附錄　誤差估計及最小平方法

一、誤差估計

對於實驗誤差的大小，通常有兩種表示方法，即標準差（σ，standard deviation）及變異數（σ^2，variance）。

1. 標準差 σ：

假設一組數據中有 N 個測量值，則標準差 σ 的定義如下：

$$\sigma = \sqrt{\left\{ \frac{\sum (Y_i - Y_i^*)^2}{N-1} \right\}} \tag{1}$$

其中，Y_i 代表測量值，Y_i^* 代表平均值。

2. 變異數 σ^2：

另一種常用的誤差估計方式是變異數，其定義為標準差之平方，即 σ^2。科學家通常較喜歡使用標準差，因為標準差的單位與測量值相同。而變異數的優點則在於它的加成性，也就是說，一個系統中的總變異數（σ_t^2，total variance），等於該系統中各獨立變因所造成之誤差的變異數的總和。

$$\sigma_t^2 = (\sigma_1)^2 + (\sigma_2)^2 + (\sigma_3)^2 + \ldots\ldots\ldots \tag{2}$$

二、最小平方法

最小平方法的目的係在獲得一組測量值 X_i、Y_i 之後，藉此求取回歸線（regression line），如附圖 1 所示。令最精確的直線式為 $Y_i' = a X_i + b$，則

$$E_i = Y_i - Y_i' \tag{3}$$

式中 E_i 稱為餘數（residual），為實測值（Y_i）減除回歸（Y_i'）後之剩餘。

$$E_i = Y_i - aX_i - b \tag{4}$$

令 s 為餘數平方和，如式(5)所示：

$$s = \sum_{i=1}^{n} {E_i}^2 = \sum_{i=1}^{n} (Y_i - aXi - b)^2 \tag{5}$$

最小方差法的功用即係在選擇 a、b，俾使測定 n 次的 s 呈最小值，因此令 s 呈最小值的條件如下：

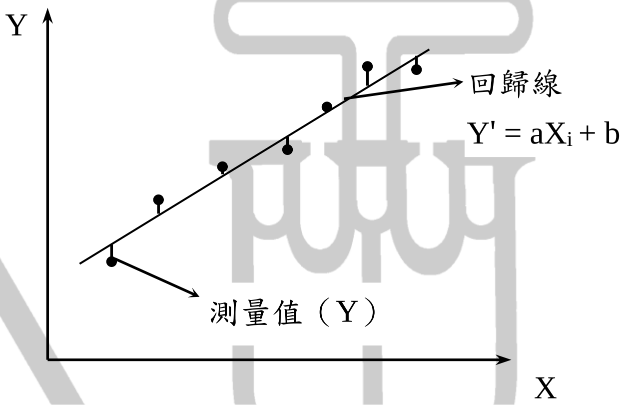
$$\frac{\partial s}{\partial a} = -2\sum_{i=1}^{n} X_i (Y_i - aX_i - b) = 0 \tag{6}$$

$$\frac{\partial s}{\partial b} = -2\sum_{i=1}^{n} (Y_i - aX_i - b) = 0 \tag{7}$$

解(6)(7)兩聯立方程式即可求出常數 a，b

$$a = \frac{(n)(\sum Y_i \times X_i) - (\sum Y_i)(\sum X_i)}{(n)(\sum X_i^{\ 2}) - (\sum X_i)^2} \tag{8}$$

$$b = \frac{(\sum Y_i)(\sum X_i^{\ 2}) - (\sum Y_i \times X_i)(\sum X_i)}{(n)(\sum X_i^{\ 2}) - (\sum X_i)^2} \tag{9}$$



附圖 1　測量值與回歸線