

Neue einfache und rasche Extrapolationsverfahren

Von Dr. A. SIPPEL

Forschungslaboratorium der Deutschen Rhodiaceta A.G. Freiburg/Brsg.

Hat man Wertepaare mit äquidistanten Werten der unabhängigen Variablen, d. h. Meßwerte in Abhängigkeit von einer gleichmäßig zunehmenden Größe, so ist eine Extrapolation mit dem Pascalschen Dreieck möglich. Der extrapolierte Wert wird dabei umso genauer sein, je mehr Wertepaare bekannt sind. Für periodische Funktionen und Extrapolationen nach sehr kleinen oder sehr großen Werten hin haben sich aber zwei neue, hier mitgeteilte, einfache Rechenverfahren als vorteilhafter erwiesen.

Die Rechenweisen und die erzielbaren Genauigkeiten werden an Beispielen dargelegt.

Einleitung

Für den Fachmathematiker ist Extrapolation (d. h. die Voraussage des Wertes von abhängigen Variablen für neue Werte der zugehörigen unabhängigen Variablen ohne Kenntnis der Funktion, die beide Variablen verbindet) keine orthodoxe, sondern höchstens eine geduldete Methode; Extrapolation gilt als ein spezieller Fall der Interpolation, der zulässigen Methode; sie wird als wenig verlässlich und nur in geringer Entfernung von bekannten Werten (Meßwertepaaren) als noch erlaubt angesehen.

Natürlich besteht immer die Gefahr, daß man einem Extrapolationsverfahren zuviel zumutet. Kein derartiges Verfahren wird sprunghafte Änderungen, wie die wöchentlichen Änderungen des Luftdruckes oder die täglichen Änderungen der Börsenkurse voraussagen können. Für eine Extrapolation kommen nur einigermaßen stetige, womöglich gesetzmäßige Änderungen in Frage.

Ein weiterer triftiger Grund für die berechtigte Vorsicht der Mathematiker besteht darin, daß jede Extrapolationsformel sich nur für eine bestimmte Klasse von Funktionen mit gutem Erfolg gebrauchen läßt, für andere Funktionen dagegen weniger gut. Es gibt also keine universell brauchbare Extrapolationsformel. Z. B. ist das übliche Interpolationsverfahren speziell für Polynome und normale Potenzreihen gut geeignet. Die in dieser Abhandlung zu besprechenden neuen Verfahren hingegen können im Fall jener Exponentialfunktionen und verwandten Funktionen mit besonderem Vorteil benutzt werden, die gerade dem Chemiker und Physikochemiker häufig begegnen.

Ein anderer Grund für die vorsichtige Einstellung der Fachmathematiker dürfte in den Eigenschaften der für das „klassische“ Extrapolations- bzw. Interpolationsverfahren benutzten Funktionengruppe zu suchen sein, den sog. ganzen rationalen Funktionen, die durch Gleichungen von der Form:

$$y = a + bx + cx^2 + dx^3 \dots \quad (1)$$

dargestellt werden.

Diese Funktionen bzw. die durch sie dargestellten Kurven pflegen nämlich „davonzulaufen“; sie nehmen rasch sehr hohe oder sehr niedrige Werte an, die weitab von dem Bereich liegen, in dem sich die bekannten bzw. gemessenen Funktionswerte bewegen; sie vermögen deshalb auch keinen periodischen Verlauf wiederzugeben; man kann beispielsweise die Sinus- oder Cosinus-Funktion damit nicht befriedigend extrapoliieren. Dieses Unvermögen erstreckt sich auch auf die gerade in der Physik so wichtigen Exponentialfunktionen (von denen sich ja mittels der Eulerischen Formel die Sinus- und Cosinus-Funktion ableiten lassen). Das Mißtrauen der Mathematiker ist also begreiflich. Andererseits hat aber das klassische Extrapolationsverfahren einen speziellen Vorzug, von dem weiter unten die Rede sein wird und der u. U. die Umständlichkeit der Ermittlung der Koeffizienten $a, b, c, d \dots$ (mittels einer Serie von Gleichungen) bei weitem aufwiegt.

Das Pascalsche Dreieck

Es scheint noch nicht genügend bekannt zu sein, daß die Extrapolationsverfahren sehr bequem sind, wenn man gleichabständige („äquidistante“) Argumente (x -Werte) hat, also x bei den bekannten Wertepaaren, von denen die Extrapolation ausgeht, nacheinander z. B. die Werte 1, 2, 3, 4 oder 40, 50, 60, 70 annimmt.

In diesen Fällen kann die Extrapolation nach dem klassischen Verfahren (Gleichung (1)) im Handumdrehen mittels des sog. Pascalschen Dreiecks vorgenommen werden:

1							
	1						
		1					
			1				
				1			
					1		
						1	
							1
1	4	6	4	1			
1	5	10	10	5	1		

... usw.

das als bekannt vorausgesetzt werden darf.

Sind beispielsweise 4 Wertepaare (mit gleichabständigen x -Werten) bekannt, z. B.

y	4	9	16	25		
x	2	3	4	5		

und der y -Wert für den nächstfolgenden gleichabständigen x -Wert gesucht, also für $x = 6$, so gilt ohne Rücksicht auf die x -Werte für die y -Werte folgendes (siehe 5. Zeile des Pascalschen Dreiecks):

$$1 \cdot y_a - 4 \cdot y_b + 6 \cdot y_c - 4 \cdot y_d + 1 \cdot y_e = 0$$

oder es gilt für den gesuchten Wert y_e

$$y_e = 4 \cdot y_d - 6 \cdot y_c + 4 \cdot y_b - y_a \quad (2)$$

in unserem Fall haben wir also:

$$y_e = 4 \cdot 25 - 6 \cdot 16 + 4 \cdot 9 - 4 = 36,$$

also offenbar den richtigen Wert für $x = 6$.

Selbstverständlich wird der gefundene Wert nicht in allen Fällen genau der „richtige“ sein, sondern nur dann, wenn die bekannten Wertepaare einer ganzen rationalen Funktion nicht zu hohen Grades genügen; aber es wird in allen Fällen der durch unser vereinfachtes Verfahren gefundene Wert genau derselbe sein, wie man ihn durch eine ausführliche Rechnung der üblichen Art (unter Benutzung mehrerer Gleichungen zur Koeffizientenberechnung) erhalten hätte.

Allgemein lautet unsere Berechnungsvorschrift folgendermaßen:

Sind n bekannte Wertepaare (mit gleichabständigen x -Werten) gegeben, so erhält man den y -Wert zum nächsten (ebenfalls gleichabständigen) x -Wert, indem man die $(n+1)$ te Zeile des Pascalschen Dreiecks benutzt. Die Glei-

der dieser Zeile sind abwechselnd mit positivem und negativem Vorzeichen zu versehen und je eines der Glieder mit einem y-Wert (einschließlich des gesuchten y-Wertes) zu multiplizieren; die Summe sämtlicher Produkte ist gleich Null.

Wir geben noch ein Beispiel:

Bekannt:

y	27	64	125	216	343	(y = x ³)
x	3	4	5	6	7	

Gesucht ist y_e für x_e = 8.

Da 5 Glieder bekannt sind, wird die 6te Reihe des *Pascalschen Dreiecks* benutzt, welche lautet:

$$\begin{array}{ccccccc} & 1 & 5 & 10 & 10 & 5 & 1 \\ \text{Hieraus wird: } & 1 & -5 & +10 & -10 & +5 & -1 \end{array}$$

$$\begin{array}{l} \text{Hieraus kommt: } 1 \cdot 27 - 5 \cdot 64 + 10 \cdot 125 - 10 \cdot 216 \\ \quad + 5 \cdot 343 - y_e = 0 \end{array}$$

$$\text{oder: } y_e = 27 - 320 + 1250 - 2160 + 1715 = 512$$

$$\begin{array}{ll} \text{Also wird f\ddot{u}r } & x_e = 8 \\ & y_e = 512 \end{array}$$

Mit Hilfe dieses einfachen Verfahrens können wir nun leicht einen besonderen Vorteil der klassischen Extrapolationsmethode aufzeigen, den die später zu besprechenden Verfahren nicht besitzen.

Je größer nämlich die Anzahl der bekannten Glieder (für gleichabständige x-Werte) ist, desto genauer ist im allgemeinen das Extrapolationsergebnis, wenn ein exaktes Ergebnis mit dem klassischen Verfahren nicht erzielbar ist.

Dies gilt z. B. für Wertepaare, die einer Exponentialfunktion genügen.

Wir benutzen als Beispiel die Funktion y = 2^x und betrachten der Einfachheit halber nur die y-Werte für gleichabständige x-Werte. Gesucht ist y_e für x_e = 8:

gegebene y-Werte	Anzahl y-Werte	extrapolierter y _e -Wert
16 32 64 128	4	240
4 8 16 32 64 128	6	252
1 2 4 8 16 32 64 128	8	255
$\frac{1}{16} \frac{1}{8} \frac{1}{4} \frac{1}{2} 1 2 4 8 16 32 64 128$	10	255,75
$\frac{1}{16} \frac{1}{8} \frac{1}{4} \frac{1}{2} 1 2 4 8 16 32 64 128$	12	255,937
	14	255,984

Der richtige Wert 256 wird also mit steigender Gliedanzahl mit immer größerer Genauigkeit erreicht.

Dagegen hat, wie bereits bemerkt, dieses klassische Verfahren den Nachteil, bei periodischen Funktionen zu versagen; auch können bei nur wenigen bekannten Gliedern die Extrapolationsfehler sehr groß werden, wie oben das Beispiel y = 2^x gezeigt hat.

Dies wird besonders verhängnisvoll, wenn man entweder nach sehr großen oder sehr kleinen Werten hin extrapoliert, wie unten an Beispielen gezeigt wird.

Zuvor seien jedoch unsere beiden neuen Extrapolationsverfahren beschrieben, von denen das eine bereits veröffentlicht worden ist¹⁾.

Neue Extrapolationsverfahren

Verfahren I

Gegeben sind die vier zu gleichabständigen x-Werten gehörigen y-Werte, die wir der Einfachheit halber mit A, B, C, D bezeichnen wollen. Man findet dann den Wert für E (für ebenfalls gleichabständigen x-Wert) rasch mittels der Formel:

$$E = B + \frac{(D-C)(D-A)}{C-B}$$

¹⁾ Vgl. diese Ztschr. 55, 331 [1942].

Verfahren II

Gegeben seien wiederum A, B, C, D; gesucht sei E. Man bildet zunächst folgende Anordnung:

$$\begin{array}{ccccc} A & B & C & A & B \\ B & C & D & B & C \\ C & D & E & C & D \end{array}$$

Nun wird ähnlich wie beim Rechnen mit Determinanten verfahren:

Man bildet zunächst die Produkte aus den wie nachstehend durch Striche verbundenen Gliedern:

$$\begin{array}{ccccc} A & B & C & A & B \\ \diagdown & \diagdown & \diagdown & \diagdown & \diagdown \\ B & C & D & B & C \\ \diagup & \diagup & \diagup & \diagup & \diagup \\ C & D & E & C & D \end{array}$$

also ACE + BDC + CBD, entsprechend bildet man.

$$\begin{array}{ccccc} A & B & C & A & B \\ \diagup & \diagup & \diagup & \diagup & \diagup \\ B & C & D & B & C \\ \diagdown & \diagdown & \diagdown & \diagdown & \diagdown \\ C & D & E & C & D \end{array}$$

also C³ + AD³ + B³E.

Man setzt nun die beiden Ausdrücke einander gleich und erhält:

$$\begin{aligned} ACE + 2BCD &= C^3 + AD^3 + B^3E \\ \text{oder: } E &= \frac{2BCD - C^3 - AD^3}{B^3 - AC} \end{aligned}$$

Man könnte unschwer analog auch Formeln für mehr als vier bekannte Glieder gewinnen; die Genauigkeit würde jedoch hierdurch im allgemeinen nicht wachsen.

Die Genauigkeit der verschiedenen Extrapolationsmethoden sei am Beispiel einer Funktion verglichen, welche mit wachsendem x sehr rasch anwächst:

$$\begin{array}{ll} y = x! \quad (\text{x-Fakultät}) & \text{gesucht:} \\ \text{Gegeben sei:} & \\ \begin{array}{ccccc} y & 6 & 24 & 120 & 720 \\ x & 3 & 4 & 5 & 6 & 7 \end{array} & \end{array}$$

Man erhält nach den verschiedenen Methoden:

$$\begin{array}{ll} \text{klassische Methode: } 2250 & \text{Richtiger Wert:} \\ \text{Methode I: } 4486,5 & 5040 = 7! \\ \text{Methode II: } 4800 & \end{array}$$

Die neue Methode II zeitigt also bei weitem das beste Ergebnis.

Würde man für die klassische Methode nicht vier, sondern fünf bekannte Glieder benutzen, also auch den Wert für x = 2, so würde man 2612 erhalten, also einen etwas besseren, aber immer noch völlig unbefriedigenden Wert; nicht viel besser wäre es mit 6 bekannten Gliedern: 2921.

Als weiteres dem Chemiker näher liegendes Beispiel wählen wir die Abhängigkeit des Dampfdrucks p von der Temperatur t bei Benzol:

$$\begin{array}{ll} \text{gegeben:} & \text{gesucht} \\ \begin{array}{ccccc} p \text{ (atm)} & 1,337 & 1,769 & 2,300 & 2,945 \\ t \text{ (°C)} & 90 & 100 & 110 & 120 & 130 \end{array} & \end{array}$$

In unserer Schreibweise bedeutet dies, daß A = 1,337, B = 1,769, C = 2,300; D = 2,945 ist und daß E, nämlich der Dampfdruck für die Temperatur t = 130 °C gesucht wird.

Für E ergeben sich nach den einzelnen Extrapolationsmethoden folgende Werte:

$$\begin{array}{ll} \text{klassische Methode: } 3,719 & \text{Richtiger, d. h. expe-} \\ \text{Methode I: } 3,722 & \text{riental bestimmt} \\ \text{Methode II: } 3,719 & \text{Wert: 3,717} \end{array}$$

Wir beobachten also auch in diesem zufällig der chemischen Praxis entnommenen Beispiel eine einwandfreie Brauchbarkeit der neuen Methode II.

Noch viel mehr kommt aber der in der Methode II liegende Fortschritt zum Ausdruck, wenn es sich um Extrapolation nach sehr kleinen Werten hin handelt.

Ein einfaches allgemein geläufiges Beispiel sei zunächst dem Gebiet der Mathematik entnommen: Wir behandeln als Beispiel die logarithmische Funktion $y = \log x$.

Gegeben sei:	gesucht
y	0,699 0,602 0,477 0,301 ?
x	5 4 3 2 1

Wir wissen natürlich von vornherein, daß E, also der Logarithmus von 1 zur Basis 10, gleich Null ist; wir wollen aber dieses Wissen nicht voraussetzen und die verschiedenen Extrapolationsverfahren anwenden. Wir finden:

klassische Methode:	0,051
Methode I:	0,042
Methode II:	0,035

Am nächsten dem wahren Wert Null kommt also die neue Methode II.

Für den Chemiker ein weiteres Beispiel: Die Abhängigkeit des Dampfdruckes p von der Temperatur t , wiederum bei Benzol.

Gegeben ist:	gesucht
p	0,3539 0,2383 0,1556 0,0982 ?
t	50 40 30 20 10

Wir finden nach den verschiedenen Methoden:

klassische Methode:	0,0585	Experimentell bestimmter Wert: 0,0598
Methode I:	0,0608	
Methode II:	0,0595	

Auch bei diesem Beispiel kommt also die neue Methode II der Wirklichkeit am nächsten.

Einen Vorteil hat die neue Methode II mit der bereits veröffentlichten Methode I gemeinsam: Sie gestattet bei Exponentialfunktionen und gewissen mit diesen zusammenhängenden Funktionen wie z. B. $y = \sin x$ oder $y = \cos x$ eine exakte Extrapolation, sie eignet sich mithin auch zur Darstellung eines periodischen Verlaufs.

Im Rahmen dieser mehr praktischen Zwecken dienenden Darstellung erscheint ein Eingehen auf die mathematischen Grundlagen nicht angebracht.

Die Extrapolation bedarf übrigens bei Methode II im Fall von Exponentialfunktionen eines kleinen Kunstgriffs. Würde man ohne weiteres, wie oben dargestellt, verfahren, so würde man ein unbestimmtes Ergebnis, näm-

lich 0/0 erhalten. Man gelangt aber leicht zum richtigen Ergebnis, wenn man zu den gegebenen Werten für A, B, C und D einen konstanten Betrag, am einfachsten den Betrag Eins, hinzufügt und ihn dementsprechend vom Ergebnis wieder abzieht.

Beispiel: gegeben:

y	1	2	4	8
x	1	2	3	4

Wir erhöhen die y -Werte um Eins und erhalten:

A	B	C	D
2	3	5	9

Nach Methode II ergibt sich für E:

$$E = \frac{2 \cdot 3 \cdot 5 \cdot 9 - 5^3 - 2 \cdot 9^2}{3^3 - 2 \cdot 5} = 17$$

Ziehen wir hiervon wieder Eins ab, so erhalten wir den richtigen Wert 16 (diese besondere Verfahrensweise ist jedoch nur bei reinen Exponentialfunktionen anzuwenden).

In einer Hinsicht ist die neue Methode II der klassischen Methode sowie der Methode I etwas unterlegen: Im Gegensatz zu jenen Methoden ergibt sie im Fall der ganzen rationalen Funktion 2. Grades nicht völlig den exakten Wert:

$$y = a + bx + cx^2$$

Der Fehler ist aber nicht groß, wie das folgende Beispiel zeigt ($y = 2 + 3x + x^2$):

gegeben:	gesucht
y	6 12 20 30 ?
x	1 2 3 4 5

Während die klassische Methode und Methode I den richtigen Wert 42 für $x = 5$ ergeben, erhält man nach Methode II den Wert 41,67, der also einen Fehler von nur 0,7% besitzt.

Man darf hoffen, daß die neue Methode II in vielen praktischen Fällen wertvolle Hilfe bringen wird, zumal ihre Ausführung sehr einfach ist, auf jeden Fall viel einfacher als die heute noch übliche ausführliche Rechnung gemäß der klassischen Methode. Steht eine kleine Rechenmaschine zur Verfügung, so wird man das Resultat gemäß Methode II meist in wenigen Minuten erhalten können.

Eingegangen am 20. Januar 1959 [A 943]

Analytisch-technische Untersuchungen

Bestimmung von Schwefel-Spuren in kleinen Luftmengen

Von Dr. H. ZIMMERMANN

Hygiene-Institut des Ruhrgebiets, Gelsenkirchen

Die Empfindlichkeit der trübungsphotometrischen Mikro-Sulfat-Bestimmung nach Wickbold wurde auf das 200-fache erhöht. So können jetzt noch 0,5 γ Schwefel auf wenige Prozent genau bestimmt werden. Nach Vorgabe einer Sulfat-Menge, die später wieder in Abzug gebracht wird, läßt sich sogar noch 0,1 γ S, allerdings mit geringerer Genauigkeit, erfassen. Diese hohe Empfindlichkeit gestattet die Bestimmung von 0,2 ppm Schwefel in wenigen Litern Luft.

Einleitung

Der Schwefel-Gehalt der „Außenluft“¹⁾ interessiert heute besonders im Bereich von 0,25 mg Schwefel = 0,5 mg SO₂/m³ (etwa 0,2 ppm^{2, 3}), da man in der Lufthygiene international in den letzten Jahren immer kleinere Schwefel-Konzentrationen als Grenzwerte empfohlen hat.

SO₂: Oberhalb etwa 0,2 ppm SO₂ = 0,29 mg S/m³ werden Pflanzen geschädigt^{2, 3}). In den USA ist ein Grenzwert von

* ppm = parts per million, bei Gasen: Volumen-Teile, 1 ppm SO₂ = 1 cm³ SO₂/1000000 cm³ Luft = 2,86 mg SO₂/m³ bei 0 °C und 760 Torr. Dabei ist idealer Gaszustand für das so stark verdünnte SO₂ zugrundegelegt, 1 cm³ unverdünntes SO₂ wiegt 2,926 mg.

¹⁾ O. Beyreis, A. Heller u. E. M. Bursche: Außenlufthygiene, Fischer-Verlag, Stuttgart 1955.

²⁾ M. Katz, Ind. Engng. Chem. Analytic. Ed. 41, 2450 [1949].

³⁾ H. Stratmann, Mitt. Vereinig. Großkesselbesitzer Heft 40, 59 [1956].

0,3 ppm SO₂ in landwirtschaftlich genutzten Gebieten vereinbart worden.

H₂SO₄: Ab 0,2 ppm H₂SO₄ = 0,29 mg S/m³ ist auch beim gesunden Menschen sicher mit einer deutlichen Wirkung auf die Atmung zu rechnen. 1952 wurden in den USA 0,23 ppm H₂SO₄ als Grenzwert für Wohngebiete festgelegt⁴⁾.

H₂S: Bei 0,3 ppm H₂S = 0,43 mg S/m³ ist die Geruchsgrenze schon ungefähr 10-fach überschritten⁵).

Organische Verbindungen: Unter ihnen zeichnen sich die niederen Mercaptane durch besonders tief liegende Ge-

⁴⁾ H. Collumbine, R. E. Pattle u. F. Burgess: Toxische Eigenschaften von Nebel. VII. Int. Kongr. f. vergleichende Pathologie, Lausanne 1955.

⁵⁾ F. A. Patty: Industrial Hygiene and Toxicology. Interscience Publishers Inc., New York, London 1949, Bd. II, S. 590.