示仪表不准确而造成的误差。在测量中我们使被测量对指示仪表的作用与某个已知量对它的作用相互平衡以使指示仪表示零，这时被测量就等于已知的标准量，这种方法叫零示法。

在电阻测量中广泛使用的平衡电桥就是用零示法来进行测量的。在电桥中作为指示仪表的检流计应该灵敏，作为已知量的各臂元件值应该准确。

(2) 代替法 代替法是在测量条件不变的情况下，用一个标准已知量去代替被测量，并调整标准量使仪器的指示值不变，在这种情况下，被测量就等于标准量的数值。由于在代替的过程中，仪器的状态和示值都不变，那么仪器的误差和其他造成系统误差的因素对测量结果基本上不产生什么影响。

在电桥中用代替法求未知电阻时，首先接入被测电阻，调节电桥臂使电桥平衡。然后用一个可变标准电阻代替被测电阻，调整这个可变标准电阻的阻值，使电桥达到原来的平衡状态。这时被测电阻的阻值就等于可变标准电阻的阻值。只要电桥中检流计灵敏度足够高，测量误差便主要取决于标准电阻的准确程度，而与各桥臂电阻以及检流计的准确度无关，电桥中的分布电容、分布电感等对测量也基本上没有什么影响。

(3) 交换法 由于某些因素可能使测量结果产生单一方向的系统误差时，我们可以进行两次测量，利用交换被测量在测量系统中的位置或测量方向等办法，设法使两次测量中误差源对被测量的作用相反。对照两次测量值，可以检查出系统误差的存在。对两次测量值取平均值，会大大削弱系统误差的影响。例如用旋转度盘读数时，分别将度盘向右旋转和向左旋转两次读数，对读数取平均值，可以在一定程度上消除由传动系统的回差造成的系统误差。用电桥测电阻时，将被测电阻先后放在两个桥臂上进行测量，也有助于削弱系统误差的影响。

(四) 修正系统误差

前面介绍的限制、减弱和消除系统误差的一些方法，是针对系统误差产生的根源采取的“治本”之法。但有时系统误差的变化规律过于复杂，采取了一些技术措施后仍然难于完全解决。这时应尽量找出系统误差的方向和数值，采用修正值（包括修正曲线或公式）的方法加以修正。例如可在不同温度时进行多次测量，找出温度对测量值影响的关系，然后在实际测量时，根据当时的温度对测量结果进行修正。

处理系统误差是一个复杂的问题，需要实验工作者具有坚实的理论基础和丰富的实践经验。希望读者在平日的实验训练中，结合具体实验的分析研究来提高这方面的能力。

三、概率统计的有关概念

在近代物理实验中，测量值的随机性除了有随机误差的影响外，有时还来自被测对象本身固有的随机性质。例如温度、密度、压强等宏观物理量的数值是统计平均值，原子核蜕变的统计涨落等。因此我们要用概率理论和数理统计的方法研究随机误差对测量数据的

影响，并用统计平均的办法来估计和处理随机误差。下面我们先回顾概率统计中的几个概念。

(一) 随机变量的概率分布

1. 随机变量

在一定条件下，某一事件 A 可能发生，也可能不发生，则事件 A 称为随机事件。在物理实验中，在一定条件下测量某个物理量时，由于存在着我们未知或尚不能控制的许多偶然因素，某一测量值的出现是随机事件。

如果在一定的条件下进行了 N 次实验，其中事件 A 发生了 N_A 次，则比值 N_A/N 称为事件 A 发生的频率。当 $N \rightarrow \infty$ 时，频率存在一个极限值，称为事件 A 的概率，记为 $P_r(A)$ 即 $N_A/N \rightarrow P_r(A)$ 。

不同的随机事件可以用不同的数来表示，这个数便是随机变量。随机变量按其取值的情况分为离散型和连续型：只能取有限个或可数的一串数值的随机变量称为离散型随机变量，可能值布满某个区间的随机变量是连续型随机变量。

随机变量全部可能取值的集合称为总体。总体的任何一个部分称为样本。在实验中，对某个物理量做有限次测量，测量结果总是获得某随机变量的样本。

2. 分布函数、概率函数和概率密度函数

对于随机变量的描述，我们不仅关心随机变量的全部取值，而且要了解各种可能取值的概率，即随机变量的概率分布。

无论是离散型还是连续型的随机变量，其可能的全部取值可以排列在实数轴上。因此可以定义随机变量 X 的分布函数 $P(x)$ 为

$$P(x) = P_r(X \leq x) \quad (0-7)$$

即分布函数 $P(x)$ 在 x 处的取值，等于 X 取值小于或等于 x 这样一个随机变量的概率。按照分布函数的定义，它必须满足：

$$P(-\infty) = 0 \quad (0-8)$$

$$P(\infty) = 1 \quad (0-9)$$

离散型随机变量 X 只能取可数的数值 $x = x_1, x_2, x_3, \dots$ 除了用分布函数描述外，还可以用概率函数 $p(x)$ 来描述它的分布。概率函数在某一点 x 的取值，等于随机变量 X 取值为 x 的概率，即：

$$p(x) = P_r(X = x) \quad (0-10)$$

根据分布函数和概率函数的定义，它们之间的关系为

$$P(x) = \sum_{x_i \leq x} p(x_i) \quad (0-11)$$

对于连续型随机变量，可引入概率密度函数 $p(x) = dP(x)/dx$ 来描述它的分布，因此有

$$P(x) = \int_{-\infty}^x p(x) dx \quad (0-12)$$

根据公式 (0-9) 应该有

$$\int_{-\infty}^{\infty} p(x) dx = 1$$

(0-13)

这就是概率密度函数 $p(x)$ 应满足的归一化条件。

由概率密度函数或分布函数，可求得随机变量 X 在区间 $[a, b]$ 内取值的概率为

$$P_r(a \leq x \leq b) = P(b) - P(a) = \int_a^b p(x) dx \quad (0-14)$$

此值称为随机变量 X 在区间 $[a, b]$ 内的概率含量。

3. 分布的数字特征量

如果一个随机变量的概率函数或概率密度函数的形式已知，只要给出函数式中各个参数（称为分布参数）的数值，则随机变量的分布就完全确定了。而分布参数的数值，往往就是所要研究的物理量的数值。

对于不同形式的分布，常常用一些有共同定义的数字特征量来表示它们。最重要的特征量有两个：期望值和方差。

(1) 随机变量的期望值 随机变量的期望值定义为：

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} x p(x) dx \quad (0-15)$$

期望值的物理意义是：作无穷多次重复测量时，测量结果的平均值。它处于随机变量概率密度曲线重心的位置。对于单峰对称的密度曲线，期望值就是曲线峰值所对应的位置。对于其他形式的密度曲线，期望值与概率密度函数取极大值的位置一般不重合。根据期望值的定义可得

$$\int_{-\infty}^{\infty} (x - \langle x \rangle) p(x) dx = 0 \quad (0-16)$$

此式表明，随机变量 x 分布在它的期望值附近。

(2) 随机变量的方差 随机变量的期望值只反映了它取值的平均情况。但是在实验工作中只知道随机变量的平均情况往往是不够的，还需要知道随机变量的离散程度。通常用随机变量的方差来反映它的离散程度。随机变量 x 的方差定义为

$$\sigma^2(x) = \langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} (x - \langle x \rangle)^2 p(x) dx \quad (0-17)$$

方差描述随机变量围绕期望值分布的离散情况，即随机变量取值偏离期望值起伏的大小。

方差的平方根称为随机变量的标准误差，简称标准差。即 $\sigma(x) = \sqrt{\sigma^2(x)}$
根据方差的定义，不难证明： $\sigma^2(x) = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2$ 。

(二) 随机变量的正态分布

各种随机变量由于受到不同因素的影响，或者物理现象本身的统计性质，随机变量的概率分布也多种多样。

概率理论中的中心极限定理说明：如果一个随机变量是由大量的、相互独立的、微小的因素所合成的总效果，则这个随机变量就近似地服从正态分布。

在近代物理实验的大多数情况下，测量中的随机误差正是由对测量值影响较微小的相互独立的且又无法控制的多种因素的综合影响造成的。因而随机误差的分布及其在随机误差影响下测量数据的分布会遵从或近似遵从正态分布。

正态分布又称为高斯分布，是误差理论中最重要的分布。它是一种连续型分布，其概率密度函数的一般形式为

$$p(x) = \frac{1}{\sigma \sqrt{2\pi}} \exp \left[-\frac{1}{2} \left(\frac{x-\mu}{\sigma} \right)^2 \right] \quad (0-18)$$

式中 x 为随机变量， μ 和 σ 为分布参数且 $\sigma > 0$ 。为了标志其特征通常又用 $n(x; \mu; \sigma^2)$ 来表示正态分布的概率密度函数，用 $N(x; \mu; \sigma^2)$ 表示正态分布的分布函数，即

$$n(x; \mu, \sigma^2) = \frac{1}{\sigma \sqrt{2\pi}} \exp \left[-\frac{1}{2} \left(\frac{x-\mu}{\sigma} \right)^2 \right] \quad (0-19)$$

$$N(x; \mu, \sigma^2) = \frac{1}{\sigma \sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \exp \left[-\frac{1}{2} \left(\frac{x-\mu}{\sigma} \right)^2 \right] dx \quad (0-20)$$

不难证明，如果一个随机变量 x 遵从正态分布，则它的期望值、方差和标准差分别为

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} x n(x; \mu, \sigma^2) dx = \mu \quad (0-21)$$

$$\sigma^2(x) = \int_{-\infty}^{\infty} (x-\mu)^2 n(x; \mu, \sigma^2) dx = \sigma^2 \quad (0-22)$$

$$\sigma(x) = [\sigma^2(x)]^{1/2} = \sigma \quad (0-23)$$

由此可见，正态分布中的两个分布参数 μ 和 σ 的意义： μ 是期望值； σ 是标准误差。这两个参数决定了正态分布的特征：若消除了系统误差，则 μ 就是待测物理量的真值，它决定了分布曲线的位置。而参数 σ 的大小决定了概率密度函数曲线的胖与瘦，即决定了分布偏离期待值的离散程度。不同参数值的正态分布概率密度函数曲线如图 0-1 所示。由图可见，正态分布的特点是：曲线是单峰对称的。对称轴所在处 ($x=\mu$) 也就是期望值和概率密度极大值所在处。在期望值附近一个标准误差范围以内的概率含量为

$$P_r(|x-\mu| \leq \sigma) = \int_{\mu-\sigma}^{\mu+\sigma} n(x; \mu, \sigma^2) dx = 0.683$$

如图 0-2 所示。图中阴影部分的面积在数值上等于 0.683。如果把 x 的取值范围扩大到期望值附近三倍标准偏差的范围内，其概率含量为

$$P_r(|x-\mu| \leq 3\sigma) = \int_{\mu-3\sigma}^{\mu+3\sigma} n(x; \mu, \sigma^2) dx = 0.997$$

因此，遵从正态分布的随机变量 x 取值与期望值相差大于 3σ 的概率已小于 0.3%。

期望值 $\mu=0$ ，方差 $\sigma^2=1$ 的正态分布称为标准正态分布，其概率密度函数和分布函数分别为

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

$$N(x; 0, 1) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \exp \left(-\frac{1}{2} x^2 \right) dx$$

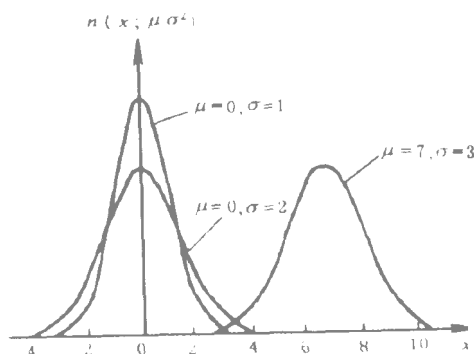
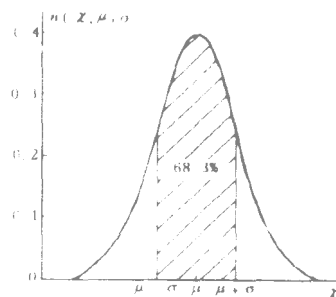


图 0-1 不同参数值的正态分布曲线

图 0-2 $|x - \mu| \leq \sigma$ 范围内的概率含量

对于 $\mu \neq 0, \sigma^2 \neq 1$ 的正态分布, 可对随机变量 x 作变换 $u = \frac{x - \mu}{\sigma}$, 那么新的随机变量 u 服从标准化的正态分布, 而且有:

$$n(x; \mu, \sigma^2) = n(u; 0, 1)$$

$$N(x; \mu, \sigma^2) = N(u; 0, 1)$$

这样便可利用标准正态分布来求概率分布。

四、随机误差的估计与处理

前面讨论了随机变量的正态分布, 它对于研究随机误差具有特别的意义。现在我们就来具体探讨随机误差的估计与处理问题, 即要研究随机误差的数字特征问题。首先需要说明的是: 第一, 我们在实验测量中只能得到有限次测量值, 它们是随机样本我们是从随机样本来估计总体分布参数。第二, 在这里我们假定系统误差不存在或已经修正, 实验者是用相同的方法和仪器在相同的条件下作重复而相互独立的测量, 得到一组等精度测量值, 也就是说, 我们只讨论等精度测量中随机误差的数字特征问题。

(一) 正态分布参数的最大似然估计

1. 似然函数和最大似然法

设某个物理量 X 的 N 个等精度测量值为 $x_1, x_2, \dots, x_N$, 它是总体 X 中容量为 N 的样本, 我们把这个样本看作是 N 维的随机变量, 把 N 维随机变量的联合概率密度定义为样本的似然函数。根据概率理论, 相互独立随机变量的联合概率密度等于各个随机变量概率密度的相乘积。设 x 的概率密度函数为 $p(x; \theta)$, 则联合概率密度函数为

$$p(x_1, x_2, \dots, x_N) = p(x_1; \theta) \cdot p(x_2; \theta) \cdots p(x_N; \theta) = \prod_{i=1}^N p(x_i; \theta)$$

式中 θ 为分布的特征参数。即这个样本的似然函数为

$$L(x_1, x_2, \dots, x_N; \theta) = \prod_{i=1}^N p(x_i; \theta) \quad (0-24)$$

我们可以从两个方面来理解似然函数: 若分布参数 θ 是已知的, 那么 L 的大小说明哪

些样本有较大的可能性；若 θ 是未知的但已知样本 $(x_1, x_2, \dots, x_N)$ 则采用 θ 的不同估计值会使得 L 有不同的数值， L 的大小说明哪些 θ 值有较大的可能性。选择使实测数值有较大概率密度的参数值作为 θ 的估计值是一种很自然的估计办法，这就是最大似然法如果估计值 $\hat{\theta}$ 使似然函数最大，即

$$L(x_1, x_2, \dots, x_N; \theta) |_{\theta=\hat{\theta}} = \max$$

则 $\hat{\theta}$ 称为参数 θ 的最大似然估计 求最大似然估计量的方法是解似然方程

$$\frac{\partial \ln L(x_1, x_2, \dots, x_N; \theta)}{\partial \theta} = 0 \quad (0-25)$$

2. 正态分布的参数估计

现在用最大似然法来估计正态分布的特征参数。根据正态分布的概率密度函数式 (0-18)，可得正态样本的似然函数为

$$\begin{aligned} L(x_1, x_2, \dots, x_N; \mu, \sigma^2) &= \prod_{i=1}^N \frac{1}{\sigma \sqrt{2\pi}} \exp \left[-\frac{1}{2} \left(\frac{x_i - \mu}{\sigma} \right)^2 \right] \\ &= \left(\frac{1}{\sigma^2 2\pi} \right)^{N/2} \exp \left[-\frac{1}{2\sigma^2} \sum_{i=1}^N (x_i - \mu)^2 \right] \end{aligned}$$

对似然函数 L 取对数，得

$$\ln L = -\frac{N}{2} \ln 2\pi - \frac{N}{2} \ln \sigma^2 - \frac{1}{2\sigma^2} \sum_{i=1}^N (x_i - \mu)^2$$

为了求得分布参数 μ 和 σ^2 的最大似然估计 $\hat{\mu}$ 和 $\hat{\sigma}^2$ 求 $\ln L$ 对 μ 和 σ^2 的偏导数

$$\begin{aligned} \frac{\partial \ln L}{\partial \mu} \Big|_{\mu=\hat{\mu}} &= \frac{1}{\sigma^2} \sum_{i=1}^N (x_i - \hat{\mu}) = 0 \\ \frac{\partial \ln L}{\partial \sigma^2} \Big|_{\sigma^2=\hat{\sigma}^2} &= -\frac{N}{2} \frac{1}{\hat{\sigma}^2} + \frac{1}{2\hat{\sigma}^4} \sum_{i=1}^N (x_i - \hat{\mu})^2 = 0 \end{aligned}$$

联立求解以上两个方程，可得期望值和方差的估计值分别为

$$\hat{\mu} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N x_i = \bar{x} \quad (0-26)$$

$$\hat{\sigma}^2 = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (x_i - \bar{x})^2 \quad (0-27)$$

从而标准偏差的估计值为

$$\hat{\sigma} = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (x_i - \bar{x})^2} \quad (0-28)$$

上述似然估计的结果表明：测量值 x 的期望值 μ 由测量样本的算术平均值估计；方差 σ^2 由测量样本的均方偏差估计。标准误差 σ 由均方根偏差估计。但对于容量有限的样本来说，上述三个估计量只是被估计参数的近似值。

(二) 样本平均值的期望值和方差

若 $(x_1, x_2, \dots, x_N)$ 是被测物理量的一个随机样本，该样本的平均值 $\bar{x} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N x_i$ 由期

望值的一些运算规则可以求得平均值 $\bar{x}$ 的期望值和方差：

$$\langle \bar{x} \rangle = \left\langle \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N x_i \right\rangle = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \langle x_i \rangle = \langle x \rangle \quad (0-29)$$

$$\sigma^2(\bar{x}) = \sigma^2\left(\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N x_i\right) = \frac{1}{N^2} \sigma^2\left(\sum_{i=1}^N x_i\right) = \frac{1}{N^2} \sum_{i=1}^N \sigma^2(x_i) = \frac{1}{N} \sigma^2(x) \quad (0-30)$$

从而求得样本平均值的标准误差为

$$\sigma(\bar{x}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sigma(x) \quad (0-31)$$

由上面三式可以看出：随机样本平均值 $\bar{x}$ 的期望值就是被测量 x 的期望值，所以用平均值 $\bar{x}$ 作为真值 μ 的估计值是合适的。样本平均值 $\bar{x}$ 的方差比单次测量值的方差小 N 倍；换句话说就是：若测量值 x 在真值 μ 左右摆动，则 N 个测量值的平均值 $\bar{x}$ 也在真值 μ 左右摆动，它们的期望值都是 μ ，但 $\bar{x}$ 比 x 更靠近真值 μ 。这就是通常采用平均值估计被测真值的理由。

我们可以这样来理解上面三个公式的物理意义：若被测物理量的总体中，各测量值由于随机误差的影响而分布在真值 μ 附近，分散的程度可以用 $\sigma(x)$ 来描述。那么 N 次测量值取算术平均值之后， $\bar{x}$ 必然还分布在 μ 附近。但是由于在平均的过程中，随机误差在很大程度上会互相抵消，所以 $\bar{x}$ 的分布就相对集中了，即 $\sigma(\bar{x})$ 比 $\sigma(x)$ 变小了

(三) 样本的标准偏差

下面我们来检验样本均方偏差是否满足无偏估计条件。为此求均方偏差的期望值：

$$\begin{aligned} \left\langle \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (x_i - \bar{x})^2 \right\rangle &= \frac{1}{N} \left\langle \sum_{i=1}^N (x_i - \bar{x})^2 \right\rangle = \frac{1}{N} \left\langle \sum_{i=1}^N [(x_i - \langle x \rangle) - (\bar{x} - \langle x \rangle)]^2 \right\rangle \\ &= \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \left\langle (x_i - \langle x \rangle)^2 \right\rangle - \left\langle (\bar{x} - \langle x \rangle)^2 \right\rangle = \sigma^2(x) - \frac{1}{N} \sigma^2(x) = \frac{N-1}{N} \sigma^2(x) \end{aligned} \quad (0-32)$$

上式表明，样本均方偏差的期望值不是 $\sigma^2(x)$ 而是 $\frac{N-1}{N} \sigma^2(x)$ 。换句话说，样本均方偏差的值不是在 $\sigma^2(x)$ 附近摆动，而是在 $(N-1)\sigma^2(x)/N$ 左右摆动。这说明样本标准偏差不是 $\sigma^2(x)$ 的无偏估计量。

现定义一个统计量为

$$S_x^2 = \frac{1}{N-1} \sum_{i=1}^N (x_i - \bar{x})^2 \quad (0-33)$$

称它为样本方差，它的期望值为

$$\begin{aligned} \langle S_x^2 \rangle &= \left\langle \frac{1}{N-1} \sum_{i=1}^N (x_i - \bar{x})^2 \right\rangle = \frac{1}{N-1} \left\langle \sum_{i=1}^N (x_i - \bar{x})^2 \right\rangle \\ &= \frac{N-1}{N} \left\langle \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (x_i - \bar{x})^2 \right\rangle = \frac{N}{N-1} \cdot \frac{N-1}{N} \sigma^2(x) \end{aligned}$$

$$\text{即} \quad \langle S_x^2 \rangle = \sigma^2(x) \quad (0-34)$$

可见样本方差 S_x^2 的期望值等于方差 $\sigma^2(x)$ ，故一般采用 S_x^2 作为 $\sigma^2(x)$ 的估计。

把 S_x^2 的平方根取正值，称为样本的标准偏差，简称样本的标准差。即

$$S_x = \sqrt{\frac{1}{N-1} \sum_{i=1}^N (x_i - \bar{x})^2} \quad (0-35)$$

这个公式称为贝塞尔公式。通常把样本的标准偏差 S_x 作为标准误差 $\sigma(x)$ 的估计。

贝塞尔公式是已知 N 次测量值后估计标准误差的一个很有用的公式。在物理实验中，常常需要从随机样本中求出期望值和方差的估计值来，这时就需要用到贝塞尔公式。目前有些袖珍型科学计算器都带有计算 $\bar{x}$ 和 S_x 的程序。只要从数字键上输入 N 个测量数据，再按动相应按键就可以直接读出这批数据的期望值和标准偏差的估计值，非常方便。其中 S_x （有些计算器中标为 S 或 σ_{N-1} ）就是按式 (0-35) 计算的。

测量平均值 $\bar{x}$ 的标准误差 $\sigma(\bar{x})$ 的估计问题。按照前面的讨论，可以采用平均值的标准偏差

$$S_{\bar{x}} = \frac{S_x}{\sqrt{N}} = \sqrt{\frac{1}{N(N-1)} \sum_{i=1}^N (x_i - \bar{x})^2} \quad (0-36)$$

作为 $\sigma(\bar{x})$ 的估计值。

（四）正态样本测量结果的表述

当测量值 x 服从正态分布的情况下，它的平均值也会严格的服从正态分布 $n(x; \mu, \sigma_x^2)$ ，其中 $\sigma_x = \sigma / \sqrt{N}$ ；如果对随机变量 $\bar{x}$ 作线性变换，令 $t = \frac{\bar{x} - \mu}{\sigma_x}$ ，则随机变量 t 遵从标准正态分布 $n(t; 0, 1)$ ，这时可以按标准正态分布概率来表示测量结果：当采用 σ_x 表示不确定度时，即有 $\mu = \bar{x} \pm \sigma_x$ 。其意义是：真值 μ 落在 $[\bar{x} - \sigma_x, \bar{x} + \sigma_x]$ 范围内的概率为 68.3%。当采用 $2\sigma_x$ 表示不确定度时，即 $\mu = \bar{x} \pm 2\sigma_x$ ，其意义是：真值 μ 落在 $[\bar{x} - 2\sigma_x, \bar{x} + 2\sigma_x]$ 范围内的概率为 95.4%。

五、不确定度的传递

间接测定的物理量，是利用直接观测量的结果代入所属的函数关系式计算出来的。既然直接观测量存在误差，那么间接测定量也必然存在误差，这称为误差的传递。那么，如何根据直接观测量的不确定度来求得间接测定量的不确定度呢？这就是下面要讨论的不确定度的传递问题。

设直接观测量和间接测定量的函数关系为 $y = f(x_1, x_2)$ ，其中 x_1 和 x_2 为直接观测量， y 为间接测定量。设 x_1 和 x_2 的偏差分别为 Δx_1 和 Δx_2 ，可以把它们看作微小量。因 y 随 x_1 和 x_2 连续变化，故函数 $f(x_1, x_2)$ 可在期望值 $(x_1 = \bar{x}_1, x_2 = \bar{x}_2)$ 附近展开为泰勒级数，略去微小量 Δx_1 和 Δx_2 的二次方以上的项，则

$$y = f(\bar{x}_1, \bar{x}_2) + \frac{\partial f}{\partial x_1} \Delta x_1 + \frac{\partial f}{\partial x_2} \Delta x_2 \quad (0-37)$$

从而得，间接测定量的误差为 $\Delta y = \frac{\partial f}{\partial x_1} \Delta x_1 + \frac{\partial f}{\partial x_2} \Delta x_2$ 。式中的偏微商 $\partial f / \partial x_1$ 和 $\partial f / \partial x_2$ 是在 $x_1 = \bar{x}_1$ 和 $x_2 = \bar{x}_2$ 处取值。

如果各个直接观测量分别测了 N 次,第 i 次偏差分别为 Δx_1 和 Δx_2 ,则相应于 y 的 N 个偏差为

$$\begin{aligned}\Delta y_1 &= \frac{\partial f}{\partial x_1} \Delta x_{11} + \frac{\partial f}{\partial x_2} \Delta x_{21} \\ \Delta y_2 &= \frac{\partial f}{\partial x_1} \Delta x_{12} + \frac{\partial f}{\partial x_2} \Delta x_{22} \\ &\vdots \\ \Delta y_N &= \frac{\partial f}{\partial x_1} \Delta x_{1N} + \frac{\partial f}{\partial x_2} \Delta x_{2N}\end{aligned}$$

对上面这些式子分别取平方后相加,再除以 N 得

$$\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \Delta y_i^2 = \frac{1}{N} \left(\frac{\partial f}{\partial x_1} \right)^2 \sum_{i=1}^N \Delta x_{1i}^2 + \frac{1}{N} \left(\frac{\partial f}{\partial x_2} \right)^2 \sum_{i=1}^N \Delta x_{2i}^2 + \frac{2}{N} \left(\frac{\partial f}{\partial x_1} \right) \left(\frac{\partial f}{\partial x_2} \right) \sum_{i=1}^N \Delta x_{1i} \sum_{i=1}^N \Delta x_{2i}$$

式中最后一项包含 $\sum \Delta x_{1i} \sum \Delta x_{2i}$,因为 x_1 和 x_2 为相互独立的随机变量 Δx_1 和 Δx_2 有正有负,在求和时会相互抵消,因此这一项随着 N 的增大而趋于零,那么上式变为

$$\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \Delta y_i^2 = \frac{1}{N} \left(\frac{\partial f}{\partial x_1} \right)^2 \sum_{i=1}^N \Delta x_{1i}^2 + \frac{1}{N} \left(\frac{\partial f}{\partial x_2} \right)^2 \sum_{i=1}^N \Delta x_{2i}^2 \quad (0-38)$$

再由方差的表达式可知, $\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \Delta y_i^2 = \sigma_y^2$; $\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \Delta x_{1i}^2 = \sigma_{x_1}^2$; $\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \Delta x_{2i}^2 = \sigma_{x_2}^2$; 则式(0-38)可表示为

$$\sigma_y^2 = \left(\frac{\partial f}{\partial x_1} \right)^2 \sigma_{x_1}^2 + \left(\frac{\partial f}{\partial x_2} \right)^2 \sigma_{x_2}^2 \quad (0-39)$$

这个公式就是两个直接观测量的方差传递公式。由此式可以求得间接测定量的标准误差

$$\sigma_y = \sqrt{\left(\frac{\partial f}{\partial x_1} \right)^2 \sigma_{x_1}^2 + \left(\frac{\partial f}{\partial x_2} \right)^2 \sigma_{x_2}^2} \quad (0-40)$$

如果直接观测量不只两个,而有 m 个,也可以根据上面的分析推广为

$$\sigma_y = \sqrt{\left(\frac{\partial f}{\partial x_1} \right)^2 \sigma_{x_1}^2 + \left(\frac{\partial f}{\partial x_2} \right)^2 \sigma_{x_2}^2 + \cdots + \left(\frac{\partial f}{\partial x_m} \right)^2 \sigma_{x_m}^2} \quad (0-41)$$

这个公式又称为高斯误差传递公式。

直接观测量的不确定度,通常由平均值的标准偏差来表示。用平均值的标准偏差 $S_{\bar{x}_1}, S_{\bar{x}_2}, \cdots, S_{\bar{x}_m}$ 来取代式(0-41)右边相应的标准误差 $\sigma_{x_1}, \sigma_{x_2}, \cdots, \sigma_{x_m}$,便可求得间接测量平均值的标准偏差 $S_{\bar{y}}$;用它来估计间接测定量的不确定度。

六、曲线拟合

在物理实验中经常要观察两个有函数关系的物理量。根据两个物理量的许多组测量数据来确定它们之间的函数关系曲线,这项工作称为曲线拟合。曲线拟合通常有两种情况:一种情况是两个物理量 x 和 y 之间的函数形式为已知,但是有一些参数未知,曲线拟合的任务是确定这些未知参数的最佳估计值。另一种情况是 x 和 y 之间的函数形式也不知道,需要找出它们之间的经验公式下面我们仅仅讨论第一种情况,即用最小二乘法找出测量数据所满足的最佳曲线,即回归方程。

(一) 最小二乘法原理

在曲线拟合中应用得最广泛的数学方法是最小二乘法

在很多物理实验中, x 和 y 这两个物理量中总有一个物理量的测量精度要比另一个高得多, 其测量误差可以忽略。通常把它选作自变量 x 其测量值 x 可以看作是准确值。对应于某个 x 值, 另一个物理量 y 的测量值 y 是随机变量。设 x 和 y 的函数关系由理论公式

$$y = f(x; c_1, c_2, \dots, c_m) \quad (0-42)$$

给出 其中 $c_1, c_2, \dots, c_m$ 是需要通过拟合确定的参数。

进行 N 次测量可以在 xy 平面上得到 N 个数据点 $(x_i, y_i), i=1, 2, \dots, N$ 如果不存在测量误差的话, 这些数据点都应该准确地落在理论曲线上, 因此我们只需要从 N 组测量数据中选取 m 组测量值, 利用它们来解方程组

$$y_i = f(x_i; c_1, c_2, \dots, c_m) \quad i=1, 2, \dots, m \quad (0-43)$$

就可以确定 m 个参数的数值, 函数关系也就完全确定了。

但是, 测量总是有误差存在的, 因此这 N 组数据点不可能完全准确地落在式 (0-42) 所确定的理论曲线上。当 $N > m$ 时, 方程组 (0-43) 就成为矛盾方程组, 不能通过直接解方程组的办法确定参数 $c_1, c_2, \dots, c_m$; 只能用曲线拟合的方式来处理。

假定实验中已经消除了系统误差, 则 y 的观察值 y 围绕着期望值 $f(x; c_1, c_2, \dots, c_m)$ 摆动, 其分布为正态分布, 则 y 的概率密度函数为

$$p(y_i) = \frac{1}{\sigma \sqrt{2\pi}} \exp \left[-\frac{[y_i - f(x_i; c_1, c_2, \dots, c_m)]^2}{2\sigma_i^2} \right]$$

式中 σ 是分布的标准误差; 为书写简便起见, 用 C 来代表 $c_1, c_2, \dots, c_m$; 如果各次测量是相互独立的, 那么测量值 $(y_1, y_2, \dots, y_N)$ 的似然函数为

$$L = \frac{1}{(\sqrt{2\pi})^N \sigma_1 \sigma_2 \dots \sigma_N} \exp \left\{ -\frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \frac{[y_i - f(x_i; C)]^2}{\sigma_i^2} \right\}$$

取似然函数 L 最大来估计参数 C 应使

$$\sum_{i=1}^N \frac{[y_i - f(x_i; C)]^2}{\sigma_i^2} = \min \quad (0-44)$$

这种用式 (0-44) 来估计参数值的方法称为最小二乘法。

根据公式 (0-44) 的要求, 应有

$$\frac{\partial}{\partial c_k} \sum_{i=1}^N \frac{1}{\sigma_i^2} [y_i - f(x_i; C)]^2 \Big|_{c=\hat{c}} = 0 \quad (0-45)$$

从而得到方程组

$$\sum_{i=1}^N \frac{1}{\sigma_i^2} [y_i - f(x_i; C)] \frac{\partial f(x_i; C)}{\partial c_k} \Big|_{c=\hat{c}} = 0 \quad (0-46)$$

解此方程组, 可以得到 m 个参数的估计值 $c_1, c_2, \dots, c_m$; 从而得到回归方程

$$y = f(x; \hat{c}_1, \hat{c}_2, \dots, \hat{c}_m)。$$

(二) 直线拟合

曲线拟合中最基本和最常用的是直线拟合。设变量 x 和 y 之间的函数关系是一直线方程 即

$$y=a+bx \quad (0-47)$$

式中有两个待定参数, a 代表截距, b 代表斜率。对于等精度测量所得到的 N 组数据 $(x_i, y_i) i=1, 2, \dots, N$, x 值被认为是准确的, 所有的误差只联系着 y 。现在讨论如何从这 N 组测量数据中求出参数 a, b 的最佳估计值。

根据最小二乘原理, 即公式 (0-44) 可得

$$\sum_{i=1}^N [y_i - (a + bx_i)]^2 |_{a=\hat{a}, b=\hat{b}} = \min \quad (0-48)$$

即对参数 a, b 的最佳估计, 要求测量值 y 的偏差的平方和为最小。

根据上式要求, 应有

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial a} \sum_{i=1}^N [y_i - (a + bx_i)]^2 |_{a=\hat{a}, b=\hat{b}} &= -2 \sum_{i=1}^N (y_i - \hat{a} - \hat{b} x_i) = 0 \\ \frac{\partial}{\partial b} \sum_{i=1}^N [y_i - (a + bx_i)]^2 |_{a=\hat{a}, b=\hat{b}} &= -2 \sum_{i=1}^N (y_i - \hat{a} - \hat{b} x_i) x_i = 0 \end{aligned}$$

整理后得到正规方程组

$$\left. \begin{aligned} \hat{a} N + \hat{b} \sum x_i &= \sum y_i \\ \hat{a} \sum x_i + \hat{b} \sum x_i^2 &= \sum x_i y_i \end{aligned} \right\} \quad (0-49)$$

式中简化的求和记号 $\sum$ 即 $\sum$; 解正规方程组便可求得直线参数 a 和 b 的最佳估计值 $\hat{a}$ 和 $\hat{b}$ (即最佳拟合值),

$$\hat{a} = \frac{(\sum x_i^2)(\sum y_i) - (\sum x_i)(\sum x_i y_i)}{N(\sum x_i^2) - (\sum x_i)^2} \quad (0-50)$$

$$\hat{b} = \frac{N(\sum x_i y_i) - (\sum x_i)(\sum y_i)}{N(\sum x_i^2) - (\sum x_i)^2} \quad (0-51)$$

将 $\hat{a}, \hat{b}$ 代入 (0-47) 式就求得回归方程式

如果用作图法来求参数 a, b 时, 不同的实验者对于相同的测量数据会作出不同的直线, 求得不同的 a 和 b 值。而根据最小二乘法作直线拟合时, 结果是唯一的, 且是最佳的。

但是, 我们仍然要指出, 由于直线参数的估计值 $\hat{a}$ 和 $\hat{b}$ 是根据有误差的测量数据点计算出来的, 它们不可避免地存在着偏差。同时, 各个测量数据点不是都准确地落在拟合直线上面的, 测量值 y 与对应于拟合直线上的 $\hat{y}$ 之间也就有偏差。这里我们仅写出结果, 具体的推导过程可以参阅有关专著。

测量值 y 的标准偏差为

$$S = \sqrt{\frac{1}{N-2} \sum_{i=1}^N [y_i - (\hat{a} + \hat{b} x_i)]^2} \quad (0-52)$$

S 值又称为拟合直线的标准偏差。我们可以这样来理解它的意义：如果在 $x-y$ 平面上作两条与拟合直线平行的直线： $y_1 = a + bx - S$ 和 $y_2 = a + bx + S$ ，如图 0-3 所示，则全部测量数据点 (x, y) 的分布，大约有 68.3% 的点落在这两条直线之间的范围内。

两个拟合参数也具有偏差，分别为

$$S_a = S \sqrt{\frac{\sum x_i^2}{N(\sum x_i^2) - (\sum x_i)^2}} \quad (0-53)$$

$$S_b = S \sqrt{\frac{N}{N(\sum x_i^2) - (\sum x_i)^2}} \quad (0-54)$$

式(0-53)和(0-54)表明，截距的标准偏差 S_a 和斜率的标准偏差 S_b 均与测量值 y 的标准偏差 S 密切相关。

最后，我们介绍一下相关系数的概念。

当我们把 N 组假设具有线性相关关系的测量数据 (x, y) 作线性拟合时，总应该检验一下 x 与 y 之间到底是否符合线性关系，或符合到什么程度？在统计理论中，常用相关系数 r 来判断。对于一元线性回归的情况，常称 r 为线性相关系数，其定义如下：

$$r = \frac{\sum (x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y})}{[\sum (x_i - \bar{x})^2 \sum (y_i - \bar{y})^2]^{1/2}} \quad (0-55)$$

式中 $\bar{x}$ 和 $\bar{y}$ 分别是 x 和 y 的算术平均值。可以证明，相关系数 r 之值在 ± 1 之间，即 $-1 \leq r \leq 1$ 。当 $r > 0$ 时，直线的斜率为正，称为正相关；当 $r < 0$ 时，直线的斜率为负，称为负相关。当 $|r| = 1$ 时，全部测量数据点 (x, y) 都落在拟合直线上。若 $r = 0$ 则 x 与 y 之间完全不相关。若 r 值愈接近于 ± 1 ，则它们之间的线性关系愈密切。

由上面的推导分析过程可以看出，作直线拟合的计算工作量是相当大的。现在一些袖珍型电子计算器，具备一元线性回归计算的功能，只要依次输入 (x_i, y_i) 数值，可以得到截距 a 、斜率 b 和相关系数 r 的值。但若要求 S, S_a, S_b ，仍然需要根据式(0-52)、(0-53)、(0-54)来计算。但计算所需要的数值如 $N, \sum x_i, \sum y_i, \sum x_i^2, \sum y_i^2, \sum x_i y_i$ 等分别存放在不同的存储器中，可直接调用。

值得提及的是，很多实际问题的两个变量之间并非线性关系。对非线性关系的曲线拟合问题，通常要利用变量置换进行线性化处理。对这个问题有兴趣的读者可参阅有关专著。

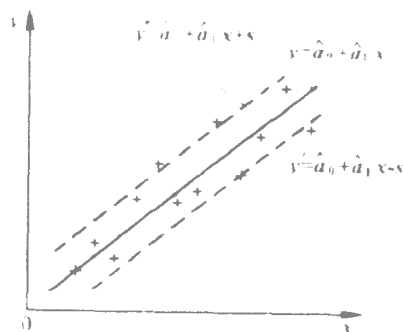


图 0-3 拟合直线两侧数据点的分布

第一单元 原子物理

1-1 光谱分析

光是电磁辐射，人们按电磁辐射的波长把它分为射频波谱、微波波谱、光学光谱等几个部分。所谓“光学光谱”是指从一端是远红外光谱扩展到另一端是紫外光谱的范围。在自然界中，能发射光辐射的物体所发出的光都是含有多种波长的复色光。可以利用棱镜或光栅把复色光分解为单色光，并且把这单色光按波长规律排列起来而成为光谱。获得和分析光谱的实验方法称为光谱技术。

1666 年牛顿用三棱镜观察太阳光谱，揭开了光谱学的序幕。到 19 世纪初，渥拉斯顿 (Wollaston) 采用狭缝分光装置获得了清晰的光谱线。随后，夫朗和费 (Fraunhofer) 设计制造分光镜，发现了太阳光谱中的吸收暗线。19 世纪 20 年代，塔耳波特 (Talbot) 先后研究了钠、锂、锶的谱线和铜、银、金的谱线，提出了元素特征光谱的概念。基尔霍夫 (Kirchhoff) 和本生 (Bunsen) 改善了分光装置，并把它应用于化学分析，发现了光谱与物质组成之间的关系，确认和证实了各种物质都具有自己的特征光谱，从而建立了光谱定性分析的基础。此后，许多分析工作者利用光谱分析，先后确认了在太阳大气中存在着钠、铁、镁、铜、锌、钡、镍等元素，鉴定了一些超铀元素。光谱分析方法已广泛地应用于各种金属、合金及其原材料、中间产品的分析中。现代科学技术和现代生产实践的不断发展，对光谱分析提出了更高的要求，因此新的方法层出不穷。发射光谱分析现代技术发展的关键，在很大程度上取决于激发光源的发展。60 年代初期，布里奇 (Brecht) 等人第一次把激光应用于发射光谱分析，制造了激光显微光谱分析仪，促进了微区分析的迅速发展，接着，格林菲尔德 (Greenfield) 和法赛尔 (Fassel) 等人先后把感耦高频等离子体光源用于发射光谱分析，使发射光谱技术发生了新的变革。在这时期，火花和弧光光源也在不断改进，使光源的可控性和稳定性都得到了提高。

光谱技术是人们认识原子、分子结构的重要手段之一，它在现代科学技术的各个领域和国民经济的许多部门获得了广泛应用。

在本实验中，主要研究发射光谱，掌握发射光谱的基本分析方法。物质的发射光谱有三种：线状光谱、带状光谱及连续光谱。线状光谱由原子或离子被激发而发射；带状光谱由分子被激发而发射；连续光谱由炽热的固体或液体所发射。

一、发射光谱分析的内容和特点

光谱分析的过程分为三步：激发、分光和检测。第一步是利用激发光源使试样蒸发，