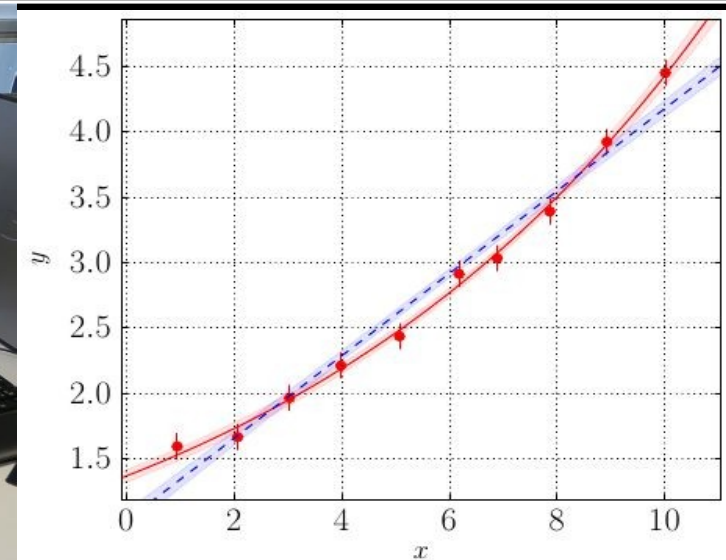


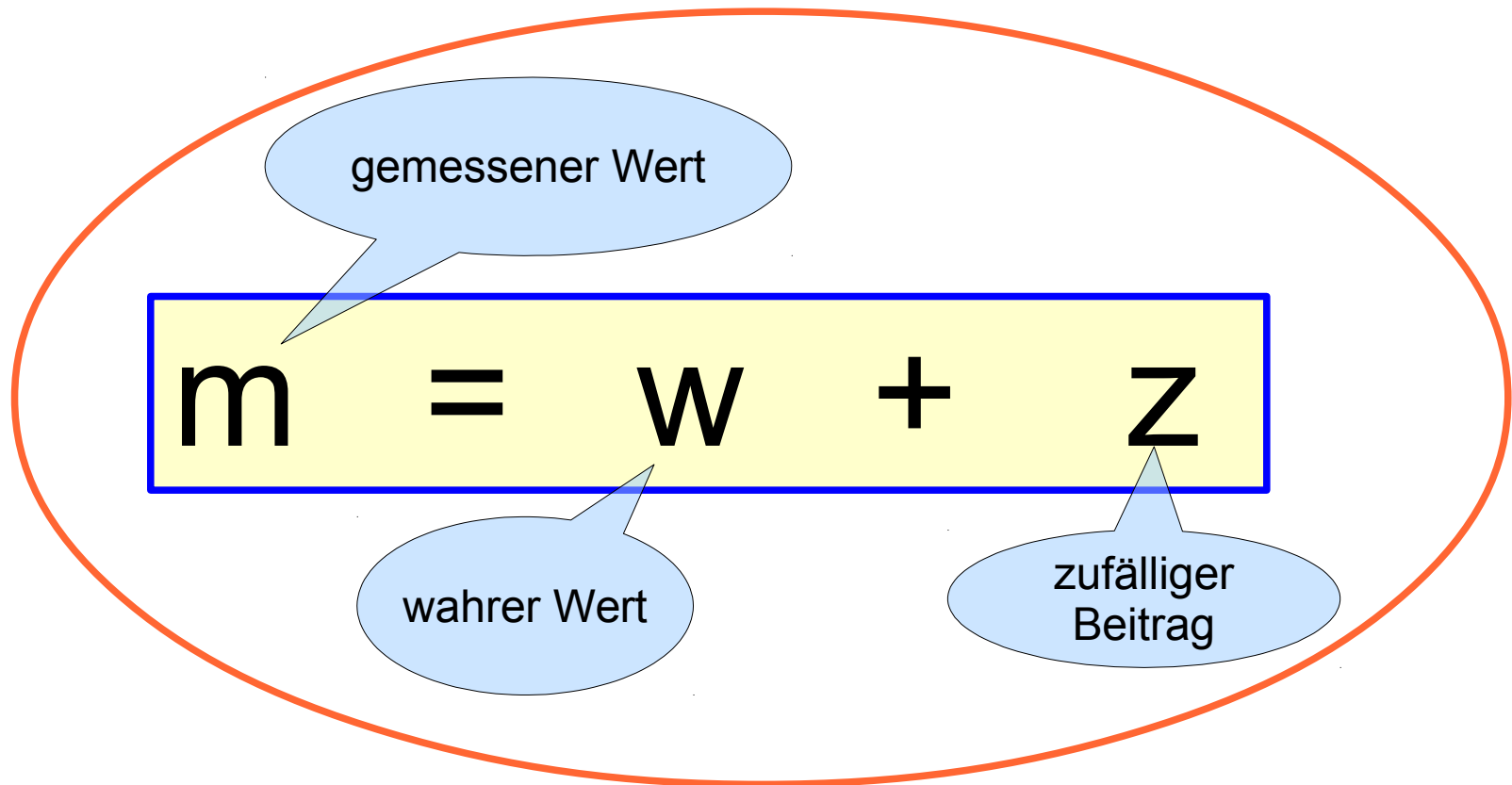
Auswertung von Messdaten im Praktikum

Prof. Dr. Günter Quast, Dr. Hans-Jürgen Simonis

Fakultät für Physik
Institut für Experimentelle Kernphysik



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 !**

$$\Rightarrow Z = Z_{\text{stat}} + Z_{\text{syst}} + Z_{\text{theo}}$$

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

$$G = (x \pm \Delta x) \cdot \langle \text{Maßeinheit} \rangle$$

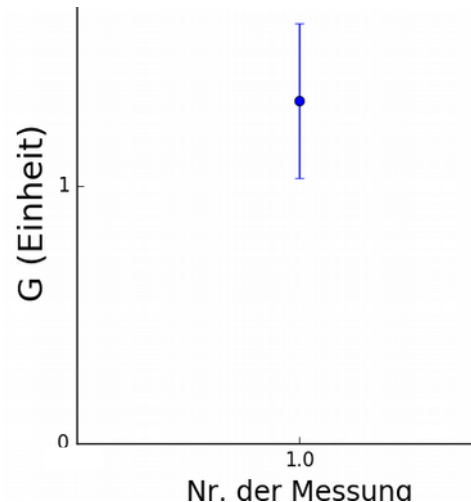
Üblich ist auch die Angabe einer **relativen Meßunsicherheit**:

$$G = (x) \cdot \langle \text{Maßeinheit} \rangle \pm \Delta x / x$$

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

Grafische Darstellung:

Koordinatensystem mit
Messpunkt und „Fehlerbalken“



Beispiel einer Messung

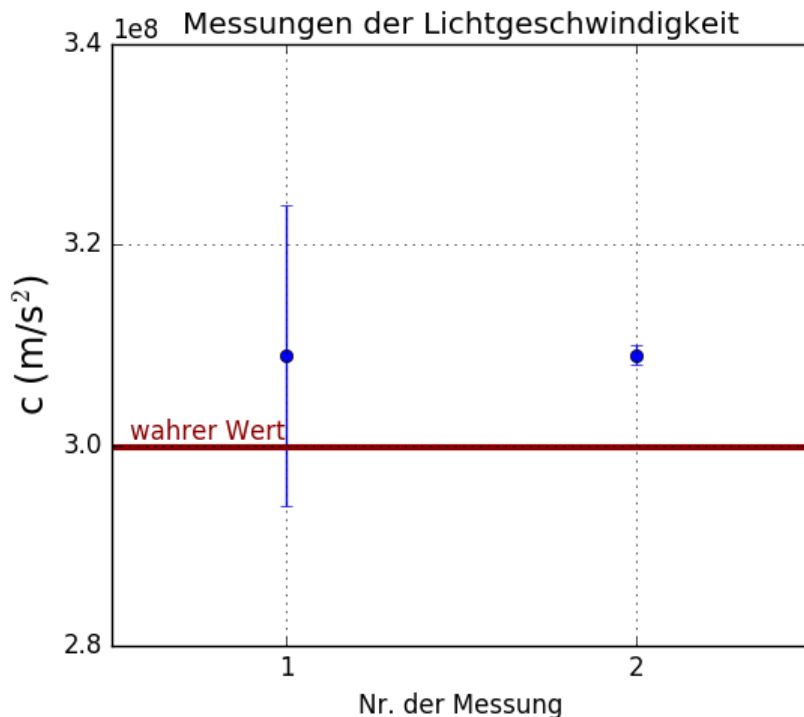
Entscheidend für Bewertung eines Ergebnisses ist die **Messunsicherheit** !

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

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

Eine Messung $c = (3.09 \pm 0.01) \cdot 10^8 \text{ m/s}$ 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, gehören ins Protokoll !

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

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

$$\begin{aligned} \rightarrow \text{Angabe} \quad & \mathbf{g = (9.82 \pm 0.02) \text{ m/s}^2} \\ \text{bzw.} \quad & \mathbf{g = 9.82 \text{ m/s}^2 \pm 0.2 \%} \end{aligned}$$

Hinweis: übersichtliche Schreibweise ist wichtig !

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

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

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

Fehleranalyse

Zu jeder Messung ist eine **Fehleranalyse** durchzuführen :
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 **Dokortitel!**

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 werden. 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: Temperatúrausdehnung eines Maßstabes, geeicht bei 20°, verwendet bei 30°, relative Temperatúrausdehnung $\alpha = 0.0005 / \text{K}$

→ **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
→ Fehler abschätzen
- wiederholte gleichartige Messungen
→ statistische Auswertung
- aus Messgrößen berechnete Ergebnisse
→ Fehlerfortpflanzung

Beispiele: einmalig gemessene Größen

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

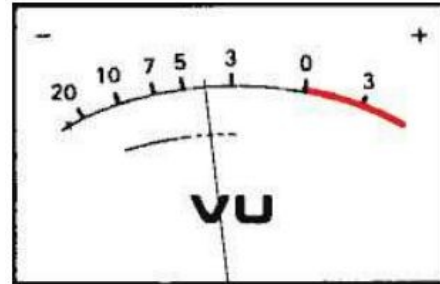
a) bei fein unterteilter Skala



→ $\pm 0.5 \cdot (\text{Intervallbreite})$

$$\underline{L = 82 \pm 0.5 \text{ mm}}$$

b) bei grob unterteilter Skala



→ $\pm 0.1 \cdot (\text{Intervallbreite})$

$$\underline{U = 4.0 \pm 0.2 \text{ V}}$$

c) digitale Skala



→ $\pm 0.5 \cdot \text{letzte Anzeigestelle}$
⊕ 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 :

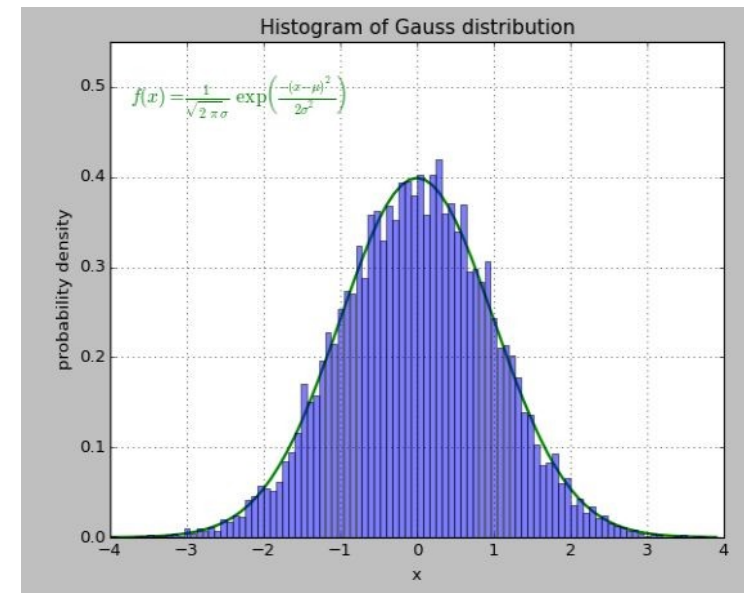
$$\bar{x} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N x_i$$

Messabweichung oder **Standardabweichung**:

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

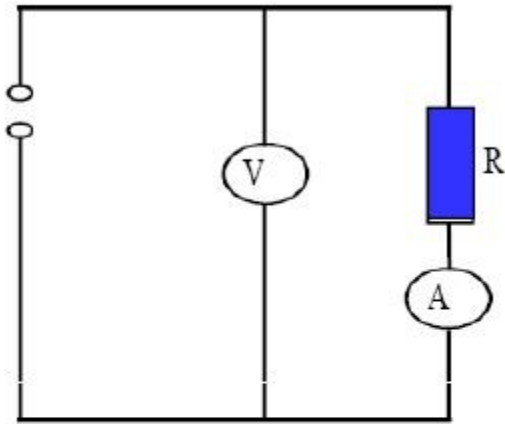
Standardabweichung des Mittelwerts:

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



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



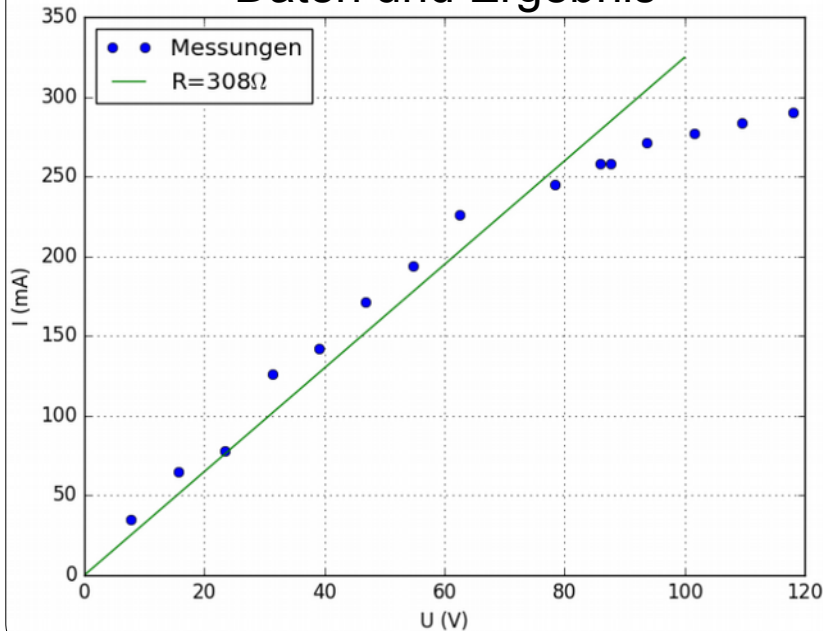
N = 15 Messungen

praktisches Beispiel: Messung eines Widerstands R (2)

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

$$\Rightarrow R = (308 \pm 14) \Omega$$

Grafische Darstellung :
Daten und Ergebnis



Hier ist etwas faul ... ?!

Mittelung nicht verträglicher Werte ist unsinnig ! (Hier: Erwärmung des Widerstands führt zu Abweichungen vom Ohm'schen Gesetz (s. Aufg. 6 CgDA))

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()
```

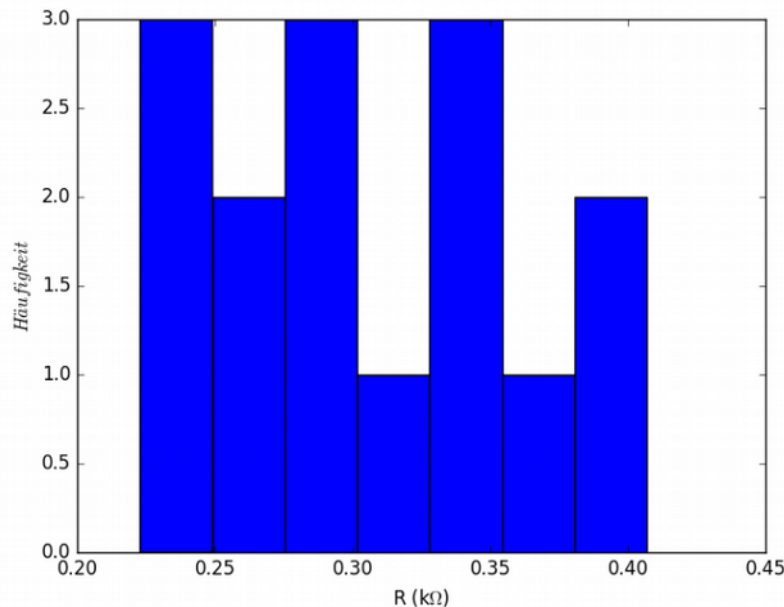
Häufigkeiten und Histogramm-Darstellung

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 , $i=1, \dots, k$

Beispiel: Widerstandsmessungen von eben als Häufigkeitsdiagramm (Histogramm)



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

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

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

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

```
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)
```

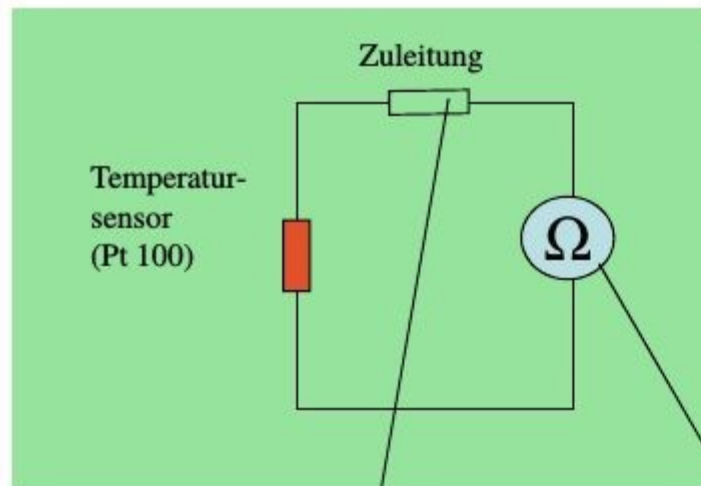
```
plt.xlabel("R ($\Omega$"))
```

```
plt.ylabel(r"$H$ Häufigkeit")
```

```
plt.show()
```

(s. auch Script
Histogram.py
aus CgDA)

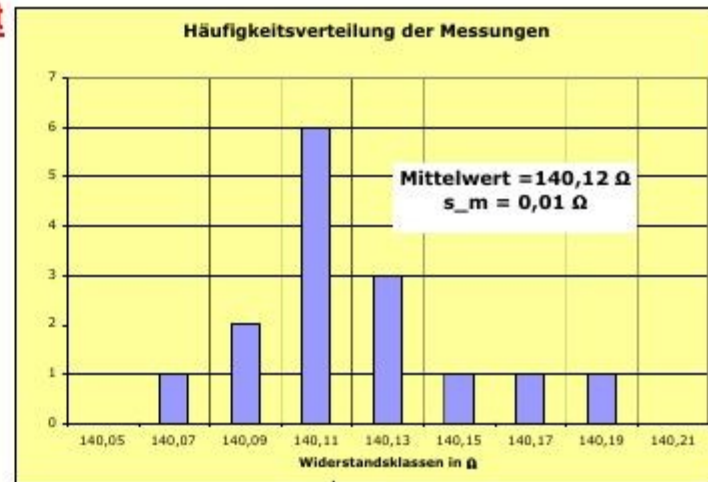
Anwendungsbeispiel: wiederholte Widerstandsmessung



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**

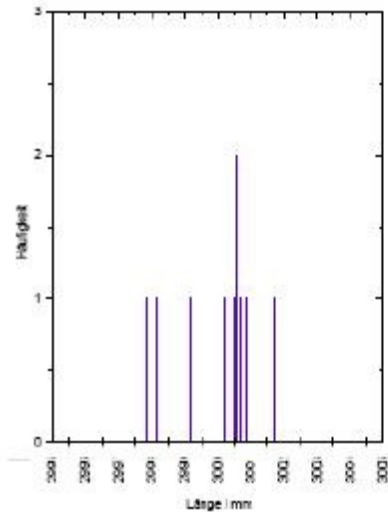
Endergebnis: (139,12 ± 0,01 ± 0,05) Ω

Falls die Gesamtunsicherheit gefordert wird: quadratische Addition

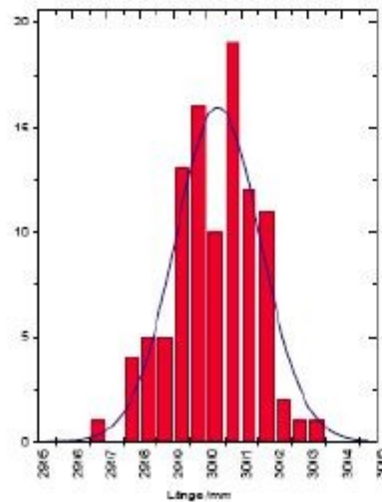
Grenzverteilung

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

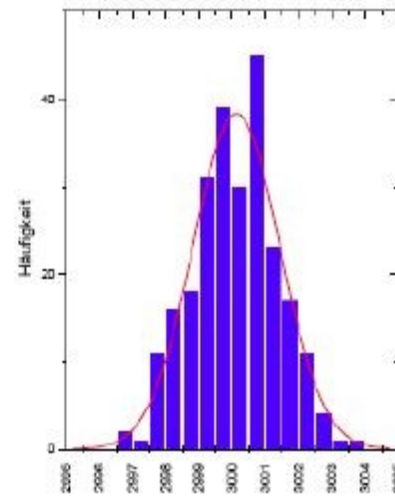
Histogramm (10 Messungen)



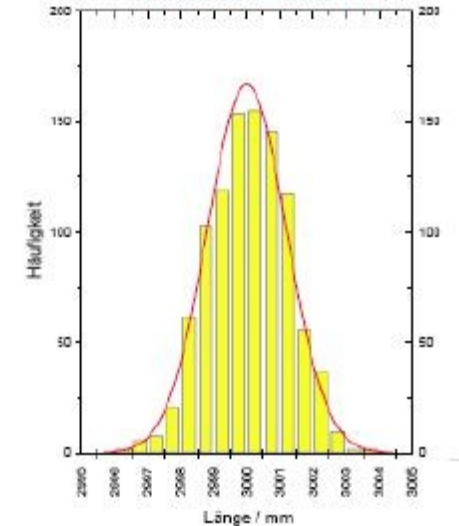
100 Messungen



Histogramm (250 Messungen)



Histogramm (1000 Messungen)

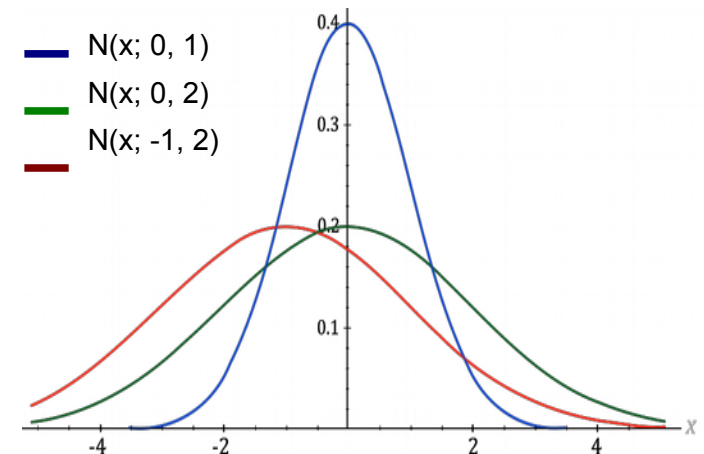


Unter recht schwachen Annahmen (Lyapunov-Bedingung) ist die **Grenzverteilung** der statistischen Abweichungen

die Gauß-Verteilung:

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

(zentraler Grenzwertsatz der Statistik)



Eigenschaften der Gauß- oder Normal-Verteilung

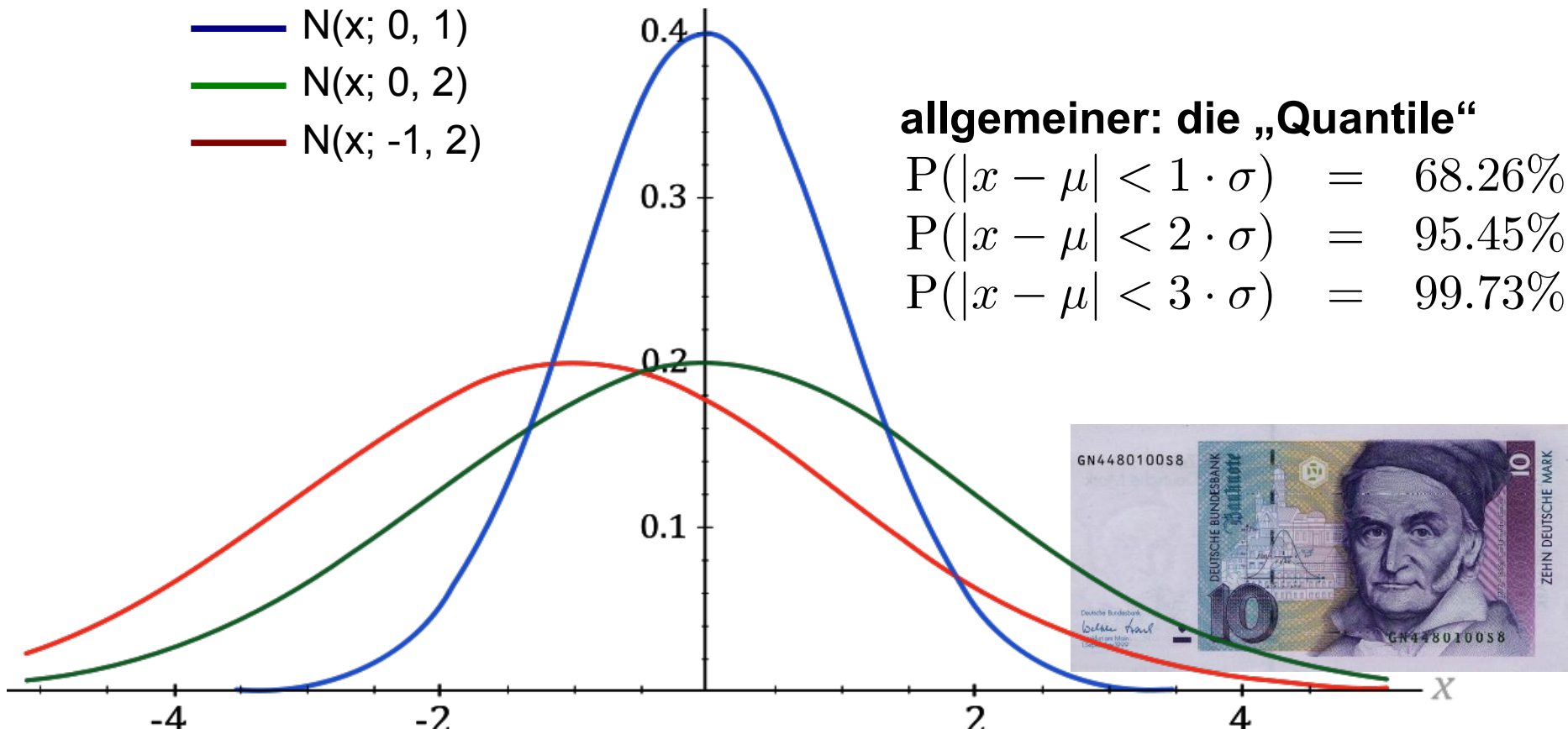
$$N(x; \mu, \sigma) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} e^{-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}}$$

Mittelwertwert $E[x] = \mu$

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

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

- $N(x; 0, 1)$
- $N(x; 0, 2)$
- $N(x; -1, 2)$



allgemeiner: die „Quantile“

$$P(|x - \mu| < 1 \cdot \sigma) = 68.26\%$$

$$P(|x - \mu| < 2 \cdot \sigma) = 95.45\%$$

$$P(|x - \mu| < 3 \cdot \sigma) = 99.73\%$$

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 $y = f(x_1, \dots, x_n)$, 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_{x_i} 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

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

zufällige systematische
Abweichung

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

G (Einheit)

simulierte Messdaten

Zahl der Messungen: 9
wahrer Wert: 0.95
syst. Abweichung: 0.3
stat. Unsicherheit: 0.3

syst. Abweichung

— wahrer Wert
× wahr+Systematik
• Einzelmessungen
• Gesamtwert

Daten einer
Messreihe

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

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

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

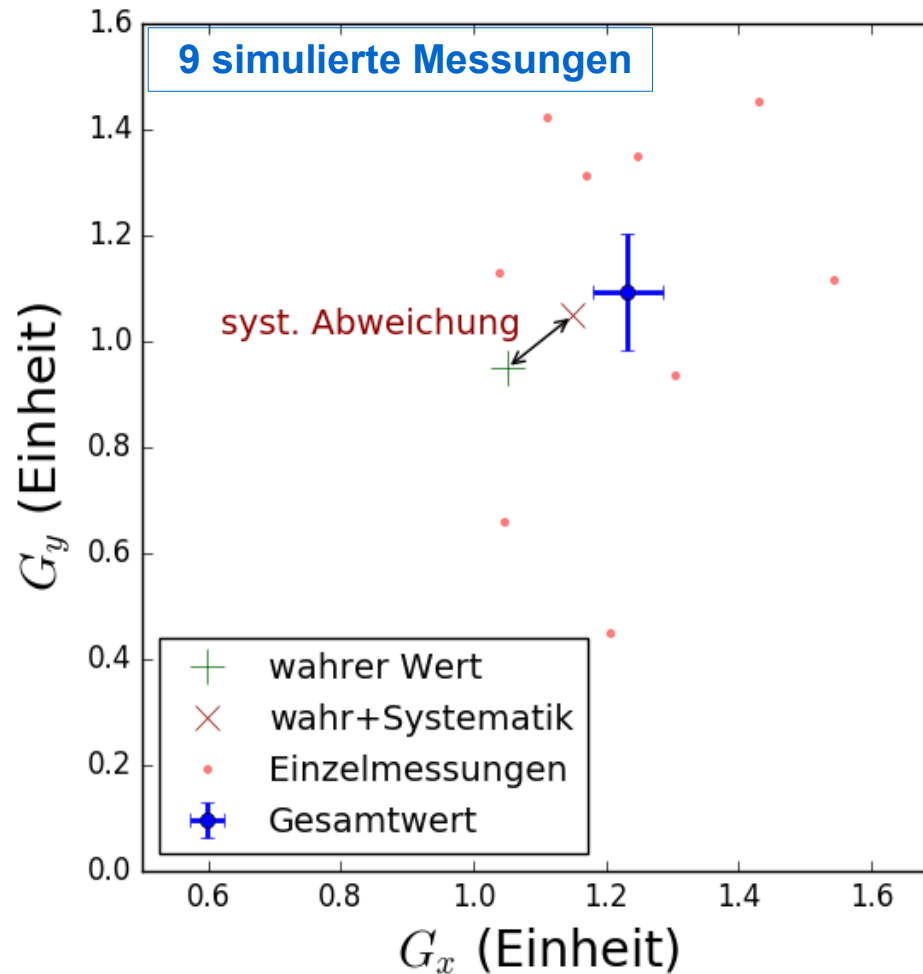
dominiert durch systematische Unsicherheit !

- 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

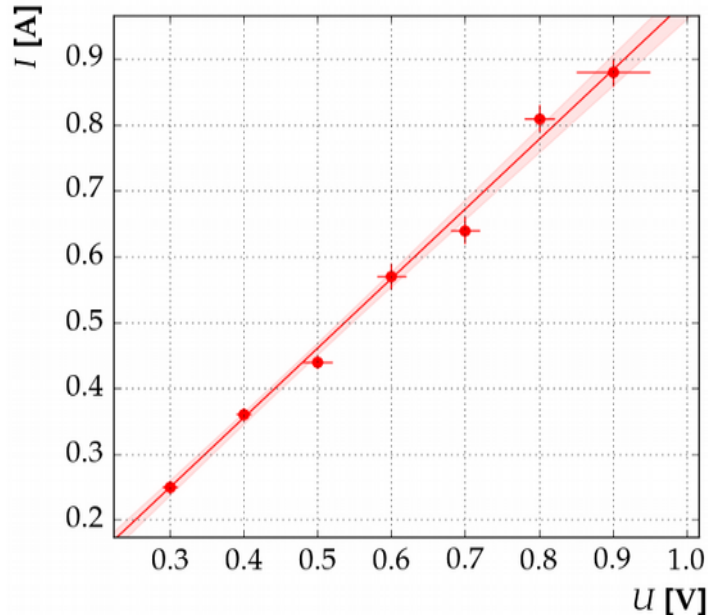
Modellanpassung oder „Regression“

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

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

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

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



Script: Anpassen von Funktionen an Messdaten

15. November 2013

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

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 $f_i = f(x_i; p_1, \dots, p_n)$ **minimal** wird.

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

- analytisch: $\frac{S}{\partial p_j} = 0, j = 1, \dots, k$ 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

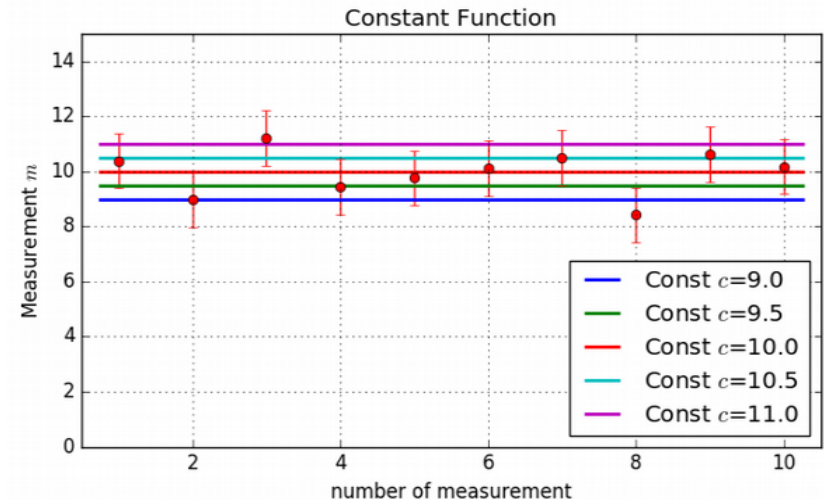
Mittelwert von 10 Messungen y_i mit Unsicherheiten σ entspricht der Anpassung einer konstanten Funktion $f(x;c)=c$

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

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

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

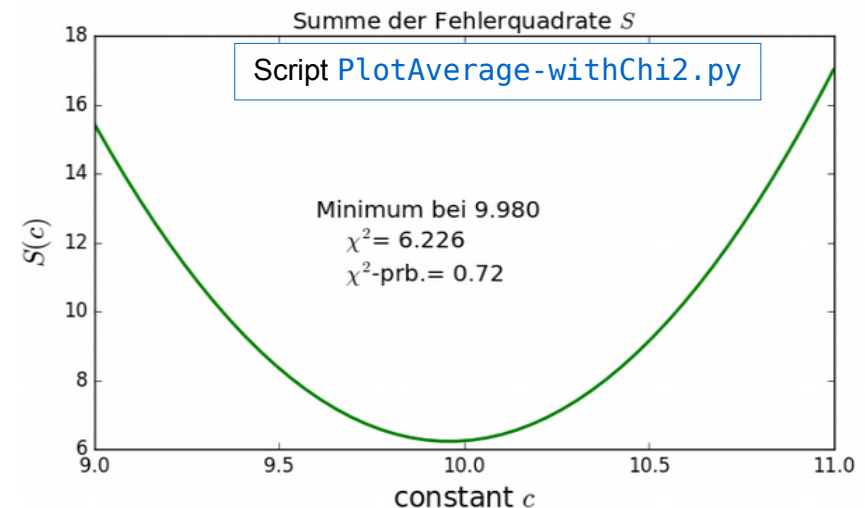
identisch zum „Mittelwert“



„numerisch“:

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

berechnen und
grafisch darstellen



Spezialfall: Lineare Regression (Geradenanpassung)

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

Nullsetzen der 1. Ableitungen ergibt das Gleichungssystem

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

mit den Abkürzungen

$$\begin{aligned} S_1 &= \sum_{i=1}^N \frac{1}{\sigma_i^2}, & S_x &= \sum_{i=1}^N \frac{x_i}{\sigma_i^2} = \bar{x} S_1, & S_y &= \sum_{i=1}^N \frac{y_i}{\sigma_i^2} = \bar{y} S_1 \\ S_{xx} &= \sum_{i=1}^N \frac{x_i^2}{\sigma_i^2} = \overline{x^2} S_1, & S_{xy} &= \sum_{i=1}^N \frac{x_i y_i}{\sigma_i^2} = \overline{xy} S_1, & D &= S_1 S_{xx} - S_x^2 \end{aligned}$$

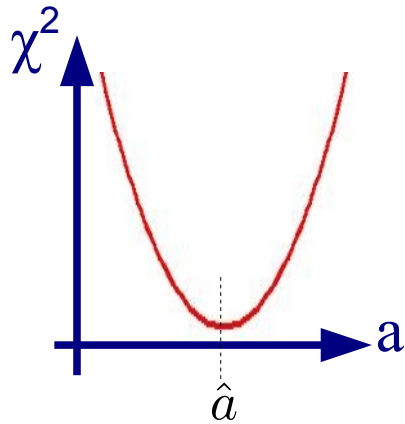
ergibt sich die Lösung:

$$\begin{aligned} \hat{p}_1 &= \frac{S_{xx} S_y - S_x S_{xy}}{D}, & \sigma_{p_1}^2 &= \frac{S_{xx}}{D}, \\ \hat{p}_2 &= \frac{S_1 S_{xy} - S_x S_y}{D}, & \sigma_{p_2}^2 &= \frac{S_1}{D}, & V_{12} &= \frac{-S_x}{D} \end{aligned}$$

Implementierung in python s. Script `linRegression`

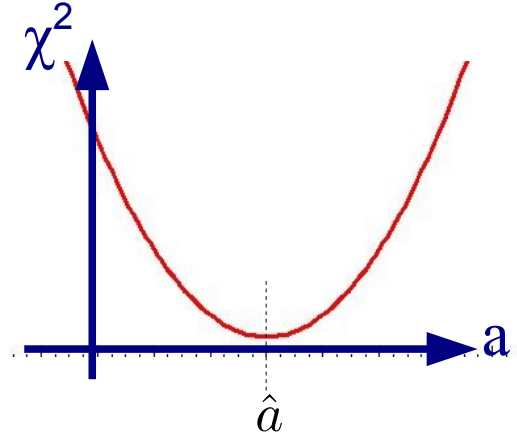
Diese Formeln waren für Generationen von Studierenden die Basis einer jeden Anpassung („Regression“)
***aber:** schon die Behandlung von Unsicherheiten in Ordinate **und** Abszisse erfordert numerische Methoden*

Modellanpassung: Bestimmung der Parameterfehler



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

scharfes Minimum:
große Krümmung



flaches Minimum:
kleine Krümmung

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

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

bei mehreren Parametern .

V: Kovarianzmatrix der Parameterunsicherheiten, s. Vorl. CgDA

Modellanpassung: das Anpassungspaket kafe

zu **kafe** gibt es eine Anzahl von gut dokumentierten Beispielen, s.

<http://www.ekp.kit.edu/~quast/kafe/html> oder <https://github.com/dsavoiiu/kafe>

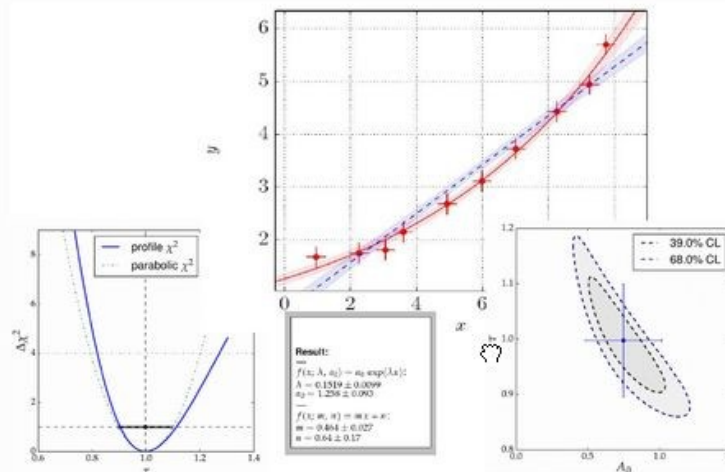
Welcome to KaFE (Karlsruhe Fit Environment)

kafe is a data fitting framework designed for use in undergraduate physics lab courses. It provides a basic *Python* toolkit for fitting models to data as well as visualisation of the data and the model function. It relies on *Python* packages such as `numpy` and `matplotlib`, and uses the *Python* interface to the minimizer *Minuit* contained in the data analysis framework *ROOT*.

kafe Overview

The **kafe** package provides a rather general approach to fitting of a model function to two-dimensional data points with correlated uncertainties in both dimensions. The *Python* API guarantees full flexibility for data input. Helper functions for file-based input and some examples are available for own applications.

Applications range from performing a simple average of measurements to complex situations with both correlated (systematic) and uncorrelated (statistical) uncertainties on the measurements of the x and y values described by a non-linear model function depending on a large



Graphical output generated with kafe.

Anmerkung:

die Berücksichtigung von Unsicherheiten in Ordinaten- und Abszissenrichtung oder die Anpassung von Modellen, die nicht linear von den Parametern abhängen, sind analytisch nicht möglich.

Die **Empfehlung** ist daher, grundsätzlich Anpassungen mit **numerischen Werkzeugen** durchzuführen.

Empfohlene Software-Grundausstattung

Software-Pakete sind quelloffen (Open Source)

d.h. frei unter Linux, MS Windows, Mac OSX und auf dem CIP-Pool verfügbar

- Textdokumente erstellen mit **LaTeX** siehe z.B. <http://www.dante.de/>
- (Vektor-)Grafik mit **inkscape** <https://inkscape.org/de/>
- Ausführen von virtuellen Maschinen: **VirtualBox** <https://www.virtualbox.org/>
- Script- und (Programmier-) Sprache **python** vers. 2.7
unter Linux (meist) schon installiert
für Windows siehe <http://winpython.sourceforge.net/>
(Komplettpaket, enthält schon die unten angegebenen Zusatzpakete)
- (einfache) Entwicklungsumgebung für python **IDLE** Integrated **D**velopment and **L**earning
- interaktives Arbeiten mit python: **IPython** <http://ipython.org/notebook.html>
- grafische Darstellung mit python: **matplotlib**
- python-Bibliotheken für wissenschaftliches Arbeiten: **numpy** und **scipy**
- Funktionsanpassung mit python: **kafe** <http://www.ekp.kit.edu/~quast>
- *man braucht noch einen **Texteditor** (das ist „Geschmackssache“ ,
etwas komfortabler als MS Notepad darf's schon sein)*

Details s. CgDA, V01b_intro.pdf <http://www.ekp.kit.edu/~quast/CgDA> (user: Students, password: only)

enthält auch Hinweise und ein vorkonfiguriertes Gesamtpaket für Win10, sowie eine „virtuelle Maschine“

Anhang

Praktische Beispiele

Modellanpassung mit kafe

In der Praxis setzt man Programmpakete ein, die

- Strukturen zur Verwaltung von Daten und deren Fehlern
- Definition von Modellen
- Anpassung mittels numerischer Optimierung
- grafische Darstellung
- Ausgabe der Ergebnisse

bereit stellen.

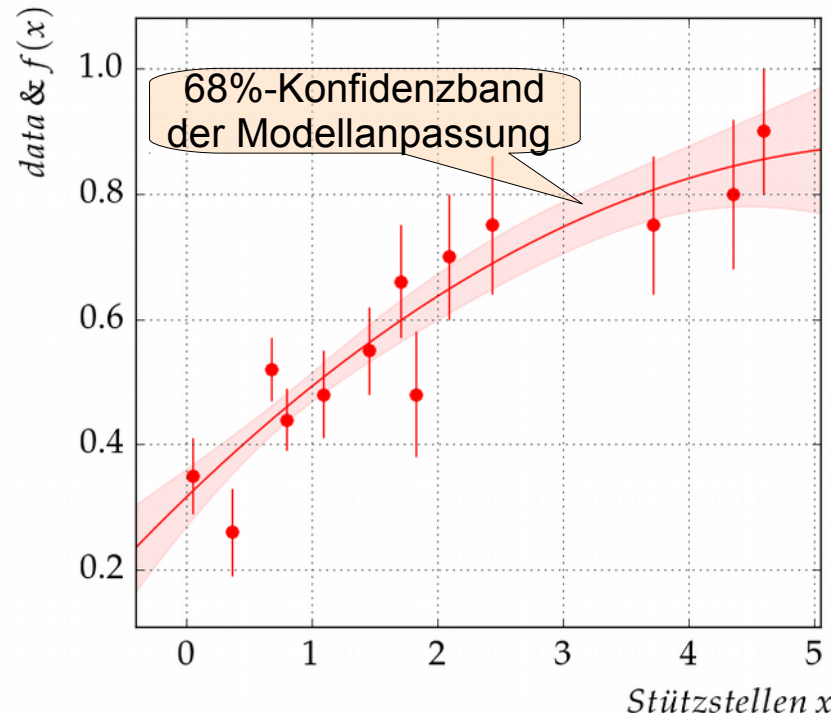
Zuverlässige Konvergenz zum globalen Minimum bei nicht-linearen Problemstellungen erfordert meist das Setzen geeigneter Startwerte!

Beispiel mit dem
python-Framework

„kafe“:

Anpassung der drei
Parameter einer qua-
dratischen Funktion
an Datenpunkte mit
Unsicherheiten nur
in Ordinatenrichtung.

siehe Script
[fitexample_kafe.py](#)



— $f(x; a, b, c) = a x^2 + b x + c$
♦ example data

Fit Info

$f(x; a, b, c) = a x^2 + b x + c$
 $a = -0.017 \pm 0.013$
 $b = 0.193 \pm 0.059$
 $c = 0.315 \pm 0.046$

Beispielcode: numerische Anpassung mit kafe

siehe Script [fitexample_kafe.py](#)

```
# example fit with kafe
import kafe
from kafe.function_tools import FitFunction, LaTeX, ASCII

# fit function definition (with decorators for nice output)
@ASCII(expression='a * x^2 + b * x + c')
@LaTeX(name='f', parameter_names=('a','b','c'), expression=r'a\,x^2+b\,x+c')
@FitFunction
def poly2(x, a=1.0, b=0.0, c=0.0):
    return a * x**2 + b * x + c

# ----- begin of workflow -----
# set data
xm = [.05,0.36,0.68,0.80,1.09,1.46,1.71,1.83,2.44,2.09,3.72,4.36,4.60]
ym = [0.35,0.26,0.52,0.44,0.48,0.55,0.66,0.48,0.75,0.70,0.75,0.80,0.90]
ye = [0.06,0.07,0.05,0.05,0.07,0.07,0.09,0.1,0.11,0.1,0.11,0.12,0.1]

# create a kafe Dataset
kdata = kafe.Dataset(data=(xm, ym), basename='kData', title='example data')
kdata.add_error_source('y', 'simple', ye) # add uncertainties
kfit=kafe.Fit(kdata, poly2) # create the Fit object from data & fit function
kfit.do_fit() # perform fit
kplot=kafe.Plot(kfit) # create plot object
kplot.axis_labels = [r'$St$ "utzzustellen \, x $', r'$data\,\&\,f(x)$']
kplot.plot_all() # make plots
kplot.show() # show the plots
```

nur zur
Verschönerung

der wichtige
Code für kafe

kafe nutzt das CERN-Paket MINUIT zur numerischen Optimierung

Modellanpassung: Daten-getriebene Anpassung

Die Methode `kafe.file_tools.build_fit_from_file()` ermöglicht es, **einfache Anpassungen vollständig über eine Datei zu steuern**:

Skript `kafe_fit-from-file.py`

```
import sys, matplotlib.pyplot as plt, kafe
from kafe.file_tools import buildFit_fromFile

# check for / read command line arguments
if len(sys.argv)==2:
    fname=sys.argv[1]
else:
    fname='data.fit'
print '*==* script ' + sys.argv[0]+ ' executing \n',\
      '      processing file ' + fname

# initialize fit object from file and run fit
theFit = buildFit_fromFile(fname)
theFit.do_fit()
thePlot = kafe.Plot(theFit)
thePlot.plot_all( show_info_for=None)

#thePlot.save(fname.split('.')[0]+'pdf')
#theFit.plot_correlations() # eventually contours
thePlot.show() # show everything on screen
```

Mit Hilfe dieses **Universalskripts** müssen

Sie keinen speziellen python-Code schreiben, sondern nur die **Eingabedatei** erstellen !

example showing fit driven by input file

```
# -- Meta data for plotting
*BASENAME linearFitExample
*FITLABEL Angepasste Gerade
*TITLE I-U Messungen
*xLabel $U$
*xUnit V
*yLabel $I$
*yUnit A
```

-- description of data

```
*xData
0.30 0.01
. . .
```

```
0.90 0.05
```

```
*yData
0.25 0.01
. . .
```

```
0.88 0.02
```

systematic errors: correlated among all measurements

```
*xRelCor 0.005 # relative error of 0.5% on U
```

```
*yRelCor 0.005 # relative error of 0.5% on I
```

-- fuction to fit

```
*FitFunction
```

```
def fitf(x, a=1., b=0.):
```

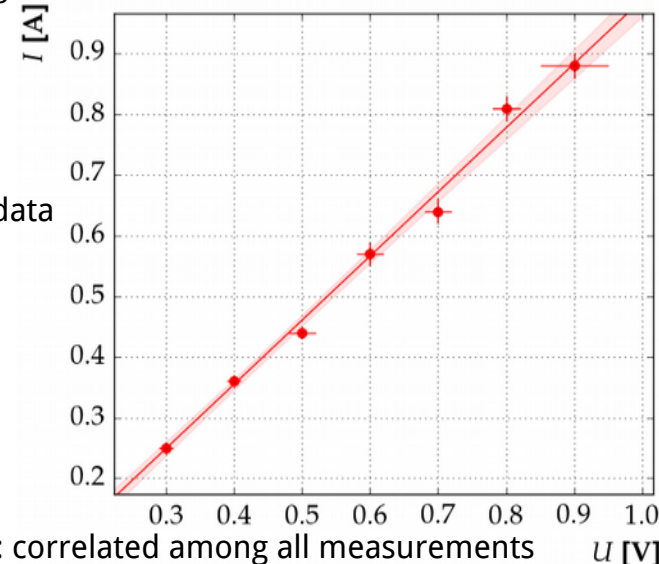
```
~~return a*x +b
```

initial parameter values and range

```
*InitialParameters
```

```
1. 0.3
```

```
0. 0.1
```



Datei
IU-Messungen.fit

weitere Beispiele ...

Alle Dateien zu den gezeigten Beispielen (und noch viele mehr)
finden Sie unter dem Link zur Vorlesung

Computergestützte Datenauswertung

<http://www.ekp.kit.edu/~quast/CgDA/CgDA.html>

Spezielle **Python-Beispiele** zum Start ins Praktikum

<http://www.ekp.kit.edu/~quast/CgDA/PhysPrakt>

das python-Modul **PhyPraKit.py** enthält

1. Dateneingabe aus Text-Dateien im Spaltenformat

read_data() n Spalten mit Meta-Daten (Datum, Autor,
Beschreibung, Einstellungen ...)

2. Berechnung des gewichteten Mittelwerts

3. Histogramm-Tools

barstat() statistische Information aus Balkendiagramm

histstat() statistische information aus 1d-Histogramm

hist2dstat() statistische Information aus 2d-histogram

profile2d() "profile plot" für 2d-Daten

chi2p_indep2d() chi2-Test auf Unabhängigkeit zweier Datensätze

4. lineare Regression ($y = a \cdot x + b$)

linRegression() mit der analytischen Formel (nur y-Fehler)

linRegressionXY() numerisch, mit Fehlern in x und y

kRegression() mit kafe, x-, y- und korrelierte Fehler

5. Erzeugung von simulierten Datensätzen

s. Beispiel-Scripts

test_readColumnData.py

test_histogram.py

test_linRegression.py

test_kRegression.py

test_generateData.py

- M. Erdmann und T. Hebbeker, Experimentalphysik 5
Moderne Methoden der Datenanalyse
Springer Lehrbuch 2013

digital über die KIT-Bibliothek



- H.J.Eichler et al., *Das neue Physikalische Grundpraktikum*,
Springer Lehrbuch 2016

digital über die KIT-Bibliothek

- W.H. Gränicher; *Messung beendet - was nun?*,
Teubnerverlag Stuttgart, 1996
- Gerhard Bohm, Günter Zech; *Introduction to Statistics and Data Analysis for Physicists*, Verlag Deutsches Elektronen-Synchrotron 2014 *digital als DESY ebook*

- Eigene Skripte zur Veranstaltung

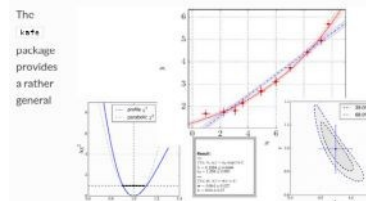
- Funktionsanpassung
- Software-Paket *kafe*
- Virtuelle Maschine

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

Welcome to KaFE (Karlsruhe Fit Environment)

kafe is a data fitting framework designed for use in undergraduate physics lab courses. It provides a basic Python toolkit for fitting models to data as well as visualisation of the data and the model function. It relies on Python packages such as `numpy` and `matplotlib`, and uses the Python interface to the minimizer `Minuit` contained in the data analysis framework `ROOT` or available as a separate python package `iminuit`.

kafe Overview



Graphical output generated with kafe.

Script: Anpassen von Funktionen an Messdaten

26. Februar 2015

Funktionsanpassung mit der χ^2 -Methode

Script: Einsatz von Virtuellen Maschinen

29. August 2014

VIRTUELLE MASCHINE ZUR PHYSIK

Danke für Ihre Aufmerksamkeit

Wir wünschen Ihnen

Experimentierfreude und

ein spannendes, erkenntnisreiches

Praktikum