<u>Περί σφαλμάτων μετρήσεων και αποτελεσμάτων</u>

Προσδιορισμός σφάλματος (ή αβεβαιότητας) ενός αποτελέσματος

Σφάλμα μιας μετρήσεως: σφάλμα αναγνώσεως, π.χ. ±1/2 υποδιαιρέσεως κλίμακος.

Σφάλμα πολλαπλών, επαναληπτικών μετρήσεων:

$$\sigma = \sqrt{\frac{1}{N-1}\sum_{i=1}^{N}\left(x_i - \bar{x}\right)^2} = \left(\frac{1}{N(N-1)}\left[N\sum_{i=1}^{N}x_i^2 - \left(\sum_{i=1}^{N}x_i\right)^2\right]\right)^{1/2} \qquad (1)$$

Πρόκειται για την τυπική απόκλιση εφόσον υποθέσουμε ότι κάθε μέτρηση ακολουθεί τυχαία κατανομή σφάλματος. $\bar{x}$ είναι η μέση τιμή της μεταβλητής x και την χρησιμοποιούμε ως την καλύτερη προσέγγιση της πραγματικής τιμής της x. $\bar{x} = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}x_i$, (2)

όπου x_1, x_2, ... x_N είναι οι μετρήσεις της μεταβλητής x.

Η **τυπική απόκλιση**, σ, είναι παράμετρος της κανονικής κατανομής (κατανομής Gauss) η οποία (κατανομή) περιγράφει την πιθανότητα (για την ακρίβεια, την πυκνότητα πιθανότητας*) ευρέσεως της τιμής x της μετρούμενης ποσότητας $f(x) = A\exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{x_i - \bar{x}}{\sigma}\right)^2\right]$, (3)

όπου $A = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}}$ έτσι ώστε $\int_{-\infty}^{+\infty} f(x)dx = 1$. (4)

Ισχύει ότι $\int_{\bar{x}-\sigma}^{\bar{x}+\sigma} f(x)dx = 0.68 = 68\%$. Δηλαδή, όταν αναφέρουμε για μια μέτρηση ότι έχει τυπική απόκλιση σ, δηλώνουμε ότι η πιθανότητα να βρεθεί μια μέτρηση στο διάστημα [$\bar{x}$-σ, $\bar{x}$+σ] είναι 68%. Ακόμη πιο συνοπτικά εννοούμε το ίδιο πράγμα όταν γράφουμε ότι η τιμή μιας ποσότητας είναι π.χ. 14.23±0.07 ή 14.23(7), όπου εννοείται ότι $\bar{x}$ = 14.23 και σ = 0.07.

Σημαντικά ψηφία: Αν υπολογίσουμε $\bar{x}$ = 14.2325783 και σ = 0.06972476, δεν έχει έννοια να καταγράψουμε όλα τα ψηφία γιατί δεν είναι σημαντικά. Η σωστή απάντηση είναι 14.23±0.07.

Διάδοση σφάλματος: Αν έχουμε $x_3 = x_1 \pm x_2$, τότε $\sigma_3^2 = \sigma_1^2 + \sigma_2^2$. (5)

Αν $x_4 = x_1 \cdot x_2$, τότε $\left(\frac{\sigma_4}{x_4}\right)^2 = \left(\frac{\sigma_1}{x_1}\right)^2 + \left(\frac{\sigma_2}{x_2}\right)^2$. (6)

Γενικά, αν y = f(x), τότε $\sigma_y^2 = \left(\frac{dy}{dx}\right)^2 \sigma_x^2$. (7)

* Η πιθανότητα ευρέσεως της τιμής της μετρούμενης ποσότητας στο διάστημα (x,x+dx) δίνεται από το διαφορικό f(x)dx.

Τέλος, αν $y = f(x_1,x_2,...x_n)$ και οι μεταβλητές x_i είναι ανεξάρτητες μεταξύ τους (δηλ. δεν υπάρχει συσχέτιση μεταξύ τους) τότε $\sigma_y^2 = \sum_{i=1}^{n}\left(\frac{\partial y}{\partial x_i}\right)^2 \sigma_{x_i}^2$ (8)

Γενικότερα: $\sigma_y^2 = \sum_{i=1}^{n}\left(\frac{\partial y}{\partial x_i}\right)^2 \sigma_{x_i}^2 + 2\sum_{i<j}^{n}\left(\frac{\partial y}{\partial x_i}\right)\left(\frac{\partial y}{\partial x_j}\right)\sigma_{x_i x_j}^2$, (9)

όπου $\sigma_{x_i x_j}^2$ είναι η συνδιακύμανση των μεταβλητών x_i και x_j, που αποτελεί μέτρο της συσχετίσεως των μεταβλητών αυτών. Η σχέση (9) αποτελεί τον πλήρη τύπο διαδόσεως σφάλματος.

Μέθοδος Ελαχίστων Τετραγώνων

Πρόκειται για γενική μέθοδο προσδιορισμού των παραμέτρων (α,β,γ,...) μιας πρότυπης σχέσης ($y = f(x)$) η οποία θεωρούμε ότι περιγράφει τις μετρήσεις μας (y_1, y_2, ..., y_N). Η μέθοδος υποθέτει ότι οι αποκλίσεις των υπολογιζόμενων τιμών $f(x_i)$ από τις μετρήσεις y_i, δηλ. οι ποσότητες $y_i – f(x_i)$ ακολουθούν κανονική κατανομή και οι παράμετροι προσδιορίζονται με ελαχιστοποίηση της ποσότητας S (ή χ^2 στην βιβλιογραφία) όπου $S = \sum_{i=1}^{N}\left(y_i - f(x_i)\right)^2$. (10)

Αυτό το άθροισμα ονομάζουμε άθροισμα τετραγώνων των αποκλίσεων.

Αν π.χ. η f(x) έχει 3 παραμέτρους, τις α, β και γ, τότε $\frac{\partial S}{\partial \alpha} = \frac{\partial S}{\partial \beta} = \frac{\partial S}{\partial \gamma} = 0$. (11)

Προκύπτει έτσι σύστημα εξισώσεων ως προς α, β, γ ισάριθμες με τις παραμέτρους της f(x).

Γραμμική προσαρμογή

Η γνωστότερη περίπτωση εφαρμογής της μεθόδου είναι για $f(x) = \alpha x + \beta$. (12)

Αν x_1, x_2, ... x_N είναι οι τιμές της ανεξάρτητης μεταβλητής x και y_1, y_2, ... y_N οι αντίστοιχες μετρήσεις της εξαρτημένης μεταβλητής y, τότε ζητούμε τις τιμές των α και β για τις οποίες $\frac{\partial S}{\partial \alpha} = 0$ και $\frac{\partial S}{\partial \beta} = 0$, όπου $S = \sum_{i=1}^{N}\left(y_i - \alpha x_i - \beta\right)^2$.

$$\frac{\partial S}{\partial \alpha} = 0 \Rightarrow \sum\left[-2x_i\left(y_i - \alpha x_i - \beta\right)\right] = 0 \Rightarrow \sum x_i y_i - \alpha\sum x_i^2 - \beta\sum x_i = 0 \text{ και}$$

$$\frac{\partial S}{\partial \beta} = 0 \Rightarrow \sum\left[-2\left(y_i - \alpha x_i - \beta\right)\right] = 0 \Rightarrow \sum y_i - \alpha\sum x_i - \beta\sum 1 = 0.$$

Επιλύουμε ως προς α και β:

$$\alpha = \frac{1}{D}\left(N\sum x_i y_i - \sum x_i \sum y_i\right) \text{ και} \quad (13\alpha)$$

$$\beta = \frac{1}{D}\left(\sum x_i^2 \sum y_i - \sum x_i \sum x_i y_i\right), \quad (13\beta)$$

με $D = N\sum x_i^2 - \left(\sum x_i\right)^2$. (13γ)

Ο συντελεστής συσχετίσεως r είναι ο λόγος της συνδιακύμανσης των x και y προς την ρίζα του γινομένου των διακυμάνσεων των μεταβλητών αυτών:

$$r = \frac{\sum_{i=1}^{N}(x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y})}{\sqrt{\sum_{i=1}^{N}(x_i - \bar{x})^2 \sum_{i=1}^{N}(y_i - \bar{y})^2}} = \frac{\sum_{i=1}^{N} x_i y_i - \bar{y}\sum_{i=1}^{N} x_i - \bar{x}\sum_{i=1}^{N} y_i + N\bar{x}\bar{y}}{\sqrt{\left[\sum_{i=1}^{N} x_i^2 - \frac{\left(\sum_{i=1}^{N} x_i\right)^2}{N}\right]\left[\sum_{i=1}^{N} y_i^2 - \frac{\left(\sum_{i=1}^{N} y_i\right)^2}{N}\right]}} \Rightarrow$$

$$r = \frac{N\sum_{i=1}^{N} x_i y_i - \sum_{i=1}^{N} x_i \sum_{i=1}^{N} y_i}{\sqrt{\left[N\sum_{i=1}^{N} x_i^2 - \left(\sum_{i=1}^{N} x_i\right)^2\right]\left[N\sum_{i=1}^{N} y_i^2 - N\left(\sum_{i=1}^{N} y_i\right)^2\right]}} \qquad (14)$$

Πολλοί υπολογιστές τσέπης ή προγράμματα υπολογίζουν τα α και β. Λίγοι όμως δίνουν τα σφάλματα (τυπικές αποκλίσεις) των α και β. Σύμφωνα με την γενική σχέση μεταδόσεως σφάλματος (8),

$$\sigma_\alpha^2 = \sum_{i=1}^{N}\left[\left(\frac{\partial\alpha}{\partial x_i}\right)^2 \sigma_{x_i}^2 + \left(\frac{\partial\alpha}{\partial y_i}\right)^2 \sigma_{y_i}^2\right] \text{και } \sigma_\beta^2 = \sum_{i=1}^{N}\left[\left(\frac{\partial\beta}{\partial x_i}\right)^2 \sigma_{x_i}^2 + \left(\frac{\partial\beta}{\partial y_i}\right)^2 \sigma_{y_i}^2\right]. \qquad (15)$$

Οι τιμές x_i δεν έχουν σφάλμα (προϋπόθεση για την μέθοδο) και συνήθως θεωρούμε ότι όλες τις τιμές y_i, έχουν το ίδιο σφάλμα, δηλ. $\sigma_{x_i} = 0$ και $\sigma_{y_i} = \sigma_y$, όπου

$$\sigma_y = \sqrt{\frac{S}{N-2}} = \sqrt{\frac{\sum(y_i - \alpha x_i - \beta)^2}{N-2}} \Rightarrow$$

$$\sigma_y = \sqrt{\frac{\sum y_i^2 - 2\alpha\sum x_i y_i - 2\beta\sum y_i + \alpha^2\sum x_i^2 + \beta 2\alpha\sum x_i + \beta N}{N-2}}. \qquad (16)$$

Τότε: η (15α) γίνεται $\sigma_\alpha^2 = \sigma_y^2 \sum\left(\frac{\partial\alpha}{\partial y_i}\right)^2$ (17)

Όμως από τη σχέση (13α) έχουμε: $\frac{\partial\alpha}{\partial y_i} = \frac{1}{D}\frac{\partial}{\partial y_i}\left(N\sum x_i y_i - \sum x_i \sum y_i\right) = \frac{1}{D}\left(Nx_i - \sum x_i\right)$,

άρα:

$$\sigma_\alpha^2 = \sigma_y^2 \sum\left(\frac{1}{D}\left(Nx_i - \sum x_i\right)\right)^2 = \left(\frac{\sigma_y}{D}\right)^2 ND = \frac{N}{D}\sigma_y^2. \qquad (18)$$

Παρομοίως, $\sigma_\beta^2 = \frac{1}{D}\sigma_y^2 \sum x_i^2$. (19)

Η υπολογισμένη εξίσωση της ευθείας μας επιτρέπει να υπολογίσουμε (να προβλέψουμε) μια τιμή y για οποιαδήποτε επιλεγμένη τιμή x. Και εδώ η αβεβαιότητα αυτής της τιμής του y μπορεί να προσδιορισθεί με την βοήθεια της σχέσεως μεταδόσεως του σφάλματος (8), πάντα με την ρητή προϋπόθεση των μη συσχετιζόμενων μεταβλητών.

Η υπολογισμένη τιμή του y είναι: $y_c = \alpha\ x + \beta$. Το x δεν έχει σφάλμα. Οι παράμετροι α και β υπολογίζονται από τις σχέσεις (13) με βάση το σύνολο των ζευγών των τιμών (x_i, y_i), άρα τα σφάλματα των α και β δεν είναι ανεξάρτητα. Συνεπώς η (8) γίνεται:

$$\sigma_{y_c}^2 = \sum_{i=1}^{N}\left(\frac{\partial y_c}{\partial y_i}\right)^2 \sigma_y^2 \text{ , όπου} \qquad (20)$$

$$y_c = \alpha x + \beta = \frac{\left(N\sum_{j=1}^{N} x_j y_j - \sum_{j=1}^{N} x_j \sum_{j=1}^{N} y_j\right)x + \sum_{j=1}^{N} x_j^2 \sum_{j=1}^{N} y_j - \sum_{j=1}^{N} x_j \sum_{j=1}^{N} x_j y_j}{D} \qquad (21)$$

οπότε $$\frac{\partial y_c}{\partial y_i} = \frac{\left(N x_i - \sum_{j=1}^{N} x_j\right)x + \sum_{j=1}^{N} x_j^2 - x_i \sum_{j=1}^{N} x_j}{D}$$ και

$$\left(\frac{\partial y_c}{\partial y_i}\right)^2 = \left(\frac{\left(N x_i - \sum_{j=1}^{N} x_j\right)x + \sum_{j=1}^{N} x_j^2 - x_i \sum_{j=1}^{N} x_j}{D}\right)^2 =$$

$$\left(\frac{\partial y_c}{\partial y_i}\right)^2 = \frac{1}{D^2}\left[\left(N x_i - \sum_{j=1}^{N} x_j\right)^2 x^2 + \left(N x_i - \sum_{j=1}^{N} x_j\right)\left(\sum_{j=1}^{N} x_j^2 - x_i \sum_{j=1}^{N} x_j\right)x + \left(\sum_{j=1}^{N} x_j^2 - x_i \sum_{j=1}^{N} x_j\right)^2\right] =$$

$$= \frac{1}{D^2}\left[\begin{array}{l} \left(N^2 x_i^2 - 2N x_i \sum_{j=1}^{N} x_j \left(\sum_{j=1}^{N} x_j\right)^2\right)x^2 + \\ + 2\left(N x_i \sum_{j=1}^{N} x_j^2 - N x_i^2 \sum_{j=1}^{N} x_j - \sum_{j=1}^{N} x_j \sum_{j=1}^{N} x_j^2 + x_i \left(\sum_{j=1}^{N} x_j\right)^2\right)x + \\ + \left(\sum_{j=1}^{N} x_j^2\right)^2 - 2 x_i \sum_{j=1}^{N} x_j \sum_{j=1}^{N} x_j^2 + x_i^2 \left(\sum_{j=1}^{N} x_j\right)^2 \end{array}\right] =$$

οπότε η (20) γίνεται:

$$\sigma_{y_c}^2 = \frac{\sigma_y^2}{D^2}\sum_{i=1}^{N}\left[\begin{array}{l}\left(N^2x_i^2 - 2Nx_i\sum_{j=1}^{N}x_j + \left(\sum_{j=1}^{N}x_j\right)^2\right)x^2 + \\ +2\left(Nx_i\sum_{j=1}^{N}x_j^2 - Nx_i^2\sum_{j=1}^{N}x_j - \sum_{j=1}^{N}x_j\sum_{j=1}^{N}x_j^2 + x_i\left(\sum_{j=1}^{N}x_j\right)^2\right)x + \\ +\left(\sum_{j=1}^{N}x_j^2\right)^2 - 2x_i\sum_{j=1}^{N}x_j\sum_{j=1}^{N}x_j^2 + x_i^2\left(\sum_{j=1}^{N}x_j\right)^2\end{array}\right] =$$

$$= \frac{\sigma_y^2}{D^2}\left[\begin{array}{l}\left(N^2\sum_{i=1}^{N}x_i^2 - 2N\left(\sum_{j=1}^{N}x_j\right)^2 + N\left(\sum_{j=1}^{N}x_j\right)^2\right)x^2 + \\ +2\left(N\sum_{i=1}^{N}x_i\sum_{j=1}^{N}x_j^2 - N\sum_{i=1}^{N}x_i^2\sum_{j=1}^{N}x_j - N\sum_{j=1}^{N}x_j\sum_{j=1}^{N}x_j^2 + \sum_{i=1}^{N}x_i\left(\sum_{j=1}^{N}x_j\right)^2\right)x + \\ +N\left(\sum_{j=1}^{N}x_j^2\right)^2 - 2\left(\sum_{j=1}^{N}x_j\right)^2\sum_{j=1}^{N}x_j^2 + \sum_{i=1}^{N}x_i^2\left(\sum_{j=1}^{N}x_j\right)^2\end{array}\right] =$$

$$= \frac{\sigma_y^2}{D^2}\left[N\left(N\sum_{i=1}^{N}x_i^2 - \left(\sum_{j=1}^{N}x_j\right)^2\right)x^2 - 2\sum_{i=1}^{N}x_i\left(N\sum_{i=1}^{N}x_i^2 - \left(\sum_{i=1}^{N}x_i\right)^1\right)x + \sum_{j=1}^{N}x_j^2\left(N\sum_{j=1}^{N}x_j^2 - \left(\sum_{j=1}^{N}x_j\right)^2\right)\right] =$$

$$= \frac{\sigma_y^2}{D^2}\left(N\sum_{i=1}^{N}x_i^2 - \left(\sum_{j=1}^{N}x_j\right)^2\right)\left[Nx^2 - 2x\sum_{i=1}^{N}x_i + \sum_{j=1}^{N}x_j^2\right] \Rightarrow$$

Συνεπώς: $\sigma_{y_c}^2 = \dfrac{\sigma_y^2}{D}\left[Nx^2 - 2x\sum_{i=1}^{N}x_i + \sum_{j=1}^{N}x_j^2\right]$ (22)*

Αν είχαμε θεωρήσει (λανθασμένα) ότι δεν υπάρχει συσχέτιση μεταξύ των παραμέτρων α και β, και εφαρμόζαμε την σχέση (8), θα προέκυπτε με την βοήθεια των (18) και (19) το εξής:

$$\sigma_{y_c}^2 = \sigma_\alpha^2 x^2 + \sigma_\beta^2 = \frac{\sigma_y^2}{D}\left[Nx^2 + \sum_{i=1}^{N}x_i^2\right] \qquad (23)$$

Η σχέση (22) μπορεί να μας δώσει μια ζώνη αβεβαιότητας για τις υπολογισμένες τιμές του y. Διερεύνηση της (22) μας επιτρέπει να βρούμε ποιες είναι οι πιο αξιόπιστες υπολογισμένες τιμές y, δηλ. να βρούμε για ποιες τιμές x το σφάλμα του υπολογισμένου y γίνεται ελάχιστο. Θα συμβεί αυτό στην θέση όπου η πρώτη παράγωγος της (22) ως προς x γίνεται 0.

$$\frac{\partial\sigma_{y_c}^2}{\partial x} = 0 \Rightarrow \frac{\sigma_y^2}{D}\frac{\partial}{\partial x}\left[Nx^2 - 2x\sum_{i=1}^{N}x_i + \sum_{j=1}^{N}x_j^2\right] = 0 \Rightarrow 2Nx - 2\sum_{i=1}^{N}x_i = 0 \Rightarrow x = \frac{\sum_{i=1}^{N}x_i}{N} = \bar{x} \qquad (24)$$

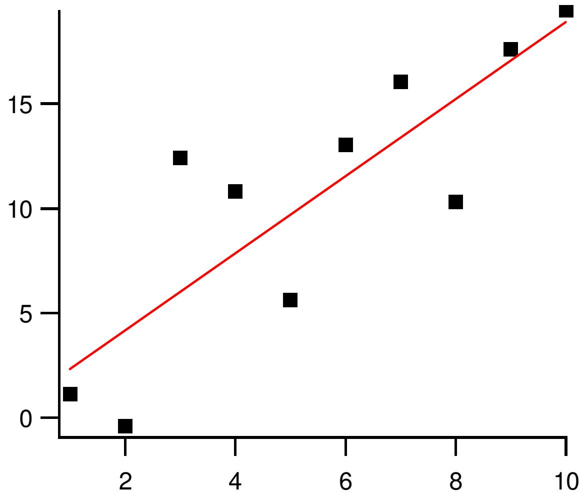
Αυτό το αποτέλεσμα είναι πολύ λογικό: Οι πληροφορίες της καμπύλης (της ευθείας) είναι πιο αξιόπιστες στο κέντρο βάρους των τιμών του οριζόντιου άξονα. Προκειμένου για ισαπέχουσες τιμές x αυτό είναι στην μέση του διαστήματος.

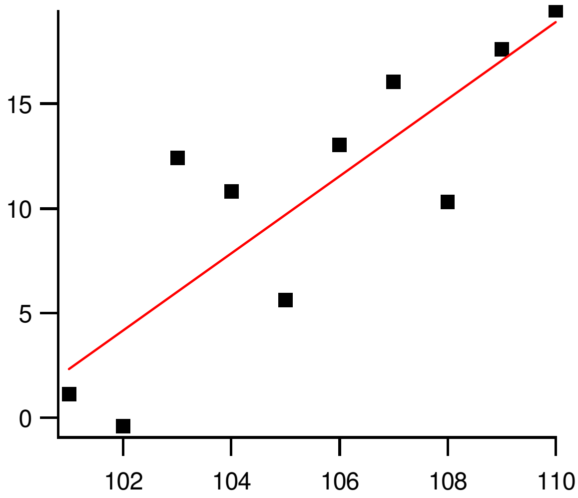
* Για x = 0, έχουμε $y_c = \beta$ και η σχέση (22) μας δίνει το σ_β^2.

Μια ποσότητα που προσδιορίζεται συχνά είναι η τετμημένη επί την αρχή, δηλ. για y = 0, $x = \gamma = -\dfrac{\beta}{\alpha}$. Το σφάλμα του γ δεν μπορεί να υπολογισθεί από την σχέση (6), αλλά, με πορεία ανάλογη αυτής που κατέληξε στην σχέση (22), προκύπτει

$$\sigma_\gamma^2 = \frac{\sigma_y^2}{D\alpha^2}\left[N\gamma^2 - 2\gamma\sum_{i=1}^{N} x_i + \sum_{i=1}^{N} x_i^2\right] \qquad (25)$$

Στα ακόλουθα διαγράμματα παριστάνονται δύο σειρές 10 δεδομένων και οι αντίστοιχες υπολογισμένες ευθείες με την μέθοδο των ελαχίστων τετραγώνων.





Οι αντίστοιχες εξισώσεις των ευθείων είναι:

y = (1.8 ± 0.4) x + (0.5 ± 3)　　　　y = (1.8 ± 0.4) x + (-18 ± 4) 10^1

x(1)	y	x(2)
1	1.14	101
2	-0.41	102
3	12.43	103
4	10.83	104
5	5.65	105
6	13.04	106
7	16.06	107
8	10.33	108
9	17.62	109
10	19.49	110

Ποσότητα	1η σειρά	2η σειρά	Ποσότητα	1η σειρά	2η σειρά
N	10	10	D	825	825
$\sum x_i$	55	1055	α	1.84206	1.84206
$\sum x_i^2$	385	111385	β	0.486667	-183.719
$\sum y_i$	106.18	106.16	σ_y	3.91831	3.91831
$\sum x_i y_i$	735.96	11354	σ_α	0.431392	0.431392
$\sum y_i^2$	1530.18	1530.18	σ_β	2.67672	45.5287
S	122.825	122.825	r	0.833693	0.833693

Πίνακες με τις τιμές των 2 σειρών δεδομένων και οι αντίστοιχες υπολογισμένες ποσότητες

Η κλίση (α), η τυπική της απόκλιση (σ_α), το άθροισμα των τετραγώνων των αποκλίσεων (S) και ο συντελεστής συσχετίσεως (r) είναι ίδια για τις δύο σειρές δεδομένων γιατί η μόνη διαφορά είναι μια μετάθεση κατά 100 των τετμημένων. Αν υπολογίσουμε την τιμή του y για x = 5 και x = 105 από την αντίστοιχη εξίσωση χρησιμοποιώντας 7 σημαντικά ψηφία, αντί για 2 που υπαγορεύουν οι αβεβαιότητες, η τιμή που βρίσκουμε είναι επίσης η ίδια: y = 9.70. Οι αντίστοιχες αβεβαιότητες σύμφωνα με την σχέση (22) υπολογίζονται ως εξής:

Από την (16) προκύπτει ότι $\sigma_y = \sqrt{\dfrac{122.8}{10-2}} = 3.9$

D = 825 και για τις δύο σειρές, ομοίως η παρένθεση στην (22) είναι 85, άρα τελικά η αβεβαιότητα του y_c είναι 1.3 και επομένως $y_c = 9.7 \pm 1.3$.

Οι παραπάνω εμπειρικές παρατηρήσεις αποδεικνύονται αν αντικαταστήσουμε σε όλες τις σχέσεις τις τιμές x_i με $x_i' = x_i + x_0$. π.χ. η ποσότητα D της σχέσεως (13γ) (ο κοινός παρονομαστής των παραμέτρων α και β) μετατρέπεται ως εξής:

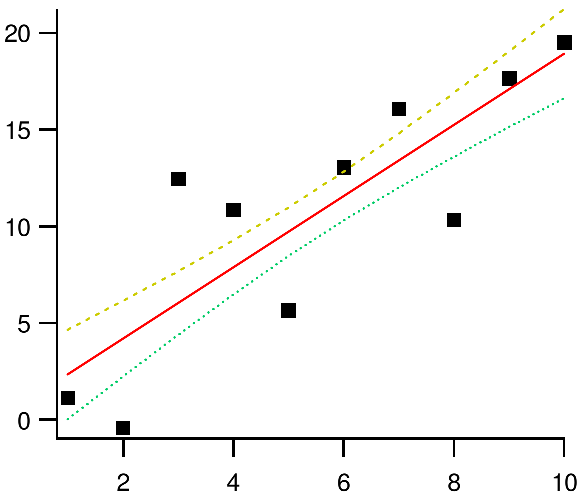
$$D' = N\sum_{i=1}^{N} x_i'^2 - \left(\sum_{i=1}^{N} x_i'\right)^2 = N\sum_{i=1}^{N}(x_i + x_0)^2 - \left(\sum_{i=1}^{N}(x_i + x_0)\right)^2 =$$

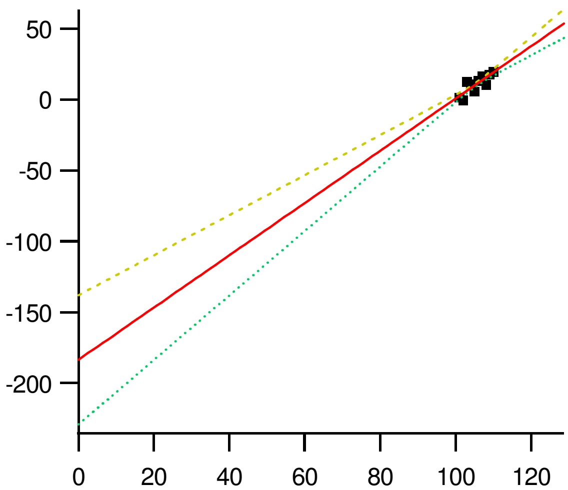
$$= N\sum_{i=1}^{N}\left(x_i^2 + 2x_i x_0 + x_0^2\right) - \left(\sum_{i=1}^{N} x_i + Nx_0\right)^2 =$$

$$= N\sum_{i=1}^{N} x_i^2 + 2Nx_0\sum_{i=1}^{N} x_i + N^2x_0^2 - \left(\sum_{i=1}^{N} x_i\right)^2 - 2Nx_0\sum_{i=1}^{N} x_i - N^2x_0^2 = N\sum_{i=1}^{N} x_i^2 - \left(\sum_{i=1}^{N} x_i\right)^2 = D$$

Αν χρησιμοποιούσαμε την λανθασμένη σχέση (23), θα προέκυπτε τυπική απόκλιση 3.4 για την πρώτη σειρά δεδομένων και 64 για την δεύτερη. Μπορεί να μην παρατηρήσουμε ότι η τιμή 3.4 είναι παράδοξη, αλλά το 64 είναι προφανώς λάθος. Το συμπέρασμα είναι ότι η σχέση υπολογισμού του σφάλματος υπολογισμένης ποσότητας μπορεί να γίνει με βάση την σχέση (8) μόνον όταν οι ποσότητες δεν έχουν συσχέτιση.

Ας χρησιμοποιήσουμε την σχέση (22) για κάθε μία από τις σειρές δεδομένων για να προσδιορίσουμε την ζώνη αβεβαιότητας. Επιβεβαιώνουμε την διαπίστωση ότι στο κέντρο βάρους των τετμημένων έχουμε την υψηλότερη ακρίβεια στην ικανότητα προβλέψεως των τεταγμένων. Επίσης βλέπουμε πόσο μεγάλο είναι το σφάλμα του β για την 2η σειρά.





Γενική περίπτωση της μεθόδου ελαχίστων τετραγώνων

Η μέθοδος ελαχίστων τετραγώνων γενικεύεται για οποιαδήποτε μορφή της συναρτήσεως f(x). Αν η εξάρτηση της f(x) από τις παραμέτρους α, β, ... δεν είναι γραμμική, τότε η $\frac{\partial f}{\partial \alpha}$ είναι συνάρτηση του α και το σύστημα που προκύπτει δεν είναι γραμμικό ως προς τις παραμέτρους α, β, ... Σε τέτοιες περιπτώσεις χρησιμοποιούνται επαναληπτικοί αλγόριθμοι διαδοχικών προσεγγίσεων για τον προσδιορισμό των τιμών των παραμέτρων οι οποίες ελαχιστοποιούν το άθροισμα των τετραγώνων των αποκλίσεων S.

Στατιστικά Βάρη:

Αν οι μετρήσεις y_i δεν έχουν τα ίδια σφάλματα, προσδίδουμε στις ακριβέστερες μετρήσεις (αυτές με μικρότερο σφάλμα) μεγαλύτερη βαρύτητα. Αυτό επιτυγχάνεται με την χρήση στατιστικών βαρών, τα οποία είναι συντελεστές κάθε όρου του αθροίσματος S και υπολογίζονται από τη σχέση $w_i = \frac{1}{\sigma_{y_i}^2}$. (26)

Τότε οι σχέσεις με τις οποίες υπολογίζονται οι παράμετροι α και β τροποποιούνται ως εξής για την πρότυπη σχέση f(x)=αx+β:

$$\alpha = \frac{1}{D'}\left(\sum w_i \sum w_i x_i y_i - \sum w_i x_i \sum w_i y_i\right) \text{ και}$$

$$\beta = \frac{1}{D'}\left(\sum w_i x_i^2 \sum w_i y_i - \sum w_i x_i \sum w_i x_i y_i\right) \text{ με } D' = \sum w_i \sum w_i x_i^2 - \left(\sum w_i x_i\right)^2. \quad (27)$$

Μια περίπτωση όπου η χρήση των στατιστικών βαρών επιβάλλεται προκύπτει όταν μετασχηματίζουμε την πρότυπη σχέση f(x) για να χρησιμοποιήσουμε μια γραμμική σχέση. π.χ. αν $f(x) = Ce^{-kx}$, μπορούμε να λογαριθμήσουμε τις μετρήσεις y_i και να προσδιορίσουμε τους συντελεστές α και β της σχέσης z=αx+β, όπου $z_i=\ln(y_i)$, από τους οποίους υπολογίζονται οι C και k ως k=-α και $C=e^{\beta}$.

Αν οι μετρήσεις y_i έχουν ίδιο σφάλμα, σ_y, αυτό δεν θα ισχύει για τα σ_{zi}. Για να διατηρηθεί η βαρύτητα των σφαλμάτων των μετρήσεων πρέπει να γίνει χρήση στατιστικών βαρών $w_i = \frac{1}{\sigma_{z_i}^2}$

με $\sigma_{z_i} = \left(\frac{\partial z_i}{\partial y_i}\right)\sigma_{y_i} = \left(\frac{\partial \ln y_i}{\partial y_i}\right)\sigma_{y_i} = \frac{1}{y_i}\sigma_y$, άρα $w_i = \frac{y_i^2}{\sigma_y^2}$.

Τελικά, οι παράμετροι δίνονται από τις σχέσεις:

$$-k = \alpha = \frac{1}{D'}\left(\sum y_i^2 \sum y_i^2 x_i \ln y_i - \sum y_i^2 x_i \sum y_i^2 \ln y_i\right) \text{ και}$$

$$\ln C = \beta = \frac{1}{D'}\left(\sum y_i^2 x_i^2 \sum y_i^2 \ln y_i - \sum y_i^2 x_i \sum y_i^2 x_i \ln y_i\right)$$

$$\text{με } D' = \sum y_i^2 \sum y_i^2 x_i^2 - \left(\sum y_i^2 x_i\right)^2. \quad (28)$$