讲　座

误差理论与实验的数学处理讲座

第五讲　曲线拟合的唯象分析方法

高 崇 寿

(北京大学物理系)

一、曲线拟合问题的分类

上一讲讨论的参数估计问题主要是直接观测物理量服从一定的统计分布，在这个统计分布中有一些确定的未知参数，需要通过直接观测量的样本对这些参数的取值进行估计．现在来看另外一类参数估计问题．

如果 y 和 x 都是直接观测量，在实验的每一次测量中都同时对 y 和 x 进行测量．如果 y 和 x 之间有函数关系，并且这个函数关系的形式是已知的，但其中有一些参数 c_i，$(i=1,\cdots,m)$ 是未知的．需要解决的问题是：如何通过 x 和 y 的样本 $(x_1^*, y_1^*),\cdots\cdots,(x_N^*, y_N^*)$ 来估计这些参数，找出 c_i 的最佳估计值 $\hat{c}_i$，以确定对这个函数关系具体形式的最佳估计．

这是最简单的曲线拟合问题，实际问题是多种多样的，可以从两方面的考察来分类：

1. 从要通过曲线拟合方法来确定的函数关系的物理来源来分析，可以分为两种情况：一种是观测量 y 与 x 之间的函数关系具体形式已知，即在过去的实验和理论工作中已把它确定下来了，这次实验要解决的问题是给出其中未定参数的最佳估计值；另一种是虽然观测量 y 与 x 之间应该存在某种函数关系，但实际上在这实验进行前，对 y 和 x 之间函数关系的具体形式并没有任何知识．换言之，需要通过实验找出它们之间联系的经验公式．

在后一种情况下，实际上可以采取的作法是假定它们之间的函数关系属于包含几个未知参量的某类函数，而把实验分析工作仍变成寻找这些参量的最佳估计值，从而可以和前一种情形同样处理．

在这种情况下，需要考虑的问题是：如果选用的函数形式与真实的形式实际上距离很远，虽然在所选择的函数范围内找到了参数的最佳估计值，但仍有可能与实际符合得不好．因此需要有一定的办法对所选用的函数形式是否妥当进行检验．其实，这种检验对第一种情形也是必要的，检验我们采用的已知函数关系是否可靠．

2. 如果 y 和 x 中有一个是离散型的物理量，或者其中一个的测量精度远远高于另一个，则可以在处理时不考虑这个离散型的量或测得很准的量的测量误差，并作为自变量来对待，另一个量作为它的函数处理．这样在整个处理过程中，只需要考虑一个量的测量误差，从而把问题大大简化．这是最常见的最简单的曲线拟合问题．

更普遍一些的问题可以从这个最简单的情形往以下几个方面推广：

(1) 自变量的测量不能忽略时，自变量和应变量的测量误差都统一考虑进去；

(2) 待估参数不只一个，并且参数之间还受一定约束条件的限制；

(3) 直接观测量多于两个，需要拟合的是多个量之间的函数关系．

当然，实际工作中遇到的问题常常需要同

时在上述几个方面都有推广．

曲线拟合中最常用的方法是最小二乘法．当用最小二乘法来处理问题时，需要注意以下两个问题：

（1）所选用的含参量的函数形式是否合适，即是否确能较好地近似描写实际物理量之间存在的函数关系；

（2）所处理的问题需要用的是否是最简单的最小二乘法．如果最简单的不合用而需要更普遍的最小二乘法，那么主要需要在哪方面推广．

这两个问题之所以重要，是因为用最小二乘法处理一个很简单的问题时常常要作不少具体计算． 事先把这两个问题考虑得比较准确，可以既保证得到符合要求的结果，又可避免大量不必要的计算．

二、最小二乘法

先考虑最简单的情形．直接测量的物理量 y 和 x 之间有函数关系 $y = f(x, c_1, \cdots c_m)$，其中有 m 个参数 $c_1, \cdots, c_m$，测量 N 次得到的观测值为 (x_i^*, y_i^*)，$i = 1, \cdots, N$．我们下面用带 * 号的表示观测值，把不带 * 号的留给随机变量．

先考虑观测值服从正态分布的情形，x_i^* 的测量误差可以略去，y_i^* 的方差为 σ_i^2，其期待值为 $\langle y_i^* \rangle = f(x_i^*, c)$（这里略去 c 的脚标，即 c 代表的是 $c_1, \cdots, c_m$． 在下面的讨论中，除要指特定的 c_j 时把脚标明显标出外，一律都采用这个简略记法）．这时，对于 y 的观测值的似然函数为

$$L = \frac{1}{(2\pi)^{N/2}\sigma_1 \cdots \sigma_N} \cdot \exp\left\{ -\frac{1}{2} \sum_{i=1}^{N} \frac{[y_i^* - f(x_i^*, c)]^2}{\sigma_i^2} \right\}. \tag{5.1}$$

注意这里由于 x_i^* 的标准误差可以忽略不计，在似然函数中，观测值 x_i^* 并不作为随机变量出现，而是以取确定值的量出现，它起的作用是确定 y_i^* 的期待值． 但是 x_i^* 和 c 又有所不同，c 是待定的参数，而 x_i^* 则取确定的值，即实际测得的值．

根据最大似然法，c 的最大似然估计值 $\hat{c}$ 应使似然函数 L 取极大值，即 $c = \hat{c}$ 时 L 取极大值．这相当于在 $c = \hat{c}$ 时使

$$\chi^2 = \sum_{i=1}^{N} \frac{1}{\sigma_i^2} [y_i^* - f(x_i^*, c)]^2 \tag{5.2}$$

取极小值，其必要条件为

$$\sum_{i=1}^{N} \frac{1}{\sigma_i^2} [y_i^* - f(x_i^*, c)] \left.\frac{\partial f(x_i^*, c)}{\partial c_j}\right|_{c=\hat{c}} = 0, \tag{5.3}$$

其中 $j = 1, \cdots, m$，共给出 m 个方程，利用这 m 个方程联立解出 $\hat{c}_1, \cdots, \hat{c}_m$，即是参数 c 的最大似然估计值．

由这些方程解出的 $\hat{c}$ 都是 y_i^* 和 x_i^* 的函数，因此 $\hat{c}$ 的方差也就可以相应地算出来（参阅上一讲）．

由于 y_i^* 服从正态分布，其期待值为 $f(x_i^*, c)$，因此（5.2）式给出的 χ^2 服从自由度 N 的 χ^2 分布，但期待值中实际上还有 m 个未知参数．对于 χ^2 的极小值，实际上是利用（5.3）式解出 m 个 c 的估计值 $\hat{c}$，再代入（5.2）式所得，这比原来仅由（5.2）式定义的 χ^2 要受更多的限制．这个限制体现在确定 $\hat{c}$ 的 m 个方程时，它使自由度减少了 m．也就是说，

$$\chi^2_{\min} = \sum_{i=1}^{N} \frac{1}{\sigma_i^2} [y_i^* - f(x_i^*, \hat{c})]^2 \tag{5.4}$$

服从自由度为 $N - m$ 的 χ^2 分布．

根据这个性质，可以对所作的曲线拟合结果作 χ^2 检验．按上述性质，$\langle \chi^2_{\min} \rangle = N - m$，即 $\chi^2_{\min}$ 应在 $N - m$ 附近，$\chi^2_{\min}$ 愈小，表明拟合的精度愈高．如果 $\chi^2_{\min}$ 的值在 $N - m$ 附近，还是合理的． 但如果 $\chi^2_{\min} \gg N - m$，则需要考虑以下的几种可能性：

（1）所采用拟合的函数形式不合适，因此虽然选择了参数的最佳估计值，拟合的精度仍不够高． 在这种情况下，需要考虑改变拟合函数的形式．实际工作中常用的办法是在原来函数基础上加以扩充，使之包含更多的待定参数．

例如当采用的函数形式 $y = c_1 + c_2 x$ 拟合得不好时，就可以考虑改用 $y = c_1 + c_2 x + c_3 x^2$ 的函数形式来进行拟合．但是如果 $\chi^2_{\min} \gg N - m$，并且两者相距太远，就应该考虑选用新的拟合函数来进行拟合．

(2) 实验中对误差估计偏小，会造成 χ^2 量的增大．

(3) 实验结果的随机涨落．

在实际工作中遇到 $\chi^2_{\min} \gg N - m$ 时，需要分析可能是上述三种情况中的哪一种．对于第二种情况，可以通过复核测量误差来判断．上述第三种情况则往往表现为少数点反常地落在意料之外的位置．如果发生这种情况，就需要考虑第三种可能性，但也并不是一定属于这种可能性．因此，在复核了测量误差之后，一般首先要考虑的是第一种可能性，并采取改进措施．

上面的讨论可以概括如下：如果观测值 y_i^* 服从正态分布，则可以从最大似然法导出参数 c 的估计值 $\hat{c}$，并应使

$$\chi^2 = \sum_{i=1}^{N} [y_i^* - f(x_i^*, c)]^2/\sigma_i^2$$

取极小值，得到结果后还应对结果作 χ^2 检验，以判断所得到的拟合是否合理．

许多实验中的观测值是服从正态分布的，但有些实验得到的观测值并不知道其是否服从正态分布，只知道其标准误差．如果不知道观测值是否服从正态分布，就不能按正态分布写出似然函数，而应按观测值实际服从的分布来给出似然函数．这样用最大似然法给出的确定 c 的估计值 $\hat{c}$ 的方程就和 (5.3) 式完全不同了．这种作法的关键在于要知道观测值满足的分布(实际计算往往相当复杂)．最小二乘法就是把观测值服从正态分布时的作法推广到观测值的标准误差为已知而服从的分布为未知的情形．

最小二乘法的基本要求就是寻求使

$$\chi^2 = \sum_{i=1}^{N} \frac{1}{\sigma_i^2} [y_i^* - f(x_i^*, c)]^2$$

取极小值参数值 $\hat{c}$，以给出实验拟合出的 y 与 x 的函数关系 $y = f(x, \hat{c})$．

从这点出发，下面的作法和公式完全和前面一样．唯一要说明的是：由于这时观测到的 y_i^* 服从的不一定是正态分布，所定出的 $\chi^2_{\min}$ 也不一定服从自由度为 $N - m$ 的 χ^2 分布．这样如由实验值实际算得的 $\chi^2_{\min}$ 值并不在 $N - m$ 附近，还有可能是由于观测值 y_i^* 服从的不是正态分布所造成的．换言之，由于在许多情况下观测值服从的分布实际上是(或者相当接近)正态分布，χ^2 检验还可以为判断这一点提供间接的信息．因此在用最小二乘法处理问题并给出拟合结果时应同时报道 χ^2 检验的结果．

下面我们看一个具体例子．

质子 p 和中子 n 的性质有很多地方相似，但所带的电荷不同，质量亦略有不同，其质量差称为电磁质量差．这种情况不仅发生在质子与中子之间，而且发生在许多基本粒子之间．现今已对许多基本粒子之间的电磁质量差进行了测量，其中 5 对是测得准的，并且可能互相之间有某种联系，结果如表 1 所示．

表 1

i	粒 子	n^*	m_i^*(MeV)
1	$e^+ - \nu$	0	0.5110034 ± 0.0000014
2	$p - n$	1	-1.29343 ± 0.00004
3	$\Sigma^+ - \Sigma^0$	2	-3.09 ± 0.09
4	$\Sigma^0 - \Sigma^-$	3	-4.88 ± 0.06
5	$\Xi^0 - \Xi^-$	4	-6.4 ± 0.6

需要拟合的是电磁质量差 m 和不同组粒子序号 n 之间的关系，n 的取值如表中所示．在这里 m 相当于 y，n 相当于 x，它取离散型的整数值，没有误差，可以直接用上面的方法．

现在要解决的是找经验规律的问题，因此对函数可能采取什么形式并没有什么限制．在这个例子中，我们选取最简单的函数形式——线性函数来进行试探，即假定 m 与 n 之间的函数关系为

$$m = c_1 + c_2 n,$$

亦即

$$m_i = c_1 + c_2 n = (c_1 - c_2) + c_2 i.$$

按照上面的作法，得出

$$\hat{c}_1 = \frac{M_0\Sigma_2 - M_1\Sigma_1}{\Sigma_0\Sigma_2 - \Sigma_1^2},\ \sigma^2(\hat{c}_1) = \frac{\Sigma_2}{\Sigma_0\Sigma_2 - \Sigma_1^2},$$

$$\hat{c}_2 = \frac{M_1\Sigma_0 - M_0\Sigma_1}{\Sigma_0\Sigma_2 - \Sigma_1^2},\ \sigma^2(\hat{c}_2) = \frac{\Sigma_0}{\Sigma_0\Sigma_2 - \Sigma_1^2},$$

其中

$$\Sigma_0 = \sum_{i=1}^{5}\frac{1}{\sigma_i^2}, \qquad \Sigma_1 = \sum_{i=1}^{5}\frac{i-1}{\sigma_i^2},$$

$$\Sigma_2 = \sum_{i=1}^{5}\frac{(i-1)^2}{\sigma_i^2},\ M_0 = \sum_{i=1}^{5}\frac{m_i^*}{\sigma_i^2},$$

$$M_1 = \sum_{i=1}^{5}\frac{m_i^*(i-1)}{\sigma_i^2}.$$

把上面表内的数值代入，得

$$\hat{c}_1 = (0.5110034 \pm 0.0000014)\mathrm{MeV},$$
$$\hat{c}_2 = -(1.80443 \pm 0.00004)\mathrm{MeV}.$$

作 χ^2 检验，得

$$\chi^2_{\min} = \sum_{i=1}^{5}\frac{1}{\sigma_i^2}[m_i^* - (c_1 - c_2) - c_2 i]^2 = 0.40.$$

由于 $\langle\chi^2_{\min}\rangle = 5 - 2 = 3 \gg 0.40$，这个结果表明用线性关系来拟合，其结果相当好。换句话说，用最小二乘法找到了一个相当好的经验公式。

从这个例子还可以看出，这两个参数实际上基本上是由 $i = 1$ 和 $i = 2$ 的两个观测值决定的。这是因为这两个观测值的误差远远小于其它观测值的误差。从这点启示我们可以在某些问题中采取一种近似作法。

这种近似作法可以概括为：如果要拟合的曲线中的独立待估参数有 m 个，观测值中有 m 个值的误差显著地小于其它值，则直接用这 m 个观测值代入函数式所给出的 m 个联立方程，解出的 c 的估计值以及根据这个解的表达式所计算出的 $\hat{c}$ 的标准误差的估计值，接近于利用最小二乘法所给出的结果。

当然，对于用这样的近似作法所给出的结果仍应进行 χ^2 检验，以考察其是否合理。如果 $\chi^2_{\min}$ 值过大，也有可能是由于对最小二乘法所给出的结果偏离过大而引起的。

这个近似方法最大的优点是简单。从上例来看，用这个近似方法可直接得出

$$\hat{c}_1 = m_1^* = (0.5110034 \pm 0.0000014)\mathrm{MeV},$$
$$\hat{c}_2 = m_2^* - m_1^* = -(1.80443 \pm 0.00004)\mathrm{MeV}.$$

上面复杂的计算过程全都省略了。该例用近似作法得出的结果实际上相当好地接近最小二乘法所给出的严格结果。因此，这个近似方法虽然不很严格，但在实际工作中却很有用，可以节省大量的计算工作量。

如果选用的拟合函数是未知参数的线性函数，最小二乘法的方程组表现为线性方程组，其解可以用标准程序作出。并且由于 $\hat{c}$ 是 y^* 的线性函数，$\hat{c}$ 的方差也很容易得到。

设拟合函数形式为

$$y = y_0(x) + \sum_{j=1}^{m} f_j(x)c_j, \qquad (5.5)$$

这时 y 对 x 的函数关系并不是线性的，但 y 对 c_j 的函数关系是线性的。将 x 的观测值 $x_i^*(i = 1, \cdots, N)$ 代入，得

$$y_i = y_0(x_i^*) + \sum_{j=1}^{m} f_j(x_i^*)c_j,$$
$$(i = 1, \cdots, N,). \qquad (5.6)$$

在下面，我们用 $\boldsymbol{y}$ 代表由 y_i 组成的列矢量，$\boldsymbol{y}_0$ 代表由 $y_0(x_i^*)$ 组成的列矢量，$\boldsymbol{c}$ 为由 c_j 组成的列矢量，F 为由 $f_{ij} = f_j(x_i^*)$ 组成的 $N \times m$ 矩阵，W 为一个 $N \times N$ 矩阵，其对角元为 $\frac{1}{\sigma_i^2}$，非对角元为零。这时上式变为

$$\boldsymbol{y} = \boldsymbol{y}_0 + F\boldsymbol{c}. \qquad (5.7)$$

最小二乘法给出的解为

$$\hat{\boldsymbol{c}} = (F^TWF)^{-1}F^TW(\boldsymbol{y}^* - \boldsymbol{y}_0). \qquad (5.8)$$

所得的 $\hat{\boldsymbol{c}}$ 的期待值为

$$\langle\hat{\boldsymbol{c}}\rangle = \boldsymbol{c}. \qquad (5.9)$$

令 $V_{\hat{c}}$ 表示对角元为 $\sigma^2(\hat{c}_i)$，非对角元为 $\mathrm{Cov}(\hat{c}_i, \hat{c}_j)$ 的协方差阵，则

$$V_{\hat{c}} = (F^TWF)^{-1} \qquad (5.10)$$

注意只有方阵才有可能有逆矩阵，行和列的数目不相等的矩阵不能有逆矩阵，因此上式不能写作 $F^{-1}W^{-1}F^{T-1}$。

这时的 χ^2 检验可以由

$$\chi^2_{\min} = (\boldsymbol{y}^* - \boldsymbol{y}_0 - F\hat{\boldsymbol{c}})^TW(\boldsymbol{y}^* - \boldsymbol{y}_0 - F\hat{\boldsymbol{c}}) \qquad (5.11)$$

和 $N-m$ 比较给出。

三、一般情形的最小二乘法

在这一节里，我们只扼要地介绍几个典型的推广，给出处理这几类问题的一般原则：

1. 考虑自变量误差的情形

如果 y_i^* 的标准误差为 σ_{y_i}，x_i^* 的标准误差为 σ_{x_i}，这时就应把 x_i^* 与 y_i^* 同样地看作是随机变量，其似然函数为

$$L=\prod_{i=1}^{N}\frac{1}{2\pi\sigma_{x_i}\sigma_{y_i}}\cdot\exp\left\{-\frac{1}{2}\frac{(x_i^*-x_i)^2}{\sigma_{x_i}^2}-\frac{1}{2}\frac{[y_i^*-f(x_i,c)]^2}{\sigma_{y_i}^2}\right\}. \quad (5.12)$$

这时观测值的随机变量为 $2N$ 个，待定参数为 $c_1,\cdots,c_m$ 和 $x_1,\cdots,x_N$ 共 $N+m$ 个。最大似然法要求的仍然是选 c 和 x，使

$$\chi^2=\sum_{i=1}^{N}\left\{\frac{(x_i^*-x_i)^2}{\sigma_{x_i}^2}+\frac{[y_i^*-f(x_i,c)]^2}{\sigma_{y_i}^2}\right\} \quad (5.13)$$

取极小值，其条件为

$$\sum_{i=1}^{N}\frac{1}{\sigma_{y_i}^2}[y_i^*-f(x_i,c)]\frac{\partial f(x_i,c)}{\partial c_j}=0 \quad (j=1,\cdots,m); \quad (5.14)$$

$$\frac{1}{\sigma_{x_i}^2}(x_i^*-x_i)+\frac{[y_i^*-f(x_i,c)]}{\sigma_{y_i}^2}\cdot\frac{\partial f(x_i,c)}{\partial x_i}=0 \quad (i=1,\cdots,N). \quad (5.15)$$

由此解出 x_i 和 c_j，就是 $\hat{x}_i$ 和 $\hat{c}_j$。当然相应地也可以讨论这些估计值的方差和作 χ^2 检验。但要注意的是 $\chi^2_{\min}$ 服从的是自由度为 $2N-(N+m)=N-m$ 的 χ^2 分布，亦即考虑了 x 的误差之后，χ^2 检验的自由度数并未改变。

2. c 之间有约束的情形

如果 $c_1,\cdots,c_m$ 之间满足 l 个约束条件，实际上在 m 个参数 $c_1,\cdots,c_m$ 之中只有 $m-l$ 个是互相独立的。原则上可以利用这 l 个约束条件消去其中的第 l 个，剩下 $m-l$ 个互相独立的参数，然后用前面的最小二乘法来求解。

但是，为了避免直接求解约束方程，常常采用拉氏乘子法。若各 c_j 之间有 l 个约束方程

$$g_k(c)=0, \quad (k=1,\cdots,l), \quad (5.16)$$

则常引入 l 个参量 $\lambda_k(k=1,\cdots,l)$，与 c_j 合在一起共 $m+l$ 个参量，再加上 $x_1,\cdots,x_N$，共得 $N+m+l$ 个参量。χ^2 量取作

$$\chi^2=\sum_{i=1}^{N}\left\{\frac{(x_i^*-x_i)^2}{\sigma_{x_i}^2}+\frac{[y_i^*-f(x_i,c)]^2}{\sigma_{y_i}^2}\right\}+\sum_{k=1}^{l}\lambda_k g_k(c). \quad (5.17)$$

由此得出 $N+m+l$ 个极值条件，其中 N 个和前面作法得到的相同，其中 l 个即约束条件，另有 m 个是把 x_i 和 c，λ 联系在一起的。在这 m 个条件中消去 λ 后还剩下 $m-l$ 个，约束条件决定了只有 $m-l$ 个 c 是互相独立的。因此极值条件中直接涉及对观测值限制的条件共 $N+m-l$ 个，在极小值处，χ^2 服从的应是自由度为 $2N-(N+m-l)=N+l-m$ 的 χ^2 分布。这和不引入拉氏乘子的结果是一致的。

3. 直接观测量多于两个的情形

若直接观测量为 x,y,z，测量 N 次得到样本 (x_i^*,y_i^*,z_i^*)，它们的标准误差分别是 σ_{x_i}，σ_{y_i}，σ_{z_i}。如果要拟合的函数关系是 $z=f(x,y,c)$，其中含有 m 个参数 c，则可以定义 χ^2 量为

$$\chi^2=\sum_{i=1}^{N}\left\{\frac{(x_i^*-x_i)^2}{\sigma_{x_i}^2}+\frac{(y_i^*-y_i)}{\sigma_{y_i}^2}+\frac{[z_i^*-f(x_i,y_i,c)]^2}{\sigma_{z_i}^2}\right\}, \quad (5.18)$$

这里出现的待定参数为 $x_i,y_i\,c_j$ 共 $2N+m$ 个。极值条件为

$$\sum_{i=1}^{N}\frac{[z_i^*-f(x_i,y_i,c)]}{\sigma_{z_i}^2}\frac{\partial f(x_i,y_i,c)}{\partial c_j}=0 \quad (j=1,\cdots,m); \quad (5.19)$$

$$\frac{(x_i^*-x_i)}{\sigma_{x_i}^2}+\frac{[z_i^*-f(x_i,y_i,c)]}{\sigma_{z_i}^2}\frac{\partial f(x_i,y_i,c)}{\partial x_i}=0 \quad (i=1,\cdots,N); \quad (5.20)$$

$$\frac{(y_i^*-y_i)}{\sigma_{y_i}^2}+\frac{[z_i^*-f(x_i,y_i,c)]}{\sigma_{z_i}^2}\frac{\partial f(x_i,y_i,c)}{\partial y_i}=0 \quad (i=1,\cdots,N). \quad (5.21)$$

亦为 $2N+m$ 个，可以定出 x_i,y_i,c_j 的估计值。这个 χ^2 量的自由度数为 $3N$，取极小值时

自由度为

$$\nu = 3N - (2N + m) = N - m.$$

如果观测值符合的是正态分布，则 $\chi^2_{\min}$ 服从自由度 $\nu = N - m$ 的 χ^2 分布，可以以此为依据来进行 χ^2 检验。

如果在 x, y, z 之间需要拟合的函数关系为

$$y = f(x, c), \quad z = g(x, c), \tag{5.22}$$

则 χ^2 量改为

$$\chi^2 = \sum_{i=1}^{N} \left\{ \frac{(x_i^* - x_i)^2}{\sigma_{x_i}^2} + \frac{[y_i^* - f(x_i, c)]^2}{\sigma_{y_i}^2} + \frac{[z_i^* - y(x_i, c)]^2}{\sigma_{z_i}^2} \right\}, \tag{5.23}$$

这里出现的待定参量为 x_i, c_j，共 $N + m$ 个，极值条件也是 $N + m$ 个，它们是

$$\sum_{i=1}^{N} \left\{ \frac{[y_i^* - f(x_i, c)]}{\sigma_{y_i}^2} \frac{\partial f(x_i, c)}{\partial c_j} + \frac{[z_i^* - g(x_i, c)]}{\sigma_{z_i}^2} \frac{\partial g(x_i, c)}{\partial c_j} \right\} = 0$$

$$(j = 1, \cdots, m), \tag{5.24}$$

$$\frac{(x_i^* - x_i)}{\sigma_{x_i}^2} + \frac{[y_i^* - f(x_i, c)]}{\sigma_{y_i}^2} \frac{\partial f(x_i, c)}{\partial x_i} + \frac{[z_i^* - g(x_i, c)]}{\sigma_{z_i}^2} \frac{\partial g(x_i, c)}{\partial x_i} = 0$$

$$(i = 1, \cdots, N). \tag{5.25}$$

这时 χ^2 量的自由度数为 $3N$，但 $\chi^2_{\min}$ 的自由度数则为

$$\nu = 3N - (N + m) = 2N - m,$$

这和上面得到的有所不同，需要注意。

四、曲线拟合的唯象分析中的几个问题

在运用曲线拟合的唯象分析方法来处理实验结果时，有几个经常遇到的实际问题，下面作一些简单的讨论和说明。

1. 如果实验中同时观测的物理量为 y 和 x，需要通过样本 (y_i^*, x_i^*) $(i = 1 \cdots, N)$ 来拟合 y 与 x 的函数关系。实际问题中首先要考察 y 与 x 是否是互相独立的，只有当它们不是互相独立时，才需要进一步考察它们之间存在什么函数关系。因此，第一步要进行 y 与 x 的相关性检验，这个检验的出发点是下述定理。

定理：如果随机变量 y 和 x 是互相独立的，则对 y 和 x 的函数 $g(y)$ 和 $f(x)$ 有

$$\langle f(x) g(y) \rangle = \langle f(x) \rangle \langle g(y) \rangle. \tag{5.26}$$

对于 y 和 x 的一切使上式两边各项都有确定值的任意函数 $g(y)$ 和 $f(x)$，如果上式都成立，则随机变量 y 和 x 是互相独立的。

这个定理给出了随机变量 y 和 x 互相独立的必要条件和充分条件。现在考察统计量

$$\begin{aligned} f^* &= \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} f(x_i^*), \\ g^* &= \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} g(y_i^*), \\ (fg)^* &= \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} f(x_i^*) g(y_i^*). \end{aligned} \tag{5.27}$$

它们的期待值分别为

$$\left. \begin{aligned} \langle f^* \rangle &= \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} \langle f(x_i^*) \rangle = \langle f(x) \rangle, \\ \langle g^* \rangle &= \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} \langle g(y_i^*) \rangle = \langle g(y) \rangle, \\ \langle (fg)^* \rangle &= \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} \langle f(x_i^*) g(y_i^*) \rangle \\ &= \langle f(x) g(y) \rangle. \end{aligned} \right\} \tag{5.28}$$

因此，统计量

$$(fg)^* - f^* g^* = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} f(x_i^*) g(y_i^*) - \frac{1}{N^2} \sum_{i=1}^{N} \sum_{j=1}^{N} f(x_i^*) g(y_j^*) \tag{5.29}$$

的期待值为

$$\langle (fg)^* - f^* g^* \rangle = \frac{N-1}{N} [\langle f(x) g(y) \rangle - \langle f(x) \rangle \langle g(y) \rangle]. \tag{5.30}$$

如果 y 和 x 是互相独立的，(5.30) 式应等于零，因此可以选取 (5.29) 式给出的统计量，看其是否接近于零，以此检验 y 和 x 是否互相独立。由于 f 和 g 是任意选取的函数，本身有量纲，为了便于比较，把它无量纲化，引入

$$\rho(f, g) = \frac{(fg)^*}{f^* g^*} - 1, \tag{5.31}$$

用 $\rho(f, g)$ 来检验 x 和 y 是否互相独立。如果 x 和 y 互相独立，则对任何函数 $f(x)$ 和 $g(y)$，$\rho(f, g)$ 的值都应接近于零。反之如果对某些

函数 $f(x)$ 和 $g(y)$，$\rho(f, g)$ 明显地不接近于零，则 y 与 x 之间有关联,即存在函数关系.

最常用的作法是取 $f(x)=x$，$g(y)=y$，所得到的 $\rho(x, y)$ 就是通常描述关联的量. 但如果在这种作法下得 $\rho(x, y)\approx 0$，为慎重起见,还应再考虑 $f(x)$ 与 $g(y)$ 的其它选取,再作检验,不要只根据 $\rho(x, y)\approx 0$ 就轻易地作出判断，认为 y 和 x 互相独立. 值得注意的是，如果同时对 $f(x)$ 和 $g(y)$ 的几种选取分别利用 $\rho(f, g)$ 作相关性检验，并不需要再作新的测量,原有的样本就已足够. 同时对几组不同的 $f(x)$ 和 $g(y)$ 的选取作相关性检验,还可以对 y 与 x 的函数关系的形式类型给出一定的启示. 因此,一般说来,在作相关性检验时,应根据需要,选取几组不同的 $f(x)$ 和 $g(y)$ 来进行.

2. 在实际工作中用最小二乘法作曲线拟合时，常常遇到的情况是观测值的标准误差并不知道. 在这种情况下,可以把最小二乘法的作法适当调整. 下面就最简单的情形作些说明.

实验中直接观测量为 x 和 y，x 的误差很小可以略去,y 的误差未知. 但是如果这 N 次测量用的是相同的仪器和方法，并且所考察的物理问题也不会带来误差的迅速变化，则可以假定 y 的 N 次测量误差虽然未知，但却是相同值，即 $\sigma_i=\sigma$. 这样只需在 (5.2) 式中将 σ_i 以一个公共的未知的 σ 代入,即得

$$\chi^2=\frac{1}{\sigma^2}\sum_{i=1}^{N}[y_i^*-f(x_i^*, c)]^2. \quad (5.32)$$

χ^2 取极小值的条件[即 (5.3) 式]变为

$$\sum_{i=1}^{N}[y_i^*-f(x_i^*, c)]\left.\frac{\partial f(x_i^*, c)}{\partial c_j}\right|_{c=\hat{c}}=0, \quad (5.33)$$

其中 $j=1,\cdots, m$ 共给出 m 个方程，可解出 $\hat{c}_1,\cdots,\hat{c}_m$. 值得注意的是在 (5.33) 式中并不出现未知的 σ，因此得到 $\hat{c}_1,\cdots,\hat{c}_m$ 与 σ 无关，亦即由此仍能得到拟合曲线.

但是在进一步作 χ^2 检验时受到了限制，因为这时

$$\chi^2_{\min}=\frac{1}{\sigma^2}\sum_{i=1}^{N}[y_i^*-f(x_i^*, \hat{c})]^2, \quad (5.34)$$

其中包含未知量 σ^2，这就使我们难以将 $\chi^2_{\min}$ 去和 $N-m$ 作比较来检验所作拟合是否合理.

但是我们可以作一些相对比较，因为

$$\sigma^2\chi^2_{\min}=\sum_{i=1}^{N}[y_i^*-f(x_i^*, \hat{c})]^2 \quad (5.35)$$

是完全确定的统计量，它的值应在 $(N-m)\sigma^2$ 附近,并且愈小愈好. 如果我们作了两种拟合，其中待定参数的数目 m 是相同的，则我们可以对这两种拟合分别计算出统计量，其值小的拟合得较好.

更一般情形是，引入如下统计量代替 (5.35) 式:

$$\frac{1}{N-m}\sigma^2\chi^2_{\min}=\frac{1}{N-m}\sum_{i=1}^{N}[y_i^*-f(x_i^*, \hat{c})]^2. \quad (5.36)$$

如果 y_i^* 服从正态分布，则 (5.36) 式期待值为 σ^2，即它的值应在 σ^2 附近，并且愈小愈好. 这样我们可以作几种拟合，即使其中待定参数的数目 m 取不同值，也可以根据统计量 (5.36) 式来判断合理的程度. 选取 (5.36) 式给出值最小的拟合作为最佳拟合. 这种作法在 $N\gg m$ 的情形是相当可靠的.

在经过这样比较而选出最佳拟合之后，可以利用 (5.36) 式给出 y 的测量值 y_i^* 的标准误差 σ 的估计值，因为 (5.36) 式的期待值为 σ^2，因此有估计值

$$\hat{\sigma}^2=\frac{1}{N-m}\sum_{i=1}^{N}[y_i^*-f(x_i^*, c)]^2. \quad (5.37)$$

这样，在作曲线拟合的同时也把 y 的未知的测量误差给出了估计值.

要强调的是，这种作法的关键是确实找到一个最佳拟合. 由于观测值 y_i^* 的误差未知,不能像通常那样用 χ^2 检验来检验所作拟合的合理性,只能利用几种拟合方案相比较的办法,找出其中最合理的一种来作为最佳拟合. 而利用 (5.37) 式给出观测值 y_i^* 的标准误差的估计值则强烈地依赖于所找到的拟合确是最佳拟合. 因此,为避免带来错误,在这种情况下应尽可能用不止一种拟合方案来作，通过相比较来保证得到的拟合可以认为是最佳拟合.

最后讨论一下如果得到的拟合实际上并不是最佳拟合，其影响表现在哪里．这时所得的拟合函数关系与 y 和 x 实际的关系有所偏离，应表现在作 χ^2 检验时 $\chi^2_{\min}$ 值比 $N-m$ 要大得多．但是由于 σ^2 是未知的，$\chi^2_{\min}$ 的值无法与 $N-m$ 直接比较，从而无法作这方面的检验．最后利用（5.37）式来估计标准误差则直接依赖于 $\langle\chi^2_{\min}\rangle=N-m$．因此，如果所得的拟合不是最佳拟合，则直接的后果是利用（5.37）式给出的标准误差估计值比实际的要偏大，真实的值有可能比用（5.37）式估计出的值小．

3．在用最小二乘法作曲线拟合时，如果对所得结果进行 χ^2 检验，$\langle\chi^2_{\min}\rangle\gg N-m$，则有可能是由于观测值 y_i^* 服从的不是正态分布引起的．为了进一步核实是否是这个因素引起的，有时还需要设法作进一步的检验，这里就不仔细讨论了．

在用最小二乘法作曲线拟合时，给出了各参数 c_j 的估计值 $\hat{c}_j$，并得出它们的方差和协方差的估计值．由于一般说来各 $\hat{c}_j$ 之间的协方差的估计值不为零，因此不能把各 $\hat{c}_j$ 当作互相独立的量来估计所得拟合曲线的误差（即利用所得拟合曲线由 x 值预言 y 值时的误差），这是常常容易被忽视的一点．

磁 性 测 量 讲 座

第一讲　铁磁共振的实验方法及其在磁性测量中的应用

廖绍彬　周丽年　尹光俊
（北京大学物理系）

一、铁磁共振及其实验方法

1. 张量磁化率

磁性物体的磁化率定义为磁化强度矢量与其内部磁场强度矢量之比．在稳恒磁场下，磁化率为一实数；在交变磁场下，磁化率一般是一复数，即 $\chi=\chi'-i\chi''$，其中 χ' 和 χ'' 分别称为磁化率的实数部分和虚数部分．但是当磁性物体受到稳恒磁场和微波磁场的同时作用时，微波磁化率（定义为微波磁化强度矢量和样品内微波磁场矢量之比）则是一张量．对于椭球形样品，当外加稳恒磁场沿椭球体的主轴方向时，张量磁化率 $\overleftrightarrow{\chi}$ 的具体表示式一般为

$$\overleftrightarrow{\chi}=\frac{\boldsymbol{m}}{\boldsymbol{h}}=\begin{pmatrix}\chi & -i\chi_a & 0\\ i\chi_a & \chi & 0\\ 0 & 0 & 0\end{pmatrix},$$

其中 χ，χ_a 分别称为张量磁化率的对角组元和非对角组元，它们都是复数，即 $\chi=\chi'-i\chi'$ 和 $\chi_a=\chi_a'-i\chi_a''$．另外，人们经常将微波磁化强度 $\boldsymbol{m}$ 与外加微波磁场 $\boldsymbol{h}_e$ 之比称为外张量磁化率，而将前述微波磁化强度 $\boldsymbol{m}$ 与样品内微波磁场 $\boldsymbol{h}$ 之比称为内张量磁化率，分别表示为 $\overleftrightarrow{\chi}^e$ 和 $\overleftrightarrow{\chi}^i$ 或 $\overleftrightarrow{\chi}$．

对于主轴与外加稳恒磁场同为 z 轴的椭球样品，外张量磁化率的具体表示式一般为

$$\overleftrightarrow{\chi}^e=\frac{\boldsymbol{m}}{\boldsymbol{h}_e}=\begin{pmatrix}\chi^e & -i\chi_a^e & 0\\ i\chi_a^e & \chi^e & 0\\ 0 & 0 & 0\end{pmatrix},$$

其中 χ^e，χ_a^e 分别称为外张量磁化率的对角组元和非对角组元，它们也都是复数，即 $\chi^e=\chi^{e\prime}-i\chi^{e\prime\prime}$ 和 $\chi_a^e=\chi_a^{e\prime}-i\chi_a^{e\prime\prime}$．

$\overleftrightarrow{\chi}^e$ 和 $\overleftrightarrow{\chi}$ 是不相同的，但又是相互紧密相关的．若知道 $\overleftrightarrow{\chi}^e$，则可求出 $\overleftrightarrow{\chi}$；反之，知道 $\overleftrightarrow{\chi}$ 也可求出 $\overleftrightarrow{\chi}^e$[1,2]．

2. 铁磁共振