ΚΕΦΑΛΑΙΟ 5
ΜΕΤΑΔΟΣΗ ΤΩΝ ΣΦΑΛΜΑΤΩΝ

Είδαμε προηγουμένως πως μπορούμε να εκτιμήσουμε τα σφάλματα των πειραματικών μεγεθών. Όμως, πολύ συχνά είναι απαραίτητο να υπολογίσουμε άλλες ποσότητες από τα πειραματικά μας δεδομένα. Τα αποτελέσματα των υπολογισμών μας έχουν κάποια αβεβαιότητα η οποία προέρχεται από την αβεβαιότητα (σφάλμα) των πειραματικών δεδομένων.

Έτσι, πρέπει να γνωρίζουμε τον τρόπο με τον οποίο τα σφάλματα των πειραματικών μας δεδομένων διαδίδονται μέσω των υπολογισμών αυτών και αντανακλώνται στην αντίστοιχη αβεβαιότητα των παραγόμενων ποσοτήτων. Μπορεί να αποδειχθεί ότι, αν τα σφάλματα είναι μικρά και συμμετρικά περί το μηδέν, μπορεί να ληφθεί ένα γενικό αποτέλεσμα του αναμενόμενου σφάλματος μιάς εξ υπολογισμών ποσότητας που εξαρτάται από κάποιον αριθμό ανεξάρτητων μεταβλητών. Αν $x, y, z, \cdots$ είναι πειραματικές ποσότητες με σφάλματα $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z, \cdots$, τότε η στάνταρ απόκλιση μιάς ποσότητας u η οποία παράγεται από αυτές μπορεί να υπολογιστεί από την σχέση:

$$\sigma_u^2 = \left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)^2 \sigma_x^2 + \left(\frac{\partial u}{\partial y}\right)^2 \sigma_y^2 + \left(\frac{\partial u}{\partial z}\right)^2 \sigma_z^2 + \cdots \tag{5.1}$$

όπου η $u = u(x, y, z, \cdots)$ παριστάνει κάποια παραγόμενη ποσότητα. Η σχέση (5.1) είναι γενικά γνωστή σαν *τύπος μετάδοσης του σφάλματος*. Οι μεταβλητές $x, y, z, \cdots$ πρέπει να είναι ανεξάρτητες ώστε να αποφεύγονται οι αλληλεπιδράσεις των αλληλοσυσχετίσεων. Η χρήση της σχέσης (5.1) μπορεί να δειχθεί σε μερικές απλές περιπτώσεις.

1. Άθροισμα και διαφορά πειραματικών ποσοτήτων.

Αν ορίσουμε:

$$u = x + y \qquad ή \qquad u = x - y$$

τότε:

$$\frac{\partial u}{\partial x} = 1 \qquad \text{και} \qquad \frac{\partial u}{\partial y} = \pm 1$$

Εφαρμόζοντας την σχέση (5.1):

$$\sigma_u^2 = (1)^2 \sigma_x^2 + (\pm 1)^2 \sigma_y^2 \qquad ή$$

$$\sigma_u = \sqrt{\sigma_x^2 + \sigma_y^2} \tag{5.2}$$

Έτσι, στην περίπτωση αθροίσματος ή διαφοράς πειραματικών ποσοτήτων *τα σφάλματα στο x και στο y αθροίζονται τετραγωνικά για να δώσουν το τετράγωνο του σφάλματος της u.*

2. Πολλαπλασιασμός ή διαίρεση με μιά σταθερά.

Αν ορίσουμε:

$$u = Ax \qquad ή \qquad u = \frac{x}{B}$$

όπου A και B σταθερές (δεν έχουν σφάλμα) τότε:

$$\frac{\partial u}{\partial x} = A \qquad \text{και} \qquad \frac{\partial u}{\partial x} = \frac{1}{B}$$

Και η εφαρμογή της σχέσης (5.1) δίνει:

$$\sigma_u = A\sigma_x \qquad ή \qquad \sigma_u = \frac{1}{B}\sigma_x \tag{5.3}$$

δηλαδή, *το τελικό σχετικό σφάλμα* (σ_u / u) *είναι το ίδιο με το σχετικό σφάλμα της πειραματικής ποσότητας* (σ_x / x).

3. Πολλαπλασιασμός ή διαίρεση πειραματικών ποσοτήτων.

Στην περίπτωση:

$$u = xy$$

$$\frac{\partial u}{\partial x} = y \qquad \text{και} \qquad \frac{\partial u}{\partial y} = x$$

Από την σχέση (5.1) έχουμε:

$$\sigma_u^2 = y^2 \sigma_x^2 + x^2 \sigma_y^y$$

ή διαιρώντας και τα δύο μέλη με $u^2 = x^2 y^2$:

$$\left(\frac{\sigma_u}{u}\right)^2 = \left(\frac{\sigma_x}{x}\right)^2 + \left(\frac{\sigma_y}{y}\right)^2 \tag{5.4}$$

Παρομοίως αν:

$$u = \frac{x}{y}$$

$$\frac{\partial u}{\partial x} = \frac{1}{y} \qquad \text{και} \qquad \frac{\partial u}{\partial y} = -\frac{x}{y^2}$$

$$\sigma_u^2 = \left(\frac{1}{y}\right)^2 \sigma_x^2 + \left(-\frac{x}{y^2}\right)^2 \sigma_y^2$$

ή διαιρώντας και τα δύο μέλη με $u^2 = x^2 / y^2$:

$$\left(\frac{\sigma_u}{u}\right)^2 = \left(\frac{\sigma_x}{x}\right)^2 + \left(\frac{\sigma_y}{y}\right)^2 \tag{5.5}$$

Έτσι, στην περίπτωση του πολλαπλασιασμού ή της διαίρεσης πειραματικών ποσοτήτων *τα σχετικά σφάλματα στο x και στο y αθροίζονται τετραγωνικά για να δώσουν το τετράγωνο του σχετικού σφάλματος της u.*

4. Μέση τιμή ενός συνόλου ανεξάρτητων μετρήσεων.

Η μέση τιμή ενός συνόλου N ανεξάρτητων μετρήσεων δίνεται από την σχέση:

$$\bar{x} = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} x_i$$

Εφαρμόζοντας τα αποτελέσματα των περιπτώσεων 1 και 2 προκύπτει:

$$\sigma_{\bar{x}} = \frac{1}{N}\sqrt{\sum_{i=1}^{N}\sigma_{x_i}^2} \tag{5.6}$$

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 6
ΠΡΟΣΑΡΜΟΓΗ (FITTING) ΚΑΜΠΥΛΩΝ

Σε πολλά πειράματα ερευνάται η σχέση μεταξύ δύο ή περισσότερων μεταβλητών που περιγράφουν μιά φυσική ποσότητα, $y = f(x_1, x_2, \cdots)$, μετρώντας την τιμή του y για διαφορετικές τιμές των $x_1, x_2, \cdots$. Στην συνέχεια απαιτείται να βρεθούν οι παράμετροι της θεωρητικής καμπύλης που περιγράφουν καλύτερα τα πειραματικά σημεία. Για παράδειγμα, για να μετρηθεί ο χρόνος ημισείας ζωής ενός ραδιενεργού μετριέται ο αριθμός των γεγονότων $N_1, N_2, \cdots N_\nu$ σε διάφορους χρόνους $t_1, t_2, \cdots t_\nu$. Η σχέση μεταξύ του αριθμού των γεγονότων και του χρόνου είναι:

$$N(t) = N_0 \exp\left(-\frac{\ln 2t}{T_{1/2}}\right)$$

Επειδή ο αριθμός των γεγονότων υπόκειται σε στατιστικές διακυμάνσεις, οι τιμές των N_i θα έχουν κάποιο σφάλμα σ_i. Αυτό θα έχει σαν αποτέλεσμα όλα τα σημεία να μην κείνται επάνω σε μιά ομαλή καμπύλη. Ποιά είναι η καλύτερη καμπύλη, ή ισοδύναμα οι καλύτερες τιμές των $T_{1/2}$ και N_0 και πως θα προσδιοριστούν αυτές; Η πιό χρήσιμη μέθοδος για να γίνει αυτό είναι η μέθοδος των *ελαχίστων τετραγώνων*.

I. Η ΜΕΘΟΔΟΣ ΤΩΝ ΕΛΑΧΙΣΤΩΝ ΤΕΤΡΑΓΩΝΩΝ

Ας υποθέσουμε ότι έχουμε ένα σύνολο n πειραματικών σημείων (x_i, y_i) και ότι το σφάλμα σε κάθε y_i είναι σ_i. Έστω επίσης ότι το y εξαρτάται από το x σύμφωνα με την σχέση:

$$y_i = f(x_i\,; a_1, a_2, \cdots, a_m)$$

όπου $a_1, a_2, \cdots a_m$ είναι άγνωστες παράμετροι που πρέπει να προσδιοριστούν έτσι ώστε η f να περιγράφει καλύτερα τα πειραματικά μας σημεία. Φυσικά, ***ο αριθμός των πειραματικών σημείων θα πρέπει να είναι μεγαλύτερος από τον αριθμό των παρα-***

μέτρων αυτών. Η μέθοδος των ελαχίστων τετραγώνων λέει ότι οι καλύτερες τιμές των a_i είναι εκείνες για τις οποίες το άθροισμα:

$$S = \sum_{i=1}^{N} \left(\frac{y_i - f(x_i\,;a_j)}{\sigma_i} \right)^2 \tag{6.1}$$

γίνεται ελάχιστο. Εξετάζοντας την σχέση (6.1) μπορούμε να διαπιστώσουμε ότι είναι το άθροισμα των τετραγωνικών αποκλίσεων των πειραματικών σημείων από την $f(x)$ με βάρος το αντίστοιχο σφάλμα της κάθε τιμής του y_i. Ο αναγνώστης μπορεί να αναγνωρίσει την σχέση αυτή σαν την έκφραση του χ^2, σχέση (3.15). Για τον λόγο αυτό, η μέθοδος αναφέρεται μερικές φορές σαν *ελαχιστοποίηση του* χ^2. Μιλώντας αυστηρά, για να είναι το S ίδιο με το χ^2 θα πρέπει τα y_i να έχουν κατανομή Gauss με μέση τιμή $f(x_i, a_i)$ και διακύμανση σ_i^2. Όμως, αυτό ισχύει σχεδόν πάντα στις μετρήσεις της Φυσικής και τις περισσότερες φορές αυτό είναι σωστό. Η μέθοδος των ελαχίστων τετραγώνων είναι γενική και δεν απαιτεί την γνώση της κατανομής. Αν η κατανομή είναι γνωστή, τότε μπορεί να εφαρμοστεί η μέθοδος της μέγιστης πιθανότητας. Για την περίπτωση της κατανομής Gauss και οι δύο μέθοδοι δίνουν ακριβώς τα ίδια αποτελέσματα.

Για να βρούμε τις τιμές των a_i πρέπει να λύσουμε το σύστημα των εξισώσεων:

$$\frac{\partial S}{\partial a_j} = 0 \tag{6.2}$$

Ανάλογα με την μορφή της $f(x)$, το σύστημα των εξισώσεων (6.2) μπορεί να έχει ή να μην έχει αναλυτική λύση. Γενικά, για να ελαχιστοποιηθεί η S πρέπει να χρησιμοποιηθούν αριθμητικές μέθοδοι και υπολογιστής.

Θεωρώντας ότι έχουμε τις καλύτερες τιμές των a_i, είναι αναγκαίο να εκτιμήσουμε τα σφάλματα αυτών των παραμέτρων. Για τον λόγο αυτό πρέπει να σχηματίσουμε έναν πίνακα V_{ij} που ονομάζεται *covariance* ή *error matrix*.

$$(V^{-1})_{ij} = \frac{1}{2} \frac{\partial^2 S}{\partial a_i \, \partial a_j} \tag{6.3}$$

όπου οι δεύτερες παράγωγοι υπολογίζονται στο ελάχιστο (οι δεύτερες παράγωγοι σχηματίζουν τον αντίστροφο πίνακα του error matrix). Τα διαγώνια στοιχεία του V_{ij} μπορεί να αποδειχθεί ότι είναι τα σφάλματα των a_i, ενώ τα μη διαγώνια στοιχεία παριστάνουν την συσχέτιση (covariance) μεταξύ των a_i και a_j. Έτσι:

$$V = \begin{pmatrix} \sigma_1^2 & \mathrm{cov}(1,2) & \mathrm{cov}(1,3) & \cdots \\ . & \sigma_2^2 & \mathrm{cov}(2,3) & \cdots \\ . & . & \sigma_3^2 & \cdots \\ . & . & . & \cdots \end{pmatrix} \tag{6.4}$$

ΙΙ. ΤΑ ΓΡΑΜΜΙΚΑ FITS. Η ΕΥΘΕΙΑ ΓΡΑΜΜΗ

Στην περίπτωση συναρτήσεων γραμμικών ως προς τα a_i, δηλαδή όταν δεν υπάρχουν όροι που είναι γινόμενα ή πηλίκα διαφόρων a_i, το σύστημα των εξισώσεων (6.2) μπορεί να λυθεί αναλυτικά. Έστω η περίπτωση μιάς ευθείας γραμμής:

$$y = f(x) = \alpha + \beta x$$

όπου α και β είναι οι παράμετροι που πρέπει να προσδιοριστούν. Σχηματίζοντας την S βρίσκουμε:

$$S = \sum \frac{(y_i - \alpha - \beta x_i)^2}{\sigma_i^2} \tag{6.5}$$

Λαμβάνοντας τις μερικές παραγώγους ως προς α και β προκύπτουν οι εξισώσεις:

$$\frac{\partial S}{\partial \alpha} = 2\sum \frac{(y_i - \alpha - \beta x_i)}{\sigma_i^2} = 0 \tag{6.6}$$

$$\frac{\partial S}{\partial \beta} = 2\sum \frac{(y_i - \alpha - \beta x_i)}{\sigma_i^2} = 0 \tag{6.7}$$

Για απλοποίηση ορίζουμε τα παρακάτω:

$$A = \sum \frac{x_i}{\sigma_i^2} \qquad B = \sum \frac{1}{\sigma_i^2}$$

$$C = \sum \frac{y_i}{\sigma_i^2} \qquad D = \sum \frac{x_i^2}{\sigma_i^2}$$

$$E = \sum \frac{x_i y_i}{\sigma_i^2} \qquad F = \sum \frac{y_i^2}{\sigma_i^2}$$

Χρησιμοποιώντας τους παραπάνω ορισμούς, οι σχέσεις (6.6) και (6.7) γίνονται:

$$\begin{aligned} 2(-C + \alpha A + \beta B) &= 0 \\ 2(-E + \alpha D + \beta A) &= 0 \end{aligned} \tag{6.8}$$

Η λύση του συστήματος είναι:

$$\alpha = \frac{DC - EA}{DB - A^2} \qquad \beta = \frac{EB - CA}{DB - A^2} \tag{6.9}$$

Όμως, δεν έχουμε τελειώσει. Πρέπει να υπολογίσουμε τα σφάλματα στα α και β. Σχηματίζοντας τον αντίστροφο πίνακα του error matrix έχουμε:

$$V^{-1} = \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{pmatrix} \tag{6.10}$$

όπου:

$$A_{11} = \frac{1}{2}\frac{\partial^2 S}{\partial \alpha^2} \qquad A_{22} = \frac{1}{2}\frac{\partial^2 S}{\partial \beta^2} \qquad A_{12} = A_{21} = \frac{1}{2}\frac{\partial^2 S}{\partial \alpha \partial \beta}$$

Αντιστρέφοντας τον πίνακα της σχέσης (6.10):

$$V = \frac{1}{A_{11}A_{22} - A_{12}^2}\begin{pmatrix} A_{22} & -A_{12} \\ -A_{12} & A_{11} \end{pmatrix} \tag{6.11}$$

με αποτέλεσμα:

$$\sigma_\alpha^2 = \frac{A_{11}}{A_{11}A_{22} - A_{12}^2} = \frac{D}{DB - A^2}$$

$$\sigma_\beta^2 = \frac{A_{22}}{A_{11}A_{22} - A_{12}^2} = \frac{B}{DB - A^2} \tag{6.12}$$

$$\mathrm{cov}(\alpha,\beta) = \frac{-A_{12}}{A_{11}A_{22} - A_{12}^2} = \frac{-A}{DB - A^2}$$

Για να τελειώσει η διαδικασία είναι απαραίτητο να έχουμε μιά ιδέα για την ποιότητα του fit. Αντιστοιχούν τα δεδομένα στην συνάρτηση $f(x)$ που έχουμε υποθέσει; Αυτό μπορεί να ελεγχθεί μέσω του χ^2. Αυτό είναι η τιμή της S στο ελάχιστο. Επιστρέφοντας στην κατανομή του χ^2 είχαμε δει ότι αν τα δεδομένα αντιστοιχούν στην συνάρτηση και οι αποκλίσεις έχουν κατανομή Gauss, η S πρέπει να ακολουθεί την κατανομή του χ^2. Στο παραπάνω πρόβλημα είχαμε n πειραματικά σημεία από τα οποία εξήχθησαν m παράμετροι. Έτσι, οι βαθμοί ελευθερίας είναι $\nu = n - m$. Στην περίπτωση της ευθείας γραμμής $m = 2$ και $\nu = n - 2$. Έτσι, αναμένουμε η τιμή της S να είναι κοντά στο $\nu = n - 2$ για ένα καλό fit. Αν υπολογίσουμε το χ^2 ανά βαθμό ελευθερίας:

$$\frac{\chi^2}{\nu} = \frac{S}{\nu} \tag{6.13}$$

αυτό πρέπει να είναι κοντά στην μονάδα για ένα καλό fit.

Ένας πιό αυστηρός έλεγχος είναι να βρούμε την πιθανότητα να λάβουμε τιμή του χ^2 μεγαλύτερη από την S, δηλαδή $P(\chi^2 \geq S)$. Αυτό απαιτεί την ολοκλήρωση της κατανομής του χ^2 ή την χρήση κατάλληλων πινάκων. Γενικά, αν η $P(\chi^2 \geq S)$ είναι μεγαλύτερη από 5% το fit μπορεί να γίνει αποδεκτό. Πέρα από το σημείο αυτό πρέπει να απαντηθούν κάποιες ερωτήσεις.

Ένα εξ ίσου σημαντικό σημείο που πρέπει να δούμε είναι η περίπτωση του πολύ μικρού S. Αυτό σημαίνει ότι τα πειραματικά σημεία δεν έχουν ικανοποιητική διασπορά. Αποκλείοντας παραποιημένα δεδομένα, η πιό πιθανή αιτία είναι η υπερεκτίμηση των σφαλμάτων των πειραματικών σημείων. Σε ένα αποδεκτό fit, λαμβάνοντας υπ' όψη το σφάλμα, πρέπει περίπου το 1/3 των πειραματικών σημείων να είναι εκτός της καλύτερης καμπύλης.

Α. Το γραμμικό fit όταν και οι δύο μεταβλητές έχουν σφάλμα

Στα προηγούμενα θεωρήσαμε ότι οι ανεξάρτητες μεταβλητές x_i είναι πλήρως απαλλαγμένες από σφάλματα. Μιλώντας αυστηρά, αυτό δεν συμβαίνει ποτέ, αν και σε πολλές περιπτώσεις τα σφάλματα των x_i είναι μικρά σε σχέση με τα αντίστοιχα σφάλματα των y_i, ώστε να μπορούν να θεωρηθούν αμελητέα. Όμως, στις περιπτώσεις όπου και τα δύο σφάλματα είναι συγκρίσιμα, αγνοώντας το σφάλμα στα x_i οδηγούμαστε σε μη σωστές παραμέτρους και σε υποεκτίμηση του σφάλματός τους. Στην περίπτωση αυτή, το σφάλμα σ_i της σχέσης (6.1) αντικαθίσταται με:

$$\sigma_i^2 = \sigma_y^2 + \left(\frac{\partial f}{\partial x}\right)^2 \sigma_x^2 \tag{6.14}$$

όπου σ_x και σ_y είναι τα σφάλματα των x και y αντίστοιχα. Επειδή η παράγωγος είναι συνήθως συνάρτηση των a_i, η S είναι μη γραμμική και πρέπει να χρησιμοποιηθούν αριθμητικές μέθοδοι για την ελαχιστοποίηση της S.