Unsicherheiten bei linearer Anpassung

Viele wichtige funktionale Zusammenhänge lassen sich durch geeignete Variablentransformationen linearisieren. Dies spiegelt einerseits die Bedeutung der linearen Anpassung wider, andererseits müssen auch die Messunsicherheiten mittransformiert werden, sodass sie sicherlich nicht mehr als konstant angesehen werden können.
Was ist nun lineare Anpassung und wie können Messunsicherheiten berücksichtigt werden? Nach Gauß sollte für eine lineare Anpassung die Summe

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

der Fehlerquadrate minimiert werden. Hierin sind (x_i, y_i) Daten, an die eine Gerade der Form $y = a \cdot x + b$ möglichst gut angepasst werden soll. Unter der Annahme, dass Fehler einer Normalverteilung genügen, sind die Gewichte p_i durch die reziproken Varianzen gegeben:

$$p_i = \frac{1}{\sigma_i^2}$$

Die Varianz der Zufallsvariablen $z_i = y_i - a x_i - b$ lässt sich bei Unabhängigkeit der x– und y–Werte durch

$$\sigma_i^2 = \sigma_{y_i}^2 + a^2 \cdot \sigma_{x_i}^2$$

berechnen. Um die Minimierung von χ^2 korrekt durchzuführen, ist zuerst anzunehmen, dass die x–Werte keine Unsicherheiten aufweisen, da der Parameter a noch nicht bekannt ist.
Unter Verwendung von Gauß–Klammern $[g] = \sum_{i=1}^{n} g_i$ lassen sich die besten Parameter als

$$a = \frac{[pxy][p] - [px][py]}{[px^2][p] - [px]^2} \quad \text{und} \quad b = \frac{[py][px^2] - [px][pxy]}{[px^2][p] - [px]^2}$$

anschreiben. Diese Formeln, die sich durch Nullsetzen der partiellen Ableitungen von χ^2 nach a und b ergeben, können in jeder besseren Formelsammlung nachgeschlagen werden.
Die Unsicherheiten der Parameter a und b lassen sich unter der Annahme, dass nur die y–Werte fehlerbehaftet sind, aus obigen Gleichungen mittels Gauß'scher Fehlerfortpflanzung zu

$$\Delta a = \sqrt{\frac{[p]}{[px^2][p] - [px]^2}} \quad \text{und} \quad \Delta b = \sqrt{\frac{[px^2]}{[px^2][p] - [px]^2}}$$

berechnen. Dies sind die Formeln, die beispielsweise `SciDAVis` für die lineare Schnellanpassung unter Verwendung von y–Fehlerbalken verwenden sollte. Wollen wir jedoch auch Unsicherheiten der x–Werte berücksichtigen, dann sollten wir diese zu den Unsicherheiten der y–Werte gemäß der Beziehung

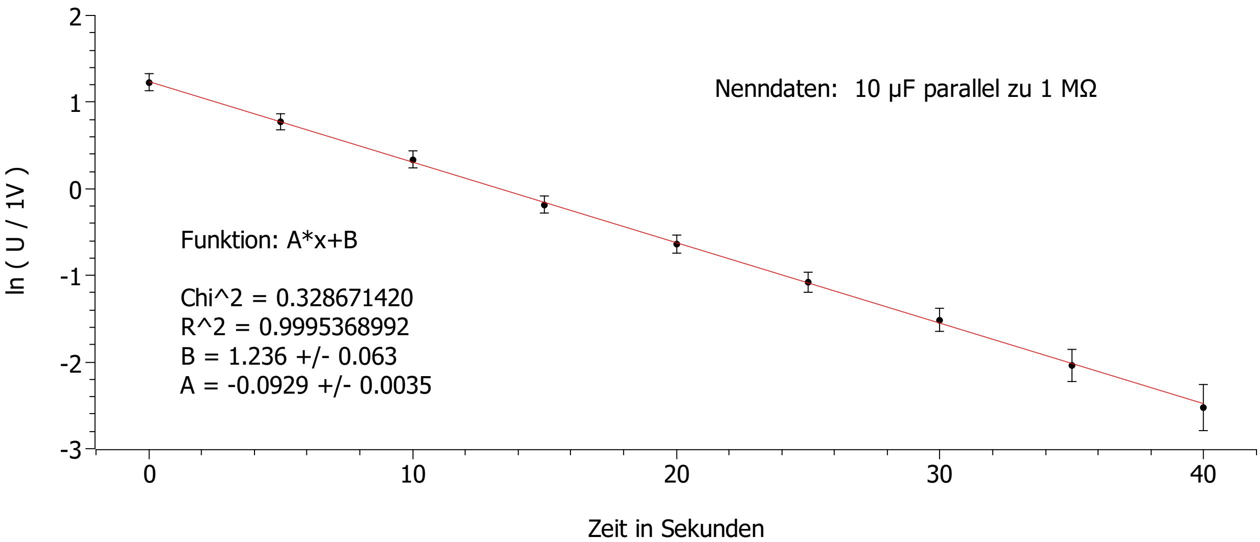
$$\sigma_{y_i}^2 = \Delta y_i^2 + a^2 \cdot \Delta x_i^2$$

hinzuzählen. Damit ist eine brauchbare Handlungsanweisung gegeben:
Man bestimme unter Vernachlässigung der Messunsicherheiten einen Schätzwert für a. Mit diesem Schätzwert lege man gemäß obiger Gleichung die y–Unsicherheiten (=Fehlerbalken) fest, und bestimme näherungsweise die besten Parameter.

Das folgende Beispiel soll das eben Gesagte verdeutlichen:
Die Entladung eines Kondensators über den Innenwiderstand eines Voltmetes soll gemessen werden. Dabei nimmt die Spannung U am Kondensator nach Abschaltung der Spannungsquelle gemäß $U = U_0 \cdot \exp(a \cdot t)$ exponentiell mit der Zeit t ab. Nach Logarithmieren erhält man die Geradengleichung $y = \ln(U) = a \cdot x + b$ mit $x = t$ und $b = \ln(U_0)$, wobei die Spannungen als reine Verhältniszahlen (z.B.: zu 1 Volt) interpretiert werden.
In `SciDaVis` können die gemessenen Zeiten t in `col("1")` in der Einheit Sekunde und die dazugehörigen Spannungen in `col("2")` in Volt abgelegt werden. Nun generiere man eine dritte Spalte, in der die logarithmierten Spannungen gemäß der `Formel ln(col("2"))` eingetragen werden. Für diese Spalte wird die `Darstellungszuordnung Y` gewählt. Eine lineare Schnellanpassung an die erste und die dritte Spalte liefert den Wert $a = -0.09349$ für den Anstieg der Geraden. Die Messunsicherheit der Spannung wird der Beschreibung des Messgerätes entnommen und beträgt 0.5% des Messwertes und 2 Digits ($= 0.02\,\mathrm{V}$). Die Messunsicherheit der Zeit wird mit einer Sekunde festgelegt und ist teilweise den Messzyklen des Messgerätes geschuldet. Nun legen wir eine vierte Spalte in `SciDAVis` an, welche der `Darstellungszuordnung yEr` genügt. Diese Spalte, die die y–Unsicherheiten, also die `Y-Fehlerbalken` beinhaltet, wird mit der `Formel`

```
sqrt((0.005*col("2")+0.02)^2/col("2")^2+(0.09349*1)^2)
```

aufgefüllt. Um die Schnellanpassung in `SciDAVis` mit Fehlerbalken korrekt durchzuführen, ist es günstig, die Tabelle nach aufsteigenden x–Werten (Spalte 1) zu sortieren. Ein Diagramm, welches den Inhalt der Spalten eins, drei und vier berücksichtigt, würde dann folgendermaßen aussehen:



Damit hätten wir ein verlässliches Maß für die Entladung gefunden:

$$a = -(0.0929 \pm 0.0035)\ 1/\mathrm{s}$$

ps.: Dieses Verfahren, die Unsicherheiten der unabhängigen Variablen auf die Unsicherheiten der abhängigen zu übertragen, kann auf alle funktionalen Zusammenhänge nicht nur auf lineare angewandt werden. Liegt ein funktionaler Zusammenhang der Form $y = f(x)$ vor, dann sind die Varianzen der Fehler z_i durch

$$\sigma_i^2 = \sigma_{y_i}^2 + \left(\frac{\partial f}{\partial x_i}\right)^2 \cdot \sigma_{x_i}^2 = \Delta y_i^2 + \left(\frac{\partial f}{\partial x_i}\right)^2 \cdot \Delta x_i^2$$

gegeben. So kann die nichtlineare Anpassung unter Verwendung von y–Fehlerbalken iterativ vollzogen werden.