Wilfried Rohm

Newtonscher Abkühlungsvorgang - Versuchsauswertung

- Mathematische / Fachliche Inhalte in Stichworten:

  Ausgleichsfunktionen, Auswertung von Experimenten

- Kurzzusammenfassung

  Dieser Artikel ist didaktisch orientiert und behandelt die Einführung des Begriffs "Ausgleichsfunktion" am Beispiel einer Versuchsauswertung eines physikalischen Experimentes in einem II.Jahrgang an einer HTL.
  Ausgehend von den realen Daten eines Experimentes werden verschiedene (teils von den Schülern vorgeschlagene) Wege eingeschlagen, um eine zu den Daten möglichst gut passende "Ausgleichsfunktion" zu finden.
  Schließlich erfolgt die Gegenüberstellung zum Prinzip der kleinsten Quadrate (nach C.F.Gauß) und eine entsprechende Diskussion der Ergebnisse.

- Didaktische Überlegungen / Zeitaufwand: [***optional***]

  Die hier skizzierte Vorgangsweise wurde von mir etwa in dieser Form in einem Zeitraum von 3 Unterrichtseinheiten druchgeführt. Die Daten wurden von einem Schüler zu Hause ermittelt . Die Auswertung erfolgte im Unterricht allerdings mit einem Taschenrechner (TI-Voyage), erst später mit Mathcad.

- Lehrplanbezug (bzw. Gegenstand / Abteilung / Jahrgang):

  Angewandte Mathematik, 2.-4.Jahrgang, alle Abteilungen

- Mathcad-Version:

  erstellt mit Mathcad 11

Einleitung

Exponentialfunktionen treten in der Praxis u.a. bei der Beschreibung physikalischer Prozesse auf. Typische Beispiele sind:

- Radiaktiver Zerfall
- Lade- und Entladevorgänge bei Kondensator und Spule
- Wachstums- und Zerfallsprozesse
- Seilreibungsgleichung, Kettenlinie
- Abkühlung einer Flüssigkeit (Newton)
- Abnahme des Bierschaumes nach dem Einschenken
- .....

Es ist nun reizvoll, zumindest an einem Beispiel zu testen, inwieweit die "Theorie" mit der Wirklichkeit übereinstimmt, bzw. festzustellen, wie sehr das Modell und die Realität auseinanderklaffen. Dies ist von prinzipiellem Interesse ("Modellvorstellungen") und hängt -auch das ist interessant festzustellen - von der Art und Weise wesentlich ab, mit der das Experiment durchgeführt wird.
Meine Schüler wurden mit der Fragestellung "**Abkühlung von Wasser nach Erwärmung**" konfrontiert. Zu diesem Zeitpunkt konnten sie bereits mit Exponentialfunktionen und Logarithmus umgehen, hatten aber noch nie eine Ausgleichs- bzw. Regressionsfunktion ermittelt. Das Beispiel dient daher gewissermassen auch als Einstieg in das Thema, das Datenmaterial kann (und wurde) auch noch später nach dem Prinzip der kleinsten Quadrate ausgewertet.

1) Die Werte

Das Datenmaterial wurde von einem Schüler geliefert, der das Experiment zu Hause durchführte. Bezüglich der Versuchsdurchführung gab es keine speziellen Vorschriften von meiner Seite. Der Schüler "sollte" sich allerdings Gedanken bezüglich einer optimalen Versuchsdurchführung machen.
Das Thermometer wurde aus dem Physik-Kabinett ausgeborgt.
[**Zeiten in Minuten; Temperaturen in Grad Celsius]**

$$\text{werte} := \begin{pmatrix} 0 & 82.5 \\ 10 & 64.8 \\ 20 & 53.2 \\ 30 & 48.1 \\ 40 & 43.7 \\ 50 & 40.2 \\ 60 & 37.2 \\ 70 & 35 \\ 80 & 33 \\ 90 & 31.2 \\ 100 & 29.5 \\ 110 & 28.2 \\ 120 & 27.4 \\ 130 & 26.6 \\ 140 & 25.4 \\ 150 & 24.9 \\ 160 & 24.1 \\ 170 & 23.5 \\ 180 & 23 \end{pmatrix}$$

werte =

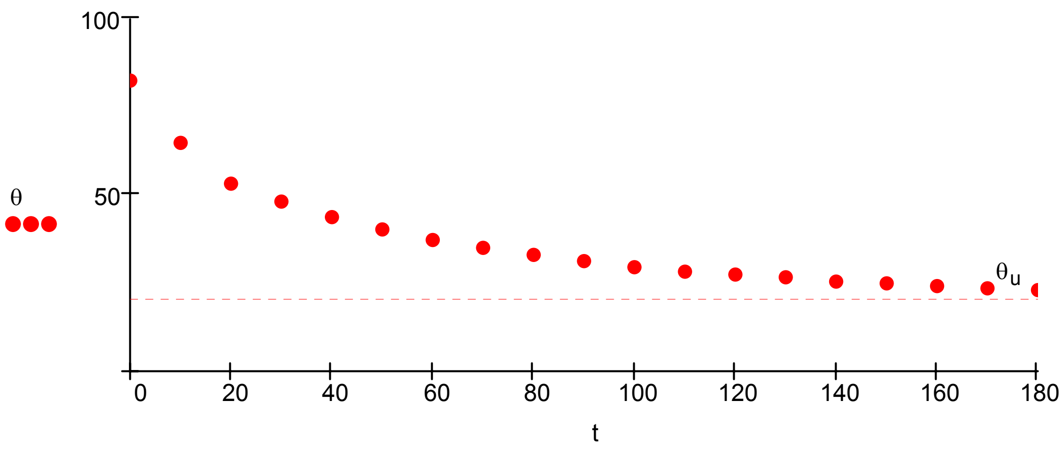
	0	1
0	0	82.5
1	10	64.8
2	20	53.2
3	30	48.1
4	40	43.7
5	50	40.2
6	60	37.2
7	70	35
8	80	33
9	90	31.2
10	100	29.5
11	110	28.2
12	120	27.4

$t := \text{werte}^{\langle 0 \rangle}$ Extrahierung der Zeitwerte aus der Eingabematrix

$\theta := \text{werte}^{\langle 1 \rangle}$ Extrahierung der Temperaturwerte aus der Eingabematrix

$\theta_u := 21$ Umgebungstemperatur in Grad

Zeichnerische Darstellung der Daten - Einzeichnen der Umgebungstempaeratur



Die Daten legen die Vermutung nahe, dass es sich um eine Exponentialfunktion handeln könnte.
Es wird daher als nächstes die Frage gestellt, wie man diese Vermutung untermauern könnte.

2) Folgen die Werte (annähernd) einer Exponentialfunktion?

Die "wesentliche Eigenschaft" einer Exponentialfunktion ist, dass in gleichen Zeitraumen Δt diese Funktion immer mit dem gleichen Prozentsatz zu- oder abnimmt.
Daher wird hier dieser Prozentsatz in den einzelnen Zeiträumen ermittelt - diese sollten dann (im Rahmen der Messgenauigkeit bzw. methodischen Ungenauigkeiten) einigermassen übereinstimmen.
Allerdings muss eine "neue" Nulllinie eingezogen werden (eben θ_u), auf die sich die Temperaturdifferenzen beziehen müssen.

$N := \text{länge}(t)$ $\qquad$ $N = 19$

$i := 0 .. N - 2$

$$vgl_i := \frac{\theta_{i+1} - \theta_u}{\theta_i - \theta_u}$$

vgl =

	0
0	0.712
1	0.735
2	0.842
3	0.838
4	0.846
5	0.844
6	0.864
7	0.857
8	0.85

Der Prozentsatz schwankt um den Wert 0,8 - d.h. innerhalb eines Zeitraumes von 10 Minuten sinkt die Temperaturdifferenz um ca. 80% des vorherigen Wertes [Bezogen auf die Differenz zur Umgebungstemperatur!] ab. Wenn man die Schwankungen des Prozentsatzes als Messungenauigkeiten bzw. als methodenbedingt interpretiert, so kann man tatsächlich von einem exponentiellen Abnahmevorgang sprechen!

Hinweis: Man könnte diskutieren [auch mit dem Physiklehrer!] warum die Temperatur im Verhältnis zunächst rascher sinkt. Meiner Meinung nach liegt das daran, dass der Topf auf einer Unterlage steht, an die zuerst viel Wärme abegegben wird, nachher weniger. Um besser an die Exponentialfunktion angepasste Werte zu erhalten, müsste man den Topf / das Glas im Raum "aufhängen", was natürlich in einem einfachen Versuch zu Hause Probleme bereitet.

Wie kann der passende Prozentsatz gefunden werden?

Auf Schülervorschlag wurde nun der Mittelwert obiger Werte als "prozentsatz" ermittelt und damit versucht, eine "Ausgleichsfunktion" zu finden. Wie die Skizze unten zeigt, ist der Prozentsatz rein optisch zu hoch, weil alle Werte gleich stark einfliessen und anfangs die Werte (wie oben beobachtet) alle wesentlich niedriger sind.
Durch Probieren wurde ein Prozentsatz2 gefunden , der optisch besser passt.

$\text{prozentsatz} := \text{mittelwert}(vgl)$

$\text{prozentsatz} = 0.828$

$\text{prozentsatz2} := 0.80$

3) Aufstellen einer Exponentialgleichung mit einem passenden Prozentsatz:

Das Aufstllen dieser Exponentialgleichung macht natürlich gewisse Schwierigkeiten und sollte an ähnlichen Fällen bereits geübt worden sein.

Überlegung: *In jeweils 10 Minuten sinkt die Differenz* $\theta_0 - \theta_u$ *um den "gemittelten" Prozentsatz. Zur Gesamttemperatur muss noch die umgebungstemperatur dazugezählt werden.*

Man erhält daher, je nachdem welchen Prozentsatz man verwendet (ausprobieren!) die folgende Exponentialgleichung, die anschließend gezeichnet und mit den Messpunkten verglichen wurden:

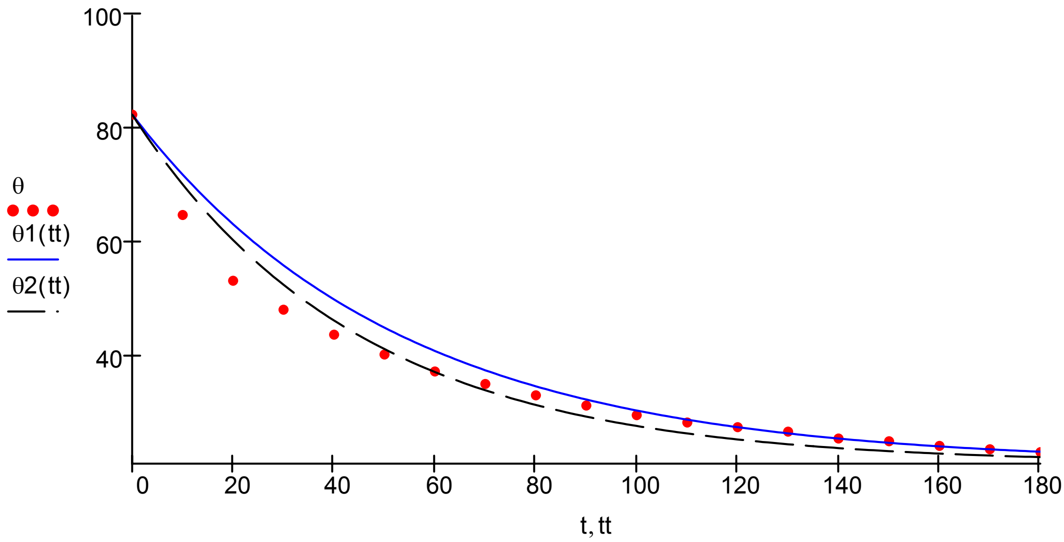
$$\theta 1(t) := \theta_u + (\theta_0 - \theta_u)\text{prozentsatz}^{\frac{t}{10}}$$

$$\theta 2(t) := \theta_u + (\theta_0 - \theta_u)\text{prozentsatz2}^{\frac{t}{10}}$$

$i\_last := \text{letzte}(t)$ $t\_last := t_{i\_last}$ $t\_last = 180$

Hier wird allgemein die Zeitachse definiert

$tt := 0 .. t_{i\_last}$



Die Diskussion des Ergebnisses betätigt die bereits oben angeführten Beobachtungen bzw. Überlegungen.

Das Ergebnis wird nun noch auf eine Funktion mit Basis e umgerechnet:

$$\text{prozentsatz}^{\frac{t}{10}} = e^{-\lambda \cdot t} \qquad \text{prozentsatz2}^{\frac{t}{10}} = e^{-\lambda \cdot t}$$

$$\lambda_p := -\frac{1}{10} \cdot \ln(\text{prozentsatz}) \qquad \lambda_{p2} := -\frac{1}{10} \cdot \ln(\text{prozentsatz2})$$

$\lambda_p = 0.019$ $\lambda_{p2} = 0.022$

Obige Funktionen lauten nun in dieser Darstellungsform:

$$\theta 1(t) := \theta_u + (\theta_0 - \theta_u)e^{-\lambda_p \cdot t}$$

$$\theta 2(t) := \theta_u + (\theta_0 - \theta_u)e^{-\lambda_{p2} \cdot t}$$

3) Anwendung der Gauss´schen Prinzipes der kleinsten Quadrate

Je nach der zur Verfügung stehenden Software (Taschenrechner, Mathematikprogramm, EXCEL,...) kann nun versucht werden (gewissermaßen als "Vorgriff" für später, wenn Ausgleichsfunktionen genauer behandelt werden), mit Hilfe des Rechners die "optimale Funktion" zu finden.
Normaler Weise wird dazu das Gauss-Prinzip der "kleinsten Quadrate" verwendet. Mit Mathcad kann dies ohne Rechenaufwand mit Hilfe des minfehl-Befehls umgesetzt werden. Erforderlich ist nur die entsprechende Ansatzfunktion, die minimal werden soll.

Als Ausgleichsfunktion wird nun gleich eine Funktion zur Basis e eingeführt:

$$\theta(t,\lambda,\theta_{anf}) = \theta_u + (\theta_{anf} - \theta_u)\cdot e^{-\lambda\cdot t_i}$$

Gesucht sind die Paramter
θ_{anf} ... Anfangstemperatur
λ .... Konstante, welche die Temperaturabnahmegeschwindigkeit beschreibt ("*Abkühlkonstante*")

Die Abkühlkonstante λ und die Anfangstemaperatur werden als Variablen betrachtet, die Umgebungstemperatur gilt als gegeben!

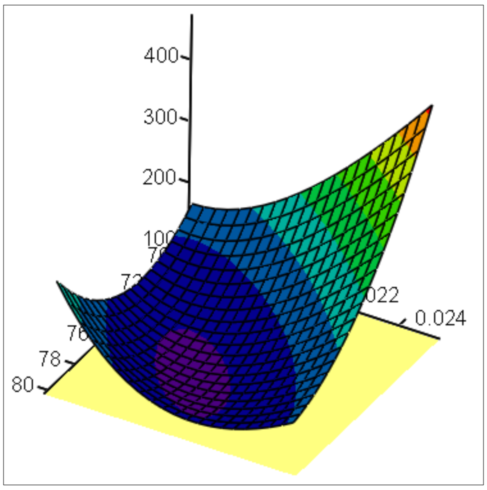
$$sumq(\theta_{anf},\lambda) := \sum_{i=0}^{N-1}\left[\theta_i - \left[\theta_u + (\theta_{anf}-\theta_u)\cdot e^{-\lambda\cdot t_i}\right]\right]^2$$

Beispiel :

$sumq(75, 0.016) = 278.034$

$sumq(80, 0.02) = 137.986$

Diese Summe der quadratischen Abweichungen der Temperaturwerte zwischen den durch das Experiment gegebenen Punkten und der von den beiden Parametern abhängigen Funktion soll ein MINIMUM werden



Nebenstehende Darstellung der Funktion im Raum ist schon so skaliert, dass die Lösung optisch gut zu sehen ist!

sumq

$\theta_{anf} := 80$ $\lambda := 0.01$

Numerischer Lösungblock

Vorgabe

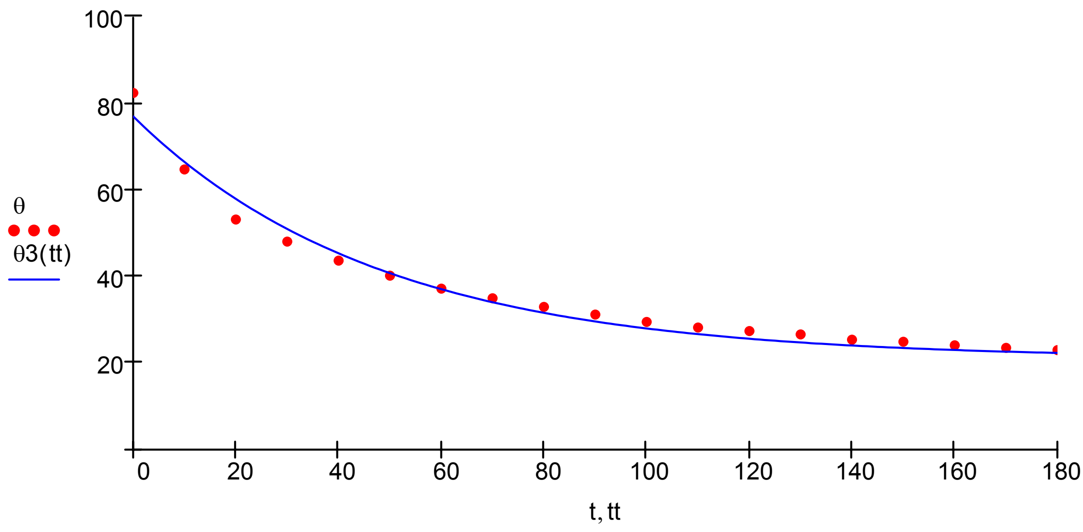
$sumq(\theta_{anf},\lambda) = 0$

$$\begin{pmatrix}\theta_{anf}\\ \lambda\end{pmatrix} := Minfehl(\theta_{anf},\lambda)$$

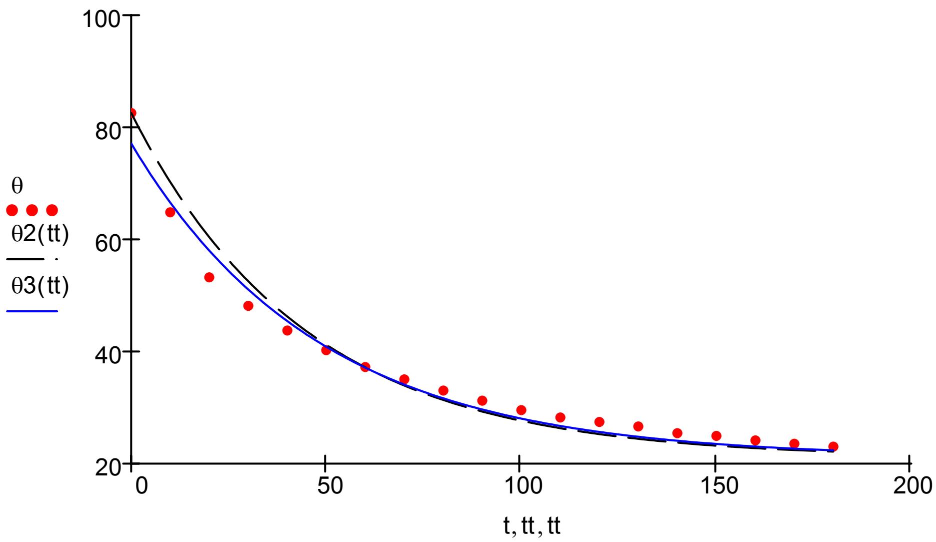
$$\begin{pmatrix}\theta_{anf}\\ \lambda\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}77.052\\ 0.021\end{pmatrix}$$

$\theta3(t) := \theta_u + (\theta_{anf} - \theta_u) \cdot e^{-\lambda \cdot t}$

Das ist die Ausgleichsfunktion nach dem Prinzip der kleinsten Quadrate



Interessant ist nun der Vergleich dieser Funktion mit unserer oben unter Punkt 2 mit Hilfe des gemittelten Prozentsatzes ermittelten Funktion (wir nehmen nur die besser passende Funktion mit prozentsatz2)



Ein optischer Unterschied ist insbesondere im Anfangsteil der Kurven zu beobachten - die Begründung sollte klar sein:

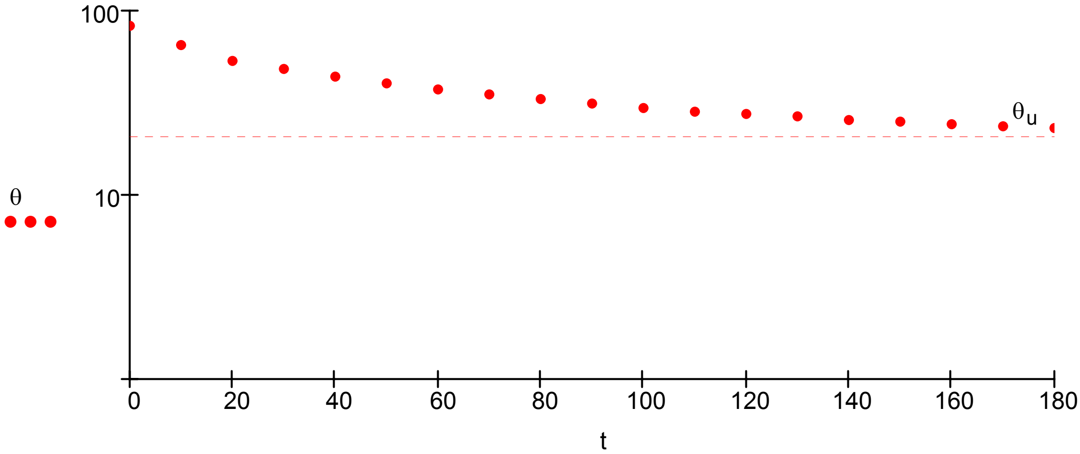
Unsere in Punkt 1) ermittelte "Ausgleichsfunktion" geht FIX durch den ersten Punkt hindurch, während bei der nach dem Gauss-Prinzip ermittelten Ausgleichsfunktion alle Punkte (also auch der 1.Punkt) quasi "gleichberechtigt" in die Rechnung eingehen. Daher haben wir in diesem Fall auch 2 Parameter zu bestimmen, während im 1.Fall nur die Abkühlkonstante λ ermittelt wurde (der 2.Parameter war fix vorgegeben).

Da schon beim 1.Punkt Messungenauigkeiten etc. eine Rolle spielen, ist daher die 1.Variante nicht jene, die sich "durchgesetzt" hat - sondern man geht besser im Allgemeinen nach dem Prinzip der kleinsten Quadrate vor!

4) Linearisierung mit Hilfe des Logarithmus

Die einfachste (und häufigste) Ausgleichsfunktion ist eine Gerade.
Daher (und das war auch eine der ersten Schülerideen, da die logarithmische Skalierung schon bekannt war) hätten wir auch durch Darstellung in einer ordinatenlogarithmischen Skalierung feststellen können, ob die Punkte einigermaßen auf einer Geraden liegen, was den Rückschluß auf eine Beschreibung des Abkühlvorganges mitttels Exponentialfunktion erlauben würde.

Daher hier eine Darstellung der Punkte mit einer logarithmischen Skalierung der Temperaturachse:



Das obige Bild ist nicht "sehr überzeugend", es entsteht bloß der Eindruck einer flacheren Exponentialfunktion.
Der Grund liegt darin, dass sich die Ausgangsfunktion nicht durch Logarithmieren in eine Gerade bringen läßt:

$\theta(t) = \theta_u + \left(\theta_{anf} - \theta_u\right) \cdot e^{-\lambda \cdot t_i}$ Logarithmieren: $\log\left[(\theta(t)) = \log\left[\theta_u + \left(\theta_{anf} - \theta_u\right) \cdot e^{-\lambda \cdot t_i}\right]\right.$

Vor dem Logarithmieren muss zuerst die Gleichung umgeformt werden:

$\theta(t) - \theta_u = \left(\theta_{anf} - \theta_u\right) \cdot e^{-\lambda \cdot t_i}$ abstrakter geschrieben als: $d(t) = C \cdot e^{-\lambda \cdot t}$

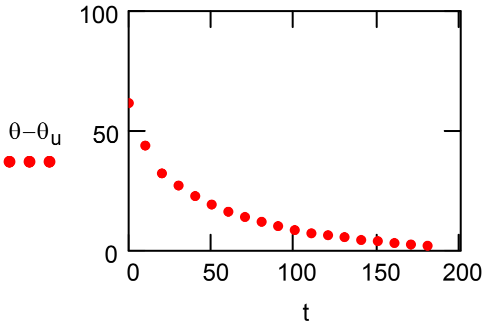
Logarithmieren : $\log(d(t)) = \log(C) - \lambda \cdot \log(e) \cdot t$

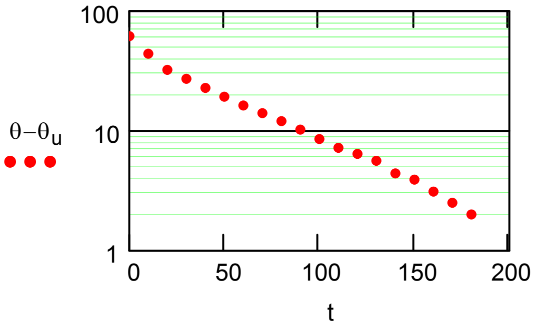
als Geradengleichung $y_{log} = d + k \cdot t$

mit : $C = 10^d$ bzw . $\theta_0 = 10^d + \theta_u$

und $k = -\lambda \cdot \log(e)$ bzw . $\lambda 2 = \dfrac{-k}{\log(e)}$

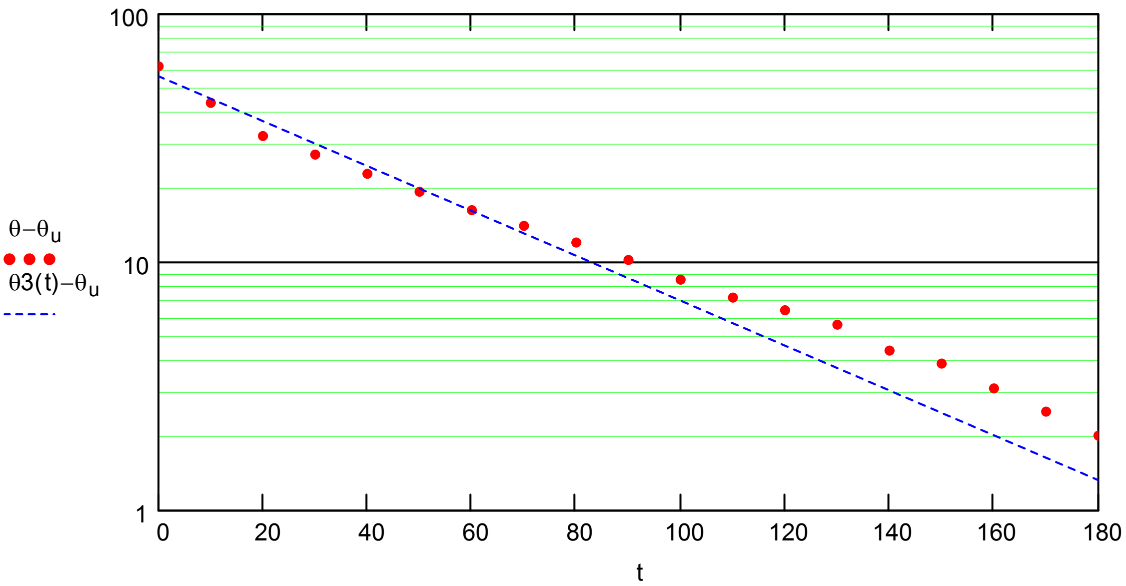
Wir versuchen daher, nun die Punkte in einem geeigneten Diagramm dazustellen, zum Vergleich links OHNE , rechts mit logarithmischer Skalierung der Temperaturachse:





Die leicht geschwungene Linie im rechten Diagramm ist nun tatsächlich "nahe" einer Geraden - daher erscheint die Annahme der Exponentialfunktion sinnvoll.

Zeichnet man nun die oben (unter Punkt 3) ermittelte Ausgleichsfunktion in das rechte Diagramm ein, stellt man überraschend fest, dass diese Funktion rein optisch nicht gut zu den Daten passt, weil offensichtlich die Punkte durch die als Gerade gezeichnete Exponentialfunktion meist unterschritten wird. Dies ist umso überraschender, weil oben unter Punkt 3) die Exponentialfunktion auich optisch gut passt.



Der Grund für dieses "Phänomen" ist, dass es etwas anderes ist, ob man die Funktionswerte oder eben die logarithmierten Funktionswrete dem Prinzip der kleinsten Quadrate "unterwirft". Schließlich ist der Logarithmus selbst ja nicht linear!

In der Folge wird nun durch die **logarithmierten Werte** die Regressionsgerade als Ausgleichsfunktion gezogen (mit Hilfe der in Mathcad vordefinierten Funktionen).
Anschließend muss auf die Parameter der e-Funktion umgerechnet werden (gemäß den oben hergeleiteten Formeln) und die beiden "Ausgleichsfunktionen" werden sowohl bei der loagarithmischen Skalierung als auch bei linearere Skalierung untereinander verglichen.

$y_{log} := \log(\theta - \theta_u)$

$y_{log} =$

	0
0	1.789
1	1.641
2	1.508
3	1.433
4	1.356
5	1.283
6	1.21
7	1.146
8	1.079
9	1.009
10	0.929

$k := \text{neigung}(t, y_{log})$ Ermittlung der "Ausgleichsgeraden"

$d := \text{achsenabschn}(t, y_{log})$

$d = 1.693$ $k = -7.57 \times 10^{-3}$

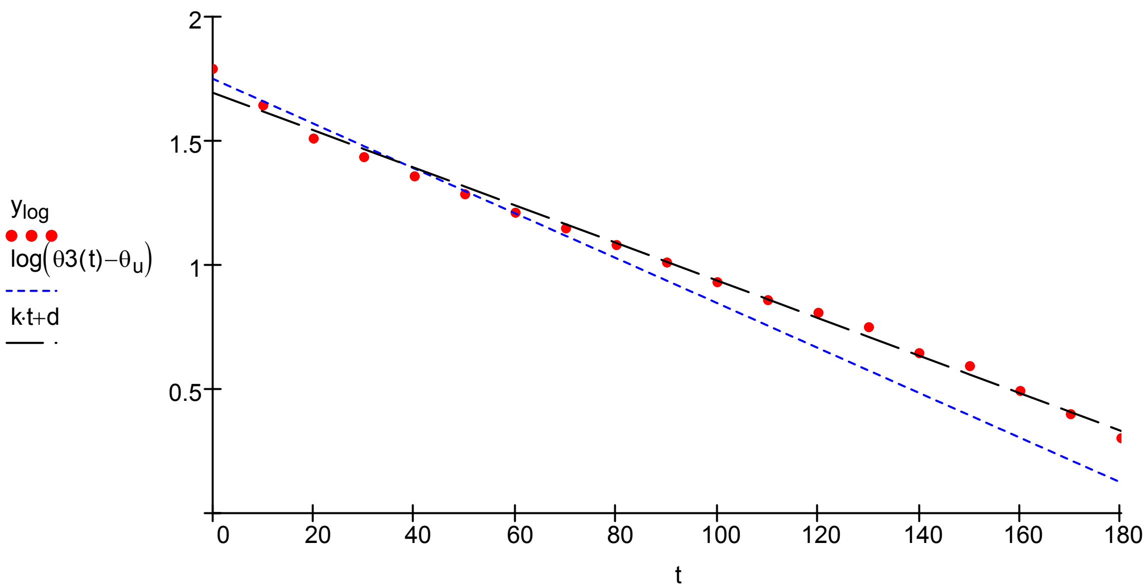
$\theta_0 := 10^d + \theta_u$ $\lambda_2 := \dfrac{k}{\log(e)}$

$\theta_0 = 70.298$ $\lambda_2 = -0.017$

Der Vergleich mit den unter Punkt 3) erzielten Werte zeigt deutliche Unterschiede!

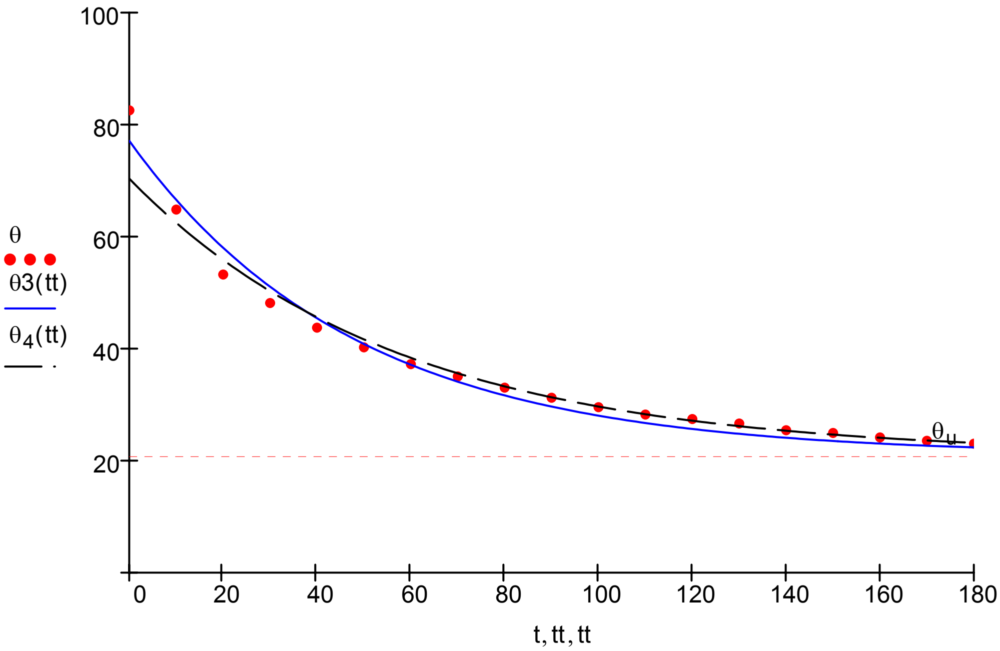
$\theta_{anf} = 77.052$ $\lambda = 0.021$

Die graphische Darstellung im ordiantenlogarithmischen Diagramm zeigt, wieviel besser die Ausgleichsgerade der logarithmierten Werte (schwarze Linie) nun "passt":



Zum Darstellen im linear geteilten Diagramm definieren wir uns nun noch die damit erhaltene Ausgleichs-Funktion als $\theta_4(t)$:

$$\theta_4(t) := \theta_u + (\theta_0 - \theta_u) \cdot e^{\lambda_2 \cdot t}$$



Der Vergleich zeigt, dass natürlich die ursprünglich (unter Punkt 3) ermittelte Exponentialfunktion $\theta3(t)$ den Vorgang besser beschreibt. Bemerkenswerter Weise beschriebt allerdings die unter Punkt 4 mit Hilf der Logarithmierung ermittelte Ausgleichsfunktion $\theta_4(t)$ die Funktion in Teilbereichen (nämlich für größere Werte) besser.
Der Grund für dieses stark unterschiedliche Verhalten liegt wohl darin, dass unsere experimentell ermittelten Punkte etwa nach 50 eine Art "Knick" aufweist.
Dies wiederum dürfte (wie schon oben angedeutet) an der methodischen Unzulänglichkeit des Experimentes liegen: Die Abkühlung erfolgt nicht wirklich gleichmäßig, weil die erhitzte Unterlage, auf der Der Topf bzw. das Glas steht, als Wärmespeicher (nach einer gewissen Dauer) wirkt.

Folgerung:

Willl man Realität und Theorie "näher zusammenbringen" muss man sich über die methodische Vorgangsweise schon im Vorfeld mehr Gedanken machen!!