Przenoszenie niepewności

Uwaga wstępna: pojęcia „niepewność pomiarowa" i „błąd pomiarowy" są stosowane wymiennie.

Załóżmy, że wielkość q jest funkcją wielkości $a, b, c\ldots$, dla których niepewności ($\Delta a, \Delta b, \Delta c\ldots$) są znane (wynikają z dokładności urządzeń, oszacowania eksperymentatora, wcześniejszych obliczeń itp.). Jeżeli błędy te są niezależne i przypadkowe, to niepewność wyznaczenia wielkości q obliczamy metodą Gaussa (MG):

$$\Delta q = \sqrt{\left(\frac{\partial q}{\partial a}\Delta a\right)^2 + \left(\frac{\partial q}{\partial b}\Delta b\right)^2 + \left(\frac{\partial q}{\partial c}\Delta c\right)^2 + \cdots} \qquad (1)$$

Przy czym błąd ten jest nie większy, niż zwykła suma:

$$\Delta q \leq \left|\frac{\partial q}{\partial a}\right|\Delta a + \left|\frac{\partial q}{\partial b}\right|\Delta b + \left|\frac{\partial q}{\partial c}\right|\Delta c + \cdots$$

Przykład:

Niech q będzie następującą funkcją zmiennych x i y.

$$q = \frac{x^2 y}{1 - x}$$

Zmierzono x i y, otrzymując wyniki: $x = 0{,}0100 \pm 0{,}0001$ i $y = 3{,}00 \pm 0{,}01$. Ile wynosi wyznaczona wartość q wraz z jej niepewnością?

Rozwiązanie:

$$\frac{\partial q}{\partial x} = \frac{xy(2 - x)}{(1 - x)^2} \qquad \frac{\partial q}{\partial y} = \frac{x^2}{1 - x}$$

$$\Delta q = \sqrt{\left(\frac{\partial q}{\partial x}\Delta x\right)^2 + \left(\frac{\partial q}{\partial y}\Delta y\right)^2} = \sqrt{\left(\frac{xy(2 - x)}{(1 - x)^2}\Delta x\right)^2 + \left(\frac{x^2}{1 - x}\Delta y\right)^2}$$

Najlepszym przybliżeniem wartości q jest:

$$q = \frac{x^2 y}{1 - x} = 0{,}00030303\ \ldots$$

Niepewność wynosi:

$$\Delta q = 0{,}0000061744\ \ldots$$

Zapisujemy wynik w eleganckiej formie:

$$q = (3{,}03 \pm 0{,}06) \cdot 10^{-4}$$

W pewnych przypadkach metoda ta bardzo się upraszcza:

1. Jeżeli q ma postać sumy i różnicy: $q = a + \cdots + b - x - \cdots - y$, to:

$$\Delta q = \sqrt{(\Delta a)^2 + \cdots + (\Delta b)^2 + (\Delta x)^2 + \cdots + (\Delta y)^2}$$

2. Jeżeli q ma postać sumy n składników o takiej samej niepewności, czyli:

$$q = a_1 + a_2 + \cdots + a_n = \sum_{i=1}^{n} a_i$$

$$\Delta a_1 = \Delta a_2 = \cdots = \Delta a_n = \Delta a$$

Wtedy:

$$\Delta q = \Delta a \cdot \sqrt{n}$$

Sytuacja taka występuje na przykład wtedy, gdy na wadze o maksymalnym udźwigu 2 kg i dokładności ±0,5 g mamy odważyć około 3 kg substancji. Załóżmy, że odważyliśmy:
- za pierwszym razem (1996,5 ± 0,5) g,
- za drugim razem (1003,3 ± 0,5) g.

(Jak widać, rozdzielczość tej wagi jest równa 0,1 g, ale nas interesuje ***dokładność****, która wynosi 0,5 g).*

Niepewność: $\Delta m = 0{,}5\ \mathrm{g} \cdot \sqrt{2} = 0{,}71\ \mathrm{g}$
Odważyliśmy zatem $m = (2999{,}8 \pm 0{,}7)$ g substancji.

3. Jeżeli q ma postać iloczynu i ilorazu, $q = \frac{a \cdot \ldots \cdot b}{x \cdot \ldots \cdot y}$, to:

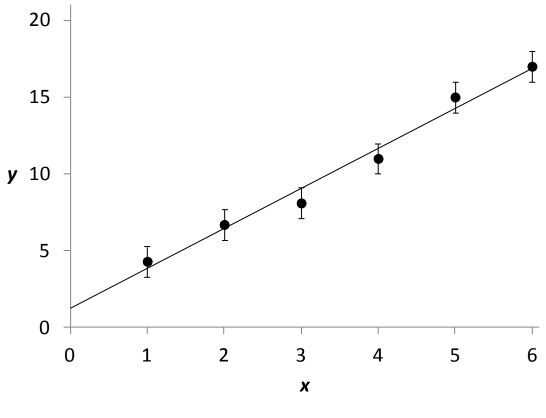
$$\Delta q = |q| \cdot \sqrt{\left(\frac{\Delta a}{a}\right)^2 + \cdots + \left(\frac{\Delta b}{b}\right)^2 + \left(\frac{\Delta x}{x}\right)^2 + \cdots + \left(\frac{\Delta y}{y}\right)^2}$$

Niepewności parametrów wyznaczonych z równania kierunkowego prostej

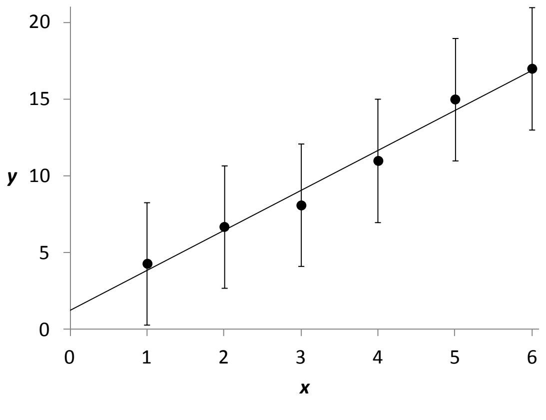
Często, gdy zależność między pewnymi parametrami jest liniowa ($y = ax + b$), fizyczną interpretację ma współczynnik kierunkowy (a) lub wyraz wolny (b) równania kierunkowego otrzymanej prostej. W takich przypadkach z eksperymentu otrzymujemy (często dopiero po pewnych obliczeniach) dyskretne wartości x oraz odpowiadające im wartości y. Naszym zadaniem jest znalezienie parametrów a i b (i ich niepewności: Δa i Δb) równania prostej, która najlepiej aproksymuje punkty doświadczalne. Najczęściej używa się w tym celu metody najmniejszych kwadratów.

Zwykła metoda najmniejszych kwadratów (MNK)

Arkusze kalkulacyjne (np. MS Excel) oferują funkcję pozwalającą na aproksymację punktów doświadczalnych linią prostą przy pomocy zwykłej metody najmniejszych kwadratów. W MS Excelu jest to funkcja REGLINP zwracająca tablicę danych: a, b, σ_a (inaczej Δa), σ_b (Δb), R^2, σ_y i inne. Jak widać, otrzymujemy w wyniku nie tylko współczynnik kierunkowy a i wyraz wolny b, ale również oszacowanie ich niepewności (Δa i Δb), współczynnik determinacji R^2 będący miarą jakości korelacji* oraz oszacowanie niepewności wielkości y na podstawie odchylenia standardowego.
Tu pojawia się bardzo ważna uwaga: tak oszacowana niepewność y ma niewiele wspólnego z rzeczywistymi niepewnościami tej wielkości otrzymanymi w doświadczeniu. Podobnie, Δa i Δb oszacowane tą metodą powinny budzić pewien niepokój, ponieważ nie uwzględniają rzeczywistych niepewności określonych w doświadczeniu dla poszczególnych punktów pomiarowych. Staje się to zrozumiałe, gdy się spojrzy na poniższe wykresy:



Wykres 1



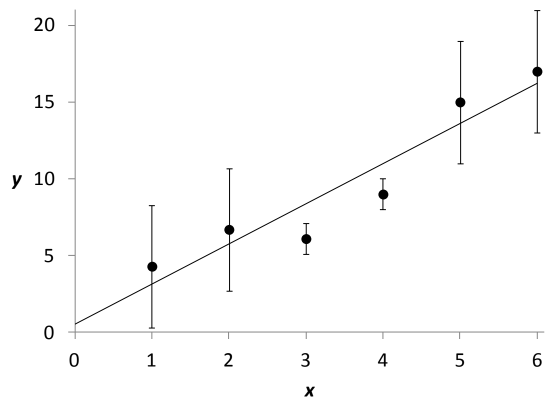
Wykres 2

* Jednak nie należy mylić go ze współczynnikiem korelacji (Pearsona) r. Jest on określony – w przeciwieństwie do współczynnika determinacji – tylko dla zależności liniowych (wówczas zachodzi $R^2 = r^2$) i przyjmuje wartości od -1 do 1, a jego znak jest zgodny ze znakiem współczynnika kierunkowego prostej.

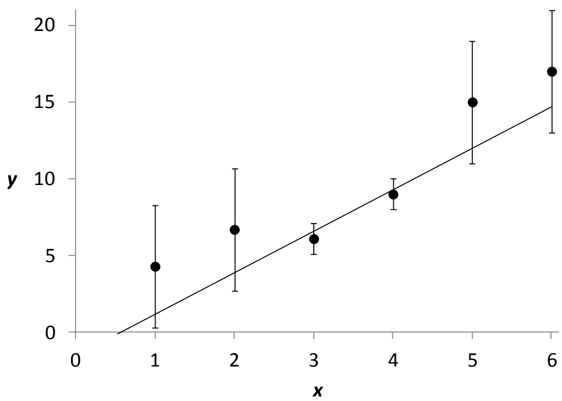
Wykresy przedstawiają dwa identyczne zbiory punktów zależności $y = f(x)$, ale na wykresie 2 punkty te są obarczone większymi niepewnościami y (przyjęto brak niepewności x). Wyznaczone metodą najmniejszych kwadratów współczynniki a i b są w obu przypadkach identyczne, ale w drugim przypadku ich niepewności Δa (i Δb) powinny być WIĘKSZE, niż w pierwszym. Jednak zwykła metoda najmniejszych kwadratów (dostępna np. w arkuszu Excel) w obu przypadkach poda TAKIE SAME wartości niepewności. Dzieje się tak dlatego, że są one szacowane na podstawie odchyleń standardowych y (czyli na podstawie rozrzutu punktów eksperymentalnych, które na obu wykresach są jednakowe), a nie na podstawie rzeczywistych niepewności Δy (i Δx) wynikających z charakterystyki aparatów i warunków eksperymentu. **Jeśli znamy błędy eksperymentalne** (na podstawie znajomości aparatu i metodyki pomiarowej), powinniśmy ich użyć do oceny niepewności wyznaczonych parametrów. W tym celu niepewności otrzymane z Excela ($\Delta a', \Delta b'$) powinny być poprawione poprzez pomnożenie przez stosunek błędu Δy do odchylenia standardowego obliczonego na podstawie różnic pomiędzy wartościami obliczonymi a eksperymentalnymi σ_y. Ten ostatni parametr można otrzymać z funkcji REGLINP.

$$\Delta a = \frac{\Delta y}{\sigma_y}\Delta a' \qquad \Delta b = \frac{\Delta y}{\sigma_y}\Delta b' \tag{2}$$

Zwykła metoda najmniejszych kwadratów zawodzi również wtedy, gdy poszczególne punkty pomiarowe są obarczone różnymi niepewnościami. Rozważmy poniższy przykład.



Wykres 3



Wykres 4

Oba powyższe wykresy przedstawiają dwa takie same zbiory punktów eksperymentalnych wraz z niepewnościami. Dwa pomiary, tzn. przy *x* = 3 oraz przy *x* = 4, zostały wykonane z większą dokładnością, niż pozostałe. Przedstawiono też dwie propozycje przeprowadzenia przez te punkty prostej. Na wykresie 3 widzimy aproksymację przy użyciu zwykłej metody najmniejszych kwadratów – w tym przypadku prosta nie przechodzi w odpowiedniej bliskości punktów wyznaczonych z większą dokładnością (omija ich słupki błędów). Wydaje się zatem, że lepsze dopasowanie jest przedstawione na Wykresie 4. Został tu uwzględniony fakt, że pomiary wykonane z większą dokładnością są istotniejsze (mają większą wagę).

Podsumowując – zwykła metoda najmniejszych kwadratów może być uznana za odpowiednią, gdy niepewności poszczególnych pomiarów są w przybliżeniu takie same. Dotyczy to również sytuacji, kiedy błędy eksperymentalne są nieznane – w tym przypadku po prostu ze względów praktycznych zakładamy równość niepewności dla wszystkich punktów eksperymentalnych. W przeciwnym wypadku (często zresztą spotykanym w praktyce laboratoryjnej), powinniśmy zastosować ważoną metodę najmniejszych kwadratów (WMNK)

Ważona metoda najmniejszych kwadratów (WMNK)

Opisane wyżej problemy rozwiązuje ważona metoda najmniejszych kwadratów. Efekt jej zastosowania jest przedstawiony na wykresie 4.
Zostanie ona opisana poniżej w formie uwzględniającej eksperymentalne niepewności zarówno y, jak i x.

Ważona metoda najmniejszych kwadratów – opis jednego z wariantów.

Wprowadzamy wagi statystyczne w_i przypisane każdemu punktowi zależności $y = f(x)$:

$$w_i = \frac{1}{\left(\Delta y_i^{eksp}\right)^2 + \left(\Delta y_i^{pb}\right)^2} = \frac{1}{\left(\Delta y_i^{eksp}\right)^2 + a_{KMNK}^2\left(\Delta x_i^{eksp}\right)^2} \tag{3}$$

Gdzie:
Δy_i^{eksp} – niepewność y (wynikająca np. z dokładności urządzenia, wcześniejszych obliczeń metodą różniczki zupełnej itp.),
Δy_i^{pb} – dodatkowa niepewność y wynikająca z przeniesienia błędu x na y (dzięki temu w wadze danego pomiaru uwzględniamy również Δx), którą szacujemy stosując metodę różniczki zupełnej dla równania $y_i = a_{KMNK}x_i + b_{KMNK}$ (*chwilowo* zakładamy, że $\Delta a = \Delta b = 0$):

$$\Delta y_i^{pb} = a_{KMNK} \cdot \Delta x_i^{eksp} \tag{4}$$

a_{KMNK} – współczynnik kierunkowy prostej obliczony ze zwykłej metody najmniejszych kwadratów,
Δx_i^{eksp} – niepewność x (wynikająca np. z dokładności urządzenia, wcześniejszych obliczeń metodą różniczki zupełnej itp.)

Interpretacja wag statystycznych jest bardzo prosta: im dokładniej ustaliliśmy położenie punktu o współrzędnych (x_i, y_i) (czyli im mniejsze jest Δx_i^{eksp} i Δy_i^{eksp}), tym „ważniejszy” jest dany pomiar (czyli tym większe w_i).

Będziemy stosować pewne uproszczenie w zapisie sum:

$$\text{zamiast} \quad \sum_{i=1}^{N} m_i \cdot n_i \cdot \ldots \cdot o_i \quad \text{będziemy pisać} \quad \sum mn \ldots o$$

gdzie N – liczba punktów pomiarowych.

Najlepsze przybliżenia stałych a i b są określone wzorami:

$$a = \frac{(\sum w)(\sum wxy) - (\sum wx)(\sum wy)}{\Delta}$$

$$b = \frac{(\sum wx^2)(\sum wy) - (\sum wx)(\sum wxy)}{\Delta}$$

Gdzie:

$$\Delta = \left(\sum w\right)\left(\sum wx^2\right) - \left(\sum wx\right)^2$$

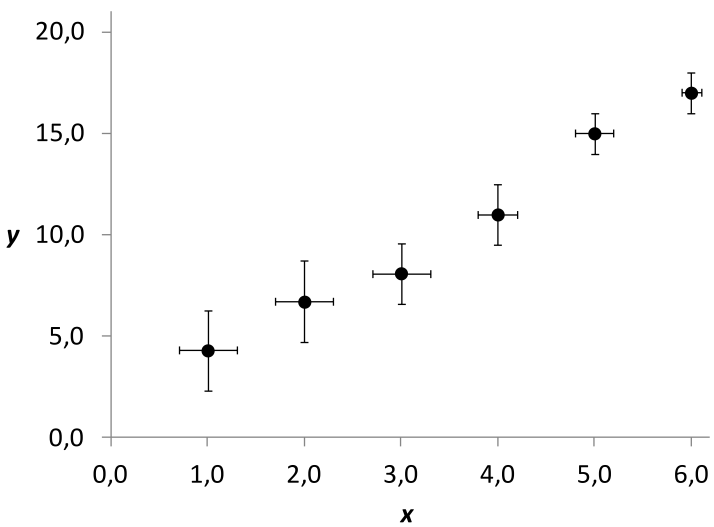
Natomiast niepewności a i b są równe:

$$\Delta a = \sqrt{\frac{\sum w}{\Delta}} \qquad \Delta b = \sqrt{\frac{\sum wx^2}{\Delta}}$$

<u>Ważona metoda najmniejszych kwadratów – przykład krok po kroku.</u>

Załóżmy, że w pomiarach otrzymaliśmy następujący zbiór punktów i ich niepewności:

Lp.	x	Δx^{eksp}	y	Δy^{eksp}
1	1,0	0,3	4,3	2,0
2	2,0	0,3	6,7	2,0
3	3,0	0,3	8,1	1,5
4	4,00	0,20	11,0	1,5
5	5,00	0,20	15,0	1,0
6	6,00	0,10	17,0	1,0



Wyznaczamy współczynnik kierunkowy zwykłą metodą najmniejszych kwadratów (funkcja REGLINP w MS Excel):

$$a_{KMNK} = 2{,}608571\ ...$$

Stosownie do podanych wyżej wzorów liczymy wagi w, następnie wszystkie potrzebne sumy (jest tu przydatna funkcja SUMA.ILOCZYNÓW w MS Excel), parametry a i b oraz ich błędy:

Lp.	Δy^{eksp}	Δy^{pb}	w
1	2,0	0,78	0,22

$\Sigma w =$ 2,90 $a =$ 2,69

$\Sigma wx =$ 12,83 $\Delta a =$ 0,37

2	2,0	0,78	0,22
3	1,5	0,78	0,35
4	1,5	0,52	0,40
5	1,0	0,52	0,79
6	1,0	0,26	0,94

$\Sigma wy =$ 37,28

$\Sigma wx^2 =$ 63,93

$\Sigma wxy =$ 184,23

$\Delta =$ 20,84

$b =$ 0,93

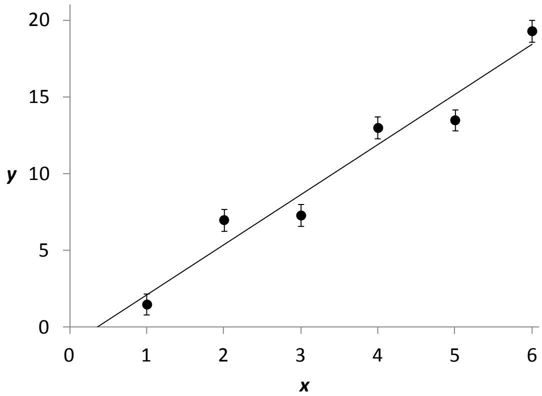
$\Delta b =$ 1,75

Wynik:

$$\boldsymbol{a = 2,7 \pm 0,4}$$
$$\boldsymbol{b = 0,9 \pm 1,8}$$

Ze zwykłej metody najmniejszych kwadratów:

$$a = 2{,}61 \pm 0{,}18$$
$$b = 1{,}2 \ \ \pm 0{,}7$$



UWAGA: Może się zdarzyć, że błędy oszacowane zwykłą metodą najmniejszych kwadratów będą większe, niż te wynikające z metody ważonej. Dzieje się tak wtedy, gdy rozrzut punktów eksperymentalnych wokół prostej (ich odchylenie standardowe) jest większy, niż określony przez eksperymentatora błąd mierzonej wielkości (wykres obok). Najprawdopodobniej oznacza to, że istnieją dodatkowe, źródła błędów, nieprzewidziane przez eksperymentatora. W takim przypadku bardziej wiarygodne oszacowanie Δa i Δb otrzymujemy ze zwykłej metody najmniejszych kwadratów.

Badanie istotności współczynnika regresji prostoliniowej

Niejednokrotnie w trakcie laboratorium należy określić, czy pewien parametr wpływa na wielkość mierzoną lub wyznaczaną. Można się na przykład spodziewać, że przewodność roztworu zależy od temperatury, lecz nie zależy od głębokości zanurzenia termometru. Kiedy na pierwszy rzut oka niełatwo stwierdzić istnienie zależności, przeprowadza się test istotności współczynnika kierunkowego prostej.

Stawiamy hipotezę że współczynnik kierunkowy prostej jest równy 0:

Hipoteza zerowa: $H_0\colon a_0 = 0$

Hipoteza alternatywna: $H_1\colon a_0 \neq 0$

Hipotezę H_0 weryfikujemy za pomocą testu *t*-Studenta następującej postaci:

$$t = \frac{|a|}{\Delta a} \tag{5}$$

Gdzie a oraz Δa to odpowiednio: współczynnik kierunkowy prostej najlepiej aproksymującej punkty doświadczalne i błąd standardowy tego współczynnika.
Porównujemy następnie wartość t z wartością graniczną na wymaganym poziomie istotności α (najczęściej $\alpha = 0{,}05$) i dla danej liczby stopni swobody r ($r = n - 2$, gdzie n jest liczbą pomiarów). Tę wartość odczytujemy w tablicach rozkładu *t*-Studenta.

$t > t_{gr}$ $\Longrightarrow$ odrzucamy hipotezę H_0, stwierdzamy, że zależność występuje

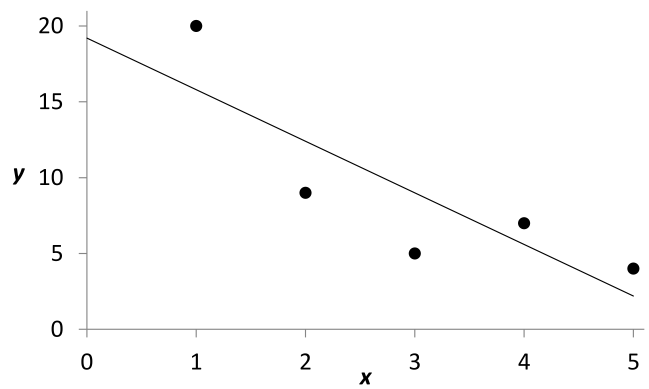
$t \leq t_{gr}$ $\Longrightarrow$ przyjmujemy hipotezę H_0, stwierdzamy brak zależności

Przykład:
Weźmy następujący zbiór punktów doświadczalnych:

x	y
1	20
2	9
3	5
4	7
5	4

$a = -3{,}4$
$\Delta a = 1{,}3$
$b = 19$
$\Delta b = 4$
$R^2 = 0{,}70$

Parametry prostej i ich błędy standardowe oraz współczynnik determinacji obliczono przy pomocy funkcji REGLINP w MS Excelu.



Hipoteza zerowa: $H_0\colon a_0 = 0$

Hipoteza alternatywna: $H_1\colon a_0 \neq 0$

Obliczamy: $t = 2{,}938$

Dobieramy odpowiedni poziom istotności:

- jeżeli chcemy sprawdzić hipotezę na poziomie ufności 95% (czyli chcemy mieć 95-procentową pewność, że zależność między x i y występuje), to dobieramy poziom istotności

$$a = 1 - 0{,}95 = 0{,}05$$

- sprawdzimy również, co się stanie, jeżeli będziemy mniej rygorystyczni i starczy nam 90% pewność; wówczas poziom istotności:

$$a = 1 - 0{,}90 = 0{,}1$$

W każdym przypadku liczba stopni swobody jest równa

$$r = 5 - 2 = 3$$

Odczytujemy z tablic rozkładu t-Studenta wartość t na obu poziomach istotności:

$$t_{\alpha=0{,}05;\,3} = 3{,}182$$

$$t_{\alpha=0{,}1;\,3} = 2{,}353$$

Z porównania z obliczoną wartością t wynika, że:

- ponieważ $t \le t_{\alpha=0{,}05;\,3}$, to na poziomie istotności 0,05 należy zaakceptować hipotezę o braku zależności między x i y,
- ponieważ $t > t_{\alpha=0{,}1;\,3}$, to na poziomie istotności 0,1 odrzucamy hipotezę zerową i stwierdzamy, że zależność występuje.

Dokładniejsze obliczenia wykazałyby, że mamy mniej więcej 92-procentową pewność, że y zależy od x (innymi słowy, że występuje korelacja między tymi wielkościami, czyli że współczynnik kierunkowy tej zależności jest różny od 0).

Uwaga: w tablicach rozkładu t-Studenta dwojako definiuje się poziom istotności – może on dotyczyć jedno- lub dwustronnego obszaru krytycznego. Ponieważ w obu przypadkach używa się tego samego symbolu (α), może to prowadzić do nieporozumień. Należy zawsze upewnić się, która definicja jest używana w danych tablicach. W razie konieczności należy skorzystać z zależności:

$$\begin{matrix}\alpha \text{ dotyczące dwustronnego} \\ \text{obszaru krytycznego}\end{matrix} = 2 \times \begin{matrix}\alpha \text{ dotyczące jednostronnego} \\ \text{obszaru krytycznego}\end{matrix}$$

W powyższym przykładzie testowano hipotezy dwustronne (sprawdzano, czy współczynnik kierunkowy jest różny od 0, przy czym mógł być zarówno większy, jak i mniejszy od 0), dlatego użyto poziomu istotności dla obszaru dwustronnego.

Literatura:
Taylor, J. R., *Wstęp do analizy błędu pomiarowego*, PWN, Warszawa 2011
Respondowski, R., *Opracowanie wyników pomiarów fizycznych*, Wydawnictwo Politechniki Śląskiej, Gliwice 1995
Czermiński, J., Iwasiewicz, A., Paszek, Z., Sikorski, A., *Metody statystyczne w doświadczalnictwie chemicznym*, wyd. II, PWN, Warszawa 1974

Inne polecane pozycje:
Brandt, S., *Analiza danych*, PWN, Warszawa 2002
Urbański, M.K., *Opracowanie danych doświadczalnych* (skrypt do przedmiotu prowadzonego na Wydziale Fizyki PW), http://www.if.pw.edu.pl/~murba/ODD_skrypt.pdf