

ZADANIE 57

WYZNACZANIE WSPÓŁCZYNNIKÓW ZAŁAMANIA ŚWIATŁA PROMIENI ZWYCZAJNEGO I NADZWYCZAJNEGO W RUTYLU

Cel ćwiczenia

Zasadniczym celem ćwiczenia jest pomiar współczynników załamania światła promieni zwyczajnego i nadzwyczajnego z widmowej lampy sodowej otrzymanych w kryształach rutyłu (minerał – dwutlenek tytanu – TiO_2). Dodatkowo, i przy wykorzystaniu widmowej lampy rtęciowej, wykonywana jest kalibracja spektroskopu i wyznaczana jest długość fali, przy której mierzone są oba współczynniki.

Masz do dyspozycji

- goniometr;
- pryzmat z rutyłu;
- lampę widmową.

Wykonanie ćwiczenia

- zapoznaj się z budową i obsługą goniometru;
- przygotuj goniometr do pomiarów;
- ostrożnie przetrzyj ręcznikiem papierowym lub chusteczką powierzchnie łamiące pryzmatu, aby usunąć odciski palców lub inne zabrudzenia; staraj się **nie** chwytać pryzmatu za te powierzchnie;
- włącz lampę rtęciową i wykonaj pomiar kąta łamiącego pryzmatu z rutyłu;
- znajdź w widmie lampy rtęciowej promienie zwyczajne i nadzwyczajne różnych linii widmowych i sprawdź ich polaryzację za pomocą nasadki z polaryzatorem umieszczonym na lunecie;
- wykonaj pomiary kątów najmniejszego odchylenia obu promieni dla różnych linii widma rtęci;
- powtórz pomiary kąta najmniejszego odchylenia obu promieni pojedynczej linii widma sodu.

Literatura przedmiotu

- Sz. Szczeniowski, *Fizyka doświadczalna* Część IV – Optyka, Warszawa, 1983;
- J. Ginter, *Fizyka fal, Fale w ośrodkach jednorodnych, Fale w ośrodkach niejednorodnych*, Wydawnictwo Naukowe PWN, Warszawa, 1993;
- D. Halliday, R. Resnick, *Fizyka t. I, II*, Warszawa 2001, §46.1 - 46.5;
- H. Szydłowski, *Pracownia fizyczna wspomagana komputerem*, Wydawnictwo Naukowe PWN, Warszawa, szereg wydań w latach 2003 ÷ 2012;
- A. Zięba, *Analiza danych w naukach ścisłych i technice*, Wydawnictwo Naukowe PWN, Warszawa, 2013.

ZADANIE 57

WYZNACZANIE WSPÓŁCZYNNIKÓW ZAŁAMANIA ŚWIATŁA
PROMIENI ZWYCZAJNEGO I NADZWYCZAJNEGO W RUTYLU**Cel ćwiczenia**

Zasadniczym celem ćwiczenia jest pomiar współczynników załamania światła promieni zwyczajnego i nadzwyczajnego z widmowej lampy sodowej otrzymanych w kryształach rutylu (minerał – dwutlenek tytanu – TiO_2). Dodatkowo, i przy wykorzystaniu widmowej lampy rtęciowej, wykonywana jest kalibracja spektroskopu i wyznaczana jest długość fali, przy której mierzone są oba współczynniki.

Wprowadzenie teoretyczne

Rutyl należy do ciał dwójłomnych, w których wiązka światła przy padaniu na płaszczyznę takiego kryształu zostaje rozdzielona na dwie wiązki spolaryzowane w płaszczyznach wzajemnie prostopadłych. Wiązki te nazywamy promieniami zwyczajnymi i nadzwyczajnymi. Dlatego też przy przejściu wiązki światła z lampy widmowej przez pryzmat rutylowy uzyskujemy dla każdej linii światła dwa prążki położone w dość znacznej kątowej odległości od siebie. Stanowi to zasadniczą różnicę w porównaniu z obrazem uzyskanym za pomocą zwykłego pryzmatu, np. szklanego, dającego tylko jeden prążek. Promienie uzyskiwane po przejściu przez kryształ dwójłomny noszą nazwę zwyczajnego i nadzwyczajnego. Powstają one w wyniku rozdzielenia frontu falowego we wnętrzu kryształu, z których jeden, zwany zwyczajnym, zachowuje się jak dobrze znane nam z życia codziennego promienie świetlne, drugi zaś, nadzwyczajny, burzy nasze doświadczenie życiowe.

Kąt łamiący pryzmatu i kąt odchylenia promieni w pryzmacie

Goniometr jest przyrządem pozwalającym mierzyć kąty, a jeśli dodatkowo wyposażymy go w pryzmat, to otrzymamy spektroskop, czyli przyrząd do pomiaru długości fali światła. Wykorzystanie takiego spektrometru wymaga jednak uprzedniej jego kalibracji, czyli wyznaczenia zależności między długością fali λ a wielkością mierzoną za pomocą goniometru. W układzie goniometru z pryzmatem naturalnym wyborem takiej wielkości jest odchylenie δ promienia od jego pierwotnego kierunku, a więc wyznaczenie krzywej $\delta = f(\lambda)$ tzw. dyspersji kątowej. Inny wybór odwołuje się np. do kąta mierzącego odległość rozważanej linii od innej, uprzednio wybranej, linii. W ćwiczeniu wykorzystywany jest współczynnik załamania n wyznaczany z minimalnego kąta δ_{\min} odchylenia promienia w pryzmacie z rutylu, a co za tym idzie, krzywej $n = f(\lambda)$.

Związek między współczynnikiem załamania n a kątem δ_{\min} najmniejszego odchylenia wymaga znajomości kąta łamiącego φ pryzmatu, dlatego najpierw zajmiemy się wyznaczeniem tego kąta. Definicje kątów i rozmaite relacje między nimi przy padaniu wiązki na kąt łamiący i jednocześnie na obie sąsiednie ściany ukazuje Rysunek 1. W pomiarach za pomocą goniometru łatwo jest zmierzyć kąt ψ między promieniami odbitymi od obu powierzchni pryzmatu, więc naszym celem będzie wyznaczenie związku między tym kątem a kątem łamiącym.

Kąt $\sphericalangle ADC$ trójkąta ADC wynosi

$$\sphericalangle ADC = 180^\circ - \varphi_1 - \chi_1,$$

ale skoro

$$\chi_1 = 180^\circ - 2\alpha - \varphi_1,$$

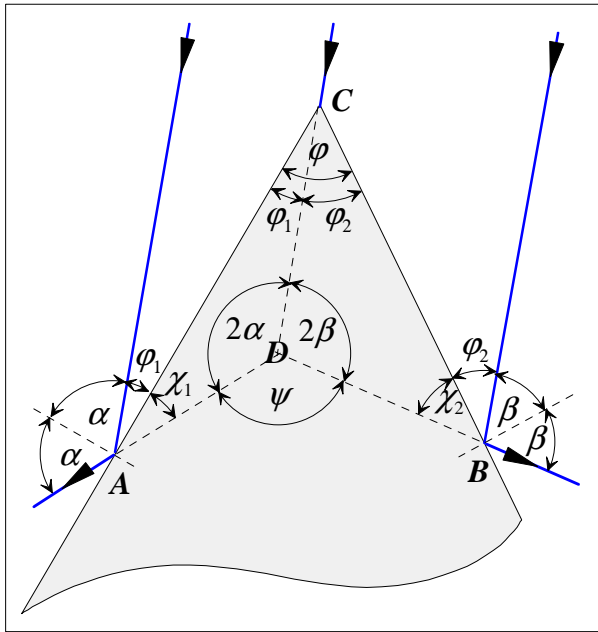
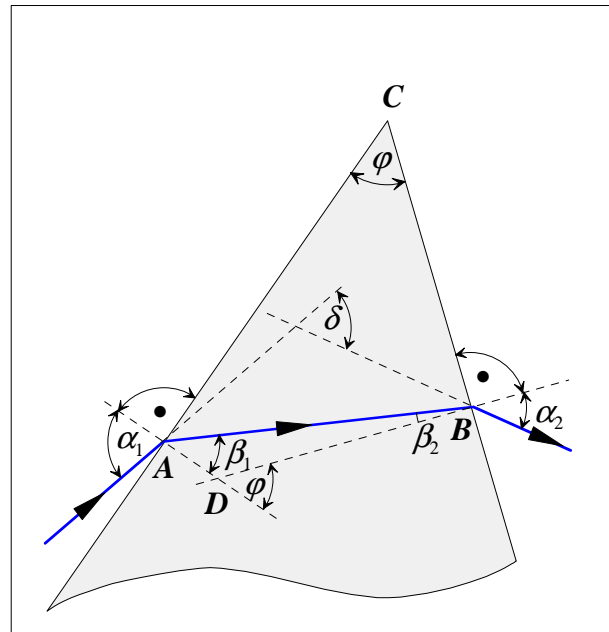
więc

$$\sphericalangle ADC = 2\alpha,$$

jak zostało to zaznaczone na rysunku. Podobnie, dla kąta $\sphericalangle BDC$ znajdujemy $\sphericalangle BDC = 2\beta$,

a z rysunku widzimy także, że

$$\psi = 360^\circ - 2\alpha - 2\beta$$

Rys. 1. Wyznaczanie kąta łamiącego φ Rys. 2. Wyznaczanie kąta odchylenia δ

i jednocześnie:

$$\alpha = 90^\circ - \varphi_1$$

oraz

$$\beta = 90^\circ - \varphi_2,$$

więc:

$$\psi = 360^\circ - 2\alpha - 2\beta = 360^\circ - 2(90^\circ - \varphi_1) - 2(90^\circ - \varphi_2) = 2\varphi_1 + 2\varphi_2 = 2\varphi,$$

a to prowadzi do poszukiwanego związku:

$$\varphi = \frac{1}{2}\psi.$$

Zakładając, że kąt łamiący φ pryzmatu jest znany, wyznaczmy współczynnik załamania szkła, z którego wykonany jest pryzmat. Definicje kątów i rozmaite między nimi relacje ukazane są na Rysunku 2. Ponieważ kąt zewnętrzny w trójkącie ABD jest równy kątowi łamiącemu pryzmatu φ (kąt ten ma ramiona prostopadłe do ścian pryzmatu) – otrzymujemy następujące zależności:

$$\varphi = \beta_1 + \beta_2$$

oraz:

$$\delta = \alpha_1 - \beta_2 + \alpha_2 - \beta_2 = \alpha_1 + \alpha_2 - \varphi.$$

O tym, pod jakim kątem α_2 promień opuści pryzmat decyduje kąt α_1 , pod jakim promień pada na pryzmat. Wyznamy teraz zależność między kątem α_2 a kątem α_1 . Z prawa Snella $\sin\alpha_1 = n \sin\beta_1$ dla płaszczyzny, przez którą promień wchodzi do pryzmatu, znajdujemy

$$\beta_1 = \arcsin\left(\frac{1}{n} \sin\alpha_1\right),$$

a z prawa Snella $\sin\alpha_2 = n \sin\beta_2$ dla płaszczyzny, przez którą promień wychodzi, otrzymujemy:

$$\alpha_2 = \arcsin(n \sin\beta_2).$$

Ponieważ

$$\beta_2 = \varphi - \beta_1 = \varphi - \arcsin\left(\frac{1}{n} \sin\alpha_1\right),$$

więc

$$\alpha_2 = \arcsin\left(n \sin\left(\varphi - \arcsin\left(\frac{1}{n} \sin\alpha_1\right)\right)\right),$$

a to prowadzi do kąta odchylenia δ jako funkcji kąta padania α_1 :

$$\delta = \alpha_1 + \arcsin \left(n \sin \left(\varphi - \arcsin \left(\frac{1}{n} \sin \alpha_1 \right) \right) \right) - \varphi.$$

Przykładowy przebieg tej zależności, dla $n = 1,4$ oraz $\varphi = 45^\circ$, przedstawia Rysunek 3, na którym widać minimum w zależności kąta odchylenia δ od kąta padania α_1 . Wyznaczenie, standardowymi metodami, wartości δ_{\min} prowadzi do wniosku, że pojawia się ona wtedy, gdy bieg promienia w pryzmacie jest symetryczny względem dwusiecznej kąta łamiącego pryzmatu, tzn. gdy $\alpha_1 = \alpha_2$ oraz $\beta_1 = \beta_2$, co pociąga:

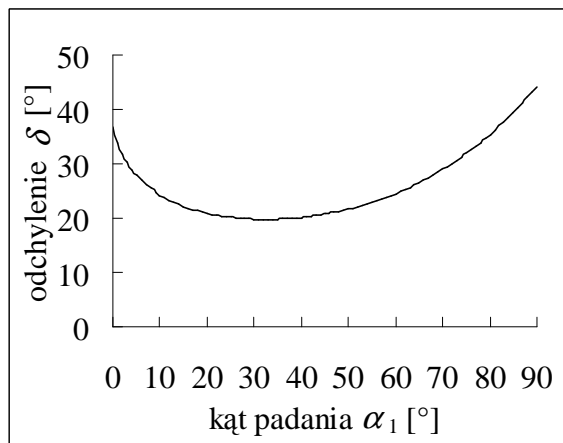
$$\beta_1 = \frac{1}{2} \varphi$$

oraz:

$$\alpha_1 = \frac{1}{2} (\delta_{\min} + \varphi).$$

Prowadzi to do następującego wyrażenia na współczynnik załamania:

$$n = \frac{\sin \alpha_1}{\sin \beta_1} = \frac{\sin \left(\frac{1}{2} (\delta_{\min} + \varphi) \right)}{\sin \left(\frac{1}{2} \varphi \right)}.$$



Rys. 3. Minimalny kąt odchylenia

Czytelnikowi pozostawiamy dowód, że faktycznie warunki $\beta_1 = \beta_2$ oraz $\alpha_1 = \alpha_2$ wyznaczają minimum kąta odchylenia.

Masz do dyspozycji

- goniometr;
- pryzmat z rutyłu;
- lampę widmową sodową i rtęciową.

Wykonanie ćwiczenia

- zapoznaj się z budową i obsługą goniometru;
- przygotuj goniometr do pomiarów;
- ostrożnie przetrzyj ręcznikiem papierowym lub chusteczką powierzchnię łamiącego pryzmatu, aby usunąć odciski palców lub inne zabrudzenia; staraj się **nie** chwytać pryzmatu za te powierzchnie;
- włącz lampę rtęciową i wykonaj pomiar kąta łamiącego pryzmatu z rutyłu;
- znajdź w widmie lampy rtęciowej promienie zwyczajne i nadzwyczajne różnych linii widmowych i upewnij się, że istotnie masz do czynienia z promieniami zwyczajnymi i nadzwyczajnymi sprawdzając ich polaryzację za pomocą nasadki z polaryzatorem umieszczonym na lunecie;
- wykonaj pomiary kątów najmniejszego odchylenia obu promieni dla różnych linii widma rtęci;
- powtórz pomiary kąta najmniejszego odchylenia obu promieni pojedynczej linii widma sodu.

Analiza wyników pomiarów

Analiza danych winna zawierać następujące elementy:

- ustalenie realistycznych, dopuszczalnych błędów granicznych wielkości bezpośrednio mierzonych i wyznaczenie odpowiadających im niepewności standardowych – pamiętaj, że zdolność rozdzielcza przyrządu nie musi gwarantować sensownych błędów granicznych (oczywiście, możesz też od razu oszacować niepewności standardowe, bez przechodzenia przez etap błędów granicznych);
- prezentację ocen wszelkich wielkości wraz z niepewnościami standardowymi uwzględniającymi niepewności statystyczne i niepewności wynikające z dokładności przyrządów;

- wyznaczenie, wraz z niepewnościami, współczynników załamania promieni zwyczajnych i nadzwyczajnych dla linii widmowych rtęci;
- kalibrację goniometru dla promienia zwyczajnego i nadzwyczajnego, czyli wyznaczenie dla każdego z promieni niezależnie, ocen nieznanymi stałymi, wraz z ich niepewnościami i korelacjami, w związku dyspersyjnym przedstawiającym zależność współczynnika załamania n od długości fali λ w fenomenologicznych modelach – Cauchy’ego:

$$n = A_0 + \frac{A_1}{\lambda^2}$$

oraz (uproszczonym) Sellmeiera:

$$n^2 - 1 = \frac{B_1 \lambda^2}{\lambda^2 - C_1};$$

prezentowane zależności nie przedstawiają liniowej relacji między współczynnikiem załamania a długością fali, dlatego zaleca się rozważenie możliwości wyboru nowych zmiennych, aby po transformacji zależności te przyjęły postać liniową, co ułatwia wyznaczenie współczynników;

- wybór modelu lepiej odtwarzającego dane doświadczalne;
- wyznaczenie współczynników załamania promienia zwyczajnego i nadzwyczajnego dla zmierzonej linii sodu i porównanie uzyskanych wartości z danymi literaturowymi;
- wyznaczenie, z krzywych kalibracyjnych obu promieni i zmierzonych wartości współczynników załamania, długości fali, wraz z niepewnościami, wybranej linii widmowej sodu;
- wyznaczenie, z obu wartości długości fali dla promienia zwyczajnego i nadzwyczajnego, najlepszej wartości długości fali, wraz z niepewnością, wybranej linii widmowej sodu i porównanie uzyskanej wartości z danymi literaturowymi.

Istotne, w Twej opinii, kroki analizy danych podsumuj stosownymi tabelami z wynikami pośrednimi i zilustruj odpowiednimi rysunkami.

Jeśli na którymś z etapów analizy danych uznasz za niezbędne dopasowanie modelowej zależności do danych metodą najmniejszych kwadratów wystarczy, że podasz jawną formę wielkości minimalizowanej, jako że postać ta jednoznacznie wyznacza oceny poszukiwanych współczynników modelowej zależności wraz z ich niepewnościami i nie musisz cytować stosownych wzorów dla tych obiektów.

Dla ambitnych. Jeśli dysponujesz programem do dopasowywania krzywych, spróbuj swych sił i wyznacz oceny nieznanymi parametrów i ich niepewności dla bardziej rozbudowanych zależności dyspersyjnych – Cauchy’ego (model Cauchy’ego można zamienić na model liniowy, więc tu wystarczy nawet arkusz kalkulacyjny typu Excel):

$$n = A_0 + \frac{A_1}{\lambda^2} + \frac{A_2}{\lambda^4}$$

oraz Sellmeiera:

$$n^2 - 1 = \frac{B_1 \lambda^2}{\lambda^2 - C_1} + \frac{B_2 \lambda^2}{\lambda^2 - C_2}.$$

Dodatkowe uwagi odnośnie do raportu

W raporcie zamieść, w stosownie dobranych tabelach, wszystkie surowe wyniki wykonanych pomiarów tak, aby sięgając jedynie do raportu i bez potrzeby odwoływania się do protokołu z doświadczenia można było wykonać pełną i niezależną analizę Twych danych. Zadbaj o wierne przeniesienie zmierzonych wartości do raportu.

Nim przygotujesz raport, zaznajom się z uwagami zawartymi w opracowaniu *Instrukcja - Jak pisać raport końcowy* oraz z przykładową realizacją tych uwag w postaci *Przykładowy raport końcowy*. Materiały te zamieszczone są na stronie <http://anipw.igf.fuw.edu.pl> Pracowni wstępnej. Wymagania ukazane w tych opracowaniach będą bezwzględnie egzekwowane przy sprawdzaniu Twego raportu. W szczególności pamiętaj o konwencji odnoszącej się do precyzji przedstawiania niepewności, a co za tym idzie, również wartości wielkości zmierzonej.

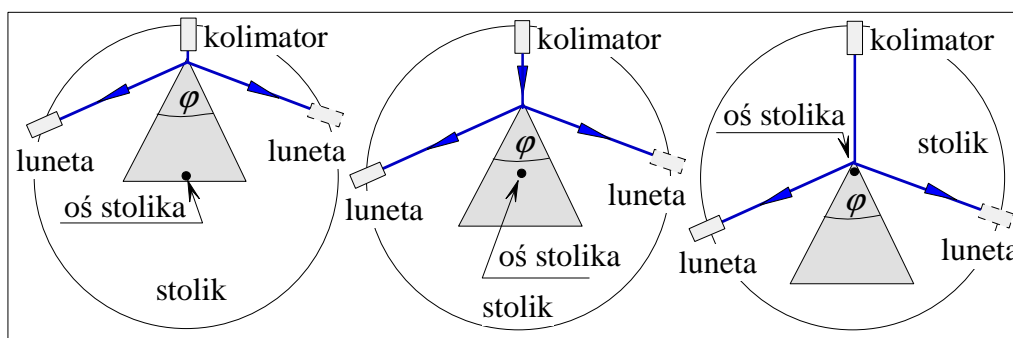
Absolutnie zalecane jest także świadome przyjrzenie się redakcji tekstu a także tabel, rysunków i wzorów, sposobów ich numerowania, tytułowania i opisywania w dowolnym, ale wydanym przez uznane wydawnictwo, akademickim podręczniku do fizyki, jak również zajrzenie do kilku publikacji w różnych czasopismach naukowych, co może ułatwić podjęcie decyzji co do podziału Twojego raportu na części.

Literatura przedmiotu

- Sz. Szczeniowski, *Fizyka doświadczalna Część IV – Optyka*, Warszawa, 1983;
- J. Ginter, *Fizyka fal, Fale w ośrodkach jednorodnych, Fale w ośrodkach niejednorodnych*, Wydawnictwo Naukowe PWN, Warszawa, 1993;
- D. Halliday, R. Resnick, *Fizyka t. I, II*, Warszawa 2001, §46.1 - 46.5;
- H. Szydłowski, *Pracownia fizyczna wspomagana komputerem*, Wydawnictwo Naukowe PWN, Warszawa, szereg wydań w latach 2003 ÷ 2012;
- A. Zięba, *Analiza danych w naukach ścisłych i technice*, Wydawnictwo Naukowe PWN, Warszawa, 2013.

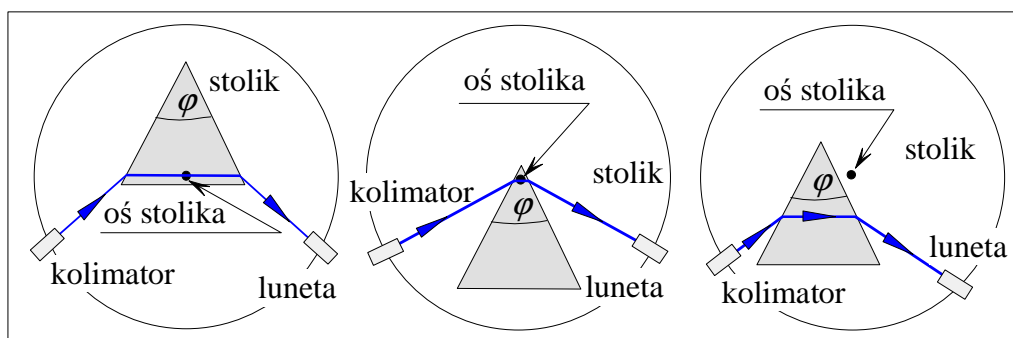
Pytania i zadania definiujące wymagania do ćwiczenia

Problem 1. Przy pomiarze kąta łamiącego pryzmatu (jak na Rysunku 1), pryzmat umieszczamy na stoliku tak, że krawędź kąta łamiącego znajduje się na osi kolimatora, aby wiązkę światła z kolimatora rozdzielić na dwie. Możemy jednak pryzmat dowolnie przesuwając równoległe do siebie na stoliku, jak na Rysunku 4, umieszczając go bliżej lub dalej od kolimatora. Czy dla pomiarów goniometrem ma znaczenie, jakie to będzie miejsce?



Rys. 4. Pomiar kąta łamiącego - przykłady ustawień pryzmatu na stoliku

Problem 2. Przy pomiarze kąta najmniejszego odchylenia na stoliku pryzmat możemy położyć w dowolnym miejscu, w wyniku czego wiązka światła z kolimatora może padać bliżej kąta łamiącego lub dalej od niego. Możemy też pryzmat położyć na boku stolika. Przykłady takich ustawień ukazuje Rysunek 5. Czy miejsce pryzmatu na stoliku ma znaczenie dla pomiarów goniometrem?



Rys. 5. Pomiar kąta odchylenia - przykłady ustawień pryzmatu na stoliku

Problem 3. Co oznacza termin *widmo liniowe*?

Problem 4. Na czym polega zjawisko dyspersji światła?

Problem 5. Gdy na pryzmat pada wiązka światła złożona z fal o dwóch różnych długościach, to po przejściu przez pryzmat wiązka ta ulega rozszczepieniu na dwie wychodzące pod różnymi kątami. Czy kąt między wiązkami zależy od długości drogi jaką światło pokonuje w pryzmacie, a więc tego czy wiązka światła pada na pryzmat bliżej wierzchołka kąta łamiącego, czy też bliżej podstawy?

Problem 6. Dlaczego pomiar współczynnika załamania odbywa się przez pomiar kąta najmniejszego odchylenia, a nie przez pomiar, po prostu, kąta odchylenia, kiedy to rzucamy promień światła na pryzmat pod dowolnym kątem, a nie jedynie tym, który gwarantuje najmniejsze odchylenie?

Pytania i zadania przybliżające, uzupełniające lub poszerzające treść ćwiczenia

Problem 7. Pokaż, że istotnie, symetryczny bieg promienia w pryzmacie gwarantuje minimalny kąt odchylenia promienia od kierunku pierwotnego. Jak kąt odchylenia zależy od kąta łamiącego?

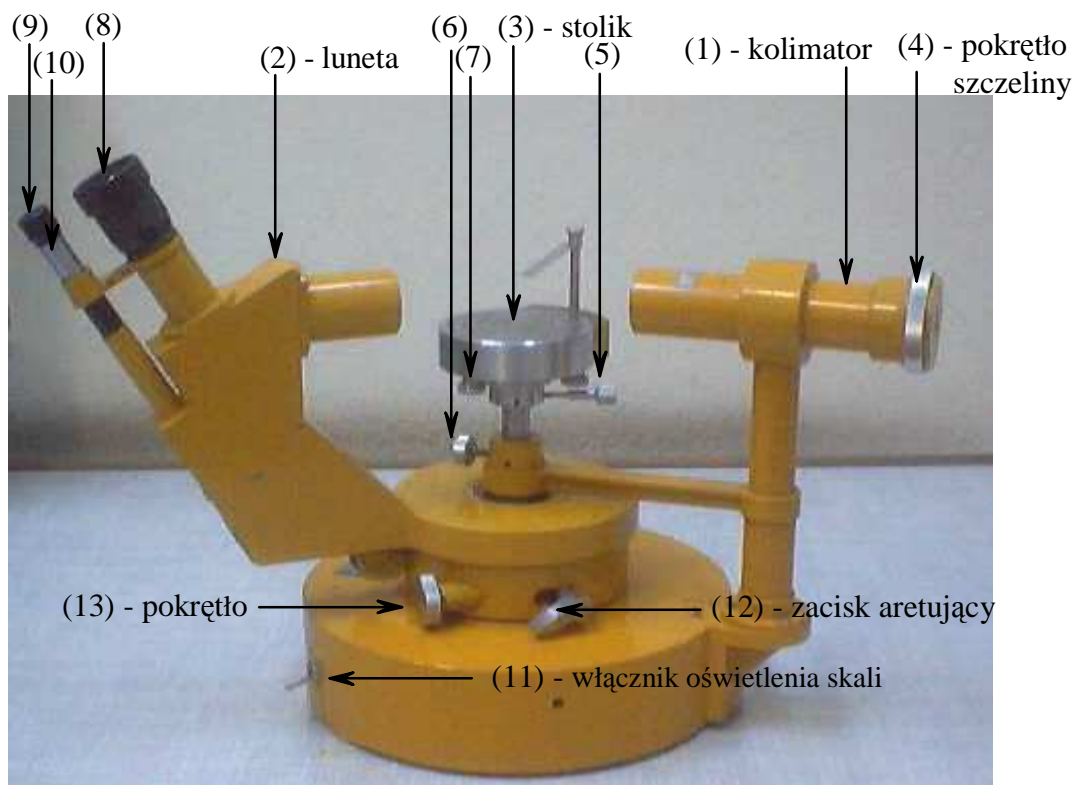
Problem 8. Wiązka światła padająca na pryzmat pod kątem α składa się z fal o dwóch mało różniących się długościach λ_1 i λ_2 . Wyznacz różnicę $\Delta\delta$ kątów między wiązkami wychodzącymi z pryzmatu, jeśli współczynnik załamania fali o długości λ_1 wynosi n_1 a fali o długości λ_2 wynosi n_2 i wartości współczynników załamania niewiele się różnią. Kąt łamiący pryzmatu wynosi φ . Dla jakiego kąta padania α różnica $\Delta\delta$ jest największa (promienie odpowiadające dwóm długościom fali będą najsilniej rozbieżne)?

Problem 9. Wiązka światła składająca się z fal o długości odpowiednio λ_1 i λ_2 , pada prostopadłe na jedną ze ścian pryzmatu o kącie łamiącym φ . Przedyskutuj, dla jakiego zakresu wartości kąta łamiącego i jakich wartości współczynników załamania obu fal, z pryzmatu wyjdzie wiązka światła zawierająca tylko jedną barwę.

DODATEK – BUDOWA I OBSŁUGA GONIOMETRU OPTYCZNEGO

BUDOWA GONIOMETRU

Goniometr służy do pomiarów kątów, a więc kąta łamiącego pryzmatu, kątów odchylenia promieni przechodzących przez pryzmat lub ugiętych przez siatkę dyfrakcyjną. Typowy goniometr ukazany jest na Rysunku 6.



Rys. 6. Budowa goniometru (fot. T. Nowak)

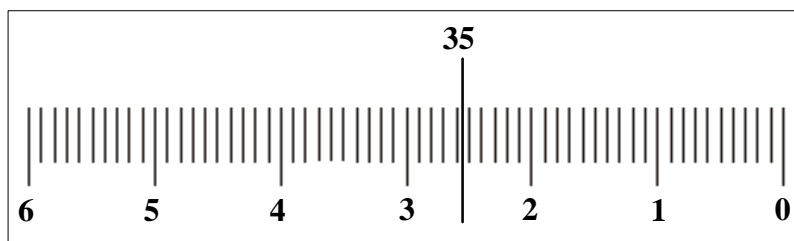
Goniometr składa się z kolimatora (1) lunety (2) i stolika (3). Kolimator zaopatrzony jest w regulowaną szczelinę, przed którą umieszczamy się źródło światła. Szerokość szczeliny zmienia się pokręcając pierścieniem (4).

Stolik, na którym umieszczamy pryzmat lub siatkę dyfrakcyjną, można obracać wokół pionowej osi po zwolnieniu śruby (5) oraz podnosić lub opuszczać po zwolnieniu śruby (6). Przy zwalnianiu śruby blokującej (6) stolik należy podtrzymywać ręką. Pochylenie stolika uzyskuje się przez obrót pokrętek trzech śrub elewacyjnych (7).

Luneta wyposażona jest w okular (8) z krzyżem z nitek pajęczych. W lunecie obserwujemy obraz szczeliny kolimatora, a wartość kąta między osią kolimatora a osią lunety odczytujemy w okularze (9) mikroskopu odczytowego (10). Oświetlenie skali kręgu pomiarowego włączamy włącznikiem (11). Obrótu zgrubnego lunety dookoła osi pionowej goniometru można dokonać ręką przy zwolnionym zatrzasku aretującym (12). Precyzyjny obrót wykonuje się pokrętelem (13) po uprzednim zaciśnięciu zacisku aretującego.

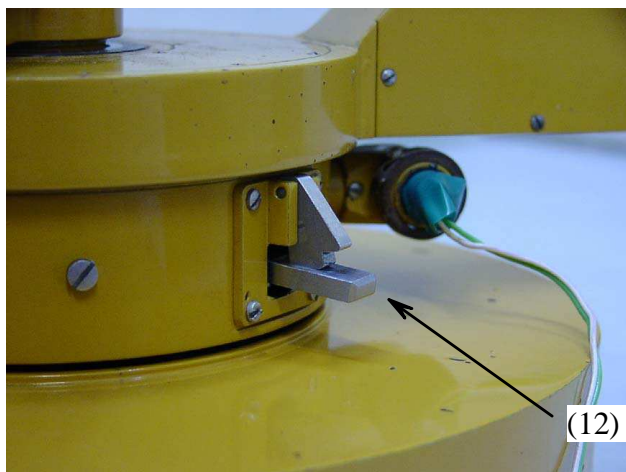
UWAGA! Nie wolno obracać lunety ręcznie bez sprawdzenia, czy zacisk aretujący jest zwolniony. W żadnym wypadku nie stosuj siły przy obracaniu lunety!

Skala, jaką widzimy w okularze mikroskopu pomiarowego, jest skalą kątową od 0° do 360° , przy czym wartość najmniejszej działki to $1'$ (minuta). Przykładowy obraz pola widzenia mikroskopu odczytowego jest pokazany na Rysunku 7 i ukazuje wskazanie (około) $35^\circ 25' 30''$.

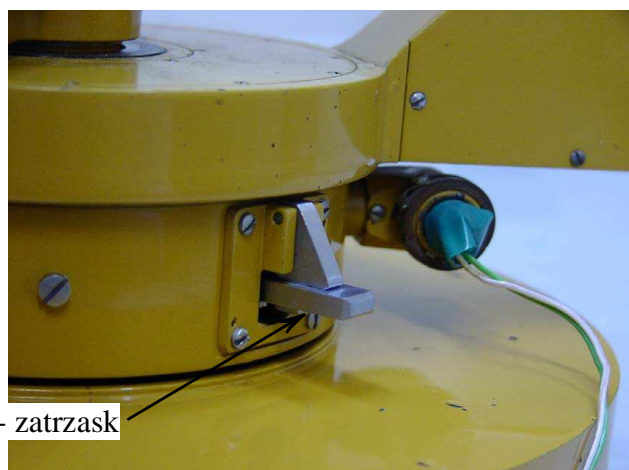


Rys. 7. Widok skali w okularze mikroskopu odczytowego

Rysunki 8 oraz 9 ukazują dwa położenia zatrzasku (12). Służy on do sprzęgania obrotu kręgu pomiarowego ze skalą z obrotem lunety. Przy położeniu zatrzasku jak na Rysunku 8, przy obrocie lunety krąg pomiarowy pozostaje w miejscu, podczas gdy przy położeniu zacisku ukazanym na Rysunku 9, krąg obraca się razem z lunetą. W trakcie pomiaru zatrzask musi pozostawać w położeniu unieruchamiającym krąg pomiarowy (pozycja jak na Rys. 8).



Rys. 8. Oborty kręgu i lunety rozprzężone (fot. T. Nowak)



Rys. 9. Oborty kręgu i lunety sprzężone (fot. T. Nowak)

PRYGOTOWANIE GONIOMETRU DO POMIARÓW

Goniometr używany w ćwiczeniu jest zbudowany tak, że nie wymaga wielu wstępnych operacji przygotowujących go do pracy. Niezbędne są tylko trzy, z których dwie są elementarne: wymagają ustawienie ostrości obrazu w lunecie i w mikroskopie pomiarowym. Trzecia, polegająca

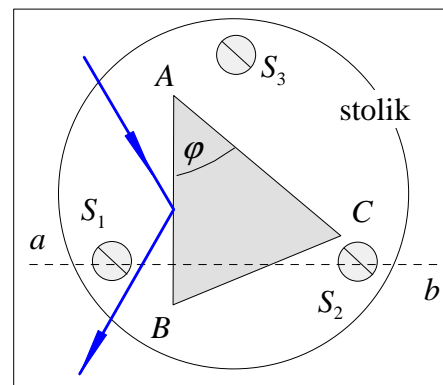
na poziomowaniu stolika, jest nieco bardziej wymagająca i zazwyczaj niepotrzebna, dlatego wszelkie Twoje działania w tym względzie skonsultuj uprzednio z prowadzącym ćwiczenie.

Ustawianie ostrości obrazu w lunecie i mikroskopie odczytowym

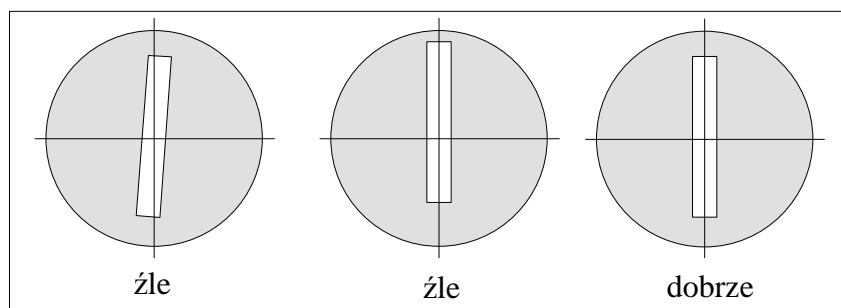
Ostrość obrazu w lunecie możemy uzyskać, kręcąc okularom lunety. Podobnie, wykorzystując okular mikroskopu odczytowego, nastawiamy ostrość obrazu podziałki kątowej.

Ustawianie płaszczyzny stolika prostopadłe do jego osi

Położenie płaszczyzny stolika w stosunku do jego osi obrotu regulują trzy śruby elewacyjne (7) S_1 , S_2 i S_3 pod stolikiem. Ustawiamy oś lunety w stosunku do osi kolimatora pod kątem $60^\circ \div 90^\circ$ i ustawienia tego nie zmieniamy w trakcie całej dalszej procedury. Kładziemy pryzmat ABC na stoliku – Rysunek 10 – w taki sposób, aby jedna z jego ścian tworzących kąt łamiący φ , nazwijmy ją ścianą AB , była prostopadła do linii ab łączącej dwie wybrane śruby elewacyjnych – S_1 i S_2 . Szczelinę kolimatora oświetlamy, a stolikiem z pryzmatem obracamy tak, abyśmy w lunecie zobaczyli obraz szczeliny powstały przez odbicie od wybranej ściany pryzmatu. Szczelina powinna być stosunkowo wąska. Jeśli obraz szczeliny nie jest symetryczny, np. obrócony lub przesunięty w górę lub w dół względem nici pajęczych – jak na Rysunku 11 – to połowę deformacji usuwamy kręcąc śrubą S_1 , a drugą połowę śrubą S_2 . Po uzyskaniu obrazu szczeliny o krawędziach równoległych do nici pajęczych, obracamy stolik tak, aby w lunecie zobaczyć obraz szczeliny uzyskany przez odbicie promieni od ściany AC pryzmatu. Tym razem do uzyskania poprawnego obrazu szczeliny kręcimy tylko śrubą S_3 . Czynności te, tzn. korekcja obrazu powstałego przy odbiciu do ściany AB , a następnie od ściany AC należy powtórzyć kilkakrotnie – do pełnego wyrównania obrazu szczeliny.



Rys. 10. Regulacja płaszczyzny stolika



Rys. 11. Widok szczeliny w lunecie - przykłady złego i poprawnego ustawienia obrazu

Ustawianie kątowego kręgu pomiarowego ze skalą

Pozycja zera na kręgu pomiarowym względem osi kolimatora lub lunety może być dowolna i jej ustalenie nie jest niezbędne, ale jeśli pociągają nas względy estetyczne lub porządkowe, to można to wykonać w następujący sposób. Zatrząsk aretujący (12) ustawiamy jak na Rys. 8 i obracamy tak lunetę, aby wskazania w mikroskopie pomiarowym pokrywały się z działką 180° koła pomiarowego – niezależnie od obrazu szczeliny, której może nie być widać w ogóle. Sprzęgamy teraz ruch lunety z kołem pomiarowym – jak na Rys. 9 – i szczelinę oświetlamy. Obracając lunetę ustawiamy ją naprzeciw kolimatora tak, aby pionowa nitka pajęczka znalazła się w środku obrazu szczeliny – na stoliku nie powinno nic stać, co zakłócałoby bieg promieni z kolimatora. Wracamy z zatrząskiem aretującym do pozycji z Rys. 8. Procedura ta prowadzi do ustawienia kręgu pomiarowego w orientacji ukazanej na Rysunku 12.

POMIARY KĄTÓW GONIOMETREM

Przed wykonaniem pomiarów z pryzmatem, dobrze jest pryzmat wytrzeć ręcznikiem papierowym lub chusteczką, aby usunąć odciski palców i inne zabrudzenia.

Pomiar kąta łamiącego pryzmatu

Oświetlamy szczelinę kolimatora, przy czym sama szczelina powinna być stosunkowo szeroka. Pryzmat ustawiamy na stoliku w taki sposób, aby światło ze szczeliny padając na kąt łamiący oświetlało obie ściany pryzmatu, jak ilustruje to Rysunek 12. Wyszukujemy lunetą obraz szczeliny powstały z odbicia od lewej ściany pryzmatu i odczytujemy wartość kąta α_L , następnie obracamy lunetę na prawą stronę pryzmatu, odszukujemy obraz szczeliny i odczytujemy wartość kąta α_P . Jeśli oba odczyty nie są rozdzielone zerem skali (jak na Rys. 12), to z obu wartości otrzymujemy:

$$\varphi = \frac{1}{2}(\alpha_L - \alpha_P).$$

Jeśli promień lewy i prawy oddzielone są od siebie zerem skali, wtedy:

$$\varphi = \frac{1}{2}(\alpha_L + 360^\circ - \alpha_P).$$

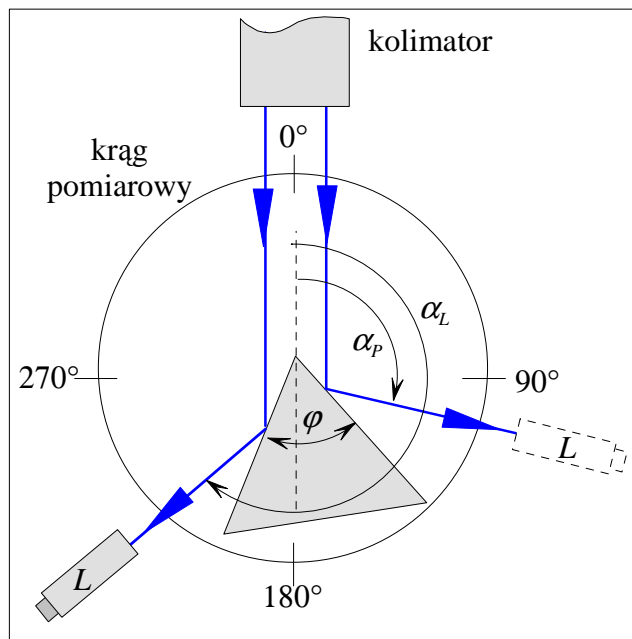
Pomiar należy powtórzyć kilkakrotnie, obracając delikatnie pryzmat o niewielki kąt (aby nie utracić możliwości oświetlenia obu ścian pryzmatu) wokół osi zadanej krawędzią łamiącą pryzmatu.

Pomiar kąta najmniejszego odchylenia

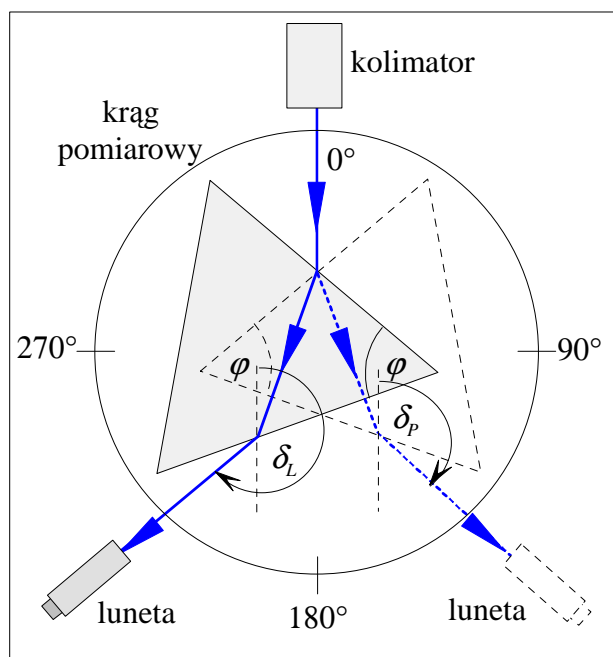
Promień z kolimatora po przejściu przez pryzmat ulega odchyleniu o kąt δ od swego pierwotnego kierunku wyznaczonego przez oś kolimatora. Ustawiamy pryzmat na stoliku w konfiguracji ukazanej linią ciągłą na Rysunku 13 i szukamy, dla wybranej linii widmowej, obrazu szczeliny odpowiadającego odchylonemu biegowi promieni po drugiej stronie pryzmatu. Po znalezieniu go, delikatnie obracamy stolik, obserwując w lunecie przesuwanie się obrazu. Jeśli obraz ucieknie z pola widzenia lunety, obracamy lunetę tak, aby ponownie uzyskać obraz w jej polu widzenia i kontynuujemy obrót stolika. W pewnym momencie zauważymy, że kierunek ruchu obrazu szczeliny zmienia się na przeciwny. Obracając delikatnie i kilkakrotnie stolik w jedną i drugą stronę należy upewnić się, że uchwyciło się poprawnie ten moment. Po ustawieniu krzyżownicy pajączkowej lunety na środku obrazu szczeliny, odczytujemy kąt δ_L najmniejszego odchylenia promienia. Następnie obracamy stolik tak, aby promień z lunety padał na drugą ścianę tworzącą kąt łamiący pryzmatu, powtarzamy procedurę wyznaczenia kąta najmniejszego odchylenia i odczytujemy kąt δ_P . Jeśli promienie lewy i prawy nie są rozdzielone zerem skali (jak na Rys. 13), to kąt δ_{\min} najmniejszego odchylenia wynosi:

$$\delta_{\min} = \frac{1}{2}((\delta_L - 180^\circ) + (180^\circ - \delta_P)) = \frac{1}{2}(\delta_L - \delta_P).$$

W przeciwnym przypadku kąt ten wyznaczamy ze związku:



Rys. 12. Wyznaczanie kąta łamiącego pryzmatu



Rys. 13. Pomiar kąta najmniejszego odchylenia

$$\delta_{\min} = \frac{1}{2}(360^\circ - \delta_p + \delta_L).$$

Pojedynczy pomiar kąta najmniejszego odchylenia obarczony jest większym błędem niż pojedynczy pomiar kąta łamiącego pryzmatu. Spowodowane jest to trudnością uchwyceniu momentu, w którym obraz szczeliny zaczyna się cofać przy obrocie stolika. Dlatego pomiary dla każdej linii należy powtórzyć kilkakrotnie, przekręcając stolik lub pryzmat o niewielki kąt i ponownie poszukując punktu zwrotnego.

Kąt najmniejszego odchylenia możemy wyznaczyć z pomiaru jedynie np. kąta δ_L (lub δ_p) odchylenia promienia po jednej stronie pryzmatu. W tym celu wystarczy, że zmierzemy kąt δ_0 pod jakim obserwujemy obraz szczeliny przy obserwacji na wprost – bez pryzmatu na stoliku, a wtedy:

$$\delta_{\min} = \begin{cases} \delta_L + \delta_0, & \text{gdy } \delta_0 < 180^\circ, \\ 360^\circ - \delta_0 + \delta_L, & \text{gdy } \delta_0 > 180^\circ. \end{cases}$$

Nie jest to zalecana metoda, jako że przy jej stosowaniu nie kasują się rozmaite błędy związane z ewentualnym brakiem symetrii w układzie pomiarowym.

Uwagi dotyczące eksploatacji goniometru

- przy pracy z goniometrem należy zachować dużą ostrożność;
- obracając lunetę **nie wolno** używać siły;
- goniometr należy chronić przed gwałtownymi wstrząsami i uderzeniami;
- nie wolno dotykać części szklanych dostępnych z zewnątrz.

UZUPEŁNIENIE

Analiza danych w tym ćwiczeniu odwołuje się do zagadnienia kalibracji, którego aspekt statystyczny może nie być znany, dlatego niniejszy passus poświęcimy właśnie temu problemowi. Problem kalibracji przyrządu sprowadza się, w istocie, do dwóch kwestii:

- pomiaru, w ściśle kontrolowanych warunkach, odpowiedzi przyrządu na dobrze zdefiniowany sygnał i ujęciu tej odpowiedzi w stosowną formułę;
- odwróceniu owej formuły, aby w praktycznych zastosowaniach ocenić siłę sygnału i jego niepewność ze znajomości, wraz z niepewnością, odpowiedzi przyrządu.

Siła sygnału i odpowiedź przyrządu

Przy kalibracji przyrządu poddajemy go działaniu serii x_i niezależnych i bardzo dobrze znanych (w idealnym przypadku: znanych bezbłędnie) sygnałów, a wyidealizowany mechanizm pomiaru wytwarza serię n bezbłędnych wartości η_i , $i = 1, 2, \dots, n$, wyznaczających odpowiedzi przyrządu na owe sygnały. W rezultacie pomiaru w miejsce wartości η_i znajdujemy wartość y_i . W modelowym opisie statystycznym, obok wartości y_i , traktowanych jako wartości wylosowane z pewnego, być może nieznanego rozkładu i być może zależnego od wartości x zaaplikowanego sygnału, mamy także odchylenia standardowe σ_i charakteryzujące jakość pomiaru wielkości η_i . Należy podkreślić, że w praktyce, w miejsce odchyłeń standardowych znamy, zazwyczaj, jedynie niepewności standardowe u_i . W pozostałej części tego UZUPEŁNIENIA będziemy przyjmowali modelowe założenie o znajomości odchyłeń standardowych σ_i . Czytelnik powinien być świadom, że zastąpienie odchyłeń standardowych niepewnościami nie doprowadzi go do ścisłych wielkości, a jedynie ocen poszukiwanych wielkości, które w dodatku będą z reguły obciążone z uwagi na nieliniowy charakter związków wyznaczających te wielkości (np. otrzymamy obciążone oceny wariancji ocen parametrów lub obciążone oceny nieznanymi parametrów).

Formuła kalibracyjna

W problemie kalibracji dysponujemy formułą $\eta = \mu(x; \theta)$ wiążącą odpowiedź η z sygnałem x , w której $\theta = (\theta_1, \theta_2, \dots, \theta_m)$ to układ m , zazwyczaj nieznanymi, parametrów. Formuła ta może wynikać z teoretycznego modelu działania przyrządu lub też być dziełem czystej praktyki ujmującej w wygodny sposób fenomenologię procesu pomiarowego.

Sposobem oceny nieznanymi parametrów θ_i jest metoda najmniejszych kwadratów, w której minimalizowana jest, względem nieznanymi parametrów, ważona odwrotnościami kwadratów odchyłeń standardowych σ_i suma kwadratów odchyłeń zmierzonych wartości y_i od wartości modelowych $\eta_i = \mu(x_i; \theta)$ (w skrócie: ważona suma kwadratów reszt):

$$R(\theta) = \sum_{i=1}^n \frac{(y_i - \mu(x_i; \theta))^2}{\sigma_i^2}.$$

We wszystkich naszych dalszych rozważaniach przyjmujemy, że zgodnie z intuicyjnie zrozumiałym wymogiem, liczba n pomiarów jest większa od liczby m nieznanymi parametrów.

Liniowa formuła kalibracyjna

Zacniemy od przypomnienia, że w kontekście metody najmniejszych kwadratów problemem liniowym nie nazywamy liniowej zależności między zmienną zależną (odpowiedzią η przyrządu) a zmienną niezależną (sygnałem x), lecz zależność, w której relacja między zmienną niezależną a zmienną zależną jest *liniowa w nieznanymi parametrach* i ma postać:

$$\eta = \mu(x; \theta) = \varphi_1(x)\theta_1 + \varphi_2(x)\theta_2 + \dots + \varphi_m(x)\theta_m, \quad (1)$$

gdzie wielkości $\varphi_j(x)$ są w pełni znanymi, liniowo niezależnymi funkcjami – są to zazwyczaj kolejne potęgi wielkości x , ale mogą to być też np. funkcje Bessela lub wielomiany ortogonalne.

Dla n wartości x_i otrzymujemy n związków dla n wartości $\mu(x; \theta)$

$$\mu(x_i; \theta) = \sum_{j=1}^m \varphi_j(x_i)\theta_j, \quad i = 1, 2, \dots, n,$$

odpowiadających wielkościom mierzonym y_i . Powyższe równania możemy zapisać zwracając w formie macierzowej

$$\eta = \Phi(x)\theta,$$

gdzie

$$\eta = \begin{pmatrix} \eta_1 \\ \eta_2 \\ \vdots \\ \eta_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mu(x_1; \theta) \\ \mu(x_2; \theta) \\ \vdots \\ \mu(x_n; \theta) \end{pmatrix}, \quad \Phi(x) = \begin{bmatrix} \varphi_1(x_1) & \varphi_2(x_1) & \dots & \varphi_m(x_1) \\ \varphi_1(x_2) & \varphi_2(x_2) & \dots & \varphi_m(x_2) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \varphi_1(x_n) & \varphi_2(x_n) & \dots & \varphi_m(x_n) \end{bmatrix}, \quad \theta = \begin{pmatrix} \theta_1 \\ \theta_2 \\ \vdots \\ \theta_m \end{pmatrix},$$

a jeśli jeszcze do tego zdefiniujemy:

$$U = \begin{bmatrix} \sigma_1^2 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \sigma_2^2 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & \sigma_n^2 \end{bmatrix}, \quad y = \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{pmatrix},$$

to i samą sumę kwadratów reszt będziemy mogli zgrabnie zapisać w postaci:

$$R(\theta) = (y - \Phi\theta)^T U^{-1} (y - \Phi\theta).$$

Oceny parametrów i ich wariancje

Różniczkowanie sumy kwadratów reszt względem nieznanymi parametrów prowadzi do liniowego układu równań na te parametry:

$$\Phi^T U^{-1} \Phi \theta = \Phi^T U^{-1} y,$$

a jeśli macierz Φ , wymiaru $n \times m$, zwana **macierzą planu**, jest rzędu m , czyli jej wszystkie kolumny są liniowo niezależne, to oceny $\hat{\theta}$ nieznanymi parametrów wyznaczamy ze związku:

$$\hat{\theta} = (\Phi^T U^{-1} \Phi)^{-1} \Phi^T U^{-1} y. \quad (2)$$

W dalszej części tego UZUPEŁNIENIA stosować będziemy notację „z daszkiem” dla ukazania oceny dyskutowanej wielkości (w duchu tej notacji zmierzone wartości y_i zapisalibyśmy jako \hat{y}_i).

Jeśli pomiary są nieobciążone, czyli jeśli $E(y) = \eta = \Phi\theta$, to i ocena $\hat{\theta}$ jest nieobciążona:

$$E(\hat{\theta}) = (\Phi^T U^{-1} \Phi)^{-1} \Phi^T U^{-1} E(y) = (\Phi^T U^{-1} \Phi)^{-1} \Phi^T U^{-1} \Phi \theta = \theta,$$

a jej wariancja wynosi:

$$\begin{aligned} \mathbf{V} &= E\left(\left(\hat{\theta} - \theta\right)\left(\hat{\theta} - \theta\right)^T\right) \\ &= E\left(\left(\left(\Phi^T U^{-1} \Phi\right)^{-1} \Phi^T U^{-1} y - \left(\Phi^T U^{-1} \Phi\right)^{-1} \Phi^T U^{-1} \eta\right)\left(\left(\Phi^T U^{-1} \Phi\right)^{-1} \Phi^T U^{-1} y - \left(\Phi^T U^{-1} \Phi\right)^{-1} \Phi^T U^{-1} \eta\right)^T\right) \\ &= \left(\Phi^T U^{-1} \Phi\right)^{-1} \Phi^T U^{-1} E\left(\left(y - \eta\right)\left(y - \eta\right)^T\right) U^{-1} \Phi \left(\Phi^T U^{-1} \Phi\right)^{-1} = \left(\Phi^T U^{-1} \Phi\right)^{-1}. \end{aligned}$$

Zauważmy, że alternatywnie, elementy odwrotnej macierzy wariancji możemy wyznaczyć z prostej relacji:

$$\left[\mathbf{V}^{-1}\right]_{ij} = \frac{1}{2} \frac{\partial^2 R}{\partial \theta_i \partial \theta_j}. \quad (3)$$

Jak widzimy, w przypadku, gdy nieznane parametry występują w formule w sposób liniowy, minimalizację można przeprowadzić analitycznie i uzyskać zamknięte wyrażenia zarówno na oceny $\hat{\theta}$ nieznanymi parametrów jak i ich macierz wariancji \mathbf{V} . Jeśli jednak parametry θ_j pojawiają się w zależności $\eta = \mu(x; \theta)$ w sposób nieliniowy, rozwiązanie problemu nie ma formy zamkniętej, a sama minimalizacja ważonej sumy kwadratów reszt wymaga, zazwyczaj, zastosowania wyspecjalizowanych metod numerycznych.

Musimy także zwrócić uwagę na fakt, że macierz \mathbf{V} przestaje być macierzą wariancji i kowariancji, a staje się macierzą ocen tych wielkości, jeśli macierz \mathbf{U} utworzymy z niepewności pomiarów wielkości y_i , a nie ich odchyłeń standardowych.

Test zgodności χ^2 Pearsona

Ważnym obiektem problemu liniowego (1) jest suma kwadratów reszt w minimum:

$$R_{\min} = \left(y - \Phi \hat{\theta}\right)^T U^{-1} \left(y - \Phi \hat{\theta}\right)$$

w przypadku, gdy wyniki y_i pomiarów opisane są rozkładem Gaussa $N(y_i; \eta_i, \sigma_i)$, gdzie $\eta_i = \mu(x_i; \theta)$ jest wartością oczekiwaną zmiennej y_i o wariancji σ_i^2 . Ten specyficzny rozkład powoduje, że R_{\min} przedstawia wartość wylosowaną z rozkładu χ^2 o liczbie $n - m$ stopni swobody, o ile proponowana krzywa kalibracyjna jest słuszna, co pozwala zbudować tzw. test χ^2 Pearsona i zweryfikować propozycję $\mu(x; \theta)$. Oczywiście powinniśmy pamiętać, że stosowanie niepewności standardowych u_i w miejsce odchyłeń standardowych σ_i w macierzy \mathbf{U} osłabia siłę takiej konkluzji.

Równie przybliżony charakter ma minimalna suma kwadratów reszt w przypadku, gdy zależność $\eta = \mu(x; \theta)$ nie jest liniowa, a parametry wyznaczone są z danych doświadczalnych. Przybliżenie to jest tym lepsze, im różnica między liczbą punktów danych a liczbą wyznaczanych z danych parametrów jest większa.

Przykład: zależność kalibracyjna postaci $\eta = ax + b$

Dla przykładu rozważmy dopasowanie do danych liniowej zależności w postaci linii prostej $\mu(x; \theta) = ax + b$, kiedy to macierz planu przyjmuje postać:

$$\Phi(x) = \begin{bmatrix} x_1 & 1 \\ x_2 & 1 \\ \vdots & \vdots \\ x_n & 1 \end{bmatrix},$$

a oceny \hat{a} i \hat{b} parametrów a i b znajdujemy ze związku (2):

$$\begin{pmatrix} \hat{a} \\ \hat{b} \end{pmatrix} = \frac{1}{SS_{xx} - S_x^2} \begin{bmatrix} S & -S_x \\ -S_x & S_{xx} \end{bmatrix} \begin{pmatrix} S_{xy} \\ S_y \end{pmatrix} = \frac{1}{SS_{xx} - S_x^2} \begin{pmatrix} SS_{xy} - S_x S_y \\ S_y S_{xx} - S_x S_{xy} \end{pmatrix},$$

gdzie:

$$S = \sum_{i=1}^n \frac{1}{\sigma_i^2}, \quad S_x = \sum_{i=1}^n \frac{x_i}{\sigma_i^2}, \quad S_{xx} = \sum_{i=1}^n \frac{x_i^2}{\sigma_i^2}, \quad S_y = \sum_{i=1}^n \frac{y_i}{\sigma_i^2}, \quad S_{xy} = \sum_{i=1}^n \frac{x_i y_i}{\sigma_i^2}.$$

Obok ocen parametrów a oraz b znajdujemy macierz wariancji tych ocen:

$$\mathbf{V}[\hat{a}, \hat{b}] = \frac{1}{SS_{xx} - S_x^2} \begin{bmatrix} S & -S_x \\ -S_x & S_{xx} \end{bmatrix},$$

w której elementy diagonalne:

$$\mathbf{V}[\hat{a}] = \sigma_{\hat{a}}^2 = \frac{S}{SS_{xx} - S_x^2}, \quad \mathbf{V}[\hat{b}] = \sigma_{\hat{b}}^2 = \frac{S_{xx}}{SS_{xx} - S_x^2} \quad (4)$$

to wariancje ocen \hat{a} oraz \hat{b} , a wyraz pozadiagonalny

$$\mathbf{V}[\hat{a}, \hat{b}] = \text{cov}[\hat{a}, \hat{b}] = C_{\hat{a}\hat{b}} = -\frac{S_x}{SS_{xx} - S_x^2}, \quad (5)$$

zwany kowariancją, przedstawia tzw. korelację między obiema ocenami parametrów. Często, prezentując wyniki dopasowania, podajemy także tzw. Pearsona liniowy współczynnik korelacji:

$$\rho = \frac{\mathbf{V}[\hat{a}, \hat{b}]}{\sqrt{\mathbf{V}[\hat{a}]\mathbf{V}[\hat{b}]}} = -\frac{S_x}{\sqrt{SS_{xx}}},$$

opisujący siłę relacji między ocenami parametrów a i b . Ograniczony jest on w swych wartościach do przedziału $[-1; 1]$, przy czym im jego wartość bezwzględna jest bliższa jedności, tym siła tej relacji jest bliższa matematycznej zależności liniowej.

Wariancja odpowiedzi przyrządu i siły sygnału

Istnienie wyrazów pozadiagonalnych w macierzy \mathbf{V} powoduje, że oceny $\hat{\theta}$ nieznanymi parametrów w zależności kalibracyjnej $\eta = \mu(x; \theta)$ przestają być statystycznie niezależne i „szkolny” wzór na przenoszenie odchyłeń standardowych (propagację błędów) w celu obliczenia odchylenia standardowego $\sigma_{\hat{\eta}}$ oczekiwanej odpowiedzi $\hat{\eta} = \mu(x; \hat{\theta})$ przyrządu na sygnał x różny od dotychczas zastosowanych, wymaga korekty. Zamiast niego musimy skorzystać ze związku:

$$\sigma_{\hat{\eta}}^2 = \sum_{i,j=1}^m \frac{\partial \mu}{\partial \theta_i} \mathbf{V}_{ij} \frac{\partial \mu}{\partial \theta_j} = \sum_{i,j=1}^m \varphi_i(x) \mathbf{V}_{ij} \varphi_j(x),$$

gdzie diagonalne elementy \mathbf{V}_{ii} macierzy \mathbf{V} to wariancje ocen parametrów θ_i , np. w przypadku dopasowywania linii prostej są to związki (4), natomiast elementy pozadiagonalne to kowariancje tychże ocen – w przypadku linii prostej jest to wielkość (5), w którym to przypadku końcowe odchylenie standardowe $\sigma_{\hat{\eta}}$ wartości odpowiedzi przyrządu przyjmuje postać:

$$\sigma_{\hat{\eta}}^2 = x^2 \sigma_{\hat{a}}^2 + \sigma_{\hat{b}}^2 + 2x C_{\hat{a}\hat{b}}.$$

Po tym, gdy wykalibrowaliśmy przyrząd, chcemy go zastosować do pomiarów, tj. chcemy ocenić siłę x sygnału, jeśli przyrząd zarejestrował odpowiedź y , przy czym odchylenie standardowe tej odpowiedzi wynosi σ_y . Oczywiście, najpierw musimy odwrócić zależność $\eta = \mu(x; \theta)$ i wyznaczyć siłę x jako funkcję wielkości η . Nawet jeśli takiej operacji nie potrafimy wykonać analitycznie, a jedynie numerycznie, to taką odwrotną zależność zapiszmy jako $x = \zeta(\eta; \theta)$ i wyznaczmy z niej ocenę siły sygnału:

$$\hat{x} = \zeta(y; \hat{\theta}),$$

jak również odchylenie standardowe $\sigma_{\hat{x}}$ tej oceny:

$$\sigma_{\hat{x}}^2 = \left(\frac{\partial \zeta}{\partial y} \sigma_y \right)^2 + \sum_{i,j=1}^m \frac{\partial \zeta}{\partial \theta_i} \mathbf{V}_{ij} \frac{\partial \zeta}{\partial \theta_j}.$$

W przypadku dyskutowanej wcześniej relacji $\eta = ax + b$, ocena siły sygnału wynosi:

$$\hat{x} = \frac{1}{\hat{a}}(y - \hat{b}),$$

a jej odchylenie standardowe to:

$$\sigma_{\hat{x}}^2 = \frac{1}{\hat{a}^2} \left(\left(\frac{y - \hat{b}}{\hat{a}} \sigma_{\hat{a}} \right)^2 + 2 \frac{y - \hat{b}}{\hat{a}} C_{\hat{a}\hat{b}} + \sigma_{\hat{b}}^2 + \sigma_y^2 \right) = \frac{1}{\hat{a}^2} (\hat{x}^2 \sigma_{\hat{a}}^2 + 2\hat{x} C_{\hat{a}\hat{b}} + \sigma_{\hat{b}}^2 + \sigma_y^2).$$

Jeśli wykonaliśmy serię pomiarów wielkości η przy ustalonej wartości x , to w miejsce odchylenia standardowego σ_y należy użyć odchylenia standardowego średniej.

Na zakończenie tych rozważań odniesiemy się do dwóch kwestii, często pojawiających się w zagadnieniu kalibracji: nieliniowej relacji $\eta = \mu(x; \theta)$ między zmienną niezależną x (sygnałem) a zmienną zależną η (odповідzią przyrządu) oraz sytuacji, gdy zmienna x nie ma charakteru wartości wzorcowej i pojawia się problem uwzględnienia niedokładnej znajomości tej wielkości.

Siła sygnału z pomiaru

Zacznijmy od drugiej kwestii, jako że bardzo łatwo jest sformułować kryterium sprawdzające, czy stopień nieoznaczoności zmiennej niezależnej x jest istotny. Przypuśćmy, że nieoznaczoność tę kwantyfikujemy za pomocą odchylenia standardowego σ_x , a wtedy przyczynek do odchylenia standardowego zmiennej zależnej, wynikający z samego faktu braku precyzyjnej informacji o zmiennej niezależnej, a na mocy przenoszenia niepewności, wynosi $\mu'(x; \theta)\sigma_x$, gdzie μ' jest pochodną względem zmiennej niezależnej x . Oczywiście w wyrażeniu tym pojawiają się nieznanne wartości parametrów θ , ale do odpowiedzi na interesujące nas pytanie często wystarcza przybliżona ocena nachylenia μ' , np. z rysunku. Możemy także przeprowadzić uproszczone dopasowanie, np. bez wag i takie dopasowanie wykorzystać do przeniesienia nieoznaczoności z osi wartości x na oś wartości η . Jeśli tak przeniesione odchylenie standardowe będzie, dla wszystkich punktów (par) pomiarowych np. o rząd wielkości mniejsze od pierwotnego odchylenia standardowego σ_y podyktowanego naszą metodą pomiaru, wtedy możemy spokojnie założyć, że nieoznaczoności zmiennej niezależnej są bez znaczenia i możemy dopasowywać zależność $\eta = \mu(x; \theta)$ stosując dotychczas omówione metody. Jeśli jednak okaże się, że przeniesione odchylenie standardowe jest o ów rząd wielkości większe od pierwotnego odchylenia standardowego zmiennej zależnej, wtedy powinniśmy dopasowywać zależność odwrotną $x = \zeta(\eta; \theta)$, tzn. za zmienną niezależną przyjąć wielkość η , a za zmienną zależną wielkość x .

Naturalnie, pojawia się problem, gdy odchylenia standardowe $\mu'(x; \theta)\sigma_x$ z przeniesienia są porównywalne z odchyleniem standardowym σ_y , czyli odchylenia zmiennej zależnej i niezależnej są istotne. Ale i tu rozwiązanie też jest proste – wystarczy, że wczujemy się w ducha metody najmniejszych kwadratów, a natychmiast wypiszemy wyrażenie na sumę kwadratów reszt:

$$R(\theta, \xi) = \sum_{i=1}^n \left(\left(\frac{x_i - \xi_i}{\sigma_{x_i}} \right)^2 + \left(\frac{y_i - \mu(\xi_i; \theta)}{\sigma_{y_i}} \right)^2 \right), \quad (6)$$

w którym pojawiają się odchylenia wyników x_i od nieznanymi oczekiwanych wartości (zwanymi także dokładnymi lub prawdziwymi) ξ_i tych współrzędnych. Mamy oczywiście też odchylenia wyników y_i od wartości oczekiwanych $\eta_i = \mu(\xi_i; \theta)$. Celem minimalizacji jest wyznaczenie zarówno ocen m nieznanymi parametrów θ , jak również ocen dokładnych wartości n nieznanymi współrzędnych ξ . Trudność, jaką napotykamy w tym zagadnieniu polega na tym, że nawet dla tak prostej zależności jaką jest $\mu(\xi; a, b) = a\xi + b$, problem nie ma analitycznego rozwiązania i wymaga sięgnięcia do metod numerycznych. Bez wchodzenia w szczegóły podamy tu przykładową procedurę wiodącą celu.

Różniczkując sumę kwadratów reszt względem nieznanymi parametrów a oraz b , a także ξ , znajdujemy równania, których formalne rozwiązania przyjmują postać:

$$\hat{a} = \frac{\sum_{i=1}^n w_i (\hat{\xi}_i - \bar{\xi})(y_i - \bar{y})}{\sum_{i=1}^n w_i (\hat{\xi}_i - \bar{\xi})(x_i - \bar{x})}, \quad \hat{b} = \bar{y} - a\bar{x}, \quad \hat{\xi}_i = x_i - a\sigma_{ix}^2 w_i (\bar{y} - y_i - a(\bar{x} - x_i))$$

gdzie:

$$w_i = \frac{1}{\sigma_{iy}^2 + a^2 \sigma_{ix}^2}, \quad \bar{x} = \frac{1}{\sum_{i=1}^n w_i} \sum_{i=1}^n w_i x_i, \quad \bar{y} = \frac{1}{\sum_{i=1}^n w_i} \sum_{i=1}^n w_i y_i, \quad \bar{\xi} = \frac{1}{\sum_{i=1}^n w_i} \sum_{i=1}^n w_i \hat{\xi}_i.$$

Rozwiązania są formalne, gdyż wyrażają się przez nieznaną parametrami a , mogą jednak posłużyć do zbudowania iteracyjnej procedury. Mogłaby ona przebiegać w następujący sposób. Zanedbując informacje o odchyleniach standardowych, z zadanych wartości x_i oraz y_i wyznaczamy, dotychczas poznaną metodą, zerowe przybliżenie oceny parametru a , aby za jego pomocą określić nowe oceny współrzędnych ξ_i , wag w_i i średnich \bar{x} , \bar{y} oraz $\bar{\xi}$, dzięki czemu możemy wyznaczyć nowe oceny parametrów a , b oraz ξ_i . Postępując tą drogą tak długo, aż zmiany kolejnych ocen, jak również sumy kwadratów reszt staną się dostatecznie małe, ocenimy poszukiwane parametry. Wspomniemy jeszcze, że wykorzystując formalne rozwiązania, minimalną sumę kwadratów reszt można przedstawić w wygodniejszej do sprawdzania postaci:

$$R_{\min} = \sum_{i=1}^n \frac{(y_i - \hat{a}x_i - \hat{b})^2}{\sigma_{iy}^2 + \hat{a}^2 \sigma_{ix}^2}.$$

Powinniśmy tu pamiętać, że wyrażenie to nie jest równoważne sumie kwadratów reszt wyrażonej związką (6), którą mamy różniczkować – powyższa postać powstaje już *po zróżniczkowaniu* i podstawieniu rozwiązań.

Pozostaje nam jeszcze wyznaczenie macierzy kowariancji ocen \hat{a} i \hat{b} . Jeśli skorzystamy z relacji typu (3) (mówimy wtedy, że wyznaczamy asymptotyczną postać wariancji) uwzględniającej także wyznaczone oceny wielkości ξ_i , to znajdziemy:

$$\hat{V}[\hat{a}] = \frac{1}{\sum_{i=1}^n \hat{w}_i (\hat{\xi}_i - \bar{\xi})^2}, \quad \hat{V}[\hat{b}] = \frac{\sum_{i=1}^n \hat{w}_i \hat{\xi}_i^2}{\sum_{i=1}^n \hat{w}_i} \hat{V}[\hat{a}], \quad \hat{V}[\hat{a}, \hat{b}] = -\bar{\xi} \hat{V}[\hat{a}], \quad (7)$$

gdzie

$$\hat{\xi}_i = x_i - \hat{a}\sigma_{ix}^2 \hat{w}_i (\bar{y} - y_i - \hat{a}(\bar{x} - x_i)), \quad \hat{w}_i = \frac{1}{\sigma_{iy}^2 + \hat{a}^2 \sigma_{ix}^2}.$$

Nad wszystkimi obiektami postawiliśmy symbol „daszka”, gdyż uzyskane wyrażenia są, *de facto*, wyrażone przez wyniki pomiarów x_i oraz y_i , a więc prezentują sobie oceny poszukiwanych wielkości.

Gdy wyniki x_i oraz y_i pomiarów czerpiemy z rozkładu normalnego, wtedy wielkość R opisuje rozkład χ^2 z liczbą stopni swobody $2n$, o ile słuszną jest zależność $\mu(\xi; a, b) = a\xi + b$, w której zarówno parametry a i b , jak i wartości zmiennej kontrolowanej ξ_i są znane. Gdy prowadzimy dopasowanie, to minimalna suma kwadratów reszt traci, z uwagi na nieliniową zależność ocen od wyników x oraz y , charakter zmiennej losowej z rozkładu χ^2 . Przypuszczenie, że wielkość ta będzie podlegała rozkładowi χ^2 z liczbą $n - 2$ stopni swobody ($2n$ wartości zmierzonych i $n + 2$ wyznaczanych wielkości), będzie zawsze jedynie gorszym lub lepszym (tym lepszym, im większą liczbą zmierzonych par (x_i, y_i) dysponujemy) przybliżeniem. Tym sposobem test zgodności Pearsona, jako narzędzia oceny wiarygodności przyjętej formuły kalibracyjnej, traci na ostrości konkluzji.

Nieliniowa relacja $\eta = \mu(\xi; \theta)$

W przypadku nieliniowej relacji między zmiennymi nie mamy nawet częściowych wzorów, które pozwoliłyby uzyskać przynajmniej niektóre z rozwiązań – każdy problem wymaga indywidualnego podejścia. Z reguły rozwiązujemy go metodą kolejnych przybliżeń, stosując rozmaite techniki numeryczne, nie rzadko mieszając je na różnych etapach obliczeń. W przypadku wzorcowych (bezbłędnych) wartości zmiennej niezależnej, ocenę macierzy wariancji znajdujemy z relacji (3), obliczanej w punkcie $\theta = \hat{\theta}$ wyznaczonym przez wartość realizującą minimum.

Trudniejszą jest sytuacja, kiedy musimy także uwzględnić odchylenia standardowe zmiennej niezależnej, jako że wtedy pojawia się liczba n nieznanymi wartości ξ_i tej zmiennej. W takiej sytuacji macierz wariancji obejmuje też oceny wariancji tych zmiennych, a jej odwrotność wynosi:

$$\hat{V}^{-1} \left[\hat{\theta}, \hat{\xi} \right] = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} \left[\frac{\partial^2 R}{\partial \theta_i \partial \theta_j} \Big|_{\theta=\hat{\theta}} \right] & \left[\frac{\partial^2 R}{\partial \theta_i \partial \xi_j} \Big|_{\theta=\hat{\theta}} \right] \\ \left[\frac{\partial^2 R}{\partial \theta_i \partial \xi_j} \Big|_{\theta=\hat{\theta}} \right]^T & \left[\frac{\partial^2 R}{\partial \xi_i \partial \xi_j} \Big|_{\theta=\hat{\theta}} \right] \end{bmatrix},$$

gdzie kolejne nawiasy kwadratowe ukazują macierze blokowe utworzone z pochodnych cząstkowych. Wyznaczenie oceny macierzy wariancji ocen parametrów θ_i (w których zazwyczaj jesteśmy zainteresowani) wymaga odwrócenia pełnej macierzy $\hat{V}^{-1} \left[\hat{\theta}, \hat{\xi} \right]$ i wybrania z niej

stosownego bloku wymiaru $m \times m$ z górnego lewego rogu. Taka właśnie procedura doprowadziła nas do wzorów (7).

Rozważania te zakończymy uwaga o teście χ^2 w zastosowaniu do problemu nieliniowego. Jeśli pomiary, tj. wyniki y_i , pochodzą z rozkładu gaussowskiego $N(y_i; \eta_i, \sigma_{y_i})$, to stosowna ważona suma kwadratów reszt cieszy się rozkładem χ^2 o liczbie n lub też $2n$ stopni swobody, przy czym ten drugi przypadek występuje wtedy, gdy wielkości x_i także pochodzą z pomiarów i opisane są rozkładem gaussowskim $N(x_i; \xi_i, \sigma_{x_i})$, o ile spełnione są dwa warunki: wagi zadane są odchyleniami standardowymi σ_{y_i} i odpowiednio σ_{x_i} , a nie ich ocenami oraz gdy relacja $\eta = \mu(x; \theta)$ bądź $\eta = \mu(\xi; \theta)$ jest słuszna i znana w pełni – wraz z wartościami parametrów θ_i oraz odpowiednio ξ_i . Wartość ważonej sumy kwadratów może wtedy posłużyć do zweryfikowania stosowności tej relacji. Jeśli jakkolwiek metodą (także najmniejszych kwadratów) wyznaczymy z danych choćby jednej tych wielkości, to wartość ważonej sumy kwadratów reszt nie będzie obdarzona już takimi własnościami. Możemy jedynie oczekiwać, że asymptotycznie, tj. przy narastającej liczbie pomiarów suma w minimum będzie nosiła znamiona zmiennej χ^2 . Równocześnie ta zbieżność do granicy będzie tym bardziej skuteczna, im mniejsze będą odchyleniach od liniowości.

Opracował: NN.

Uzupełnił: Roman J. Nowak, 5 listopada 2015.