Regression einer Proportionalität

Martin Lieberherr
Mathematisch Naturwissenschaftliches Gymnasium
Rämibühl, Natw. Institute/Physik
Rämistrasse 54, 8001 Zürich

1 Einleitung

Die lineare Regression nach der Methode der kleinsten Quadrate, d.h. die Bestimmung der Koeffizienten eines Polynoms ersten Grades, das eine Menge von Zahlenpaaren optimal repräsentiert, ist allgemein bekannt und wird auch von technisch-wissenschaftlichen Taschenrechnern unterstützt. Im physikalischen Unterricht trifft man aber häufig auf die Proportionalität. Es wäre schön, wenn man die Proportionalitätskonstante mit einer Ausgleichsrechnung direkt bestimmen könnte. Eine lineare Regression liefert ja stets Steigung und Ordinatenabschnitt, die Steigung alleine kann also bestenfalls als Näherung für die Proportionalitätskonstante angesehen werden. Es ist wenig bekannt, dass sich die Proportionalitätskonstante leicht exakt berechnen lässt. Die meisten technisch wissenschaftlichen Taschenrechner, mit denen sich lineare Regressionen durchführen lassen, berechnen dabei auch die Grössen, welche zur Bestimmung der Proportionalitätskonstanten benötigt werden.

In der einschlägigen Literatur [1, 2, 3] werden die Regressionskoeffizienten mit Hilfe der Differentialrechnung bestimmt. Im Falle der einparametrigen Proportionalität genügen aber Kenntnisse der quadratischen Funktionen, so dass die Schlussformel sogar in einem Kurs der gymnasialen Mittelstufe bewiesen werden kann.

2 Theorie

Gegeben seien die Zahlenpaare (x_i, y_i), $i = 1 \dots n$. Gesucht sei jene Proportionalität $y = mx$, welche nach der Methode der kleinsten Quadrate am besten zu diesen Punkten passt, d.h. bei der die Summe der Quadrate der Residuen $r = \sum (mx_i - y_i)^2$ minimal wird. Hier und im folgenden laufen die Summen über die Indices $i = 1 \dots n$. Durch Umformung erhält man:

$$r = \left(\sum x_i^2\right)\cdot m^2 - \left(2\cdot\sum x_i y_i\right)\cdot m + \left(\sum y_i^2\right)$$

Der letzte Ausdruck ist eine quadratische Funktion in m. Von einer quadratischen Funktion $r = am^2 + bm + c$, $a \neq 0$, wissen wir, dass sie das Minimum an der Stelle $m = -b/2a$ haben muss, denn dort liegt in einer graphischen Darstellung der Scheitel der Parabel. Man erhält:

$$m = \frac{\sum x_i y_i}{\sum x_i^2}$$

Mit einem analogen algebraischen Verfahren lässt sich zeigen, dass das arithmetische Mittel x_M eine Menge von Werten x_i, $i = 1, .. , n$, optimal repräsentiert, und dass der Datenschwerpunkt (x_M , y_M) den kleinsten quadratischen Abstand zu einer Menge von Wertepaaren (x_i, y_i) hat. Eine Regressionsgerade verläuft durch den Datenschwerpunkt und genügt somit der Beziehung $y-y_M = m(x-x_M)$. Mit der Substitution $x' = x-x_M$ und $y' = y-y_M$ erhält man $y' = mx'$, also eine Proportionalität. Man könnte so im Prinzip die bekannten Regressionsformeln herleiten, ohne auf die Differentialrechnung zurückzugreifen.

Wir benötigen eine Grösse, mit der wir die Qualität der Anpassung bewerten können. Bei der linearen Regression verwendet man den Korrelationskoeffizienten [4]:

$$K = \frac{\sum (x_i-x_M)(y_i-y_M)}{\sqrt{\sum (x_i-x_M)^2 \cdot \sum (y_i-y_M)^2}}$$

Bei der Proportionalität tritt der Nullpunkt an die Stelle des Datenschwerpunkts. Man erhält dann folgendes:

$$C = \frac{\sum x_i y_i}{\sqrt{\sum x_i^2 \cdot \sum y_i^2}}$$

Diese Grösse nimmt Werte zwischen -1 und +1 an. Sie ist bereits für ein einzelnes Zahlenpaar (verschieden vom Nullpunkt) definiert, was anschaulich auch klar ist, denn mit einem Zahlenpaar ist eine Proportionalität bereits eindeutig festgelegt.

3 Rechenbeispiele

3.1 Gegeben seien die sechs Zahlenpaare (1,1), (2,2), (3,3), (4,4), (1,0) und (4,5). Eine lineare Regression liefert die Steigung 1.316, Ordinatenabschnitt -0.789 und Korrelationskoeffizient 0.969. Weiter erhält man $\sum x_i^2 = 47$, $\sum y_i^2 = 55$ und $\sum x_i y_i = 50$. Damit erhält man für die Proportionalitätskonstante $m = 1.064$ und für den Korrelationskoeffizienten $C = 0.983$.

3.2 Gegeben seien die zwei Zahlenpaare (1,2) und (2,1). Die Werte sind so konstruiert, dass sich ein grosser Unterschied bei der Regression einer linearen Funktion und einer Proportionalität ergibt. Eine lineare Regression liefert die Regressionsgerade $y = -x+3$ mit Korrelationskoeffizient $K = -1$. Weiter erhält man $\sum x_i^2 = \sum y_i^2 = 5$ und $\sum x_i y_i = 4$. Damit ergibt sich die Proportionalitätskonstante $m = 0.8$ und nicht 1, wie ich naiverweise zuerst erwartet hatte! Ein zweiter Blick zeigt aber sehr schnell, dass obige Lösung die Summe der Quadrate der vertikalen Abstände tatsächlich minimiert. Der Korrelationskoeffizient C ist ebenfalls 0.8.

3.3 Man habe sehr viele ($n \to \infty$) Zahlenpaare. Die x-und y-Werte seien auf [0,1] gleichverteilt und statistisch unabhängig voneinander. In einer graphischen Darstellung würden die Punkte das Einheitsquadrat dicht ausfüllen. Man erhält in diesem Fall $\Sigma x_i = \Sigma y_i = n/2$, $\Sigma x_i^2 = \Sigma y_i^2 = n/3$ und $\Sigma x_i y_i = n/4$. Für die lineare Funktion ergibt sich Steigung 0, Ordinatenabschnitt 1/2 und Korrelation 0. Für die Proportionalität erhält man Proportionalitätskonstante 3/4 und Korrelation 3/4. Warum ist diese Korrelation so hoch? Nimmt man jene Punkte, die durch eine Punktspiegelung der obigen Wertepaare am Nullpunkt entstehen, noch hinzu, so wird ein linearer Zusammenhang augenfällig. Auf die Regression einer Proportionalität hat dies keinen Einfluss, wohl aber auf eine lineare Regression. Der Datenschwerpunkt wird in den Nullpunkt verlegt, und man erhält dieselben Werte wie bei der Proportionalität. Dies stellt eine Alternative zur Berechnung der Proportionalitätskonstanten dar: Man nehme zu den gegebenen Daten (x_i, y_i), i = 1, .. , n, noch die Paare $(-x_i, -y_i)$, i = 1, .. , n, hinzu und führe dann eine lineare Regression durch.

4 Anwendungsbeispiele

4.1 Ohmsches Gesetz

Folgende Strom-Spannungs-Wertepaare (Tab. 1) wurden an einem Widerstand, der nominell 680 Ω aufweisen sollte, mit zwei Digitalmultimetern gemessen:

I [mA]	1.5	4.0	6.8	11.4	17.9	23.3	28.3
U [V]	1.00	2.73	4.59	7.65	12.05	15.75	19.20

Tabelle 1: I-U-Werte eines Widerstands

Führt man mit dem Taschenrechner eine lineare Regression durch, so erhält man folgende, noch nicht korrekt gerundete Werte: Steigung 677.414 Ω und Ordinatenabschnitt -0.02357 V. Weiter liefert der Rechner folgende Grössen: $\Sigma U^2 = 849.949\ V^2$, $\Sigma I{\cdot}U = 1256.87\ mA{\cdot}V$ und $\Sigma I^2 = 1858.64\ mA^2$. Daraus lässt sich die Proportionalitätskonstante $R = (\Sigma I{\cdot}U)/(\Sigma I^2) = 676.231\ \Omega$ berechnen (Fig. 1). Wie man sieht, unterscheiden sich die zwei Widerstandswerte nur geringfügig. Ist dieser Unterschied signifikant? Ein kurzer Blick auf die Messwerte, die etwa drei wesentliche Ziffern aufweisen, zeigt, dass der Unterschied nicht signifikant sein kann. Entsprechend ist es vernünftig, den Widerstandswert mit 676 Ω anzugeben, das ist 0.59 % unter dem Nominalwert. Berechnet man die Korrelationen, so erhält man K = 0.999982 bei der linearen Regression und C = 0.999991 im Fall der Proportionalität. Im Rahmen der Messgenauigkeit haben beide Korrelationen die Grösse 1.00.

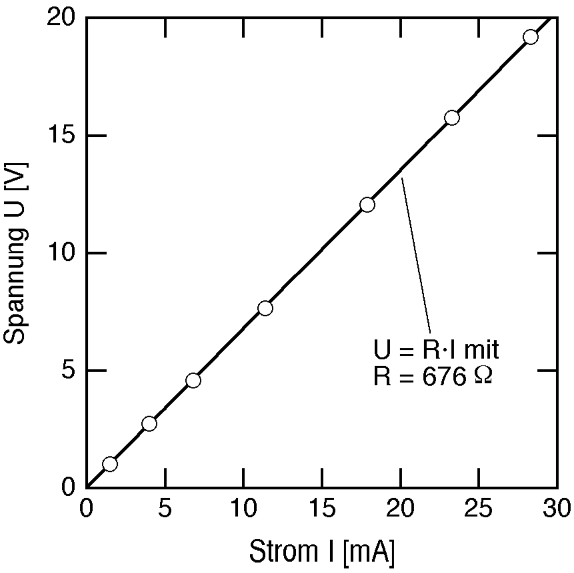


Fig. 1: Darstellung der Messwerte aus Tabelle 1 zusammen mit der optimalen Proportionalität.

4.2 Brechungsgesetz

Von einer planparallelen Glasplatte möchte man gerne die Brechzahl bestimmen. Dazu misst man Paare von Einfallswinkeln (α_1, in Luft) und Brechungswinkeln (α_2, in Glas). Wir machen das so, dass wir durch eine Glasplatte von 5 mm Dicke hindurchschauen, die Strahlengänge auf einem Reissbrett mit Nadeln abstecken und anschliessend mit einem Geodreieck ausmessen. Die Messwerte sind in Tabelle 2 wiedergegeben.

α_1 [°]	α_2 [°]	α_1 [°]	α_2 [°]
78	40.5	77.5	39
68.5	37	67.5	37
51	30	59.5	34
40	24	31	20
15.5	10	19	11.5

Tab. 2: Einfalls- und Brechungswinkel an einer ebenen Grenzfläche Luft/Glas, gegen die Normale gemessen

Will man nun die Brechzahl bestimmen, so muss man auf das Brechungsgesetz zurückgreifen, welches in unserem Fall $\sin\alpha_1 = n{\cdot}\sin\alpha_2$ lautet, wobei n die relative Brechzahl von Glas gegen Luft für sichtbares Licht ist. Durch die Substitution $x = \sin\alpha_2$ und $y = \sin\alpha_1$ erhält man die Proportionalität $y = n{\cdot}x$. Die Berechnung der optimalen Proportionalitätskonstanten liefert n = 1.540, währenddem eine gewöhnliche lineare Regression eine Steigung von 1.516 und einen Ordinatenabschnitt von 0.0131 liefert. Die Proportionalität ist in Figur 2 dargestellt. Die Korrelationen sind K = 0.99911 im linearen Fall und C = 0.99988 für die Proportionalität.

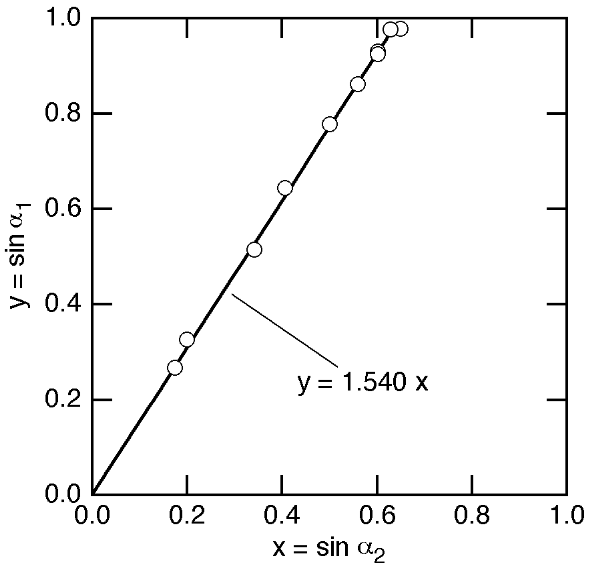
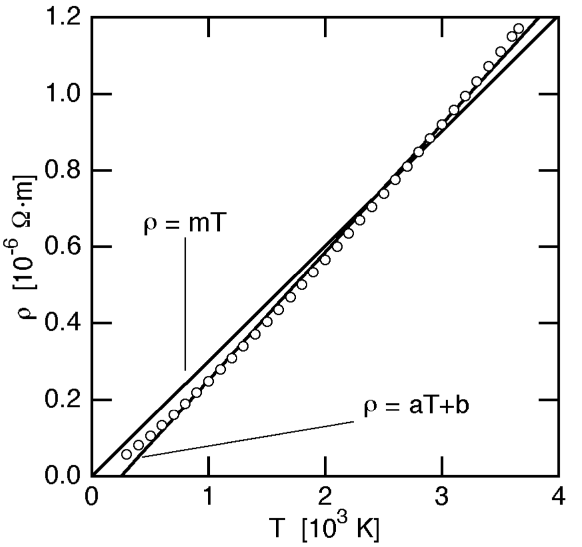


Fig. 2: Messwerte von Tabelle 2 zusammen mit der optimalen Proportionalität. (α_1: Einfallswinkel in Luft, α_2: Brechungswinkel im Glas)

4.3 Temperaturabhängigkeit des spezifischen elektrischen Widerstandes ρ von Wolfram



Figur 3: Spezifischer elektrischer Widerstand ρ von Wolfram aufgetragen gegen die absolute Temperatur T. Die Daten wurden [5] entnommen. Ebenfalls eingezeichnet sind zwei Regressionslinien mit den Gleichungen ρ = mT und ρ = aT+b.

Eine Ausgleichsrechnung liefert die Proportionalitätskonstante m = $3.012 \cdot 10^{-10} \Omega \cdot m \cdot K^{-1}$ und die Korrelation C = 0.9981. Bei einer linearen Regression erhält man Steigung a = $3.347 \cdot 10^{-10} \Omega \cdot m \cdot K^{-1}$, Ordinatenabschnitt b = $-0.0839 \cdot 10^{-6} \Omega \cdot m$ und Korrelation K = 0.9987. Beide Funktionen repräsentieren die Daten mit mässiger Genauigkeit. Für Überschlagsrechnungen genügt die Proportionalität sicher. Die lineare Funktion repräsentiert die Werte nur deshalb genauer, weil sie einen Parameter mehr enthält. Dieser zusätzliche Parameter lässt sich aber kaum physikalisch begründen. (Trägt man ρ vs. T doppelt logarithmisch auf, so scheinen die Daten tatsächlich auf einer Geraden zu liegen. Dies deutet auf ein Potenzgesetz hin.)

Hinweis: In Ausgleichsrechungen der hier besprochenen Art wird vorausgesetzt, dass der Fehler der unabhängigen Variable keine Rolle spielt. Üblicherweise nimmt man deshalb die genauere Messgrösse als unabhängige Variable (x). Sind beide Grössen ähnlich fehlerbehaftet, wie in unseren Beispielen, so müsste man das Regressionsverfahren modifizieren [2]. Im Laboralltag, und auf Gymnasialstufe sowieso, begnügt man sich aber meist mit obigem, vereinfachten Verfahren.

5 Schlussfolgerungen

Die Bestimmung einer Proportionalitätskonstanten nach der Methode der kleinsten Quadrate ist mit minimalem Aufwand durchführbar. Die Herleitung der dazu benötigten Formel ist bereits auf tiefer Stufe möglich und öffnet das Tor zur linearen Regression. Die Regressionsanalyse ist ein wichtiges Hilfsmittel der modernen Naturwissenschaften, und die Schüler haben ein Recht darauf, dieses wichtige mathematische Werkzeug wenigstens an einem Beispiel kennenzulenen.

6 Literatur

[1] Peter Henrici: Essentials of numerical analysis. - New York: John Wiley & Sons 1982

[2] W. H. Heini Gränicher: Messung beendet – was nun? - Hochschulverlag AG an der ETH Zürich und Stuttgart: B. G. Teubner 1994

[3] H. Engesser: SCHÜLERDUDEN Die Mathematik II. - Mannheim: Dudenverlag 1991

[4] DMK/DPK: Formeln und Tafeln. 5. Auflage - Zürich: Orell Füssli 1992

[5] David R. Lide: CRC Handbook of Chemistry and Physics. 71st Edition - Boca Raton: CRC Press 1991