

课程讲义 - 误差分析

赵永峰

苏州大学，物理科学与技术学院，软凝聚态物理及交叉研究中心

(Dated: August 8, 2022)

CONTENTS

I. 概述	1
A. 实验课程的目的	1
B. 测量	2
C. 误差	2
D. 不确定度	2
II. 不确定度的估计	3
A. 单次测量中由仪器有限精度带来的不确定度	3
B. 多次重复测量的统计不确定度	4
C. 多次重复测量的合成不确定度	5
D. 间接测量的不确定度	6
E. 线性最小二乘拟合的不确定度	8

I. 概述

A. 实验课程的目的

物理，尤其是理论物理，是建立在实验之上的。但是与生物、化学等学科不同的是，物理的研究与应用中较少有需要学生熟练掌握的、标准化的操作流程。因此本科的物理实验课程的训练主要集中在以下几点。

- 作为理论课程的补充。

我们希望学生能够相信在其他课程中所学到的理论并不是胡说八道。我们在力学与电磁学课程中学到的理论是为了描述与分析实验现象而建立的。最终我们必然要回到真实世界来看这些理论是如何工作的。

- 基本的学术诚信规范。

要在物理中建立正确的知识，我们必须遵守学术诚信的规范。这其中第一步就是要尊重事实：实验数据是从实验中测量得到的。**任何实验数据绝不可以被假造或剽窃。**

因为大自然的随机性质，单次测量中的具体数字并不重要。实验数据并不存在完美的答案，也不会计入分数。因而假造或剽窃数据不会带来任何分数上的优势。**一旦数据是由假造或剽窃而来，单次实验所有的数据分将被全部扣除。**

- 误差分析。

这将是这篇讲义的主要内容。

B. 测量

测量是物理实验的核心。物理学建立在对物理量的定量与精确测量之上，在此基础上我们得以发现物理量之间的关系并构造理论来描述大自然。一些物理量可以被**直接**测量。比如使用游标卡尺可以测量圆片的厚度。一些物理量则只能利用已知的物理定律来**间接**地被测量。比如我们可以利用欧姆定律，通过测量流过电阻器的电流与两端电压来测量电阻器的阻值。

哲学地说，我们相信在每一个物理量之中存在**真实值**。我们希望能通过测量知道这个真实值。但**任何测量都不可能绝对精确**，这是一个基本事实。我们如何改进测量的精度是一个非常重要的问题。因为不夸张地说，所有的新物理与新技术均在精度的进步之中诞生。而要回答这个问题需要关于误差的知识。

C. 误差

误差是测量结果与真实值之间的偏差。误差分析则是关于误差来源与不确定度估计的分析。通过误差分析，我们会知道

- 一个测量结果有多好。我们在多大程度上可以相信我们的测量结果。
- 在测量仪器精度有限的条件下，我们可以采用什么样的策略来改进测量的准确性。

我们通常根据误差的来源和统计性质，将误差分为两类。

- **系统误差**是测量中系统性的偏差。它可以源于仪器的系统性偏差、不精确的方法、环境的系统性变化、实验操作人员的偏好等。

要减少系统误差，我们可以使用更精密的仪器、改进实验方法、控制实验环境等。

- **随机误差**每一次观测都不同。它通常源自热运动、随机事件、或大自然内禀的随机性。

基本的减少随机误差的方法是重复同样的观测并对结果进行平均。

需要强调的是误差并非实验中的错误。**误差是不可避免且无法完全消除的**。当我们谈论误差的时候，我们总是假定实验是被正确实施的。

D. 不确定度

不确定度表示测量的真实值以确定的概率落入的范围，它表示了测量结果的置信区间。测量结果 x 通常记为

$$x \pm u_x, \quad (1)$$

其中 u_x 是物理量 X 的不确定度。这个写法表明 X 的真实值以确定的概率落在区间 $(x - u_x, x + u_x)$ 之中。**一个测量结果只有在标明不确定度与单位之后才是完整的**。

这里我们注意到 u_x 中 1-2 个有效数字就足够了。既然结果的精度被 u_x 所限制，比 u_x 更多的有效数字变得毫无意义。因而最终测量结果的有效数字应当与不确定度对齐。

例 1: 假如一个关于长度的测量测得 $l = 3.9514 \text{ cm}$ 与 $u_l = 0.1261 \text{ cm}$ 。首先，我们只保留不确定度的 1 位有效数字 $u_l = 0.1$ 。接下来，既然真实值最有可能落在区间 $(3.9514 - 0.1 \text{ cm}, 3.9514 + 0.1 \text{ cm})$ 之中， l 里超过两位有效数字变得毫无意义。最终结果应当表示为

$$l = 4.0 \pm 0.1 \text{ cm}.$$

这里我们使用了只入不舍的近似方法，即最后一位数字总是加 1。注意最后的数字 0 不可以省略。

例 2: 一个关于长度的测量得到 $l = 2.6 \pm 0.3 \text{ cm}$ 。如果误差是正态分布的，且不确定度以标准差记，那么真实值落在区间 $(2.3 \text{ cm}, 2.9 \text{ cm})$ 中的概率为 68.3%。因为对于正态分布来说，

$$\frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \int_{-\sigma}^{\sigma} e^{-\frac{x^2}{2\sigma^2}} \approx 0.683. \quad (2)$$

因为随机误差的影响，测量的结果通常是服从某个特定（但未知）的概率分布的随机变量。不确定度通常选为这一概率分布下的标准差。在下一节我们会讨论如何去估计它。

II. 不确定度的估计

A. 单次测量中由仪器有限精度带来的不确定度

现实中，所有的仪器都只有有限的精度和准确度，因而限制了单次测量的不确定度。我们先来讨论单次直接测量中仪器带来的不确定度。

仪器的误差通常由制造商进行校准与测量的。我们需要阅读使用手册来了解它的不确定度如何计算。每一种仪器的不确定度计算方式可能都不一样。

通常，仪器的误差是以允差的形式给出的。多数仪器的误差可以认为是在允差所限制的范围内均匀分布的。比如，如果我们使用分度为 0.1 cm 的尺子测量得到长度 1.56 cm ，真实值应当不会超出区间 $(1.51, 1.61) \text{ cm}$ 。允差是 $0.1/2 = 0.05 \text{ cm}$ ，而测量结果可以假设是在区间 $(1.51, 1.61) \text{ cm}$ 中随机分布。

如果一个随机变量 x 是在 $(\bar{x} - \Delta_I, \bar{x} + \Delta_I)$ 中均匀分布，其中 Δ_I 为允差，则它的标准差可以计算为

$$\sigma_x^2 = \frac{1}{2\Delta_I} \int_{\bar{x}-\Delta_I}^{\bar{x}+\Delta_I} (x - \bar{x})^2 dx = \frac{\Delta_I^2}{3}. \quad (3)$$

因此仪器带来的不确定度 u_I ，以标准差 σ_x 计算，可以由允差 Δ_I 计算。

$$u_I = \frac{\Delta_I}{\sqrt{3}}. \quad (4)$$

Δ_I 一般是半刻度或者从仪器制造商提供的信息中计算。

备注： 仪器的误差不一定是随机的，可能是系统误差。

例 3: 对于单臂电桥实验中用到的电阻箱（图1），制造商提供了如表I所示的误差表。根据手册，电阻箱的允差计算为 $\Delta_I = \sum_i R_i \times \alpha_i \% + R_0$ ，其中 R_i 是第 i 个表盘的电阻值， $R_0 = 0.02 \Omega$ 是残余电阻。

disk multiples	$\times 10000$	$\times 1000$	$\times 100$	$\times 10$	$\times 1$	$\times 0.1$
accuracy class α	0.1	0.1	0.1	0.1	0.5	2

Table I. 图1所示电阻箱的误差表

如果电阻箱设定为 31935.7Ω ，仪器的允差可以计算为

$$\Delta_I = 30000 \Omega \times 0.1\% + 1000 \Omega \times 0.1\% + 900 \Omega \times 0.1\% + 30 \Omega \times 0.1\% + 5 \Omega \times 0.5\% + 0.7 \Omega \times 2\% + 0.02 \Omega = 31.969 \Omega, \quad (5)$$

而电阻箱的不确定度为

$$u_I = \frac{\Delta_I}{\sqrt{3}} = 18.457 \Omega = 20 \Omega.$$

电阻箱的阻值应当记为 $(3.194 \pm 0.002) \times 10^4 \Omega$ 。

备注： 使用科学计数法展示结果可以保持正确的有效数字位数。



Figure 1. 电阻箱

B. 多次重复测量的统计不确定度

我们不要求学生熟练掌握这一小节中关于不确定度的理论。但是了解一些知识可以帮助理解后文中会出现的重要公式。

让我们考虑一个关于真实值 X 的测量，并重点考虑除去仪器有限精度之外的随机误差。由于随机误差的影响，测量结果 x 是一个随机数。真实值 X 和测量结果 x 满足的概率分布均是未知的，因而我们只能通过 n 次试验得到的有限数目的一系列测量结果 x_i 来估计不确定度， $i = 1, 2, \dots, n$ 。

使不确定度的估计成为可能的是一个数学定理——**中心极限定理**。我们这里粗略地陈述一下这个定理。对于 n 个随机变量 r_1, r_2, \dots, r_n ，平均值

$$\bar{r} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n r_i \quad (6)$$

显然也是一个随机变量。不论其中每一个 r_i 服从何种概率分布，如果它们均服从同样的分布且相互独立，那么在 $n \rightarrow \infty$ 的极限下， \bar{r} 服从的概率分布几乎一定收敛到一个正态分布。如果每一个 r_i 的均值（期望）为 μ 而（有限的）标准差为 σ ， \bar{r} 服从的正态分布具有均值 μ 与标准差 σ/\sqrt{n} 。

这一定理如何应用到不确定度的分析中？如果有控制好测量 X 的实验条件，我们可以假定每次观测的结果 x_i 是独立且同分布的。如果系统的误差已经被正确考虑，误差 $\Delta_i = x_i - X$ 的均值为 0。那么当试验次数 n 足够大时，平均值 \bar{x} 收敛到 X ，并且选做标准差的不确定度由 $u_{\bar{x}} = \sigma_{\Delta}/\sqrt{n}$ 给出。

$\sigma_{\Delta} = \lim_{n \rightarrow \infty} \sqrt{\sum_i \Delta_i^2 / n}$ 依然是未知的。为了估计 σ_{Δ} ，我们先定义 $\delta_i = x_i - \bar{x}$ ，并注意到

$$\sum_i \Delta_i = \sum_i x_i - nX = n\bar{x} - nX, \quad (7)$$

$$\bar{x} = X + \frac{1}{n} \sum_i \Delta_i. \quad (8)$$

于是有

$$\sum_i \delta_i^2 = \sum_i (x_i - X - \frac{1}{n} \sum_j \Delta_j)^2 = \sum_i (\Delta_i - \frac{1}{n} \sum_j \Delta_j)^2 = \sum_i \Delta_i^2 - \frac{2}{n} \sum_{i,j} \Delta_i \Delta_j + \frac{n}{n^2} \sum_i \Delta_i^2. \quad (9)$$

因为 Δ_i 是独立的且均值为 0，第二项在 $i \neq j$ 时总是 0。于是我们有

$$\sum_i \delta_i^2 = \frac{n-1}{n} \sum_i \Delta_i^2. \quad (10)$$

于是 σ_{Δ} 的估计有

$$\sigma_{\Delta} = \sqrt{\frac{\sum_i \Delta_i^2}{n}} = \sqrt{\frac{\sum_i \delta_i^2}{n-1}} = \sqrt{\frac{\sum_i (x_i - \bar{x})^2}{n-1}}. \quad (11)$$

现在我们可以将 \bar{x} 与它的不确定度 $u_{\bar{x}}$ 估计为

$$\bar{x} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x_i, \quad u_{\bar{x}} = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2}{n(n-1)}}. \quad (12)$$

备注:

1. 注意每次测量 x_i 的标准差 σ_{Δ} 是关于测量次数 n 的常数，它表征了测量误差分布的性质。而 $u_{\bar{x}} = \sigma_{\Delta}/\sqrt{n}$ 是均值 \bar{x} 的标准差，它表示了 \bar{x} 浮动的剧烈程度。
2. 现在我们可以看到为什么需要多次重复测量并取平均值了。平均值 \bar{x} 只有当试验次数足够大时收敛到 X ，并且不确定度 $u_{\bar{x}}$ 以 $o(n^{-1/2})$ 的标度变化，这意味着缓慢地随 n 衰减。
3. 因为中心极限定理，假定误差 $\Delta_i = x_i - X$ 总是正态分布是比较安全的。经过多次试验与平均之后，我们就无法看到分布相对于正态分布的偏离了。

C. 多次重复测量的合成不确定度

如果我们使用真实仪器对一个物理量 X 进行 n 次直接测量，作为均值的估计可以被表示为

$$\bar{x} = X + \Delta = X + \Delta_I + \Delta_R, \quad (13)$$

这里 Δ_I 是仪器精度带来的误差，而 Δ_R 是随机误差。 Δ_I 和 Δ_R 的不确定度分别记做 u_I 和 u_R 。因而最终测量结果的不确定度是这两个误差来源的合成。如果我们假定仪器的误差和随机误差是不相关的，我们有

n 次测量 x_i 的合成不确定度可以估计为

$$u = \sqrt{u_I^2 + u_R^2}, \quad (14)$$

其中 u_I 是仪器精度带来的不确定度，由(4)式计算。而 u_R 是随机误差的不确定度，由(12)式计算。

备注: 如果我们假定 Δ_I 和 Δ_R 都服从均值为 0 的正态分布，那么它们的和也是一个正态分布的随机变量。而和的标准差由 $\sqrt{u_I^2 + u_R^2}$ 给出。然而 Δ_I 的均值无法预测且不一定为 0，因为它可以是系统误差。这就是为什么(4)式中计算 u_I 没有系数 $1/\sqrt{n}$ ：系统误差无法通过重复实验来减小。但是这一未知的系统误差依然要被包括在不确定度中。因此，合成律(14)式更多的是一种（由国际标准化组织作出的）规定，而并无严格的证明。

例 4: 使用尺子对长度进行 5 次测量得到结果：1.78 cm, 1.75 cm, 1.79 cm, 1.80 cm, 1.75 cm，并且尺子的最小刻度是 0.1 cm。平均值得到

$$\bar{l} = \frac{1.78 + 1.75 + 1.79 + 1.80 + 1.75}{5} \text{ cm} = 1.774 \text{ cm}.$$

尺子的允差是半刻度 0.05 cm，因而仪器不确定度为

$$u_I = \frac{0.05}{\sqrt{3}} \text{ cm} = 0.03 \text{ cm}.$$

随机误差的不确定度为

$$u_R = \sqrt{\frac{(1.78 - 1.774)^2 + (1.75 - 1.774)^2 + (1.79 - 1.774)^2 + (1.80 - 1.774)^2 + (1.75 - 1.774)^2}{5 \times (5 - 1)}} \text{ cm} = 0.01 \text{ cm} .$$

合成不确定度则是

$$u = \sqrt{u_I^2 + u_R^2} = 0.03 \text{ cm} .$$

最终, 测量结果表示为

$$l = 1.77 \pm 0.03 \text{ cm} .$$

注意这里的误差主要由仪器的精度主导。

D. 间接测量的不确定度

能够进行直接测量的物理量并不多。比如说, 电阻器的电阻 R 可以利用欧姆定律 $R = U/I$, 通过测量流过的电流 I 与两端电压 U 来测量。 I 和 U 的测量均有不确定度, 而它们决定了计算出的 R 的不确定度。因而我们需要基于 I 和 U 的不确定度来计算 R 的不确定度。

考虑一般的情形, 假定有 m 个独立的直接测量 x_i , $i = 1, 2, \dots, m$ 。 x_i 的不确定度为 u_i 。 y 的测量是通过函数 $y = f(x_1, x_2, \dots, x_m)$ 计算得到的。那么 y 的不确定度 u_y 是什么?

每个物理量 x_i 可以有误差 $\delta x_i = x_i - \bar{x}_i$ 。假设每个测量中的误差都比较小, 我们可以根据偏微分来估计 y 的误差 δy

$$\delta y = \sum_{i=1}^m \left(\frac{\partial f}{\partial x_i} \right) \delta x_i . \quad (15)$$

如果所有的误差 δx_i 都是正态分布的, 那么(15)式中的线性组合得到的也是一个正态分布。标准差 δy 为

$$\sigma_y = \sqrt{\sum_{i=1}^m \left(\frac{\partial f}{\partial x_i} \right)^2 \sigma_i^2} . \quad (16)$$

为表明这一点, 我们可以直接计算 $\sum_{j=1}^n \delta y_j^2$, 其中 n 是试验次数, j 标记了每一次实验。我们有

$$\sum_{j=1}^n \delta y_j^2 = \sum_{j=1}^n \sum_{i=1}^m \left(\frac{\partial f}{\partial x_i} \right)^2 \delta x_{i,j}^2 + 2 \sum_{j=1}^n \sum_{i \neq k} \left(\frac{\partial f}{\partial x_i} \right) \left(\frac{\partial f}{\partial x_k} \right) \delta x_{i,j} \delta x_{k,j} . \quad (17)$$

如果所有的物理量都不相关, 我们对于 $i \neq k$ 有 $\sum_{j=1}^n \delta x_{i,j} \delta x_{k,j} = 0$, 于是第二项总是 0。由标准差的定义 $\sigma_i = \sqrt{\sum_{j=1}^n (\bar{x}_i - x_{i,j})^2 / (n - 1)}$ 我们可以得到(16)式。于是有

通过函数 $y = f(x_1, x_2, \dots, x_m)$ 测量的物理量 y 的不确定度 u_y 为

$$u_y = \sqrt{\sum_{i=1}^m \left(\frac{\partial f}{\partial x_i} \right)^2 u_i^2} , \quad (18)$$

这里 u_i 是每一个物理量 x_i 的不确定度, 并由(14)式给出。

如果计算 $\ln f$ 的导数比 f 更容易, (18)也等价于

$$\frac{u_y}{y} = \sqrt{\sum_{i=1}^m \left(\frac{\partial \ln f}{\partial x_i} \right)^2 u_i^2} . \quad (19)$$

函数 $z = f(x, y)$	u_z 的公式
$z = x + y$	$u_z = \sqrt{u_x^2 + u_y^2}$
$z = x - y$	$u_z = \sqrt{u_x^2 + u_y^2}$
$z = xy$	$\frac{u_z}{\bar{z}} = \sqrt{\left(\frac{u_x}{\bar{x}}\right)^2 + \left(\frac{u_y}{\bar{y}}\right)^2}$
$z = \frac{x}{y}$	$\frac{u_z}{\bar{z}} = \sqrt{\left(\frac{u_x}{\bar{x}}\right)^2 + \left(\frac{u_y}{\bar{y}}\right)^2}$
$z = kx$	$u_z = k u_x$
$z = x^k$	$\frac{u_z}{\bar{z}} = \frac{ k u_x}{\bar{x}}$
$z = \sqrt[k]{x}$	$\frac{u_z}{\bar{z}} = \frac{1}{k} \frac{u_x}{\bar{x}}$
$z = \sin x$	$u_z = \cos x u_x$
$z = \ln x$	$u_z = \frac{u_x}{\bar{x}}$
$z = e^x$	$\frac{u_z}{\bar{z}} = u_x$

Table II. 常用函数的不确定度

为方便期间，我们将常用函数的不确定度列在表II中。

例 5：我们通过图2所示的电路测量电阻器的电阻。

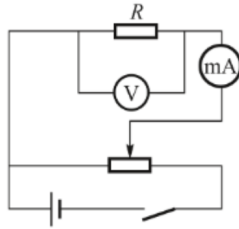


Figure 2. 测量电阻器电阻值所用的电路

因为电压表具有有限的内阻 R_V ，电阻器的阻值 R 由

$$R = \frac{U}{I - U/R_V} = \frac{R_V U}{R_V I - U} \quad (20)$$

给出。三个物理量 U ， I ， R_V 都可以有不确定度。为了计算 R 的不确定度，我们首先需要计算 R 的微分

$$\frac{dR}{R} = \left(\frac{1}{U} + \frac{1}{IR_V - U} \right) dU + \left(\frac{1}{R_V} - \frac{I}{IR_V - U} \right) dR_V - \frac{R_V}{IR_V - U} dI. \quad (21)$$

于是 R 的不确定度为

$$\frac{u_R}{R} = \sqrt{\left(\frac{1}{U} + \frac{1}{IR_V - U}\right)^2 u_U^2 + \left(\frac{1}{R_V} - \frac{I}{IR_V - U}\right)^2 u_{R_V}^2 + \left(\frac{R_V}{IR_V - U}\right)^2 u_I^2}. \quad (22)$$

如果一次测量给出 $R_V = 1000 \, \Omega$, $U = 7.0 \pm 0.2 \, \text{V}$, $I = 35 \pm 3 \, \text{mA}$, 而不确定度 u_{R_V} 可以忽略, 那么我们有

$$R = \frac{1000 \times 7}{1000 \times 0.035 - 7} \, \Omega = 250 \, \Omega.$$

以及

$$u_R = 250 \times \sqrt{\left(\frac{1}{7} + \frac{1}{1000 \times 0.035 - 7}\right)^2 \times 0.2^2 + \left(\frac{1000}{1000 \times 0.035 - 7}\right)^2 \times 0.003^2} \, \Omega = 28 \, \Omega.$$

最终的结果是

$$R = (2.5 \pm 0.3) \times 10^2 \, \Omega.$$

E. 线性最小二乘拟合的不确定度

一些物理量可能满足线性关系, 而一些重要的量是从线性关系的系数中测量的。考虑符合线性关系 $y = kx + b$ 的 n 个数据点 $(x_1, y_1), (x_2, y_2), \dots, (x_n, y_n)$ 。由于误差的存在, 它们并不是完美地落在一条直线上。我们应当如何估计 k 、 b 和它们的不确定度?

要估计 k 和 b , 我们可以寻找一条尽可能贴合所有数据点的直线。具体而言, 我们定义方均误差

$$\epsilon(k, b) = \sum_{i=1}^n (y_i - kx_i - b)^2 \quad (23)$$

来表示直线有多“接近”这些数据点。如果所有的点都落在直线上, $\epsilon = 0$ 。 k 和 b 的最优估计应当极小化 ϵ 。令 $\partial\epsilon/\partial k = \partial\epsilon/\partial b = 0$, 我们得到方程

$$\frac{\partial\epsilon}{\partial k} = - \sum_{i=1}^n 2(y_i - kx_i - b)x_i = 0, \quad (24)$$

$$\frac{\partial\epsilon}{\partial b} = - \sum_{i=1}^n 2(y_i - kx_i - b) = 0. \quad (25)$$

这些方程的解可以给出如下公式。

对于符合线性关系 $y = kx + b$ 的 n 个数据点 $(x_1, y_1), (x_2, y_2), \dots, (x_n, y_n)$, k 和 b 的最小二乘估计是

$$k = \frac{\sum_i x_i y_i - \sum_i x_i \sum_j y_j}{n \sum_i x_i^2 - (\sum_i x_i)^2} = \frac{\overline{xy} - \bar{x}\bar{y}}{\overline{x^2} - \bar{x}^2}, \quad b = \bar{y} - k\bar{x}. \quad (26)$$

如果我们假定残差 $y_i - kx_i - b$ 是中心在 0 的正态分布变量, 我们可以通过每一个点的不确定度与简单的误差传播估计 k 和 b 的不确定度。冗长的计算给出

$$u_k = \sqrt{\frac{1}{n(\overline{x^2} - \bar{x}^2)} \cdot \frac{\epsilon}{n-2}}, \quad u_b = \sqrt{\frac{\overline{x^2}}{n(\overline{x^2} - \bar{x}^2)} \cdot \frac{\epsilon}{n-2}}. \quad (27)$$

我们在线性最小二乘拟合中经常会提到相关系数 r , 它的定义是

$$r = \frac{\overline{xy} - \bar{x}\bar{y}}{\sqrt{(\overline{x^2} - \bar{x}^2)(\overline{y^2} - \bar{y}^2)}}. \quad (28)$$

如果所有的数据点都完美落在直线上, $|r| = 1$ 。 $r = 0$ 意味着 x 和 y 不相关。

备注: 根据(27)式, 截距 b 的不确定度可以很大。