Schweizerische Eidgenossenschaft
Confédération suisse
Confederazione Svizzera
Confederaziun svizra

Eidgenössisches Institut für Metrologie METAS

Ausgleichsrechnung

Frédéric Pythoud

Thema und Ziel

Einführung von grundlegenden Fitmethoden, die

- für die Auswertung von Messdaten zur Anwendung gelangen,
- typischerweise in der Kalibrierarbeit von Bedeutung sind.

Ziel:

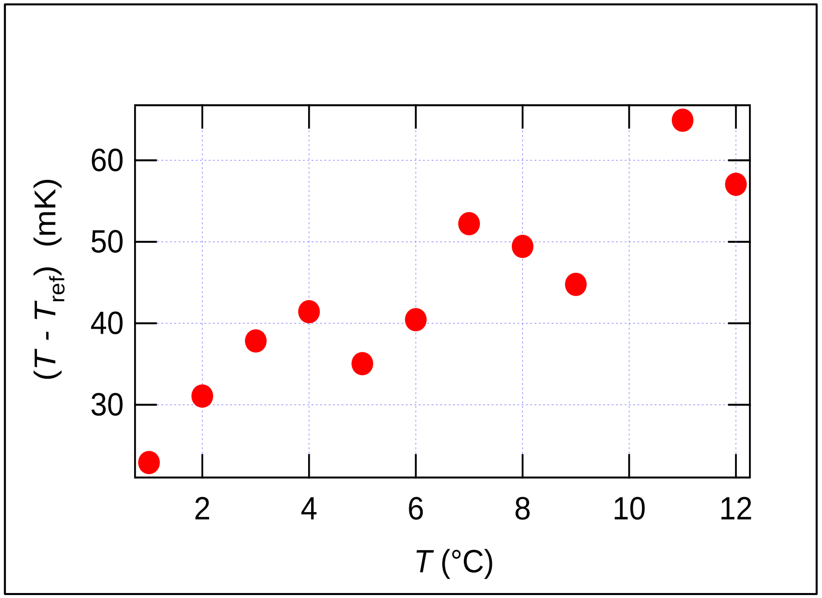
- die Methode der kleinsten Quadrate ist geläufig und Parameter eines linearen Regressionsmodells können berechnet werden,
- Messdaten können mit Hilfe der linearen Regression ausgewertet werden,
- die Güte eines Regressionsmodells kann beurteilt werden.

Inhalt

- Die lineare Regression
  - Geradenfit nach der Methode der kleinsten Quadrate
  - EXCEL-Werkzeuge
  - Analyse der Residuen
  - Voraussage neuer Beobachtungen
  - Lineare Regression mit unterschiedlichen Gewichten der Messpunkte
- Multilineare Regression
- (Nicht-lineare Ausgleichsrechnung)

Problemstellung

Wir haben eine Reihe von Messdaten bei verschiedenen Werten für einen oder mehrere der Einflussgrössen



Fragen:

- Gibt es einen funktionalen Zusammenhang zwischen x und y
- Wenn ja, welcher?
- Bestätigen die Messdaten das Modell der Messung?
- Was ist der Funktionswert (y) für ein beliebiges Argument (x)?

Einfachstes Modell – Die Gerade

Modell

Der funktionale Zusammenhang zwischen x und y kann durch eine Gerade beschrieben werden.

$$y(x) = a + bx$$

Messungen

Ein Satz von ($x_i, y_i, i = 1..n, n > 2$) Wertepaaren

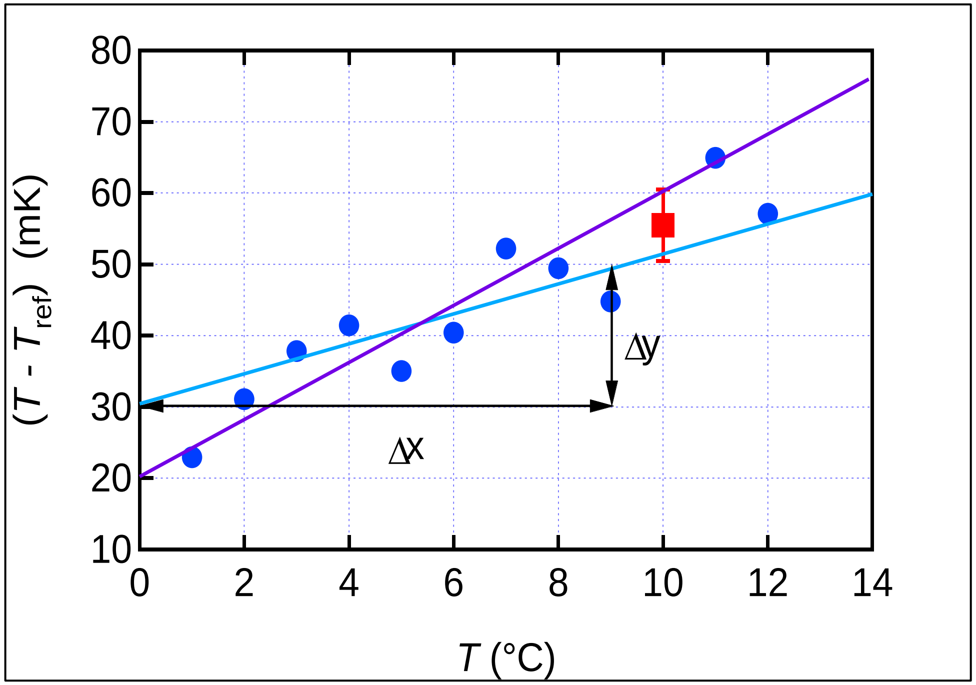
Die Funktionswerte y_i sind mit einer Unsicherheit behaftet.

Die Argumente x_i nehmen wir als exakt an.

Aufgabe

Parameter *a* und *b* einer Geraden finden, so dass der Unterschied $y_i - (a + bx_i)$ für alle Wertepaare möglichst klein wird.

Graphischer Ausgleich



Annahme:

Instrumentenfehler kann durch Gerade angenähert werden.

Geraden mit kleinster und grösster annehmbaren Steigung einzeichnen: b_{min}, b_{max}

Mittlere Steigung berechnen: b

$$b_{\min} = \frac{\Delta y}{\Delta x}$$

$$b = \frac{b_{\max} + b_{\min}}{2}$$

$$u(b) \approx \frac{b_{\max} - b_{\min}}{2}$$

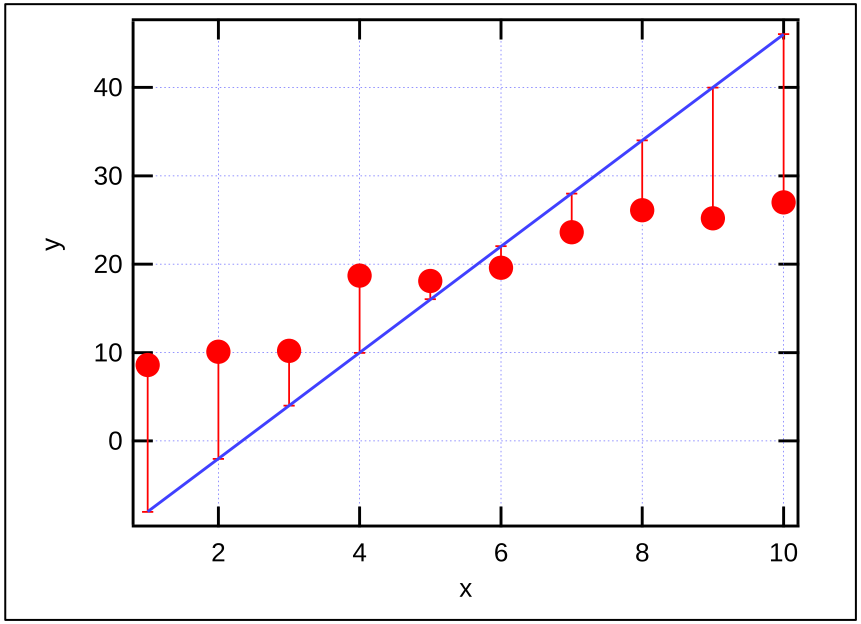
Interpolation:

Für $T = 10$ °C ist die interpolierte Abweichung: $T - T_{ref} = (55 \pm 5)$ mK

Methode der kleinsten Quadrate

Summe der Abstände zwischen einer geschätzten Gerade und den Messpunkten bilden

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

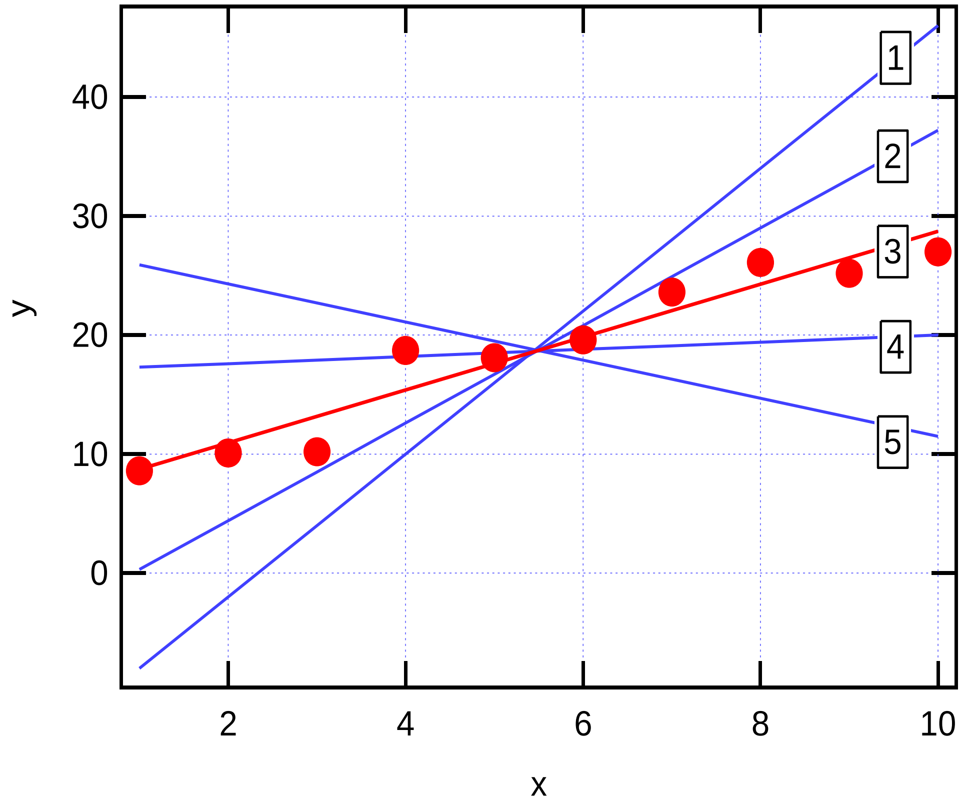


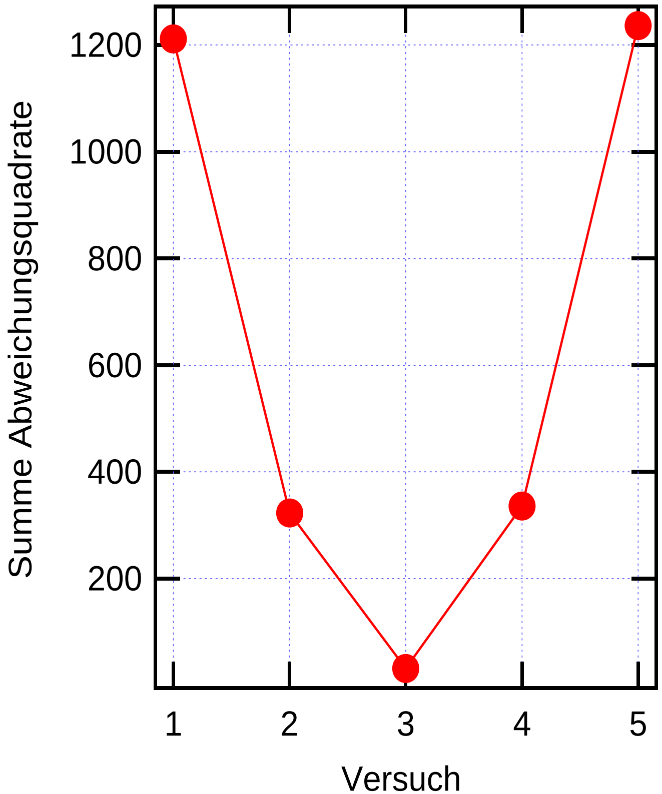
a und b nehmen den wahrscheinlichsten Wert ein, wenn χ^2 minimal ist.

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

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

Prinzip „Methode der kleinsten Quadrate“





Lösung für einen Geradenfit

a und b nehmen ihren wahrscheinlichsten Wert ein,

wenn χ^2 ein Minimum erreicht.

Definition Hilfssummen: $S_x = \sum_{i=1}^{n} x_i$, $S_y = \sum_{i=1}^{n} y_i$

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

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

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

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

Geradenfit

Als Schätzung für die Standardunsicherheit einer einzelnen Messung erhalten wir:

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

Streuung der Messwerte um die angepasste Gerade

(*n* - 2): Anzahl Freiheitsgrade

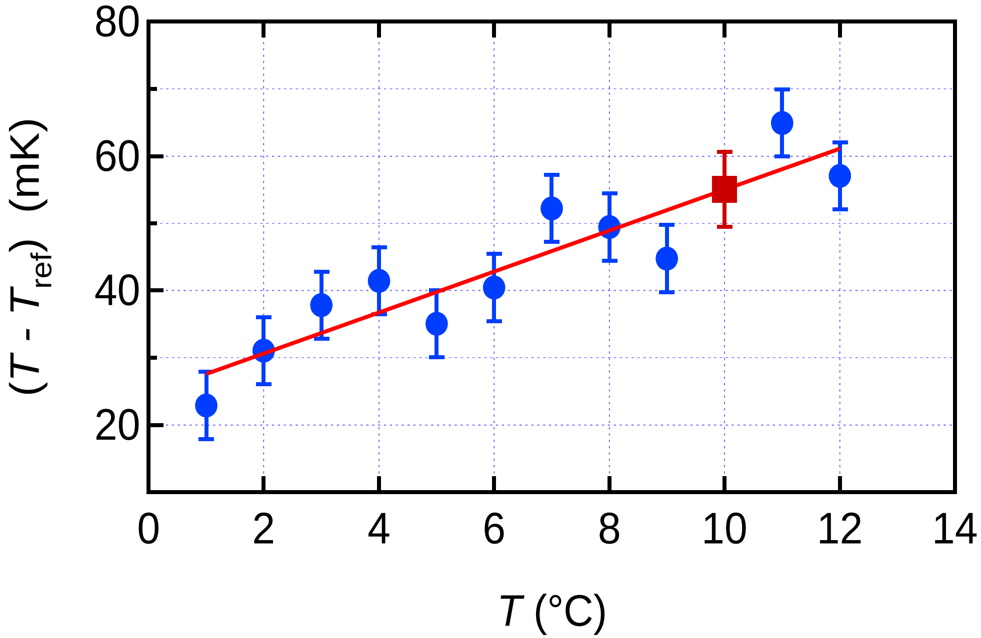
Aus dem Unsicherheitsfortpflanzungsgesetz berechnen wir für die Unsicherheit der Fitparameter:

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

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

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

Geradenfit – Resultat



Fitresultate:

a = (24.5 ± 3.2) mK

b = (3.05 ± 0.46) mK/K

s = 5 mK

Interpolation für T = 10 °C:
(exakte Lösung siehe nächste Folie)

$$\Delta T(T = 10\ °\mathrm{C}) = 55\ \mathrm{mK}$$

$$u(\Delta T) \cong \sqrt{u^2(a) + T^2 u^2(b)}$$

$$\Longrightarrow u(\Delta T) \cong 5.6\ \mathrm{mK}$$

Unsicherheit der Interpolation – Vorwärts

Die Formel lautet: $y = a + b \cdot x$

Für die Unsicherheit:

$u^2(y) =$

$u^2(a) + u^2(b) \cdot x^2 + 2 \cdot \mathrm{Cov}(a, b) \cdot x$ Fit-Unsicherheit

$+b^2 \cdot u^2(x)$ x-Unsicherheit

$+\left(u_{\mathrm{y-scale}}\right)^2$ Unsicherheit der y-Skala

Bemerkung $u(a) = s_a,\ u(b) = s_b$

Unsicherheit der Interpolation – Rückwärts

Die Formel lautet:

$$x = \frac{y - a}{b}$$

Für die Unsicherheit:

$$u^2(x) =$$

$$\frac{u^2(a)}{b^2} + u^2(b) \cdot \frac{(y-a)^2}{b^4} + 2 \cdot \mathrm{Cov}(a,b) \cdot \frac{y-a}{b^3}$$ Fit-Unsicherheit

$$+u^2(y)/b^2$$ y-Unsicherheit

$$+(u_{\mathrm{x-scale}})^2$$ Unsicherheit der x-Skala

Güte des Fits

- Experimentator muss beurteilen, ob Fitresultat sinnvoll ist oder nicht.
- Verschiedene statistische Tests helfen bei der Beurteilung

- **Frage:** Ist die Abhängigkeit der y-Werte von x statistisch relevant?

→ **Bestimmtheitsmass**

$$\bar{y} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} y_i$$

Gesamtvariabilität der Daten →

$$\sum_{i=1}^{n}(y_i - \bar{y})^2 = \sum_{i=1}^{n}(f_i - \bar{y})^2 + \sum_{i=1}^{n}(y_i - f_i)^2$$

$$= SSR + \chi^2$$

R^2 variiert zwischen 0 und 1

$R^2 = 1$: Gerade geht exakt durch alle Punkte

kleines R^2: schwache Korrelation zwischen x und y

$$R^2 = \frac{SSR}{SSR + \chi^2}$$

Linearer Fit in EXCEL

Das Tabellenkalkulationsprogramm EXCEL bietet Funktionen zur Berechnung der linearen Regression nach der Methode der kleinsten Quadrate an.

- Berechnung des Offsetterms a:
  - ACHSENABSCHNITT(y1:yn; x1:xn)
  - INTERCEPT(y1:yn; x1:xn)
- Berechnung der Steigung b:
  - STEIGUNG(y1:yn; x1:xn)
  - SLOPE(y1:yn;x1:xn)
- Standardabweichung s:
  - STFEHLERYX(y1:yn; x1:xn)
  - STEYX(y1:yn; x1:xn)

EXCEL-ArrayFunktion RGP

Berechnet Gerade und die statistischen Grössen für die lineare Regression

{RGP(y1:yn; x1:xn; WAHR, WAHR)}

$a \quad 0$

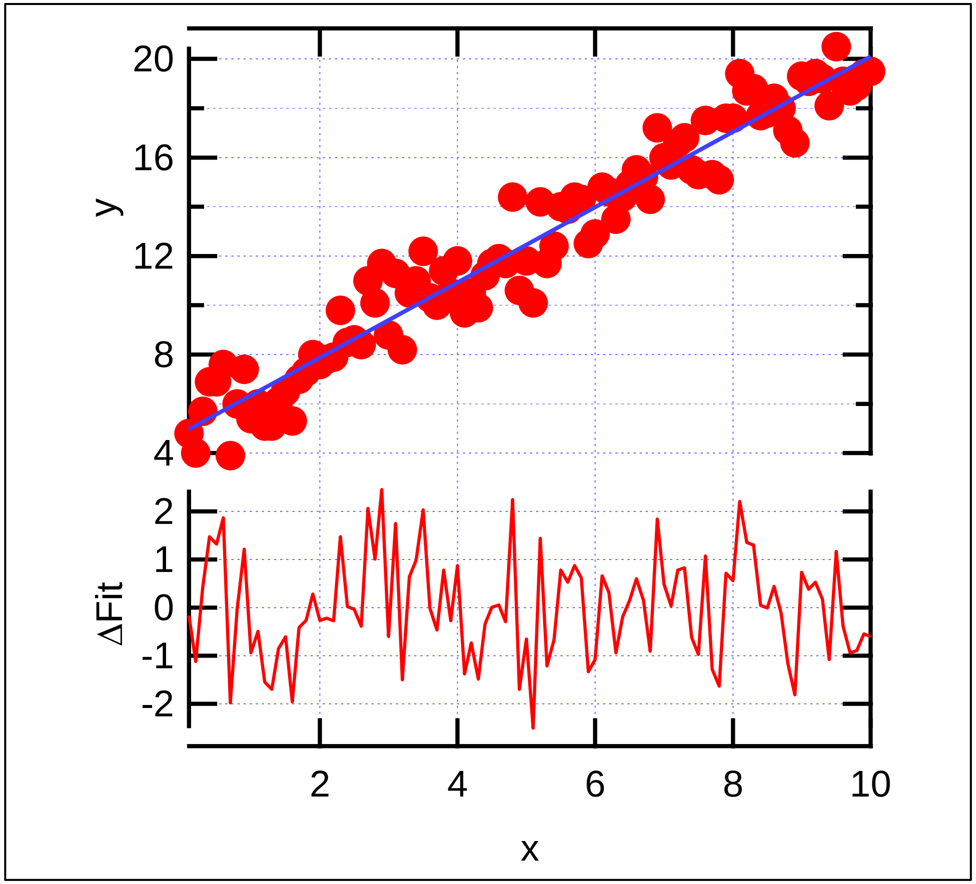
berechnet statistische Kenngrössen

	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 $\boldsymbol{SSR}$	χ^2

Bemerkung

RGP (deutsche Excel Version) oder *LINEST* (englische Version) sind «Arrays Functions»

Analyse der Residuen

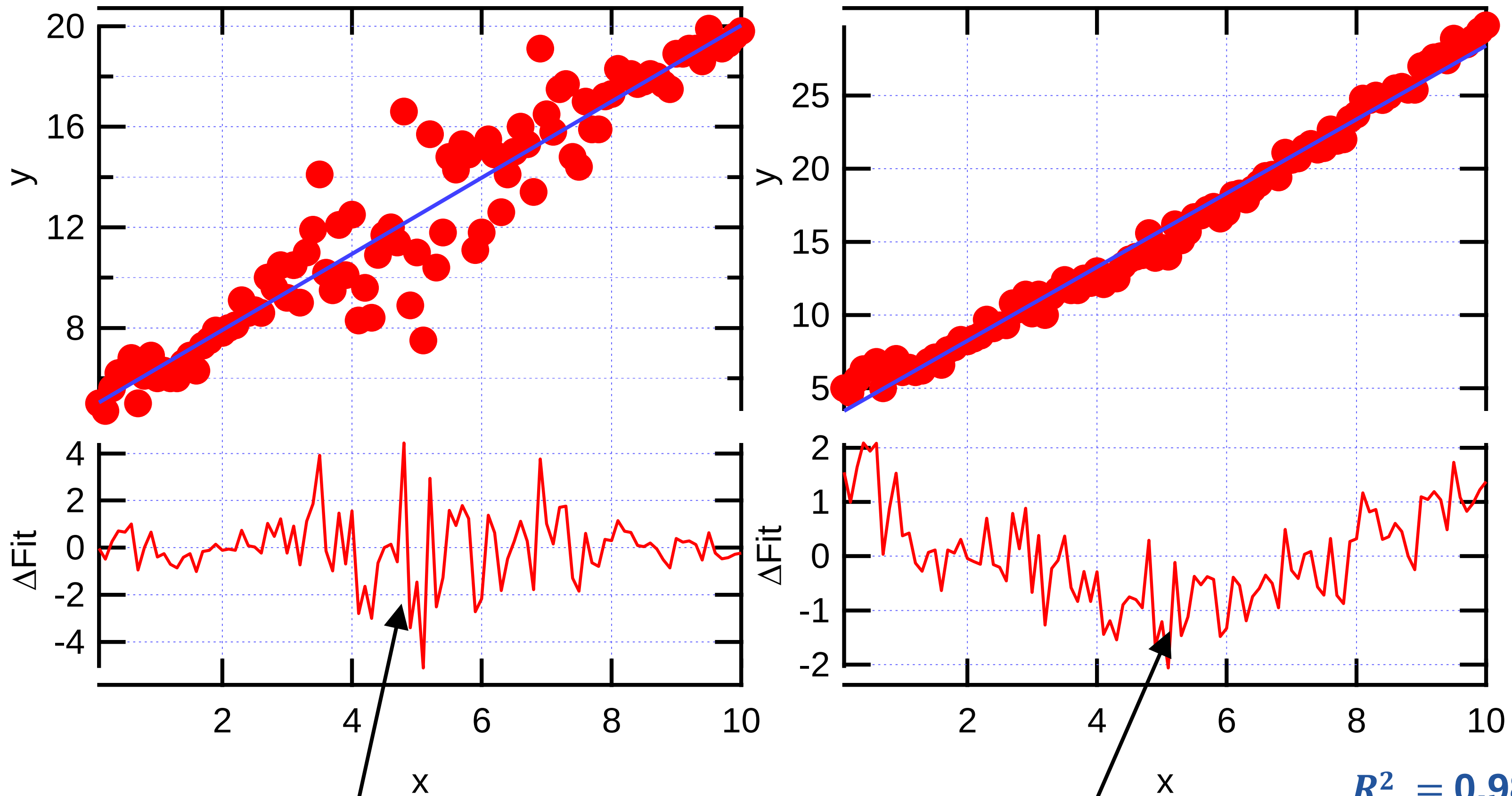


$$y_i - a - b\,x_i$$

Residuen

- sollten konstante Varianz aufweisen
- zufällig um den Nullwert verteilt sein (keine Struktur)
- normalverteilt sein

Residuen

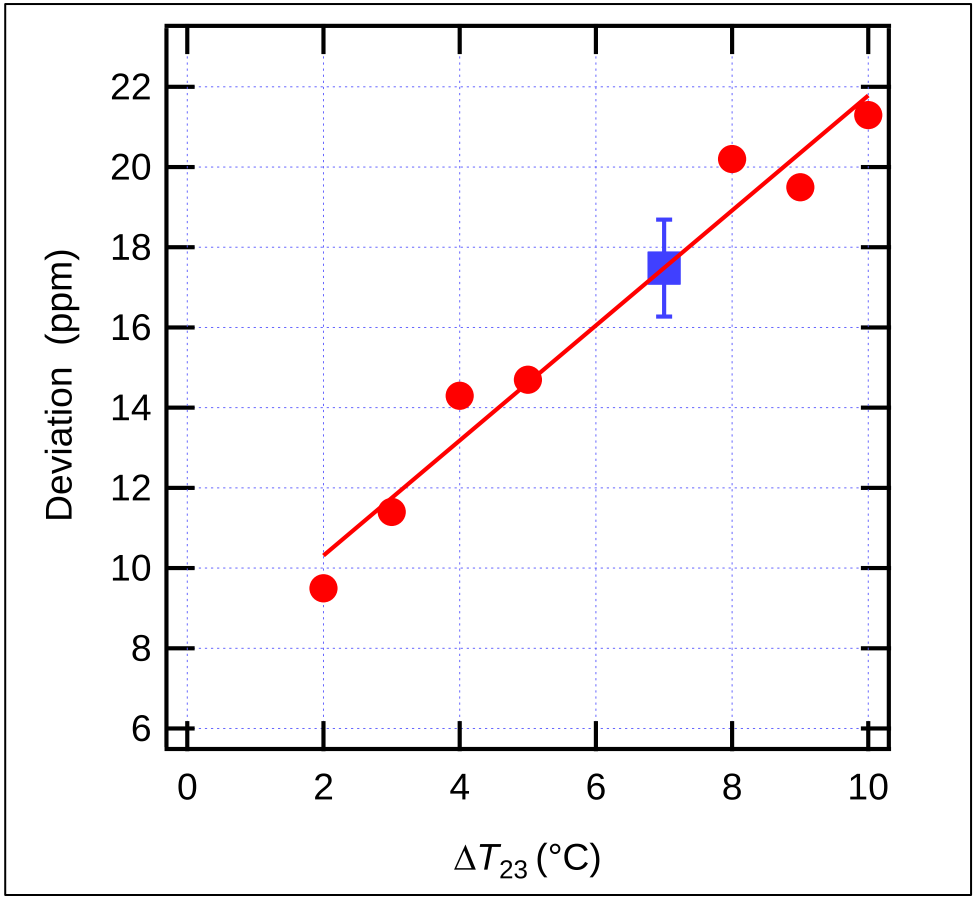


$R^2 = 0.98$!!

Messunsicherheit im mittleren Bereich grösser

Systematische Struktur
→ zusätzliche Modellparameter notwendig

Voraussage neuer Beobachtungen



$$\delta_{\mathrm{nom}}(\Delta T) = a + b \cdot \Delta T$$

$$\delta_{\mathrm{nom}}(\Delta T = 7\ \mathrm{K}) = 17.5 \times 10^{-6}$$

Unsicherheit:

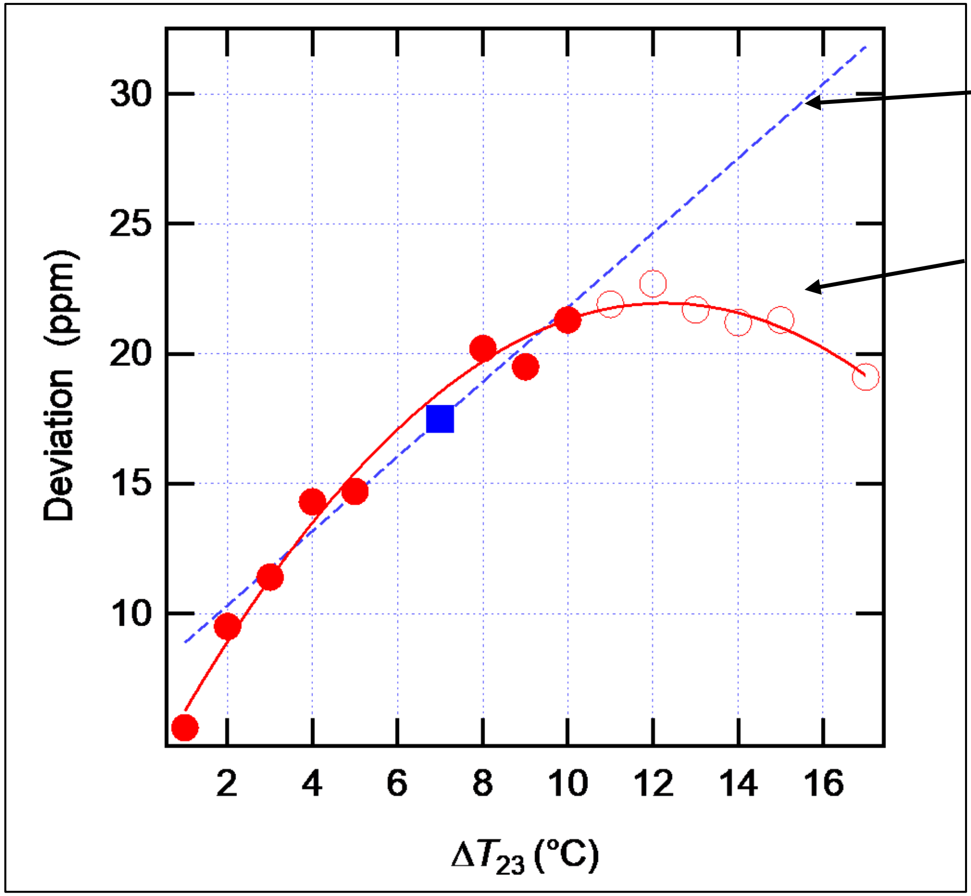
$$u(\delta_{\mathrm{nom}}) = \sqrt{s_a^2 + (\Delta T \cdot s_b)^2}$$

$$= 1.2 \times 10^{-6}$$

EXCEL-Funktion:

- SCHÄTZER(X; Y1:Yn; X1:Xn)
- FORECAST(X; Y1:Yn; X1:Xn)

Extrapolation

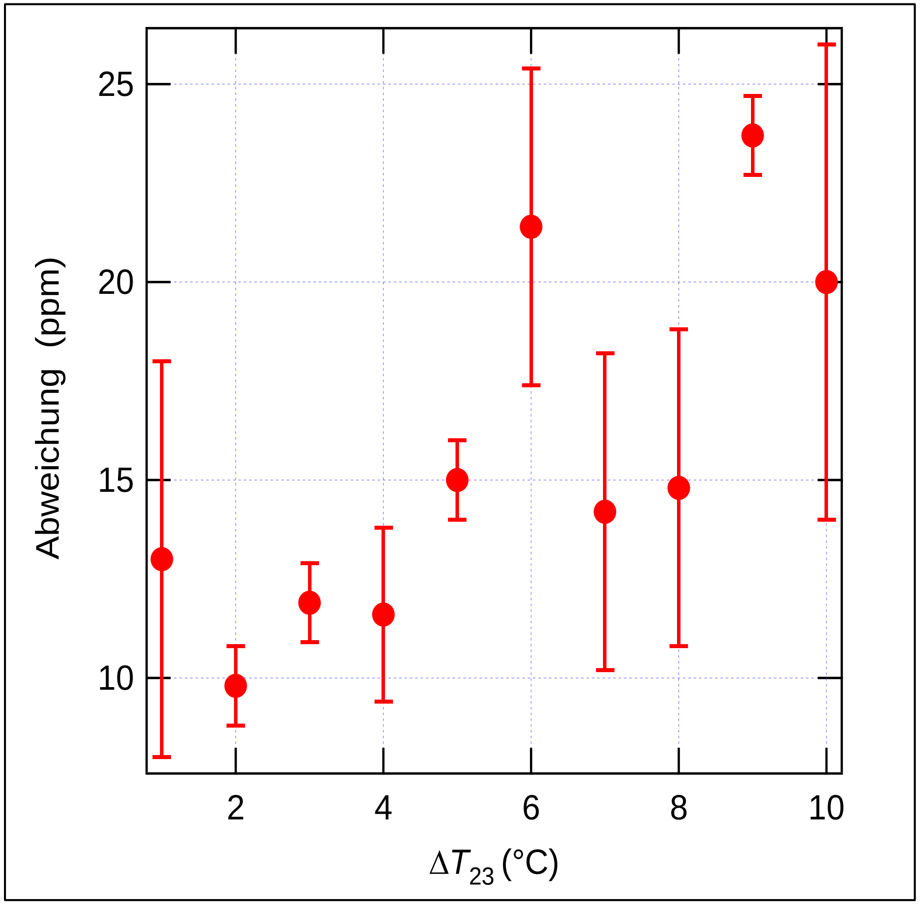


Extrapolation

tatsächlicher Verlauf

Extrapolation nur zu empfehlen, wenn Modell für Bereich ausserhalb des Fitbereichs gesichert ist.

Linearer Fit mit unterschiedlichen Gewichten



Praxis:

Messunsicherheiten nicht für alle Messpunkte gleich gross

→ Punkte mit kleinerer Unsicherheit sollten beim Fit ein grösseres Gewicht erhalten.

→ Methode der kleinsten Quadrate kann einfach verallgemeinert werden.

$$\chi^2 \rightarrow \chi_w^2 = \sum_{i=1}^{n} \frac{(y_i - f(x_i))^2}{s_i^2}$$

Gewichteter Geradenfit

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

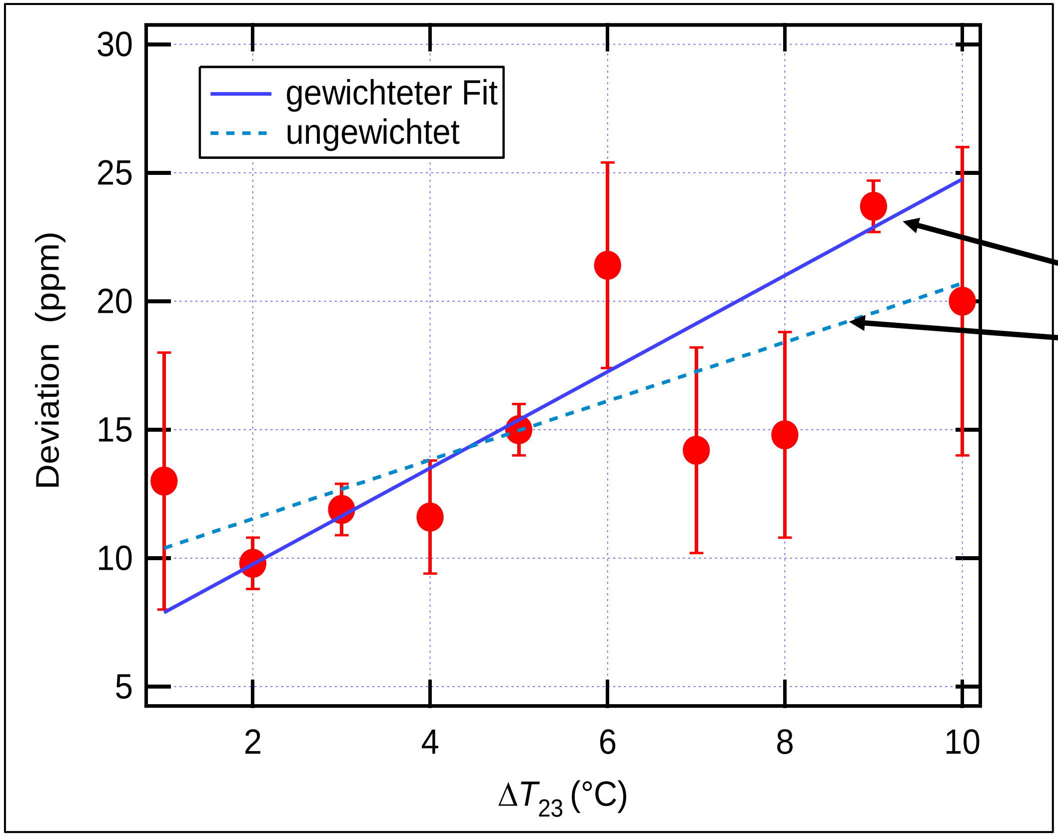
$$S_{xx} = \sum_{i=1}^{n} \frac{x_i^2}{s_i^2} \qquad S_{xy} = \sum_{i=1}^{n} \frac{x_i y_i}{s_i^2}$$

Resultate: $\Delta \equiv S \cdot S_{xx} - S_x^2$

$$a = \frac{S_{xx} S_y - S_x S_{xy}}{\Delta} \qquad S_a = \sqrt{\frac{S_{xx}}{\Delta}}$$

$$b = \frac{S \cdot S_{xy} - S_x S_y}{\Delta} \qquad S_b = \sqrt{\frac{S}{\Delta}}$$

Gewichteter Geradenfit



Resultate können sich stark unterscheiden

Bedeutung des χ^2

Ungewichteter Fit (s aus Residuen berechnet)

$$s = \sqrt{\sum_{i=1}^{n} \frac{(y_i - f(x_i))^2}{n-2}} \quad \rightarrow \quad 1 = \frac{\chi^2}{s^2 \cdot (n-2)}$$

Anzahl Freiheitsgrade

Gewichteter Fit (s_i der Einzelmessung bekannt)

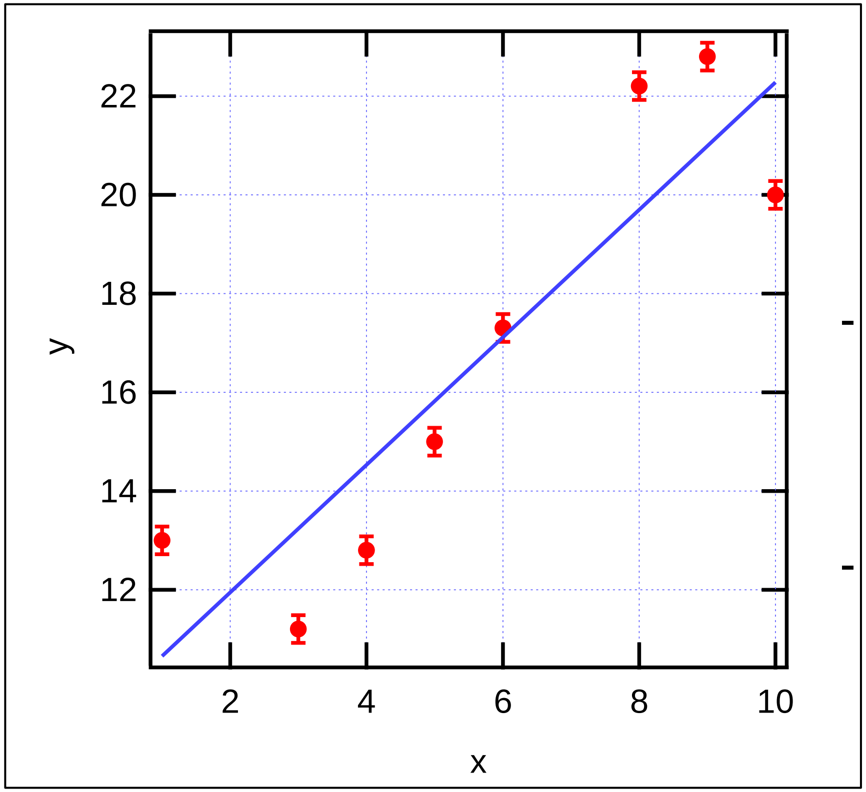
Normiertes χ^2 $\longrightarrow$ $$\chi_n^2 = \sum_{i=1}^{n} \frac{(y_i - f(x_i))^2}{s_i^2 \cdot (n-2)}$$

Kriterium für Güte des Fits:

$\chi^2 \approx 1$: **Fit ok**

$\chi^2 >> 1$: **Modell schlecht (siehe Residuen) oder Messunsicherheit zu klein geschätzt**
(Wahrscheinlichkeitsaussage über Relevanz des Fits über χ^2-Test)

Multilinearer Fit



In vielen Fällen können Messdaten durch eine Gerade nicht befriedigend angenähert werden:

- Streuung um angepasste Gerade viel grösser als Messunsicherheit
- Systematische Struktur in den Residuen

→ **zusätzliche Modellparameter notwendig**

Polynom

Eine Verbesserung ist oft mit zusätzlichen Fitparametern möglich

 Polynom m^{ter} Ordnung:

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

- Die Funktion ist linear in den Fitparametern
- Die Methode der kleinsten Quadrate ist anwendbar.
- Es existieren analytische Lösungen

RGP-Funktion für Polynomfit

{RGP(y1:yn; x11:xmn; WAHR, WAHR)}

Xij: Matrix mit m Spalten

1. Spalte: x-Werte
2. Spalte: x_2-Werte
m. Spalte: x_m-Werte

allgemeine Form multilineare Gleichung

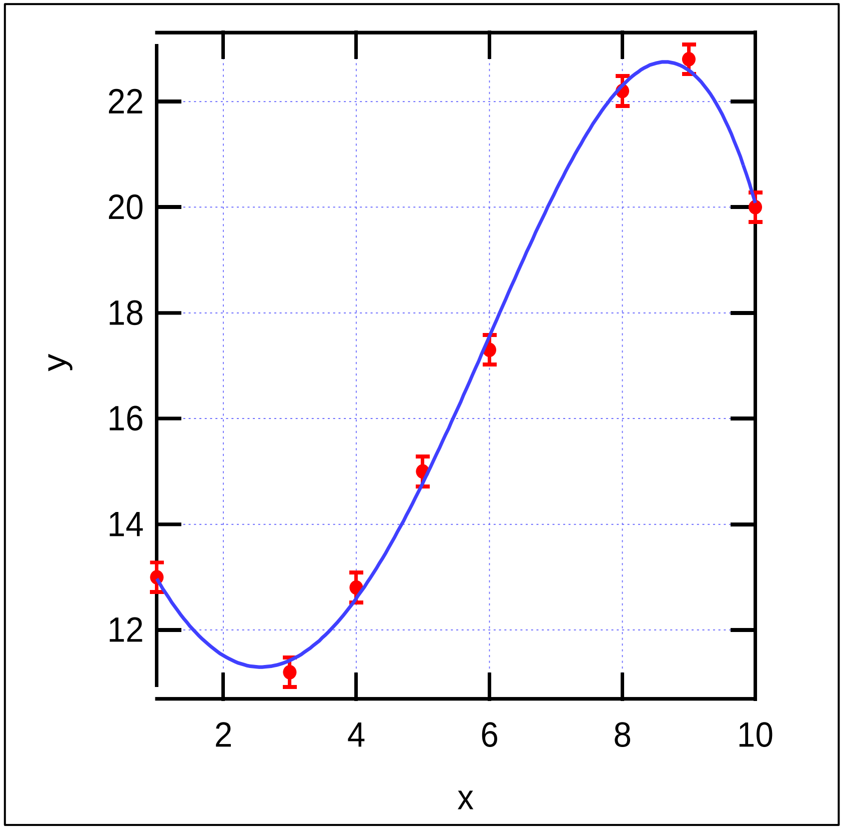
$$y(x) = a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + \cdots a_m x^m$$

Wertearray

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

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

Polynomfit



χ_n^2 = 1.05 (χ^2-Test: 40%)

F = 422 (Grenzwert = 6)

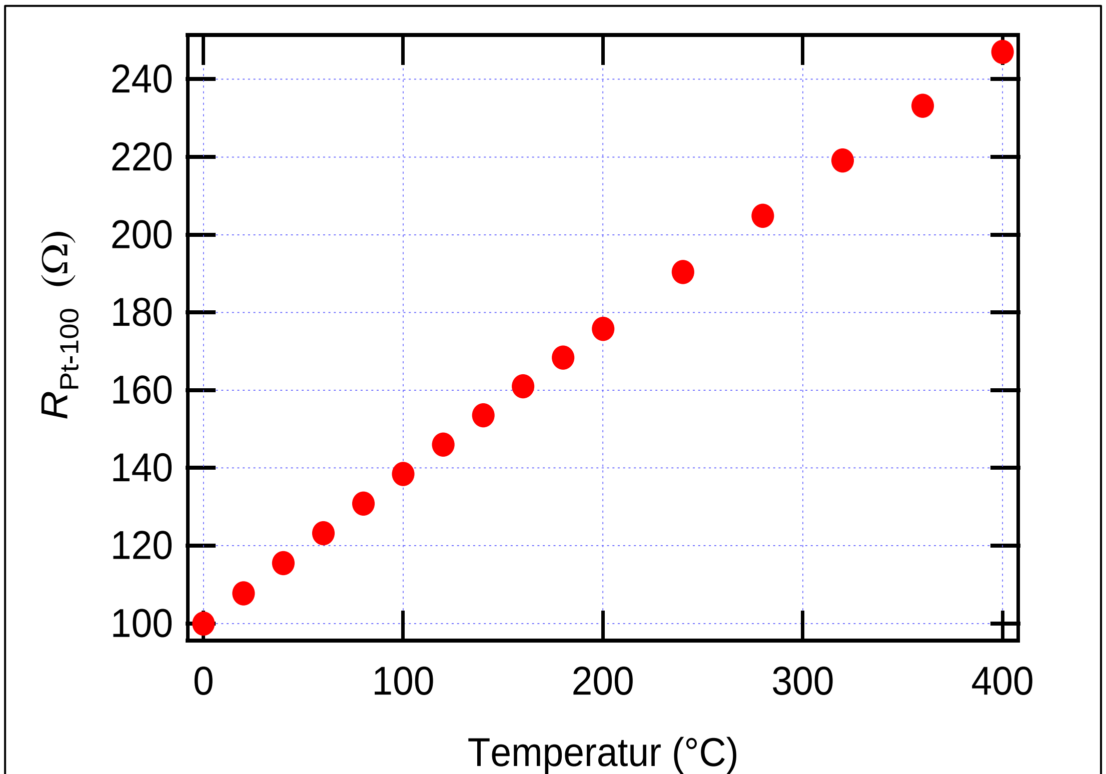
aber:

- nur 3 Freiheitsgrade
- Modell muss sinnvoll sein (Abstützung durch theoretische Überlegung; zusätzliche Untersuchungen….)

Bestimmung Kalibrierkonstanten Pt-100-Fühler

Der Widerstand eines Pt-100-Fühlers in Funktion der Temperatur lässt sich oberhalb 0 °C durch ein Polynom 2. Ordnung beschreiben.

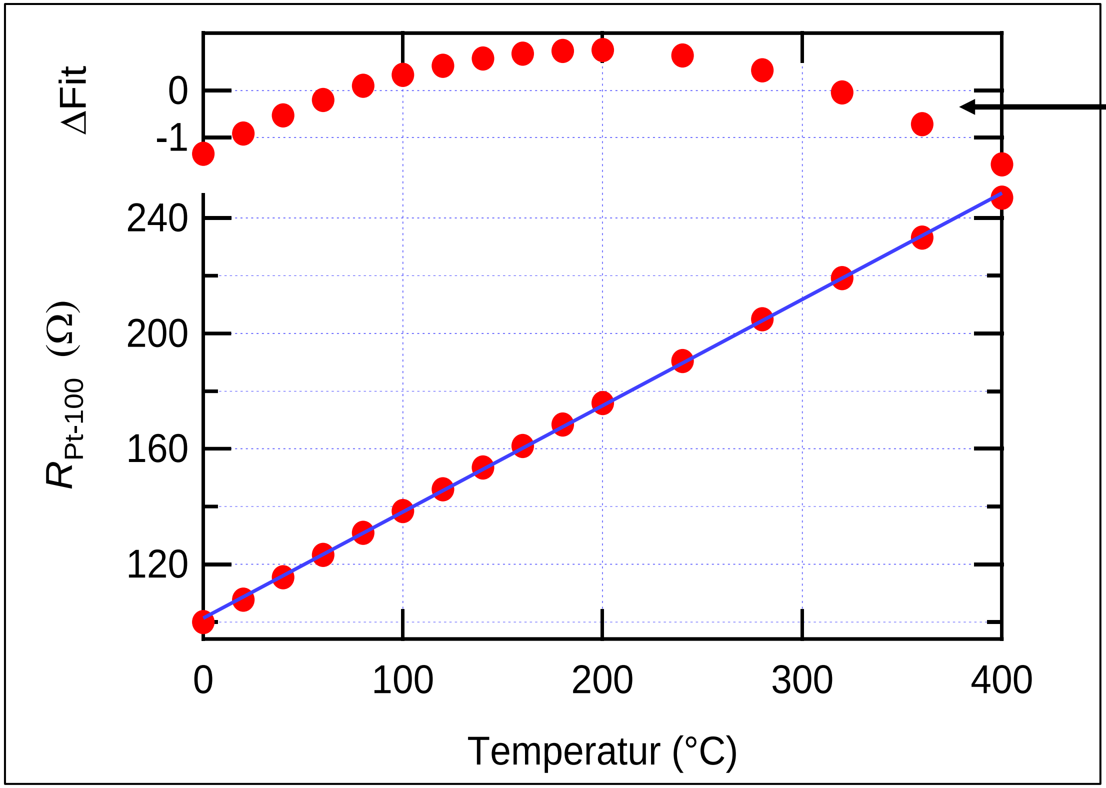
Norm IEC 751: $R(T) = R_{0\_°C}\,(1 + A \cdot T + B \cdot T^2); T \geq 0\ °C$



Beispiel:

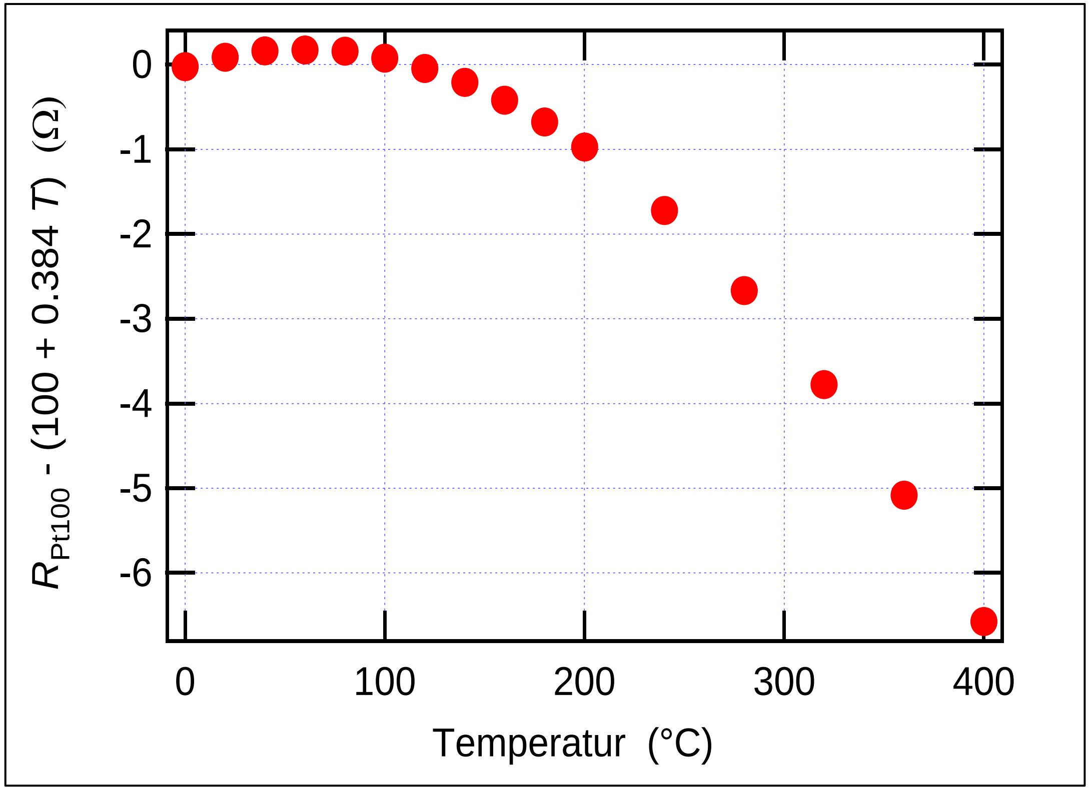
Gemessener Widerstandswert Pt-100

Geradenfit Pt-100 – Resultate



Residuen zeigen eine quadratische Komponente

Pt-100 – Abweichung lineares Verhalten

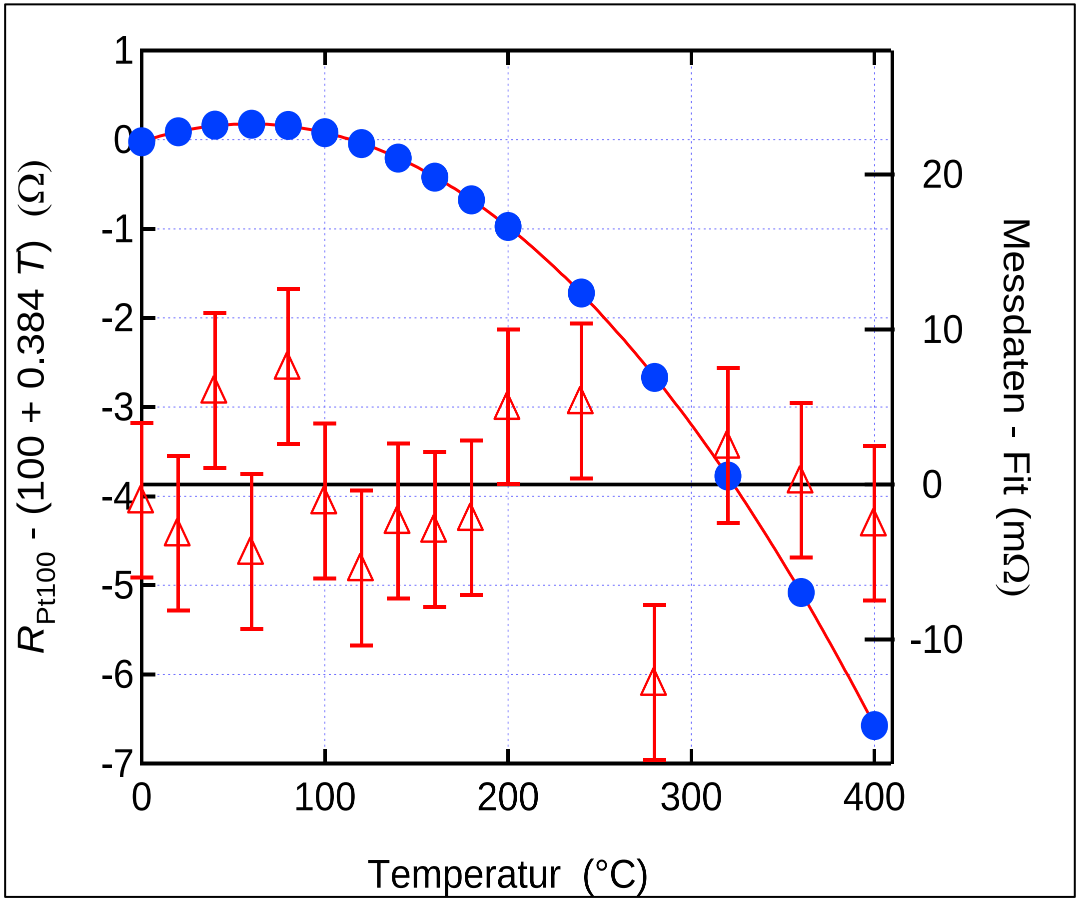


Normfühler:

$R(T = 0\ °\text{C}) = 100\ \Omega$

$a_1 = 0.384\ \Omega/°\text{C}$

Fit Temperaturabhängigkeit

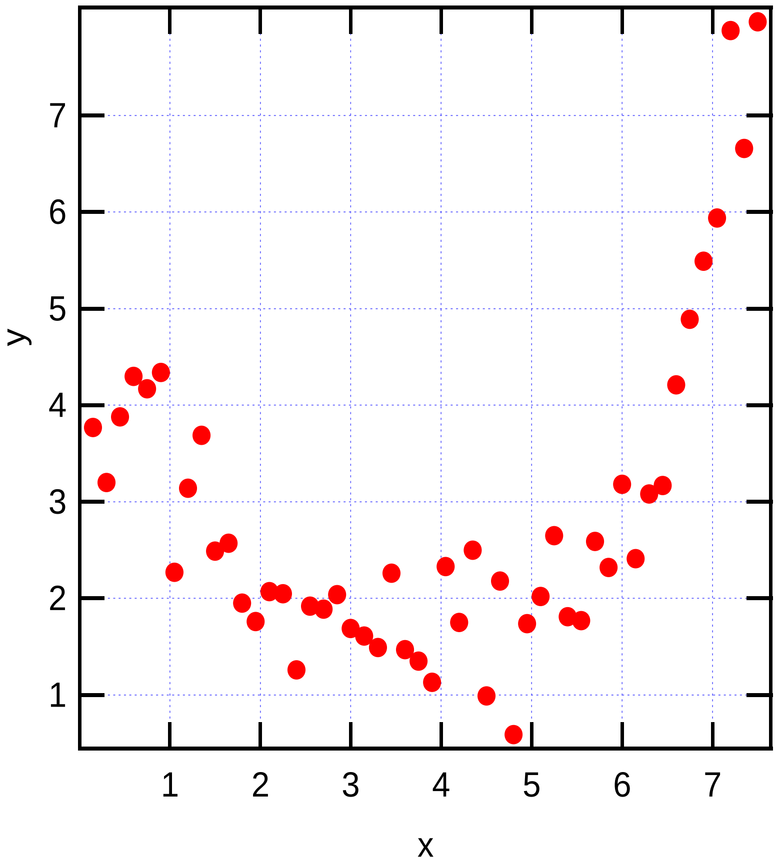


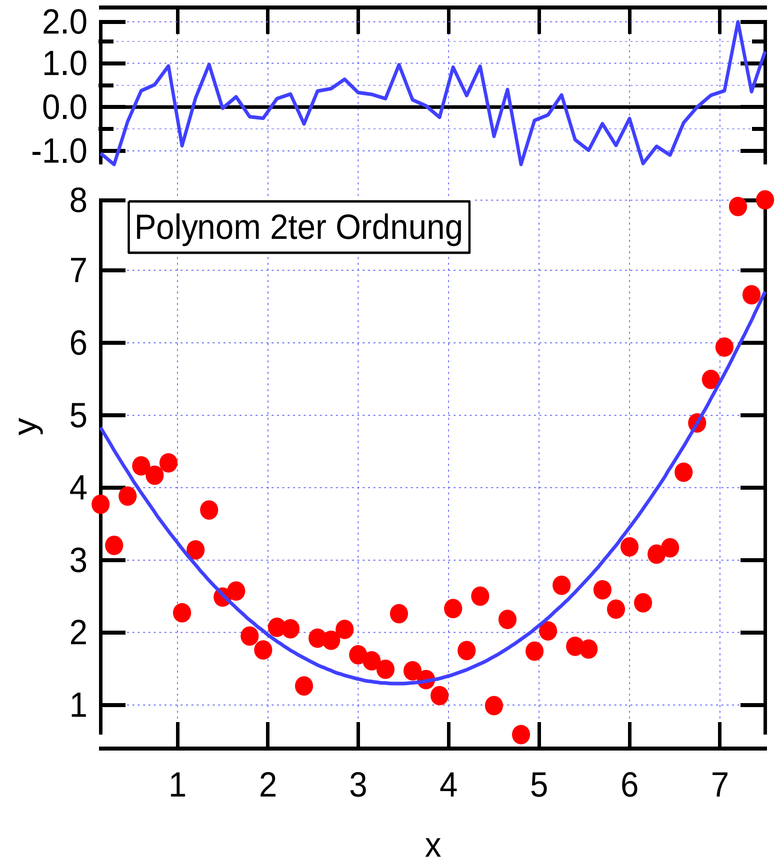
Fitresultat:

Polynom 2. Ordner nähert die Messdaten gut an:

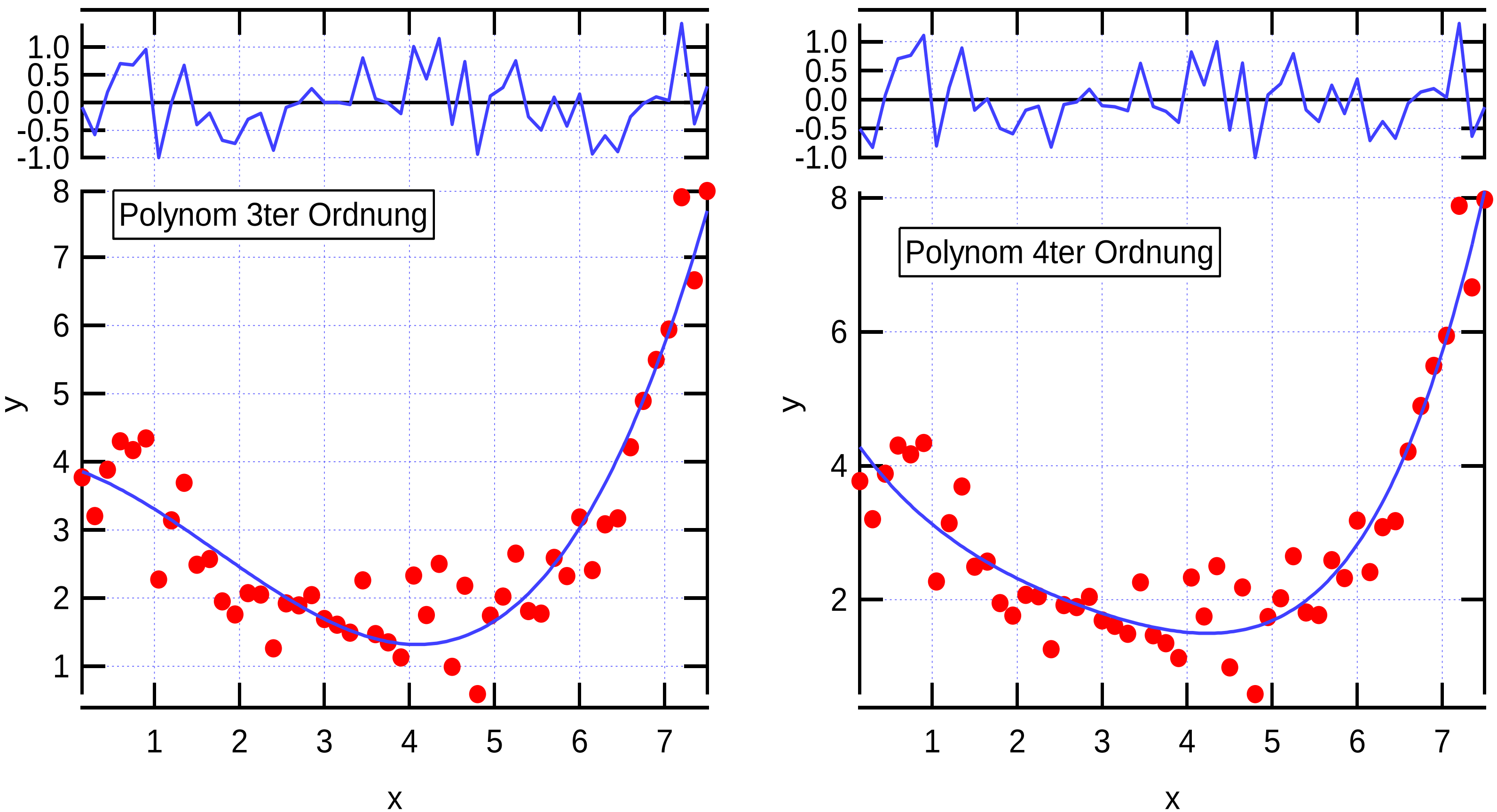
$(y_i - y(xi))$ sind zufällig verteilt

Beispiel 2 – Polynomfit

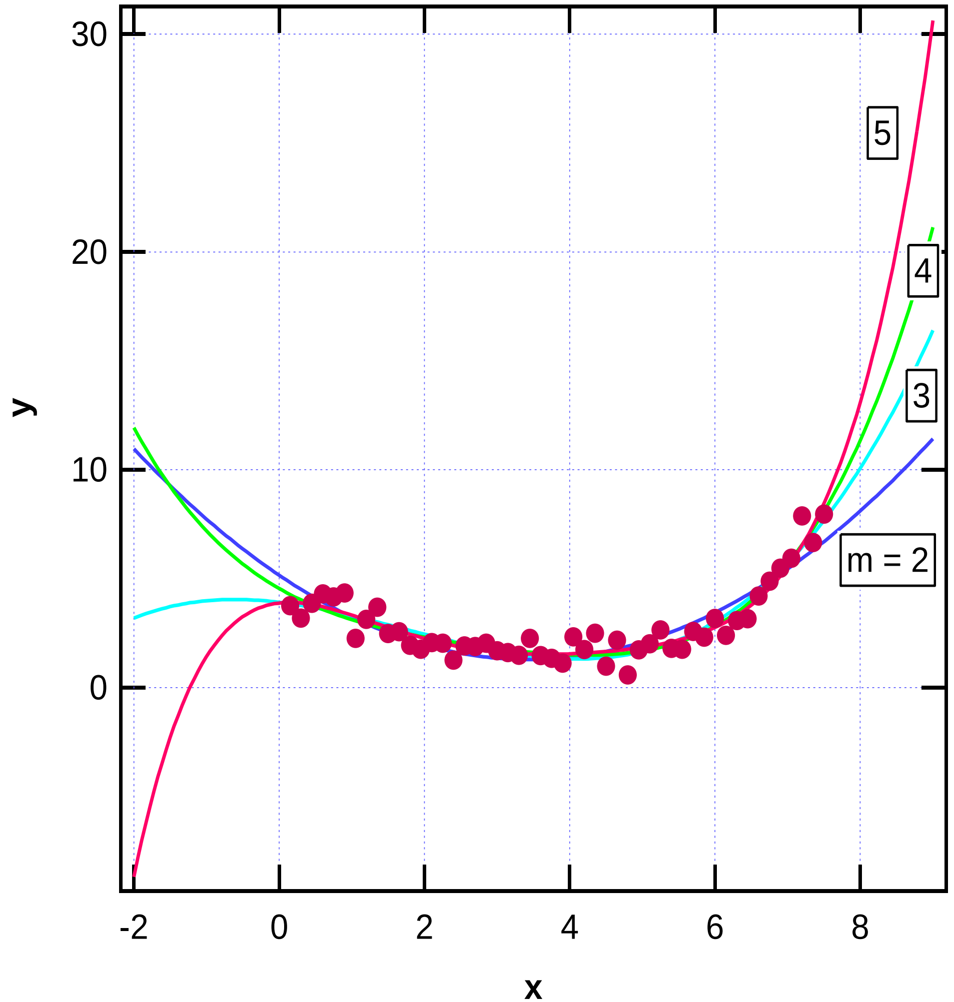




Beispiel 2 – Polynomfit



Extrapolation bei Polynomfits



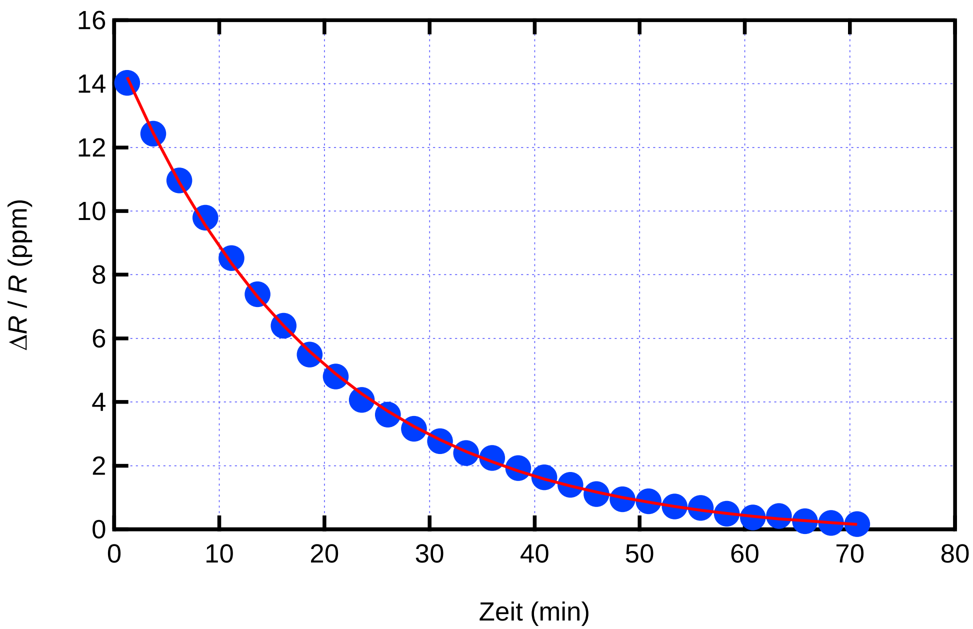
Nicht-lineare Fitfunktion

- Die Methode der kleinsten Quadrate kann auch für nicht-lineare Fitfunktionen verwendet werden.
- In diesem Fall muss das Minimum für χ^2 mit Hilfe numerischer Methoden gesucht werden.
- Im Programm EXCEL kann das Analysepaket „SOLVER“ für beliebige Fits eingesetzt werden

Beispiel – Eigenerwärmung eines Shunts

- Bei einem Messstrom I an einem Widerstand R wird die Leistung $P = R\,I^2$ verbraucht.
- Die Eigenerwärmung kann zu einer Widerstandsänderung führen.
- Die Änderung weist ein exponentielles Verhalten auf.

10 mΩ-Shunt bei 50 A ($P = 2.5$ W)



$$\frac{\Delta R}{R} = a_0 + a_1 \exp\big(-a_2(t - t_0)\big)$$

$$\frac{1}{a_2} = \tau$$

τ = Zeitkonstante

Beispiel – Eigenerwärmung eines Shunts

Bedeutung **Zeitkonstante**: Nach dieser Zeit hat der Shunt $(1 - 1/e) =$ 63 % der totalen, durch den Strom verursachten Änderung erreicht.

1 $\times\ \tau \rightarrow$ **63 %**

2 $\times\ \tau \rightarrow$ **86 %**

3 $\times\ \tau \rightarrow$ **95 %**

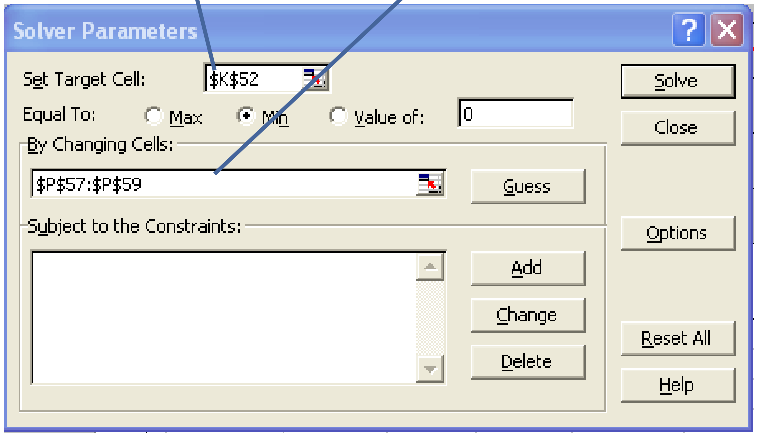
4 $\times\ \tau \rightarrow$ **98 %**

SOLVER – Praktische Anwendung

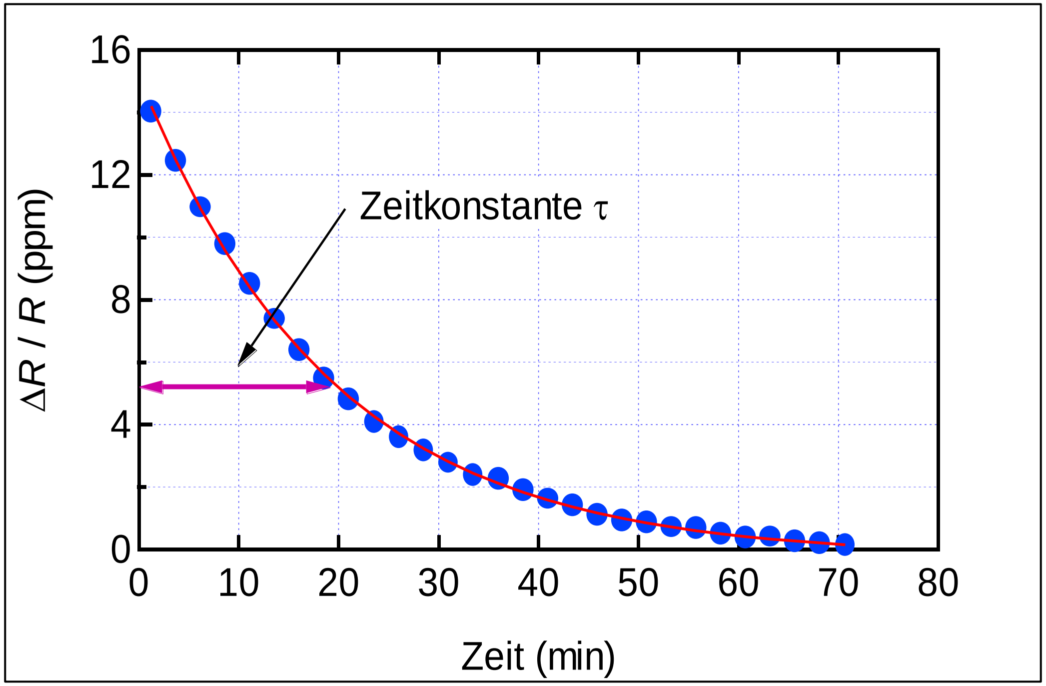
x_i: Zeit (min)	y_i : $\Delta R/R$ (ppm)	s_i (ppm)	Fitwert $f(x_i)$	$(y_i - f(x_i:))^2$
1.24	14.03	0.10	14.18	**2.09**
3.72	12.43	0.10	12.44	**0.01**
6.20	10.96	0.10	10.91	**0.22**
:	:	:	:	**:**
68.20	0.20	0.10	0.18	**0.05**
			χ^2 **:**	**17.05**

$$f(x) = a_0 + a_1 \exp(-a_2 t)$$

Fitparameter	
a_0	-0.23
a_1	15.40
a_2	0.052



Beispiel – Eigenerwärmung eines Shunts



Fitresultate:

a_0: (-0.23 ± 0.05) × 10^{-6}

a_1: (15.4 ± 0.07) × 10^{-6} = Änderung durch Eigenerwärmung

t: (19.1 ± 0.3) min

- Nach einer Stunde hat der Shunt $(1 - \exp(-60 / 19.1)) = 96$ % der Änderung erreicht.
- Er hat sich damit auf $0.04 \times 15.4 \times 10^{-6} = 0.6 \times 10^{-6}$ an seinen unter Strom I geltenden Gleichgewichtszustand angenähert

Schlussbemerkungen

Software für die (nicht-lineare) Ausgleichsrechnung

- Igor
- Mathcad
- Matlab
- Mathematica…..
- Metas.UncLib (www.metas.ch/unclib)

Weiterführende Literatur

- Douglas C. Motgomery, George C. Runger, Applied statistics and probability for engineers, Wiley, 3rd edition
- P. R. Bevington, D. K. Robinson, Data Reduction and Error Analysis for the Physical Sci-ences, 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.