补充材料 1　　实验数据的处理（上接教材第二章，p.19）

注意：（1）用最小二乘法计算斜率k 和截距b时，不宜用有效数字的运算法则计算中间过程，否则会有较大的计算误差引入。提倡用计算器计算，将所显示的数值均记录下来为佳。（2）如果y和x的相关性好，可以粗略考虑b的有效位数的最后一位与y的有效数字最后一位对齐，k的有效数字与y_n-y_1和x_n-x_1中有效位数较少的相同。（3）确定有效位数的可靠方法是计算k和b的不确定度。

直线拟合的不确定度估算：（以 $y = kx + b$ 为例）

斜率 k 和截距 b 是间接测量物理量，分别令测量数据的 A 类和 B 类不确定度分量中的一个分量为零，而求得另一个分量比较简单，最后将两个分量按直接测量的合成方法求出合成不确定度，这种方法被称为等效法。

可以证明，在假设只有y_i存在明显随机误差的条件下，k 和b的“等效”A类不确定度分别为：

$$S_k = \frac{S_y}{\sqrt{\sum x_i^2 - \frac{(\sum x_i)^2}{n}}}$$

$$S_b = S_k\sqrt{\frac{\sum x_i^2}{n}} = S_y\sqrt{\frac{\sum x_i^2}{n\sum x_i^2 - (\sum x_i)^2}}$$

式中，S_y是测量值y_i的标准偏差，即

$$S_y = \sqrt{\frac{\sum v_i^2}{n-2}} = \sqrt{\frac{\sum (y_i - kx_i - b)^2}{n-2}}$$

根据上述公式即可算出各个系数（斜率 k 和截距 b）的 A 类不确定度值，初看上去计算似乎很麻烦，但是利用所列的数据表格，由表中求出的那些累加值Σ即可很容易算得。

最小二乘法应用举例

应用最小二乘法处理物理量的测量数据是相当繁琐的工作，容易出现差错。因此，工作时要十分细心和谨慎。为便于核对，常将各数据及计算结果首先表格化。

例1.　　已知某铜棒的电阻与温度关系为：$R_t = R_0 + \alpha \cdot t$。实验测得 7 组数据（见表 1）如下：试用最小二乘法求出参量R_0、α 以及确定它们的误差。

表 1

t / ℃	19.1	25.1	30.1	36.0	40.0	45.1	50.1
R_t / Ω	76.30	77.80	79.75	80.80	82.35	83.90	85.10

此例中只有两个待定的参量R_0和α，为得到它们的最佳系数，所需要的数据有

n, $\sum x_i$，$\sum y_i$，$\sum x_i^2$，$\sum y_i^2$ 和 $\sum x_i y_i$ 六个累加数，为此在没有常用的科学型计算器时，通过列表计算的方式来进行，这对提高计算速度将会有极大的帮助(参见表 2)，并使工作有条理与不易出错。其中表内双线右边的计算是为了确定R_0和α的误差项用的。

表 2

i	t / ℃ (x_i)	R_t / Ω (y_i)	$t\times t$ (x_i^2)	$R_t\times R_t$ (y_i^2)	$t\times R_t$ ($x_i y_i$)	$R_{计算}$ / Ω	υ_i / Ω	$\upsilon_i^2\times 10^{-4}$
1	19.1	76.30	364.8	5821.7	1457.3	76.26	+0.04	16
2	25.1	77.80	630.0	6052.8	1952.8	77.99	-0.19	361
3	30.1	79.75	906.0	6360.1	2400.5	79.43	+0.32	1024
4	36.0	80.80	1296.0	6528.6	2908.8	81.13	-0.33	1089
5	40.0	82.35	1600.0	6781.5	3294.0	82.28	+0.07	49
6	45.1	83.90	2034.0	7039.2	3783.9	83.75	+0.15	225
7	50.1	85.10	2510.0	7242.0	4263.5	85.19	-0.09	81
$n=$	$\sum x_i=$	$\sum y_i=$	$\sum x_i^2=$	$\sum y_i^2=$	$\sum x_i y_i=$			$\sum v_i^2=$
7	245.5	566.00	9340.8	45826	20060.8			2845×10^{-4}

根据表 2 中所求得的数据，代入公式（12）（**参见教材第二章，p.19**）则可得：

$$\alpha = k = \frac{7\times 20060.8 - 245.5\times 566.00}{7\times 9340.8-(245.5)^2} = \frac{1472.6}{5115.35} = 0.28788\Omega/{}^0C$$

$$R_0 = b = \frac{566.00}{7} - 0.28788\cdot\frac{245.5}{7} = 70.76078\Omega$$

把测量数据代入式（13）和（15）（**参见教材第二章，p.19**）中可求出相关系数

$$\gamma = \frac{\sum x_i y_i - \frac{1}{n}\sum x_i \sum y_i}{\sqrt{[\sum x_i^2 - \frac{1}{n}(\sum x_i)^2]\cdot[\sum y_i^2-\frac{1}{n}(\sum y_i)^2]}} = \frac{20060.8-\frac{245.5\times 566.00}{7}}{\sqrt{[9340.8-\frac{(245.5)^2}{7}]\times[(45826-\frac{(566.00)^2}{7})]}}$$

$$= k\times\sqrt{\frac{\sum x_i^2-\frac{1}{n}(\sum x_i)^2}{\sum y_i^2-\frac{1}{n}(\sum y_i)^2}} = 0.28788\times\sqrt{\frac{9340.8-\frac{(245.5)^2}{7}}{45826-\frac{(566.00)^2}{7}}} = 0.99757$$

说明：电阻R_t与温度t的线性关系良好，所以取R_0的有效数字与R对齐，即R_0＝70.76Ω；又因为t_7－t_1 = 31.0 ℃，R_7－R_1 = 8.80Ω，取k有效数字为以上两个差值中较少的位数 3 位，则k = 0.288Ω/°C。由此可以得到电阻与温度的相关关系为：

$$R_t = (70.76+0.288t)\Omega$$

计算k 和b的不确定度：测量仪器为不连续读数装置，仪器误差$\Delta_R = 0.01\Omega$，$\Delta_t = 0.1$°C，按补充资料中的公式计算，可得

$$S_y = S_{R_t} = \sqrt{\frac{\sum v_i^2}{n-2}} = \sqrt{\frac{2845\times10^{-4}}{7-2}} = 0.23854(\Omega)$$

$$S_k = S_\alpha = \frac{S_y}{\sqrt{\sum x_i^2 - \frac{(\sum x_i)^2}{n}}} = \frac{0.239}{\sqrt{9340.8 - \frac{(245.5)^2}{7}}} = 0.239\times0.03699 = 0.008841(\Omega/{}^0C)$$

$$u_k = u_\alpha = \frac{1}{\sqrt{3}\cdot\bar{x}}\sqrt{k^2\cdot\Delta_t^2 + \Delta_R^2} = \frac{\sqrt{(0.28788)^2\times0.1^2 + 0.01^2}}{\sqrt{3}\cdot(\frac{245.5}{7})} = 0.000502(\Omega/{}^0C)$$

$$u(\alpha) = \sqrt{S_\alpha^2 + u_\alpha^2} = \sqrt{0.00884^2 + 0.000502^2} = 0.008854\Omega/{}^0C = 0.009(\Omega/{}^0C)$$

$$S_b = S_{R_0} = S_k\sqrt{\frac{\sum x_i^2}{n}} = 0.00884\times\sqrt{\frac{9340.8}{7}} = 0.32292(\Omega)$$

$$u_b = u_{R_0} = \frac{1}{\sqrt{3}}\sqrt{k^2\cdot\Delta_t^2 + \Delta_R^2} = \sqrt{\frac{(0.28788)^2\times0.1^2 + 0.01^2}{3}} = 0.01759(\Omega)$$

$$u(R_0) = \sqrt{S_{R_0}^2 + u_{R_0}^2} = \sqrt{0.323^2 + 0.0176^2} = 0.324\Omega = 0.33(\Omega)$$

故 $R_0 = (70.76\pm0.33)\Omega = (70.8\pm0.4)\Omega$，

$$\alpha = (0.2879\pm0.009)\Omega/{}^0C = (0.288\pm0.009)\Omega/{}^0C$$

则 $R_t = (70.8 + 0.288t)\Omega$

验证及比较最后的计算结果：

利用计算机软件（Origin 7.5）对上述实验数据进行线性拟合，发现：其斜率、截距及其标准偏差，以及测量值y_i的标准偏差与直接用所述公式进行计算的结果是完全一致的（仅讨论A类不确定度，而B类不确定度未考虑）。