FAKULTÄT FÜR MATHEMATIK UND NATURWISSENSCHAFTEN
INSTITUT FÜR PHYSIK
FACHGEBIET EXPERIMENTALPHYSIK I
Dr. rer. nat. Norbert Stein

Parabolische Regression – Mathematische Grundlagen

Gelegentlich kann es sinnvoll sein, nichtlineare Zusammenhänge zwischen den Messwertpaaren $x_1, x_2, \dots, x_N$ sowie $y_1, y_2, \dots, y_N$ zumindest teilweise durch eine Ausgleichsparabel entsprechend $y = ax^2 + bx + c$ anzunähern. Im gezeigten Beispiel wird das Minimum der Reflektivität parallel zur Einfallsebene polarisierten Lichts von Luft auf Glas als Funktion des Einfallswinkels gesucht:

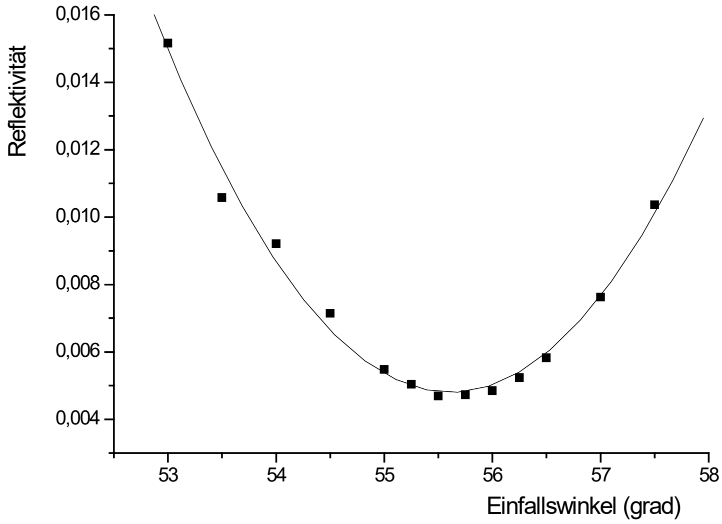

Abb. 1: Parabolischer Verlauf der Reflektivität in der Nähe des Brewserwinkels

Vereinfachend für die weiteren Berechnungen wird angenommen, dass die Abszissenwerte x_i (hier Einfallswinkel) praktisch fehlerlos abgelesen wurden und alle Ordinatenwerte y_i (hier Reflektivität) mit dem gleichen Gewicht betrachtet werden können. Unter Anwendung der Methode der kleinsten Quadrate geht man, analog zur Berechnung einer Ausgleichsgeraden, von der Summe der Abweichungsquadrate S aus, die durch Variation der Parabelkoeffizienten a, b und c minimiert wird. Mit σ^2, der Varianz der Einzelmessung, erhält man:

$$S = \frac{1}{\sigma^2} \sum_{i=1}^{N} \left(a x_i^2 + b x_i + C - y_i \right)^2 \tag{1}$$

Nullsetzen der partiellen Ableitungen von S nach den Unbekannten a, b und c liefert die Normalgleichungen:

$$\frac{\partial S}{\partial a} = \frac{2}{\sigma^2} \sum_{i=1}^{N} \left(a x_i^2 + b x_i + c - y_i \right) x_i^2 = 0\,, \tag{2}$$

$$\frac{\partial S}{\partial b} = \frac{2}{\sigma^2} \sum_{i=1}^{N} \left(a x_i^2 + b x_i + c - y_i \right) x_i = 0\,, \tag{3}$$

$$\frac{\partial S}{\partial c} = \frac{2}{\sigma^2} \sum_{i=1}^{N} \left(a x_i^2 + b x_i + c - y_i \right) = 0\,. \tag{4}$$

Zur Vereinfachung der Schreibweise der nächsten Rechenschritte werden nach Gauß die Summenzeichen $\sum_{i=1}^{N} z_i$ durch gleichbedeutende Klammerausdrücke $[z]$ ersetzt, sodass sich das zu lösende lineare Gleichungssystem folgendermaßen darstellt:

$$\begin{pmatrix} N & [x] & [x^2] \\ [x] & [x^2] & [x^3] \\ [x^2] & [x^3] & [x^4] \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} c \\ b \\ a \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} [y] \\ [yx] \\ [yx^2] \end{pmatrix}. \tag{5}$$

Die Lösung erfolgt mithilfe der Cramerschen Regel (Determinantenmethode), indem zunächst die Nennerdeterminante berechnet wird. Man erhält

$$D = N[x^2][x^4] - N[x^3]^2 - [x]^2[x^4] + 2[x][x^2][x^3] - [x^2]^3 \tag{6}$$

und weiterhin Schätzwerte für die Koeffizienten der Ausgleichsparabel:

$$\hat{a} = \frac{N[yx^2][x^2] - N[yx][x^3] - [yx^2][x]^2 + [yx][x][x^2] + [y][x][x^3] - [y][x^2]^2}{D}, \tag{7}$$

$$\hat{b} = \frac{N[yx][x^4] - N[yx^2][x^3] - [y][x][x^4] + [y][x^2][x^3] + [yx^2][x][x^2] - [yx][x^2]^2}{D} \tag{8}$$

sowie

$$\hat{c} = \frac{[y][x^2][x^4] - [y][x^3]^2 - [yx][x][x^4] + [yx^2][x][x^3] + [yx][x^2][x^3] - [yx^2][x^2]^2}{D}. \tag{9}$$

Die empirische Standardabweichung des Einzelwertes $s(y_i)$ von der gefundenen Parabel erhält man unter Berücksichtigung der Tatsache, dass drei Unbekannte gesucht wurden:

$$s(y_i) = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^{N}\left(\hat{a}\,x_i^2 + \hat{b}\,x_i + \hat{c} - y_i\right)^2}{N-3}}. \tag{10}$$

Sie muss bei der Berechnung der Standardunsicherheiten der Koeffizienten $\hat{a}, \hat{b}$ und $\hat{c}$ berücksichtigt werden. Hierzu wird das Gaußsche Fortpflanzungsgesetz für die Unsicherheiten, dessen Form für den Fall kleiner, unkorrelierter Abweichungen

$$s(f) = \sqrt{\left(\frac{\partial f}{\partial x_1}\right)^2 s(x_1)^2 + \left(\frac{\partial f}{\partial x_2}\right)^2 s(x_2)^2 + \ldots + \left(\frac{\partial f}{\partial x_N}\right)^2 s(x_N)^2} \tag{11}$$

ist, für jeden der gemessenen Werte y_i auf die Gleichungen (7) bis (9) angewendet und man erhält zunächst für die partiellen Ableitungen:

$$\frac{\partial \hat{a}}{\partial y_i} = \frac{Nx_i^2[x^2] - Nx_i[x^3] - x_i^2[x]^2 + x_i[x][x^2] + [x][x^3] - [x^2]^2}{D}, \tag{12}$$

$$\frac{\partial \hat{b}}{\partial y_i} = \frac{Nx_i[x^4] - Nx_i^2[x^3] - [x][x^4] + [x^2][x^3] + x_i^2[x][x^2] - x_i[x^2]^2}{D} \tag{13}$$

sowie

$$\frac{\partial \hat{c}}{\partial y_i} = \frac{[x^2][x^4] - [x^3]^2 - x_i[x][x^4] + x_i^2[x][x^3] + x_i[x^2][x^3] - x_i^2[x^2]^2}{D}. \tag{14}$$

Es lässt sich an dieser Stelle leicht erahnen, dass die weiteren Rechenschritte einigen Schreibaufwand erfordern, was es nahelegt, ein Mathematikprogramm zu verwenden, das wenigstens keine Schusselfehler macht. Jede der partiellen Ableitungen (12) bis (14) muss jetzt mit der Standardunsicherheit $s(y_i)$ multipliziert, quadriert und die geometrische Summation gemäß (11) ausgeführt werden. Dabei fallen einige der zwischendurch auftretenden Terme wieder weg und es bleiben recht einfache Ausdrücke für die kombinierten Unsicherheiten der Schätzwerte übrig:

$$\Delta\hat{a} = s(\hat{a}) = s(y_i)\sqrt{\frac{N[x^2]-[x]^2}{D}}, \tag{15}$$

$$\Delta\hat{b} = s(\hat{b}) = s(y_i)\sqrt{\frac{N[x^4]-[x^2]^2}{D}} \tag{16}$$

und

$$\Delta\hat{c} = s(\hat{c}) = s(y_i)\sqrt{\frac{[x^2][x^4]-[x^3]^2}{D}}. \tag{17}$$

Bei der Berechnung weiterer Ergebnisse müssen diese Unsicherheiten über die Regeln der Fortpflanzung (Berechnung der kombinierten Unsicherheiten) mitberücksichtigt werden.

Beispiel:

Es interessieren die Parameter der Parabel in der Scheitelform $y = (x-b)^2 + c$. Die Normalform sei mit $y = \hat{a}x^2 + \hat{b}x + \hat{c}$ gegeben. Mithilfe einer quadratischen Ergänzung findet man die Umrechnungen

$$a = \hat{a}, \tag{18}$$

$$b = -\frac{\hat{b}}{2\hat{a}} \tag{19}$$

und

$$c = \hat{c} - \frac{\hat{b}^2}{4\hat{a}}. \tag{20}$$

Für die Bestimmung der Unsicherheiten der neuen Parameter folgt man dem Vorgehen nach (11) und berechnet:

$$\Delta a = \Delta\hat{a}, \tag{21}$$

$$\Delta b = \sqrt{\left(\frac{\hat{b}\,\Delta\hat{a}}{2\hat{a}^2}\right)^2 + \left(\frac{\Delta\hat{b}}{2\hat{a}}\right)^2} \tag{22}$$

sowie

$$\Delta c = \sqrt{\left(\frac{\hat{b}^2\Delta\hat{a}}{4\hat{a}^2}\right)^2 + \left(\frac{\hat{b}\,\Delta\hat{b}}{2\hat{a}}\right)^2 + \Delta\hat{c}^2}. \tag{23}$$

Ilmenau, den 13.03.2020