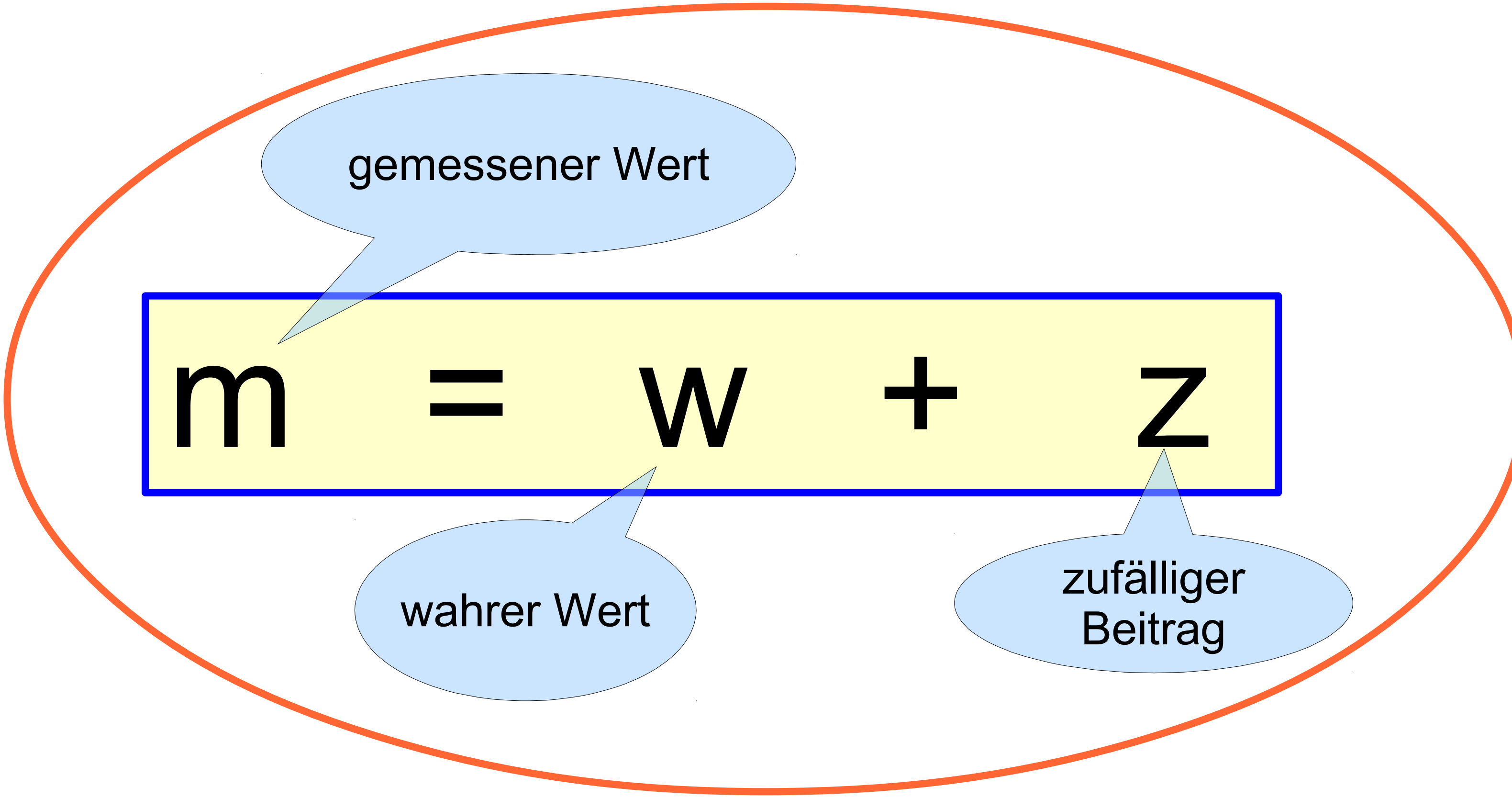
Modell einer Messung



***z* kann viele Ursachen haben:**

- zufälliger Beitrag zum Messwert („Rauschen“) → „statistische Unsicherheit“
- Genauigkeit des verwendeten Messinstruments → „systematische Unsicherheit“
- mitunter gibt es auch eine Unsicherheit auf den „wahren“ Wert, den man oft *z* zuschlägt → „theoretische Unsicherheit“
- Fehler im Messprozess – sollten nicht passieren !

$$\Rightarrow \quad z = z_{stat} + z_{syst} + z_{theo}$$

Darstellung von Messergebnissen

Messung einer physikalischen Größe *x* bedeutet,
experimentell die **Maßzahl** zur Maßeinheit zu ermitteln:

$$G = (G) \cdot [G]$$

Dazu gehört auch die Angabe der **Messunsicherheit ΔG**

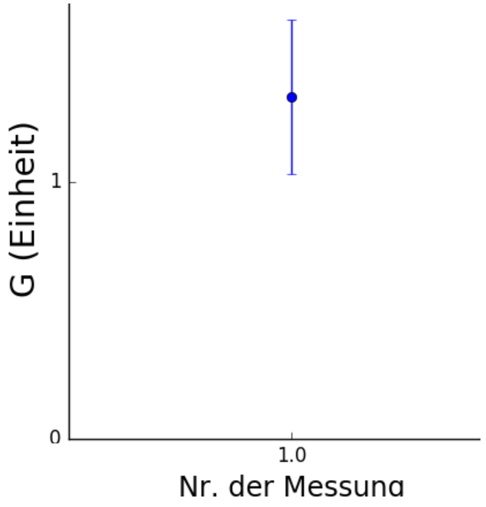
$$G = (x \pm \Delta x) \cdot \text{<Maßeinheit>}$$

Üblich ist auch die Angabe einer **relativen Meßunsicherheit**:

$$G = (x) \cdot \text{<Maßeinheit>} \pm \Delta x / x$$

$\Delta x / x$ meist in % angegeben, aber ggf. auch auch ‰ oder ppM („parts per Million“)

Grafische Darstellung:
Koordinatensystem mit Messpunkt und „Fehlerbalken“



Beispiel einer Messung

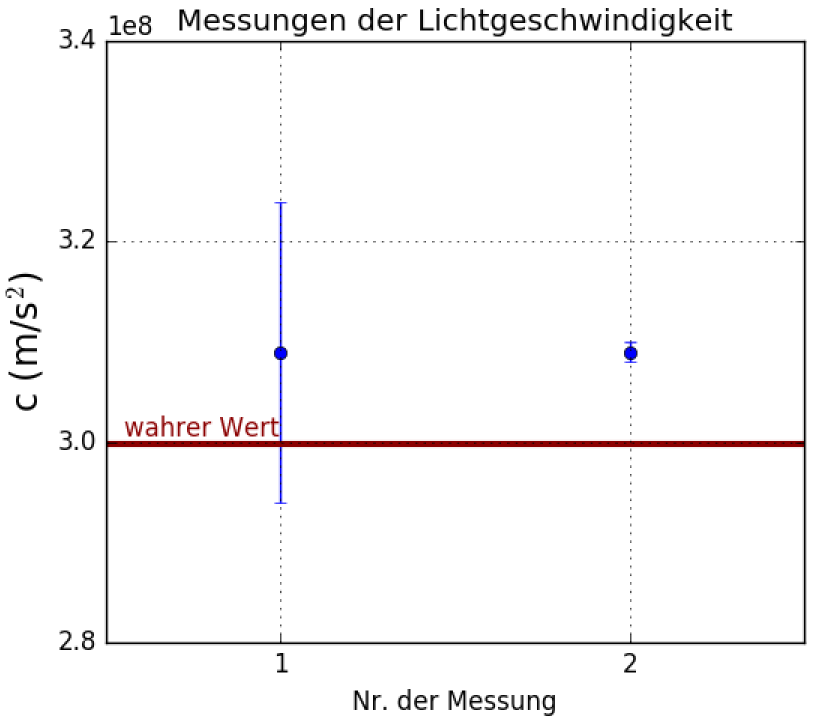
Entscheidend für Bewertung eines Ergebnisses ist die **Messunsicherheit !**

Beispiel: Die Lichtgeschwindigkeit ist bereits sehr genau bekannt,
„Literaturwert“ : $c = 2.99792458 \cdot 10^8$ m/s

Eine Messung $c = (3.09 \pm 0.15) \cdot 10^8$ m/s ist in **Übereinstimmung**

Eine Messung $c = (3.09 \pm 0.01) \cdot 10^8$ m/s wäre dagegen im **Widerspruch**

grafische Darstellung mit erzeugendem Script in der Sprache python




```
import numpy as np, matplotlib.pyplot as plt
# die Messdaten
c_m=[3.09e8, 3.09e8]
c_e=[0.15e8, 0.01e8]
c_w=2.99792458e8
# grafische Darstellung
plt.errorbar([1, 2], c_m, yerr=c_e, fmt='bo')
plt.axhline(c_w, color='darkred', linewidth=3)
plt.text(0.55, 3.005e8, 'wahrer Wert',
color='darkred')
plt.ylabel("c (m/s$^2$)", size='x-large')
plt.xlabel("Nr. der Messung")
plt.title("Messungen der
Lichtgeschwindigkeit")
# (... + einige Verschoenerungen ...)
plt.show()
```

Angabe einer physikalischen Größe ohne Messunsicherheit ist wertlos!

Signifikante Stellen eines Ergebnisses

Nicht alle Stellen, die ein Rechner ausspuckt, sind relevant !

Regel: Im Praktikum sollten die Messunsicherheiten („Fehler“) auf eine signifikante Stelle gerundet werden.

Die letzte Stelle des Messwerts hat die gleiche Größenordnung

(**Ausnahme**: wenn ein Zwischenergebnis mit Unsicherheit weiter verwendet werden soll, so wird mindestens eine signifikante Stelle mehr mitgenommen)

Beispiel:

Das numerische Ergebnis einer Messung der Erdbeschleunigung sei

$g = (9.8234 \pm 0.02385)\ \mathrm{m/s^2}$

→ Angabe **$g = (9.82 \pm 0.02)\ \mathrm{m/s^2}$**

bzw. **$g = 9.82\ \mathrm{m/s^2} \pm 0.2\ \%$**

Hinweis: übersichtliche Schreibweise ist wichtig !

$m = (0.0000082 \pm 0.0000003)\ \mathrm{kg}$ ist zwar korrekt, aber schwer lesbar

$m = 0.0000082\ \mathrm{kg} \pm 0.3\ \mathrm{mg}$ dito

$m = (8.2 \pm 0.3) \times 10^{-6}\ \mathrm{kg}$ oder **$m = (8.2 \pm 0.3)\ \mathrm{mg}$** ist **viel besser** !

Fehleranalyse

Zu jeder Messung gehört eine **Fehleranalyse**:
Ursache und Größe von Messabweichungen

Ursachen: 1) Fehlerhafte Bedienung von Messgeräten (z.B. falsch kalibriert)

2) Irrtum beim Protokollieren oder der Auswertung (z.B. Zahlendreher)

3) Messverfahren oder Messbedingung ungeeignet

Grobe Abweichungen durch sorgfältiges Experimentieren und Kontrolle (möglichst durch eine zweite Person) vermeiden !

Grob fehlerhafte Werte einer Messreihe werden nicht weiter verwendet.

Eine nicht zu unterschätzende Fehlerquelle ist eine mangelnde Objektivität des Experimentators. Oft entstehen falsche Messresultate auch dadurch, dass der Experimentator das Resultat, das er haben will, aus unzureichenden Daten herausliest oder sogar Daten manipuliert.

---

kleiner Exkurs: der Fall „Schön“ (DPA-Meldung vom 11.06.2004)

Die Universität Konstanz entzieht dem Physiker Jan Hendrik Schön seinen Doktortitel!

Die Universität bezieht sich ausdrücklich nicht auf Fehler in seiner Doktorarbeit, sondern stuft Datenmanipulationen während seiner späteren Forschertätigkeit an den Bell-Labs in den USA als wissenschaftlich unwürdiges Handeln ein. Das baden-württembergische Universitätsgesetz lässt einen Titelentzug auch auf Grund späteren unwürdigen Verhaltens zu.

Systematische Unsicherheiten

„Systematische Fehler" zeigen bei identischen Messbedingungen immer um den gleichen Betrag in die gleiche Richtung.

Sie können durch Messwiederholung weder erkannt noch eliminiert erden. Sie beeinflussen alle unter gleichen Bedingungen erfolgten Messungen in gleicher Weise.
Sie sind erfassbar durch Variation der Messmethode oder der Messbedingungen.

Ursachen	**Beispiele**
Fehlerhafte Meßgeräte	Eich- oder Justierfehler, Drift,...
Umwelteinflüsse	Temperatur, Druck,...
Rückwirkung der Meßgeräte	Innenwiderstand, Verformung, ..
Unzulänglichkeit des Experimentators	
Gültigkeitsgrenzen der phys. Gesetze	

Erkannte systematische Probleme können und müssen korrigiert werden!

Beispiel: Temperaturausdehnung eines Maßstabes, geeicht bei 20°, verwendet bei 30°, relative Temperaturausdehnung α = 0.0005 / K

→ **Korrektur** $L' = L \cdot [1 + 0.0005 \cdot (30-20)] = 1.005 \cdot L$

Aus mess- oder rechentechnischen Gründen nicht erfassbare systematische Unsicherheiten müssen abgeschätzt werden

Statistische (zufällige) Messunsicherheiten

„Statistische Fehler" beeinflussen Messergebnisse trotz identischer Bedingungen unterschiedlich in Betrag und Vorzeichen.

Sie sind zufällig in dem Sinne, dass ihre Ursachen im Einzelnen nicht verfolgt werden können - „Zufall" durch Unkenntnis in der klassischen Physik bzw. als Eigenschaft des Messprozesses in der Quantenphysik. Statistische Fehler sind unvermeidbar und werden mit mathematischen Methoden der Stochastik und Statistik behandelt.

Subjektive Ursachen	Objektive Ursachen
Parallaxenfehler	Äußere Einflüsse (p, T)
Skaleninterpolation	Statistische Messgröße (Rauschen)
Reaktionsvermögen	

Zufällige Messunsicherheiten lassen sich durch **Messwiederholung** und **Mittelung** reduzieren.

Bei n Wiederholungen einer Messung mit Einzelunsicherheit Δx

gilt für die Unsicherheit des Mittelwerts $$\Delta\bar{x} = \frac{\Delta x}{\sqrt{n}}$$

Wie bestimmt man die Werte der Messunsicherheiten ?

Und wie sind sie zu interpretieren ?

- einmalige Messungen
  $\longrightarrow$ Fehler abschätzen
- wiederholte gleichartige Messungen
  $\longrightarrow$ statistische Auswertung
- aus Messgrößen berechnete Ergebnisse
  $\longrightarrow$ Fehlerfortpflanzung

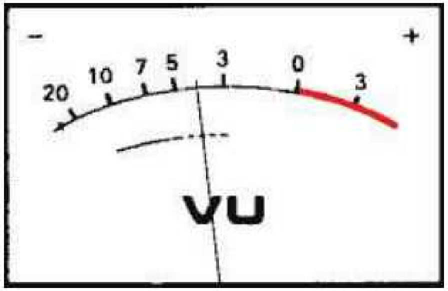
Beispiele: einmalig gemessene Größen

Bei einmalig gemessenen Größen schätzt man die Unsicherheit;
grobe Richtlinien:

a) bei fein unterteilter Skala → ± 0.5 · (Intervallbreite)

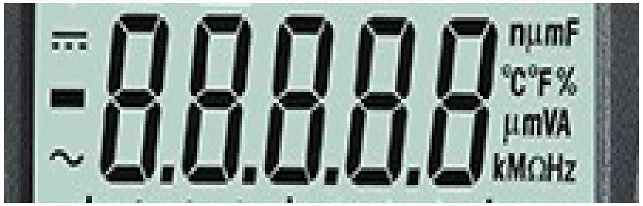
L = (82 ± 0.5) mm

b) bei grob unterteilter Skala → ± 0.1 · (Intervallbreite)



U = (4.0 ± 0.2) V

c) digitale Skala → ± 0.5 · letzte Anzeigestelle
⊕ Geräteklasse (lt. Datenblatt)
⊕ evtl. Anzeigefluktuationen



Beispiel: Messreihen

Bei Messreihen (mit N Werten x_i) führt man eine **statistische Analyse** durch.

In der Sprechweise der Statistik:
Eine Messreihe stellt eine Stichprobe aus der Menge der möglichen Messwerte („Grundgesamtheit“) dar. Die Häufigkeitsverteilung der Einzelmessungen nähert sich mit steigender Stichprobengröße der Verteilungsdichte der Grundgesamtheit an.

Unter recht schwachen Voraussetzungen (s. zentraler Grenzwertsatz) ist die zu Grunde liegende Verteilungsdichte in der Praxis häufig die **Normal-** oder **Gauß-Verteilung:**

Bestwert oder Erwartungswert, auch Mittelwert :

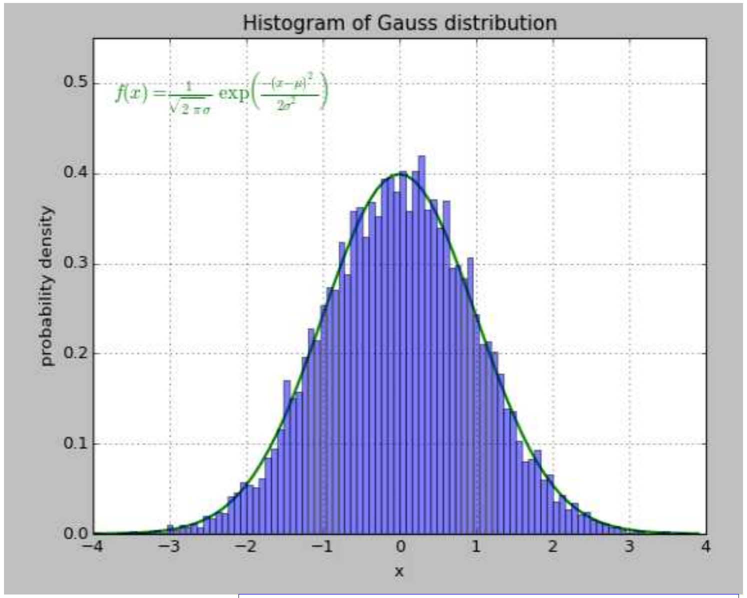
$$\bar{x} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} x_i$$

Messabweichung oder Standardabweichung:

$$\sigma_x = \sqrt{\frac{1}{N-1} \sum_{i=1}^{N} (x_i - \bar{x})^2}$$

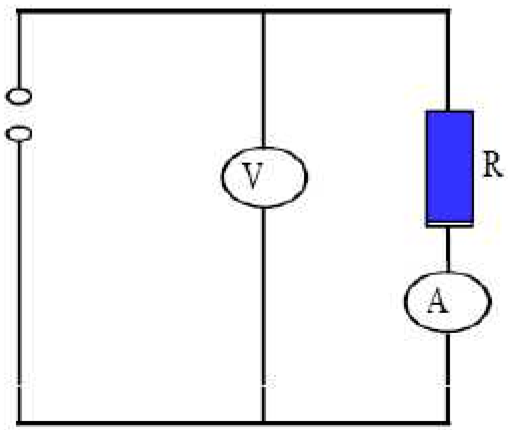
Standardabweichung des Mittelwerts:

$$\sigma_{\bar{x}} = \frac{\sigma_x}{\sqrt{N}}$$



script animated_Gauss.py

praktisches Beispiel: **Messung eines Widerstands R**



$$R = \frac{U}{I}$$

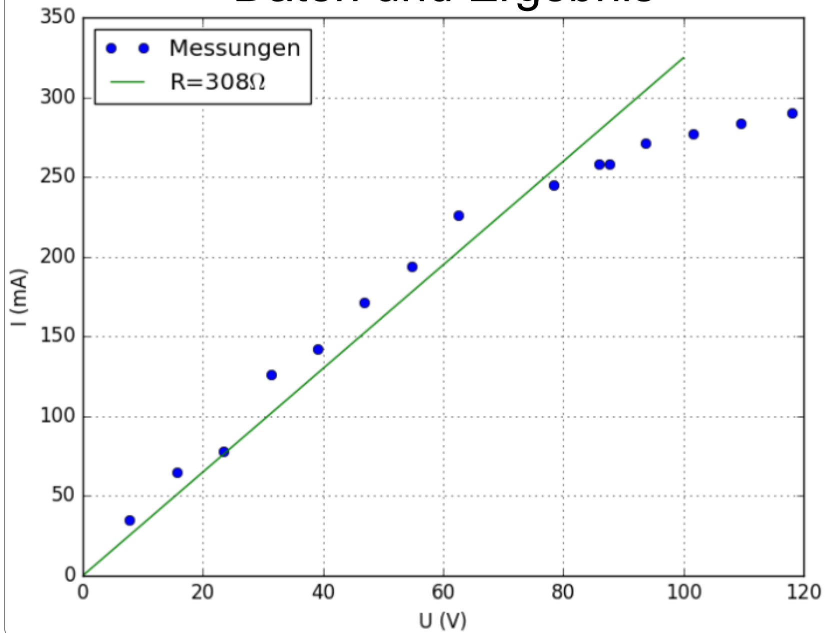
U \ V	I \ mA	R=U/I (Ω)
7,8	35	222.86
15,6	65	240.00
23,4	78	300.00
31,3	126	248.41
39,0	142	274.65
46,9	171	274.27
54,7	194	281.96
62,6	226	276.99
78,3	245	319.59
86,0	258	333.33
87,6	258	339.53
93,6	271	345.39
101,6	277	366.79
109,6	284	385.91
118,0	290	406.90

N = 15 Messungen

praktisches Beispiel: Messung eines Widerstands R (2)

Nach Kochrezept ausrechnen: $R = \frac{1}{N}\sum R_i = 307.77\,\Omega,\ \Delta R = \sqrt{\frac{\sum(R_i - R)^2}{N(N-1)}} = 14\,\Omega$

Grafische Darstellung :
Daten und Ergebnis



$$\Rightarrow \boxed{R = (308 \pm 14)\,\Omega}$$

Hier ist etwas faul … ?!

Mittelung nicht verträglicher Werte ist unsinnig ! (Hier: Erwärmung des Widerstands führt zu Abweichungen vom Ohm' schen Gesetz)

Script zur Erzeugung der Grafik

```
import numpy as np, matplotlib.pyplot as plt

U=[7.8,15.6,23.4,31.3,39.0,46.9,54.7,62.6,78.3,86.0,
    87.6,93.6,101.6,109.6,118.0]
I=[35,65,78,126,142,171,194,226,245,258,258,271,
   277,284,290]

plt.plot(U, I, 'bo',  label = "Messungen")
plt.xlabel("U (V)")
plt.ylabel("I (mA)")
x=np.arange(0, 140., 100)
plt.plot(x, 1/0.308*x,'g-',label = "R=308$\Omega$")
plt.legend(loc='best')
plt.grid()
plt.show()
```

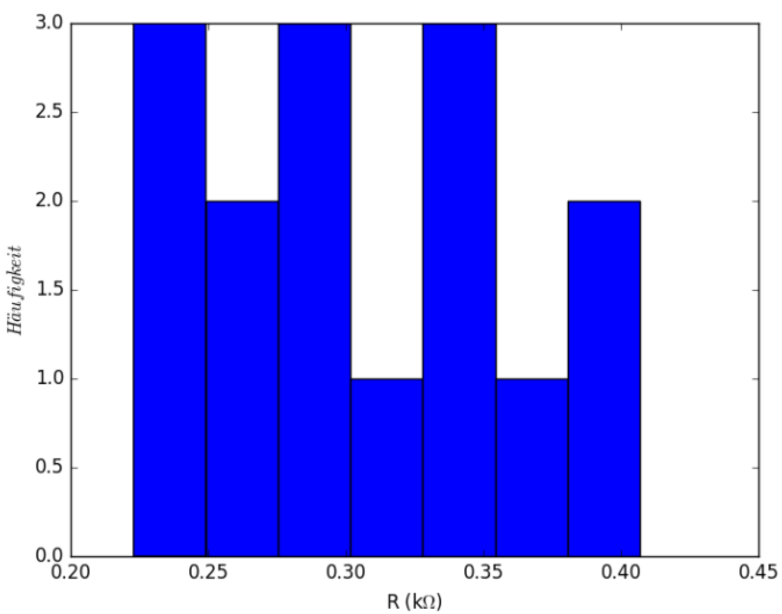
Häufigkeiten und Histogramm-Darstellung

Auswertung umfangreicher Messreihen:

→ Einteilung der *N* Messungen in *k* „Klassen“ (z.B. Intervalle 1, …, *k*) und Häufigkeit des Vorkommens auftragen.

Histogrammdarstellung: „Balkendiagramm“ der Häufigkeiten H_i, $i = 1, \ldots, k$

Beispiel: Widerstandsmessungen von eben als Häufigkeitsdiagramm (Histogramm)



Häufigkeiten: $\sum_{i=1}^{k} H_i = N$

relative Häufigkeiten: $h_i = \frac{H_i}{N} \Leftrightarrow \sum h_i = 1$

Mittelwert der Messgrößen: $\bar{x} = \sum h_i \, x_i$

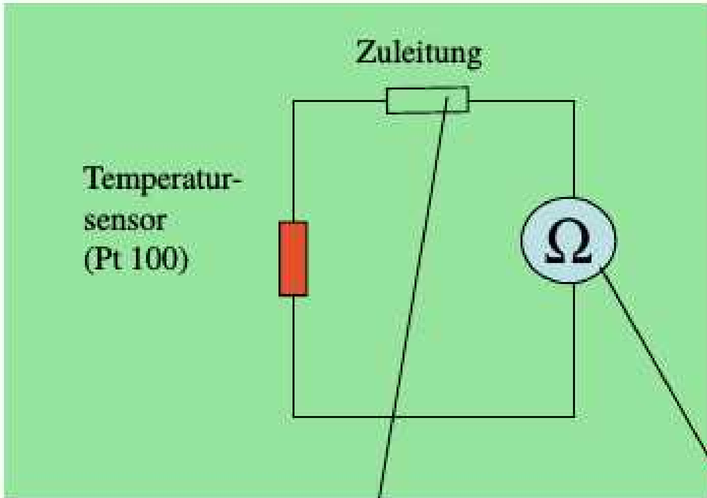
Messunsicherheit: $\sigma_x = \sum h_i (x_i - \bar{x})^2$

```
import numpy as np, matplotlib.pyplot as plt

U=np.array([7.8,15.6,23.4,31.3,39.0,46.9,54.7,62.6,
            78.3,86.0,87.6,93.6,101.6,109.6,118.0])
I=np.array([35,65,78,126,142,171,194,226,245,258,
           258,271,277,284,290])
R=U/I
plt.hist(R,7)
plt.xlabel("R ($\Omega$)")
plt.ylabel(r"$H\"aufigkeit$")
plt.show()
```

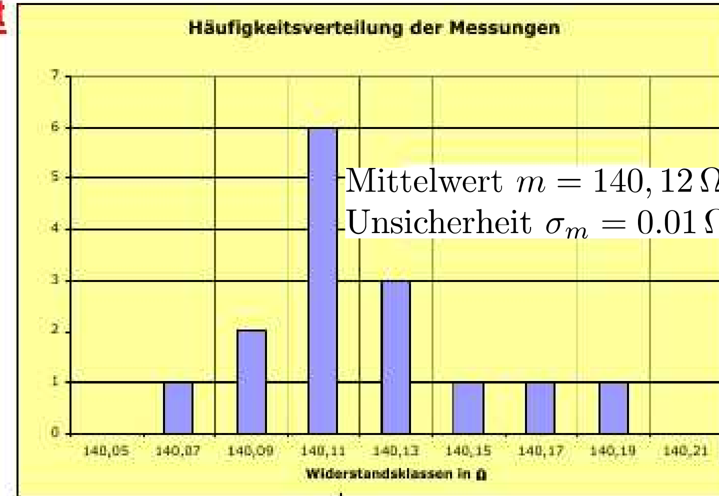
(s. auch Script Histogram.py aus CgDA)

Anwendungsbeispiel: wiederholte Widerstandsmessung



Klasse/Ω	Häufigkeit
140.05	0
140.07	1
140.09	2
140.11	6
140.13	3
140.15	1
140.17	1
140.19	1
140.21	0

Summe = 15



Systematische Abweichung: Zuleitungswiderstand 1,00 Ω

Herstellergarantie 0,05 Ω

statistische Unsicherheit 0,01 Ω

Messergebnis: 140,12 Ω

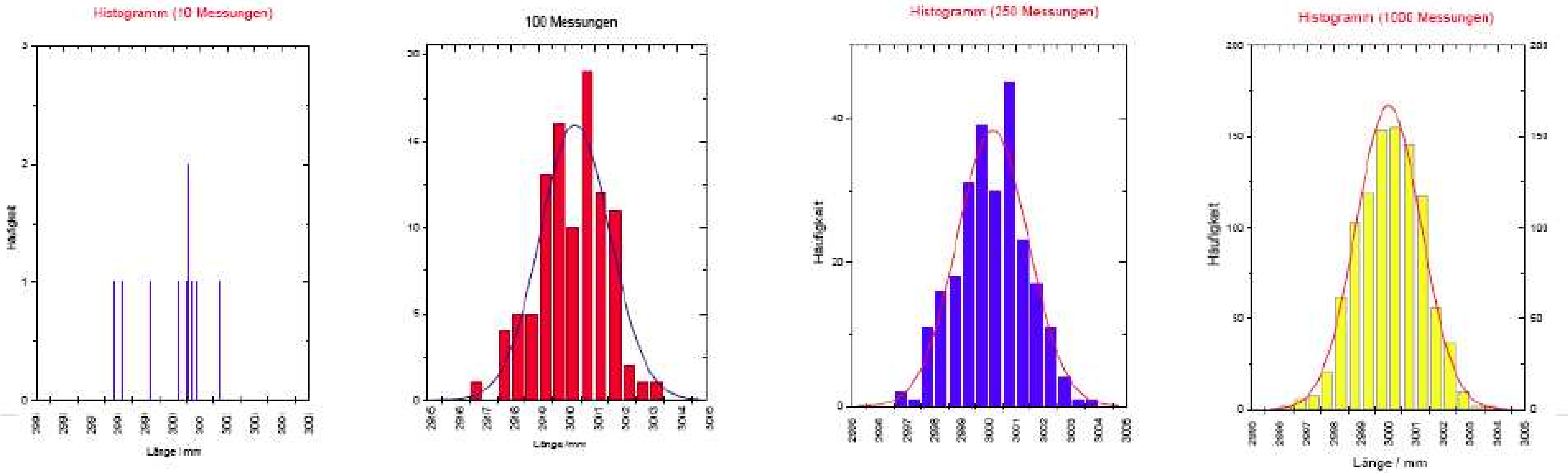
Korrektur: Messergebnis - Abweichung
139,12 Ω

Endergebnis: (139,12 ± 0,01 ± 0,05) Ω

Falls die Gesamtunsicherheit gefordert wird: quadratische Addition

Grenzverteilung

Mit zunehmender Anzahl von Messungen nähert sich die **Häufigkeitsverteilung** einer **kontinuierlichen Grenzverteilung** an.

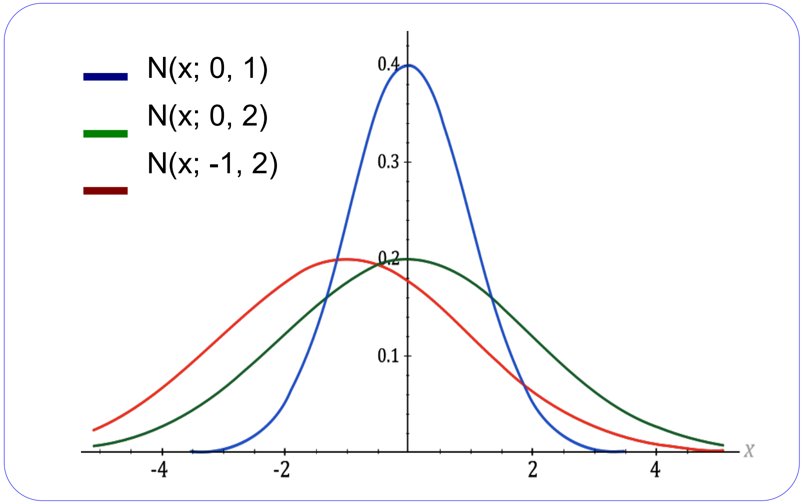


Unter recht schwachen Annahmen (Lyapunov-Bedingung) **ist die Grenzverteilung der statistischen Abweichungen**

die <u>Gauß-Verteilung:</u>

$$\boxed{N(x;\mu,\sigma) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} e^{\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}}}$$

(zentraler Grenzwertsatz der Statistik)



Eigenschaften der Gauß- oder Normal-Verteilung

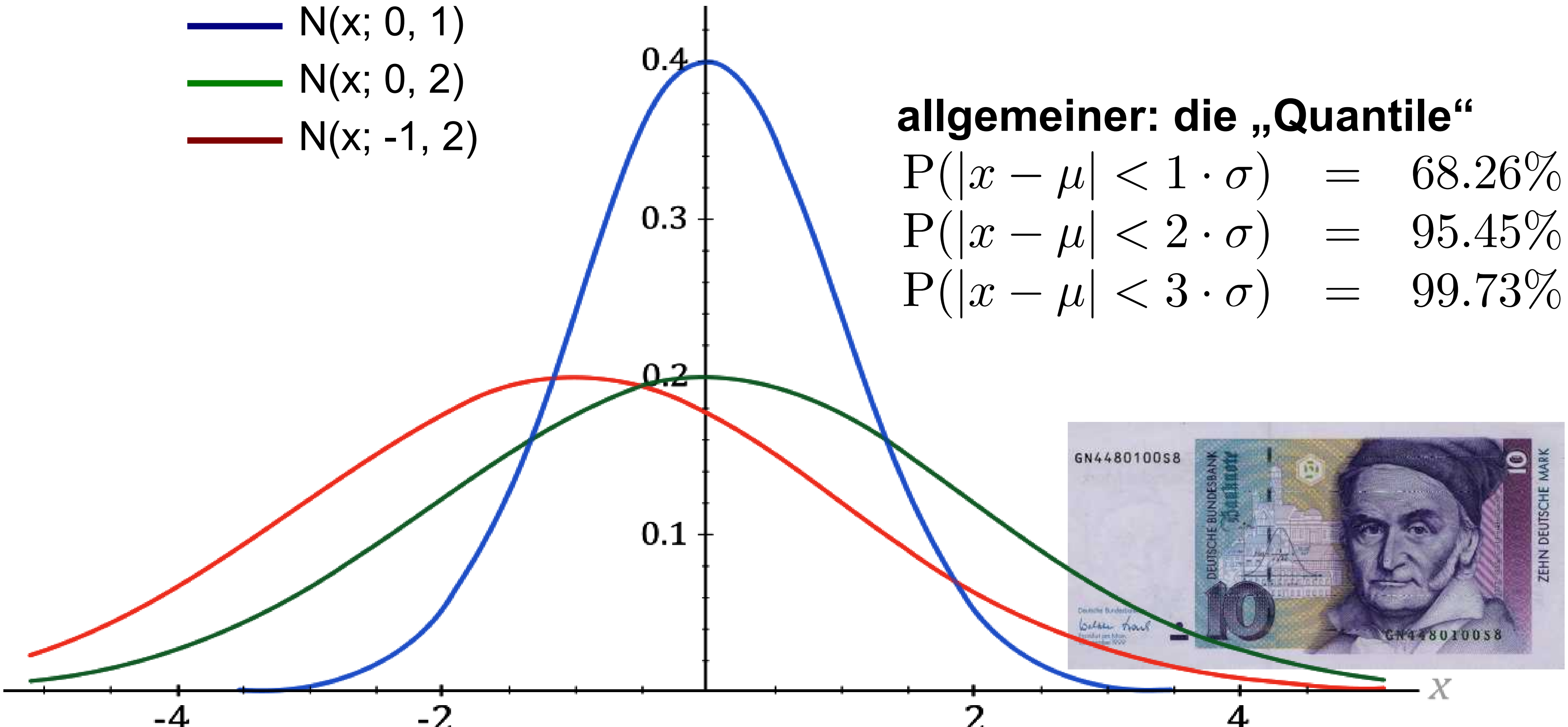
$$\boxed{N(x;\mu,\sigma) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma}\mathrm{e}^{\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}}}$$

Mittelwertwert $\mathrm{E}[x] = \mu$

Standardabweichung σ

(Maß für die Breite, entspricht der Messunsicherheit Δx von eben)

68,3% aller Messungen liegen im Intervall $[\mu-\sigma,\ \mu+\sigma]$



allgemeiner: die „Quantile“

$$\begin{aligned}
\mathrm{P}(|x-\mu| < 1\cdot\sigma) &= 68.26\% \\
\mathrm{P}(|x-\mu| < 2\cdot\sigma) &= 95.45\% \\
\mathrm{P}(|x-\mu| < 3\cdot\sigma) &= 99.73\%
\end{aligned}$$

Gewichteter Mittelwert

Wenn eine Größe mehrfach (Werte x_i) mit unterschiedlichen Unsicherheiten (σ_i) bestimmt wurde, so bildet man einen „**gewichteten Mittelwert**".

Die **Gewichte** sind dabei die **quadrierten Kehrwerte der Unsicherheiten**:

$$\bar{x} = \frac{\sum w_i \, x_i}{\sum w_i} \; \text{mit} \, w_i = 1/{\sigma_i}^2$$

Präzisere Messungen erhalten das größere Gewicht.

Überlegen Sie, was die quadratische Wichtung für Ihre Arbeit bedeutet, wenn Sie eine Größe mit dem dreifachen der bisher bekannten Unsicherheit bestimmen.

Die **Unsicherheit** des gewichteten Mittelwerts ergibt sich folgendermaßen:

$$\sigma_{\bar{x}} = 1 \,/\, \sqrt{\sum w_i} \quad \left(\Leftrightarrow \; \frac{1}{\sigma_{\bar{x}}^2} = \sum \frac{1}{{\sigma_i}^2} \right)$$

(Beweis z.B. mit Hilfe der Fehlerfortpflanzung, s. u., bzw. Vorl. CgDA)

python *Script*:

```
import numpy as np

w = 1/sx**2
sumw = np.sum(w)
mean = np.sum(w*x)/sumw
smean = np.sqrt(1./sumw)
```

Fehlerfortpflanzung

Wenn eine Größe y nicht direkt messbar ist, sondern als Funktion von anderen (Mess-)Größen abhängt, also $y = f(x_1, \ldots, x_n)$, dann wendet man das **Gauß'sche Fehlerfortpflanzungsgesetz** an:

$$\sigma_y^2 = \sum_{i=1}^{n} \left(\frac{\partial y}{\partial x_i} \right)^2 \sigma_{x_i}^2$$

Dabei wird die **statistische Unabhängigkeit** der Größen x_i vorausgesetzt. Für Nicht-lineare Funktionen f muss die Gültigkeit der **Taylor-Näherung** um die Bestwerte der x_i innerhalb der Unsicherheiten σ_{xi} gewährleistet sein. Wenn diese Voraussetzungen nicht gegeben sind, müssen andere Methoden angewandt werden (Berücksichtigung der Kovarianz-Matrix oder Monte-Carlo-Methode, s. Vorl. CgDA).

Spezialfälle:

$$y = x_1 + x_2 \text{ oder } y = x_1 - x_2$$

$$\Rightarrow \sigma_y{}^2 = \sigma_1{}^2 + \sigma_2{}^2$$

Quadrierter *absoluter* Fehler auf die Summe oder Differenz zweier Messungen ist die quadratische Summe ihrer *absoluten* Fehler

$$y = x_1 \cdot x_2 \text{ oder } y = \frac{x_1}{x_2}$$

$$\Rightarrow \left(\frac{\sigma_y}{y} \right)^2 \simeq \left(\frac{\sigma_1}{x_1} \right)^2 + \left(\frac{\sigma_2}{x_2} \right)^2$$

Quadrierter *relativer* Fehler auf das Produkt oder Verhältnis zweier Messungen ist die quadratische Summe ihrer *relativen* Fehler

Zusammenfassung: Messung

Messwert

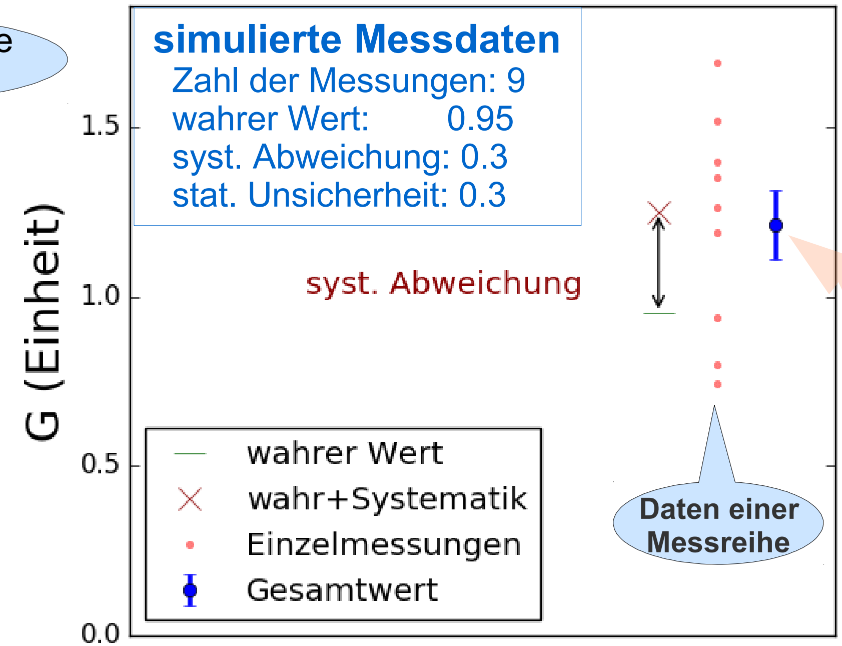
wahrer Wert

zufällige statistische Abweichung

$$m = w + z_{sys} + z_{stat}$$

zufällige systematische Abweichung

- systematische Unsicherheit betrifft alle Messwerte in gleicher Weise
- statistische Unsicherheit ist bei jeder Messung anders



Statistische Unsicherheiten können durch Mehrfachmessung und Mittelwertbildung reduziert werden → Zusammengefasst als **Messpunkt mit „Fehlerbalken"**

$$\sigma_{\bar{G}} = \frac{\sigma_G}{\sqrt{N}}$$

Gesamtunsicherheit: $\sigma_{\text{tot}} = \sqrt{{\sigma_{\text{stat}}}^2 + {\sigma_{\text{sys}}}^2} = \sqrt{0.3^2/9 + 0.3^2} = 0.32$

dominiert durch systematische Unsicherheit !

- da verschiedene Unsicherheiten lt. **Fehlerfortpflanzungsgesetz** quadratisch addiert werden, können kleine Beiträge im Endergebnis vernachlässigt werden

→ Konzentration auf die dominanten Effekte !

Paare von Messungen

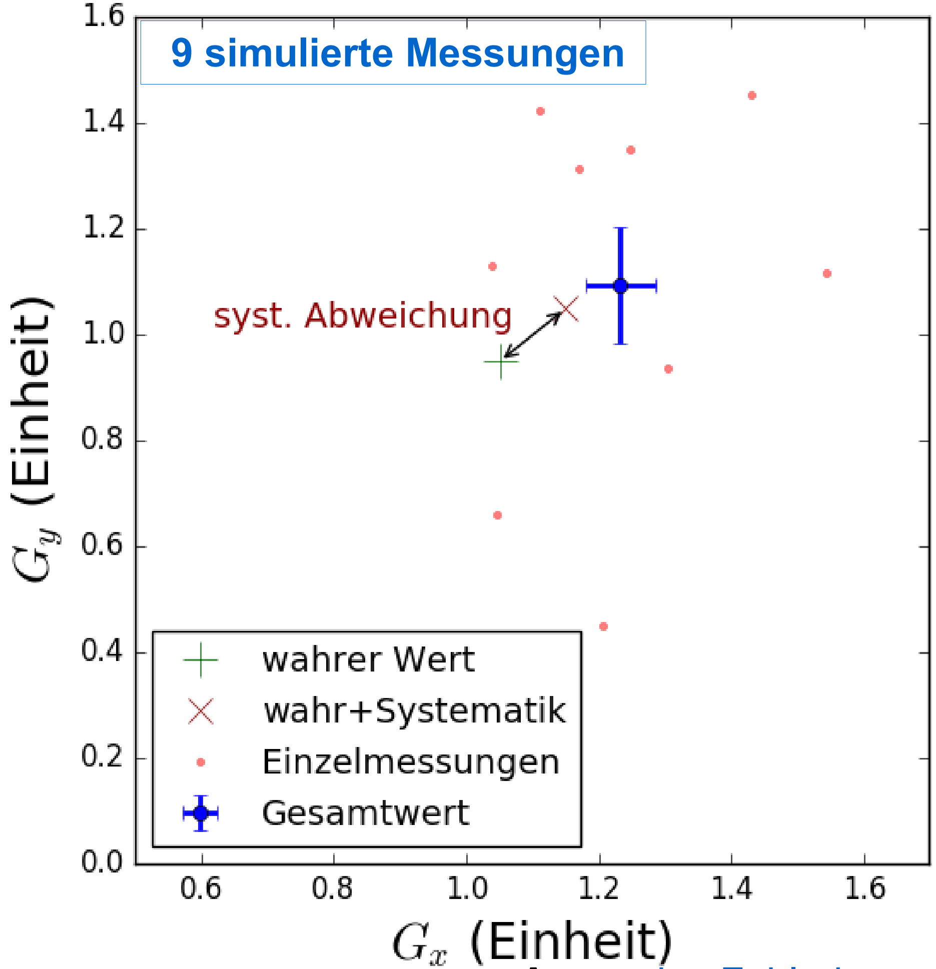
Sehr häufig werden Paare von Messungen (G_x, G_y) aufgenommen.

Fast immer sind diese Messungen unabhängig –

dann lassen sich die Überlegungen verallgemeinern:

aus dem „Fehlerbalken“ wird ein Fehlerkreuz.

Mittelwert, Unsicherheit auf den Mittelwert und Fehlerfortpflanzung in jeder Koordinate separat berechnen



Anm.: das Fehlerkreuz zeigt nur die statistischen Unsicherheiten

Datenquellen

Daten aus Messungen
können in unterschiedlicher Form gewonnen werden:

– Ablesen von analogen und digitalen Messgeräten

Eingabe über Tastatur zur Darstellung / Auswertung

– Datenexport aus digitalen Messgeräten,
insb. „Datenlogger“ oder Digitaloszilloskope

typischerweise große Datenmengen erfordern Programm-gestütztes Einlesen sowie Funktionen zur Darstellung und Signalverarbeitung
(Maxima / Minima, Periodendauer bzw. Frequenz, Frequenzspektrum, ...)

– Weiterverarbeitung der Ausgabe von Analyseprogrammen

erfordert Funktionen zur Datenübergabe an Programme zur finalen Auswertung und Darstellung der Ergebnisse

(übliche) Datenformate

Messgeräte (auch „Datenlogger") und einige Handy-Apps (z.B. phyphox) nutzen einfache Datenformate in Text-Form:

Beispiel `PicoScope,` „Comma Separated Values" (CSV)

```
Time,Channel A
(ms),(V)

-0.349,-0.000458
-0.348,-0.000458
-0.347,-0.000458
    . . .
```

Kopfzeilen mit sog. „**Meta-Daten**"

die eigentlichen **Daten** als Dezimalzahlen, in Spalten durch „," getrennt

Üblich sind auch „Tabulator-getrennte" Dezimalzahlen und - bisweilen – auch Dezimalzahlen mit „ , " statt „ . "
(dann müssen für die Verwendung in python-Programmen Dezimalkommata durch Dezimalpunkte ersetzt werden!)

Durchgesetzt haben sich „beschreibende" Datenformate, z.B.
`xml` = „**ex**tensible **m**arkup **l**anguage" oder
`json` = „**j**ava **s**cript **o**bject **n**otation" (≙ python dictionary);
gut durch `python`-Module unterstützt !

Rein „binäre" Datenformate (also sehr kompakte Darstellungen in maschinenabhängigem digitalem Format) werden wegen ihrer Plattformabhängigkeit heute kaum noch verwendet.

`Beispiel-Code`

```
#  Daten im csv-Format lesen

# Datei zum Lesen öffnen
f = open('AudioData.csv', 'r')

# Kopzeile(n) lesen
header=f.readline()
print "Kopfzeile:", header

# Daten in 2D-numpy-array einlesen
data = np.loadtxt(f,
        delimiter=',', unpack=True)
print "-> Anzahl Spalten",
        data.shape[0]
print "-> Datenzeilen",
        data.shape[1]

# Daten in 1D-arrays speichern
t = data[0]
a = data[1]
l = len(a)
```

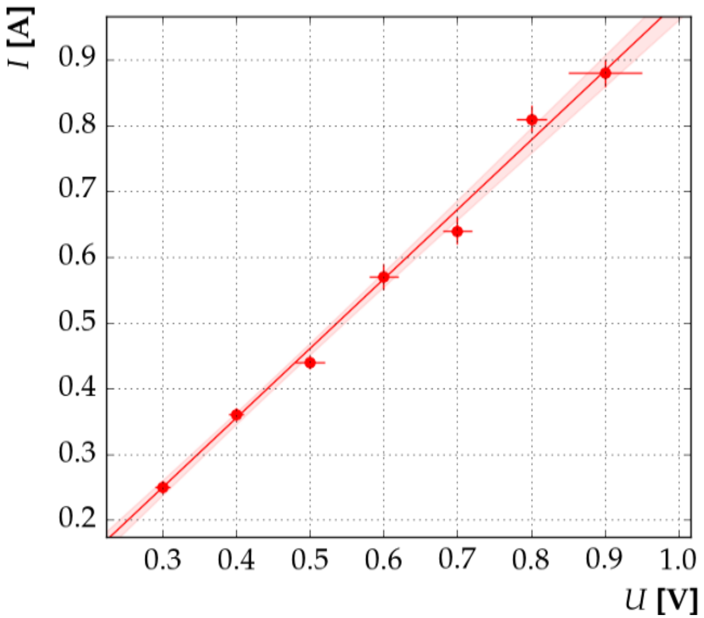
Modellanpassung oder „Regression“

In der Regel gibt es einen funktionalen Zusammenhang zwischen (Mess-)Größen:

$$y = f(x;\ p_1, \ldots, p_n)\ ;$$

die gesuchten physikalischen Größen stecken dann in den Parametern $p_1, \ldots, p_n$.

Beispiel von eben (I, U) : $I = (1/R) \cdot U$



in aller Kürze:

Mit numerischen oder analytischen Methoden werden die Parameter p_k so bestimmt, dass ein vorgegebenes „**Abstandsmaß**“ zwischen den Messpunkten y_i und den Funktionswerten $f_i = f(x_i; p_1, \ldots, p_n)$ **minimal** wird.

Script: Anpassen von Funktionen an Messdaten

15. November 2013

Funktionsanpassung mit der χ^2-Methode

http://www.ekp.kit.edu/~quast

Vorschlag von Gauß:
Summe der kleinsten Fehlerquadrate,

$$S = \chi^2 = \sum_{i=1}^{N} \frac{(y_i - f(x_i, \{p\}))^2}{{\sigma_i}^2}$$

wird bzgl. der Parameter {p} minimiert.

Modellanpassung: Minimieren von S

Minimierung von $$S = \chi^2 = \sum_{i=1}^{N} \frac{\left(y_i - f(x_i, \{p\})\right)^2}{{\sigma_i}^2}$$ *N* Messungen
k Parameter

- analytisch: $$\frac{\partial S}{\partial p_j} = 0\,,\; j = 1, \ldots, k$$ als notwendige Bedingung für ein Minimum

  lösbar in Spezialfällen, z. B. für lineare Probleme $$f(x, \{p\}) = \sum_{j=0}^{k} p_j\, f_j(x)$$

- i. a. numerisch
  „numerische Optimierung: Algorithmen zur Suche nach dem (einem?) Minimum einer Skalaren Funktion im *k*-dimensionalen Parameterraum

In der Praxis werden heute auch für lineare Probleme
numerischen Minimierungsmethoden verwendet.
(außer in Spezialfällen, z. B. bei zeitkritischen oder immer wieder vorkommenden Problemstellungen)

Modellanpassung: Beispiel mit einem Parameter

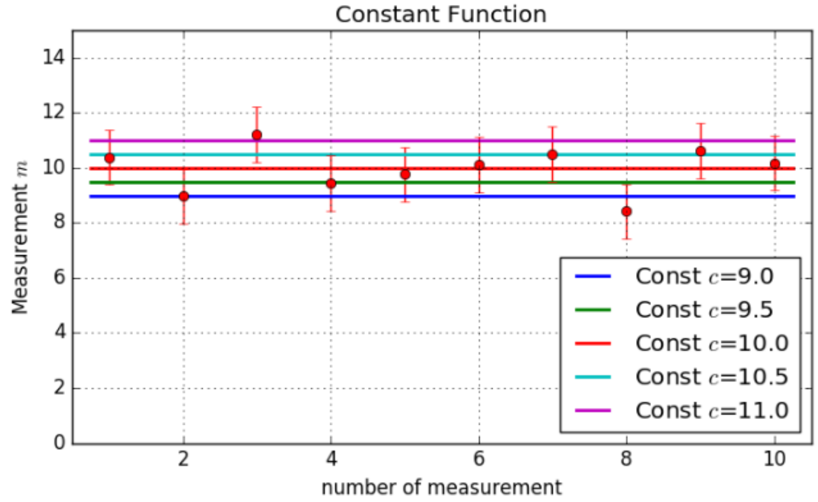
Mittelwert von 10 Messungen y_i mit Unsicherheiten σ entspricht der Anpassung einer konstanten Funktion $f(x;c)=c$

$$S(c) = \sum_{i=1}^{10} \frac{(y_i - c)^2}{\sigma^2}$$

analytisch: $$0 = \frac{dS}{dc} = \sum_{i=1}^{N=10} \frac{-2(y_i - c)}{\sigma^2}$$

$$\Rightarrow \hat{c} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N=10} y_i$$

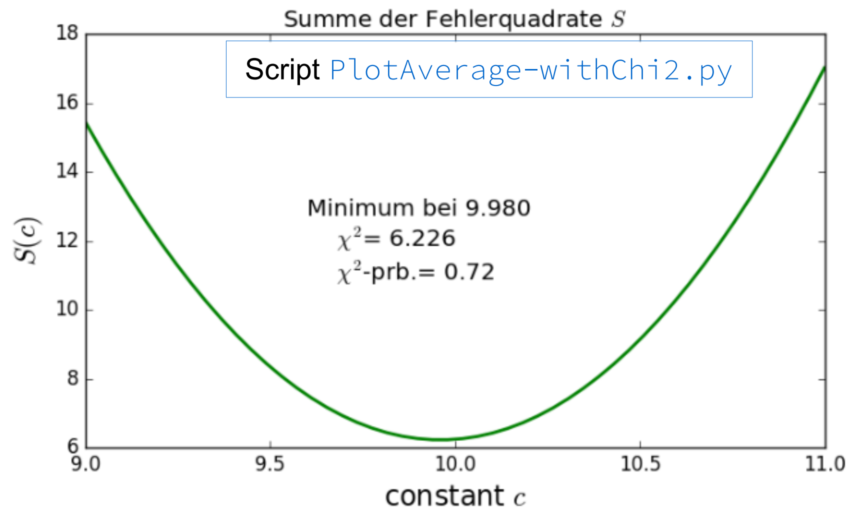
identisch zum „Mittelwert“



„numerisch“:

$$S(c) = \sum_{i=1}^{10} \frac{(y_i - c)^2}{\sigma^2}$$

berechnen und grafisch darstellen



Spezialfall: Lineare Regression (Geradenanpassung)

$$f(x;p_1,p_2) = p_1 + p_2\,x \qquad \Rightarrow \quad S = \sum_{i=1}^{N} \frac{(y_i - p_1 - p_2\,x_i)^2}{{\sigma_i}^2}$$

Nullsetzen der1. Ableitungen ergibt das Gleichungssystem

$$(1)\ 0 \stackrel{!}{=} \frac{\partial S}{\partial p_1} = -2\sum_{i=1}^{N} \frac{(y_i - p_1 - p_2\,x_i)}{{\sigma_i}^2}$$

$$(2)\ 0 \stackrel{!}{=} \frac{\partial S}{\partial p_2} = -2\sum_{i=1}^{N} \frac{x_i\,(y_i - p_1 - p_2\,x_i)}{{\sigma_i}^2}$$

mit den Abkürzungen

$$S_1 = \sum_{i=1}^{N} \frac{1}{\sigma_i^2}\,, \qquad S_x = \sum_{i=1}^{N} \frac{x_i}{\sigma_i^2} = \overline{x}\,S_1\,, \qquad S_y = \sum_{i=1}^{N} \frac{y_i}{\sigma_i^2} = \overline{y}\,S_1$$

$$S_{xx} = \sum_{i=1}^{N} \frac{x_i^2}{\sigma_i^2} = \overline{x^2}\,S_1\,, \qquad S_{xy} = \sum_{i=1}^{N} \frac{x_i\,y_i}{\sigma_i^2} = \overline{xy}\,S_1\,, \qquad D = S_1 S_{xx} - S_x^2$$

ergibt sich die Lösung:

$$\hat{p}_1 = \frac{S_{xx}S_y - S_x S_{xy}}{D}\,, \qquad {\sigma_{p_1}}^2 = \frac{S_{xx}}{D}\,,$$

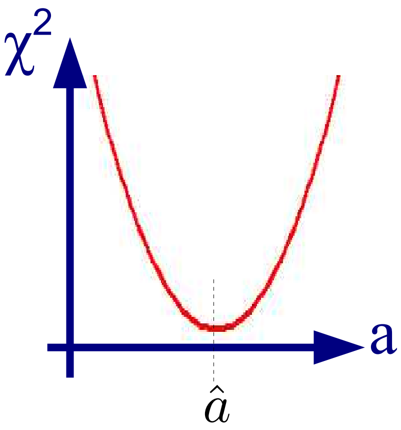
$$\hat{p}_2 = \frac{S_1 S_{xy} - S_x S_y}{D}\,, \qquad {\sigma_{p_2}}^2 = \frac{S_1}{D}\,, \qquad V_{12} = \frac{-S_x}{D}$$

Implementiergung in python s. Script `linRegression`

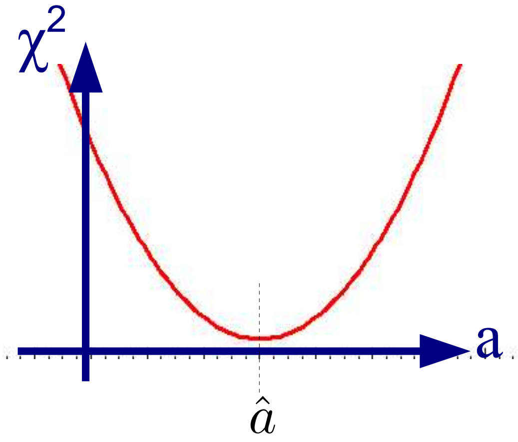
Diese Formeln waren für Generationen von Studierenden die Basis einer jeden Anpassung („Regression“)

aber: *schon die Behandlung von Unsicherheiten in Ordinate* ***und Abszisse*** *erfordert numerische Methoden*

Modellanpassung: Bestimmung der Parameterfehler



Je schärfer das Minimum von $\chi^2(\boldsymbol{p})$,
desto kleiner die Parameterfehler:



scharfes Minimum:
große Krümmung

flaches Minimum:
kleine Krümmung

$\longrightarrow$ Parameterunsicherheiten sind umgekehrt proportional zu Krümmung(en) von $\chi^2(\boldsymbol{p})$ am Minimum

$$\frac{1}{{\sigma_{\hat{p}}}^2} = \frac{1}{2} \left. \frac{\partial^2 \chi^2(p)}{\partial p^2} \right|_{\hat{p}} \quad \text{bzw.} \quad \left({V_{\hat{a}}}^{-1}\right)_{ij} = \frac{1}{2} \left. \frac{\partial^2 \chi^2(\{\mathbf{p}\})}{\partial p_i \partial p_j} \right|_{\hat{p_i}\hat{p_j}}$$

bei mehreren Parametern .

V: Kovarianzmatrix der Parameterunsicherheiten, s. Vorl. CgDA