Korrekturen Einführungsskript 2007

P. Schäfer
Institut für Physik, Humboldt-Universität zu Berlin,
Newtonstraße 15, 12489 Berlin

23. Januar 2018

- Die erste Gleichung auf Seite 31 des Einführungsskript (2007) ist fehlerhaft. Richtig lautet die Gleichung:

$$s = \sqrt{\frac{1}{n-1}\sum_{i=1}^{n}(x_i - \overline{x})^2}$$

- Auf der gleichen Seite muss die Gleichung in der Abbildung 12 im Kasten $n \geq 6$ richtig lauten:

$$e_z = \overline{s} = \sqrt{\frac{1}{n(n-1)}\sum_{i=1}^{n} v_i^2}$$

- Die Gleichung 45 auf Seite 42 ist nur unter ganz bestimmten Bedingungen gültig, da sie über die Fehlerfortpflanzung hergeleitet wurde. Damit sie angewendet werden kann, müssen die Messdaten beziehungsweise die Messunsicherheiten s_i eine Reihe von Anforderungen erfüllen:

  1. Die Messunsicherheiten s_i sind echte, experimentell bestimmte Messunsicherheiten, die zum Beispiel durch mehrfache Wiederholungsmessung an der jeweiligen Messstelle x_i ermittelt wurden. Als Werte y_i sind dann die jeweiligen Mittelwerte zu verwenden.
  2. Die Verteilungsfunktion der Messunsicherheiten an jeder Messstelle x_i ist eine Normalverteilung mit dem Erwartungswert 0 und der Varianz s_i^2.
  3. Die Messunsicherheiten der einzelnen Messstellen sind unkorreliert, die Kovarianzmatrix $\mathbf{\Sigma}$ der Messwerte y_i ist eine Diagonalmatrix.

$$\mathbf{\Sigma} = \begin{pmatrix} s_1^2 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & s_2^2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & s_n^2 \end{pmatrix}$$

4. Die Modellfunktion ist linear in den Parametern und die Basisfunktionen sind an den gegebenen Messpositionen x_i linear unabhängig. Dieser Punkt ist beim hier betrachteten Geradenausgleich (ein Spezialfall der linearen Regression) erfüllt.

Unter diesen Voraussetzungen genügt die Summe der Abweichungsquadrate

$$\chi^2 = \sum_{i=1}^{n} \left(\frac{y_i - a\, x_i - b}{s_i} \right)^2$$

einer χ^2-Verteilung mit dem Erwartungswert $\nu = n - p$ und der Varianz $2\,\nu$. Die Anzahl der Parameter p ist im Fall des hier beschriebenen einfachen Geradenausgleichs gleich 2. ν gibt die Anzahl der Freiheitsgrade (degrees of freedom, oftmals abgekürzt mit dof) an. Der Wert von χ^2/ν kann unter den oben genannten und nur unter diesen Bedingungen als ein Test für die Güte der Anpassung des Modells, in diesem Fall eine Gerade, an die Daten genutzt werden. Liegt der Wert von χ^2/ν im Intervall $1 - \sqrt{2/\nu} \ldots 1 + \sqrt{2/\nu}$ kann das gewählte Modell, hier die Gerade, vom Standpunkt der klassischen Statistik nicht verworfen werden (D. W. Hogg u.a., Data analysis recipes: Fitting a model to data (2010) Anmerkung 32). Dieser Test besticht durch seine Einfachheit, ist aber nicht unproblematisch (siehe dazu: (R. Andrae u.a., Dos and don‘ts of reduced chi-squared (2010)).

In vielen Fällen ist im Praktikum die 1. Forderung an die Messdaten nicht erfüllt, man kann aber davon ausgehen, dass die Messunsicherheiten an allen Messstellen mit der gleichen Varianz $s = s_1 = s_2 = \cdots = s_n$ beschreiben werden. Diese ist damit auch unabhängig von der Größe des Messwerts y_i. Dies ist zum Beispiel beim Ablesen auf einer einfachen Längenskala (Büromaßstab, Stahllineal, Spiegelskala) der Fall. Dann können die Gleichungen 49 und 50 auf Seite 42 angewandt werden, wobei für die unbekannte Varianz s der Messunsicherheit deren Schätzwert

$$\widehat{\sigma^2} = \frac{1}{n-p} \sum_{i=1}^{n} (y_i - a\, x_i - b)^2$$

zu verwenden ist.

Ist davon auszugehen, dass die unbekannten Messunsicherheiten an den einzelnen Messstellen deutliche verschieden sind, oder dass die Messunsicherheiten eine deutliche Abhängigkeit vom gemessen Wert erwarten lassen, ist die obige Annahme der Gleichheit der Varianzen s_i nicht mehr gegeben. Die Methode der linearen Regression erfordert in diesem Fall die Einführung von Gewichten w_i. Es wird das Minimum der Größe

$$\chi^2 = \sum_{i=1}^{n} w_i \, (y_i - a \; x_i - b)^2$$

bestimmt. Für die Festlegung der Gewichte gibt es eine Vielzahl verschiedener Möglichkeiten (siehe dazu T. Strutz, Data Fitting and Uncertainty (2016), Chapter 3). In einigen Fällen liegen Informationen darüber vor, wie sich die einzelnen Messunsicherheiten relativ zueinander verhalten. Dies ist z.B. bei Messungen mit elektrischen oder elektronischen Messgeräten, die über mehrere verschiedene Messbereiche verfügen, der Fall (Einführungsskript (2007) Seite 19 ff.). An Hand der zu den einzelnen Messbereichen angegebenen Messunsicherheiten s_i können die Gewichte $w_i = C/s_i^2$ festgelegt werden. Hierbei ist C eine willkürlich festlegbare Konstante. Diese Vorgehensweise ist analog zu der im Abschnitt 3.8 (Seite 47) beschriebenen Gewichtung für die Bildung eines gewichteten Mittelwertes. In vielen Fällen erhalten so alle im selben Messbereich gemessenen Werte jeweils das gleiche Gewicht. In all den Fällen, in denen die Parameter a und b unter Anwendung einer Gewichtung, berechnet wurden, lautet die Gleichung 45 auf Seite 42 richtig:

$$s_a = \pm \sqrt{\widehat{\sigma^2} \frac{1}{D} \sum_{i=1}^{n} w_i} \text{ und } s_b = \pm \sqrt{\widehat{\sigma^2} \frac{1}{D} \sum_{i=1}^{n} w_i \, x_i^2} \tag{45}$$

In diesem Fall ist für die unbekannte Varianz deren Schätzwert

$$\widehat{\sigma^2} = \frac{1}{n-2} \sum_{i=1}^{n} w_i \; (y_i - a \; x_i - b)^2$$

zu verwenden. Der mathematische Hintergrund kann in P. Schäfer, Einige Anmerkungen zur Methode der linearen Regression (2016) und B. R. Martin, Statistics for Physical Sciences: An Introduction (2012) (Seite 149 -151 Chapter 8.1.2 insbesondere Gleichung 8.33) nachgelesen werden. Damit die so bestimmten Fehlerintervalle richtig sind, ist die Erfüllung der beiden oben benannten Forderungen nach Normalverteilung der unbekannten Messunsicherheiten und dass die einzelnen Messunsicherheiten unkorreliert sind zwingend notwendig (siehe hierzu R. Andrae, Error estimation in astronomy: A guide (2010)).

- Aus dem selben Grund ist die Gleichung 48 auf der Seite 42 nicht vollständig. Es gilt hier analog das oben Gesagte. Im Falle einer vorgenommenen Gewichtung lautet die vollständige Gleichung:

$$a = \frac{\sum\limits_{i=1}^{n} w_i\, x_i\, y_i}{\sum\limits_{i=1}^{n} w_i\, x_i^2} \quad \text{und } s_a = \pm \sqrt{\widehat{\sigma^2} \frac{1}{\sum\limits_{i=1}^{n} w_i\, x_i^2}} \tag{48}$$

mit

$$\widehat{\sigma^2} = \frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^{n} w_i\, (y_i - a\, x_i)^2$$

- An den oben aufgestellten Anforderungen an die Kenntnisse über die Messunsicherheiten ist leicht zu erkennen, dass der auf Seite 43 als sehr selten eingestufte Fall, dass nicht ausreichend Informationen über die Messunsicherheiten vorliegen, im Praktikum eigentlich der Normalfall ist. Die Messunsicherheiten werden lediglich abgeschätzt. Über deren Verteilungsfunktion liegen bestfalls Vermutungen oder wage Annahmen vor.

- Für die Berechnung des Kovarianzterms in der Varianz-Kovarianz Matrix (Gleichung 54 auf Seite 43) gilt das gleiche wie für die Berechnung der Varianzen der Parameter a und b (Gleichung 45 auf Seite 42).

- Zu der Abbildung 14 auf Seite 46 ist eine Anmerkung erforderlich. Da hier im Praktikum allgemein mit $1\,\sigma$ Unsicherheiten gerechnet wird, kann man nicht erwarten, dass die Regressionsgerade durch alle Unsicherheitsintervalle verläuft. Die Wahrscheinlichkeit dafür, dass ein gemessener Wert im Intervall $[\mathrm{E}[y] - \sigma\ ,\ \mathrm{E}[y] + \sigma]$ liegt, beträgt 68.3%. Damit ist es durchaus normal, wenn etwa ein Drittel der Unsicherheitsintervalle von der Modellkurve nicht geschnitten werden. Nur wenn ein sehr hohes Konfidenzniveau verwendet wird, zum Beispiel $3\,\sigma$-Intervalle, sollte die Regressionsgerade alle Intervalle schneiden.

- Zum Abschnitt 3.8 „Gewichtetes Mittel“ (Seite 47) sind einige ergänzende Bemerkungen notwendig. Die Formel für u_g in Gleichung 56

$$\begin{aligned} u_g &= \pm \frac{\sqrt{\sum\limits_{j=1}^{k} (p_j\, u_j)^2}}{\sum\limits_{j=1}^{k} p_j} \quad \text{mit } p_j = \frac{C}{u_j^2} \\ &= \pm \frac{\sqrt{\sum\limits_{j=1}^{k} \left(\frac{C}{u_j}\right)^2}}{\sum\limits_{j=1}^{k} \frac{C}{u_j^2}} = \pm \frac{1}{\sqrt{\sum\limits_{j=1}^{k} \frac{1}{u_j^2}}} \end{aligned}$$

liefert immer einen Wert für u_g, der kleiner ist, als der kleinste Wert von u_j. Die Anwendung dieser Formel setzt voraus, dass alle Werte $\bar{x_j}$ als Ergebnis jeweils einer Stichprobe aus der gleichen Grundgesamtheit angesehen werden können. Auf diesen Umstand wird in in der Herleitung in P. R. Bevington, D. K. Robinson, Data Reduction and Error Analysis for the Physical Sciences (2003) (Chapter 4, Seite 56) ausdrücklich hingewiesen. Nur wenn alle Unsicherheiten einen gemeinsamen Bereich überdecken, kann davon ausgegangen werden, dass diese Voraussetzung erfüllt ist. Nach F. James, Statistical Methods in Experimental Physics 2nd Edition (2006) (Chapter 11.5.2, S 323-325) lässt sich mit:

$$\sum_{i=j}^{k} \frac{1}{u_j^2} \left(\bar{x}_j - \bar{x}_g\right)^2 < \lambda_\alpha$$

testen, ob diese Voraussetzung erfüllt ist. Dabei ist λ_α das Quantil der χ^2-Verteilung mit $k-1$ Freiheitsgraden für das Signifikanzniveau α. Für das im Praktikum benutzte Signifikanzniveau $\alpha = 68,3\%$ gilt $\lambda_\alpha \approx k-1$. Wenn diese Testbedingung erfüllt ist, wird das mit Gleichung 55 bestimmte gewichtete Mittel in dem Bereich liegen, der von allen Unsicherheitsintervallen überdeckt wird und dessen Unsicherheit kann mit Gleichung 56 berechnet werden. Das in Abbildung 15 gezeigte Beispiel erfüllt diese Voraussetzung nicht. Die Unsicherheitsintervalle überdecken sich nur paarweise. Unter solchen Bedingungen führt die Anwendung der Gleichung 56 zu einem falschen Ergebnis.

Soll aus Messungen der gleichen physikalischen Größe, die mit unterschiedlichen Messmethoden bestimmt wurden und damit nicht als der gleichen Grundgesamtheit entstammend angesehen werden können, ein Gesamtergebnis ermittelt werden, muss man die Streuung der einzelnen Werte mit berücksichtigen. Dies ist zum Beispiel beim Versuch **E12** „Elektronen in Feldern“ der Fall. Hier wird die spezifische Ladung e/m des Elektrons mit drei verschiedenen Methoden bestimmt.

Das gewichtete Mittel kann genauso wie die lineare Regression als ein spezieller Fall des allgemeinen linearen Modells [1] angesehen werden. Für den Wert des gewichteten Mittels $\bar{x}_g$ ergibt sich daraus der in Gleichung 55 angegebene Ausdruck. Für die Varianz $\sigma_{\bar{x}_g}$ dieses Wertes folgt aber:

$$\sigma_{\bar{x}_g} = \frac{1}{n-1} \left[\frac{\sum\limits_{j=1}^{n} p_j\, x_j^2}{\sum\limits_{i=j}^{n} p_j} - \bar{x}_g^2 \right]$$

Diese Beziehung findet man auch bei Bevington (2003) (Chapter 4, Seite 58, Gleichung 4.23) für die Varianz des gewichteten Mittels, wenn dies mit Hilfe relativer Unsicherheiten berechnet wird. Daraus ergibt sich für die Unsicherheit u_g des gewichteten Mittels

$$u_g = \pm\sqrt{\sigma_{\bar{x}_g}} = \pm\sqrt{\frac{1}{n-1}\left[\frac{\sum\limits_{j=1}^{n} p_j\,\bar{x}_j^2}{\sum\limits_{i=j}^{n} p_j} \;-\; \bar{x}_g^2\right]}$$

In diesem Ausdruck werden die Abweichungen der einzelnen Werte $\bar{x}_j$ vom gemeinsamen Mittelwert $\bar{x}_g$ mit berücksichtigt. Wenn der obengenannte Test nicht positiv ausfällt, ist der so bestimmte Wert für u_g größer als der nach Gleichung 56 berechnete.

Anmerkungen

[1] Zum allgemeinen linearen Modell siehe: Schäfer (2016).
Um das gewichtete Mittel über den Vektor

$$\mathbf{y} = \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{pmatrix}$$

zu bestimmen, stellt man ein allgemeines lineares Modell mit nur einem Parameter θ_1

$$\theta = \begin{pmatrix} \theta_1 \end{pmatrix}$$

und der der $n \times 1$ Design-Matrix

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ \vdots \\ 1 \end{pmatrix}$$

auf. Die Unsicherheiten u_i der Werte y_i definieren die $n \times n$ Gewichtsmatrix

$$\mathbf{P} = \begin{pmatrix} p_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & p_2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & p_n \end{pmatrix} \quad \text{mit } p_i = \frac{C}{u_i^2}$$

wobei C eine willkürlich festgelegte Konstante ist. Durch Anwendung der Gleichungen 12 bis 14 aus Schäfer (2016) folgt daraus:

$$(\mathbf{A}^T\mathbf{P}\mathbf{A})^{-1} = \frac{1}{\sum\limits_{i=1}^{n} p_i} \qquad \text{und} \qquad \mathbf{A}^T\mathbf{P}\mathbf{y} = \sum_{i=1}^{n} y_i \; p_i$$

Damit ergibt sich für den Schätzwert des gewichteten Mittels

$$\begin{aligned} \widehat{\theta} &= (\mathbf{A}^T\mathbf{P}\mathbf{A})^{-1} \; \mathbf{A}^T\mathbf{P}\mathbf{y} \\ \widehat{\theta}_1 &= \frac{\sum\limits_{i=1}^{n} p_i \; y_i}{\sum\limits_{i=1}^{n} p_i} = \frac{\sum\limits_{i=1}^{n} \frac{y_i}{s_1^2}}{\sum\limits_{i=1}^{n} \frac{1}{s_i^2}} \end{aligned}$$

Mit dem Schätzwert für die Varianz

$$\widehat{\sigma^2} = \frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^{n} p_i \, (y_i - \theta_1)^2$$

folgt aus dem linearen Modell für die Varianz des geschätzten Parameters θ_1:

$$\begin{aligned}
\sigma_{\theta_1}^2 &= \widehat{\sigma^2} \, (\mathbf{A}^T\mathbf{P}\mathbf{A})^{-1} \\
&= \frac{1}{n-1} \, \frac{1}{\sum\limits_{i=1}^{n} p_i} \, \sum_{i=1}^{n} p_i \, (y_i - \theta_1)^2 \\
&= \frac{1}{n-1} \, \frac{1}{\sum\limits_{i=1}^{n} p_i} \, \sum_{i=1}^{n} \left(p_i \, y_i^2 \; - \; 2 \, p_i \, y_i \, \theta_1 \; + \; p_i \, \theta_1^2 \right) \\
&= \frac{1}{n-1} \, \frac{1}{\sum\limits_{i=1}^{n} p_i} \, \left(\sum_{i=1}^{n} p_i \, y_i^2 \; - \; 2 \, \theta_1 \sum_{i=1}^{n} p_i \, y_i \; + \; \theta_1^2 \sum_{i=1}^{n} p_i \right) \\
&= \frac{1}{n-1} \left[\frac{\sum\limits_{i=1}^{n} p_i \, y_i^2}{\sum\limits_{i=1}^{n} p_i} \; - \; \theta_1^2 \right]
\end{aligned}$$

Literatur

Physikalisches Grundpraktikum:
Einführung in die Messung, Auswertung und Darstellung experimenteller Ergebnisse in der Physik
Mathematisch-Naturwissenschaftliche Fakultät I der HUB
Institut für Physik **2007**
http://gpr.physik.hu-berlin.de/Skripten/Einfuehrung/PDF-Datei/Einfuehrung.pdf
abgerufen am 4.1.2016 10:39 Uhr

Renè Andrae, Tim Schulze-Hartung, Peter Melchior
Dos and don‘ts of reduced chi-squared **2010**
https://arxiv.org/pdf/1012.3754v1.pdf
abgerufen am 29.11.2017 13:57 Uhr

Renè Andrae
Error estimation in astronomy: A guide **2010**
https://arxiv.org/pdf/1009.2755.pdf
abgerufen am 29.11.2017 14:11 Uhr

P.R. Bevington and D.K. Robinson
Data Reduction and Error Analysis for the Physical Sciences
McGraw-Hill Book Co., New York, 3. edition **2003**

David W. Hogg, Jo Bovy, Dustin Lang
Data analysis recipes: Fitting a model to data **2010**
https://arxiv.org/pdf/1008.4686.pdf
abgerufen am 30.11.2017 17:29 Uhr

Frederick James
Statistical Methods in Experimental Physics
World Scientific Publishing, 2. edition **2006**

Brain R. Martin
Statistics for Physical Sciences: An Introduction
ELsevier **2012**

Peter Schäfer
Rechnet QtiPlot falsch ?
Einige Anmerkungen zur Methode der linearen Regression
Institut für Physik **2016**
http://roe10.physik.hu-berlin.de/Grundpraktikum/Rechnet_QtiPlot_falsch/index.html

Tilo Strutz
Data Fitting and Uncertainty
A practical introduction to weighted least squares and beyond
Springer Vieweg **2016**