Обробка результатів експерименту

10 вересня 2022 р.

Зміст

1. Що таке похибки і навіщо їх оцінювати?				
2. Сист	ематичні та статистичні похибки	5		
3. Як ог	цінюються похибки?	7		
3.1.	Оцінка систематичних похибок	7		
	3.1.1. Визначення та врахування систематичних похибок. Клас			
	точності приладів	8		
3.2.	Оцінка статистичних похибок	9		
3.3.	Оцінка похибок прямих вимірювань	10		
3.4.	Статистичний розподіл випадкових величин	12		
3.5.	Нормальний (Гаусовий) розподіл	13		
4. Як за	пписується похибка?	15		
5. Як по	орівнювати похибки?	18		
6. Апро	ксимація результатів експерименту	19		
6.1.	Метод найменших квадратів	20		
6.2.	Метод найменших повних квадратів (врахування похибок в неза-			
	лежних величинах)	23		
6.3.	Практичні поради для проведення апроксимації	25		
Додатк	И	26		
A.	Приклад обробки даних та перевірка лінійної моделі	26		
Б.	Програмне забезпечення для апроксимації даних та побудови			
	графіків. Приклади застосування	30		
	Б.1. Обробка результатів в Python	30		
	Б.2. Обробка результатів в Gnuplot	33		
	Б.3. Побудова графіку за допомогою пакета pgfplots/MEX.	34		
	Б.4. Апроксимація в Google Colab	36		
Перелік	використаних джерел	37		

Що таке похибки і навіщо їх оцінювати?

Результати вимірювання мають певний ступінь невизначеності. Процес оцінки невизначеності, пов'язаної з результатом вимірювання, називають аналізом невизначеностей.

Коли ми представляємо результат виміряної величини, він повинен включати оцінку рівня впевненості, з якою отриманий цей результат. Правильне звітування про експериментальний результат разом із його невизначеністю дозволяє іншим людям робити судження про якість експерименту, а також полегшує порівняння з іншими подібними значеннями або теоретичним прогнозом. Без оцінки невизначеності неможливо відповісти на основне наукове запитання: «Чи узгоджується мій результат з теоретичним прогнозом чи результатами інших експериментів?» Це питання є фундаментальним для вирішення питання про підтвердження чи спростування наукової гіпотези.

Коли ми робимо вимірювання, ми зазвичай припускаємо, що існує деяке *точне* або *істинне значення вимірюваної величини*. Хоча ми, можливо, ніколи не дізнаємося, чому дорівнює це значення, але ми намагаємося якомога точніше його встановити в міру своїх можливостей, використовуючи наявний час і ресурси.

Оскільки ми проводимо вимірювання різними методами, або навіть коли робимо кілька вимірювань за допомогою одного й того ж методу, ми постійно отримуємо трохи різні результати. Тож, як саме ми повідомимо про наші висновки для найкращої оцінки цього невловимого істинного значення? Найпоширеніший спосіб показати діапазон значень, який, на нашу думку, *ймовірно* включає справжнє значення. І слово *ймовірно* тут важливе.

Будь-яке число, яке видає нам експеримент — це результат вимірювання ¹. Вимірювання проводиться приладом, і це або безпосередні покази приладу, або результат обробки цих показів. В першому випадку вимірювання називаються *прямими*, в другому — *непрямими*.

Розглянемо, для прикладу, результат зважування якогось предмета, що виглядає як

$$m = 100 \pm 5 \text{ грам.}$$
 (1.1)

У побутовій ситуації такий запис часто інтерпретується так, немов справ-

¹Це знаменита фраза капітана «Очевидність»

жня маса гарантовано лежить в цьому діапазоні і ні в якій мірі не може бути 94 або 106 грам. Науковий запис має на увазі не це. І тут ми повертаємось до слова «*ймовірно*». Цей запис означає, що ми не знаємо істинну масу точно, вона може бути і 101 грам, і 96 грам, а може бути і всі 108 грам. На скільки далеко істинне значення може відхилятись від середнього? Теорія ймовірностей дає нам інструмент, який дозволяє визначити таку ймовірність, про ще ми поговоримо згодом.

Вимога наводити результат з відповідною точністю стосується не лише остаточного результату експерименту, воно стосується також і тих величин, що вимірюються в ході цього вимірювання. Адже рідко бувають такі прості експерименти, в яких остаточна величина вимірювалася би безпосередньо. Зазвичай доводиться прямо вимірювати цілий ряд проміжних величин, які лише в комбінації дають необхідний результат. При цьому похибка остаточного результату визначається похибками прямих вимірюваннях проміжних величин. Загалом, ці похибки по-різному впливають на остаточну. Остання буде мінімальною, якщо розподілити наявні ресурси часу, приладів і терпіння так, щоб зменшити ті помилки і які дають найбільший вклад в остаточну помилку.

Перейдемо тепер до означень.

Абсолютна похибка вимірювання — це відхилення виміряного значення величини від її істинного значення x:

$$\delta x = x_{\text{вимір}} - x. \tag{1.2}$$

Крім абсолютної похибки δx , часто буває важливо знати відносну похибку δx , яка дорівнює відношенню абсолютної похибки до значення вимірюваної величини:

$$\varepsilon = \frac{\delta x}{x}.\tag{1.3}$$

Як випливає з (1.2) і (1.3), для того, щоб знайти абсолютну я відносну похибку вимірювань, потрібно знати не тільки виміряне, а й істинне значення величини, яка нас цікавить. Але якщо істинне значення відоме, то навіщо робити вимірювання? Тому формули (1.2) і (1.3), що визначають величину похибок, не мають практичного сенсу. В практичних вимірюваннях похибки можна лише оцінити.

Систематичні та статистичні похибки

Похибки розділяються на два типи: *статистичні* і *систематичні*. Мета такого поділу — дати чітке розуміння того, що саме обмежує точність цього конкретного вимірювання, а отже, за рахунок чого цю точність можна покращити в майбутньому.

Систематичними похибками називаються такі похибки, які залишаються незмінними при вимірюваннях. Серед них можна виділити: *поправки* (постійні впливи чогось на прилади), *похибки невідомого походження* (недостатньо розроблена теорія, складний експеримент) та *клас точності приладів*. Найчастіше клас точності приладів вважається основним джерелом систематичних помилок.

У електровимірювальних приладах зазвичай є класи від 0.05 до 4. Що це означає? Якщо, клас точності приладу, наприклад, дорівнює 0.5 а шкала має 100 поділок, то це означає, що покази приладу даються не точніше, ніж 0.5 % від шкали, тобто, 0.5 поділки.

Статистичними похибками (або випадковими) називають такі похибки, які змінюються від досліду до досліду, носять випадковий характер і можуть бути як додатними такі від'ємними.

Випадкові похибки завжди присутні в експериментах завдяки різним неконтрольованим впливам на прилади і за відсутністю систематичних помилок, вони є причиною розкиду повторних вимірювань навколо істинного значення (рис. 2.1a). Якщо в дослідах присутня також систематична похибка, то результати вимірювань будуть розкидані навколо не істинного, а зміщеного значення (рис. 2.1б).



Рис. 2.1

Статистичні (або випадкові) помилки можна зменшити збільшуючи число вимірювань, а оцінити їх можна використовуючи методи математичної статистики. При наявності ж систематичних помилок, ви можете повторювати якесь вимірювання на приладі мільйони разів, але якщо у нього «збитий приціл», то

ви систематично будете отримувати значення, що відрізняється від істинного. Систематична похибка вказує наскільки прилад «бреше», і якщо це ми добре знаємо, то тим самим зможемо скоригувати його покази і усунути цю похибку. Однак, якщо ми не знаємо, а гірше того, навіть не підозрюємо про наявність систематичної помилки, то це може призвести до небезпечних наслідків. Загальних рецептів по їх виявленню не має, тому експериментатору треба самостійно спланувати експеримент так, щоб усунути, або зменшити ці похибки.

Як оцінюються похибки?

3.1. Оцінка систематичних похибок

Систематичні похибки — це такі похибки, які залишаються постійними (за величиною і знаком) або закономірно змінюються при повторних вимірюваннях. В результаті існування таких похибок середня вимірювана величина відхиляється від очікуваної на деяку постійну величину. Розрізняють чотири типи систематичних похибок:

- Похибки відомої природи і їх величини можуть бути визначені. Для усунення таких похибок вводяться поправки. Так, наприклад, при вимірюванні довжини тіла за допомогою лінійки необхідно врахувати поправку на теплове розширення як самого тіла, так і лінійки при заданій температурі.
- Похибки невідомої природи. Наприклад, при визначенні густини тіла шляхом вимірювання маси та об'єму при наявності порожнин у тілі буде допускатися систематична похибка, усунути яку можна лише, застосувавши інший спосіб вимірювання даної величини.
- Похибки, пов'язані із властивостями досліджуваного об'єкта, наприклад, із не ідеальністю його форми, що призведе до похибки у вимірюванні його розмірів.
- Інструментальні похибки похибки відомої природи, але невідомої величини, які зумовлені неточністю самих вимірювальних приладів.

Оскільки в лабораторних роботах найчастіше доводиться зіштовхуватися із інструментальними систематичними похибками, то саме цей клас похибок розглянемо детальніше.

Інструментальні похибки (похибки приладів) обумовлені багатьма причинами, пов'язаними із конструкцією приладів, якістю їх виготовлення, ретельністю налаштування, умовами застосування і т.д.

Так, наприклад, неможливо знайти рулетку з ідеально точним розбиттям шкали, абсолютно точні гирі, ідеально рівноплечі важелі.

Інструментальні похибки можна встановити при порівнянні показів даного вимірювального приладу із показами більш точного. Така процедура називається *повіркою прилад*у.

3.1.1. Визначення та врахування систематичних похибок. Клас точності приладів

Похибки вимірювальних засобів — це гранично допустимі абсолютні або відносні похибки, що встановлюються державними відділами стандартів для виробництв, що виготовляють вимірювальні засоби. Ці граничні похибки вказані на приладах або в їхніх паспортах. Наприклад, в паспорті до гирь для технічних аналізів масою 10, 20, 50 та 100 мг вказана їхня гранична похибка $\Delta m_{\text{iнст}} = 1$ мг. Точність електровимірювальних приладів (амперметрів, вольтметрів і т.д.), деяких мір (магазинів опорів, індуктивностей, електроємностей і т.д.) та ряду інших приладів характеризується класом точності k. Клас точності — це число, рівне вираженому у відсотках відношенню абсолютної похибки приладу $\Delta_{\text{iнст}}$ до максимального значення вимірюваної ним величини x_{max} :

$$k = \frac{\Delta_{\text{iHCT}}}{x_{\text{max}}} \cdot 100\%$$

Для електровимірювальних приладів можливі 8 класів точності 0.02; 0.05; 0.1; 0.2; 0.5; 1.0; 1.5; 2.5; 4.0, що вказуються на шкалі цих приладів або в їхньому паспорті.

Знаючи клас точності можна легко знайти максимальну абсолютну інструментальну похибку:

$$\Delta_{\text{ihct}} = \frac{k \cdot x_{\text{max}}}{100}$$

Наприклад, припустимо, що в дослідах використовується амперметр, клас точності якого k=0.5, границя вимірювання —50 mA. Абсолютна похибка приладу:

$$\Delta I_{\text{ihct}} = \frac{0.5 \cdot 50 \text{ MA}}{100} = 0.25 \text{ MA}$$

Увага

Звернемо увагу, що похибка в 0.25 мА складає невелику долю від вимірювального струму (0.5 %) лише при умові відхилення стрілки амперметра на усю шкалу. Навпаки, при відхиленні стрілки приладу, наприклад, на половину шкали під час вимірювання меншого значення струму значення відносної похибки зросте і становитиме: $\frac{\Delta I}{I} = \frac{0.25 \text{ мA}}{25 \text{ мA}} \cdot 100 \% = 1 \% \text{ . При вимірювання це менших значень струму цим амперметром відносна похибка буде ще зростати. Таким чином, при проведенні вимірювання з великою точністю необхідно вибирати такий прилад, у якому вимірювальний струм призведе до відхилення стрілки більше ніж на половину шкали.$

При невідомій точності приладу користуються таким наближеним правилом: якщо вимірювання проводяться шляхом порівняння вимірюваної величини

із якою-небудь шкалою, то точність приладу визначається половиною ціни найменшої поділки шкали приладу (лінійка, термометр, секундомір). Якщо вимірювання проводяться приладом із ноніусом (штангенциркуль), то точність приладу приймається рівною різниці між ціною однієї поділки приладу та однієї поділки ноніуса.

3.2. Оцінка статистичних похибок

Випадкові похибки, як уже було сказано вище, є причиною розкиду повторних вимірювань навколо істинного значення (рис. 3.1). Слід застеретти, що слово «випадкові» зовсім не означає, що їх величина може бути якою завгодно, у випадкових подій також є свої закони. Наприклад, якщо проводиться серія експериментів і результати «кучно лягають» біля свого середнього значення (рис. 3.1a), то можна казати, що істинне значення x скоріше за все має бути досить близькою до $\langle x \rangle$, тоді як в ситуації зображеній на рис. 3.16 різниця може виявитись більшою. Точно сказати, де саме буде це істинне значення ми не можемо, але можна вказати з якою ймовірністю воно опиниться в тому чи іншому інтервалі навколо $\langle x \rangle$.

Тому адекватною мовою для опису похибок — є мова ймовірності.

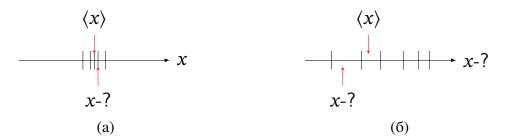


Рис. 3.1. Серія прямих вимірювань величини x. Чим точніше виконуються експерименти, тим менше статистична похибка («кучніше результати»).

3.3. Оцінка похибок прямих вимірювань

Нехай, *п* вимірювань деякої величини дало нам сукупність значень:

$$x_1, x_2, \dots, x_n.$$
 (3.1)

Зазвичай, на практиці ніхто не виконує нескінченну кількість вимірювань, в навчальних лабораторіях ця кількість сягає $n=10\dots 50$. Число n значень називається вибіркою.

На основі вимірювань можна побудувати гістограму (рис. 3.2a) і визначити середнє арифметичне (середнє за вибіркою):

$$\langle x \rangle = \frac{1}{n} \sum_{i}^{n} x_{i}, \tag{3.2}$$

яке буде найкращою оцінкою істинної величини для даної вибірки.

Похибка і-го вимірювання визначається як:

$$e_i = x_i - x, (3.3)$$

де x — істинне значення вимірюваної величини (яке не відоме).

Саме середнє значення $\langle x \rangle$ також визначене з похибкою E:

$$E = \langle x \rangle - x. \tag{3.4}$$

Підставимо (3.2) в (3.4) і отримаємо зв'язок похибки i-го вимірювання з похибкою середнього значення:

$$E = \frac{1}{n} \sum_{i}^{n} e_i. \tag{3.5}$$

Введемо поняття середньоквадратичного відхилення одиничних вимірювань:

$$\sigma^2 = \langle e^2 \rangle = \frac{1}{n} \sum_{i}^{n} e_i^2, \tag{3.6}$$

Піднесемо до квадрату (3.5):

$$E^{2} = \frac{1}{n^{2}} \sum_{i}^{n} e_{i}^{2} + \frac{2}{n^{2}} \sum_{\substack{i \ i \neq j}}^{n} \sum_{i}^{n} (e_{i}e_{j}).$$

Усереднимо останній вираз по всій сукупності вибірок:

$$\langle E^2 \rangle = \frac{1}{n^2} \left\langle \sum_{i}^{n} e_i^2 \right\rangle + \frac{2}{n^2} \sum_{i}^{n} \sum_{\substack{j \ i \neq j}}^{n} \left\langle e_i e_j \right\rangle.$$

Ця величина називається середньоквадратичним відхиленням середнього.

Оскільки помилки e_i та e_j незалежні (некорельовані), то $\langle e_i e_j \rangle = 0$, а середнє суми по всім вибіркам $\langle \sum_i^n e_i^2 \rangle = n \langle e^2 \rangle$. Отже, матимемо:

$$\langle E^2 \rangle = \frac{1}{n} \langle e^2 \rangle$$
, and $\sigma_{\langle x \rangle} = \frac{\sigma}{\sqrt{n}}$. (3.7)

Ступінь відхилення результатів окремих вимірювань від середнього для даної вибірки визначається вибірковим середньоквадратичним відхиленням:

$$s^{2} = \frac{\sum_{i}^{n} (x_{i} - \langle x \rangle)^{2}}{n} = \langle (x - \langle x \rangle)^{2} \rangle.$$
 (3.8)

Величину s^2 легко визначити з результатів експерименту. Встановимо її зв'язок з похибкою результатів експерименту $\sigma_{\langle x \rangle}$. З рівностей (3.3) та (3.4) бачимо, що

$$x_i - \langle x \rangle = e_i - E$$

звідки вибіркове середньоквадратичне відхилення:

$$s^{2} = \frac{1}{n} \sum_{i}^{n} (x_{i} - \langle x \rangle)^{2} = \frac{1}{n} \sum_{i}^{n} (e_{i} - E)^{2} =$$

$$= \frac{1}{n} \sum_{i}^{n} e_{i}^{2} - 2E \frac{1}{n} \sum_{i}^{n} e_{i} + E^{2} = \frac{1}{n} \sum_{i}^{n} e_{i}^{2} - E^{2}. \quad (3.9)$$

Використовуючи (3.7) та (3.9) маємо:

$$s^{2} = \frac{1}{n} \sum_{i}^{n} e_{i}^{2} - E^{2} = (n-1)E^{2}.$$

Усереднимо по всім вибіркам останнє рівняння:

$$\langle s^2 \rangle = \langle e^2 \rangle - \langle E^2 \rangle = (n-1) \langle E^2 \rangle.$$
 (3.10)

Звідки, середньоквадратичне відхилення середнього:

$$\sigma_{\langle x \rangle} = \sqrt{\frac{\langle s^2 \rangle}{n-1}}.$$
 (3.11)

На відміну від s^2 , величина $\langle s^2 \rangle$ нам невідома, тому в якості її оцінки можна наближено покласти $s^2 \approx \langle s^2 \rangle$, а тому оцінка середньоквадратичного відхилення середнього:

$$\sigma_{\langle x \rangle} \approx \frac{s}{\sqrt{n-1}} = \sqrt{\frac{\sum\limits_{i}^{n} (x_i - \langle x \rangle)^2}{n(n-1)}}.$$
 (3.12)

Як ми побачимо далі, цю величину ми називатимемо оцінкою похибки вимірюваної величини. Чому це так і що це означає, ми покажемо далі, скориставшись поняттям нормального розподілу.

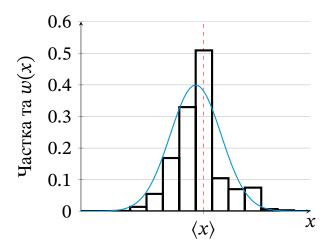
3.4. Статистичний розподіл випадкових величин

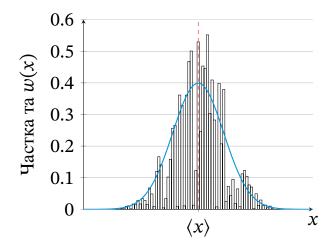
Результат великого числа вимірювань випадкової величини зручно представити за допомогою спеціального типу графіка — гістограми. Для цього область значень x, розміщують на осі абсцис. Саму вісь розбивають на однакові малі інтервали — «кошики» або «біни» деякого розміру h. По осі ординат

будемо відкладати частку значень w_i , які потрапили в відповідний *i*-й кошик (рис. 3.2a).

Якщо спрямувати число вимірювань до нескінченності $(n \to \infty)$, а ширину кошиків до нуля $(h \to 0)$, то огинаюча гістограми буде прямувати до деякої неперервної функції w(x), яка називається густиною ймовірності.

Найвищі стовпчики гістограми будуть групуватися поблизу максимуму функції w(x) — це найбільш ймовірне значення випадкової величини. Якщо відхилення в додатну і від'ємну сторони рівноймовірні, то гістограма буде симетрична — в такому випадку середнє значення $\langle x \rangle$ також буде лежати поблизу цього максимуму.





- (a) Приклад гістограми вимірювань деякої величини x при числі вимірювань $n \approx 50$
- (б) Приклад гістограми вимірювань деякої величини x при числі вимірювань $n \approx 10000$

Рис. 3.2. Приклад гістограми вимірювань деякої величини x. При збільшення числа вимірювань $n \to \infty$ гістограма «огинається» кривою розподілу

Якщо число вимірювань прямує до нескінченності, то всі суми замінюються на інтеграли і середнє значення за розподілом обчислюється як:

$$\overline{x} = \int_{-\infty}^{\infty} xw(x)dx. \tag{3.13}$$

Ця величина (середнє по розподілу) називається математичним очікуванням величини x.

Сума ймовірностей для всіх можливих випадків завжди дорівнює одиниці. Тому інтеграл розподілу w(x) по всій області значень x (тобто сумарна площа під графіком w(x)) дорівнює одиниці:

$$\int_{-\infty}^{\infty} w(x)dx = 1. \tag{3.14}$$

Ця умова називається умовою нормування.

Аналогічно для розподілу, величину

$$\sigma^2 = \overline{(x - \overline{x})^2} = \int_{-\infty}^{\infty} (x - \overline{x})^2 w(x) dx$$
 (3.15)

називають дисперсією розподілу. Значення σ є середньоквадратичним відхиленням величини x від математичного очікування. Воно має ту ж розмірність, що і сама величина x і характеризує розкид розподілу.

3.5. Нормальний (Гаусовий) розподіл

Істинним значенням величини можна вважати таке значення, до якого ми наближаємося при здійсненні все більшого числа вимірювань, які виконуються все більш ретельно. Розподіл результатів вимірювань матиме вигляд симетричною «дзвону» (рис. 3.3) з центром, що співпадає з істинним значенням \overline{x} . Нормальний розподіл називається також гаусовим розподілом і виглядає як:

$$w_N(x) = \frac{1}{\sqrt{4\pi\sigma}} e^{-\frac{(x-\bar{x})^2}{2\sigma^2}}.$$
 (3.16)

Розподіл характеризується дисперсією σ — яка «задає» ширину цього дзвону.

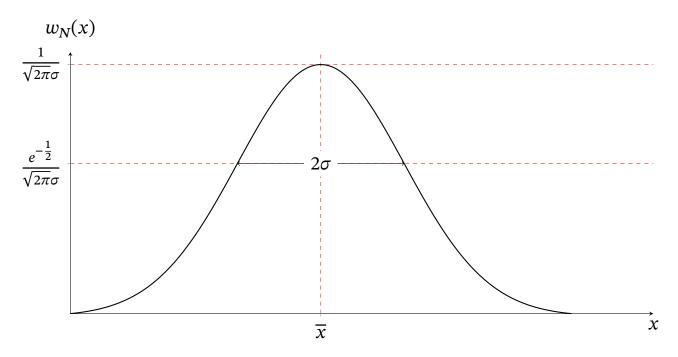


Рис. 3.3. Нормальний розподіл $w_N(x)$.

Ймовірність того, що істинне значення виявиться в межах $\langle x \rangle \pm \sigma$, дорівнює площі під графіком функції $w_N(x)$ в інтервалі $|x - \langle x \rangle| < \sigma$ — називається

довірчим ймовірністю (рис. 3.4):

$$P_{|\Delta x| < \sigma} = \int_{\langle x \rangle - \sigma}^{\langle x \rangle + \sigma} w(x) dx \approx 0.68,$$
(3.17)

а сам інтервал — довірчим інтервалом:

$$\langle x \rangle - \sigma < x < \langle x \rangle + \sigma$$
.

Імовірність відхилення в межах $x \pm 2\sigma$:

$$P_{|\Delta x| < 2\sigma} \approx 0.95. \tag{3.18}$$

а в межах $x \pm 3\sigma$:

$$P_{|\Delta x| < 3\sigma} \approx 0.997. \tag{3.19}$$

Іншими словами, при великому числі вимірювань нормально розподіленої величини можна очікувати, що лише третина вимірювань випадуть за межі інтервалу $(\langle x \rangle - \sigma, \langle x \rangle + \sigma)$. При цьому близько 5% вимірів випадуть за межі $(\overline{x} - 2\sigma, \overline{x} + 2\sigma)$, і лише 0.27% виявляться за межами $(\langle x \rangle - 3\sigma, \langle x \rangle + 3\sigma)$.

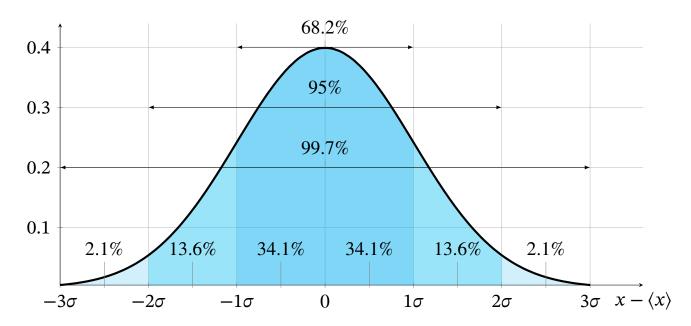


Рис. 3.4. Нормальний розподіл

Як записується похибка?

При представленні експериментальних досліджень результат вимірювання фізичної величини *х* зазвичай прийнято записувати у вигляді:

$$x = \langle x \rangle \pm \sigma_{\langle x \rangle}.\tag{4.1}$$

При розрахунках з використанням сучасних обчислювальних засобів кожне з оцінених чисел $\langle x \rangle$ та $\sigma_{\langle x \rangle}$ в десятковому запису складається з великого числа цифр, тому надзвичайно важливо провести коректне округлення отриманого результату. Адже при цій процедурі також вноситься додаткова похибка, яка називається похибкою округлення, і яка, зрозуміло, не має перевищувати інші похибки. Але при цьому важливо також виключити в запису ті цифри, які є надлишковими і не несуть ніякої інформації.

Нехай, наприклад, в процесі вимірювань або шляхом розрахунку за формулами були отримані наступні результати:

$$\langle x \rangle = 21.497263, \quad \sigma_{\langle x \rangle} = 0.6294302.$$

Перед тим, як сформулювати правила округлення, слід дати одне важливе означення. Значущі цифри даного числа — всі цифри від першої ліворуч, що не дорівнює нулю, до останньої праворуч. При цьому нулі, які випливають з множника 10^m (m – ціле число), не враховують.

Приклади:

- 1. 0.2396 4-и значущі цифри, перша цифра 2;
- 2. 0.00173 3-и значущі цифри, перша цифра 1;
- 3. 30170 5-ть значущих цифр, перша цифра 3, останній нуль також значуща цифра;
- 4. $301.7 \cdot 10^2$ 4-и значущі цифри, перша цифра 3, остання 7;
- 5. 20000 5-ть значущих цифр, перша цифра 2, все наступні нулі також значущі цифри;
- 6. $20 \cdot 10^3$ 2-і значущі цифри, перша цифра 2, друга цифра 0, нулі, які слідують із множника 10^3 не враховуються;
- 7. $2.0 \cdot 10^4$ 2-і значущі цифри, перша цифра 2, друга цифра 0;
- 8. $0.02 \cdot 10^6$ одна єдина значуща цифра 2.

Приклади показують, що, хоча з точки зору математики, записи під номерами 3 і 4 ідентичні, означають одне і те ж число, але кількість значущих цифр у них різна! Те ж саме можна сказати і про записи під номерами 5, 6 і 7 та 8. Цей факт надзвичайно важливий для коректного запису результату, одержуваного після округлення.

Для представлення результатів слід їх округлити скориставшись наступними правилами:

1. Округлення слід **починати з похибки**, залишаючи 1 (одну) або 2 (дві) значущі цифри.

Увага

В яких випадках одну, а в яких випадках дві? Пояснимо це на прикладі. Як вже було зазначено, при округленні вноситься додаткова похибка. Якщо округлити скажімо число 0.64 до 0.6, то відмінність між цими величинами становитиме близько 6%. Якщо ми будемо округлювати скажімо 0.34 до 0.3, то відмінність між цими результатами вже становить 13%. Якщо ж округлити, скажімо 0.24 до 0.2, то відмінність становитиме вже 20%, і тим більше, якщо округлити 0.14 до 0.1, відмінність становитиме аж 40%. З цих прикладів видно, що чим менше число, тим округлення все сильніше позначається на відмінності. Тому, якщо похибка ваших вимірювань становить близько 20%, то щоб не вносити ще похибку округлення треба залишати дві значущі цифри, якщо перша з них одиниця або двійка.

Отже, якщо перша значуща цифра — одиниця або двійка, то після округлення залишають дві значущі цифри. Якщо ж перша значуща цифра — трійка і більше, то залишають одну значущу цифру.

До округлення	Після округлення
0.17295	0.17
4.8329	5
0.97283	1.0
0.006298	0.006
0.8138	0.8

2. Далі **округляється сама величина**, причому її остання значуща цифра повинна знаходитися на тій же позиції, що і остання значуща цифра вже округленої похибки.

До округлення	Після округлення
3.4874 ± 0.17	3.49 ± 0.17
285.396 ± 5	285 ± 5
2.482 ± 1.0	2.5 ± 1.0
0.280184 ± 0.006	0.280 ± 0.006
19.983984 ± 0.8	20.0 ± 0.8

Видно, що якщо в похибці присутні всього одна або дві значущі цифри, то в самому результаті після округлення кількість значущих цифр не менше, ніж в похибці, причому останні значущі цифри в обох числах стоять на одній і тій же позиції.

Увага

Особливу увагу зверніть на два останні рядки в табличці! Наприклад, якщо округлена похибка приймає значення 0.006, тобто перша значуща цифра стоїть в третій позиції після десяткової точки, то округлену величину також треба представити до третьої позиції після коми, тобто записати не 0.28, а 0.280, оскільки в цьому випадку останній нуль стає значущим.

3. Якщо при округленні похибки зазначений порядок, тобто 10^m , то такий же порядок повинен бути і у самої величини, при цьому обидва числа беруться в дужки, і множник 10^m вказується один раз.

До округлення	Після округлення
0.283984 ± 0.006	0.284 ± 0.006
	або $(28.4 \pm 0.6) \cdot 10^{-2}$
	або $(284 \pm 6) \cdot 10^{-3}$
72903 ± 400	$(72.9 \pm 0.4) \cdot 10^3$
	або $(729 \pm 4) \cdot 10^2$
2.482 ± 1.0	2.5 ± 1.0
2374 ± 50	$(2.37 \pm 0.05) \cdot 10^3$
	або $(23.7 \pm 0.5) \cdot 10^2$

Як видно, використання запису з порядком 10^m не є однозначним, адже одне і те ж число можна записати з однією і тією ж кількістю значущих цифр, але з різними порядками.

Одак, слід уникати записів з порядками 10^{-1} і 10^1 оскільки це тільки ускладнює розуміння. Та й записи 10^{-2} і 10^2 навряд чи надто зручні, хоча і цілком припустимі. Тому краще починати зі степенів 10^{-3} і 10^3 , а для розмірних величин набагато приємніше переходити до розмірностей із зазначенням тієї чи іншої приставки (мікро, мілі, кіло, мега, ...).

Як порівнювати похибки?

Знаючи похибки можна також порівнювати результат вашого вимірювання з чужим виміром тієї ж самої величини, або з теоретичними розрахунками. Ви бачите, що числа відрізняються, і хочете зрозуміти, чи маєте ви право стверджувати, що між двома результатами є статистично значуща розбіжність — тобто неузгодженість, яку не можна списати на випадкову статистичну флуктуації в даних. Тоді твердження звучать так:

- якщо відмінність складає менше 1σ , то ймовірність того, що два числа узгоджуються один з одним, більше 32%. В такому випадку просто говорять, що два результату збігаються в межах похибок.
- Якщо відмінність складає менше 3σ, то ймовірність того, що два числа узгоджуються один з одним більше 0.2%. У фізиці таку ймовірність недостатньо для будь-яких серйозних висновків, і прийнято говорити: відмінність між двома результатами не є статистично значущою;
- якщо відмінність від 3σ до 5σ, то це привід підозрювати щось серйозне. Втім, навіть в цьому випадку фізики говорять обережно: дані вказують на існування відмінності між двома результатами;
- і лише у випадку, якщо два результату відрізняються на 5σ або більше, фізики чітко заявляють: два результату відрізняються один від одного.

По-друге, треба чітко розуміти, що похибки — це не помилки експерименту. Навпаки, вони є показником якості експерименту. Похибки характеризують об'єктивний рівень недосконалості приладу або неідеальної методики обробки. Їх не можна повністю усунути, зате можна сказати, в яких рамках результату можна довіряти.

Апроксимація результатів експерименту

Часто, результатом фізичного експерименту є виміряні значення пар величин (x_i, y_i) . Прийнято величини y_i вважати залежними від величин x_i .

Зазвичай, на практиці з якихось апріорних чи теоретичних міркувань відомо, який аналітичний вигляд має функція $y = f(x|p_1, p_2, ..., p_p)$, що описує експериментальні дані, а невідомими є p штук числових величин p_i (i=1...p). Така аналітична функція називається *моделлю*, а величини p_i називаються *параметрами* моделі.

Виникає задача, як підібрати значення параметрів так, щоб графік функції проходив якомога ближче до експериментальних точок? Така процедура називається апроксимацією (puc. 6.1).

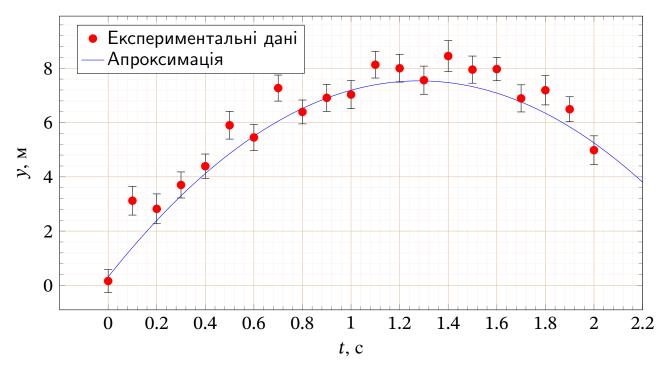


Рис. 6.1. Приклад апроксимації експериментальних даних за моделлю $y=p_1+p_2x+p_3x^2$. Алгоритм апроксимації підбирає параметри p_1, p_2 та p_3 так, щоб графік y=f(x) якомога ближче пройшов до точок з урахуванням їх похибок. Для наведених даних $p_1=0.31$, $p_2=11.29, p_3=-4.41$, критерій відповідності моделі даним $\chi^2=22.88$ (див. секцію 6.1).

¹В англомовній літературі ця процедура називається «fitting» (дослівно перекладається як «підгонка» [параметрів моделі]).

Апроксимація та інтерполяція

Апроксимація (слово за своїм походженням означає «наближення») — це метод, що полягає у визначенні вигляду функції y = f(x), яка описує залежність між величинами (x_i, y_i) з деяким наближенням.

Поняття апроксимації застосовне не лише до дискретного набору даних, а й до неперервних функцій. Наприклад, можна функцію f(x) апроксимувати деякою наближеною функцією g(x). Прикладом такої апроксимації може бути розкладання функції в ряд Тейлора, тобто заміна функції f(x) поліномом g(x).

Крім того, можна ще так побудувати y = f(x), при якому її графік проходить точно через усі точки. Такий метод називається *інтерполяцією*. Оскільки, для кожна експериментальна точка визначена з деякою похибкою, то метод інтерполяції для експериментальних даних не застосовується.

Для проведення апроксимації необхідні наступні компоненти:

- 1. Результати вимірювань (x_i, y_i) та їх похибки σ_{x_i} та σ_{y_i} .
- 2. Модель $y = f(x, | p_1, p_2, ..., p_p)$ параметричний запис досліджуваної залежності, де p_i набір параметрів моделі.
- 3. Процедура оцінки параметрів моделі та їх точності.
- 4. Критерій адекватності обраної моделі експериментальним даним. Розглянемо алгоритми оцінки параметрів.

6.1. Метод найменших квадратів

Нехай у нас є експериментальні дані (x_i, y_i) , ми намагаємось застосувати модель y = f(x).

Позначимо відстань від i-ї експериментальної точки до шуканої прямої, що виміряна по вертикалі як Δy_i (цей доданок називається *лишком*):

$$\Delta y_i = y_i - f(x_i|p_1, p_2, \dots, p_n)$$

і знайдемо суму

$$S(p_1, p_2, \dots, p_p) = \sum_{i=1}^{n} (w_i [y_i - f(x_i | p_1, p_2, \dots, p_p)])^2 = \sum_{i=1}^{n} (w_i \Delta y_i)^2$$
 (6.1)

яка залежить від параметрів $p_1, p_2, ..., p_p$. Параметри підбираються так, щоб $S(p_1, p_2, ..., p_p) \to \min$. Така сума називається зваженою сумою квадратичних лишків².

Кожен доданок в сумі (6.1) береться з відповідним ваговим коефіцієнтом w_i . Це означає, що чим менша похибка у точки y_i , то тим ближче апроксимаційна крива повинна пройти до цієї точки, а тому ваговий коефіцієнт доданка Δy_i має бути більшим. В якості вагового коефіцієнта логічно приймається величина оберненої стандартної похибки $w_i = \frac{1}{\sigma_{v_i}}$.

²В англомовній літературі та в help'ах до програм обробки даних ця сума називається — Weighted Sum of Square Residuals, або скорочено WSSR (зважена сума квадратичних лишків).

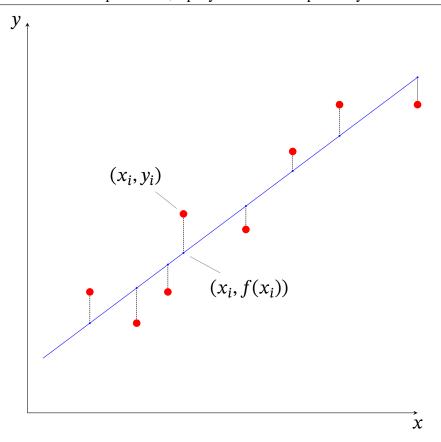


Рис. 6.2. Ілюстрація методу найменших квадратів для лінійної моделі f(x) = ax + b.

Даний метод побудови найкращої прямої називається методом найменших квадратів.

Мінімальне значення суми (6.1) називать χ -квадрат:

$$\chi^2 = S_{\min}.\tag{6.2}$$

Чим ближче дані до модельної кривої, тим менше буде χ^2 . У випадку, якщо більша частина відхилень даних від моделі буде порядку середньоквадратичної похибки, тобто $\Delta y_i \approx \sigma_{y_i}$, то сума χ^2 буде за порядком величини дорівнювати числу доданків, що входять в неї, тобто $\chi^2 \approx n$. В математичній статистиці доводиться, що математичне очікування для χ^2 в точності дорівнює числу ступенів свободи $\overline{\chi^2} = n - p$, де p — число незалежних параметрів моделі 3 . Таким чином, при гарній відповідності моделі і даних, величина $\frac{\chi^2}{\chi^2}$ повинна приблизно дорівнювати одиниці.

Оцінка відповідності вибраної моделі

При $\frac{\chi^2}{n-p} \approx 1$ модель добре описує експериментальні точки, якщо $\frac{\chi^2}{n-p} > 2$, то модель погано відповідає експерименту, або ж значення похибок одиничних вимірювань сильно занижені. Значення $\frac{\chi^2}{n-p} < 0.5$ як правило свідчить про завищені похибки.

 $^{^{3}}$ В англомовній літературі та в help'ах до програм обробки даних ця величина називається — Number of Degrees of Freedom, або скорочено NDF.

⁴В англомовній літературі та в help'ах до програм обробки даних ця величина називається — Redused Chi-square

Для випадку наведеному на рис. 6.1 $\chi^2 \approx 22.88$, n=21, p=3, отже $\frac{\chi^2}{\chi^2}=1.27<2$, отже можна зробити висновок, що модель $y=p_1+p_2x+p_3x^2$ відповідає експериментальним даним.

У випадку, якщо похибки кожної точки y_i не відомі, або ж однакові, то можна покласти $\sigma_{y_i}=1.$

Оцінка параметрів лінійної моделі для $\sigma_{y_i}=1$

Теорія методу дозволяє розрахувати параметри лінійної моделі y = ax + b. Для цього треба розв'язати систему рівнянь:

$$\frac{\partial S(a,b)}{\partial a} = -\sum_{i=1}^{n} 2x_i [y_i - (ax_i + b)] = 0,$$

$$\frac{\partial S(a,b)}{\partial b} = -\sum_{i=1}^{n} 2[y_i - (ax_i + b)] = 0.$$

Звідки отримуємо:

$$a = \frac{\langle xy\rangle - \langle x\rangle \langle y\rangle}{\langle x^2\rangle - \langle x\rangle^2} \tag{6.3}$$

$$b = \langle y \rangle - a \langle x \rangle \tag{6.4}$$

де

$$\langle x \rangle = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} x_i, \quad \langle y \rangle = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} y_i$$
$$\langle xy \rangle = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} x_i \cdot y_i, \quad \langle x^2 \rangle = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} x_i^2.$$

Оскільки такий метод не враховує похибок вимірювання σ_{y_i} , то для оцінки похибок параметрів a та b використовуються припущення, що $\sigma_{y_i}=1$ і отримують формули:

$$\sigma_a = \frac{1}{\sqrt{n-2}} \sqrt{\frac{\langle y^2 \rangle - \langle y \rangle^2}{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2} - a^2}$$
(6.5)

$$\sigma_b = \sigma_a \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2} \tag{6.6}$$

Коефіцієнт n-2 тут відображає число незалежних ступенів свободи: n експериментальних точок за винятком двох умов зв'язку.

У випадку $\sigma_{y_i} = 1$ величина χ^2 не підходить для оцінки якості моделі, а тому в якості критерію відповідності моделі даним вводиться коефіцієнт детермінації.

Коефіцієнт детермінації

$$R^{2} = 1 - \frac{S(a,b)}{\sum_{i=1}^{n} (y_{i} - \langle y \rangle)^{2}}.$$
(6.7)

Коефіцієнт приймає значення від 0 до 1. Для лінійної моделі вважається, що чим

ближче коефіцієнт до 1, тим кращою є модель.

6.2. Метод найменших повних квадратів (врахування похибок в незалежних величинах).

У розглянутому вище методі враховуються лише похибки у залежних величинах y_i , а тому виникає обмеження в його використанні лише для випадку коли похибками незалежних змінних можна знехтувати ($\sigma_{x_i} \approx 0$). Однак, на практиці виникає потреба у такому методі, в якому цими похибками нехтувати не можна. Тому треба будувати суму (6.1) з урахуванням похибок σ_{x_i} . Ідея такої побудови полягає в тому, щоб в якості доданків брати не відстань від точки до прямої по вертикалі $d_{\parallel i} = |y_i - f(x_i)|$, а ортогональну відстань від точки до прямої (рис. 6.3) $d_{\perp_i}^2 = (x_i - \tilde{x}_i)^2 + (y_i - \tilde{y}_i)^2$, причому, кожен із доданків в сумі треба взяти з відповідним ваговим коефіцієнтом, що обернений до похибки. Тоді сума для мінімізації прийме вигляд:

$$\tilde{S} = \sum_{i=1}^{n} \left[\left(\frac{x_i - \tilde{x}_i}{\sigma_{x_i}} \right)^2 + \left(\frac{y_i - f(\tilde{x}_i)}{\sigma_{y_i}} \right)^2 \right], \tag{6.8}$$

де точка $(\tilde{x}_i, \tilde{y}_i)$ розташована на шуканій прямій на найкоротшій (ортогональній) відстані від експериментальної точки (x_i, y_i) (див. рис. 6.3).

Цей метод називається *методом найменших повних квадратів*. Як показано в [2] сума (6.8) зводиться до вигляду:

$$\tilde{S} = \sum_{i=1}^{n} \left(\frac{y_i - f(x_i)}{\sigma_i} \right)^2, \tag{6.9}$$

де сума \tilde{S} формально виглядає як і в зваженому методі найменших квадратів (6.8), однак тут ваговий коефіцієнт дещо інший і визначається як:

$$\sigma_i^2 = \left(\frac{\partial f}{\partial x}\right)_i^2 \sigma_{x_i}^2 + \sigma_{y_i}^2,\tag{6.10}$$

або для лінійної моделі

$$\sigma_i^2 = a^2 \sigma_{x_i}^2 + \sigma_{y_i}^2. \tag{6.11}$$

Оцінка параметрів лінійної моделі

Теорія методу дозволяє розрахувати параметри лінійної моделі^а за формулами [2]:

$$a = \sum_{i=1}^{n} \frac{y_i x_i}{\sigma_i^2} (H^{-1})_{11} + \sum_{i=1}^{n} \frac{y_i}{\sigma_i^2} (H^{-1})_{21},$$

$$b = \sum_{i=1}^{n} \frac{y_i x_i}{\sigma_i^2} (H^{-1})_{12} + \sum_{i=1}^{n} \frac{y_i}{\sigma_i^2} (H^{-1})_{22}$$

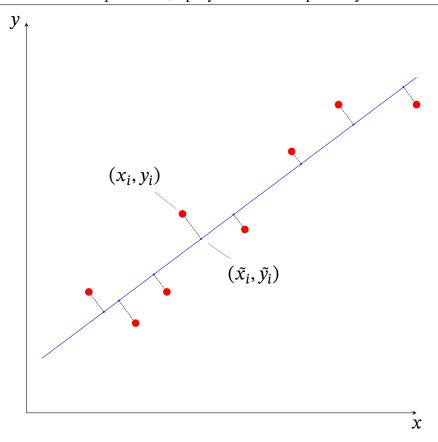


Рис. 6.3. Ілюстрація методу повних найменших квадратів

де, σ_i^2 розраховується за формулою (1.2), а

$$(H^{-1})_{11} = \frac{1}{\Delta} \sum_{i=1}^{n} \frac{1}{\sigma_i^2},$$

$$(H^{-1})_{12} = -\frac{1}{\Delta} \sum_{i=1}^{n} \frac{x_i}{\sigma_i^2} = (H^{-1})_{21},$$

$$(H^{-1})_{22} = -\frac{1}{\Delta} \sum_{i=1}^{n} \frac{x_i^2}{\sigma_i^2},$$

$$\Delta = \sum_{i=1}^{n} \frac{x_i^2}{\sigma_{y_i}^2} \cdot \sum_{i=1}^{n} \frac{1}{\sigma_i^2} - \left(\sum_{i=1}^{n} \frac{x_i}{\sigma_i^2}\right)^2$$

Для оцінки похибок параметрів a та b використовуються формули:

$$\sigma_a = \sqrt{(H^{-1})_{11}}$$

$$\sigma_b = \sqrt{(H^{-1})_{22}}.$$

З огляду на те, що знаходження параметрів a та b залежать від величини σ_i , яка в свою чергу залежить від a, то процедуру підбору параметрів доведеться повторювати певне число разів (ітерацій) $^{\delta}$. Оскільки обчислення «вручну» доволі трудомісткі, ці алгоритми покладені в основу програмних засобів обробки результатів даних.

 $^{{}^{}a}$ Саме завальний випадок довільної моделі f(x) розглянутий в статті [2]

 $^{^{6}}$ На початковому етапі задаються початкові значення параметрів a та b.

6.3. Практичні поради для проведення апроксимації

Наведені вище методи реалізується за допомогою алгоритмів. Метод найменших квадратів в якому враховуються лише похибки залежних змінних y_i реалізується за допомогою алгоритму Левенберга-Марквардта. Метод найменших повних квадратів, який враховує похибки як в залежних змінних y_i так і в незалежних змінних x_i реалізується за допомогою алгоритму який називається Ortohonal Distance Regression. Останній алгоритм важливий для даних, що отримуються в фізичних експериментах. Сам алгоритм був вперше реалізований на мові FORTRAN під назвою ODRPACK, а згодом розповсюджений в багатьох програмних пакетах по обробці даних.

Для того, щоб скористатись алгоритмами і провести успішну апроксимацію даних, треба дотримуватись наступних правил:

- 1. Виберіть відповідну модель та визначте число можливих параметрів.
- 2. Якщо модель можна лінеаризувати, то краще зробити це.
- 3. Вкажіть початкові прийнятні значення параметрів моделі.
- 4. Якщо в результаті апроксимації один з параметрів оцінено з похибкою $\sigma_{p_i} \gg p_i$, що значно перевищує значення самого параметра, то треба покласти значення відповідного параметра рівним нулю.

Додатки

А. Приклад обробки даних та перевірка лінійної моделі

Розглянемо методи оцінки похибок на прикладі визначення константи котушок Гельмгольца.

Котушки Гельмгольца (кільця Гельмгольца) — пристрій, що складається з двох однакових тонких соленоїдів, розташованих на одній осі на відстані один від одного, що дорівнює їх радіусам (рис. 1.4) і які з'єднані послідовно таким чином, щоб струм у них циркулював в однаковому напрямку. Котушка названа на честь Германа фон Гельмгольца. Розташування двох соленоїдів на віддалі радіуса один від одного забезпечує таку однорідність поля вздовж осі, при якій відмінною від нуля є тільки четверта похідна від поля. Використовуються для отримання постійного, змінного або імпульсного магнітного поля з зоною однорідності, яке зазвичай використовується в експериментах, а також для калібрування датчиків магнітної індукції, намагнічування і розмагнічування постійних магнітів, розмагнічування сталевих заготівок, деталей і інструментів. Область поля з неоднорідністю менше 1% є еліпсоїдом обертання близьким до сфери радіусом 0.3R, що майже в 4 рази більше ніж для одного кільця. Еліпсоїд трохи стислий уздовж осі (рис. 1.5).

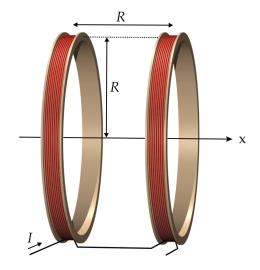


Рис. 1.4. Схема котушок Гельмгольца (взято з wikipedia)

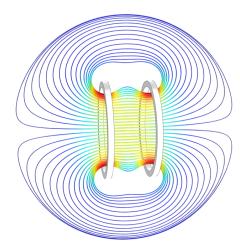


Рис. 1.5. Вигляд поля котушок Гельмгольца (взято з https://www.freepng.ru/png-d02278/)

Магнітне поле в центрі між котушками можна розрахувати за допомогою

закону Біо-Савара-Лапласа, який дає формулу:

$$B = \left(\frac{4}{5}\right)^{\frac{3}{2}} \frac{\mu_0 nI}{R}.\tag{1.12}$$

Константою котушок називається величина $C = \frac{B}{I}$, яка, як випливає з (1.12) визначається формулою:

$$C = \left(\frac{4}{5}\right)^{\frac{3}{2}} \frac{\mu_0 n}{R},\tag{1.13}$$

де n — кількість витків в одному кільці, R — радіус кільця.

Для визначення константи, нам знадобиться вимірювати лише відстань L між котушками, яка дорівнює їх радіусу за допомогою лінійки, тому треба визначити лише похибку прямого вимірювання R. Сама лінійка має дуже малу інструментальну похибку, однак зважаючи на те, що кільця складаються з багатьох витків, які поодинці знаходяться на відстанях дещо відмінних від R, що не враховано в формулі (1.13), оцінимо систематичну похибку у вимірюванні відстані як $R = (0.200 \pm 0.005)$ м.

Похибку непрямого вимірювання константи ми визначимо як похибку непрямого вимірювання за формулою:

$$\Delta C = \left(\frac{4}{5}\right)^{\frac{3}{2}} \frac{\mu_0 n}{R^2} \Delta R = 1.73 \cdot 10^{-5} \text{ T}_{\text{J}}/\text{A}, \tag{1.14}$$

Таким чином, отримаємо результат:

$$C_{\text{БСЛ}} = (6.92 \pm 0.17) \cdot 10^{-4} \,\text{Тл/A}.$$
 (1.15)

Таблиця 1.1. Параметри котушок

Величина	Значення
Кількість витків в одному кільці	N = 154
Радіус кільця	R = 0.200 M
Похибка вимірюванні радіусу	$\Delta R = 0.005 \text{M}$
Константа котушок	$C = (6.92 \pm 0.17) \cdot 10^{-4} \text{ Тл/A}$

Далі виміряємо прямо залежність магнітного поля в центрі котушок, виміряну тесламетром від сили струму, що тече через котушки. Після обробки результатів, отримаємо графік зображений на рис. 1.6.

Увага

Якщо з теорії відомо, що залежність між вимірюваними величинами є лінійною y = ax + b і має проходити через початок координат, може виникнути бажання покласти b = 0. Проте, при початковому аналізі таких даних все одно краще цього не робити, оскільки це дозволить

визначити систематичну похибку, яка може бути присутня в вимірюваннях (наприклад у приладу «збитий нуль»). Однак, якщо в результаті апроксимації виявиться, що $b \ll \Delta b$, то це означає, що параметр b є надлишковим і в якості моделі можна прийняти y = ax.

Результати мають наступний вигляд:

$$C_{\text{exp}} = (6.83 \pm 0.24) \cdot 10^{-4} \text{ Tp/A},$$
 (1.16)

$$\frac{\chi^2}{N-p} = 0.93. \tag{1.17}$$

Критерій якості апроксимації, який дорівнює 0.93 і свідчить про те, що модель добре описується експериментом.

Порівняємо тепер результати двох вимірювань і вияснимо, наскільки вони співпадають. Для цього знайдемо різницю $|C_{\rm ECJI}-C_{\rm exp}|$ і порівняємо її з похибкою експериментальних даних:

$$\left| \frac{C_{\text{BCJI}} - C_{\text{exp}}}{\Delta C} \right| \approx 0.4. \tag{1.18}$$

Як видно відмінність двох значень становить 0.4 стандартного відхилення, що з точки зору інтерпретації говорить, що ці величини однакові.

Увага

Часто зустрічається помилка, коли студент знаходить кутовий коефіцієнт (параметр a) по середньому від частки. Наприклад, якщо вимірюється залежність B(I), то отримавши кілька експериментальних точок (I_i, B_i) , і користуючись формулою $C = \frac{B}{I}$, студент обчислює константу котушок для вимірювання $C_i = \frac{B_i}{I_i}$, а потім визначає саму константу як середнє значення

$$\langle C \rangle = \frac{1}{n} \sum_{i} C_{i}$$

Помилки полягають в наступному: по-перше, застосовувати процедуру усереднення можна тільки при повторенні одного і того ж вимірювання. В даному випадку значення C_i відносяться до різних вимірювань, так як параметри системи кожен раз змінювалися. По-друге, не можна перевірити, чи залежність дійсно лінійна. По-третє, навіть якщо залежність можна вважати лінійною, може виявитися так, що вона не проходить через нуль (наприклад, через зсув нуля амперметра або тесламетра) — тоді формула $C_i = \frac{B_i}{I_i}$ не годиться. І нарешті, навіть якщо виконана лінійність і залежність проходить через нуль, обчислення таким способом загрожує великими похибками. Неважко бачити, що середнє значення $\left\langle \frac{B_i}{I_*} \right\rangle$ по суті є середнє тангенсів кутів нахилу ліній, проведених з початку координат в експериментальну точку. Як відомо, функція tg(x) при $x > \frac{\pi}{4}$ дуже різко зростає (і прямує до нескінченності при $\frac{\pi}{2}$). У такому випадку навіть невелике «ворушіння» експериментальної точки, особливо якщо вона знаходиться досить близько до осі ординат, може привести до різкого збільшення внеску цієї точки в підсумковий результат. Таким чином, «розумний» результат студента плід вдалого збігу багатьох обставин. Правильний — обґрунтований і надійний — алгоритм знаходження константи: побудувати графік B(I), переконатися в його лінійності, і побудувати найкращу пряму. Кутовий коефіцієнт цієї прямої і буде найкращою оцінкою константи котушок Гельмгольца.

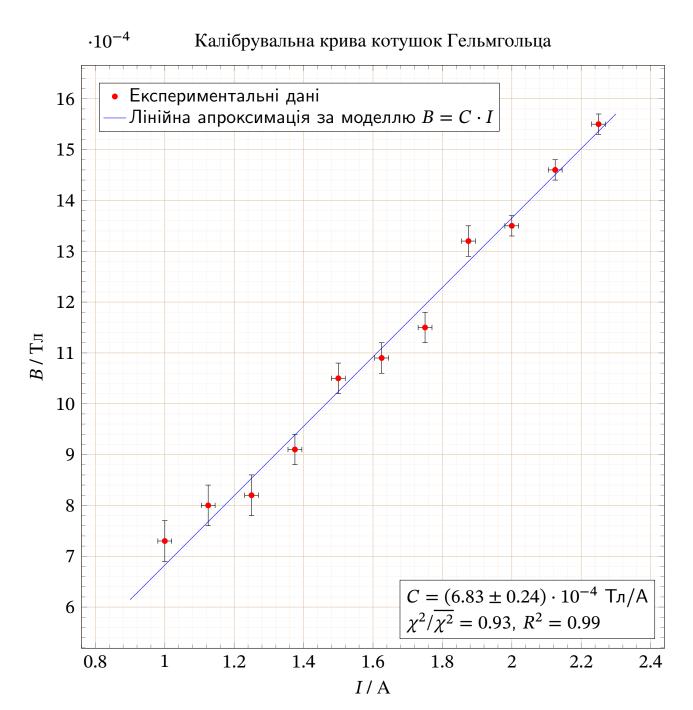


Рис. 1.6. Вимірювання залежності індукції магнітного поля B в середині котушок Гельмгольца від сили струму I в їх обмотках. Експериментальні дані та їх лінійна апроксимація. Наведено критерій якості апроксимації, який дорівнює 0.93 і свідчить про те, що модель добре описується експериментом

Б. Програмне забезпечення для апроксимації даних та побудови графіків. Приклади застосування

Існує чимало програмних пакетів для апроксимації експериментальних даних. Зосередимось лише на потужному Open Source забезпеченні. Нехай є експериментальні дані, подані у вигляді чотирьох колонок: самих даних x, y, та їх стандартних похибок xdelta, ydelta:

```
x y xdelta ydelta

1.000 0.73e-3 0.02 0.04e-3

1.125 0.80e-3 0.02 0.04e-3

1.250 0.82e-3 0.02 0.04e-3

1.375 0.91e-3 0.02 0.03e-3

1.500 1.05e-3 0.02 0.03e-3

1.625 1.09e-3 0.02 0.03e-3

1.750 1.15e-3 0.02 0.03e-3

1.875 1.32e-3 0.02 0.03e-3

2.000 1.35e-3 0.02 0.02e-3

2.125 1.46e-3 0.02 0.02e-3

2.250 1.55e-3 0.02 0.02e-3
```

Для цих даних необхідно перевірити модель y = ax + b, а також отримати параметр a цієї моделі та його стандартну похибку Δa .

Б.1. Обробка результатів в Python

В середовищі Python пакетом для чисельної обробки експериментальних даних є scipy. Наведемо тут лише приклад виклику процедури оптимізації.

Для початку, треба завантажити дані в змінні:

```
"""
Завантаження даних в эмінні
"""
data = np.loadtxt(sys.argv[1], skiprows=1)
x = data[:, 0]
y = data[:, 1]
dx = data[:, 2]
dy = data[:, 3]
```

Задаємо функцію, якою будемо апроксимувати наші дані:

```
# Задаємо модельну функцію
def model_func(beta, x):
    """
Визначення математичної моделі для підгони.

Параметр підгонки beta[0] та beta[1]
    """
    y = beta[0] * x + beta[1]
    return y
```

Вибираємо метод Orthogonal distance regression (ODR) з бібліотеки scipy.odr, який реалізує метод найменших повних квадратів, який і будемо використовувати для підгонки:

```
# Створюємо екземпляр моделі
model = Model(model_func)

# Створюємо екземпляр даних data
data = RealData(x, y, dx, dy)

# Створюємо ODR зі своїми даними, моделлю та початковою оцінкою параметрів
odr = ODR(data, model, [6e-4, 0])

# Вибір методу підгонки
odr.set_job(fit_type=0)
```

Результати обробки даних програма вміщує в змінні. Параметр моделі — output.beta[0], стандартна похибка параметру моделі — output.beta[0] та χ^2 — output.res_var. Після чого завдяки функції np.savetxt ці результати можна записати у файл.

Повний лістинг скрипту (текст 1). Скрипт отримує на вході файл з даними, а на виході записує файл з результатами апроксимації:

```
PyFit.py <file_with_experimental_data> <file_with_fit_parameters>
```

Listing 1. Лістинг скрипта PyFit.py

```
1 """

2 Апроксимація даних за визначеною моделлю.

3 В файл передаються параметри 1 - 'Вхідний файл з даними'

5 2 - 'Вихідний файл з результатами'

6 Модель задається функцією model_func

7 """

8 
9 import sys
import numpy as np
```

```
from scipy.odr import ODR, Model, RealData
11
12
13
14
    Завантаження даних в змінні
15
16
    data = np.loadtxt(sys.argv[1], skiprows=1)
17
18
    x = data[:, 0]
    y = data[:, 1]
19
    dx = data[:, 2]
20
    dy = data[:, 3]
21
22
23
    11 11 11
24
25
    Підгонка
26
27
28
    # Задаємо модельну функцію
29
    def model_func(beta, x):
30
31
        Визначення математичної моделі для підгони.
32
33
        Параметр підгонки beta[0] та beta[1]
34
35
        y = beta[0] * x + beta[1]
36
        return y
37
38
39
    # Здійснюємо підгону даних за моделлю
40
    # https://docs.scipy.org/doc/scipy/reference/odr.html
41
42
    # Створюємо екземпляр моделі
43
    model = Model(model_func)
44
45
    # Створюємо екземпляр даних data
46
    data = RealData(x, y, dx, dy)
47
48
    # Створюємо ODR зі своїми даними, моделлю та початковою оцінкою параметрів
49
    odr = ODR(data, model, [6e-4, 0])
50
51
    # Вибір методу підгонки
52
    odr.set_job(fit_type=0)
53
54
55
    def R_square(x, y, model, popt, uncertainty=1):
56
57
        Розрахунок R^2.
58
59
        Функція повертає R^2 для заданої моделі.
60
         H/H/H
61
        weight = 1.0 / uncertainty
62
        Rsq = 1.0 - (np.var((y - model(popt, x)) * weight) / np.var(y * weight))
63
        n, p = len(y), len(popt)
64
        coefficient = (n - 1) / (n - p - 1)
65
        adj_Rsq = 1 - (1 - Rsq) * coefficient
66
67
        return adj_Rsq
68
69
    # Отримуємо результати підгонки
70
```

```
output = odr.run()
71
    adjusted_Rsq = R_square(x, y, model_func, popt=output.beta)
72
73
    # Заапис параметрів у файл
74
    np.savetxt(
75
        sys.argv[2],
76
77
78
             ("Parameter a", output.beta[0]),
             ("Standart Deviation of a", output.sd_beta[0]),
79
             ("Parameter b", output.beta[1]),
80
             ("Standart Deviation of b", output.sd_beta[1]),
             ("chi square", output.res_var),
82
             ("R square", adjusted_Rsq),
83
        ],
84
        delimiter=": ",
85
        fmt="%s",
86
87
```

Б.2. Обробка результатів в Gnuplot

Ті ж самі обчислення можна зробити за допомогою **Gnuplot**. Як сказано в файлі документації, апроксимація даних здійснюється за алгоритмом описаним в статті [2].

Listing 2. Лістинг скрипта GpFit.gp

```
# ----- Підгонка -----
    set fit quiet
    a = 6e-4;
   f(x) = a*x + b;
    set fit errorvariables;
   fit f(x) ARG1 u 1:2:3:4 xyerrors via a,b;
6
    # ----- Обчислення of R^2 -----
   stats "" u 2:($2 - (a*$1 + b)) nooutput
10
   SST = STATS_stddev_x**2*STATS_records
11
   SSE = STATS_sumsq_y
12
   R2 = 1 - SSE/SST
13
14
    # ----- Запис результатів -----
15
16
   set print ARG2
17
   print "Parameter a: ", a
18
    print "Standart Deviation of a: ", a_err
19
    print "Parameter b: ", b
20
    print "Standart Deviation of b: ", b_err
21
   print "chi square: ", (FIT_STDFIT)**2
22
   print "R square:" , R2
```

Скрипт отримує на вході файл з даними, а на виході записує файл з результатами апроксимації:

```
gnuplot -persist -c GnuFit.gp <file_with_experimental_data> <file_with_fit_parameters>
```

Увага

Слід зазначити, що існує величезна кількість засобів і способів оцінки оптимальних значень параметрів, тому при використанні того чи іншого інструменту, завжди слід читати документацію і з'ясовувати, що саме і як він виконує алгоритм.

Якщо поставити холіварне питання, що краще обирати scipy, GnuPlot, чи щось інше, то тут лише справа смаку. Деякі порівняння в роботі бібліотек Python та GnuPlot можна знайти за посиланням https://stackoverflow.com/a/23883352/4908648.

Також слід завжди перевіряти результати обробки з якісних міркувань.

Б.3. Побудова графіку за допомогою пакета pgfplots/М-X

Побудувати графік можна засобами того ж Python або Gnuplot, але набагато гнучкіше це можна зробити за допомогою пакета pgfplots для LATEX:

Listing 3. Лістинг धान् файлу

```
% !TeX program = lualatex
    % !TeX encoding = utf8
    % !TeX spellcheck = uk_UA
5
    \documentclass[tikz, border = 0.5cm]{standalone}
    % ======== Шрифти ============
    \usepackage{fontspec}
8
    \setsansfont{CMU Sans Serif}%{Arial}
9
    \setmainfont{CMU Serif}%{Times New Roman}
10
    \setmonofont{CMU Typewriter Text}%{Consolas}
11
    \defaultfontfeatures{Ligatures={TeX}}
12
    \usepackage[math-style=TeX] {unicode-math}
13
    % ======= Мова =========
14
    \usepackage[english, russian, ukrainian]{babel}
15
16
    % ========= Пакети =============
17
    \usepackage{pgfplots} % Пакет для побудови графіків
18
19
    \usepackage{pgfplotstable} % Пакет для роботи з таблицями
20
    % ===== Файли з даними ======
21
    \edef\infile{ExpData.dat} % Файл з даними експерименту
22
    \edef\outfile{FitParam.dat} % Файл з параметрами підгонки
23
24
    % Виклик скрипта РҮТНОN для апроксимації даних
25
    %\input{|python PyFit.py \infile\space \outfile}
26
27
    %або
28
29
30
    % Виклик скрипта GNUPLOT для апроксимації даних
    \input{|gnuplot -persist -c GnuFit.gp \infile\space\outfile}
31
32
    % ====== Команда \getelement ======
33
    % Забирає данні з файлу параметрів
34
    % і вміщуе в змінні LaTeX
35
    \pgfplotstableread[]{\infile}\datatable
```

```
\newcommand{\getelement}[4]{
37
            \pgfplotstablegetelem{#2}{#3}\of#1
38
            \pgfmathsetmacro{#4}{\pgfplotsretval}
39
    }
40
41
    % ====== Завантаження данних для побудови ======
42
43
    \pgfkeys{/pgf/fpu}
    \pgfplotstableread[col sep = colon, header=false]{\outfile}\plotfitdata
44
    \getelement{\plotfitdata}{0}{1}{\C} % Параметр моделі С
45
    \getelement{\plotfitdata}{1}{1}{\dC} % Стандартна похибка параметру
46
    \getelement{\plotfitdata}{2}{1}{\b} % Параметр моделі С
47
    \getelement{\plotfitdata}{3}{1}{\db} % Стандартна похибка параметру
48
    \getelement{\plotfitdata}{4}{1}{\chisqr} % Приведений хі-квадрат
49
    \getelement{\plotfitdata}{5}{1}{\rsq} % Коефіцієнт детермінації R^2
50
    \pgfmathsetmacro{\Cprint}{\C*1e4}
51
    \pgfmathsetmacro{\dCprint}{\dC*1e4}
52
    \pgfmathsetmacro{\bprint}{\b*1e4}
53
    \pgfmathsetmacro{\dbprint}{\db*1e4}
54
    \pgfkeys{/pgf/fpu=false}
55
                                     _____
56
57
    \begin{document}
58
59
    \begin{tikzpicture}[]
            \begin{axis}[
60
                             % ===== Легенда ========
61
                             legend style={font=\small,
62
                                             fill opacity=0.5,
63
                                             text opacity=1,
64
                                             draw=none,
65
                                             cells={
66
                                                              align = left,
67
                                                              anchor=west},
68
                                             legend pos=north west,
69
                                     },
70
                             % ====== Координатна сітка =======
71
                             grid = both,
72
                             grid style={line width=.1pt, draw=brown!10},
73
74
                             major grid style={line width=.2pt,draw=brown!50},
                             minor x tick num = 9,
75
                             minor y tick num = 4,
76
                             minor grid style = {line width=.1pt,draw=brown!10},
77
                             % ===== Штрихи координатних осей ==
78
                             tick label style = {font=\sffamily},
79
                             tick align=inside,
80
                             legend style = {font=\sffamily},
81
                             enlargelimits=false,
82
                             width=\linewidth,
83
                             height=\linewidth,
84
                             every axis label = {font=\sffamily},
85
                             xlabel={SI$ / A},
86
                             ylabel=\{\$B\$ / T\pi\},
87
                             scaled x ticks=base 10:0,
88
                             scaled y ticks=base 10:4,
89
                             xtick distance=0.2,
90
                             title = {\sffamily Калібрувальна крива котушок Гельмгольца},
91
                    ]
92
                    % ======= Plot 1 ========
93
                    \addplot [only marks,
94
                             mark options = {color = red},
95
                             mark size = 2,
96
```

```
error bars/.cd,
97
                      y dir=both,
98
                                    x dir=both,
99
                                    y explicit,
100
                                    x explicit,
101
                  pgfplots/.cd,
102
                      ] table[
103
                                        x = x,
104
                                        y = y,
105
                                        x error = xdelta,
106
                                        y error = ydelta] \datatable;
107
                      \addlegendentry{Експериментальні дані}
108
109
                      \addplot [no markers, blue, domain=0.8:2.5] {
110
                               \C * x
111
                      };
112
                       \addlegendentry{Лінійна апроксимація за моделлю $B = C \cdot I$}
113
114
                      % Додавання результатів на графік
115
                      \node[anchor=south east,
116
                      draw=none,
117
                      fill=white,
119
                      align=left,
                      font=\sffamily,
120
                      fill opacity=0.5,
121
                      text opacity=1,
122
                      ] at ([shift = {(-0.25cm, 0.25cm)}] current axis.south east) {
123
                      $C = (\pgfmathprintnumber[precision=2, fixed, fixed zerofill]{\Cprint}
124
                                \pm
125
                               \pgfmathprintnumber[precision=2, fixed, fixed zerofill]{\dCprint})
126
                               \cdot 10^{-4}$^T\pi/A \\
127
                      {\phi^2}/{\sigma^2}/{\sigma^2} =
128
                     \pgfmathprintnumber[precision=2,fixed]{\chisqr}$,
129
130
                      $R^2 = \pgfmathprintnumber[precision=2,fixed]{\rsq}$ };
              \end{axis}
131
     \end{tikzpicture}
132
133
134
     \end{document}
```

Б.4. Апроксимація в Google Colab

Ви також можете побачити роботу алгоритмів апроксимації в Python з використанням сервісу Google Colab.

Перелік використаних джерел

- [1] Fitting data with errors. English. URL: https://riptutorial.com/gnuplot/example/27491/fitting-data-with-errors.
- [2] Jay Orear. "Least squares when both variables have uncertainties". B: American Journal of Physics 50.10 (1982), c. 912—916. DOI: 10.1119/1.12972. eprint: https://doi.org/10.1119/1.12972.
- [3] Введение в Gnuplot. Pyc. URL: http://gnuplot.ikir.ru/intro/index-e.html.
- [4] Л. Л. Гольдин и др. Лабораторные занятия по физике. Рус. Под ред. Л. Л. Гольдин. М.: Φ МЛ, 1983. 704 с.
- [5] И. В. Митин и В. С. Русаков. Анализ и обработка экспериментальных данных. Рус. М.: Физфак МГУ, 1985.
- [6] Обработка результатов эксперимента. Лекторий МФТИ. Рус. 2019. URL: https://bit.ly/3m2M1JJ.
- [7] П. В. Попов. Обработка результатов учебного эксперимента. Рус. М., 2019. 49 с.
- [8] Дж. Сквайрс. Практическая физика. Рус. Пер., под ред. Е. М. Лейкин. М.: Мир, 1971. 246 с.
- [9] Дж. Тейлор. Введение в теорию ошибок. Рос. Пер. Л. Г. Деденко. М.: Мир, 1985. 272 с.