بسم الله الرحمن الرحیم

مقدمه‌ای بر اصول اولیه‌ی محاسبه خطا و اندازه‌گیری

گردآورنده و نویسنده: علی معتضدی فرد

اردیبهشت ۱۳۹۴

پیش گفتار

دقت و خطای اندازه‌گیری در علوم مختلف از اهمیت بالایی برخوردار هستند. متاسفانه در نظام آموزش و پرورش از پرداختن به این موضوع غفلت شده است و دانش آموزان احساس درستی از اندازه‌گیری کمیت های مختلف، دقت آن و ارقام با معنی در اندازه‌گیری ندارند. از این روی، اینجانب به نمایندگی از شاخه دانشجویی انجمن فیزیک ایران قصد دارم به طور خلاصه مفاهیمی اولیه را در این باب بیان نمایم.

بخشی از مطالب از مراجع دیگری گردآوری شده اند که برای مطالعه بیشتر در انتها ذکر شده است و برخی دیگر حاصل تجربیات شخصیِ اینجانب در زمینه فعالیت های تئوری، تجربی و شبیه سازی است. شایسته است که از تمام اساتیدی که در دوران تحصیلم آموزش‌های مناسبی در این زمینه فراهم کردند کمال قدردانی خود را ابراز نمایم بخصوص آقایان دکتر مسعود علیمحمدی، دکتر محمد تقی توسلی، دکتر رسول رکنی زاده، دکتر محمد حسین نادری و دوست و همکار عزیزم نوید فرحی.

از دوستان عزیزم در انجمن فیزیک ایران آقایان علیرضا دخیلی، محمدعلی ورشابی، مهدی فقیه نصیری و خانم‌ها سمانه کیائی و نرگس چینی‌چیان که برای تهییه این گزارش به اینجانب کمک فراوانی کردند صمیمانه سپاسگزارم. همچنین شایسته است از آقایان عباس علیزاده، عرفان حسنی و احسان ایرانی که در گذشته کارگاهی در این زمینه را در گردهمایی دانش آموزی برگزار کرده بودند به خاطر توجه به این مهم قدردانی نمایم.

امیدوارم مطالب پیش روی برای دانش آموزان عزیز، دبیران محترم و غیره مفید واقع شود. منتظر دیدن نظرات و پیشنهادات شما عزیزان به ایمیل alimotazedifard@ut.ac.ir ، psi.studentbranch@gmail.com و یا ایمیل info@psi.ir هستیم.

علی معتضدی فرد

۱۳۹۴/۰۲/۲۰

مقدمه

فیزیک علمی است که با اعداد و ارقامِ با معنی سر و کار دارد بنابراین دقت در اندازه‌گیری، خطای کمیت های اندازه‌گیری شده و تعداد ارقام با معنی در یک اندازه‌گیری دارای اهمیت زیادی هستند. هیچ گاه نمی‌توان ادعا کرد که کمیت اندازه‌گیری شده بدون هیچ خطایی اندازه‌گیری شده است زیرا عواملی زیادی در ایجاد خطا موثر اند برای مثال خطای خود آزمایشگر، خطای وسایل اندازه‌گیری به دلیل عدم کالیبره بودن و یا خطای ناشی از دقت و یا محدودیت وسیله اندازه‌گیری.

نکته دیگری که خواننده را به تأمل به آن رهنمون می‌نماییم آن است که بشر جز شمارش آن هم شمارش اعداد طبیعی قادر به کار دیگری نیست! در واقع تمام وسایل اندازه‌گیری هم بر اساس شمارش یکسری اعداد طبیعی کار می‌کنند که پرداختن به این موضوع مجال مفصلی می‌طلبد. برای مثال هنگامیکه جریان الکتریکی را بوسیله آمپرمتر اندازه‌گیری می‌کنیم اگر چه عددی که می‌خوانیم یک عدد طبیعی نیست ولی چیزی که ما اندازه‌گیری کردیم تعداد الکترون‌هایی است که در واحد زمان عبور کرده است.

در انجام یک آزمایش تجربی و یا برآورد عددی بصورت تئوری، لازم است خطای کمیت مورد نظر را گزارش کنیم. با پیشرفت علم و تکنولوژی در کنار پیشرفت نظریه های فیزیکی بخش وسیعی از فیزیک پیشه‌گان سعی دارند که کمیت های مختلف فیزیکی را با دقت بیشتری اندازه‌گیری کنند و یا دستگاه‌هایی با دقت بیشتر برای اندازه‌گیری های مختلف و یا روش هایی با دقت بیشتر برای اندازه‌گیری ارائه دهند. شاید این سوال پیش آید که اهمیت اندازه‌گیری دقیق برای یک کمیت چیست ؟ برای روشن شدن این موضوع مثالی می‌زنیم . برای مثال ضریب شکست مایعات و یا جامدات مانند شیشه و آب را در نظر بگیرید، دمای محیط می‌تواند رقم سوم و یا چهارم ضریب شکت را تغییر دهد بنابراین اگر در محیطی تغییر دما داریم لازم است ضریب شکست تا ۴ رقم بعد از اعشار و یا ۵ رقم گزارش شود در غیر این صورت اثر تغییرات دمایی در عدد گزارش شده در دماهای مختلف آشکار نمی‌شود و ممکن است شما به اشتباه فرض کنید که با تغییر دما ضریب شکست ثابت بوده و این دحالی است که با تغییرات دما، ضریب شکست به طور جزئی تغییر خواهد کرد.

حال با روشن شدن اهمیت خطا و دقت اندازه گیری در ادامه به بیان روش های اندازه گیری خطا و منابع ایجاد خطا می‌پردازیم.

خطای نسبی و مطلق

باید توجه داشت که مقدار واقعی هیچ کمیتی به طور دقیق معلوم نمی‌باشد؛ منظور از مقدار واقعی یک کمیت، مقداری است که از دقیق‌ترین آزمایش انجام شده برای اندازه‌گیری آن کمیت تا کنون گزارش شده است و یا مقدار تئوری ای که برای یک کمیت در نظر میگیریم.

منظور از خطای مطلق؛ قدر مطلقِ اختلاف میان مقدار اندازه‌گیری شده در آزمایش و یا مقدار بدست آمده ناشی از محاسبه با مقدار واقعیِ آن کمیت است که دارای بُعد است. منظور از خطای نسبی حاصل تقسیم خطای مطلق بر مقدار واقعی کمیت است که معمولا بر حسب درصد نیز می‌توان بیان کرد و بدون بُعد است.

$$\text{درصدخطای نسبی} = \frac{\left|\text{نتیجه آزمایش} - \text{مقدارواقعی}\right|}{\text{مقدارواقعی}} \times 100$$

برای مثال ضریب شکست نوع خاصی از شیشه در طول موج خاصی ۱.۴۵۷۳ ±۰.۰۰۰۷ است، و ما در آزمایشی با کمک منشور ضریب شکست را ۱.۴۶ ± ۰.۰۵ بدست می آوریم؛ بنابراین خطای مطلق برابر است با ۰.۰۲۷ است. و درصد خطای نسبی این اندازه‌گیری تقریبا برابر ی با ٪ ۵ ۰.۱۸ است. خطاها معمولا به دو دسته تقسیم میشوند:

۱- خطای تصادفی (کاتوره‌ای)

۲- خطای سیستماتیک(ذاتی)

طبق تعریف خطاهای کاتوره ای خطاهایی هستند که احتمال مثبت یا منفی بودن آنها مساوی است پس معقول به نظر می رسد که میانگین این اعداد تقریب خوبی از مقدار واقعی کمیت باشد و هر چه تعداد اندازه گیری ها افزایش پیدا کند به مقدار واقعی نزدیک تر شود. اگر خطاهای موجود در اندازه‌گیری فقط از نوع خطاهای کاتور ای باشند نتایج اندازه‌گیری های متوالی در اطراف مقدار حقیقی کمیت مورد نظر گسترده می شوند. همانطور که گفته شد در حضور خطاهای کاتوره‌ای به تنهایی نقطه میانگین اعداد به دست آمده تقریب خوبی از مقدار حقیقی کمیت مورد نظر می باشد.

اثر خطاهای سیستماتیک موجود، این است که یک جابجایی از مقدار واقعی در میانگین اعداد به وجود می آورد. تشخیص و رفع خطاهای سیستماتیک در حالت کلی کار نسبتا مشکلی است و معمولا وقتی یک کمیت از طریق آزمایش های مختلف به دست می آید قابل تشخیص است اما کار با خطاهای کاتوره‌ای و تشخیص درست کمیت نسبتا ساده است چون اگر در آزمایشی خطاهای کاتوره ای بزرگی وجود داشته باشند، به صورت یک مقدار بزرگ در خطای نهایی آشکار خواهند شد ولی حضور ناپیدای یک خطای سیستماتیک ممکن است به ارائه یک نتیجه ظاهرا معتبر همراه با یک خطای تخمینی کوچک منجر شود که در واقع اشتباهی جدی است. در واقع خطاهای سیستماتیک را باید یکی یکی کشف و حذف کرد .این کار قاعده کلی ندارد و با تجربه زیاد به دست می آید.

برای گزارش یک خطا با ید به هر دوی این خطاها دقت کرد و خطایی که مقدار بیشتری دارد را در نظر گرفت . به عبارت دیگر، اگر خطای تصادفی از خطای دستگاه کمتر بود خطای اندازه‌گیری، همان خطای دستگاه اندازه گیری است .در غیر این صورت خطای اندازه‌گیری برابر با خطای تصادفی خواهد بود.

خطای تصادفی

اصولا تمام عوامل موجود که تاثیر آنها مستقل از کمیات موجود در آزمایش است می توانند تولید خطای کاتوره ای کنند .به همین علت پراکندگی در غیاب خطاهای سیستماتیک حول مقدار واقعی نسبتا یکنواخت است یا به عبارتی دیگر احتمال مثبت یا منفی بودن این خطا یکی است تغییرات دما، رطوبت، جریانات جوی، تغییرات جریانات برق، خود شخص اندازه گیر می توانند عامل تولید خطای کاتوره‌ای باشند. فرض کنید زمان تناوب یک آونگ را چندین بار با یک کرنومتر اندازه گرفته ایم .خطاهای حاصل در به کار انداختن کرنومتر و توقف آن و بی نظمی های کوچک در حرکت آونگ تغییراتی در نتایج اندازه گیری متوالی به وجود می آورند که می توان آنها را به عنوان خطاهای کاتوره ای در نظر گرفت.

خطای سیستماتیک یا ذاتی

خطاهای سیستماتیک معمولا موقعی پیش می آیند که واقعیت آزمایش از مفروضات نظری تعدی می کند و از ضریب تصحیحی که این تفاوت را اعمال کند چشم پوشی می شود. به مثال‌های زیر توجه کنید:

خطای صفر یا معیوب بودن وسیله اندازه گیری و یا خطای کالیبراسیون: کرنومتری که کمی کند کار می کند، ولت سنجی که محور عقربه آن دقیقا در مرکز صفحه مدرجش نباشد. در چنین مواردی ابتدا باید مقدار خطای صفر را یافت و سپس دستگاه را کالیبره کرد. اندازه گیری شتاب جاذبه زمین به وسیله یک سطح شیب دار که دارای اصطکاک می باشد ولی وجود آن فرض نشده باشد .

دقت و خطای وسیله اندازه‌گیری

وسایل اندازه‌گیری که بصورت مدرج و یا آنالوگ هستند دقت اندازه‌گیری در آنها برابر با کمترین درجه بندی آن است ولی قرار داد می‌کنیم که خطای اندازه‌گیری نصف کمترین درجه بندی است. اگر از یک آوومتر مدرج استفاده می‌کنید که کمترین درجه بندی آن ۱ میلی آمپر را نشان می‌دهد دقت آن نیز ۱ میلی آمپر ولی خطای آن ۰.۵ میلی آمپر است. برای مثال اگر دستگاه عدد ۱۴ میلی آمپر را نشان می‌دهد در هنگام گزارش کردن باید چنین نوشت: ۰.۵±۱۴ میلی آمپر.

در وسایلی که دیجیتال هستند خطای اندازه‌گیری کوچکترین رقم با معنی است که دستگاه نشان می‌دهد. برای مثال اگر ولتمتر دیجیتال عدد ۱۲.۲۰ میلی آمپر را نشان می‌دهد خطای آن ۰.۰۱ میلی آمپر است. توجه کنید که عدد صفر در اینجا یک رقم بامعنی است برای مثال اگر دستگاه عدد ۱۲.۲ را قرائت کند اگر چه مقدار عددی اش با مورد اخیر یکسان است ولی خطای آن ۰.۱ میلی آمپر است یعنی دستگاه اول یک مرتبه بزرگی از دستگاه دوم دقیق تر است. بنابراین مورد اول را ۱۲.۲۰±۰.۰۱ میلی آمپر و مورد دوم را ۱۲.۲ ±۰.۱ میلی آمپر گزارش می‌نماییم.

میانگین، انحراف معیار و پراکندگی میانگین

اگر آزمایشی تجربی برای اندازه‌گیری کمیت دلخواه x ترتیب داده‌اید و تعداد N بار آزمایش را تکرار کرده اید و یا به طریق شبیه سازی کمیت مورد نظر را بارها اندازه‌گیری کرده‌اید باید مقدار متوسط و انحراف معیار را در گزارش کمیت مورد نظر بیان کنید. توجه کنید ذکر واحد یا بُعد ضروری است. مقدار متوسط یک کمیت بصورت زیر تعریف می‌شود

$$\overline{x} = \frac{\sum_{i=1}^{N} x_i}{N} \qquad (۱)$$

همچنین انحراف معیار که بیانگر تمرکز داده ها حول مقدار متوسط است بصورت زیر بیان تعریف می‌شود

$$\sigma = \sqrt{\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}(x_i - \overline{x})^2} \qquad (۲)$$

بنابراین کمیت x بصورت $x = \overline{x} \pm \sigma$ گزارش می‌شود.

حال علاوه بر این علاقه مندیم بدانیم که میانگین اعداد هم می‌تواند پراکندگی داشته باشد؟ یعنی چند دسته از اندازه گیریهای متوالی میتوانند میانگین‌هایی که با هم برابر نیستند داشته باشند. انحراف معیار میانگین یا پراکندگی میانگین را با σ_m نشان می‌دهیم. توجه کنید که σپراکندگیِ یک رشته از اعداد است در حالیکه σ_m پراکندگی میانگین‌های رشته‌هایی از اعداد است. یعنی اگر چندین بار آزمایش را برای یکسری رشته های مختلف از اعداد انجام دهید چه مقدار پراکندگی میان میانگین هر یک از این رشته‌ها وجود دارد. اما برای محاسبه لازم به میانگین گیری و محاسبه مجدد نبیست بلکه از رابطه زیر می‌توان پراکندگی میانگین را محاسبه کرد

$$\sigma_m = \frac{\sigma}{\sqrt{N}} \qquad (۳)$$

بنابراین با افزایش تعداد انداگیری‌ها خطای تصادفی ناشی از اندازه‌گیری کاهش می‌یابد البته باید توجه کرد که اگر خطای سیستماتیکی بیشتر از σ است در اینصورت خطای اندازگیری همان خطای دستگاه است نه خطای تصادفی بدست آمده در آزمایش. البته به طور تقریبی نیز می‌توان از رابطه‌ی $\sigma_m = (x_{\max} - x_{\min})/N$ برای پرامندگی میانگین استفاده کرد که $x_{\max,\min}$ بیشترین عدد و کمترین عدد اندازه‌گیری شده است.

خطای شمارش

فرض کنید برای اندازه‌گیری کمیت l لازم است n بار شمارش انجام گیرد و خطای اندازه‌گیری بوسیله دستگاه Δx مشخص گردد در اینصورت $\Delta l = \sqrt{n}\Delta x$. برای مثال در اندازه‌گیری طولی که از طول خط کش بزرگتر است لازم است nبار از خط کش استفاده کنید و خطای دستگاه در یکبار اندازه‌گیری طول Δx است در اینصورت خطای طول اندازه‌گیری شده برابر است با $\Delta l = \sqrt{n}\Delta x$. به عبارت دیگر خطای شمارش برابر است با $\Delta n = \sqrt{n}$. توجه کنید همواره تعداد ارقام بامعنی باید متناظر با خطای گزارش شده باشد . برای مثال $x = 1.457 \pm 0.02$غلط است و باید بصورت $x = 1.45 \pm 0.02$ اصلاح شود.

محاسبه خطای توابع و یا محاسبه خطای تئوری

ممکن است در تحلیل نتایج مجبور شوید از روابط و توابعی استفاده کنید به آنها کمیت های ثانویه می گوییم که مستقیم آن ها را اندازه گیری نکرده‌ایم .را عملی برای اندازه‌گیری خطای این کمیات این است که کمیات ثانویه هر اندازه‌گیری را محاسبه کرده و سپس همان گونه که خطای تصادفی کمیت ها را پیدا می‌کردیم خطای این کمیات را محاسبه کنیم. اشکالی که مطرح است این است که با این کار ما خطای تصادفی این کمیات را محاسبه کرده‌ایم و دقت دستگاه اندازه گیری را در خطای خود در نظر نگرفته ایم. مثلا فرض کنید تمام اندازه گیری‌ها یکسان باشند به طوری که خطای تصادفی صفر شود، اما ما میدانیم این به معنای صفر بودن خطا نیست بلکه خطای کمیت اندازه گیری شده برابر با دقت دستگاه اندازه گیری است . لذا با در نظر گرفتن دقت دستگاه خطای خود را گزارش می دهیم .اما در کمیات ثانویه دقت دستگاه را چگونه باید وارد کرد؟ برای این کار روشی کلی وجود دارد که به اختصار توضیح می‌دهیم.

فرض کنید $y = f(x_i); i = 1,...,N$ است در اینصورت خطای کمیت y بصورت زیر است

$$\Delta y = \sqrt{\sum_{i=1}^{N} \left| (\frac{\partial f}{\partial x_i}) \right|^2 (\Delta x_i)^2} = \sum_{i=1}^{N} |\Delta y_i| \qquad (۴)$$

بنابراین کمیت y بصورت $y = (\overline{y} \pm \Delta y)$ گزارش می‌شود که البته توجه شود که واحد های هر دو یکسان است و باید بعد از پرانتز ذکر شود (طول موج لیزر هلیوم نئون که رنگ آن قرمز است در یک آزمایش پراش فرنل از پله‌ی فازی در آزمایشگاه تحقیقاتی اپتیک ۲ در دانشکده فیزیک دانشگاه تهران بصورت $\lambda = (632.8 \pm 0.3) nm$ اندازه‌گیری شده است). توجه کنید که خطاهای مختلف قدر مطلقشان با یکدیگر جمع می‌شوند همچنین $\partial f / \partial x_i$ مشتق جزئی نسبت به متغیر x_i است وقتی بقیه متغیرهای x_k که $k \neq i$ است ثابت فرض شده اند. همچنین باید توجه کنید که همواره خطاهای مربوط به یک متغیر قدر مطلقشان با یکدیگر جمع میشوند.

مثال: $y = (\frac{a+b}{a-b})^3 x^2 e^{-2z}$

معمولا بهتر است ابتدا از عبارت مورد نظر لگاریتم بگیریم بنابراین

$$Lny = 3Ln(a+b) - 3Ln(a-b) + 2Lnx - 2z$$

حال از دو طرف مشتق میگیریم و سپس $dx_i \to \Delta x_i$ بنابراین

$$\frac{\Delta y}{y} = 3\Delta a\left(\frac{1}{a+b} - \frac{1}{a-b}\right) + 3\Delta b\left(\frac{1}{a+b} + \frac{1}{a-b}\right) + 2\frac{\Delta x}{x} - 2\Delta z$$

حال حال همانطور که اشاره کردیم قدر مطلق خطای کمیت های مختلف با یکدیگر جمع می‌شوند زیرا همواره برای ما بیشینه خطایی که در آزمایش مرتکب شدیم مد نظر است. بنابراین

$$\frac{\Delta y}{y} = 3\Delta a\left(\frac{1}{|a+b|} + \frac{1}{|a-b|}\right) + 3\Delta b\left(\frac{1}{|a+b|} + \frac{1}{|a-b|}\right) + 2\frac{\Delta x}{|x|} + 2\Delta z$$

همچنین توجه دارید که خطای اندازه‌گیری مربوط به هر یک از کمیت ها و یا متغیرهای x_i مقداری مثبت است یا به عبارت دیگر $\Delta x_i > 0$. بنابراین خطای نسبی را در عبارت بالا بدست آوردیم و $y = \overline{y} \pm \Delta y$.

لازم به ذکر است که Δy_k را علاوه بر مشتق گیری بصورت مستقیم و با استفاده تعریف استاندار مشتق نیز بصورت زیر می‌توان بدست آورد

$$\Delta y_k = f(x_1,..., x_k + \Delta x_k,..., x_N) - f(x_1,..., x_k,..., x_N) \qquad (۵)$$

این رابطه مخصوصا زمانی مفید است که در تجربه کمیتی که قابل اندازه‌گیری است را می‌توان با تغییرات جزئی به میزان خطای پارامترهای موثر در آن اندازه‌گیری کرد. برای مثال فرض کنید در اندازه‌گیری پهنای فریزهای تداخلی ناشی از جابجایی یکی از دوشکاف های آزمایش یانگ به اندازه‌ی دقت جابجاگر بتوان پهنای جدید را در این وضعیت اندازه گرفت در اینصورت خطای پهنای فریزهای تداخلی اختلاف میان اندازه‌گیری در وضعیت اول و دوم است. همچنین زمانی

که در کامپیوتر از حل یکسری معادله y را بدست می‌آوریم؛ با تغییر پارامترها به اندازه خطای آنها می‌توان معادله را دوباره حل کرد و مقدار y_{new} را بدست آورد بنابراین خطای آن عبارت است از $\Delta y = |y - y_{new}|$ که از رابطه ۵ می‌توان بدست آورد.

قوانین حاکم بر ارقام با معنی

احتمالا تا حدودی با ارقام با معنی و نماد علمی در دروس دبیرستان و سال اول دانشگاه آشنا هستید در این گزارش نیز در قالب چند مثال با مفهموم ارقام با معنی آشنا شده اید. برخی قوانین حاکم بصورت زیر است

۱- تعداد رقم های اعشار مجموع یا تفاوت دو کمیت برابر تعداد رق مهای اعشار کمیتی است که کمترین رقم اعشار را دارد

$$22.0cm + 35cm = 57cm$$
$$42.1s + 2.12s = 44.2s$$
$$12.6gr - 2gr = 11gr$$

که در آخری، ۱۰.۶ به ۱۱ گرد شده است.

۲- تعداد ارقام معنادار حاصل ضرب یا نسبت دو کمیت برابر تعداد ارقام معنادار کمیتی است که کمترین ارقام معنادار را داراست

$$5.1cm \times 2.42cm = 12.4$$
$$\frac{25.5m}{6s} = 4m/s$$

۳- در محاسبات طولانی شامل چندین جمع و تفریق و ضرب و تقسیم محاسبات را به طور کامل انجام می دهیم و قوانین را روی نتیجه نهایی اعمال کرده و در صورت لزوم گرد می کنیم.

۴- اعداد ثابت در روابط مانند اعدادی هستن که دارای بی نهایت رقم بامعنی هستند مانند عدد ۰.۵ در رابط $y = 0.5gt^2$.

رسم نمودار و برازش

به شکل زیر توجه کنید. یک نمودار باید دارای اجزای زیر باشد.

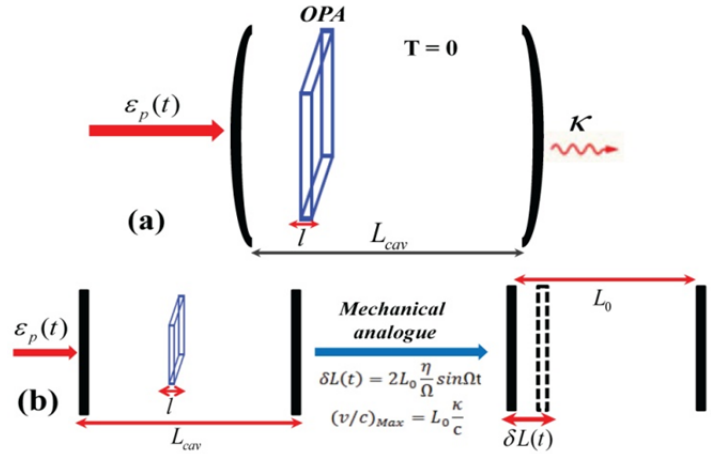
۱- عنوان نمودار باید کوتاه و کامل باشد

۲- محورهای افقی و عمودی به درستی انتخاب شوند . درجه بندی محور ها به طور مناسب انتخاب شوند.

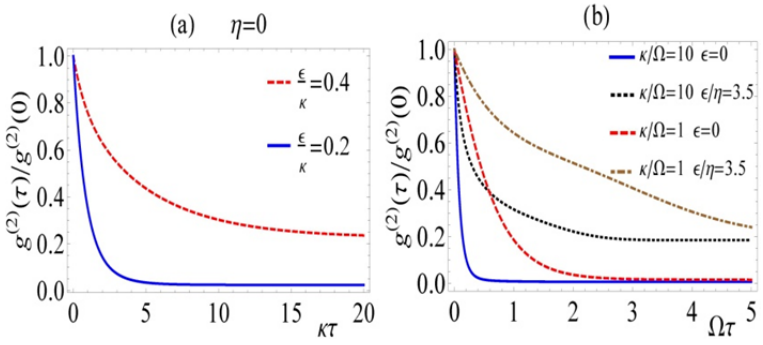
۳- هر نمودار زیرنویسی مناسب باید داشته باشد

۴- میزان خطای هر یک از داده ها در نمودارهای تجربی باید مشخص شود

۵- اطلاعات نمودار باید خوانا باشد



شکل ۱ : (a) طرحواره‌ی سامانه مورد بحث. (b) مانستگی میان کاواک فابری پروت با آینه ثابت و تقویت کننده‌ی پارامتریک که دامنه پمپاژ آن مدوله شده است با کاواک با آینه متحرک که حرکت آینه در آن مدوله شده است.

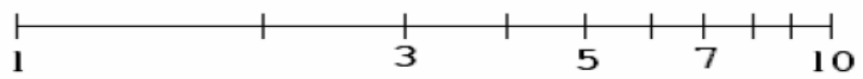


شکل ۴ : (a) $g^{(2)}(\tau)/g^{(2)}(0)$ در غیاب مدولاسیون زمانی برحسب $\kappa\tau$ برای مقادیر مختلف ε/κ. (b) $g^{(2)}(\tau)/g^{(2)}(0)$ بر حسب $\Omega\tau$ برای مقادیر مختلف κ/Ω و ε/η. مقدار $\kappa/2\pi = 10^4 Hz$ ثابت است

رسم بهترین خط و یا برازش بهترین خط به داده ها و رگرسیون

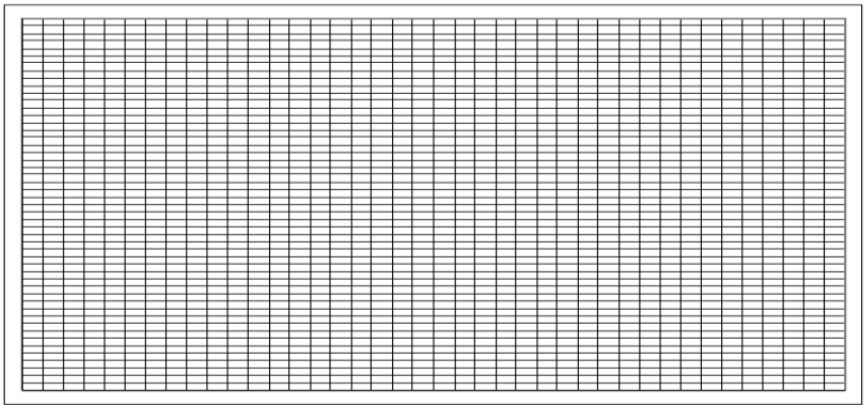
سوال اساسی که مطرح است این است که اگر یک سری داده‌ی تجربی دارید که رفتار آنها به طور ذاتی بر حسب یک متغیر خطی ($y = ax + b$) است و یا می‌توانید با طرفندهای ریاضی (لگاریتم گرفتن) آن را به یک رابطه خطی تبدیل کنید($y = \alpha x^b, y = \beta e^{\gamma x}$)، چگونه بهترین خطی را می‌توان به این داده‌ها برازش داد؟ و یا اینکه چگونه ثابت های مسئله و یا کمیت مجهول را به بهترین وجه و با بیشترین دقت می‌توان از این داده‌ها استخراج کرد؟

محور لگاریتمی زیر را که در آن فاصله ظاهری هر دو عدد متناسب است با تفاضل لگاریتم دو عدد است را در نظر بگیرید

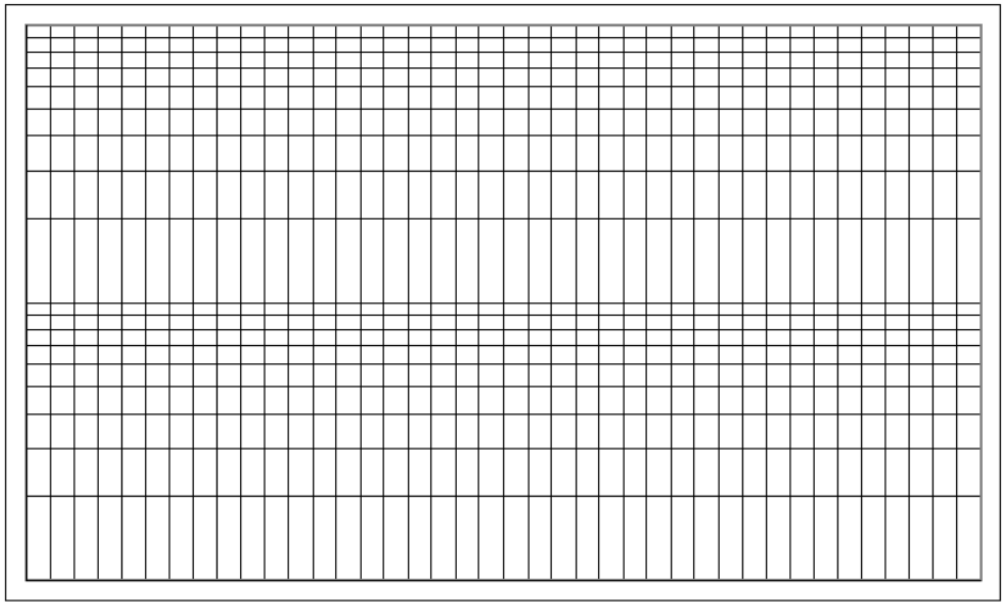


اگر هر دو محور لگاریتمی باشد به آن نمودار تمام لگاریتمی گفته می‌شود که توابع $y = \alpha x^b$ بصورت خط دیده می‌شوند و اگر محور عمودی لگاریتمی باشد به آن نمودار نیمه لگاریتمی گفته می‌شود که توابع $y = \beta e^{\gamma x}$ در آن بصورت خط دیده می‌شوند که برای رسم هم از کاغذهای لگاریتمی و نیمه لگاریتمی استفاده میشود.

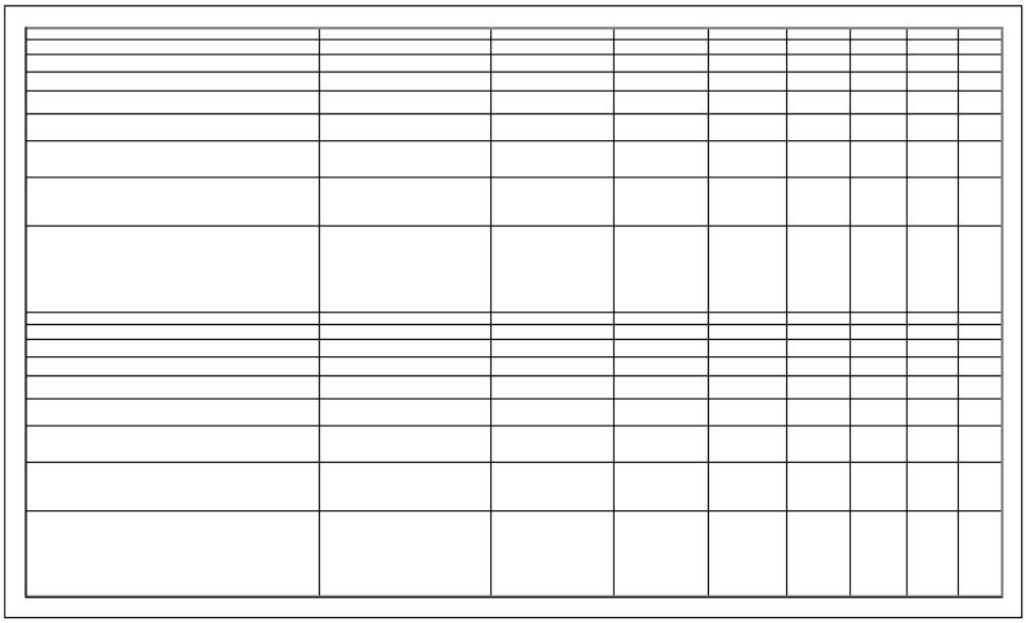
کاغذ میلی‌متری



کاغذ نیم لگاریتمی



کاغذ تمام لگاریتمی



در هر صورت چه در حالتیکه رابطه خطی است و در چه در حالتی که از نمودارهای نیمه لگاریتمی و تمام لگاریتمی استفاده می‌کنید هدف یافتن رابطه خطی $y = mx + b$ یعنی یافتن بهترین شیب خط و عرض از مبدأ. می‌توان از روابط زیر برای یافتن پارامترهای بهترین خط استفاده کرد

$$m = \frac{\sum_{i=1}^{N} y_i (x_i - \overline{x})}{\sum_{i=1}^{N} (x_i - \overline{x})} \qquad \Delta m = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^{N} d_i^2}{D(N-2)}} \qquad (۶)$$

$$b = \overline{y} - m\overline{x} \qquad \Delta b = \sqrt{(\frac{1}{N} + \frac{\overline{x}^2}{D}) \frac{\sum_{i=1}^{N} d_i^2}{N-2}} \qquad (۷)$$

که در آن پارامترهای Dو d بصورت زیر هستند

$$d_i = y_i - ax_i - b \qquad D = \sum_{i=1}^{N}(x_i - \overline{x})^2 \qquad (۸)$$

اگر بهترین خطی که از مبدأ میگذرد مورد نظر باشد شیب و خطای آن بصورت زیر است

$$m_0 = \frac{\sum_{i=1}^{N} x_i y_i}{\sum_{i=1}^{N} x_i^2} \qquad \Delta m_0 = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^{N} d_i^2}{(N-1)\sum_{i=1}^{N} x_i^2}} \qquad (۹)$$

لازم به توضیح است اگر رابطه بصورت خطی نباشد باید شکل تئوری مورد نظر را به آن از طریق الگوریتم های موجود با استفاده از نرم افزار برازش کرد و پارامترهای مورد نظر را به همراه خطای آنها بدست آورد. توجه کنید هنگامیکه از نرم افزار برای برازش استفاده می‌کنید چند مورد را باید دقت کنید. اول اینکه خطای پارامترهایی که از برازش بدست می‌آید را باید گزارش کنید. دوم اینکه مقدار ضریب شایستگی برازش را باید گزارش کنید که نشان دهنده این است که چقدر برازش خوب انجام شده است. سوم اینکه توجه داشته باشید خطایی که گزارش می‌کنید باید علاوه بر خطای برازش که نرم افزار می‌دهد شامل خطای ناشی از تغییر پارامترهای تجربی و دیگر خطاها باشدو هر کدام که بیشتر باشد به عنوان خطای نهایی باید در نظر گرفته شود. نکته دیگر این که در هنگام کارهای تجربی وقتی کمیت و یا پارامتری را اندازه‌گیری می‌کنید بهتر است آن را در صورت امکان با مقدار عددی اش که از یک روش دیگر بدست می‌آید مقایسه کنید.

فرض کنید دو سری کمیت((x_i, y_i)) را اندازه‌گیری کرده‌اید و می‌خواهیم رابطه‌ای میان این دو کمیت برقرار کنیم. بعد از برازش داده‌ها یک منحنی بصورت $Y = f(x)$ بدست می‌آید. حال سه ستون شامل داده‌های تجربیِ x, y که اندازه‌گیری شده‌اند و یک ستون دیگر شامل Y های پیش‌بینی شده داریم. کمیت r^2 همبستگی میان y, Y را می‌سنجد. رگرسیون بصورت $r^2 = A_2 / A_1$ تعریف می‌شود که در آن $A_1 = \sum_{i=1}^{N}(y_i - \overline{Y})^2$ و $A_2 = \sum_{i=1}^{N}(\overline{y} - Y_i)^2$ هستند. ملاحظه کنید که هنگامیکه Y_i, y_i با یکدیگر یکسان باشند مقدرا r^2 برابر با یک است و بهترین برازش رخ داده است. برای کارهای ساده‌ی نرم افزاری در حد رسم نمودار، برازش، حل معادلات جبری بصورتو دستگاه معادلات و غیره می‌توان از نرم افزار gplot(genuplot) استفاده کرد. در صورت عدم دسترسی به این نرم افزار می‌توان از Excel استفاده کرد اگر چه نرم افزار Excel چندان برای کارهای علمیِ دقیق و سطح بالا مناسب نیست.

مراجع برای مطالعه بیشتر:

۱- فیزیک عملی، ج.ل .اسکوایرز، ترجمه محمد علی شاهزمانیان و محمد حسن فیض، مرکز نشر دانشگاهی، چاپ اول 1370

۲- خطاهای مشاهده و محاسبه آن، تاپینگ ج ., ترجمه محسن تدین، مرکز نشر دانشگاهی1364

۳- شیمی عمومی جلد اول، چارلز مورتیمر، ترجمه علی پورجوادی، ...مرکز نشر دانشگاهی، چاپ پنجم1378