

Kurzanleitung

zu

Protokoll, Auswertung und Fehlerrechnung

im

Praktikum Physikalisch-Chemische
Experimente

Dr. Markus Braun

Institut für Physikalische und Theoretische Chemie

Goethe-Universität Frankfurt

Juli 2022

Das Versuchs-Protokoll

Das Versuchsprotokoll umfasst immer:

1. Deckblatt (Templates auf der Homepage des Praktikums: PCPweb):
 - Versuchsnummer
 - Versuchstitel
 - Namen der Praktikanten und Praktikantinnen (Verfasser oder Verfasserin des Protokolls unterstreichen)
 - Praktikum: PC I, PC II, PC I (L3), PC II (L3), PC Biophysik, PC Nebenfach
 - Datum der Erstellung
 - Stand des Protokolls (Erstabgabe, 1. Korrektur oder 2. Korrektur)
2. Einleitung:

Welche Fragestellung wurde in diesem Versuch bearbeitet und mit welchen experimentellen Mitteln wurde die praktische Arbeit durchgeführt.
3. Experimentelles:

Ausführliche Beschreibung der Durchführung des Versuchs.
4. Resultate:

Präsentation der selbst gemessenen Versuchsergebnisse (Originaldaten) in Form von beschrifteten Graphen bzw. Tabellen. Dazu eine klare Darstellung des vollständigen Gangs der Auswertung.
5. Fehlerbetrachtung:

Fehlerrechnung mit sämtlichen zur Berechnung erforderlichen Graphen (Fitkurven), Formeln und Werten.
6. Diskussion:

Die Ergebnisse des Versuchs sollen wissenschaftlich belastbar diskutiert werden. Dies umfasst unter anderem eine Bewertung der Fehlerquellen (statistische bzw. systematische Fehlerquellen) und die Diskussion der Versuchsergebnisse in Hinblick auf Literaturwerte und der bei der Durchführung aufgetretenen Schwierigkeiten.
7. Fragen aus dem Protokoll
8. Anhang (nicht nötig, wenn das Protokoll über das PCPweb digital eingereicht wird):
 - Kopie der Versuchsanleitung
 - bereits korrigierte Versionen des Protokolls
 - originales, gestempeltes Tagesprotokoll

Formalien:

- Geben Sie Ihr komplettes Protokoll digital (pdf-Format) über das PCPweb ab.
- Verwenden Sie im Protokoll Seitenzahlen und nummerieren Sie ebenfalls Abbildungen, Tabellen und Formeln.

Versuchsdurchführung:

- Um eine Reproduzierbarkeit von Experimenten zu ermöglichen, muss die Versuchsdurchführung so genau wie möglich sein. Es gehören dazu die genaue Auflistung der Ausgangssubstanzen und deren Mengenangaben sowie Versuchsbedingungen wie z.B. Temperatur und Druck.
- Zusätzlich sollte der Versuchsaufbau durch eine Skizze oder ein Foto ergänzt werden.
- Eine Versuchsdurchführung beschreibt Ihren schon getätigten Vorgang und ist daher in der Vergangenheitsform zu schreiben.
- In die Durchführung gehören keine Resultate, die während des Versuchs gemacht worden sind.
- Das gesamte Protokoll soll in einer wissenschaftlich adäquaten Ausdrucksweise verfasst sein (keine Umgangssprache). Typischerweise wird die neutrale Erzählperspektive (keine Ich-Erzählperspektive) verwendet. Lassen Sie alle unnötigen Füllwörter, die umgangssprachlich gebräuchlich sind, weg. "Man-Formen" nach Möglichkeit vermeiden. Ein Beispiel findet sich folgend in Tabelle 1.

Tabelle 1. Vergleich von umgangssprachlicher (links) und wissenschaftlicher Ausdrucksweise (rechts)

Suboptimal	Besser
... Da haben wir dann so etwa 1 Grad Messfehler, weil das Thermometer komisch geschwankt hat und wir da keine Temperatur genau ablesen konnten. ... Das AgCl hat man dann in das Glas umgefüllt Durch starke Schwankungen der Umgebungstemperatur war die Ablesegenauigkeit des Thermometers ΔT auf 1 K begrenzt. ... 100 mL der konzentrierten Silberchlorid-Lösung wurde in ein 200 mL Becherglas umgefüllt ...

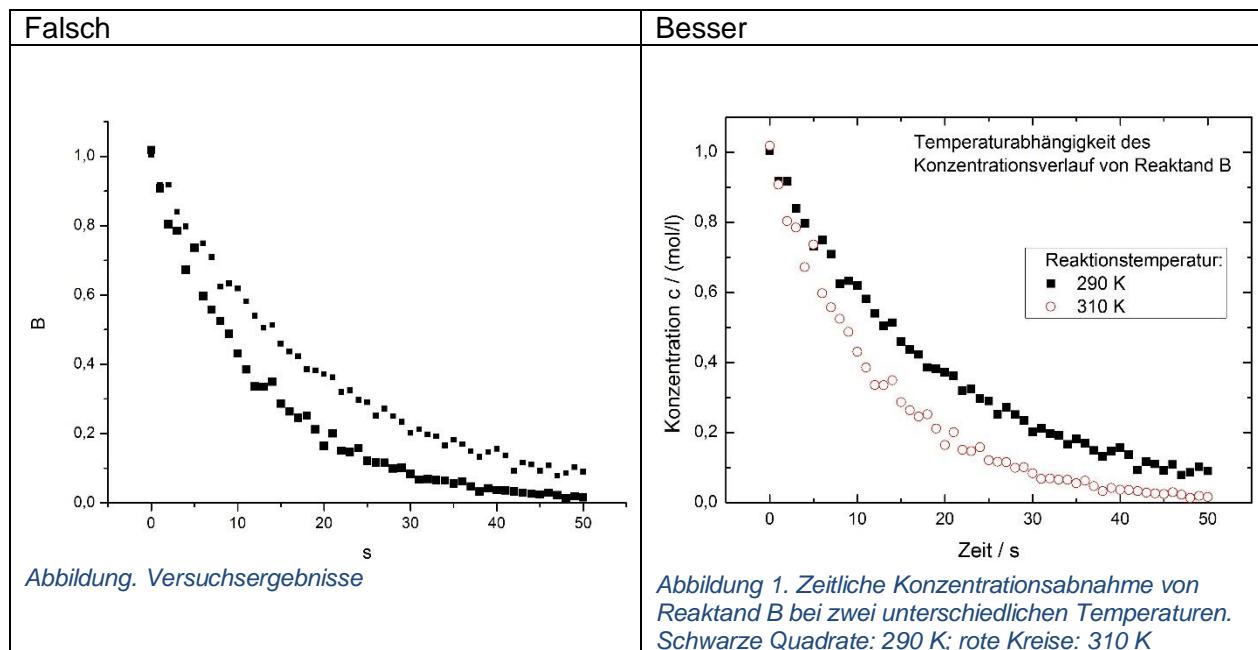
Resultate

- Der Abschnitt „Resultate“ besteht nicht nur aus einer Aneinanderreihung von Graphen und Tabellen, sondern sollte von kurzen erklärenden Texten begleitet werden.
- Auf jede Abbildung oder Tabelle sollte im Lauftext Bezug genommen werden, dabei muss ein Verweis mit der entsprechenden Nummer erfolgen.
- Bei allen Werten muss auf die signifikanten Stellen (siehe unten) geachtet werden.

Tabellen und Abbildungen

- Nummerieren Sie Ihre Tabellen und Abbildungen. Dazu gehört auch eine kurze Beschreibung, welche die Tabelle bzw. Abbildung erläutert. Diese sollten so knapp und präzise wie möglich ausfallen und den Inhalt der jeweiligen Abbildung genau beschreiben. Als Beispiel dafür dienen Beschriftungen in dieser Kurzanleitung.
- Im Allgemeinen haben Tabellen eine Überschrift und Abbildungen eine Unterschrift.
- Sofern Abbildungen aus einer Quelle entnommen wurden, wie z.B. der Anleitung, sind sie wie wörtliche Zitate zu behandeln (siehe Zitate)
- Beschriften Sie Ihre Graphen (z.B. welche Probe wurde hier vermessen?). Beschriften Sie die Achsen mit korrekter Messgröße bzw. Formelzeichen und Einheit. Bei mehreren Messreihen in einem Graphen ergänzen Sie bitte eine Legende wie im Beispiel in Tabelle 2 rechts zu sehen

Tabelle 2. Beispiel für eine unvollständige und damit falsche Abbildung einer Messreihe (links) und einem vollständig beschrifteten Graphen mit Achsenbezeichnung und Legende (rechts)



Gleichung und Variablen

- Bei mehr als 2 Gleichungen sollten diese nummeriert werden.
- Alle Naturkonstanten müssen definiert werden (z.B. die Avogadrokonstante $N_A = 6,022 \cdot 10^{23} \text{ mol}^{-1}$). Vergessen Sie nicht die Einheit hinter dem Zahlenwert einer dimensionsbehafteten Größe.
- Es ist allgemein üblich, Variablen kursiv (z.B. N_A), die Einheiten jedoch nicht kursiv darzustellen. Zahlen und Funktionen (\exp , \sin) sind ebenfalls nicht kursiv.
- Alle Variablen innerhalb der Gleichung müssen definiert sein, entweder im Lauftext oder als Aufzählung direkt nach der Gleichung.

Bsp.

$$pV = nRT \quad (1)$$

Entweder:

Aus der unabhängigen Bestimmung der Stoffmenge n , Temperatur T und Druck p kann mit Hilfe der allgemeinen Gaskonstante $R = 8,32 \text{ J}/(\text{mol} \cdot \text{K})$ das Gasvolumen V berechnet werden.

Oder:

$$\begin{aligned} p &= \text{Raumdruck} \\ V &= \text{Gasvolumen} \\ &\dots \end{aligned}$$

Zitate

- Alle Materialien, die für die Durchführung des Versuches und das Schreiben des Protokolls verwendet werden, müssen im Literaturverzeichnis am Ende des Protokolls angegeben werden.
- Abbildungen, Literaturwerte oder Annahmen aus einer Quelle müssen als solche direkt gekennzeichnet werden mit einem Verweis auf das Literaturverzeichnis.
- Quellen aus dem Internet müssen mit ihrem kompletten URL und dem Besuchsdatum und Zeit angegeben werden.

Bsp.

Der Vergleich mit dem Literaturwert der spezifischen Wärmekapazität c von $4183 \text{ J}/(\text{kg} \cdot \text{K})$ ($20 \text{ }^\circ\text{C}$, $0,1 \text{ MPa}$) [1] zeigt...

[1] https://www.chemie.de/lexikon/Wasser_%28Stoffdaten%29.html#Drucktabellen.html
(10.09.19 13:33 Uhr)

Fehlerbetrachtung

- Die Messunsicherheit (Messfehler) einer experimentell bestimmten Größe ist ein wichtiger Bestandteil des Messergebnisses, da diese das Vertrauensintervall angibt, in dem der eigentliche (unbekannte) Wert liegen kann.
- Bei der Diskussion von Fehlern (Fehlerquellen) im Experiment sind daher grundsätzlich zwei wichtige Arten von Fehlerquellen zu unterscheiden: statistische oder systematische Fehler.
- Bei der Diskussion der Fehler soll nicht versucht werden Messfehler möglichst klein zu halten, es soll vielmehr eine möglichst ehrliche Abschätzung der Fehler und deren Ursachen erfolgen.
- Grundsatz: Im Zweifelsfall soll ein Fehler lieber überschätzt als unterschätzt werden.

Systematische Fehler:

Diese Fehler fassen alle Unzulänglichkeiten eines experimentellen Aufbaus zusammen, welche reproduzierbar eine Abweichung des gemessenen Werts vom (unbekannten) wahren Wert einer Größe in nur eine Richtung ergeben. Das bedeutet, dass ein Wert immer als zu hoch oder immer als zu niedrig bestimmt wird. Ursachen sind zum Beispiel:

- falsch geeichte/kalibrierte Messinstrumente, Waagen, Kolben, Pipetten, ...
- Praktikanten und Praktikantinnen, die nicht pipettieren können, einen Meniskus falsch ablesen, ...
- ...

Solche Fehlerquellen führen auch bei einer wiederholten Messung zu identischen, aber falschen Ergebnissen. Das mehrmalige Wiederholen des Experiments führt somit nicht zu einer Verbesserung der Präzision. Solch ein Verhalten wird in Abbildung 2 (links) gezeigt.

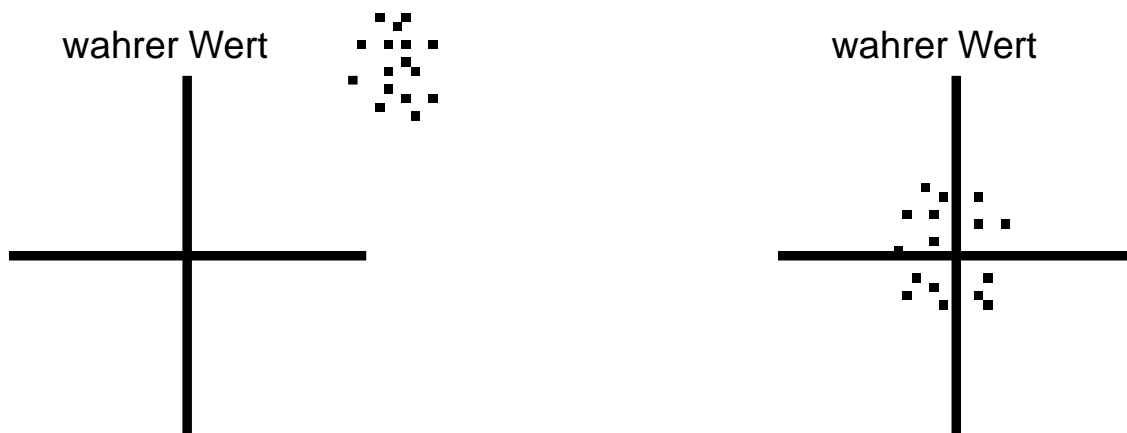


Abbildung 2: Schwankung von Messwerten: (links) die Messwerte weichen systematisch vom wahren Wert ab; (rechts) die Messwerte zeigen eine statistische Verteilung um den zu erwartenden wahren Messwert.

Statistische Fehler:

Bei mehrmaliger Wiederholung desselben Experiments können unterschiedliche Ergebnisse erhalten werden, wie in Abbildung 2 (rechts) gezeigt. Dies lässt sich zurückführen auf:

- die Schwankungen äußerer Bedingungen wie z.B. Temperatur, Luftdruck, Luftfeuchtigkeit ...
- die Experimentatoren: richtiges, aber ungenaues Ablesen von Skalen, Toleranzen beim Pipettieren, Ablesen/Einstellen eines Meniskus, ...
- die Ablesegenauigkeit von Messgeräten (Digitalisierung)
- ...

Um eine Abschätzung der Größe des statistischen Fehlers zu bekommen, werden in manchen Versuchen die Experimente mehrmals (N-mal) wiederholt. Dies führt zu einer Verbesserung der Messgenauigkeit.

Der Schätzer des Erwartungswerts $\langle x \rangle$ für das N-mal wiederholte Experiment mit den Einzelergebnissen x_i ergibt sich als arithmetischer Mittelwert \bar{x} :

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

Die (empirische) Standardabweichung σ wird bestimmt durch:

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

Der Fehler des geschätzten Erwartungswerts ergibt sich als:

$$\Delta x = \frac{\sigma}{\sqrt{N}}$$

Bsp:

Zu messen sei die Schwingungsdauer eines Pendels mit der Stoppuhr. Infolge der Reaktionszeit beim Starten und Stoppen der Uhr kommt es zu zufälligen (statistischen) Messabweichungen.

Tabelle 3: Messreihe mit 13 Einzelmessungen der Schwingungsdauer x_i .

Messung i	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13
x_i in s	2,6	2,3	2,5	2,3	2,6	2,4	2,2	2,3	2,4	2,5	2,6	2,8	2,7

Der Mittelwert \bar{x} ergibt sich zu:

$$\bar{x} = \frac{1}{13} \sum_{i=1}^{13} x_i = 2,476923$$

Die empirische Standardabweichung σ der Einzelmessung x_i ist:

$$\sigma = \sqrt{\frac{1}{12} \cdot \sum_{i=1}^{13} (2,476923 - x_i)^2} = 0,178670$$

und die Unsicherheit des Mittelwerts Δx :

$$\Delta x = \frac{0,178670}{\sqrt{13}} = 0,049554$$

Somit ergibt sich aus der Messreihe die Schwingungsdauer von $x = (2,476923 \pm 0,049554)$ s.

Dieses Ergebnis ist soweit korrekt berechnet, aber noch nicht korrekt unter Beachtung gültiger Stellen angegeben (siehe unten).

Darstellung der Ergebnisse

Nachdem eine experimentelle Größe x und der zugehörige Fehler Δx bestimmt wurden, müssen diese noch korrekt als Ergebnis mit der passenden Genauigkeit (gültigen Stelle) angegeben werden.

Das Ergebnis aus dem Beispiel oben wird folgendermaßen angegeben:

Schwingungsdauer $x = (2,48 \pm 0,05) \text{ s}$
--

Es gilt: Die Genauigkeit (gültige Stellen) des Fehlers Δx legt fest, mit welcher Genauigkeit das Ergebnis x angegeben werden darf.

Für die Angabe der Ergebnisse im Praktikum werden folgende Regeln angewandt.

<p>Regel 1: Messunsicherheiten werden auf eine signifikante Stelle aufgerundet.</p>
--

<p>Ausnahme: Ist die erste signifikante Stelle eine „1“, wird auf zwei signifikante Stellen aufgerundet.</p>

Bemerkung: als signifikante Stelle wird die hochwertigste Stelle einer Zahl bezeichnet, die ungleich Null ist (die erste signifikante Stelle ist in folgender Tabelle 4 unterstrichen).

Tabelle 4: Beispiele für die Bestimmung der gültigen Stellen. Linke Spalte: der berechnete Messfehler. Rechte Spalte: Korrekte Angabe des Messfehlers nach Regel 1 (siehe oben).

berechneter Messfehler	aufgerundeter Messfehler
0,00 <u>4</u> 428097	0,005
<u>3</u> ,2835366	4
<u>2</u> 32,456723	300 besser: $3 \cdot 10^2$
0, <u>1</u> 3890	0,14
0, <u>0</u> 987467	0,10
0,000 <u>1</u> 6831145	0,00017
<u>7</u> 3,2	80 besser: $8 \cdot 10^1$
0, <u>0</u> 45674 $\cdot 10^{-12}$	0,05 $\cdot 10^{-12}$
<u>1</u> 2,98	13

Regel 2: Ergebnisse werden auf dieselben signifikanten Stellen wie die zugehörige Messunsicherheit gerundet und angegeben.

Anwendungsbeispiele für Regel 2 werden in Tabelle 5 gezeigt.

Tabelle 5: Korrekte Angabe der Ergebnisse mit gültigen Stellen. Linke Spalte: Gerundete Messfehler aus Tabelle 2. Mittlere Spalte: Original Messwerte. Rechte Spalte: Korrekte Angabe der Ergebnisse mit gültigen Stellen.

gerundeter Messfehler	Messwert	Ergebnis
0,005	-10,0975	-10,098 ± 0,005
4	23,86	24 ± 4
300	1222,3	1200 ± 300 besser: (12 ± 3) · 10 ²
0,14	-0,5090	-0,51 ± 0,14
0,10	0,00167	0,00 ± 0,10
0,00017	0,031145	0,03115 ± 0,00017
80	98573,2	98570 ± 80 besser: (9857 ± 8) · 10 ¹
0,05 · 10 ⁻¹²	8,674 · 10 ⁻¹²	(8,67 ± 0,05) · 10 ⁻¹²
13	2,98	3 ± 13

Bei der Angabe der Ergebnisse dürfen auch die Dimensionen (Einheiten) nicht vergessen werden. Physikalische Größen besitzen neben ihrem numerischen Wert auch eine Dimension. Außer wenn es in der Anleitung anders verlangt wird, sollten im Protokoll die Ergebnisse immer in SI-Einheiten (französisch: *Système international d'unités*) angegeben werden.

Fehlerfortpflanzung

Oft wird in Experimenten aus mehreren unabhängig bestimmten Größen eine daraus abgeleitete Größe als Ergebniswert berechnet.

Als Beispiel diene das ideale Gas-Gesetz:

$$p \cdot V = n \cdot R \cdot T$$

Aus der unabhängigen Bestimmung der Stoffmenge n (z.B. durch Wiegen), Temperatur T (Thermometer) und Druck p (Barometer) kann das Gasvolumen V berechnet werden.

Als allgemeine Formulierung kann man für den Messwert y abhängig von N Variablen schreiben:

$$y = y(x_1, x_2, x_3, \dots, x_N)$$

Wird die Variablen x_i um h_i geändert, so wird der Messwert y (in 1. Näherung: Taylor-Reihe) zu:

$$y = y(x_1 + h_1, x_2 + h_2, x_3 + h_3, \dots, x_N + h_N) = y(x_1, x_2, x_3, \dots, x_N) + \sum_{i=1}^N \left(\frac{\partial y}{\partial x_i} \right) h_i$$

Werden die Werte h_i als Messfehler σ_i der Variablen x_i interpretiert und wird die Varianz σ_y von y berechnet, so ergibt sich daraus das „Allgemeine Fehlerfortpflanzungsgesetz“ (siehe Lehrbücher zur Statistik). Unter der Annahme, dass die Fehler von Einzelmessungen nicht korreliert sind, wird daraus das bekannte „Gauß'sche Fehlerfortpflanzungsgesetz“ erhalten:

$$\Delta y = \sigma_y = \sqrt{\sum_{i=1}^N \left(\frac{\partial y}{\partial x_i} \right)^2 \sigma_i^2}$$

Beispiel:

Ideales Gasgesetz. Experimentell bestimmt wurden die Stoffmenge n , die Temperatur T und der Druck p . Berechnet werden soll das Gasvolumen V nach der Formel:

$$V(n, T, p) = \frac{n \cdot R \cdot T}{p}$$

Der Fehler der Volumenbestimmung hängt dabei von den Messfehlern der drei Einzelmessungen Δn , ΔT und Δp ab.

Nach der Gauß'schen Fehlerfortpflanzung ergibt sich die Messunsicherheit für das Volumen zu:

$$\Delta V = \sqrt{\left(\frac{\partial V}{\partial n} \right)^2 \Delta n^2 + \left(\frac{\partial V}{\partial T} \right)^2 \Delta T^2 + \left(\frac{\partial V}{\partial p} \right)^2 \Delta p^2} = \sqrt{\left(\frac{R \cdot T}{p} \right)^2 \Delta n^2 + \left(\frac{n \cdot R}{p} \right)^2 \Delta T^2 + \left(\frac{-n \cdot R \cdot T}{p^2} \right)^2 \Delta p^2}$$

Graphische Auswertung

Aus der gemessenen Abhängigkeit einer Messgröße von einem experimentellen Parameter können oft charakteristische Koeffizienten für den beobachteten Prozess erhalten werden.

Beispiel: Bei einer Reaktionskinetik 1. Ordnung (exponentielles Zeitgesetz) kann die Reaktionsrate k bestimmt werden, indem die Konzentration des Edukts c in Abhängigkeit des Parameters Zeit t bestimmt wird. (Siehe Abbildung 3 links)

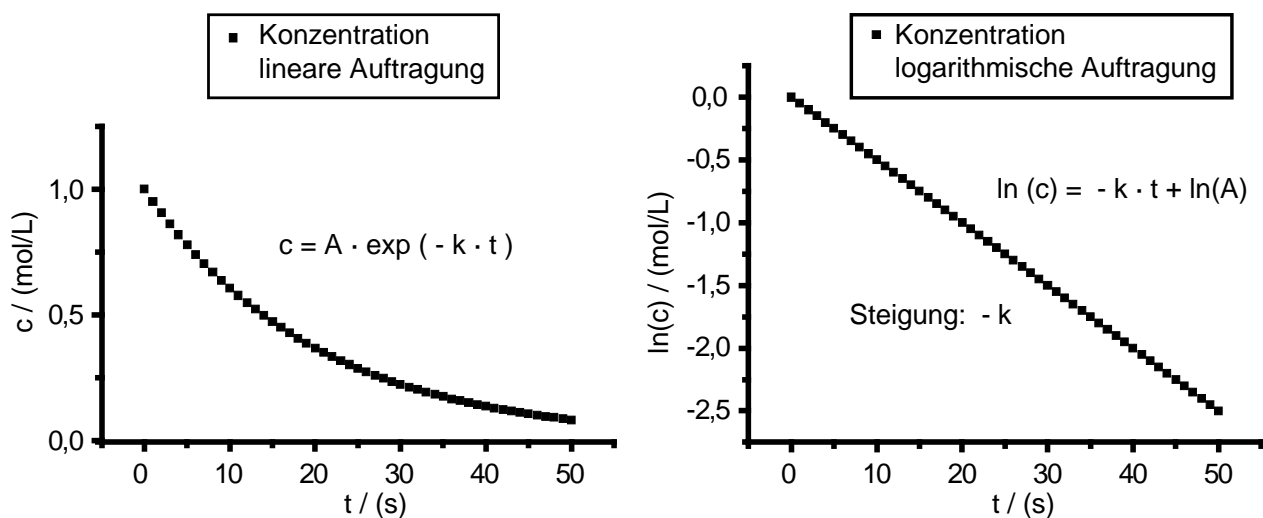


Abbildung 3: Graphische Darstellung des Reaktionsverlaufs bei einer Reaktionskinetik 1. Ordnung: (links) Auftragung der Konzentration c gegen die Zeit t ; (rechts) Auftragung des natürlichen Logarithmus der Konzentration $\ln(c)$ gegen die Zeit t .

In vielen Fällen ist es möglich die gemessenen Daten so aufzutragen, dass idealerweise ein lineares Verhalten erwartet wird. Wird z.B. den natürlichen Logarithmus der Messdaten aus dem oben genannten Beispiel als Funktion der Zeit aufgetragen, wird ein lineares Verhalten erwartet (vgl. Abbildung 3 rechts): die Steigung der resultierenden Gerade ist dann die gesuchte Reaktionsrate k .

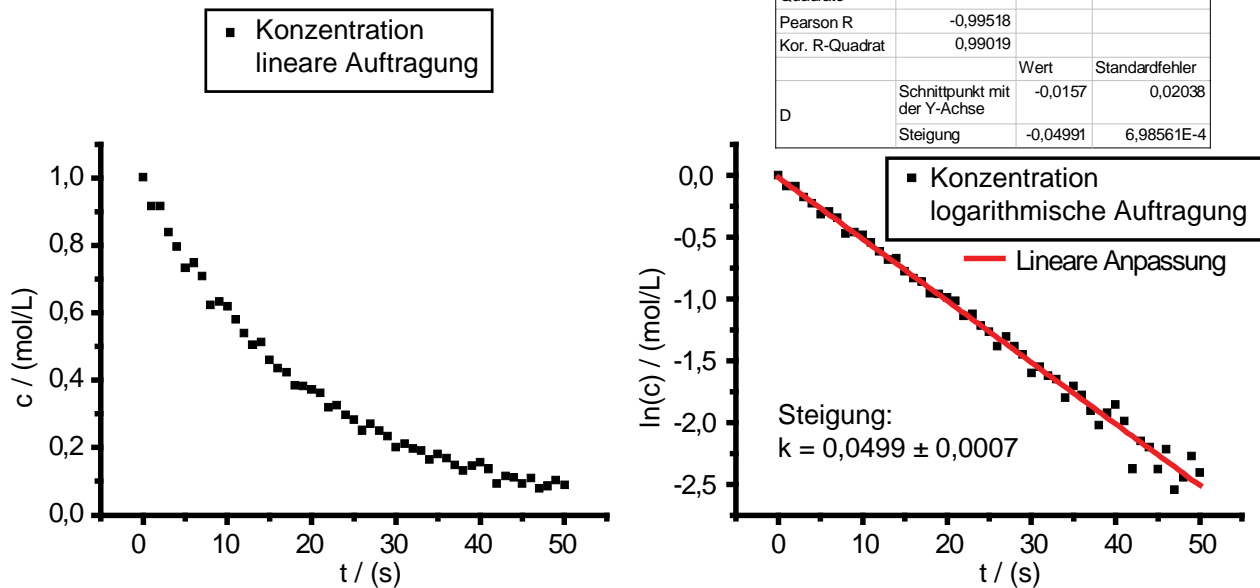


Abbildung 4: Graphische Darstellung experimenteller Daten für eine Reaktionskinetik 1. Ordnung: (links) Auftragung der Konzentration c gegen die Zeit t ; (rechts) Auftragung des natürlichen Logarithmus der Konzentration $\ln(c)$ gegen die Zeit t zusammen mit der Fitgerade (rot) zur Bestimmung der Reaktionsrate k .

Die Rate k und der zugehörige Fehler von k können nun beispielsweise über eine rechnergestützte Anpassung (linearer Fit) einer Geradengleichung an die Messdaten in Programmen wie z.B. Origin (Windows) oder gnuplot (Linux) bestimmt werden.

Lineare Regression

Die Bestimmung der optimalen Geradensteigung und des Achsenabschnitts einer Ausgleichsgerade kann mit Hilfe der linearen Regression erfolgen. Dazu wird als Kriterium die „least square“ Methode gewählt.

Die Messwertpaare $(x_i ; y_i)$ sollen einem linearen Zusammenhang $y = a + b \cdot x$ genügen. Hierbei sollen die Parameter a (Achsenabschnitt) und b (Geradensteigung) so gewählt werden, dass der mittlere quadratische Abstand der Messwerte von der Ausgleichsgerade (Summe der Fehlerquadrate: SFQ) minimiert wird.

Dies wird durch folgenden Zusammenhang ausgedrückt:

$$SFQ = \sum_{i=1}^N (y_i - (a + b \cdot x_i))^2 \rightarrow \min$$

Diese Minimumbedingung wird mathematisch dadurch realisiert, dass die ersten Ableitungen nach a bzw. nach b verschwinden müssen. Das heißt:

$$\begin{aligned} \frac{\partial SFQ}{\partial a} \left(\sum_{i=1}^N (y_i - (a + b \cdot x_i))^2 \right) &= - \sum_{i=1}^N 2 \cdot (y_i - (a + b \cdot x_i)) = \\ &= -2 \cdot \left(\left[\sum_{i=1}^N y_i \right] - [N \cdot a] - \left[b \cdot \sum_{i=1}^N x_i \right] \right) = 0 \end{aligned}$$

und

$$\begin{aligned} \frac{\partial SFQ}{\partial b} \left(\sum_{i=1}^N (y_i - (a + b \cdot x_i))^2 \right) &= - \sum_{i=1}^N 2 \cdot (y_i - (a + b \cdot x_i)) \cdot x_i = \\ &= -2 \cdot \left(\left[\sum_{i=1}^N x_i y_i \right] - \left[a \cdot \sum_{i=1}^N x_i \right] - \left[b \cdot \sum_{i=1}^N x_i^2 \right] \right) = 0 \end{aligned}$$

Das resultierende Gleichungssystem aus den beiden obigen Gleichungen lässt sich nun einfach nach den unbekanntem Regressionsparametern a und b auflösen. Es wird somit als Bestimmungsgleichungen für Achsenabschnitt a und Geradensteigung b erhalten:

$$b = \frac{\left[\frac{1}{N} \cdot \sum_{i=1}^N x_i y_i\right] - \left[\frac{1}{N} \cdot \sum_{i=1}^N x_i\right] \cdot \left[\frac{1}{N} \cdot \sum_{i=1}^N y_i\right]}{\left[\frac{1}{N} \cdot \sum_{i=1}^N x_i^2\right] - \left[\frac{1}{N} \cdot \sum_{i=1}^N x_i\right]^2} = \frac{\overline{xy} - \bar{x} \cdot \bar{y}}{\overline{x^2} - \bar{x}^2}$$

und

$$a = \left[\frac{1}{N} \cdot \sum_{i=1}^N y_i\right] - b \cdot \left[\frac{1}{N} \cdot \sum_{i=1}^N x_i\right] = \bar{y} - b \cdot \bar{x}$$

Der Fehler der beiden Regressionsparameter ist natürlich von der Messunsicherheit Δy der Einzelmessungen y_i abhängig. Aus der Anwendung der Gauß'schen Fehlerfortpflanzung (hier ohne Rechnung) wird die zugehörigen Fehler als:

$$\Delta b = \sqrt{\frac{\frac{1}{N} \cdot (\Delta y)^2}{\left[\frac{1}{N} \cdot \sum_{i=1}^N x_i^2\right] - \left[\frac{1}{N} \cdot \sum_{i=1}^N x_i\right]^2}} = \sqrt{\frac{\frac{1}{N} \cdot (\Delta y)^2}{\overline{x^2} - \bar{x}^2}}$$

und

$$\Delta a = \sqrt{\frac{\frac{1}{N} \cdot (\Delta y)^2 \cdot \left[\frac{1}{N} \cdot \sum_{i=1}^N x_i^2\right]}{\left[\frac{1}{N} \cdot \sum_{i=1}^N x_i^2\right] - \left[\frac{1}{N} \cdot \sum_{i=1}^N x_i\right]^2}} = \sqrt{\frac{\frac{1}{N} \cdot (\Delta y)^2 \cdot \overline{x^2}}{\overline{x^2} - \bar{x}^2}}$$

erhalten.

Unter der Voraussetzung dass alle Messwerte y_i gleiche Fehler $\Delta y_i = \Delta y$ haben kann die mittlere quadratische Abweichung der Einzelmesswerte y_i verwendet werden:

$$(\Delta y)^2 = \frac{1}{N-2} \sum_{i=1}^N (y_i - (bx_i + a))^2$$

Hier steht $N - 2$ im Nenner da die Zahl der unabhängigen Messwerte N minus 2 (abhängige Relationen über a und b) ist.

Zeichnerische Bestimmung einer Ausgleichsgerade

Alternativ kann auch eine einfache Fehlerabschätzung der Geradensteigung zeichnerisch per Hand durch sogenannte Min/Max-Geraden erfolgen: Die folgenden Arbeitsschritte werden nochmals in Abbildung 5 verdeutlicht)

- A) Die Messdaten $(x_i; y_i)$ werden (mit dem Messfehler) geeignet skaliert gezeichnet.
- B) Die gesuchte Ausgleichsgerade geht durch den Schwerpunkt $(x_s; y_s)$ der Daten (unter Annahme gleicher Messfehler für den gesamten Datensatz). Dabei gilt: $x_s = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N x_i$ und $y_s = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N y_i$. Die Ausgleichsgerade soll so abgeschätzt werden, dass sie im Mittel möglichst allen Punkten nahekommt und innerhalb der Messfehlerintervalle für alle Messwerte liegt.
- C) Zwei weitere Geraden gleicher Steigung werden parallel nach unten bzw. oben eingezeichnet, so dass sich mindestens 70% aller Messwerte im Bereich innerhalb dieser beiden Geraden befinden. Durch zwei dazu senkrechte Striche am Anfang und Ende des Messbereichs (also der entsprechende Messwert) wird das sogenannte „Streubereichrechteck“ fertiggestellt.
- D) Durch die Eckpunkte des Streubereichrechtecks werden Diagonalen gezogen. Dies sind die gesuchten Min/Max-Geraden. Deren Steigungen dienen zur Abschätzung des Messfehlers der Ausgleichsgeraden.

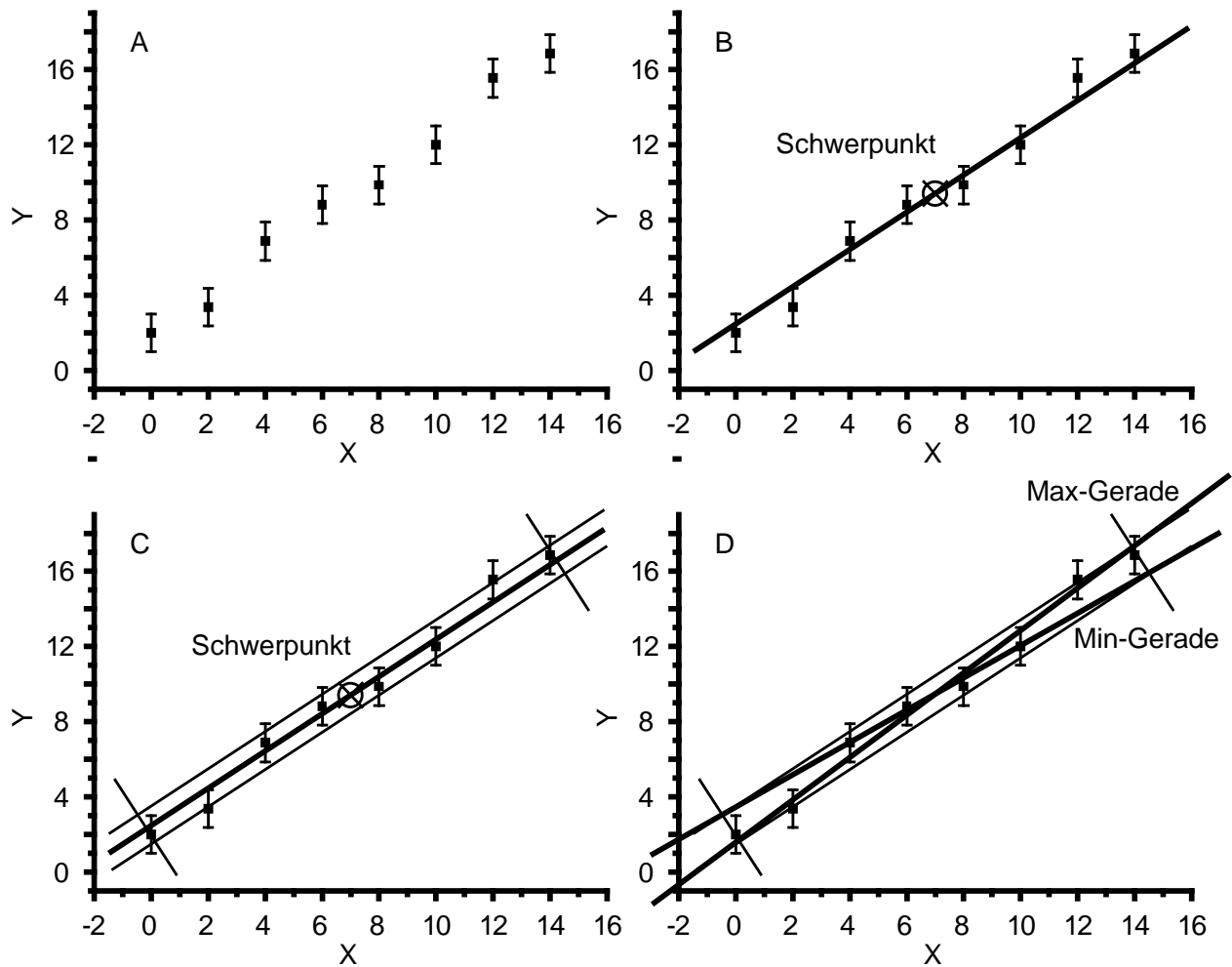


Abbildung 5: Zeichnerische Bestimmung einer Ausgleichsgerade. Die Arbeitsschritte A bis D sind im Text erklärt.

Bemerkung: Diese zeichnerische Methode der linearen Regression ist durch die rechnergestützte Datenerfassung und Auswertung heutzutage kaum mehr von Bedeutung und soll hier nur zur Vollständigkeit erwähnt werden. Wenn möglich (und in der Versuchsanleitung nicht anders verlangt) soll die Bestimmung einer Geradensteigung und deren Fehler mit einer geeigneten Software erfolgen.

Herzlichen Dank an Dr. Peter Blüm (Uni Karlsruhe) und Dr. Ina Sieckmann-Bock (Uni Freiburg), deren Skripte die Erstellung dieser Kurzanleitung stark vereinfacht haben.