

1. Einführung

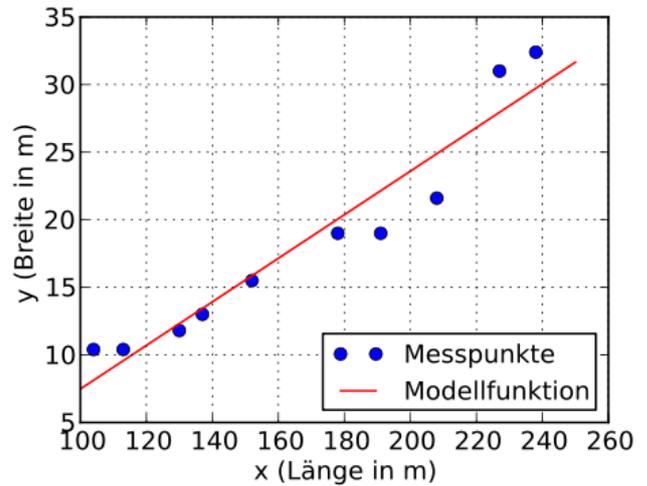
1.1 Füllen Sie im unten stehenden Abschnitt die Lücken, indem Sie die notwendigen Informationen aus Abb. 1 und 2 entnehmen.

Man erkennt anhand Abb. 1, dass ein Schiff mit einer Breite von 20 Metern ungefähr eine Länge von ..... Metern haben müsste. Aus Abb. 2 kann man herleiten, dass männliche Personen im Alter von 30 Jahren im Schnitt ca..... Kilo wiegen.

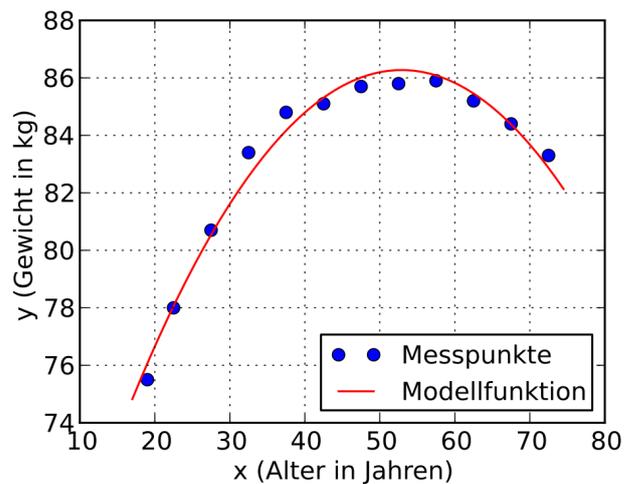
Statt wie Sie mithilfe eines Diagramms eine **graphische Bestimmung** mit dem Auge durchzuführen kommt man zu präziseren Ergebnissen, wenn man den Wert mittels der mathematischen Funktion berechnet. Ziel der **Regressionsanalyse** ist es, eine mathematische Modellfunktion  $f(x)$ , herauszufinden, die den Zusammenhang zwischen den beiden Größen beschreibt. Bei der Ermittlung der Modellfunktion wird diese so angepasst, dass die Abstände zu den Messpunkten insgesamt minimal wird. Streng mathematisch betrachtet, wird die Summe der quadratischen Abweichungen minimiert. Mithilfe der Modellfunktionen kann man dann innerhalb des modellierten Datenbereichs anhand der einen Größe, die andere berechnen.

Mithilfe diverser Computerprogramme oder Apps, beispielsweise dem Tabellenkalkulationsprogramm *Libre-Office CALC*, lässt sich die am besten passende Funktionsgleichung bestimmen. Man gibt dem Programm die allgemeine Form der Funktionsgleichung der Modellfunktion vor. In der Praxis ist das sehr häufig eine linearer Modellfunktion,  $f(x) = a \cdot x + b$ , man spricht dann von einer **linearen Regression**. Das Programm ermittelt dann die am besten passenden Parameter für die Steigung (a) und den y-Achsenabschnitt (b).

Bei einer **numerischen Bestimmung** gibt man dem Programm Startwerte für die Parameter der Modellfunktion  $f(x)$  vor. Das Programm verändert jetzt ausgehend von den Startwerten die Parameter in kleinen Schritten. Es berechnet dann das Ergebnisse von  $f(x)$  und vergleicht mit den tatsächlichen Messwerten. Je kleiner diese Unterschiede ausfallen, desto besser sind die gerade benutzten Parameter. Nach vielen Schritten hat es die optimalen Parameter gefunden. Eine **numerische Bestimmung** ermittelt durch schrittweise Variation und Ausprobieren die optimalen Parameter.



**Abb. 1:** xy-Diagramm (Streudiagramm) von Längen und Breiten von 10 zufällig ausgewählten Schiffen mit eingezeichneter linearer Modellfunktion. Quelle: wikipedia.de



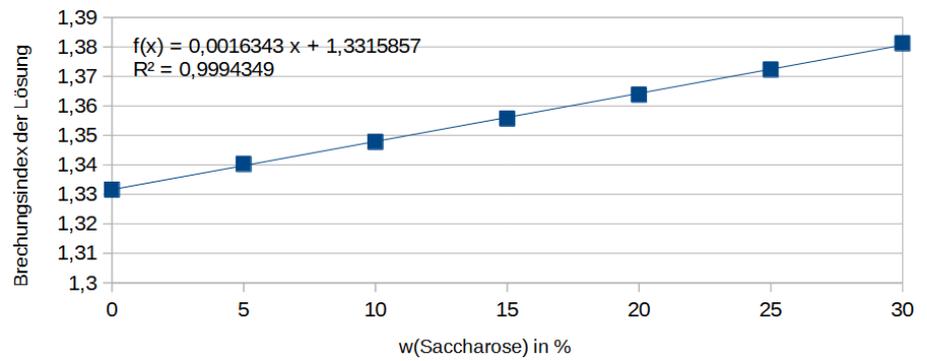
**Abb. 2:** xy-Diagramm: Durchschnittliches Gewicht von Männern nach Alter mit eingezeichneter parabelförmiger Modellfunktion Quelle: wikipedia.de

## 2. Lineare Regression/Kalibrierung

Die Anzeige der meisten Analyseinstrumente gibt meistens ein Signal aus, dass linear vom Gehalt abhängt.

1. Die Kalibrierung eines Refraktometers liefert beispielsweise folgende Ergebnisse:

w(Sac.) in %	Brechungsindex (Messwert)
0	1,3316
5	1,3403
10	1,3478
15	1,3557
20	1,3638
25	1,3723
30	1,3812



1. Berechnen Sie den Gehalt einer Probe (gerundet auf zwei Nachkommastellen), wenn der Brechungsindex 1,3511 beträgt.

Man erkennt am Diagramm, dass der Saccharosegehalt und der Brechungsindex *keine* Proportionalität zueinander aufweisen. Verdoppelt man beispielsweise den Saccharosegehalt von 5% auf 10%, so nimmt der Brechungsindex nicht auf das Doppelte zu, sondern nur von ca. 1,35 auf ca. 1,36. Weiterhin stellt man fest, dass reines Wasser, also 0% Saccharosegehalt, nicht das Messsignal 0 ergibt, sondern 1,3330 beträgt.

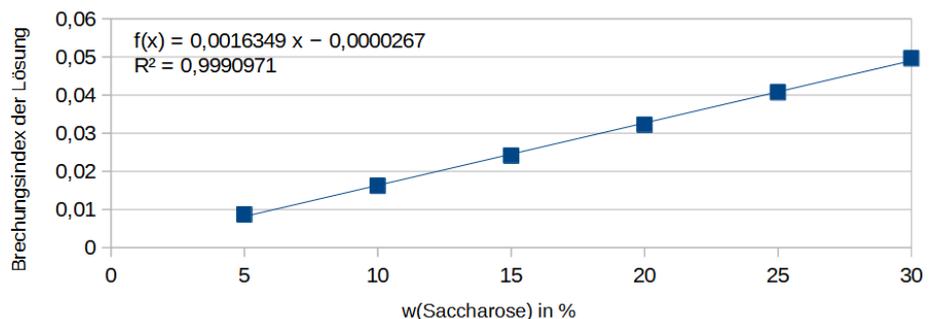
Zur einfacheren Interpretation zieht man es häufig vor, einen linearen Zusammenhang zu erhalten, bei dem ein Gehalt von Null, ein Messsignal von Null erzeugt. Dann sind Messsignal und Gehalt zueinander **proportional**: Liegt beispielsweise der doppelte Gehalt vor, so ist auch das Ergebnis ungefähr doppelt so hoch. Viertelt man den Gehalt, so liefert das Gerät ein Ergebnis, dass nur ca. ein Viertel des ursprünglichen Wertes beträgt. Dies führt auch zu einer Kalibriergerade, die keinen oder nur eine

kleinen y-Achsenabschnitt besitzt. Hierfür kann man so verfahren, dass man eine Lösung mit einem Gehalt von Null (**Blindprobe**) misst und das Messergebnis (**Leerwert, Blindwert, Reagenzienleerwert**) von den anderen Messwerten abzieht. Die meisten Messinstrumente lassen es zu, dass der Blindwert auf Tastendruck auf Null gestellt wird. So entfällt das manuelle Abziehen des Wertes von den anderen Messergebnissen.

Das **Einstellen des Reagenzienleerwertes auf Null** wird auch häufig „**Messen gegen die Referenz**“ oder „**Referenz auf Null stellen**“ o.ä. bezeichnet. Im Biolaborjargon spricht man auch von „**blanken**“, weil eine Blindprobe ohne Gehalt im Englischen *blank solution* heißt.

2. a) Geben Sie bei dem Beispiel von oben bleibend (Aufgabe 1), die Messwerte nach Einstellung des Leerwertes auf Null, in untenstehender Tabelle an.

w(Sac.) in %	Brechungsindex
5	
10	
15	
20	
25	
30	



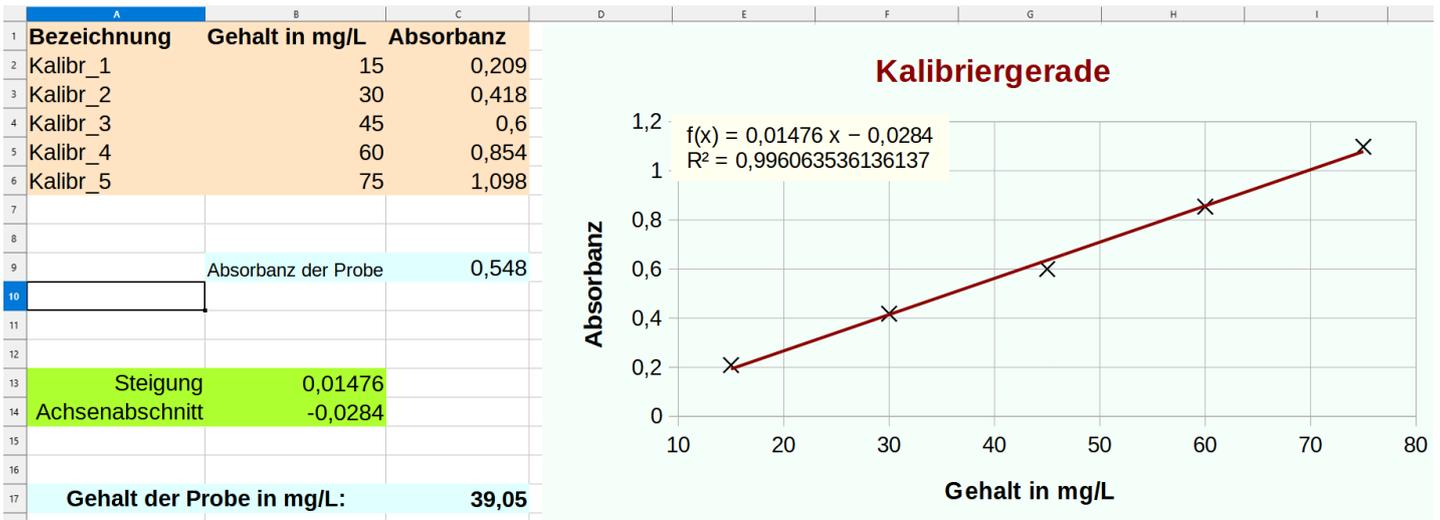
b) Die Probe zeigt jetzt ein Brechungsindex von 0,0195. Zeigen Sie, dass dasselbe Ergebnis wie oben resultiert (auf zwei Nachkommastellen genau)

**2.1 Regressionsgerade/Kalibriergerade erstellen mit LibreOffice Calc**

Lernvideo für diese Aufgabe hier: <https://youtu.be/YYPCKRYQf-w>



Beispiel einer Kalibrierung (incl. Regressionsgerade):



**2.2 Vorgehensweise zur Erstellung mit LibreOffice Calc**

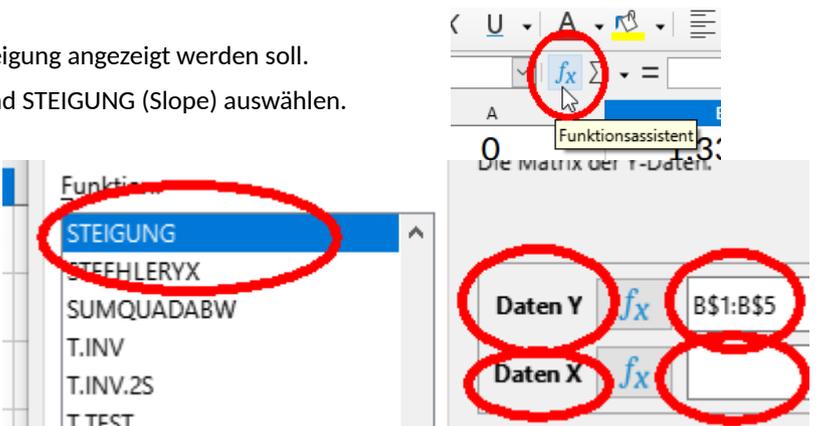
- Tabelle mit den Messpunkten. Spalte links: Gehalt (z.B. mg/L oder % o.ä.). Spalte rechts daneben: Messwert (z.B. Absorbanz, Dichte). Das Zahlenfeld mit der gedrückter Maus markieren. ⇒ Zahlenfelst ist jetzt blau unterlegt.
- Menü → Einfügen → Diagramm erstellen → Diagrammtyp: **XY-Streudiagramm** → Fertigstellen.
- Doppelklick auf Diagramm, so dass von kleinen **schwarze Miniquadraten** umrahmt:
- **Rechts**klick auf einen der Datenpunkte → **Trendlinie einfügen. Geradengleichung** und **Bestimmtheitsmaß (R<sup>2</sup>)** anzeigen lassen (anklicken). R<sup>2</sup> ist ein Maß, wie gut der lineare Zusammenhang ist. Idealwert bei absolut linearem Zusammenhang: 1,0000.
- Weitere nützliche Funktionen in **Libreoffice Calc** sind **STEIGUNG (SLOPE\*)** und **ACHSENABSCHNITT (INTERCEPT\*)**, mit denen man sich diese Werte der Geradengleichung in Zellen anzeigen lassen kann. So können Sie z.B. zum Weiterrechnen benutzt werden.

- Auf Zelle gehen, in der die Steigung angezeigt werden soll. **Funktionsassistent** starten und STEIGUNG (Slope) auswählen.

- Daten Y und Daten X durch Markieren der entsprechenden Zahlenspalte mit der Maus übernehmen lassen.

- Auf Zelle gehen, in der der y-Achsenabshcnitt angezeigt

werden sollen und mit der Funktion ACHSENABSCHNITT genauso verfahren.



**Aufgabe:**

- Erstellen Sie ein entsprechendes Kalibrierdiagramm mit Ihren Daten aus dem Praktikum (Alternative auf Lehreranweisung hin: Daten vom Beispiel oben nutzen).
- Berechnen Sie den Gehalt der Probe mit dem Taschenrechner und der Geradengleichung der Näherungsfunktion.

\* Je nach installierter Sprache werden die deutschen oder die in Klammern angegeben englischen Funktionsnamen angezeigt.

## 2.3 Regressionsgerade (Kalibriergerade) ermitteln mit Taschenrechner

Die meisten wissenschaftlichen Taschenrechner können die Geradengleichung einer Regressionsgeraden (Steigung + y-Achsenabschnitt) anhand von Wertepaaren ermitteln.

Ist Ihr Taschenrechner nicht dabei? Informieren Sie den Lehrer und suchen Sie selbst unter [youtube.de](https://www.youtube.de) mit Taschenrechner-Modell und „Regression“ als Stichworte.

Prüfen Sie für Ihr Taschenrechner-Modell die Anleitung anhand folgender Werte:

- **Beispiel für X/Y-Wertepaare:** 2,5/0,858      5,0/1,753      7,5/2,591      10,0/3,515      12,5/4,510
- **Ergebnisse:** Achsenabschnitt  $\approx -0,07440$     Steigung  $\approx 0,36264$ ,  $\Rightarrow y \approx 0,36264 \cdot x - 0,07440$      $R^2 \approx 0,999047$

### 2.3.1 Casio, z.B. fx-85, fx-991 etc.

- Mit **MODE** in den STAT-Modus wechseln. Anschließend A+BX auswählen (Geradengleichung)
- Wertepaare eingeben. Am Ende mit der **AC**-Taste („All Clear“) die Dateneingabe beenden.
- Mit **SHIFT** **1** in in das Statistik-Menü wechseln und Reg für Regressionsanalyse auswählen. Im Untermenü kann man sich A (Achsenabschnitt) und B (Steigung) anzeigen lassen. Quadriert man den Wert von r, erhält man das Bestimmtheitsmaß  $R^2$  anzeigen lassen.

### 2.3.2 Casio ClasWiz-Modelle

- Mit **MODE** oder **MENU** den STATISTIK-Modus aufrufen. Anschließend A+BX auswählen (Geradengleichung).
- Wertepaare eingeben. Am Ende mit der **AC**-Taste („All Clear“) die Dateneingabe beenden.
- Unter **Optn** „Regression“ auswählen. Werte werden angezeigt. Quadriert man den Wert von r, erhält man das Bestimmtheitsmaß  $R^2$ .

### 2.3.3: Casio-Modelle der Reihe MS:, z.B. fx-82MS, fx-991MS, fx-100MS, fx-350MS

- Speicher leeren/Reset (clear): „CLR“ durch **SHIFT** **MODE** auswählen. Danach mit **MODE** **REG** regression auswählen und im Untermenü dann **LIN** leare Regression.
- Wertepaare eingeben: Zuerst X-Wert tippen, unmittelbar danach als Trennsymbol das Hochkomma: **↵** (neben „M+“). Jetzt den dazugehörigen Y-Wert eintippen. Unmittelbar danach mit **M+** das Wertepaar in den Speicher (**M**emory) befördern. Evtl. wird danach die Anzahl der vorhandenen Wertepaare im Speicher angezeigt. Für alle Wertepaare wiederholen!
- Mit **SHIFT** **2** in das Statistik-Menü (S-VAR) wechseln. Dort A (Achsenabschnitt) und B (Steigung) auswählen und mit **=**-Taste anzeigen lassen. Mit **AC** Anzeige beenden und ggf. wieder ins S-VAR-Menü wechseln. Quadriert man den Wert von r, erhält man das Bestimmtheitsmaß  $R^2$ .

### 2.3.4 Texas Instruments, z.B. TI-30X Plus

- Mit **data** erst die Werteliste eingeben. Alle x-Werte in einer Spalte (z.B. in L1) eingeben, die dazugehörigen y-Werte in der Nachbarspalte (L2). Jede Eingabe mit **enter** quittieren. Werte löschen mit **delete** möglich.
- Mit **2nd** **data** ins Statistikmenu . **LinReg** aufrufen.
- Im sich öffnenden Menü überprüfen ob die betreffende Daten-Spalten auch vorausgewählt wurde
- FRQ-Zeile (Häufigkeit) so lassen wie sie ist. Auf **CALC** scrollen und **enter** drücken.

### 2.3.5 Sharp - EL-9950

- **STAT** drücken. Wertepaare in L1 und L2 eingeben. Dann mit „Quit“ beenden: **2ndF** + **CL**.
- **STAT** drücken und „**REG**“ auswählen (Regressionsanalyse). A+BX auswählen (Geradengleichung). **ENTER**

### 2.3.6 Sharp - EL-531

- Mit **MODE** den STATISTIK-Modus aufrufen (**1** drücken) . Dann „**LINE**“ auswählen (linear).
- Wertepaare eingeben: X-Wert des ersten Wertepaares eingeben und **STO** drücken (store). Jetzt dazugehörigen y-Wert eingeben und **M+** drücken. (Anzeige der erfassten Datenpunkte: „DATA SET = 1“). Alle weiteren Wertepaare genauso eingeben: Nach X-Wert **STO** drücken, nach dazugehörigem y-Wert **M+**.
- **ON/C** drücken („clear“). Achsenabschnitt a anzeigen: **RCL** **(**  
Steigung b anzeigen: **RCL** **)**
- r anzeigen: **ALPHA** **÷** **=** . Für das Bestimmtheitsmaß ( $r^2$ ) muss dieser Wert noch quadriert werden.
- Mit **MODE** wieder in den normalen Modus zurückkehren.