Weiterbildungskurs Metrologie	Modul-Nr.:	MUS-01
Grundlagen der Messunsicherheit	Dozent:	Dr. F. Pythoud

Ausgleichsrechnung

Übersicht
In diesem Modul werden einige grundlegende Fittechniken eingeführt, die für die Auswertung von Messdaten, wie sie typischerweise in der metrologischen Arbeit vorkommen, zur Anwendung gelangen.

Lernziel
Der Kursteilnehmer ist in der Lage:

- ein empirisches Modell für eine Serie von Messdaten mit Hilfe einer linearen Regression zu finden;
- die Methode der kleinsten Abweichungsquadrate zu verstehen und die Parameter eines linearen Regressionsmodells zu berechnen;
- durch eine Analyse der Residuen zu bestimmen, ob das Regressionsmodell die Messdaten angemessen annähert.

Inhaltsverzeichnis

1. Einleitung

Eine sorgfältige Analyse von Messresultaten ermöglicht es, Aussagen über den Messprozess und die Eigenschaften des Messaufbaus zu machen.

Die folgenden Abschnitte führen in einige grundlegende Techniken der Datenanalyse ein, wie sie bei der Analyse von Messresultaten in der metrologischen Arbeit verwendet werden können. Wegen der Kürze der Darstellung sind die vorgestellten Konzepte nicht umfassend dargestellt. Für ein vertieftes Studium sei auf die Literaturliste verwiesen.

2. Die lineare Regression

In der Datenanalyse geht es häufig darum, den funktionalen Zusammenhang zwischen einem Resultat eines Experimentes y und einer anderen Grösse x zu bestimmen. Wir machen eine Serie von n Messungen des Paares (x_i, y_i) und suchen die Funktion $y = f(x)$, welche die Beziehung zwischen den beiden Grössen beschreibt.

Häufig kann der funktionale Zusammenhang durch eine Gerade beschrieben werden:

$$y(x) = a + bx. \tag{2.1}$$

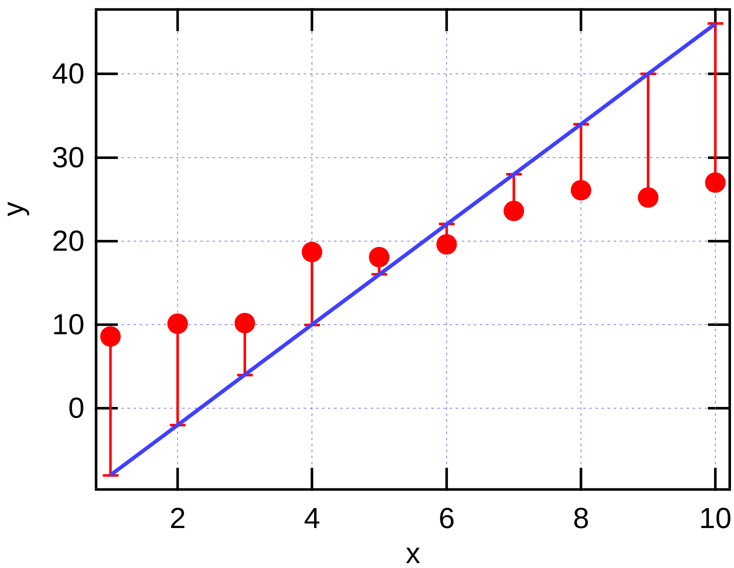
In diesem Kapitel untersuchen wir Methoden, um die wahrscheinlichsten Werte für die Parameter a und b und ihre Unsicherheiten zu bestimmen. Wir betrachten dabei nur den Fall, wo mehr Messwerte (x_i, y_i) als Unbekannte bestimmt worden sind und die Werte y_i mit einer Messunsicherheit behaftet sind. Die x-Werte nehmen wir als exakt an.

2.1 Geradenfit nach der Methode der kleinsten Quadrate

Unsere Daten bestehen aus einem Satz von Wertepaaren $(x_i, y_i), i = 1 \dots n$. Wir wollen Werte für die Parameter a und b finden, bei welchen der Unterschied zwischen den gemessenen Werten y_i und den berechneten $y(x) = a + bx$ möglichst klein wird. Wir betrachten zuerst den Fall, wo die Standardabweichung der Messpunkte nicht bekannt ist, oder für alle Punkte gleich ist $(s_i = s)$.

Figur 1

Anpassung einer Geraden an eine Reihe von Messdaten.
Die dargestellte Gerade ist eine erste Schätzung; die Abstände der Messpunkte zu der geschätzten Geraden sind eingezeichnet.



Das zur Lösung dieses Problems meist verwendete, experimentell gut abgestützte Verfahren ist die Methode der kleinsten Quadrate. Es wird die Quadratsumme der Differenzen zwischen Messwert und Fitwert gebildet:

$$\chi^2 = \sum_{i=1}^{n} \left(y_i - y(x_i)\right)^2 = \sum_{i=1}^{n} (y_i - a - bx_i)^2 \tag{2.2}$$

Nach dem Prinzip der kleinsten Quadrate nehmen a und b ihren wahrscheinlichsten Wert ein, wenn χ^2 ein Minimum einnimmt. In diesem Punkt sind die partiellen Ableitungen von $\chi^2(a,b)$ nach den Parametern a und b gleich Null:

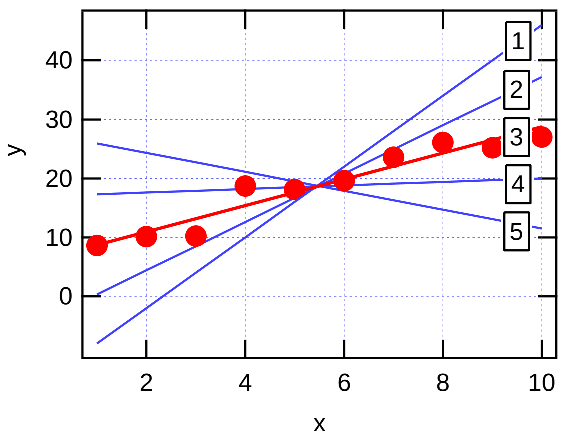
$$0 = \frac{\partial \chi^2}{\partial a} = -2 \sum_{i=1}^{n} y_i - a - bx_i$$

$$0 = \frac{\partial \chi^2}{\partial b} = -2 \sum_{i=1}^{n} x_i (y_i - a - bx_i) \tag{2.3}$$

Aus den beiden Gleichungen lassen sich die zwei Unbekannten a und b einfach berechnen. Für eine vereinfachte Darstellung definieren wir zunächst die folgenden Summen:

$$S_x = \sum_{i=1}^{n} x_i, \qquad S_y = \sum_{i=1}^{n} y_i$$

$$S_{xx} = \sum_{i=1}^{n} x_i^2, \qquad S_{xy} = \sum_{i=1}^{n} x_i y_i \tag{2.4}$$



Summe Abweichungsquadrate

Figur 2: Prinzip der kleinsten Quadrate: Die Parameter der Ausgleichsgeraden werden solange verändert (Versuche 1 bis 5), bis die Summe der Abweichungsquadrate minimal wird. Die Gerade Nr. 3 nähert die Messdaten am besten an.

Dann gilt für die Parameter:

$$\Delta \equiv nS_{xx} - S_x^2$$

$$a = \frac{S_{xx}S_y - S_x S_{xy}}{\Delta} \tag{2.5}$$

$$b = \frac{nS_{xy} - S_x S_y}{\Delta}$$

Unter Anwendung des Gesetzes der linearen Unsicherheitsfortpflanzung können die Unsicherheitsberechnungen durchgeführt werden. Als Schätzung für die Standardunsicherheit einer einzelnen Messung erhalten wir:

$$s = \sqrt{\frac{1}{n-2} \sum (y_i - a - bx_i)^2} = \sqrt{\frac{\chi^2}{n-2}} \tag{2.6}$$

Die Grösse s ist ein Mass für die Streuung der Messwerte um die angepasste Gerade. Die Verkleinerung des Nenners um die Zahl zwei ist als Verlust von zwei Freiheitsgraden anzusehen. Für die Berechnung der Parameter a und b mussten wir zwei Relationen einführen; wir haben daher für die Bestimmung von s nicht mehr n unabhängige Abweichungen $y_i - a - bx_i$ zur Verfügung.

Für die Standardabweichung der Fitparameter gilt:

$$u(a) \equiv s_a = s \cdot \sqrt{\frac{S_{xx}}{\Delta}}$$

$$u(b) \equiv s_b = s \cdot \sqrt{\frac{n}{\Delta}} \qquad (2.7)$$

$$\mathrm{Cov}(a,b) = -s^2 \cdot \frac{S_x}{\Delta}$$

Hier ist $\mathrm{Cov}(a,b)$ die Kovarianz von a und b: dieser Begriff wird hier nicht näher erklärt. Er beschreibt den Zusammenhang zwischen den zwei Variablen a und b, und wird weiter für Interpolationszwecke gebraucht.

Mit der vorgestellten Technik kann eine Gerade an einen beliebigen Datensatz angepasst werden. Es ist die Aufgabe des Experimentators, zu beurteilen, ob die Anpassung sinnvoll ist oder nicht. Es gibt verschiedene statistische Tests und Verfahren, um diese Beurteilung vornehmen zu können. Ein erstes Indiz für die Anpassungsqualität des linearen Modells liefert die Varianzanalyse. Dazu betrachten wir zunächst das arithmetische Mittel der y-Werte

$$\overline{y} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} y_i \qquad (2.8)$$

Die quadratische Summe der Abweichungen der Messwerte von diesem Mittelwert ist die Gesamtvariabilität der Daten. Diese Summe kann wie folgt zerlegt werden:

$$\sum_{i=1}^{n}(y_i - \overline{y})^2 = \sum_{i=1}^{n}(f_i - \overline{y})^2 + \sum_{i=1}^{n}(y_i - f_i)^2 = SSR + \chi^2 \text{ mit } SSR \equiv \sum_{i=1}^{n}(f_i - \overline{y})^2 \qquad (2.9)$$

Dabei ist f_i der Wert der angepassten Geraden bei x_i $(f_i = a + bx_i)$. Die Grösse

$$R^2 = \frac{SSR}{SSR + \chi^2} \qquad (2.10)$$

wird als Bestimmtheitsmass bezeichnet. Sie misst den Grad der durch die Regression erklärten Variabilität an der Gesamtvariabilität des Datensatzes. R^2 variiert zwischen 0 und 1. Bei $R2 = 1$ verläuft die Gerade exakt durch alle Datenpunkte. Ein kleines R^2 ist ein Indiz dafür, dass das lineare Modell weniger gut an die Daten passt, bzw. die Abhängigkeit der gemessenen Grösse y vom Parameter x statistisch nicht relevant ist. Die Grösse R ist der empirische Korrelationskoeffizient von x und y.

2.2 EXCEL-Werkzeuge

Das Tabellenkalkulationsprogramm EXCEL bietet Funktionen zur Berechnung der linearen Regression nach der oben beschriebenen Methode an. Die Funktionen heissen:

- ACHSENABSCHNITT(Y1:Yn; X1:Xn), für die Berechnung von a
- STEIGUNG(Y1:Yn; X1:Xn); für die Berechnung von b
- STFEHLERYX(Y1:Yn; X1:Xn), für die Berechnung von s.

Die Funktion „RGP“ berechnet zusätzlich zu den Fitparametern die Statistik für die lineare Regression. Falls wir die gemessenen Wertepaare in den Vektoren X1:Xn und Y1:Yn abgelegt haben, liefert die Matrixformel {RGP(Y1:Yn; X1:Xn; WAHR; WAHR)} den folgenden Wertarray:

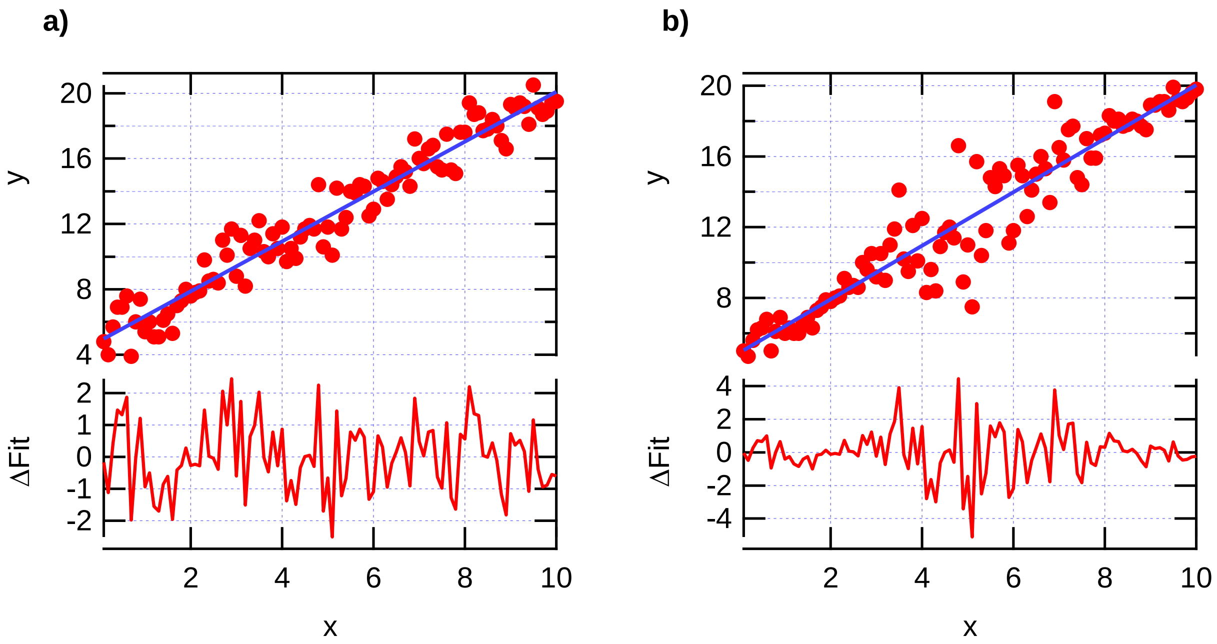
	A	B
1	Fitparameter $\boldsymbol{b}$	Fitparameter $\boldsymbol{a}$
2	Standardabweichung $\boldsymbol{s_b}$	Standardabweichung $\boldsymbol{s_a}$
3	Bestimmtheitsmass $\boldsymbol{R}^2$	Standardunsicherheit einer Einzelmessung $\boldsymbol{s}$
4	$\boldsymbol{F}$ (Grösse für die F-Statistik)	Anzahl der Freiheitsgrade $\boldsymbol{= n - 2}$
5	Quadratsumme $\boldsymbol{SSR}$	$\boldsymbol{\chi^2}$

Tabelle 1: Wertearray der EXCEL-Funktion RGP bei einem Geradenfit

Die Funktion RGP kann auch für die multilineare Regression verwendet werden (siehe Kap. 3).

2.3 Analyse der Residuen

Die Analyse der Residuen, d.h. der Abweichungen $(y_i - a - bx_i)$ der Messwerte vom entsprechenden Fitwert aus der Regressionsanalyse ist oftmals hilfreich, wenn die Gültigkeit des gewählten linearen Modells überprüft werden soll. Die Residuen sollten eine konstante Varianz aufweisen und zufällig um den Nullwert verteilt sein. Die Häufigkeitsverteilung der Residuen sollte zudem die Form einer Normalverteilung haben. In Figur 3 sind drei Beispiele dargestellt, wie sie in der Praxis anzutreffen sind. Im Fall c) weisen die Residuen eine systematische Struktur auf, was darauf schliessen lässt, dass das lineare Modell die Messdaten nicht ausreichend beschreibt und damit zusätzliche Modellparameter notwendig sind. Der berechnete Wert für das Bestimmtheitsmass ist $R^2 = 0.98$ und damit sehr nahe bei 1. Trotzdem ist der Fit nicht befriedigend. Das zeigt, dass die Betrachtung des Bestimmtheitsmasses für eine umfassende Beurteilung des Fitmodells nicht ausreicht.

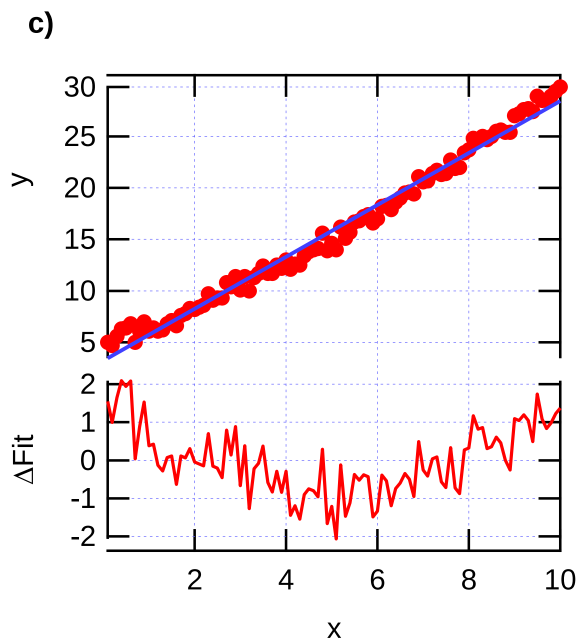


Figur 3:

a) Die Residuen (Differenz zwischen Messpunkten und Ausgleichsgerade) sind zufällig um den Nullwert verteilt. Die Gerade nähert damit die Messwerte gut an.

b) Die Verteilung der Residuen ist zufällig; im Bereich zwischen *x* = 3 und *x* = 7 ist jedoch die Streuung grösser als bei den übrigen Werten. Das deutet auf eine erhöhte Messunsicherheit im mittleren Bereich hin.

c) Die Residuen haben eine nicht-lineare Struktur. Das bedeutet, dass die Messdaten durch das gewählte Modell (Gerade) nicht befriedigend beschrieben werden.



2.4 Voraussage neuer Beobachtungen

Die mit Hilfe der linearen Regression berechneten Fitparameter können dazu verwendet werden, Beobachtungen bei neuen x-Werten, bei denen keine Messungen durchgeführt wurden, vorauszusagen. Figur 4a zeigt als Beispiel die gemessene Temperaturabhängigkeit eines Normals. Die eingezeichnete Gerade ist nach Methode der kleinsten Quadrate berechnet, ebenso die Standardunsicherheit für die einzelnen Messpunkte. Die Resultate sind:

a = (7.44 ± 0.82) ppm, b = (1.43 ± 0.13) ppm/°C, s = 0.95 ppm.

Mit diesen Werten kann nun z.B. der Wert des Normals bei ΔT = 7 °C berechnet werden. Für den interpolierten Punkt gilt:

$$\delta_{nom}(\Delta T = 7°\mathrm{C}) = 17.5\ \mathrm{ppm}$$

Die Unsicherheit dieses Punktes ist näherungsweise (d.h. ohne Berücksichtigung der Korrelationen) gegeben durch:

$$u(\delta_{nom}) \simeq \sqrt{s_a^2 + (\Delta T)^2 s_b^2}$$

Mit $\Delta T = 7$ °C für den Zeitpunkt des interpolierten Wertes wird $u(\delta_{nom}) \simeq 1.2$ ppm.

Die genaue Bestimmung der Messunsicherheit für diese Voraussage wird für Vorwärts- bzw. Rückwärtsinterpolation ausgeführt.

<u>Vorwärtsinterpolation</u> $y = a + b \cdot x$

$$u^2(y) = u^2_{\text{fit\_vorwärts}} + b^2 \cdot u^2(x) + u^2_{\text{y-scale}} \tag{2.11}$$

besteht aus:

- der Fit-Unsicherheit:
  $$u^2_{\text{fit\_vorwärts}} = u^2(a) + u^2(b) \cdot x^2 + 2 \cdot \mathrm{Cov}(a,b) \cdot x \tag{2.12}$$

  Dieser Term lässt sich auch folgendermassen schreiben:
  $$u^2_{\text{fit\_vorwärts}} = \frac{s^2}{n} + \frac{s^2 n}{\Delta}\left(x - \frac{S_x}{n}\right)^2$$

- dem Beitrag der *x*-Unsicherheit:
  $$b^2 \cdot u^2(x) \tag{2.13}$$

- dem Beitrag der *y*-Skala (meistens bestehend aus zwei Beiträgen, nämlich der absoluten und relativen Unsicherheit):
  $$\left(u_{\text{y-scale}}\right)^2 \tag{2.14}$$

<u>Rückwärtsinterpolation</u> $x = (y - a)/b$

$$u^2(x) = u^2_{\text{fit\_rückwärts}} + u^2(y)/b^2 + u^2_{\text{x-scale}} \tag{2.15}$$

besteht aus:

- der Fit-Unsicherheit:
  $$u^2_{\text{fit\_rückwärts}} = \frac{u^2(a)}{b^2} + u^2(b) \cdot \frac{(y-a)^2}{b^4} + 2 \cdot \mathrm{Cov}(a,b) \cdot \frac{y-a}{b^3} = \left(\frac{s^2}{n} + \frac{s^2 n}{\Delta}\left(x - \frac{S_x}{n}\right)^2\right)/b^2 \tag{2.16}$$
  wo x das Resultat der Rückwätzinterpolation ist.

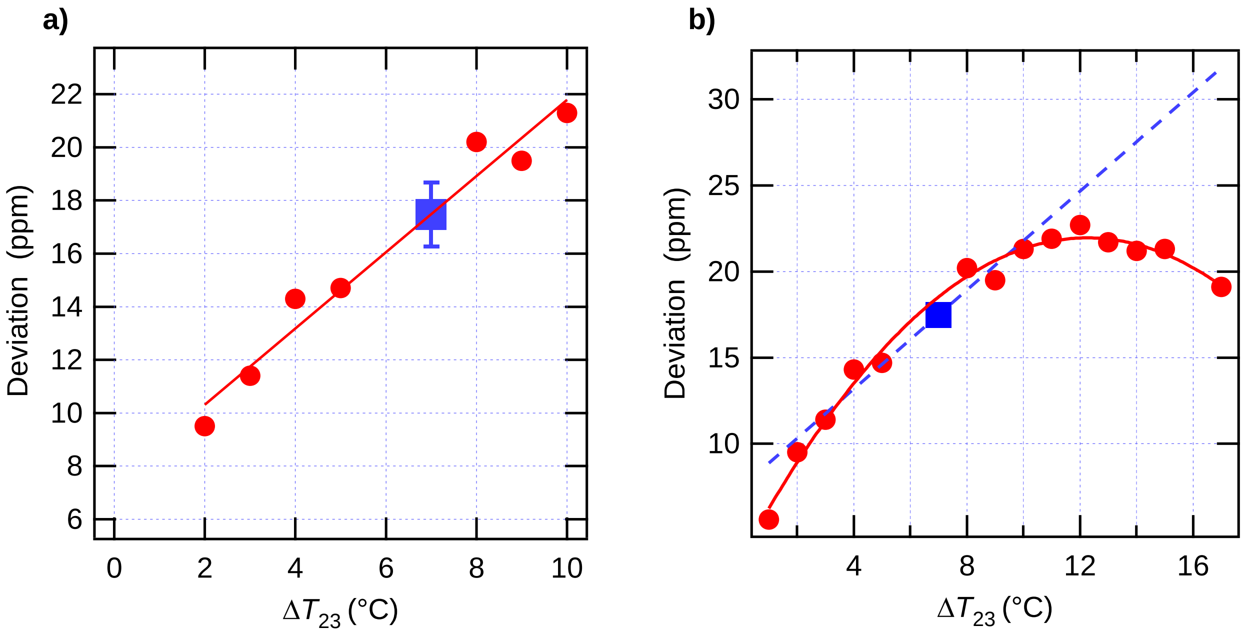
- dem Beitrag der *y*-Unsicherheit:
  $$u^2(y)/b^2 \tag{2.17}$$

- dem Beitrag der *x*-Skala (meistens bestehend aus zwei Beiträge, nämlich der absoluten und relativen Unsicherheit):
  $$(u_{\text{x-scale}})^2 \tag{2.18}$$

Die EXCEL-Funktion „SCHÄTZER“ erlaubt die einfache Berechnung eines Schätzwertes bei einem linearen Trend. Die Funktion hat die folgende Syntax:

SCHÄTZER(X, Y1:Yn; X1:Xn)

- X ist der Datenpunkt, für welchen der gefittete Wert berechnet werden soll. Xi und Yi sind die Vektoren mit den gemessenen x- resp. y-Werten.



Figur 4: Voraussage neuer Beobachtungen mit Hilfe des angepassten Modells

Vorsicht ist geboten, wenn Modellwerte berechnet werden, die ausserhalb des gefitteten Wertebereichs liegen. Figur 4b zeigt den Verlauf der Messdaten in einem erweiterten Temperaturbereich. Dabei wird ersichtlich, dass das Normal eine quadratische Temperaturabhängigkeit aufweist. Die lineare Anpassung der Daten ist in einem beschränkten Temperaturbereich möglich und sinnvoll. Im erweiterten Temperaturbereich ist jedoch das Modell nicht mehr gültig. So liefert z.B. die zwischen ΔT = 2 °C und 10 °C angepasste Gerade eine falsche Voraussage bei ΔT = 16 °C.

2.5 Lineare Regression mit unterschiedlichen Gewichten der Messpunkte

In der Praxis kommt es häufig vor, dass bei einer Messserie die einzelnen Messpunkte unterschiedliche, bestimmbare Unsicherheiten haben. Die Punkte mit kleinerer Unsicherheit sollten bei der Anpassung einer Modellgleichung ein grösseres Gewicht erhalten als die Punkte mit grösserer Unsicherheit. Im Fall der linearen Regression lassen sich die in Kap. 2.1 aufgeführten Beziehungen einfach in diesem Sinn anpassen. Dazu werden die Abweichungen der Messwerte zur Modellgeraden mit dem Kehrwert der Unsicherheit gewichtet. Je kleiner die Unsicherheit s_i eines Messpunktes, desto mehr trägt damit dieser Punkt zur Summe der Abweichungsquadrate bei:

$$\chi_w^2 = \sum\left(\frac{y_i - y(x_i)}{s_i}\right)^2 = \sum\left(\frac{y_i - a - bx_i}{s_i}\right)^2 \tag{2.19}$$

Mit dieser Änderung wird die Formel 2.4:

$$S = \sum_{i=1}^{n} \frac{1}{s_i^2}, \quad S_x = \sum_{i=1}^{n} \frac{x_i}{s_i^2}, \quad S_y = \sum_{i=1}^{n} \frac{y_i}{s_i^2}$$

$$S_{xx} = \sum_{i=1}^{n} \frac{x_i^2}{s_i^2}, \quad S_{xy} = \sum_{i=1}^{n} \frac{x_i y_i}{s_i^2} \tag{2.20}$$

Für die Fitparameter gilt:

$$\Delta \equiv S \cdot S_{xx} - S_x^2$$
$$a = \frac{S_{xx}S_y - S_x S_{xy}}{\Delta} \tag{2.21}$$
$$b = \frac{S \cdot S_{xy} - S_x S_y}{\Delta}$$

Die Standardabweichungen der Fitparameter werden analog zu:

$$S_a = \sqrt{\frac{S_{xx}}{\Delta}}, \qquad S_b = \sqrt{\frac{S}{\Delta}} \tag{2.22}$$

Bei der gewichteten linearen Regression kommt der gewichteten Summe der Abweichungsquadrate χ_w^2 eine besondere Rolle zu. Wie wir im Fall der ungewichteten linearen Regression gesehen haben, ist die Varianz eines Messpunktes gegeben durch die Summe der Abweichungsquadrate dividiert durch die Anzahl der Freiheitsgrade (Formel 2.6). Wir haben:

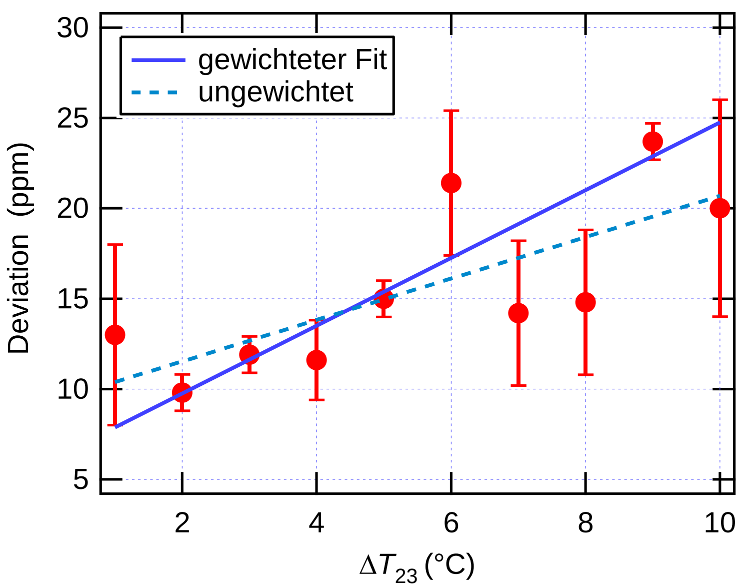
$$1 = \frac{\sum(y_i - a - bx_i)^2}{s^2 \cdot (n-2)} \tag{2.23}$$

Bei der Gewichtung mit den Unsicherheiten erhalten wir ein normiertes χ^2 durch:

$$\chi_n^2 = \sum \frac{(y_i - a - bx_i)^2}{s_i^2} \frac{1}{(n-2)} \tag{2.24}$$

Das normierte χ^2 gibt uns damit Aufschluss über die Güte des Fits. Ist sein Wert nahe bei 1, so ist der Fit gut. Ist der Wert viel grösser als 1, so ist entweder das Fitmodell schlecht (Fitfunktion verläuft nicht durch die Messpunkte) oder die Standardunsicherheit für die Messpunkte ist zu klein geschätzt. Der χ^2-Test (siehe weiterführende Literatur) gibt je nach χ^2-Wert und der Anzahl Freiheitsgrade eine Wahrscheinlichkeitsaussage zur Relevanz des ausgeführten Fits. Die Figur 5 zeigt ein Beispiel für die Anwendung eines gewichteten linearen Fits.

Figur 5:
Beispiel einer Messserie mit unterschiedlichen Unsicherheiten. Der gewichtete Geradenfit verläuft durch die Punkte mit den kleinsten Unsicherheiten. Der Wert für das normierte χ^2 beträgt 1.05 und ist damit sehr nahe am idealen Wert. Beim ungewichteten Fit wird die tatsächliche Abhängigkeit zwischen x- und y-Werten weniger gut angenähert.



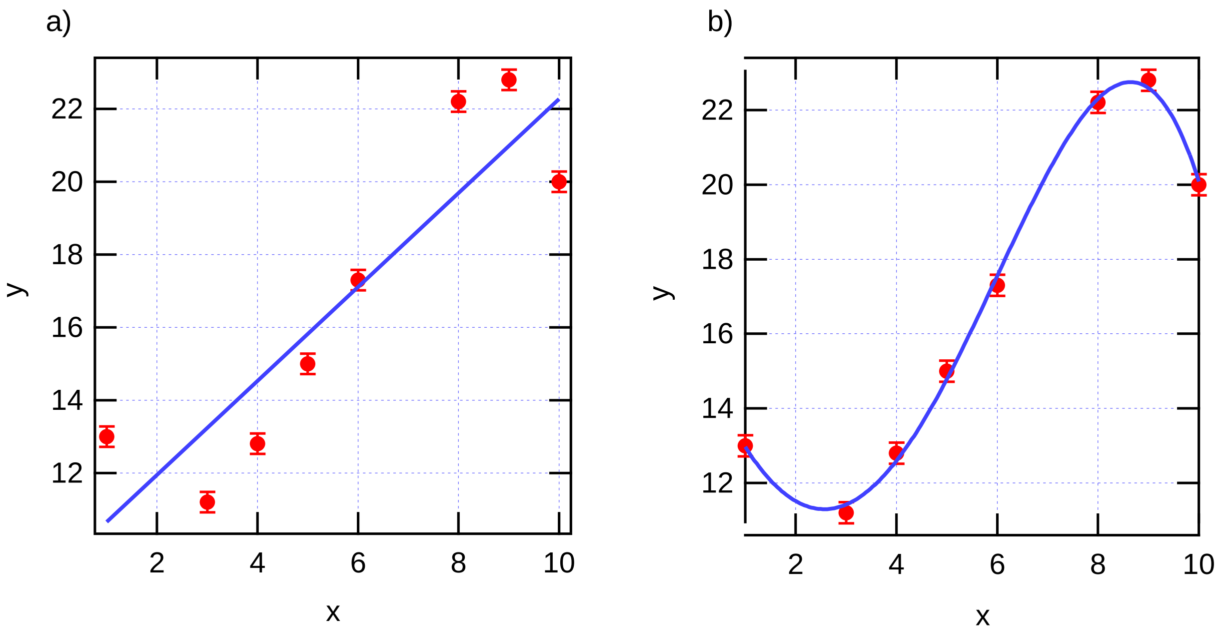
3. Multilineare Regression

3.1 Einführung

In vielen Fällen können die Messdaten mit einer Gerade nicht befriedigend angenähert werden (siehe Figur 6). Eine Verbesserung bringt unter Umständen die Erweiterung der Funktion mit zusätzlichen Fitparametern. Eine nützliche Funktion ist das Polynom m^{ter} Ordnung:

$$y(x) = a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + a_3 x^3 + \cdots a_m x^m \quad (3.1)$$

Diese Funktion ist wie die Gerade linear in den Fitparametern a_i. Die Methode der kleinsten Quadrate mit analytischen Methoden kann einfach auf diese Fitfunktion ausgedehnt werden. Viele Auswerteprogramme bieten die Möglichkeit eines Polynom-Fits an und passen ein Polynom mit der gewünschten Ordnung an eine Messreihe an.



Figur 6: a) Die angepasste Gerade beschreibt die Messdaten nur ungenügend: die Abweichungen der Messpunkte zur Geraden sind viel grösser als die Unsicherheiten der Messpunkte und die Residuen zeigen eine systematische Struktur.
b) Ein Polynom 4.ter Ordnung ist eine gutes Modell für die Messdaten.

In EXCEL kann die Funktion „RGP“, die wir bereits beim ungewichteten Geradenfit kennen gelernt haben, für einen Polynom-Fit verwendet werden. Die allgemeine durch die EXCEL-Funktion verwendete Gleichung hat folgende Form:

$$y = a_0 + a_1 x_1 + a_2 x_2 + \cdots a_m x_m \quad (3.2)$$

Wenn $x_j = x_1^j$ gesetzt wird, erhalten wir ein Polynom m-ter-Ordnung. Für eine komplette Berechnung mit allen Regressionsgrössen hat die EXCEL-Funktion folgende Syntax:

{RGP(Y1:Yn; X11:Xmn; WAHR; WAHR)}

Dabei ist x_{ij} eine Matrix mit m Spalten. In der ersten Spalte befinden sich die x-Werte. Die zweite Spalte enthält die x_i^2-Werte und die m^{te} Spalte die x_i^m-Werte. Der Wertarray der Funktion hat die Form:

	A	**B**	**C**	**…**	**X**
1	Fitparameter $\boldsymbol{a_m}$	$\boldsymbol{a_{m-1}}$	$\boldsymbol{a_{m-2}}$	……	$\boldsymbol{a_0}$
2	Standardabweichung $\boldsymbol{s(a_m)}$	$\boldsymbol{s(a_{m-1})}$	$\boldsymbol{s(a_{m-2})}$	……	$\boldsymbol{s(a_0)}$
3	Bestimmtheitsmass $\boldsymbol{R^2}$	$\boldsymbol{s}$			
4	$\boldsymbol{F}$ (Grösse für die F-Statistik)	Freiheitsgrade $\boldsymbol{\nu = n - m - 1}$			
5	Quadratsumme $\mathbf{SSR}$	$\boldsymbol{\chi^2}$			

Tabelle 2: Wertearray der EXCEL-Funktion RGP bei einem Polynomfit

Die Grösse F wird im Zusammenhang mit einem F-Test (siehe weiterführende Literatur) verwendet. F wird wie folgt berechnet:

$$F = \frac{R^2}{1-R^2} \cdot \frac{n-m-1}{m} \tag{3.3}$$

F sollte möglichst gross sein. Ein kleiner Wert (unterhalb eines den Freiheitsgraden entsprechenden Grenzwertes gemäss F-Verteilungsfunktion) bedeutet, dass einige der Parameter a_j nicht signifikant verschieden von Null sind.

3.2 Beispiel: Kalibrierung eines Pt-100-Temperaturfühlers

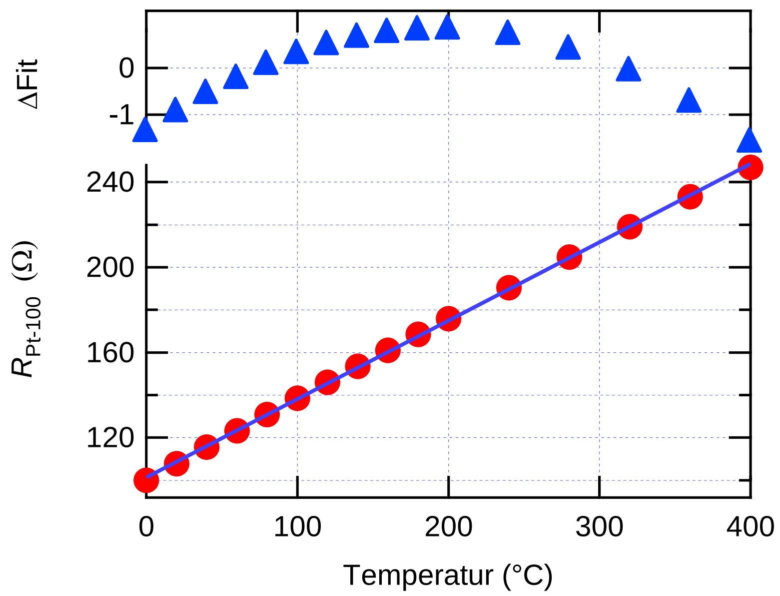
Als Beispiel wenden wir einen Polynomfit 2ter Ordnung auf die Kalibierresultate eines Pt-100-Temperaturfühlers an. Figur 7 zeigt den gemessenen Widerstand des Fühlers bei Temperaturen zwischen 0 °C und 400 °C. Die Residuenanalyse des Geradenfits zeigt, dass zusätzliche Terme in der Modellfunktion notwendig sind, um die Messdaten befriedigend anzunähern. Um den nichtlinearen Teil der Temperaturabhängigkeit des Fühlers zu verdeutlichen, ist in Figur 8 die lineare Abhängigkeit, wie sie für einen typischen Pt-100-Fühler zu erwarten ist, subtrahiert. Die Theorie über die Pt-100-Fühler sagt, dass ein praktisch realisierter Fühler im betrachteten Temperaturbereich neben dem linearen ein kleiner quadratischer Term notwendig ist, um die Widerstandsänderung als Funktion der Temperatur zu beschreiben:

$$\frac{\Delta R}{R} = a_0 + a_1(T - T_0) + a_2(T - T_0)^2 \tag{3.4}$$

Ein Polynomfit 2. Ordnung an die Messdaten zeigt, ob die Messdaten durch die Modellfunktion genügend gut angenähert werden und -falls dies zutrifft- was die wahrscheinlichsten Werte für die gesuchten Parameter a_i sind.

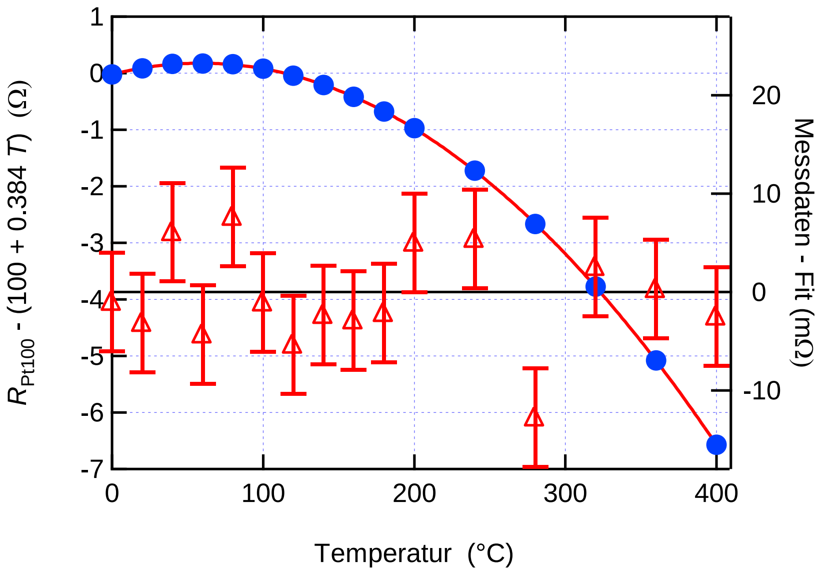
Figur 7:

Gemessene Widerstandswerte für einen Pt-100-Fühler als Funktion der Temperatur. Der obere Teil der Graphik zeigt die Residuen zu einem Geradenfit.



Figur 8:

Nichtlinearer Teil der Temperaturabhängigkeit des Pt-100-Widerstands. Die Residuen zu einem Polynomfit 2ter Ordnung sind eingezeichnet.



Ein Polynomfit 2ter Ordnung mit der EXCEL-Funktion RGP ergibt folgende Resultate:

a_0 = (99.9760 ± 0.0034) Ω

a_1 = (0.39081 ± 0.00004) Ω/°C

a_2 = (-5.796 ± 0.010) × 10^{-5} Ω/°C^2

R^2 = 0.9999; s = 5.5 mΩ

Der gerechnete Wert für die Standardabweichung s stimmt gut mit der geschätzten Reproduzierbarkeit der Widerstandsmessungen überein.

Die angepasste Fitfunktion ist in Figur 8 eingezeichnet. Die graphische Darstellung zeigt, dass die Funktion ein gutes Modell für das tatsächliche Temperaturverhalten des Normals darstellt. Die Residuen sind zufällig verteilt.

4. Nicht-lineare Ausgleichsrechnung

4.1 Einführung

Bei Funktionen, die nicht linear in ihren Koeffizienten sind und die nicht linearisiert werden können (wie z.B. bei einer Exponentialfunktion), liefert die Methode der kleinsten Quadrate keine analytischen Lösungen für die Fitparameter. Es gibt jedoch eine Reihe von numerischen Verfahren, die auch in solchen Fällen zu Lösungen führen.

Das Programm EXCEL stellt die Analysefunktion „SOLVER“ zur Verfügung, um basierend auf der Methode der kleinsten Quadrate beliebige Fitfunktionen an Messdaten anzupassen. Leider berechnet SOLVER die Unsicherheiten der angepassten Fitparameter nicht.

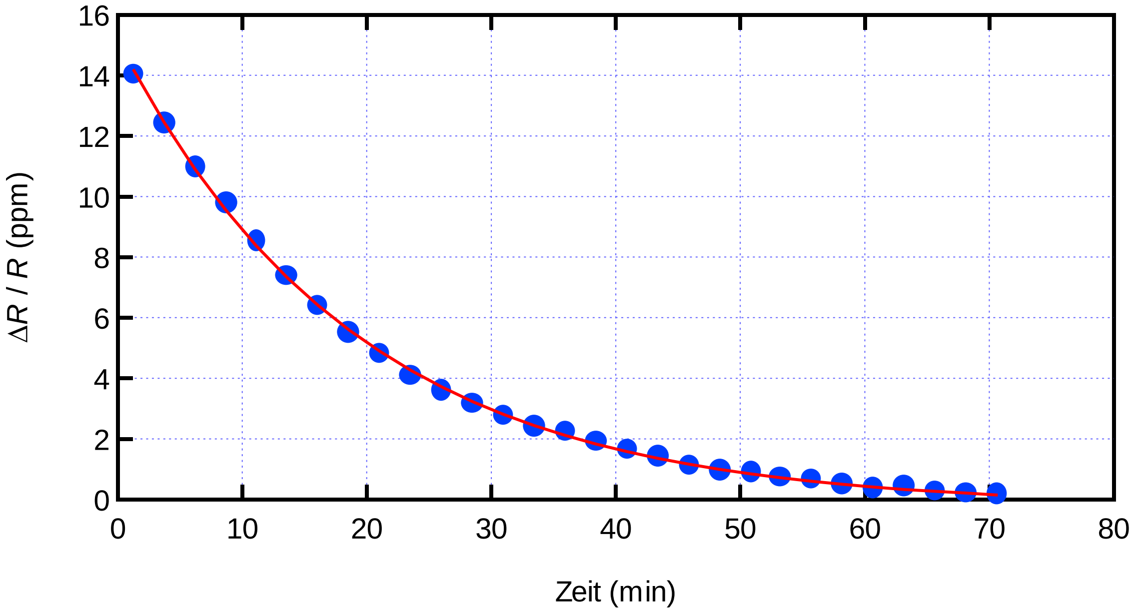
4.2 Beispiel: Eigenerwärmung eines Widerstandes

Wird ein Messstrom I an einen Widerstand R angelegt, so wird die Leistung $P = RI^2$ verbraucht. Ist diese gross genug, so kann sich die Temperatur des Widerstandes merklich verändern, was wiederum zu einer Änderung seines Wertes führen kann. Solche Prozesse weisen ein exponentielles Verhalten auf. Nach Einschalten des Stromes zum Zeitpunkt t_0 ändert der Widerstand seinen Wert in der Form:

$$\frac{\Delta R}{R} = a_0 + a_1 \exp\left(-a_2(t - t_0)\right) \tag{4.1}$$

Die Grösse $\tau = 1/a_2$ wird auch die Zeitkonstante genannt. Nach dieser Zeit hat der Widerstand $(1 - 1/e)$ der totalen, durch den Strom verursachten Änderung a_1 erreicht.

Zeit	erreichte Änderung/ totale Änderung in %
1 τ	63
2 τ	86
3 τ	95
4 τ	98



Figur 9: Relative Widerstandsänderung eines 1-mΩ-Shunts nach Einschalten des Messstromes. Annäherung der Messdaten durch eine exponentielle Fitfunktion.

Figur 9 zeigt die Änderung eines 1-mΩ-Shunt-Widerstandes nach Einschalten des Messstromes von 50 A ($P = 2.5$ W). Für die Auswertung werden die Messdaten z.B. wie in Tabelle 3 gezeigt dargestellt. Mit grob geschätzten Anfangswerten für die gewählte Fitfunktion werden die y_{i}, die mit der Unsicherheit gewichteten Abweichungsquadrate und schliesslich die Summe χ^2 gebildet.

x_i: Zeit (min)	y_i : $\Delta R/R$ (ppm)	s_i (ppm)	Fitwert $f(x_i)$	$(yi\ -\ f(x_i))2$
1.24	14.03	0.10	14.18	2.09
3.72	12.43	0.10	12.44	0.01
6.20	10.96	0.10	10.91	0.22
8.68	9.79	0.10	9.57	4.70
11.16	8.52	0.10	8.39	1.78
13.64	7.39	0.10	7.35	0.21
16.12	6.40	0.10	6.43	0.09
18.60	5.49	0.10	5.63	1.90
21.08	4.80	0.10	4.92	1.31
26.04	3.60	0.10	3.75	2.01
31.00	2.77	0.10	2.84	0.49
35.96	2.24	0.10	2.14	1.12
38.44	1.92	0.10	1.85	0.48
43.40	1.40	0.10	1.37	0.11
45.88	1.11	0.10	1.17	0.32
50.84	0.88	0.10	0.84	0.10
53.32	0.72	0.10	0.71	0.01
58.28	0.49	0.10	0.49	0.00
60.76	0.37	0.10	0.40	0.06
65.72	0.25	0.10	0.24	0.00
68.20	0.20	0.10	0.18	0.05
			χ^2 :	**17.05**
			$\chi^2/(n-3)$:	0.95

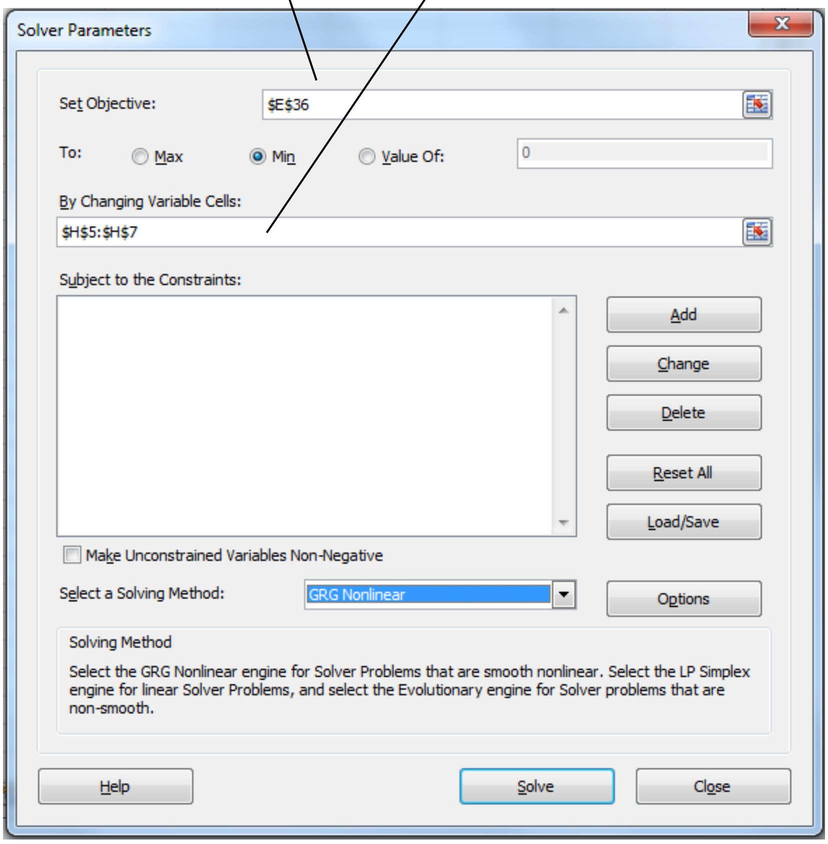
$$f(x_i) = a_0 + a_1 \exp\left(-a_2(t - t_0)\right)$$

Fitparameter	
a_0	-0.23
a_1	15.40
a_2	0.052

Tabelle 3: Nichtlinearer Fit mit SOLVER

Figur 10

Pop-up-Fenster der EXCEL-Funktion „SOLVER“



Im Eingabefenster der Funktion SOLVER (Figur 10) gibt man an, in welchem Feld sich χ^2 befindet und dass für diesen Wert ein Minimum gesucht werden soll, indem die Felder mit den Fitparametern geändert werden. (-> siehe Übungen).

Die Anpassung der exponentiellen Fitfunktion an die Messdaten ergibt:

a_0: (-0.23 ± 0.05) ppm; (= Offset)

a_1: (15.40 ± 0.07) ppm. Das ist die totale durch die Eigenerwärmung verursachte Widerstandsänderung.

a_2: (0.0524 ± 0.0007) min^{-1}. Die Zeitkonstante τ wird somit: τ = (19.1 ± 0.3) min.

Nach einer Stunde hat der Shunt $(1 - exp(-60/19.1))$ und somit 96% der Änderung erreicht. Er hat sich damit bis auf 0.04 × 15.4 ppm = 0.6 ppm an seinen unter Strom I geltenden Gleichgewichtszustand angenähert.

5. Literatur

P. R. Bevington, D. K. Robinson, Data Reduction and Error Analysis for the Physical Sciences, McGraw-Hill, 2nd edition, 1992.

W. H. Press, B. P. Flannery, S. A. Teukolsky, w. T. Vetterling, Numerical Recipes: The art of Scientific Computing, Cambridge University Press.

W. H. Heini Gränicher, Messung beendet – was nun? vdf Hochschulverlag an der ETH Zürich und B. G. Teubner, Stuttgart, 1994.