

# BEIBLATT

## zur

# FEHLER- und AUSGLEICHSCHEUNUNG

### 1. Allgemeines

Viele physikalische Messgrößen  $Z_i$  (=  $Z$  des  $i$ -ten Versuchs) lassen sich nicht oder nur schwer direkt bestimmen. Die Größe  $Z_i$  lässt sich jedoch oft durch eine bekannte Funktion  $f()$  aus anderen, leicht zugänglichen Messgrößen  $X_{ji}$  (= Messwerte  $X_j$  des  $i$ -ten Versuchs) berechnen:

$$Z_i = f(X_{1i}, X_{2i}, X_{3i}, \dots) \quad (1)$$

Die einzelnen Messgrößen  $X_{ji}$  sind normalerweise mit einem statistischen und / oder systematischen Fehler  $\Delta X_{ji}$  behaftet, der sich, je nach Art der jeweiligen Funktion  $f()$  unterschiedlich auf die Genauigkeit von  $Z_i$  auswirkt.

### 2. Fehler in einer Einzelmessung

Bei Einzelmessungen ( $i=1$ ) kann man Fehler, mit dem eine Messgröße  $X_i$  behaftet ist (z.B. die Ablesegenauigkeit des Messgerätes) abschätzen. Der mittlere Fehler  $\Delta_{\text{mittl.}} Z$  der Größe  $Z$  lässt sich, sofern die Fehler im Verhältnis zu den Messwerten  $X_j$  klein sind, nach dem sogenannten Fehlerfortpflanzungsgesetz berechnen:

$$\Delta_{\text{mittl.}} Z = \sum_j \frac{\partial Z}{\partial X_j} \cdot \Delta X_j \quad (2)$$

Nach Gleichung (2) können sich verschiedene Fehler, je nach dem Vorzeichen der partiellen Ableitung und des Fehlers, kompensieren. Der größtmögliche Fehler  $\Delta_{\text{max}} Z$  einer Einzelmessung tritt dann auf, wenn sich alle Fehler in derselben Richtung (mit demselben Vorzeichen) auswirken:

$$\Delta_{\text{max}} Z = \sum_j \left| \frac{\partial Z}{\partial X_j} \right| \cdot |\Delta X_j| \quad (3)$$

### 3. Fehler in Mehrfachmessungen

Wird eine Messgröße  $X_{ji}$  mehrfach gemessen, so kann man den statistischen Fehler  $\Delta X_j$  als Standardabweichung der Mehrfachmessung  $X_{ji}$  ( $i=1,2,3,\dots$ ) definieren. Der mittlere Fehler  $\Delta_{\text{mittl.}} Z$  ergibt sich in diesem Fall wiederum aus der Gleichung (2).

Da bei der Berechnung der Standardabweichung bereits angenommen wird, dass sich die Fehler in alle Richtungen auswirken, macht in diesem Fall die Berechnung eines maximalen Fehlers wenig Sinn.

Systematische Fehler bleiben dabei unberücksichtigt.

#### **4. Ausgleichsrechnung**

Bei der experimentellen Ermittlung von Parametern (z.B. Aktivierungsenergien, Enthalpiedifferenzen u. ä.) erfolgt häufig eine Linearisierung von Messwertpaaren mit den Messgrößen X und Y. Der lineare Zusammenhang beider Messgrößen ergibt sich durch folgende Geradengleichung:

$$Y = A + B X \quad (4)$$

A = Achsenabschnitt

B = Steigung

mit jeweils n Messwertpaaren  $(X_j, Y_j)$ .

Aus dem Achsenabschnitt und / oder der Steigung lassen sich dann die gewünschten physikalischen Größen ableiten.

Die Gerade ist dann optimal angepasst, wenn die Summe S der Fehlerquadrate der Y-Werte ein Minimum durchläuft. Mittels folgender Beziehung zwischen den experimentellen Y - Werten ( $Y_{\text{exp}}$ ) und errechneten ( $Y_{\text{err}}$ ) ist sie darstellbar:

$$\sum (Y_{\text{exp}} - Y_{\text{err}})^2 = \sum_{j=1}^n (Y_j - (A + B X_j))^2 = S \quad (5)$$

Um die beiden Geradenparameter A und B zu erhalten, müssen die partiellen Ableitungen von S nach A und B gleich Null gesetzt werden (Fehlerquadratsumme S wird minimal):

$$\frac{\delta S}{\delta A} = -2 \sum_{j=1}^n (Y_j - A - B X_j) = 0 \quad (6)$$

$$\frac{\delta S}{\delta B} = -2 \sum_{j=1}^n (Y_j - A - B X_j) \cdot X_j = 0 \quad (7)$$

Durch Division mit -2; Auflösen der Klammern und Zusammenfassen der bei den Parameter A und B stehenden Ausdrücke resultiert aus (6) und (7):

$$\sum_{j=1}^n Y_j = A \cdot n + B \sum_{j=1}^n X_j \quad (8)$$

$$\sum_{j=1}^n Y_j \cdot X_j = A \cdot \sum_{j=1}^n X_j + B \cdot \sum_{j=1}^n X_j^2 \quad (9)$$

Setzt man nun:

$$S_1 = n$$

$$S_2 = \sum_{j=1}^n X_j$$

$$S_3 = \sum_{j=1}^n Y_j$$

$$S_4 = \sum_{j=1}^n X_j^2$$

$$S_5 = \sum_{j=1}^n X_j Y_j$$

so entsteht folgendes Gleichungssystem für die gesuchten Parameter A und B:

$$S_3 = S_1 \cdot A + S_2 \cdot B \quad (10)$$

$$S_5 = S_2 \cdot A + S_4 \cdot B \quad (11)$$

Hieraus folgt:

$$A = \frac{S_3 \cdot S_4 - S_5 \cdot S_2}{S_1 \cdot S_4 - S_2 \cdot S_2} \quad (12)$$

$$B = \frac{S_1 \cdot S_5 - S_2 \cdot S_3}{S_1 \cdot S_4 - S_2 \cdot S_2} \quad (13)$$

Man geht hierbei davon aus, dass nur die  $Y_j$  - Werte fehlerbehaftet sind, bzw. strenggenommen systematische Fehler nicht auftreten. Erst die Korrelationsanalyse stellt einen Zusammenhang zwischen fehlerbehafteten  $Y_j$  - und  $X_j$  - Werten her. Dennoch gibt das besagte Verfahren eine brauchbare Näherungslösung wieder (Trendanalyse).

Für die Fehlerabschätzung der Parameter A und B nimmt man folgende Hilfsfunktionen (siehe R. Ludwig: Methoden der Fehler- und Ausgleichsrechnung):

$$D = n \cdot \sum_{j=1}^n X_j^2 - \left( \sum_{j=1}^n X_j \right)^2 = n \cdot S_4 - S_2^2 \quad (14)$$

$$T = \sqrt{\frac{\sum_{j=1}^n (Y_j - A - B X_j)^2}{n-2}} = \sqrt{\frac{S}{n-2}} \quad (15)$$

Der mittlere Fehler von A ist dann:  $T \cdot \sqrt{\frac{S_4}{D}}$

Der mittlere Fehler von B ist dann:  $T \cdot \sqrt{\frac{n}{D}}$

Eine wichtige Größe in der Korrelationsanalyse stellt der Korrelationskoeffizient  $r$  dar. Er ist ein Maß für den linearen Zusammenhang von  $Y_j$  und  $X_j$  gemäß (4).

$$r = \frac{n \cdot \sum_{j=1}^n X_j Y_j - \sum_{j=1}^n X_j \cdot \sum_{j=1}^n Y_j}{\sqrt{n \cdot \sum_{j=1}^n X_j^2 - \left(\sum_{j=1}^n X_j\right)^2} \cdot \sqrt{n \cdot \sum_{j=1}^n Y_j^2 - \left(\sum_{j=1}^n Y_j\right)^2}} \quad (16)$$

Folgende 4 Punkte zu seiner Bedeutung /2/:

1. Der Korrelationskoeffizient ist nur ein Maß für den angenommenen Funktionstyp.
2. Selbst wenn eine strenge Korrelation nachgewiesen werden kann, ist nicht automatisch bewiesen, dass ein kausaler Zusammenhang zwischen X und Y im Sinne der Modellfunktion besteht (Ursache - Wirkungs - Beziehung). Die Möglichkeit der Scheinrelation besteht.
3. Die Größe der Korrelationskoeffizienten allein ist noch kein Maß für die „Stärke“ des im Sinne der Ausgleichsfunktion angenommenen Zusammenhangs!
4. Der Korrelationskoeffizient  $r$  ist nur ein Maß für den Zusammenhang zwischen X und Y in untersuchten Bereich.

Nur im Zusammenhang mit anderen stochastischen Größen ergibt  $r$  also einen Sinn.

### **5. Literatur:**

- |     |                |  |           |
|-----|----------------|--|-----------|
| /1/ | Ebert / Ederer | Computeranwendung in der Chemie        | S. 184 ff |
| /2/ | S. Noack       | Auswertung von Mess- und Versuchsdaten |           |