

Mathematische und statistische Hilfsmittel für Pharmazeuten

Dr. Helga Lohöfer

Fachbereich Mathematik und Informatik
der Philipps-Universität Marburg

Fassung vom September 2003

Inhaltsverzeichnis

I	Elementare Grundlagen	1
1	Zahlen und Regeln für Zahlen	3
1.1	Typen von Zahlen	3
1.2	Rechenregeln für Zahlen	4
1.2.1	Bruchrechnung	5
1.2.2	Prozentrechnung und die Begriffe relative Abweichung und relative Änderung	5
1.2.3	Potenzrechnung und die Binomialkoeffizienten $\binom{n}{k}$	7
1.2.4	Binomialkoeffizienten in der Wahrscheinlichkeitsrechnung	11
1.2.5	Runden von Dezimalzahlen auf n Nachkommastellen	12
2	Funktionen	13
2.1	Allgemeines über Variable und Funktionen	13
2.2	Einfache Klassen von Funktionen	16
2.2.1	Proportionalitäten	16
2.2.2	Anwendung: Proportionalität in der Mischungsrechnung	18
2.2.3	Geradengleichungen	19
2.2.4	Anwendung: Interpolation	19
2.2.5	Monome, Polynome und rationale Funktionen	20
2.2.6	Anwendung: Polynome zur näherungsweisen Berechnung stetiger Funktionen	21
2.3	Funktionen mehrerer Variabler	21

3	Einige fundamentale Algorithmen	23
3.1	Lineare Regression	23
3.1.1	Das Drei-Schritt-Verfahren	23
3.1.2	Das Ein-Schritt-Verfahren	24
3.1.3	Wahl zwischen den beiden Verfahren	24
3.1.4	Absicherung des Ergebnisses durch Probe	24
3.1.5	Der Linealtest	24
3.2	Der Gauß-Algorithmus für Lineare Gleichungssysteme	26
3.2.1	Standardaufgabe der Mischungsrechnung	26
3.2.2	Gauß-Algorithmus im Falle $n = 3$	27
3.2.3	Gauß-Algorithmus für $n = 2$ oder $n \geq 4$	28
3.2.4	Anwendung auf die Standardaufgabe der Mischungsrechnung	28
3.2.5	Mischungsrechnung bei überschüssiger Anzahl von Edukten	29
3.3	Konvergente Folgen	31
3.3.1	Grundbegriffe	31
3.3.2	Spezielle Typen von Folgen: Monotone und alternierende Konvergenz	33
3.3.3	Grenzwertregeln und summatorische Folgen	35
3.3.4	Anwendung: Konstante Zufuhr kontra prozentuale Abnahme	38
3.3.5	Die Konvergenzgeschwindigkeit von Folgen	40
II	Analysis	43
4	Differentialrechnung	45
4.1	Der Begriff der mittleren Änderungsrate	45
4.2	Der Begriff der momentanen Änderungsrate	46
4.3	Die Ableitung einer Funktion $y = f(x)$	48
4.3.1	Der Begriff der Ableitung	48
4.3.2	Kriterium zur Erkennung von Ableitungen und Stammfunktionen . . .	49
4.3.3	Anwendung: Wichtige Beispiele von Ableitungen	49
4.4	Regeln für die Berechnung von Ableitungen	51

4.4.1	Berechnung der Ableitung aus einer Funktionsformel für $y = f(x)$. . .	51
4.4.2	Berechnung der Ableitung aus einer Wertetabelle für $y = f(x)$ (numerische Differentiation)	53
4.5	Anwendung: Fehlerrechnung	54
4.5.1	Ungenaue Zahlen	54
4.5.2	Fehlerfortpflanzung bei einer ungenauen Größe	55
4.5.3	Partielle Ableitungen	55
4.5.4	Fehlerfortpflanzung bei mehreren ungenauen Größen	56
4.5.5	Rechenbeispiele	56
4.6	Bestimmung von Maxima und Minima (Kurvendiskussion)	58
4.7	Anwendung: Beweis der Formeln für die Lineare Regression	60
4.7.1	Bestimmung der Konstanten C (Ein-Schritt-Verfahren)	60
4.7.2	Bestimmung der Konstanten A, B (Drei-Schritt-Verfahren)	62
5	Die wichtigsten nicht-elementaren Funktionen	65
5.1	Die natürlichen Wachstums- und Abbaugesetze	65
5.1.1	Beispiele für natürliche Wachstumsgesetze	67
5.1.2	Beispiele für natürliche Abbaugesetze	68
5.2	Berechnungsformel für natürliche Wachstumsgesetze	71
5.2.1	Fall $c = 1$ und $y_0 = 1$: Die Exponentialfunktion $y = \exp(x)$	71
5.2.2	Fall c und y_0 im Wert beliebig: Allgemeine Exponentialfunktionen . .	75
5.2.3	Beispiele	76
5.3	Eigenschaften der Exponentialfunktion $y = \exp(x)$	77
5.3.1	Historischer Exkurs: Erklärung der Namen “Exponentialfunktion“ und “e-Funktion“ für die natürliche Wachstumsfunktion $y = \exp(x)$	78
5.3.2	Graph und qualitative Eigenschaften der Exponentialfunktion	79
5.4	Der natürliche Logarithmus \ln (= logarithmus naturalis)	81
5.5	Drei Anwendungen des natürlichen Logarithmus	84
5.5.1	Graphischer Test für natürliches Wachstum/Abbau	84
5.5.2	Die Arrheniusgleichung	85

5.5.3	Der Begriff der Halbwertszeit	87
5.6	Die Schreibweise a^b für beliebige $a > 0$ und $b \in \mathbb{R}$	88
5.7	Exponentialfunktion zur Basis a , Logarithmus zur Basis a	89
5.7.1	Anwendung: Photometrie	92
5.8	Verschiedene Wachstumsgesetze im Vergleich, Allometrie	93
5.8.1	Natürliches (exponentielles, prozentuales) Wachstum/Abbau	93
5.8.2	Logarithmisches Wachstum/Abbau	94
5.8.3	Lineares Wachstum/Abbau	95
5.8.4	Allometrisches (potentielles) Wachstum/Abbau	96
5.9	Potenzfunktionen und Wurzelfunktionen	98
5.9.1	Potenzfunktionen	98
5.9.2	Wurzelfunktionen	101
5.10	Anwendung: Potenzfunktionen in der Kinetik	101
5.10.1	Verschiedene Maße für die Reaktionsgeschwindigkeit	101
5.10.2	Ordnung einer Reaktion bezüglich eines Edukts A	103
5.10.3	Geschwindigkeitsgesetz und Geschwindigkeitskonstante einer chemischen Reaktion	106
5.10.4	Graphische Tests zum Erkennen einer Reaktion von n -ter Ordnung bezüglich des Edukts A_1	108
5.10.5	Berechnungsformel für $[A_1](t)$	110
5.10.6	Graphische Tests zur Bestimmung der Reaktionsordnung	111
5.10.7	Halbwertszeiten bei Reaktionen der Ordnung n	114
5.10.8	Beispiel für ein biologisches Wachstumsgesetz mit Ähnlichkeit zur che- mischen Reaktion n -ter Ordnung	117
5.11	Die Winkelfunktionen und ihre Abkömmlinge	118
5.11.1	Cosinus, Sinus und Bogenlänge eines Winkels	118
5.11.2	Symmetrie-Eigenschaften von $\cos t$ und $\sin t$	119
5.11.3	Wertetabelle und Graph von $\cos t$ und $\sin t$	121
5.11.4	Bedeutung von Cosinus und Sinus in den Naturwissenschaften	123
5.11.5	Berühmte Formeln für Cosinus und Sinus	125

6	Integralrechnung	129
6.1	Das bestimmte Integral	129
6.1.1	Das Windrad-Beispiel	129
6.1.2	Das bestimmte Integral und seine numerische Berechnung	131
6.1.3	Umformungsregeln für bestimmter Integrale	133
6.1.4	Anwendung: Der Begriff des mittleren (durchschnittlichen) Wertes einer Funktion $y = f(x)$ im Bereich $a \leq x \leq b$	135
6.2	Stammfunktionen	137
6.3	Summatorische Funktionen zu einer Funktion $y = f(x)$	137
6.3.1	Wichtige Beispiele von summatorischen Funktionen	138
6.4	Der Hauptsatz der Differential- und Integralrechnung	140
6.5	Zwei Anwendungen des Hauptsatzes	143
6.5.1	Numerische Berechnung von Stammfunktionen	143
6.5.2	Unbestimmtes Integral und partielle Integration	144
III	Wahrscheinlichkeitsrechnung und Statistik	147
7	Grundlagen aus der Wahrscheinlichkeitsrechnung	149
7.1	Die Begriffe Zufallsvariable, Messmethode, Experiment	149
7.2	Messreihen und ihre statistischen Daten	151
7.3	Dichtefunktionen und Verteilungsfunktionen	153
7.4	Die drei wichtigsten Typen von Zufallsvariablen	158
8	Normalverteilung	159
8.1	Gauß-Glocke und Gauß'sche Φ -Funktion	159
8.2	Sicherheitsvereinbarungen, Fehler 1. und 2. Art	163
8.3	Entfernung fehlerhafter Messdaten: Der Ausreißertest	164
8.4	Der Streubereich und seine Schätzung	166
8.5	Der Vertrauensbereich für \bar{x} und seine Schätzung	168
8.5.1	Anwendung: Qualitätstest für quantitative Eigenschaften	169
8.6	Der F-Test zum Vergleich zweier Streuungen s_1, s_2	169

8.6.1	Anwendung: Test auf gleichmäßige Qualität einer Ware	170
8.7	Der Vertrauensbereich für s und seine Schätzung	172
8.8	Der t-Test zum Vergleich zweier Mittelwerte \bar{x}_1, \bar{x}_2	173
8.8.1	Anwendung 1: Zusammenfassung zweier Messreihen zu einer	174
8.8.2	Anwendung 2: Untersuchung von Einflüssen auf die normalverteilte Zufallsvariable x	175
8.9	Simultaner Vergleich von mehr als zwei empirischen Messreihen	175
8.9.1	Der Bartlett-Test zum Vergleich von Streuungen s_1, \dots, s_m (Verallgemeinerter F-Test)	175
8.9.2	Die Einfache Varianzanalyse zum Vergleich von Mittelwerten $\bar{x}_1, \dots, \bar{x}_m$ (Verallgemeinerter t-Test)	176
9	Poissonverteilung und Binomialverteilung	181
9.1	Allgemeines über Zufallsvariable mit Wertebereich in \mathbb{Z}	181
9.2	Poissonverteilung	184
9.2.1	Rechenbeispiele	185
9.3	Binomialverteilung	187
9.3.1	Zufallsvariable mit Befund positiv/negativ	187
9.3.2	Theorie der Binomialverteilung	188
9.3.3	Seltene Ereignisse: Poisson- statt Binomialverteilung	192
9.3.4	Viele Messungen: Normal- statt Binomialverteilung	193
9.4	Schätzung von unbekanntem p bei Binomialverteilung	195
9.5	Schätzung von unbekanntem λ bei Poissonverteilung	198
10	Tests für beliebige Zufallsvariable	201
10.1	Der Chi-Quadrat-Anpassungstest	201
10.2	Der Chi-Quadrat-Unabhängigkeitstest	203
A	Gebrauchsanleitung für logarithmisches Papier	207
A.1	Die Lage der $\ln x$ -Werte auf der senkrechten Achse	207
A.2	Die Lage der \ln -Werte auf der waagerechten Achse	208
A.3	Die zwei Sorten von logarithmischem Papier und ihr Zweck	209

A.3.1	Halblogarithmisches Papier	209
A.3.2	Doppeltlogarithmisches Papier	210
A.4	Zum praktischen Umgang mit logarithmischem Papier	211
B	Von der Wertetabelle zur Berechnungsformel	215
C	Tabellen zur Statistik	223
C.1	Φ -Tabelle	224
C.2	F-Tabelle	226
C.3	Dichtefunktion zur Poissonverteilung	232
C.4	χ^2 -Tabelle	234
C.5	r-Tabelle und t-Tabelle	236
D	Systematik mathematischer Funktionen	237
D.1	\ln -abhängige Funktionen	238
D.2	Winkelfunktionen und Verwandte	239
D.3	Statistische Funktionen	240

Teil I

Elementare Grundlagen

Kapitel 1

Zahlen und Regeln für Zahlen

1.1 Typen von Zahlen

Unter dem Druck wachsender Ansprüche - man wollte immer mehr Rechenoperationen uneingeschränkt ausführen können - wurde im Laufe der Geschichte die Menge der Zahlen mehrfach durch Hinzunahme von Zahlen neuen Typs erweitert.

- A)** Die Menge der **natürlichen Zahlen** $\mathbb{N} = \{1, 2, 3, \dots\}$.
Uneingeschränkt möglich: Addition, Multiplikation.
Eingeschränkt möglich: Subtraktion, Division.
- B)** Die Menge der **ganzen Zahlen** $\mathbb{Z} = \{0, 1, -1, 2, -2, 3, -3, \dots\}$.
Uneingeschränkt möglich: Addition, Subtraktion, Multiplikation.
Eingeschränkt möglich: Division.
- C)** Die Menge der **rationalen Zahlen (= Brüche)** $\mathbb{Q} = \{\frac{m}{n} \mid m \in \mathbb{Z}, n \in \mathbb{N}\}$.
Uneingeschränkt möglich: Addition, Subtraktion, Multiplikation, Division (außer Division durch Null).
 \mathbb{Q} ist auch die Menge aller endlichen und aller periodischen unendlichen Dezimalzahlen.
- D)** Die Menge der **reellen Zahlen** $\mathbb{R} =$ Menge aller endlichen und unendlichen Dezimalzahlen.
Die Menge \mathbb{Q} lässt sich noch durchnummerieren, wenn man es geschickt macht. Bei der Menge \mathbb{R} ist das unmöglich: Sie ist zu groß, die natürlichen Zahlen reichen nicht aus! Diejenigen reellen Zahlen, die nicht in \mathbb{Q} liegen, heißen **irrationale Zahlen**. Sie sind Dezimalzahlen mit unendlich vielen Nachkommastellen, aber ohne Periode. Zu ihnen gehören z.B. $\sqrt{2}$ und π (= halber Umfang des Einheitskreises).

\mathbb{R} wird geometrisch veranschaulicht als Menge aller Punkte auf einer Geraden ("Zahlengerade").

Uneingeschränkt möglich: Addition, Subtraktion, Multiplikation, Division (außer Division durch Null), das Ziehen von n-ten Wurzeln aus positiven Zahlen.

Eingeschränkt möglich: Das Lösen von quadratischen Gleichungen:

$$x^2 + px + q = 0$$

hat nur zwei mögliche Lösungen, nämlich

$$x_{1,2} = -\frac{p}{2} \pm \frac{1}{2}\sqrt{p^2 - 4q},$$

aber diese existieren nicht in \mathbb{R} , sobald unter der Wurzel eine negative Zahl steht.

Beispiel: $x^2 + 2x + 6 = 0$ (= Fall $p = 2$, $q = 6$) müsste die Lösungen $x_{1,2} = -1 \pm \sqrt{-5}$ haben. Gäbe es in \mathbb{R} diese Lösungen, dann wäre auch $\sqrt{-5} = x_1 + 1$ eine reelle Zahl, und deren Quadrat wäre $= -5$. Das Quadrat einer reellen Zahl ist aber immer ≥ 0 .

E) Die Menge der **komplexen Zahlen** $\mathbb{C} = \{a + ib \mid a, b \in \mathbb{R}\}$, wobei die “imaginäre Einheit“

$$i = \sqrt{-1}$$

eine neuerfundene Zahl ist mit der spezifischen Eigenschaft

$$i^2 = -1.$$

\mathbb{C} wird geometrisch veranschaulicht als Menge aller Punkte $(a|b)$ einer euklidischen Ebene (“Gauß’sche Zahlenebene“).

$a \in \mathbb{R}$ heißt der **Realteil**, $b \in \mathbb{R}$ heißt der **Imaginärteil** der komplexen Zahl $a + ib$. Zwei komplexe Zahlen sind nur dann gleich, wenn sie in Realteil und Imaginärteil übereinstimmen.

Uneingeschränkt möglich: Addition, Subtraktion, Multiplikation, Division (außer Division durch Null), das Ziehen von n-ten Wurzeln aus allen (reellen oder komplexen) Zahlen, das Lösen von allen quadratischen Gleichungen und allen Gleichungen 3. und höheren Grades.

z.B. hat die obige Gleichung $x^2 + 2x + 6 = 0$ in \mathbb{C} die zwei Lösungen $x_{1,2} = -1 \pm i\sqrt{5}$.

Bei nochmaliger Erweiterung des Zahlbereichs muss man entweder in Kauf nehmen, dass sich die uneingeschränkte Division (außer durch Null) nicht länger erzielen lässt, d.h. es gibt dann unter den neu hinzugenommenen Zahlen a solche die $\neq 0$ sind, aber kein Inverses a^{-1} besitzen, oder die Multiplikation wird teilweise asymmetrisch, d.h. $a \cdot b = b \cdot a$ gilt nicht mehr uneingeschränkt. Deshalb ist mit \mathbb{C} der Erweiterungsprozess zu einem gewissen natürlichen Abschluss gekommen.

Beispiele für die nutzbringende Verwendung der komplexen Zahlen werden im Abschnitt 5.11.5, S.125 ff, vorgestellt.¹

1.2 Rechenregeln für Zahlen

Die folgenden Regeln gelten für Zahlen aus allen aufgeführten Zahlbereichen (insbesondere auch für komplexe Zahlen).

¹Dort werden drei wichtige Regeln über Cosinus und Sinus mittels Rechnen im Zahlbereich \mathbb{C} gewonnen.

1.2.1 Bruchrechnung

Malnehmen: $\frac{a}{b} \cdot \frac{c}{d} = \frac{a \cdot c}{b \cdot d}$ "Zähler mal Zähler,
dividiert durch Nenner mal Nenner"

Teilen: $\frac{a}{b} : \frac{c}{d} = \frac{a \cdot d}{b \cdot c}$ "mit dem Kehrwert malnehmen"

Addieren/Subtrahieren: $\frac{a}{b} \pm \frac{c}{d} = \frac{ad \pm bc}{bd}$ "erst auf den Hauptnenner bringen"

WARNUNG: ~~$\frac{a}{b} \pm \frac{c}{d} = \frac{a \pm c}{b \pm d}$~~

Kürzen/Erweitern: $\frac{a}{b} = \frac{a \cdot c}{b \cdot c}$

WARNUNG: ~~$\frac{a}{b} = \frac{a \pm c}{b \pm c}$~~

Kehrwert: $\left(\frac{a}{b}\right)^{-1} = \frac{b}{a}, \quad \left(\frac{a}{b} \cdot \frac{c}{d}\right)^{-1} = \frac{b}{a} \cdot \frac{d}{c}$

WARNUNG: ~~$\left(\frac{a}{b} \pm \frac{c}{d}\right)^{-1} = \frac{b}{a} \pm \frac{d}{c}$~~ sondern: $\left(\frac{a}{b} \pm \frac{c}{d}\right)^{-1} = \frac{bd}{ad \pm cb}$

1.2.2 Prozentrechnung und die Begriffe relative Abweichung und relative Änderung

Wichtig ist die richtige Übersetzung der deutschsprachigen Formulierung in mathematische Schreibweise und umgekehrt.

Seien a, b reelle Zahlen $\neq 0$.

deutscher Text:	mathematische Schreibweise dafür:
x % von a Beispiele: 3 % von 80 % von a 80 % von 5 % von 300	$\frac{x}{100} \cdot a$ $0,03 \cdot 80\% \text{ von } a = 2,4\% \text{ von } a = 0,024 \cdot a$ $0,8 \cdot 0,05 \cdot 300 = 12$
a ist um x% größer/kleiner als b Beispiele: a ist um 15% größer als b a ist um 3,5% kleiner als b	$a = b \pm \frac{x}{100} \cdot b = \left(1 \pm \frac{x}{100}\right) \cdot b$ $a = 1,15 \cdot b$ $a = 0,965 \cdot b$
a ist um x% angestiegen/gesunken Beispiel: Hat a sich verdreifacht, gilt: a ist um 200% angestiegen	$a_{neu} = a_{alt} \pm \frac{x}{100} \cdot a_{alt} = \left(1 \pm \frac{x}{100}\right) \cdot a_{alt}$ $a_{neu} = 3 \cdot a_{alt} = a_{alt} + \frac{x}{100} \cdot a_{alt},$ wobei $x = 200$ ist.

Bezeichnung: Ist a um $x\%$ größer oder kleiner als b , so sagt man auch:
 a weicht um $x\%$ von b ab.

In diesem Fall ist $a = b \pm \frac{x}{100} \cdot b$, also $a - b = \pm \frac{x}{100} \cdot b$, bzw. $|a - b| = \frac{x}{100} \cdot |b|$. Mittels Division durch b erhält man die

Berechnungsformel für die relative Abweichung:

Die relative Abweichung der Zahl a von der Zahl b beträgt

$$\frac{|a - b|}{|b|}$$

und wird i.a. in Prozent ausgedrückt.

WARNUNG: Sie darf nicht verwechselt werden mit der relativen Abweichung der Zahl b von a , welche gleich $\frac{|a-b|}{|a|}$ ist.

Faustregel: Falls die relative Abweichung der Zahl b von a höchstens gleich $0,05$ (also 5%) ist, so ist die relative Abweichung der Zahl a von b höchstens um $0,003$ größer (also $0,3\%$ größer) als die der Zahl b von a . Beide können in diesem Fall daher als ungefähr gleich angesehen werden. Bei mehr als 5% Abweichung müssen beide relativen Abweichungen getrennt berechnet werden, da erhebliche Größenunterschiede auftreten können.

Ist a um $x\%$ gestiegen oder gesunken, so gilt $a_{neu} = a_{alt} \pm \frac{x}{100} \cdot a_{alt}$, also $a_{neu} - a_{alt} = \pm \frac{x}{100} \cdot a_{alt}$. Division durch a_{alt} liefert hieraus

$$\frac{a_{neu} - a_{alt}}{a_{alt}} = \pm \frac{x}{100}$$

Bezeichnung: Die dimensionslose Zahl

$$\frac{a_{neu} - a_{alt}}{a_{alt}}, \text{ abgekürzt geschrieben als } \frac{\Delta a}{a},$$

heißt die **relative Änderung von a** und wird i.a. in % ausgedrückt..
 Sie ist positiv, wenn a größer geworden, negativ, wenn a kleiner geworden ist.

Beispiel 1:

Kostete ein Medikament früher 8DM , jetzt aber $8,50\text{DM}$, so beträgt die relative Preisänderung

$$\frac{8,50\text{DM} - 8\text{DM}}{8\text{DM}} = \frac{0,50}{8} = 0,0625 = +6,25\%.$$

Kostete das Medikament aber früher $8,50\text{DM}$ und jetzt 8DM , so beträgt die relative Preisänderung

$$\frac{8\text{DM} - 8,50\text{DM}}{8,50\text{DM}} = \frac{-0,50}{8,50} = -0,05882 \dots \approx -5,88\%.$$

Beispiel 2:

War die Zahl der Malariakranken in einer Region im Jahr 1950 um 60% höher als im Jahr 2000, so ist das gleichbedeutend damit, dass diese Krankenzahl von 1950 bis 2000 um $37,5\%$ zurückgegangen ist. (Die Krankenzahl von 1950 weicht von der Zahl des Jahres 2000 also um 60% ab, umgekehrt weicht letztere aber von ersterer um $37,5\%$ ab!)

So ergibt sich die

Abstrakte binomische Formel:

$$(a + b)^n = \binom{n}{0} a^n b^0 + \binom{n}{1} a^{n-1} b^1 + \binom{n}{2} a^{n-2} b^2 + \dots + \binom{n}{k} a^{n-k} b^k + \dots + \binom{n}{n} a^0 b^n,$$

$$\text{kurzgefasst: } (a + b)^n = \sum_{k=0}^n \binom{n}{k} a^{n-k} b^k.$$

Wie lässt sich der Zahlwert jedes beliebigen $\binom{n}{k}$ berechnen? Es gibt unendlich viele davon! Ein elementares Berechnungsverfahren für die Binomialkoeffizienten wird aus dem Studium der obigen Auflistung der Binomischen Formeln entwickelt:

	Wert der Koeffizienten:	Bezeichnung der Koeffizienten:
$n = 0 :$	1	$\binom{0}{0}$
$n = 1 :$	1 1	$\binom{1}{0} \binom{1}{1}$
$n = 2 :$	1 2 1	$\binom{2}{0} \binom{2}{1} \binom{2}{2}$
$n = 3 :$	1 3 3 1	$\binom{3}{0} \binom{3}{1} \binom{3}{2} \binom{3}{3}$
$n = 4 :$	1 4 6 4 1	$\binom{4}{0} \binom{4}{1} \binom{4}{2} \binom{4}{3} \binom{4}{4}$
	\vdots	\vdots
n -te Zeile:		$\dots \binom{n}{k-1} \binom{n}{k} \dots$
$n+1$ -te Zeile:		$\dots \binom{n+1}{k} \dots$

Betrachtet man in der Pyramide der Werte zwei nebeneinanderstehende Zahlen, so beobachtet man, dass in der nächsten Zeile mitten darunter gerade deren Summe erscheint. Das lässt folgende Gesetzmäßigkeit vermuten, die wir erst später allgemein beweisen können:

Binomische Summenformel:

$$\binom{n}{k-1} + \binom{n}{k} = \binom{n+1}{k} \quad \text{für } n = 1, 2, 3, \dots \text{ und } 1 \leq k \leq n.$$

Die praktische Anwendung dieser Summenformel besteht in folgendem

Berechnungsverfahren für $(a + b)^n$ (brauchbar vor allem für kleinere n):

Möchte man $(a + b)^5$ ausrechnen (z.B.), so beginnt man ein Wertedreieck (**Pascal²sches Dreieck**) mit 6 (= $n+1$) Zeilen, indem man an den Rändern lauter Einsen einträgt. Danach füllt man das Innere zeilenweise von oben nach unten, indem man in der Mitte unter zwei Zahlen der vorigen Zeile deren Summe einträgt. In der letzten (=6.ten) Zeile des Dreiecks stehen dann alle Koeffizienten von $(a + b)^5$.

Für große n ist dieses Verfahren praktisch nicht brauchbar. Eine Berechnungsformel zur gezielten Berechnung einzelner Koeffizienten $\binom{n}{k}$ bei beliebig großem n findet man mit Hilfe folgender theoretischer Überlegungen:

$(a + b)^n$ ist ein Produkt von n Faktoren. Sie seien F_1, \dots, F_n genannt. Jedes F_i ist von der Bauart $F_i = a + b$. Das Ausmultiplizieren nach dem Distributivgesetz erfordert, dass man im

²Blaise Pascal (1623 - 1662), französischer Mathematiker

ersten Schritt auf jede nur mögliche Weise aus jedem Faktor F_i einen Summanden auswählt (nämlich entweder a oder aber b), und die n ausgewählten Summanden miteinander multipliziert. Im zweiten Schritt sind alle diese Teilergebnisse aufzusummieren.

Welche möglichen Werte ergeben sich, wenn n derart ausgewählte Summanden miteinander multipliziert werden? Wenn bei genau k der F_i der Summand b ausgesucht wurde, dann wurde bei den $n - k$ übrigen F_i zwangsläufig der Summand a ausgesucht und der Wert des Produkts ist gleich $a^{n-k}b^k$. Die Zahl $\binom{n}{k}$ gibt also an, auf wie viele verschiedene Weisen es möglich ist, k mal den Summanden b auszuwählen. Dies ist gleich der Anzahl der Möglichkeiten, gewisse k verschiedene Faktoren aus den insgesamt n Faktoren herauszugreifen. Daraus ergibt sich

Kombinatorische Regel 1 (Bedeutung der Binomialkoeffizienten):

$\binom{n}{k}$ ist die Anzahl der Möglichkeiten, aus n Elementen k auszuwählen, ohne Wiederholung und ohne Beachtung der Reihenfolge der Auswahl.

Da die Anzahl der Möglichkeiten, k mal den Summanden b auszuwählen, genauso groß ist wie die Anzahl der Möglichkeiten, k mal den Summanden a auszuwählen und dadurch $(n - k)$ -mal den Summanden b , folgt

Symmetrieregeln für Binomialkoeffizienten: $\binom{n}{k} = \binom{n}{n - k}$ für $k = 0, 1, \dots, n$.

Diese Anzahl lässt sich nun in zwei Arbeitsschritten berechnen. Hier der 1. Schritt:

Kombinatorische Regel 2:

Die Anzahl der Möglichkeiten, aus n Elementen k auszuwählen, ohne Wiederholung, mit Beachtung der Reihenfolge, ist gleich

$$n \cdot (n - 1) \cdot (n - 2) \cdot \dots \cdot (n - (k - 1)),$$

in Worten: **k Faktoren absteigend, beginnend bei n .**

Beweis : Bei der Auswahl des 1. Elementes stehen n Elemente zur Auswahl, bei der des zweiten nur noch $(n - 1)$, bei der des k -ten sind schon $(k - 1)$ Elemente nicht mehr wählbar, weil bereits vorher ausgewählt, also hat man dann nur noch $n - (k - 1)$ Wahlmöglichkeiten. Da es andererseits auf die Reihenfolge der Auswahl ankommt, lassen sich aus jedem einzelnen der n möglichen Wahlergebnisse der 1. Wahl garantiert $n - 1$ verschiedene Wahlergebnisse der 2. Wahl erzielen. Insgesamt sind also bei 2 Wahlschritten schon $n \cdot (n - 1)$ verschiedene Gesamtergebnisse möglich, entsprechend bei 3 Wahlschritten $n \cdot (n - 1) \cdot (n - 2)$ usw., d.h. die Möglichkeiten pro Auswahlsschritt multiplizieren sich. \square

Beispiel: 25 Künstler nehmen an einem Wettbewerb teil, bei dem je ein 1., 2. und 3. Preis vergeben werden soll. Es gibt dann $25 \cdot 24 \cdot 23 = 13800$ verschiedene mögliche Endergebnisse des Wettbewerbs.

Kombinatorische Regel 3:

Die Anzahl der Möglichkeiten, dieselben k Elemente in eine unterschiedliche Reihenfolge zu bringen, ist gleich

$$1 \cdot 2 \cdot 3 \cdot \dots \cdot k,$$

in Worten: **k Faktoren aufsteigend, beginnend bei 1.**

Beweis : Die Anwendung der Kombinatorischen Regel 2 auf den Spezialfall $n = k$ liefert, dass diese Anzahl gleich $k \cdot (k - 1) \cdot \dots \cdot (k - (k - 1))$ ist, in Worten: k Faktoren absteigend, beginnend bei k . Das ist aber dasselbe wie $1 \cdot 2 \cdot 3 \cdot \dots \cdot k$. \square

Beispiel: Nimmt eine Mannschaft von 4 Läufern an einem Staffellauf teil, so gibt es $1 \cdot 2 \cdot 3 \cdot 4 = 24$ Möglichkeiten der Startreihenfolge.

Bezeichnung: Das Produkt $1 \cdot 2 \cdot 3 \cdot \dots \cdot k$ wird schriftlich mit dem Symbol $\mathbf{k!}$ abgekürzt, in Worten: **k-Fakultät**. Dabei wird noch vereinbart, dass $0! = 1$ ist.

Nun der 2. Schritt zur Berechnung von $\binom{n}{k}$: Nimmt man alle Möglichkeiten, aus n Elementen k auszuwählen ohne Wiederholung (s. Kombinatorische Regel 2), betrachtet aber die Reihenfolge, in welche die k ausgewählten Elemente dabei geraten, als gleichgültig (anders als bei der Preisverleihung und als beim Staffellauf), so besagt die Kombinatorische Regel 3, dass je $1 \cdot 2 \cdot 3 \cdot \dots \cdot k$ dieser Möglichkeiten letztlich doch zum selben Auswahlresultat führen.

Damit folgt: Bei Nichtbeachtung der Reihenfolge ergibt sich als Anzahl der Möglichkeiten die Anzahl aus Regel 2, dividiert durch die Anzahl aus Regel 3. Damit gilt

Berechnungsformel für Binomialkoeffizienten:

$$\binom{n}{k} = \frac{n \cdot (n - 1) \cdot (n - 2) \cdot \dots \cdot (n - (k - 1))}{1 \cdot 2 \cdot 3 \cdot \dots \cdot k},$$

in Worten: **k Faktoren absteigend, beginnend bei n, dividiert durch k Faktoren aufsteigend, beginnend bei 1**

oder auch: **k Faktoren absteigend, beginnend bei n, dividiert durch k Faktoren absteigend, beginnend bei k.**

Erweitert man Zähler und Nenner um das Produkt $(n - k) \cdot (n - (k + 1)) \cdot \dots \cdot 2 \cdot 1 = (n - k)!$, so ergibt sich im Zähler insgesamt $n!$ und man erhält die Formel

$$\binom{n}{k} = \frac{n!}{k!(n - k)!}.$$

Es ergeben sich folgende häufig gebrauchte Spezialwerte: Für alle $n \geq 0$ gilt

$$\binom{n}{0} = 1, \quad \binom{n}{1} = n, \quad \binom{n}{2} = \frac{n(n - 1)}{2}, \quad \binom{n}{n} = 1.$$

(insbesondere stimmen die Randwerte 1 im Pascalschen Dreieck). Setzt man weiterhin in die obige Summenformel für Binomialkoeffizienten die Ausdrücke ein, die die Berechnungsformel vorschreibt, und rechnet beide Seiten der Gleichung aus, so erhält man die Probe, dass die vermutete Summenformel tatsächlich stimmt und damit das Berechnungsverfahren mit dem Pascalschen Dreieck generell korrekt ist.

Nun lassen sich Beispiele zur Kombinatorischen Regel 1 berechnen:

Beispiel 1: Drei Models sollen engagiert werden, 25 Bewerberinnen haben sich gemeldet. Das Personalbüro hat $\binom{25}{3} = \frac{25 \cdot 24 \cdot 23}{1 \cdot 2 \cdot 3} = 2300$ verschiedene Entscheidungsmöglichkeiten.

Beispiel 2: Ein Hotel verfügt über 80 preisgleiche freie Doppelzimmer. Ein Touristikunternehmen bestellt 30 solche. Das Hotel hat $\binom{80}{30} \approx 8,87 \cdot 10^{21}$ verschiedene Möglichkeiten, die Buchung zu realisieren.

1.2.4 Binomialkoeffizienten in der Wahrscheinlichkeitsrechnung

Bezeichnung: Ein Experiment liefere mit der Wahrscheinlichkeit p das Ergebnis E ($0 < p < 1$). Dieses Experiment werde, unabhängig voneinander, n mal durchgeführt. Dabei trete k mal das Ergebnis E auf. Um eine Prognose zu machen, wie groß der Wert von k sein wird, verwendet man folgende Bezeichnungen:

- $P(k = a)$ Wahrscheinlichkeit, dass das Ergebnis E **genau a mal** auftritt,
 $P(a \leq k \leq b)$ Wahrscheinlichkeit, dass das Ergebnis E **mindestens a und höchstens b mal** auftritt.
 $P(k \leq b)$ Wahrscheinlichkeit, dass das Ergebnis E **höchstens b mal** auftritt,
 $P(k \geq a)$ Wahrscheinlichkeit, dass das Ergebnis E **mindestens a mal** auftritt.

Es gelten nun folgende, aus der Schule bekannte³

Regeln für unabhängig voneinander wiederholte Experimente:

$$(W1) \quad P(k = a) = \binom{n}{a} p^a (1-p)^{n-a}$$

$$(W2) \quad P(a \leq k \leq b) = \binom{n}{a} p^a (1-p)^{n-a} + \binom{n}{a+1} p^{a+1} (1-p)^{n-(a+1)} + \dots + \binom{n}{b} p^b (1-p)^{n-b} \\ = \sum_{k=a}^b \binom{n}{k} p^k (1-p)^{n-k}$$

$$(W3) \quad P(k \leq b) = P(0 \leq k \leq b) = \sum_{k=0}^b \binom{n}{k} p^k (1-p)^{n-k}$$

$$(W4) \quad P(k \geq a) = P(a \leq k \leq n) = \sum_{k=a}^n \binom{n}{k} p^k (1-p)^{n-k} = 1 - \sum_{k=0}^{a-1} \binom{n}{k} p^k (1-p)^{n-k}$$

Beispiel: Die Wahrscheinlichkeit für verregnete Weihnachtsfeiertage betrage an einem Urlaubsort 30%. Eine Familie fahre jedes Jahr zu Weihnachten dorthin. Wie groß ist die Wahrscheinlichkeit, dass ihr Urlaub in 5 Jahren

- keinmal
 - höchstens einmal
 - mindestens zweimal
- verregnet?

Lösung: Es ist hier $p = 0,3$ und $n = 5$.

- $P(k = 0) \stackrel{(W1)}{=} \binom{5}{0} p^0 (1-p)^{5-0} = 1 \cdot 1 \cdot (1-0,3)^5 = 0,7^5 = 0,16807 \approx 16,8\%$
- $P(k \leq 1) \stackrel{(W3)}{=} P(0 \leq k \leq 1) \stackrel{(W2)}{=} \binom{5}{0} p^0 (1-p)^5 + \binom{5}{1} p^1 (1-p)^{5-1} \\ = 0,7^5 + 5 \cdot 0,3^1 \cdot 0,7^4 = 0,16807 + 0,36015 = 0,52822 \approx 52,8\%$
- $P(k \geq 2) \stackrel{(W4)}{=} 1 - P(k \leq 1) \stackrel{(b)}{=} 1 - 0,52822 = 0,47178 \approx 47,2\%$

³Weitere Einzelheiten hierzu finden sich in 9.3 bis 9.3.4, S.187 ff

1.2.5 Runden von Dezimalzahlen auf n Nachkommastellen

Rundungsregel:

- a) Für positive Zahlen c :
1. Schritt: Berechne c auf mindestens $(n+1)$ Nachkommastellen.
 2. Schritt: Schneide nach der n -ten Stelle ab.
 3. Schritt: Ist die $(n+1)$ -te Ziffer (= die erste abgeschnittene) mindestens gleich 5, so addiere $1 \cdot 10^{-n}$.
- b) Für negative Zahlen c :
- Entferne das negative Vorzeichen, verfare wie unter a) und füge zuletzt das negative Vorzeichen wieder hinzu.

Rundungseffekt:

Die Differenz zwischen dem auf n Nachkommastellen gerundeten Wert von c und dem exakten Wert von c (der evtl. gar nicht ausgerechnet wurde) beträgt höchstens $\pm 0,5 \cdot 10^{-n}$.

Dies hat umgekehrt zu folgender wichtiger Konvention geführt:

Merke: Gibt man eine Zahl mit n Nachkommastellen an, so versichert man damit automatisch, dass zwischen dem angegebenen Wert und dem exakten Wert eine Differenz von höchstens $\pm 0,5 \cdot 10^{-n}$ besteht.

Beispiel: Die Längenangaben 5cm und 50mm haben durchaus nicht dieselbe Bedeutung, sondern: 5cm bedeutet dasselbe wie $5\text{cm} \pm 0,5\text{cm}$, d.h. ein Länge zwischen 45mm und 55mm.
50mm dagegen bedeutet dasselbe wie 5,0cm, nämlich eine Länge zwischen 49,5mm und 50,5mm.

Eine allgemein beachtete Mindestanforderung an das Runden besagt, dass der exakte Wert vom angegebenen Wert eine **relative Abweichung**⁴ von 2% nicht überschreiten sollte. Ob diese Anforderung eingehalten wurde, sieht man erst, wenn man die beim Runden erzeugte Differenz durch den angegebenen Wert dividiert.

Es folgt, dass bei dreistelligen Zahlen (also Zahlen über Hundert) schon das Runden auf eine Nachkommastelle genügt, um diese Mindestanforderung zu erfüllen. Andererseits gilt: Je näher die Zahl bei Null liegt, umso mehr Nachkommastellen muss man beim Runden behalten.

Ausführliches zur Problematik der Abweichung zwischen angegebenem und exaktem Wert im Abschnitt 4.5 (S.54 ff).

⁴siehe 1.2.2, S. 6

Kapitel 2

Funktionen

2.1 Allgemeines über Variable und Funktionen

Grundlegend ist der Begriff der **Variablen** (in der Physik "Größen" genannt). Beispiele für Variable, die in diesem Kurs vorkommen:

	Name:	Formelzeichen	Einheit
Physik:	Zeit	t	s, min, h, d, a
	Länge, Strecke, Entfernung, Weg	s, ℓ	m, km, cm, mm
	Fläche	A	m ² , km ² , cm ² , mm ²
	Volumen	V	m ³ , l(Liter), ml, cm ³
	Geschwindigkeit	v	m/s, km/h
	Beschleunigung	a	m/s ²
	Kraft	F	N(Newton)
	Druck	p	Pa(Pascal), hPa(= mbar)
	Temperatur	T	K(Kelvin)
	Celsiustemperatur	ϑ	⁰ C
	Masse	m	g, mg, μ g
	Dichte	$\rho = \frac{m}{V}$	g/ml, g/cm ³
	Chemie:	Stoffmenge	n
Stoffmengenkonzentration		$c = \frac{n(\text{Komponente})}{V(\text{Lösung})}$	mol/l=M
Massenkonzentration		$\rho^* = \frac{m(\text{Komponente})}{V(\text{Lösung})}$	g/l
Massenanteil		$w = \frac{m(\text{Komponente})}{m(\text{Gemisch})}$	%
Volumenanteil		$\frac{V(\text{Komponente})}{V(\text{Lösung})}$	Vol%
molare Masse		$M_{\text{molar}} = \frac{m}{n}$	g/mol
Medizin:	Körpergröße		cm
	Körpergewicht		kg, bei Säuglingen g
	Blutdruck		mmHg
	Cholesterinspiegel		mg/100ml

Bezeichnung: Die Menge aller möglichen Werte einer Variablen heißt ihr **Wertebereich**.

Beispiel: Das Körpergewicht $m[g]$ von Neugeborenen ist eine reellwertige Variable mit Wertebereich $300 \leq m \leq 6000$.

Mathematische (= anonymisierende) Bezeichnung für Variable:

Variable mit Wertebereich in \mathbb{R} oder \mathbb{C} : x, y, z, u, v, w, \dots (hinteres Alphabet)

Variable mit Wertebereich in \mathbb{N} oder \mathbb{Z} : m, n, i, j, k, \dots (mittleres Alphabet)

Fest gegebene Zahlen heißen Konstante, z.B.: $\pi = 3,14\dots$, die universelle Gaskonstante R .

Anonymisierende Bezeichnung für Konstante: $a, b, c, \alpha, \lambda, \mu, \dots$ (vorderes und griechisches Alphabet).

Bezeichnung: Zwei Variable x, y heißen **voneinander unabhängig**, wenn jeder mögliche Wert der Variablen x mit jedem möglichen Wert der Variablen y zusammen auftreten kann.

Beispiele: Alter und Kontostand einer Person.

Körpergewicht und Intelligenzquotient eines Erwachsenen.

Bezeichnung: Die extremste Form der Abhängigkeit einer Variablen y von einer Variablen x liegt vor, wenn jeder mögliche Wert von x jeweils nur in Kombination mit einem einzigen ganz bestimmten, vom x -Wert abhängigen Wert von y zusammen auftreten kann. Dann heißt y eine **Funktion von x** (Schreibweise: $y=f(x)$), x die **freie Variable** der Funktion f , y die **abhängige Variable** von f .

Der Wertebereich der freien Variablen x heißt dann auch der **Definitionsbereich der Funktion f** , der Wertebereich der abhängigen Variablen y heißt auch der **Wertebereich der Funktion f** .

Beispiel: $x =$ Zeit t , $y =$ Luftdruck p in Marburg, Marktplatz. Dann ist $p = f(t)$.

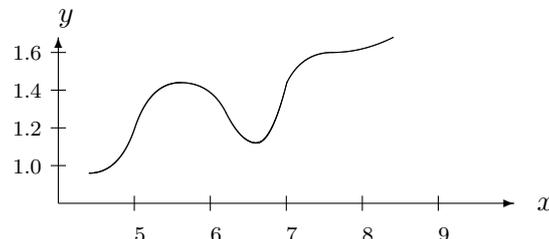
Informationen über Funktionen können in 4 unterschiedlichen Formen vorliegen, und zwar als

a) **Wertetabelle:**

x	0,023	0,500	1,750	3,000	5,000	...
y	0,27	0,82	1,70	2,00	2,40	...

Wertepaare (x_i, y_i) ($i = 1, \dots, n$) gewonnen aus Messungen oder Berechnungen.

b) **Graph:**



Punkte $(x_i|y_i)$ gewonnen mit Messgerät (z.B. Seismograph, EKG) oder durch Übertragung aus einer Wertetabelle. Der Graph heißt **vollständig**, wenn er alle möglichen Wertepaare $(x_i|y_i)$ darstellt.

Beachte: Die freie Variable muss auf der waagerechten, die abhängige Variable auf der senkrechten Achse abgetragen werden. Unterschiedliche Skalierung der Achsen erlaubt, Achsenschnittpunkt muss nicht der Punkt $(0|0)$ sein.

- c) **Wachstumsgesetz:** z.B.: “Bei kleineren Änderungen von x ist die relative Änderung von y proportional zur relativen Änderung von x .” (Gilt u.a. beim Größenvergleich zweier Organe bei höheren Organismen)
- d) **Berechnungsformel:** z.B. $x =$ Kantenlänge a des Quadrats, $y =$ Fläche A des Quadrats. Dann ist A eine Funktion von a und lässt sich aus a berechnen mittels der Formel

$$A = a^2.$$

Kriterium für Funktionen:

Die Variable y ist eine Funktion von x genau dann, wenn für Wertepaare (x_1, y_1) und (x_2, y_2) stets gilt: Wenn x_1 gleich x_2 ist, dann ist auch y_1 gleich y_2 .

Dieses Kriterium lässt als Sonderfall zu, dass auch eine Konstante c als Funktion von x aufgefasst wird: $f(x) = c$ für alle möglichen x -Werte.

Bezeichnung: Eine Funktion $y = f(x)$ heißt **umkehrbar**, wenn aus jedem möglichen Wert von y stets eindeutig auf den zugehörigen x -Wert zurückgeschlossen werden kann.

Dann ist auch x eine (andere!) Funktion von y : $x = g(y)$. Die Funktionen f und g heißen **Umkehrfunktionen voneinander**.

Kriterium für Umkehrfunktionen:

Die Funktion $y = f(x)$ ist umkehrbar genau dann, wenn für Wertepaare (x_1, y_1) und (x_2, y_2) stets gilt: Wenn y_1 gleich y_2 ist, dann ist auch x_1 gleich x_2 .

Beispiele: Eine konstante Funktion $f(x) = c$ ist nicht umkehrbar.

Der Luftdruck p in Marburg, Marktplatz, ist keine umkehrbare Funktion der Zeit t .

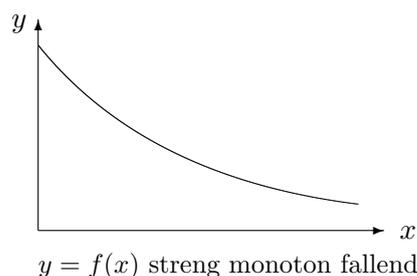
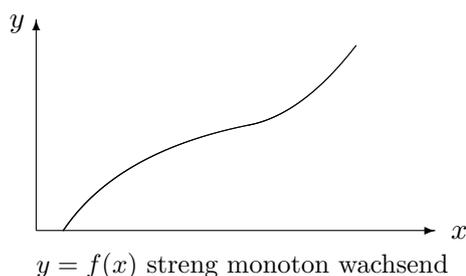
Die Fläche A des Quadrats ist eine umkehrbare Funktion der Kantenlänge a . Berechnungsformel der Umkehrfunktion: $a = \sqrt{A}$. (Dagegen ist die mathematische Funktion $y = x^2$, wenn sie den Definitionsbereich \mathbb{R} hat, nicht umkehrbar.)

Für umkehrbare Funktionen f gilt:

1. Wertetabellen für $y = f(x)$ sind zugleich brauchbar als Wertetabellen für die Umkehrfunktion $x = g(y)$.
2. Aus dem Graph von $y = f(x)$ entsteht der Graph von $x = g(y)$ durch Spiegelung der gesamten Skizze an der 1. Winkelhalbierenden.

Bezeichnung: Die Funktion $y = f(x)$ heißt

- **streng monoton wachsend**, wenn y größer wird, sobald x größer wird,
- **streng monoton fallend**, wenn y kleiner wird, sobald x größer wird.



Beispiel: Die Quadratfläche A ist eine streng monoton wachsende Funktion der Kantenlänge a , und auch die Kantenlänge a ist eine streng monoton wachsende Funktion der Fläche A . (Hingegen ist die Funktion $y = x^2$, $x \in \mathbb{R}$, nicht monoton.)

Bezeichnung: Wenn der vollständige Graph einer Funktion $y = f(x)$ eine zusammenhängende Kurve ohne Sprünge ergibt, so heißt die Funktion **stetig**.

Dies bedeutet anschaulich, dass man den vollständigen Graphen in einem Zuge zeichnen kann, ohne den Stift mehrfach neu ansetzen zu müssen.

Die wissenschaftlich präzise Definition des Begriffes Stetigkeit ist völlig unanschaulich und führt dazu, dass auch noch gewisse Funktionen als stetig zu bezeichnen sind, deren Graph zu schwierig ist, als dass er sich überhaupt visualisieren ließe. Diese Definition wird in Abschnitt 3.3.1, S.33 nachgeliefert.

R 1 **Regel 1 (Umkehrbarkeit von Funktionen):**

Eine **stetige** Funktion $y = f(x)$ ist genau dann umkehrbar, wenn sie streng monoton wachsend oder streng monoton fallend ist.

2.2 Einfache Klassen von Funktionen

2.2.1 Proportionalitäten

Bezeichnung: Zwei Variable x und y heißen **proportional** zueinander, wenn der **Quotient** aller möglichen Wertepaare (x_i, y_i) **konstant** ist:

$$\frac{y_i}{x_i} = c \quad (i = 1, 2, 3, \dots)$$

Dann gelten die Berechnungsformeln

$$y = c \cdot x \quad \text{und} \quad x = \frac{1}{c} \cdot y.$$

Bezeichnung: Zwei Variable x und y heißen **antiproportional** zueinander, wenn das **Produkt** aller möglichen Wertepaare (x_i, y_i) **konstant** ist:

$$x_i \cdot y_i = c \quad (i = 1, 2, 3, \dots)$$

Dann gelten die Berechnungsformeln

$$y = c \cdot \frac{1}{x} \quad \text{und} \quad x = c \cdot \frac{1}{y}.$$

Es ist dann y **proportional** zur Variablen $\frac{1}{x}$ und x **proportional** zur Variablen $\frac{1}{y}$.

R 2 **Regel 2 (Graphischer Test für Proportionalität/Antiproportionalität):**

Zwei Variable x, y sind genau dann **proportional** zueinander, wenn die Punkte $(x_i | y_i)$ auf einer **Ursprungsgeraden** liegen. Steigung der Geraden = $\frac{y_i}{x_i} = c$.

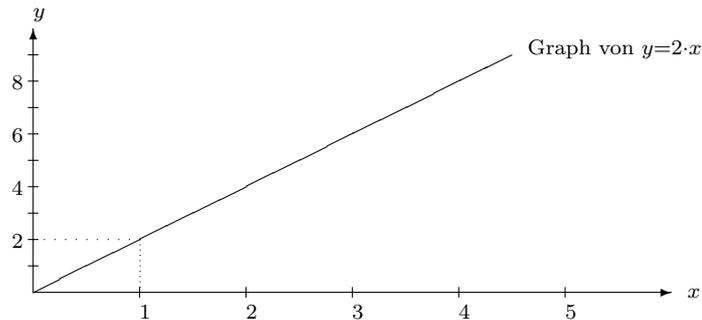
Zwei Variable x, y sind genau dann **antiproportional** zueinander, wenn die Punkte $(\frac{1}{x_i} | y_i)$ auf einer **Ursprungsgeraden** liegen. Steigung der Geraden = $y_i \cdot x_i = c$.

Beispiel für Proportionalität:

x	0,5	1,0	2,0	4,5
y	1,0	2,0	4,0	9,0

Es ist der Quotient $\frac{y_i}{x_i}$ stets = 2, also $c = 2$. Berechnungsformel für y als Funktion von x :

$$y = 2 \cdot x$$



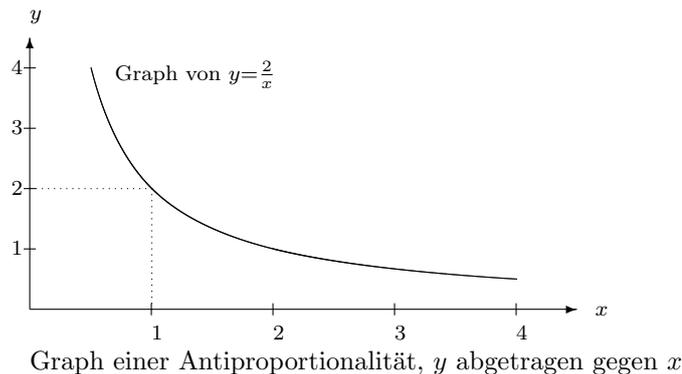
Beachte, dass wegen i.A. unterschiedlicher Maßstäbe auf beiden Achsen die Steigung (hier: 2) der Ursprungsgeraden nicht durch Augenschein, sondern nur durch Berechnung der Quotienten korrekt bestimmt werden kann.

Beispiel für Antiproportionalität:

x	0,5	1,0	2,0	4,0
y	4,0	2,0	1,0	0,5

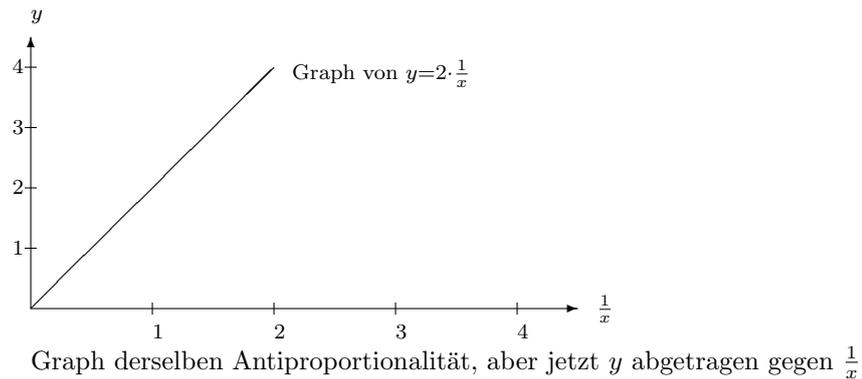
Es ist das Produkt $x_i \cdot y_i$ stets = 2, also $c = 2$. Berechnungsformel für y als Funktion von x :

$$y = 2 \cdot \frac{1}{x}$$



Aus den Werten von x werden die entsprechenden Werte der Variablen $\frac{1}{x}$ berechnet:

x	0,5	1,0	2,0	4,0
$\frac{1}{x}$	2,0	1,0	0,5	0,25
y	4,0	2,0	1,0	0,5



2.2.2 Anwendung: Proportionalität in der Mischungsrechnung

Nimmt man zur Herstellung einer Portion eines bestimmten Gemisches G

die Menge x_1 von der Komponente A_1 ,
 die Menge x_2 von der Komponente A_2 ,

 die Menge x_k von der Komponente A_k ,

so muss man zur Herstellung der n -fachen Portion desselben Gemisches G die n -fachen Mengen von allen Komponenten nehmen, also $n \cdot x_1, n \cdot x_2, \dots, n \cdot x_n$.

Konstant bleiben dabei die Größenverhältnisse, d.h. die **Quotienten** der Mengen $\frac{x_1}{x_2}, \frac{x_2}{x_3}$ usw. Betrachtet man die x_i als **Variable**, welche die jeweilige Menge angeben, die zur Herstellung einer beliebigen Portion von G benötigt werden, so sind die x_i also paarweise **proportional** zueinander. Dabei können die Mengen entweder durch ihre Masse oder durch ihr Volumen angegeben werden.

Bezeichnung: Der Ausdruck $x_1 : x_2 : x_3 : \dots : x_k$ heißt das **Mischungsverhältnis** (je nach Sachlage auch das **Massenverhältnis** oder das **Volumenverhältnis**) des Gemisches G , wenn man zuvor erst alle Zahlen x_1, x_2, \dots, x_k mit einem gemeinsamen Faktor n multipliziert, so dass sie alle ganzzahlig werden, und sie anschließend alle durch ihren größten gemeinsamen Teiler dividiert.

Beispiel: Eine Portion eines Pulvers bestehe aus den Komponenten A, B, C in folgenden Mengen:

	0,15g	0,45g	0,3g
ganzzahlig (= mal 100):	15	45	30
gekürzt (durch ggT. 15):	1	3	2

Ergebnis: Das Massenverhältnis der Komponenten A, B, C im Pulver beträgt $1 : 3 : 2$. Oder auch: Das Pulver entsteht durch Mischung der Komponenten A, B, C im Massenverhältnis $1 : 3 : 2$.

Merke: Das Mischungsverhältnis ist eine Rezeptur ohne Bezug auf Volumen und Masse des Ergebnisses.
 Um ein Mischungsverhältnis zu berechnen, berechnet man zunächst die Rezeptur für eine beliebige Standardmenge (wahlweise 100ml, 1kg o.ä.).

2.2.3 Geradengleichungen

Berechnungsformel:

$$y = a + b \cdot x, \quad (a, b \in \mathbb{R}) \quad \text{“Achsenabschnittsformel“}$$

$a =$ Schnittpunkt mit der senkrechten Achse, $b =$ Steigung der Geraden.

Regel 3 (Kriterium für Geraden):

R 3

y als Funktion von x erfüllt genau dann eine Geradengleichung $y = a + b \cdot x$, wenn für alle möglichen zwei Wertepaare (x_1, y_1) und (x_2, y_2) gilt:

$$\frac{\Delta y}{\Delta x} = \frac{y_2 - y_1}{x_2 - x_1} = b = \text{Steigung der Geraden,}$$

in Worten: Δy ist **proportional zu** Δx mit Proportionalitätskonstante b .

Durch Kehrwertbildung erhält man die

Folgerung: Wenn y als Funktion von x eine Geradengleichung mit einer Steigung $b \neq 0$ erfüllt, so ist auch x eine Funktion von y und erfüllt als solche eine Geradengleichung, aber mit der Steigung $\frac{1}{b}$ ($= \frac{\Delta x}{\Delta y}$).

Formel für die Gerade durch zwei gegebene Punkte $(x_1|x_2)$ und $(x_2|y_2)$:

$$y = y_1 + \frac{y_2 - y_1}{x_2 - x_1} \cdot (x - x_1) \quad \text{“Zweipunkteformel“}$$

Beweis : Nach *Regel 3* erfüllen alle Punkte $(x|y)$, die mit den zwei vorgegebenen Punkten auf derselben Geraden liegen, die Bedingung

$$\begin{aligned} \frac{y - y_1}{x - x_1} &= \frac{y_2 - y_1}{x_2 - x_1} & | \cdot (x - x_1) \\ y - y_1 &= \frac{y_2 - y_1}{x_2 - x_1} \cdot (x - x_1) & | + y_1 \\ y &= y_1 + \frac{y_2 - y_1}{x_2 - x_1} \cdot (x - x_1) \end{aligned}$$

□

2.2.4 Anwendung: Interpolation

Ausgangslage: Man habe für die Variable y als Funktion von x keine Berechnungsformel, nur eine möglichst detaillierte, **nach x-Werten (auf- oder absteigend) sortierte Wertetabelle** mit möglichst kleiner Schrittweite Δx .

Problem: Gesucht ein Wertepaar, das in der Tabelle fehlt. Der Wert von x sei gegeben, der zugehörige y -Wert gesucht.

Interpolationsverfahren:

- 1. Schritt:** Ermittle die beiden benachbarten Wertepaare (x_i, y_i) und (x_{i+1}, y_{i+1}) in der sortierten Tabelle, zwischen denen das gesuchte, aber nicht vorhandene Wertepaar liegen müsste (weil der gegebene x -Wert zwischen x_i und x_{i+1} liegt).
- 2. Schritt:** Stelle die Gleichung der Geraden durch die 2 Punkte $(x_i|y_i)$ und $(x_{i+1}|y_{i+1})$ auf:

$$y = y_i + \frac{y_{i+1} - y_i}{x_{i+1} - x_i} \cdot (x - x_i),$$

setze den gegebenen x -Wert ein und berechne den zugehörigen y -Wert.

Ergebnisbewertung: Der vermutlich gebogene Kurvenverlauf des (unbekannten) Graphen von $y = f(x)$ ist im (kleinen) Abschnitt zwischen den beiden bekannten Kurvenpunkten $(x_i|y_i)$ und $(x_{i+1}|y_{i+1})$ behelfsweise durch eine Gerade ersetzt worden. Der berechnete y -Wert liefert den Geradenpunkt $(x|y)$, nicht den (eigentlich gesuchten) Kurvenpunkt. Der berechnete y -Wert ist der bestmögliche **Näherungswert** für $y = f(x)$, der mittels der Wertetabelle bestimmt werden kann.

2.2.5 Monome, Polynome und rationale Funktionen

Jede Funktion der Bauart

$$y = a \cdot x^n \quad (n \in \mathbb{N} \text{ oder } n = 0, a \in \mathbb{R} \text{ konstant})$$

(in Worten: “ y ist proportional zu einer ganzzahligen Potenz von x “) heißt ein **Monom**.

Addition endlich vieler Monome ergibt **ganzzrationale Funktionen**, sogenannte **Polynome**:

$$y = a_0 + a_1x + a_2x^2 + a_3x^3 + \dots + a_nx^n \quad (a_0, \dots, a_n \in \mathbb{R} \text{ konstant})$$

n heißt der **Grad des Polynoms** (falls $a_n \neq 0$).

Division zweier Polynome ergibt **rationale Funktionen**:

$$y = \frac{a_0 + a_1x + \dots + a_nx^n}{b_0 + b_1x + \dots + b_mx^m} \quad (a_0, \dots, a_n, b_0, \dots, b_m \in \mathbb{R} \text{ konstant})$$

Es gilt offenbar: Die Proportionalitäten $y = c \cdot x$ sind Spezialfälle von Geradengleichungen $y = a + b \cdot x$ (mit $a = 0, b = c$) und von Monomen (mit $n = 1$), die Geradengleichungen sind Spezialfälle von Polynomen (nämlich Polynome vom Grad 1) und die Antiproportionalitäten sowie und die Polynome sind Spezialfälle von rationalen Funktionen (die Antiproportionalitäten sind rationale Funktionen mit konstantem Zählerpolynom $= c$ und Nennerpolynom $= x$, die Polynome sind rationale Funktionen mit konstantem Nennerpolynom $= 1$).

Jede Variable y , die sich aus einer Variablen x durch bloße Anwendung der vier Grundrechnungsarten (Addition, Subtraktion, Multiplikation, Division) exakt (nicht bloß näherungsweise) berechnen läßt, gehört zu einer der bisher besprochenen Klassen von Funktionen. Wir wollen sie die **elementaren Funktionen** nennen.

2.2.6 Anwendung: Polynome zur näherungsweisen Berechnung stetiger Funktionen

Das Verfahren der Interpolation hat gezeigt, wie man die Klasse der Geradengleichungen dazu benutzen kann, kompliziertere Funktionen, von denen gar keine Berechnungsformel bekannt ist, näherungsweise zu berechnen. Die größere Klasse der Polynome spielt eine ähnlich nützliche Rolle. Auch Polynome sind sehr bequem auszurechnen, und es gilt folgender berühmter Sachverhalt:

Approximationssatz von Weierstraß¹

Ist die Funktion $y = f(x)$ im Abschnitt $a \leq x \leq b$ stetig und ist $\varepsilon > 0$ eine beliebig kleine, frei gewählte positive Zahl (z.B. 10^{-9}), so gibt es stets ein Polynom derart, dass sich die Funktionswerte des Polynoms von denen der Funktion $y = f(x)$ für alle $a \leq x \leq b$ um garantiert weniger als $\pm\varepsilon$ unterscheiden.

Dasselbe Polynom kann also zur näherungsweisen Berechnung sämtlicher y -Werte in einem beliebig großen Bereich $a \leq x \leq b$ dienen, wobei jede gewünschte Genauigkeit erreichbar ist. (Vgl. damit, dass Interpolation nur in einem sehr kleinen Bereich $x_i \leq x \leq x_{i+1}$ brauchbare Näherungswerte liefert. Nur sehr viele verschiedene Interpolationsgeraden leisten das Gewünschte für einen größeren Bereich $a \leq x \leq b$.) Ein Gebiet der angewandten Mathematik (die sog. Approximationstheorie) beschäftigt sich damit, je nachdem, welche Informationen man über $y = f(x)$ schon besitzt, Algorithmen zum Auffinden passender Polynome zu liefern.

2.3 Funktionen mehrerer Variabler

Eine Variable y erscheint oft nur dadurch als Funktion einer einzigen Variablen x , dass man andere mitwirkende Variable (in Gedanken oder im Versuchsaufbau) künstlich konstant hält, d.h. Konstante in der Berechnungsformel für $y = f(x)$ sind evtl. selbst noch variabel, wenn man diese künstliche Rahmenbedingung weglässt.

Regel 4 (Proportionalität bei mehreren Variablen):

R 4

Sind u, v, w, \dots voneinander unabhängige Variable und ist die Variable y

- *proportional zu u , wenn nur u variiert, während v, w, \dots auf konstantem Wert stehen,*
- *proportional zu v , wenn nur v variiert, während u, w, \dots auf konstantem Wert stehen,*
- *proportional zu w , wenn nur w variiert, während u, v, \dots auf konstantem Wert stehen,*

⋮

so gibt es eine von u, v, w, \dots unabhängige spezifische Konstante c , so dass die Berechnungsformel

$$y = c \cdot u \cdot v \cdot w \dots$$

gilt.

In dieser Formel wird y als eine Funktion von mehreren Variablen u, v, w, \dots verstanden. Die Konstante ist im konkreten Fall meist so berühmt, dass sie einen eigenen Namen und eine international einheitliche Buchstabenbezeichnung besitzt.

¹Karl Weierstraß (1815 - 1897), deutscher Mathematiker

Beispiel 1: Bei Schränken der Tiefe $T=0,60[\text{m}]$ und Höhe $H=2,00[\text{m}]$ ist das Volumen V Funktion einer einzigen Variablen, denn V ist proportional zur Breite B :

$$V = 1,2 \cdot B[\text{m}^3].$$

Aber die Proportionalitätskonstante $c = 1,2[\text{m}^2]$ ergibt sich als Produkt von Tiefe T und Höhe H , ändert sich also, wenn man diese Einflussgrößen auf einen anderen konstanten Wert setzt:

Für Schränkchen der Tiefe $T=0,30[\text{m}]$ und Höhe $H=0,80[\text{m}]$ ist V auch proportional zu B , also Funktion der einzigen Variablen B , aber jetzt mit der Berechnungsformel

$$V = 0,24 \cdot B[\text{m}^3],$$

die Proportionalitätskonstante hat sich, in Abhängigkeit von T und H , geändert. Da Tiefe T , Höhe H und Breite B voneinander unabhängige Variable sind, wird die globale Gesetzmäßigkeit für die Volumenberechnung gemäß *Regel 4* erfasst durch die Formel

$$V = c \cdot T \cdot H \cdot B$$

mit der von T , B und H unabhängigen spezifischen Konstanten $c = 1$. In dieser Formel erscheint V als eine Funktion von 3 Variablen.

Beispiel 2: Bei Portionen von idealen Gasen sind die Stoffmenge n , die Kelvintemperatur T und das Volumen V voneinander unabhängige Variable (jeder mögliche Wert der einen Variablen kann mit jedem möglichen Wert der anderen kombiniert auftreten). Variiert man nur eine der drei und lässt die zwei anderen auf konstantem Wert, so gilt bekanntlich:

Der Druck p ist

- proportional zur Stoffmenge n (bei konstantem T und V)
- proportional zur Temperatur T (bei konstantem n und V) und
- antiproportional zum Volumen V (bei konstantem n und T).

Da die letztere Eigenschaft bedeutet, dass p proportional zur Variablen $1/V$ ist, folgt aus allem zusammen die

allgemeine Gasgleichung:

$$p = R \cdot n \cdot T \cdot V^{-1},$$

wobei die spezifische Proportionalitätskonstante die universelle Gaskonstante

$$R = 8,31441 \text{ J K}^{-1} \text{ mol}^{-1} = 8,31441 \text{ kPa l K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$$

ist.

Der Druck p wird in der obigen allgemeinen Gasgleichung als Funktion der drei Variablen n , T und V aufgefasst.

Durch Umformung erhält man z.B.

$$V = R \cdot n \cdot T \cdot p^{-1},$$

eine Formel, in der das Volumen als Funktion der drei Variablen n , T und p dargestellt wird.

Kapitel 3

Einige fundamentale Algorithmen

3.1 Lineare Regression

Ausgangslage: Gegeben seien zwei Variable v, w , gesucht eine Berechnungsformel für w als Funktion von v . Man habe aber lediglich eine Wertetabelle aus n Wertepaaren:

v	v_1	v_2	\dots	v_i	\dots	v_n
w	w_1	w_2	\dots	w_i	\dots	w_n

WARNUNG: Nur, wenn man zunächst diese Wertetabelle in einen Graphen überträgt und dabei sichtbar wird, dass die Punkte $(v_i|w_i)$ ungefähr auf einer Geraden liegen, sind die beiden nachfolgenden Verfahren erlaubt!

3.1.1 Das Drei-Schritt-Verfahren

Problem 1: Welche **allgemeine Geradengleichung** $w = A + B \cdot v$ passt **bestmöglich** zu der gegebenen Datenlage?

Gesucht: Konstante A und B (optimal).

Die Lösung liefert das folgende

Drei-Schritt-Verfahren:

1. Schritt: Berechne von

- allen Tabellenwerten v_i den Mittelwert $\bar{v} = \frac{v_1 + v_2 + \dots + v_n}{n}$,
- allen Tabellenwerten w_i den Mittelwert $\bar{w} = \frac{w_1 + w_2 + \dots + w_n}{n}$,
- allen Quadraten v_i^2 die Summe $\sum v_i^2 = v_1^2 + v_2^2 + \dots + v_n^2$,
- allen Produkten $v_i w_i$ die Summe $\sum v_i w_i = v_1 w_1 + v_2 w_2 + \dots + v_n w_n$.

2. Schritt: Berechne $B = \frac{\sum v_i w_i - n \bar{v} \bar{w}}{\sum v_i^2 - n \bar{v}^2}$

3. Schritt: Berechne $A = \bar{w} - B \cdot \bar{v}$

3.1.2 Das Ein-Schritt-Verfahren

Problem 2: Die graphische Auswertung der Wertetabelle ergebe, dass die Punkte $(v_i|w_i)$ ungefähr auf einer **Ursprungsgeraden** liegen. Das Drei-Schritt-Verfahren liefert dann i.a. eine Formel $w = A + B \cdot v$ mit A sehr klein (d.h. nahe Null), aber doch $A \neq 0$. Aus sachlichen Gründen geht man aber eventuell davon aus, dass **Proportionalität** zwischen v und w besteht.

Frage: Welche Proportionalitätsformel $w = C \cdot v$ passt bestmöglich?
Gesucht: Konstante C (optimal).

Die Lösung liefert das

Ein-Schritt-Verfahren: Berechne
$$C = \frac{\sum v_i w_i}{\sum v_i^2}.$$

Bezeichnung: Beide Verfahren werden als **lineare Regression** bezeichnet, die berechnete Gerade als **Ausgleichsgerade** zur Wertetabelle.

Bemerkung: Das Drei-Schritt-Verfahren und das Ein-Schritt-Verfahren werden hier als ‘‘Kochrezepte‘‘ vorgestellt. Die Erklärung dafür, wieso man gerade diese Algorithmen benutzt und in welchem Sinne sie ‘‘optimale‘‘ Geraden liefern, benutzt Methoden der Differentialrechnung und wird in 4.7, S.60 ff nachgeliefert.

3.1.3 Wahl zwischen den beiden Verfahren

Wann wählt man bei einer Geraden, die ‘‘ungefähr‘‘ durch den Ursprung läuft, das Ein-Schritt-Verfahren? Antwort: Nicht der Mathematiker, sondern immer nur der Naturwissenschaftler kann mit seinem fachlichen Wissen über die konkret vorliegenden Variablen v und w im Einzelfall entscheiden, ob das Ein-Schritt-Verfahren statt des (normalen) Drei-Schritt-Verfahrens angebracht ist.

Entscheidungskriterium: Ist es im konkret gegebenen Fall aus fachlichen Gründen einleuchtend, dass $w = 0$ sein muss, wenn $v = 0$ ist? Wenn ja, dann Ein-Schritt-Verfahren! Sonst (d.h. wenn nein, oder wenn nicht voraussagbar) Drei-Schritt-Verfahren.

3.1.4 Absicherung des Ergebnisses durch Probe

Zu den Tabellenwerten v_i der Variablen v berechne die zugehörigen Formelwerte $\tilde{w}_i = A + B \cdot v_i$, trage sie in eine zusätzliche, dritte Tabellenrubrik ein und vergleiche mit den vorgegebenen Tabellenwerten w_i . Es muss ungefähre Gleichheit herrschen zwischen w_i und \tilde{w}_i ($i = 1, \dots, n$).

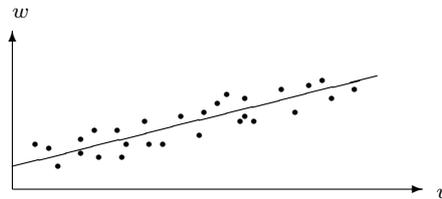
3.1.5 Der Linealtest

WARNUNG: Lineare Regressionsrechnung ist nur erlaubt, wenn zuvor die Wertetabelle in einen Graph übertragen wurde und sich dabei ergab, dass die Punkte $(v_i|w_i)$ tatsächlich ungefähr auf einer Geraden liegen. Aber woran entscheidet sich dies?

Wann soll man befinden, dass die Punkte “ungefähr auf einer Gerade“ liegen?

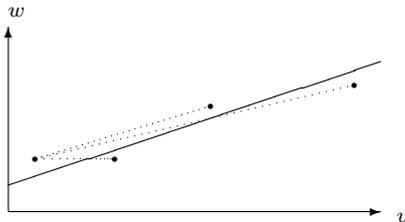
Die Ansprüche an Genauigkeit, mit der die Punkte $(v_i|w_i)$ “ungefähr“ auf einer Geraden liegen sollen, sind je nach fachlichem Zusammenhang sehr unterschiedlich groß:

Bei **medizinischen**, **biologischen** und **sozialwissenschaftlichen** Messdaten hat man es öfter mit “Wolken“ von Punkten zu tun, zu denen man eine Ausgleichsgerade berechnet:

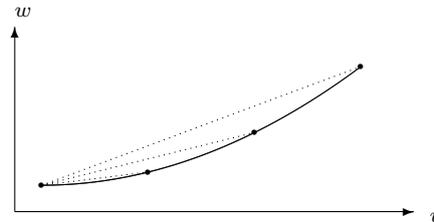


Punktwolke mit Ausgleichsgerade

In der **Physik** und **Chemie** gelten i.a. sehr viel strengere Ansprüche an das Datenmaterial, insbesondere unterscheidet man sehr sorgfältig zwischen Geraden und schwach gebogenen Graphen:



Linealtest für Gerade

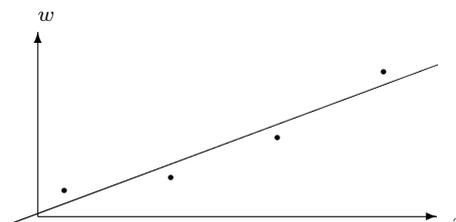


Linealtest für Bogen (Lineal immer steiler gelegt)

Linealtest zur Unterscheidung von Gerade und schwachem Bogen:

Man legt ein Lineal an den ersten (am weitesten links liegenden) Punkt des Graphen und verbindet diesen erst mit dem nächsten, dann mit dem zweitnächsten Punkt usw. Wenn dabei das Lineal wechselweise manchmal steiler, manchmal flacher gelegt werden muss, entscheidet man auf das Vorliegen einer Geraden. Muss das Lineal hingegen entweder stets immer noch steiler oder aber stets immer noch flacher gelegt werden, so liegt ein Bogen vor, keine Gerade.

Falsch bzw. zu grob wäre also das Verwenden von folgender Pseudo-Ausgleichsgeraden (die bei unangebrachter Anwendung von linearer Regression sich ergeben würde):



Kein Fall für eine Ausgleichsgerade

Merke: Wenn die Punkte der Wertetabelle auf einem Bogen liegen, nicht auf einer Geraden, kann man für sie ebenfalls eine Berechnungsformel finden, allerdings mit verfeinerten Verfahren, welche im Anhang B, S.215 ff zusammengefasst dargestellt sind. Alle diese Verfahren gehören zum mathematischen Standardwissen jedes Naturwissenschaftlers.

3.2 Der Gauß-Algorithmus für Lineare Gleichungssysteme

3.2.1 Standardaufgabe der Mischungsrechnung

Gesucht sei die Rezeptur für eine Lösungsportion L mit **vorgeschriebenem Volumen** V_L (in Liter), welche **zwei (oder mehr)** Stoffe A, B, \dots in jeweils **vorgeschriebenen** Konzentrationen $[A]_L, [B]_L, \dots$ (in mol/l) enthalten soll.

Vorgegeben seien (mindestens) **drei (oder mehr)** Standardlösungen L_1, L_2, L_3, \dots , welche A in den bekannten Konzentrationen $[A]_1, [A]_2, [A]_3, \dots$ respektive und B in den bekannten Konzentrationen $[B]_1, [B]_2, [B]_3, \dots$ respektive (usw.) enthalten.

Die Daten in folgender Tabelle sind also wertmäßig bekannt (Fall von 2 Stoffen A, B):

mol/l	L_1	L_2	L_3	L
A	$[A]_1$	$[A]_2$	$[A]_3$	$[A]_L$
B	$[B]_1$	$[B]_2$	$[B]_3$	$[B]_L$

Außerdem ist das vorgeschriebene Volumen V_L der herzustellenden Portion bekannt.

Aufgabe: Berechne x Liter von L_1 , y Liter von L_2 , z Liter von L_3 für V_L Liter von L !

Man erhält aus obiger Tabelle **drei** Gleichungen:

$$\begin{array}{ll}
 \text{(I) Volumengleichung:} & x + y + z = V_L \quad (\text{in Liter}) \\
 \text{(II) Bilanzgleichung für A:} & [A]_1 \cdot x + [A]_2 \cdot y + [A]_3 \cdot z = [A]_L \cdot V_L \quad (\text{in mol}) \\
 \text{(III) Bilanzgleichung für B:} & [B]_1 \cdot x + [B]_2 \cdot y + [B]_3 \cdot z = [B]_L \cdot V_L \quad (\text{in mol})
 \end{array}$$

Mögliche Varianten:

Bei Lösungen: Angabe der Konzentrationen z.B. in g/l (Massenkonzentration). Ergibt Bilanzgleichungen in g (statt in mol).

Bei Gemischen: Von der herzustellenden Portion ist nicht das Volumen, sondern die Masse (in g) vorgeschrieben, die Konzentrationen sind in g(Komponente)/100g(Gemisch) (= Massenanteil in %) angegeben. Das ergibt statt der Volumengleichung (in Liter) eine Massengleichung (in g) und lauter Bilanzgleichungen in g (statt in mol).

Stets ergibt sich ein sogenanntes **Lineares Gleichungssystem**, aus dem die Unbekannten x, y, z, \dots zu berechnen sind.

Die aus der Schule bekannten Einsetzverfahren und Gleichsetzungsverfahren und Zeilensummiervorgang mit ihren zahllosen Wahlmöglichkeiten sind bei mehr als zwei Gleichungen und mehr als zwei Unbekannten hochgradig anfällig für Rechenfehler und logischen Wirrwarr (es besteht die Gefahr, dass Gleichungen verloren gehen und/oder dass man im Kreise rechnet und nach etlichen Rechenschritten wieder bei Zwischenresultaten landet, die man längst vorher auch schon mal hatte). Ein Profi-Verfahren für große Gleichungssysteme (mit einer zwei- oder dreistelligen Zahl von Gleichungen und Unbekannten) ohne jede Wahlmöglichkeit bei der Durchführung, nicht schnell, aber dafür sehr sicher, weil völlig standardisiert, gut in ein Computerprogramm umsetzbar und garantiert immer ohne die Gefahr des "Rechnens im Kreise" zum Endergebnis führend, ist der sogenannte **Gauß¹-Algorithmus zur Lösung von n sog. linearen Gleichungen mit n Unbekannten ($n \geq 2$)**. Erklärt sei er zunächst am Beispiel $n = 3$:

¹Carl Friedrich Gauß (1777 - 1855), deutscher Mathematiker

3.2.2 Gauß-Algorithmus im Falle $n = 3$

Ausgangslage:

$$\begin{aligned} \text{(I)} \quad & a_1x + a_2y + a_3z = a_4 \\ \text{(II)} \quad & b_1x + b_2y + b_3z = b_4 \\ \text{(III)} \quad & c_1x + c_2y + c_3z = c_4 \end{aligned}$$

Außer x, y, z sind alle Eintragungen als Zahlen bekannt. Etliche der a_i, b_i, c_i können $= 0$ sein.

1. Arbeitsgang:

1. Schritt: Hat das Ziel, an die Stelle a_1 (= linke obere Ecke) eine 1 zu bringen.

Durchführung:

- Ordne die Gleichungen (I) bis (III) so an, dass $a_1 \neq 0$ ist (ggf. Zeilen vertauschen).
- Wenn danach noch $a_1 \neq 1$ ist, dividiere die gesamte Zeile (I) durch a_1 , ergibt (I').
- Kopiere die nachfolgenden Zeilen (II) und (III).

Ergebnis:

$$\begin{aligned} \text{(I')} \quad & x + a_2'y + a_3'z = a_4' \\ \text{(II)} \quad & b_1x + b_2y + b_3z = b_4 \\ \text{(III)} \quad & c_1x + c_2y + c_3z = c_4 \end{aligned}$$

(Die gestrichelten Zahlen haben ihren Wert geändert.)

2. Schritt: Hat das Ziel, die Spalte unter dem x in der linken oberen Ecke zu leeren.

Durchführung:

- Kopiere (I').
- Ersetze (II) durch $b_1 \cdot \text{(I')} - \text{(II)}$, ergibt (II').
- Ersetze (III) durch $c_1 \cdot \text{(I')} - \text{(III)}$, ergibt (III').

Ergebnis:

$$\begin{aligned} \text{(I')} \quad & x + a_2'y + a_3'z = a_4' \\ \text{(II')} \quad & b_2'y + b_3'z = b_4' \\ \text{(III')} \quad & c_2'y + c_3'z = c_4' \end{aligned}$$

Die Zeilen (II') und (III') bilden ein **kleineres lineares Gleichungssystem** mit einer Gleichung und einer Unbekannten weniger als vorher. **Wiederhole daran den 1. Arbeitsgang analog.** Dabei Zeile (I') stets kopieren (sonst Verlustgefahr...).

2. Arbeitsgang (analog zum 1. Arbeitsgang):

1. Schritt: Hat das Ziel, an die Stelle b_2' (= linke obere Ecke des reduzierten Systems) eine 1 zu bringen.

Durchführung:

- Kopiere (I').
- Ordne die Gleichungen (II') bis (III') so an, dass $b_2' \neq 0$ ist (ggf. Zeilen vertauschen).
- Wenn danach noch $b_2' \neq 1$ ist, dividiere die gesamte Zeile (II') durch b_2' , ergibt (II'').
- Kopiere Zeile (III').

Ergebnis:

$$\begin{aligned} \text{(I')} \quad & x + a_2'y + a_3'z = a_4' \\ \text{(II'')} \quad & y + b_3''z = b_4'' \\ \text{(III')} \quad & c_2'y + c_3'z = c_4' \end{aligned}$$

2. Schritt: Hat das Ziel, die Spalte unter dem y in Zeile (II'') zu leeren.

Durchführung:

- Kopiere (I').
- Kopiere (II').
- Ersetze (III') durch $c_2' \cdot \text{(II'')} - \text{(III')}$, ergibt (III'').

$$\begin{array}{l} \text{Ergebnis:} \\ \text{(I')} \quad x + a_2'y + a_3'z = a_4' \\ \text{(II'')} \quad \quad y + b_3''z = b_4'' \\ \text{(III'')} \quad \quad \quad c_3''z = c_4'' \end{array}$$

Das ursprüngliche Gleichungssystem mit 3 Gleichungen für 3 Unbekannte ist in zwei analogen Arbeitsgängen **auf Dreiecksgestalt gebracht worden**, d.h. dass jede nachfolgende Zeile eine Unbekannte weniger enthält als die darüberstehende Zeile. Danach kommt die Schlussrechnung und die Probe:

Schlussrechnung:

- Berechne z aus (III''), danach
- berechne y aus (II''), danach
- berechne x aus (I').

Probe: Setze die errechneten Zahlwerte von x, y, z in die linke Seite der **ursprünglichen Gleichungen (I), (II), (III)** ein. Bei richtiger Lösung müssen sich die die Zahlwerte a_4, b_4, c_4 ergeben, also die rechte Seite der Gleichungen (I), (II), (III).

3.2.3 Gauß-Algorithmus für $n = 2$ oder $n \geq 4$

$n = 2$: Wenn man nur zwei Unbekannte x, y und zwei Gleichungen (I), (II) hat, ist bereits nach dem 1. Arbeitsgang die Dreiecksgestalt erreicht:

$$\begin{array}{l} \text{(I')} \quad x + a_2'y = a_3' \\ \text{(I'')} \quad \quad b_2'y = b_3' \end{array}$$

Es folgt schon die Schlussrechnung (berechne y aus (II'), danach x aus (I')) und die Probe.

$n \geq 4$: Wenn man mehr als drei Unbekannte hat, nennt man sie statt x, y, z, \dots gern x_1, x_2, \dots, x_n . Den 1. und 2. Schritt wiederholt man bei n Unbekannten in $n - 1$ analogen Arbeitsgängen, wobei in jedem folgenden Arbeitsgang das Gleichungssystem um eine Zeile und eine Unbekannte gegenüber vorher reduziert ist. Dann ist Dreiecksgestalt erreicht und es erfolgt die Schlussrechnung (berechne x_n aus der letzten Gleichung, danach x_{n-1} aus der vorletzten usw.), danach die Probe.

3.2.4 Anwendung auf die Standardaufgabe der Mischungsrechnung

Mischungsregel 1:

Sind bei einem Mischungsverfahren die Konzentrationen von n Stoffen A_1, A_2, \dots, A_n zu kontrollieren, so braucht man mindestens $n + 1$ Edukte L_1, \dots, L_n, L_{n+1} (mehr sind jederzeit erlaubt, s.u.) und $n + 1$ Gleichungen (1 Volumen-, bzw- Massengleichung und n Bilanzgleichungen²). Auch reines Lösungsmittel kann als ein Edukt (mit Konzentrationen $[A] = [B] = \dots = 0$) auftreten.

²siehe S.26

Also: Bei 2 Stoffen 3 Gleichungen mit 3 Unbekannten und 2 Arbeitsgänge vor der Schlussrechnung, bei 3 Stoffen 4 Gleichungen mit 4 Unbekannten und 3 Arbeitsgänge vor der Schlussrechnung usw.

Mischungsregel 2:

Durch unmögliche Anforderungen kann man Gleichungssysteme erzeugen, die mathematisch unlösbar sind (z.B. weil zugleich $x = 1$ und $x = 3$ sein soll) oder aber für den Anwender unsinnige Ergebnisse liefern (z.B. wenn in einer Mischungsrechnung für eine Mengenangabe x oder $y \dots$ ein negativer Wert herauskommt). In beiden Fällen ist die Herstellung des Produkts aus den gegebenen Edukten nicht möglich.

3.2.5 Mischungsrechnung bei überschüssiger Anzahl von Edukten

Mischungsregel 1 besagt, dass man zur Kontrolle von n Stoffen $n+1$ Edukte bereitstellen muss, damit eine reale Chance auf Machbarkeit besteht. Diese Chance verbessert sich natürlich immer weiter, je mehr zusätzliche Edukte man einbezieht. Die Anzahl der Edukte sei $m \geq n+2$. Man bekommt dann ein **lineares Gleichungssystem mit mehr Unbekannten als Gleichungen**, nämlich $n+1$ Gleichungen mit m Unbekannten. Nach n analogen Arbeitsgängen ist die Dreiecksgestalt erreicht, aber für ein komplettes Dreieck fehlen die letzten Zeilen. (Dieser Fall tritt z.B. auch dann ein, wenn in (III'') zufällig c_3'' und c_4'' beide $=0$ werden.)

Die Schlussrechnung verläuft dann anders, wie hier nur am Beispiel eines überschüssigen Edukts angedeutet werden soll.

Beispiel: 2 zu kontrollierende Stoffe, 4 Edukte. Liefert eine Volumen- und zwei Bilanzgleichungen für vier Unbekannte x, y, z, u . Nach 2 Arbeitsgängen ergibt sich folgende **unvollständige Dreiecksgestalt**:

$$\begin{array}{l} \text{(I')} \quad x + a_2'y + a_3'z + a_4'u = a_5' \\ \text{(II'')} \quad \quad y + b_3''z + b_4''u = b_5'' \\ \text{(III'')} \quad \quad \quad z + c_4''u = c_5'' \end{array}$$

Nun schafft man alle überschüssigen Unbekannten (hier: u) auf die andere Seite um eine vollständige Dreiecksgestalt zu erreichen:

$$\begin{array}{l} \text{(I')} \quad x + a_2'y + a_3'z = a_5' - a_4'u \\ \text{(II'')} \quad \quad y + b_3''z = b_5'' - b_4''u \\ \text{(III'')} \quad \quad \quad z = c_5'' - c_4''u \end{array}$$

In der nicht anwendungsbezogenen Mathematik sagt man nun: Die Werte der überschüssigen Unbekannten auf der rechten Seite der Gleichungen sind alle unabhängig voneinander frei wählbar. Setzt man für sie irgendwelche gewählten Zahlen ein, so kann man anschließend stets die Unbekannten der linken Seite mit der üblichen Schlussrechnung ausrechnen (Unlösbarkeit tritt also nicht auf).

In der Mischungsrechnung wird es jetzt wesentlich komplizierter, weil alle Unbekannten ≥ 0 sein müssen. Unlösbarkeit ist immer noch nicht ausgeschlossen. Das Verfahren, "blind" für

die überschüssigen Unbekannten irgendwelche positiven Werte einzusetzen und dann einfach auszurechnen, ob hoffentlich auch alle anderen Unbekannten dann positive Werte annehmen, ist aus zwei Gründen mathematisch unbefriedigend. Erstens lässt es im ungünstigen Fall nicht erkennen, ob man beim Einsetzen anderer Werte (welcher!?) mehr Glück haben könnte oder aber überhaupt keine positiven Lösungen existieren, so dass dieses Probieren ein endloses und hoffnungsloses Geschäft wäre. Und zweitens hat man im günstigen Fall nicht die Chance, unter der Fülle aller möglichen Lösungen planmäßig wählen zu können. Deshalb ist es üblich, jetzt die Menge **aller** positiven Lösungen zu suchen. Und damit beginnt i.a. der Hauptrechenaufwand erst jetzt.

Hier sei nur ein Miniatur-Zahlenbeispiel (1 zu kontrollierender Stoff, 3 Edukte) vorgestellt: Aus der 1 Volumengleichung und 1 Bilanzgleichung erhält man (z.B.) nach 1 Arbeitsgang folgende unvollständige Dreiecksgestalt:

$$\begin{array}{rcl} \text{(I)} & x & + y + z = 0,4 \\ \text{(II')} & & y + 2z = 1 \end{array}$$

und, nachdem man z auf die andere Seite gebracht hat, eine vollständige Dreiecksgestalt:

$$\begin{array}{rcl} \text{(I')} & x & + y = 0,4 - z \\ \text{(II'')} & & y = 1 - 2z \end{array}$$

Aus der Bedingung $y \geq 0$ folgt mit der letzten Zeile (II'')

$$\begin{array}{rcl} 1 - 2z \geq 0 & | & + 2z \\ 1 \geq 2z & | & : 2 \\ 0,5 \geq z & & \end{array}$$

gepaart mit der Anforderung $z \geq 0$ also die Bedingung $0 \leq z \leq 0,5$.

Aus der Bedingung $x + y \geq 0$ folgt mit der vorletzten Zeile (I'), dass zusätzlich

$$0,4 - z \geq 0$$

sein muss, also $z \leq 0,4$. Kombination aller Bedingungen an z , wie sie sich aus den einzelnen Zeilen des Gleichungssystems ergeben, liefert für z letztlich die zulässige Bandbreite

$$0 \leq z \leq 0,4.$$

Jetzt erst gilt: Setzt man in der vollständigen Dreiecksgestalt für z irgend einen Wert ein, der **innerhalb der zulässigen Bandbreite** frei gewählt ist, so kann man y und x daraus eindeutig berechnen, d.h. jeder zulässige Wert von z liefert eine Lösung des Gleichungssystems.

Am obigen kleinen Rechenbeispiel erkennt man schon: Wenn man die Reihenfolge der Unbekannten vertauscht, kann man jede von ihnen in die Rolle der Überschüssigen bringen. Das bedeutet: Für eine überschüssige Unbekannte eigener Wahl kann man die zulässige Bandbreite von Werten bestimmen und dann einen zulässigen Wert frei wählen. **Man hat also einen Wunsch frei.** Dabei wird man so verfahren, dass man etwa von dem teuersten Edukt die zulässige Bandbreite ermittelt und dann die geringste zulässige Menge davon wählt (= Kostenminimierung) oder von dem am bequemsten zu beschaffenden Edukt die zulässige

Bandbreite ermittelt und davon die größte zulässige Menge wählt (=Verfahrensoptimierung) usw.

Bei mehr als einer überschüssigen Unbekannten sind die Werte der überschüssigen Unbekannten i.a. nicht unabhängig voneinander wählbar, sondern nur in gewissen Wertekombinationen. Die Bestimmung der zulässigen Wertekombinationen für diese Unbestimmten und erst recht die Bestimmung der optimalen unter diesen zulässigen Wertekombinationen ist so kompliziert, dass ein eigenes Spezialgebiet der Angewandten Mathematik (die sog. "Lineare Optimierung") sich damit befasst, Algorithmen hierfür zu liefern. Diese sind i.a. so rechenaufwendig, dass sie (außer in Miniaturbeispielen für Unterrichtszwecke) nur computergestützt anwendbar sind. Wie beim Gauß-Algorithmus ist ein wichtiges Problem dabei, dass das Verfahren garantiert niemals "im Kreise" arbeitet, sondern nach garantiert endlich vielen (und dazu möglichst wenigen) Schritten zu einem Endergebnis führt.

Verfahren der Linearen Optimierung spielen in der gesamten Industrie und Wirtschaft eine sehr große Rolle, die mit der zunehmenden Kapazität der Computer immer noch wächst.

3.3 Konvergente Folgen

3.3.1 Grundbegriffe

Eine unendliche Folge von Zahlen a_1, a_2, a_3, \dots (abgekürzt: eine **Folge**) kann man sich wie in einer Einkaufsrechnung in einer Kolonne untereinander geschrieben vorstellen, auf einem endlos langen Papierstreifen. Jede Zahl der Folge heißt ein **Folglied**.

Die Zahlwerte innerhalb einer Folge können sich beliebig oft wiederholen. Trotzdem kann man die Folglieder anhand ihrer Position (= Zeilennummer innerhalb der Liste = der sog. **Indexwert** des Folgliedes) unterscheiden: a_1 ist die Zahl in der 1. Zeile, a_{90} ist die Zahl in der 90. Zeile ...

Alle Folglieder derselben Folge haben als **Namensbezeichnung denselben Buchstaben, gefolgt von dem tiefgestellten Indexwert**. Folglieder einer anderen Folge müssen mit einem anderen Buchstaben bezeichnet werden, wieder gefolgt vom jeweiligen Indexwert: Jedes Folglied der Folge a_1, a_2, a_3, \dots hat also einen Namen der Bauart a_n mit $n \in \mathbb{N}$ (mit gleicher Bedeutung könnte man auch sagen: a_k mit $k \in \mathbb{N}$, oder: a_i mit $i \in \mathbb{N}$, d.h. der Name der Indexvariablen ist gleichgültig), während N_{17} nur ein Glied der Folge N_1, N_2, N_3, \dots sein kann.

Dabei gilt wieder die Konvention: Wenn eine Zahlfolge nur aus ganzzahligen Folgliedern besteht, benutzt man gern kleine Buchstaben aus der Mitte des Alphabets, etwa n_1, n_2, n_3, \dots oder k_1, k_2, k_3, \dots usw. In Anwendungen benutzt man gern eine Bezeichnung, in der die Bedeutung der Zahlen zum Ausdruck kommt, etwa T_1, T_2, T_3, \dots , wenn es sich um lauter Temperaturwerte (in Kelvin) handelt.

Beispiel: Die Folge m_1, m_2, m_3, \dots beginne mit $1, 2, 3, 1, 2, \boxed{3}, 4, 1, 2, 3, 4, 5, 1, 2, 3, \dots$. Das eingekästelte Folglied hat den Zahlwert 3, den Indexwert 6 und den Namen m_6 . Es gilt in diesem Beispiel $m_3 = m_6 = m_{10} = m_{15}$.

Bezeichnungen für Folgen:

- Zwei Folgen a_1, a_2, a_3, \dots und b_1, b_2, b_3, \dots heißen **gleich**, wenn $a_n = b_n$ ist für alle $n = 1, 2, 3, \dots$
- Eine Folge a_1, a_2, a_3, \dots heißt **konstant**, wenn alle Folgenglieder denselben Zahlwert haben, d.h. wenn $a_1 = a_2 = a_3 = \dots$
- Eine Folge a_1, a_2, a_3, \dots heißt **monoton wachsend**, wenn $a_1 \leq a_2 \leq a_3 \dots$ (anders gesagt: wenn $a_n \leq a_{n+1}$ für alle $n \in \mathbb{N}$), **streng monoton wachsend**, wenn $a_1 < a_2 < a_3 \dots$ (anders gesagt: wenn $a_n < a_{n+1}$ für alle $n \in \mathbb{N}$).
Sie heißt **monoton fallend**, wenn $a_1 \geq a_2 \geq a_3 \dots$ (anders gesagt: wenn $a_n \geq a_{n+1}$ für alle $n \in \mathbb{N}$), sie heißt **streng monoton fallend**, wenn $a_1 > a_2 > a_3 \dots$ (anders gesagt: wenn $a_n > a_{n+1}$ für alle $n \in \mathbb{N}$).
(Nur) konstante Folgen sind zugleich monoton wachsend und monoton fallend.
- Eine Folge a_1, a_2, a_3, \dots heißt **nach oben beschränkt**, wenn es eine Konstante C gibt, die mindestens so groß ist wie alle Folgenglieder. In diesem Fall heißt die Konstante eine **obere Schranke** der Folge:

$$a_n \leq C \text{ für alle } n \in \mathbb{N}.$$

Mit C ist dann aber auch jede Zahl $> C$ ebenfalls eine obere Schranke derselben Folge. Eine nach oben beschränkte Folge besitzt also keine größte obere Schranke, wohl aber eine kleinste.

Eine Folge a_1, a_2, a_3, \dots heißt **nach unten beschränkt**, wenn es eine Konstante C gibt, die mindestens so klein ist wie alle Folgenglieder. In diesem Fall heißt die Konstante eine **untere Schranke** der Folge:

$$C \leq a_n \text{ für alle } n \in \mathbb{N}.$$

Mit C ist dann aber auch jede Zahl $< C$ ebenfalls eine untere Schranke derselben Folge. Eine nach unten beschränkte Folge besitzt also keine kleinste untere Schranke, wohl aber eine größte. Beispiel: Die Folge der natürlichen Zahlen $1, 2, 3, \dots$ ist streng monoton wachsend und nicht nach oben beschränkt. Ihre größte untere Schranke ist $C = 1$. Die Folge $\frac{1}{2}, \frac{1}{3}, \frac{1}{4}, \dots$ ist streng monoton fallend und nach oben und unten beschränkt. $C = \frac{1}{2}$ ist die kleinste obere, $C = 0$ ist die größte untere Schranke.

- Eine Zahl \hat{a} heißt **Grenzwert** oder **Limes** der Folge a_1, a_2, a_3, \dots

$$(\text{Schreibweise: } \lim a_n = \hat{a}, \text{ oder ausführlicher: } \lim_{n \rightarrow \infty} a_n = \hat{a}),$$

wenn für jedes (!) kleine positive ε (z.B. $= 10^{-k}$) gilt: Mit Ausnahme endlich vieler Indexwerte unterscheiden sich die Zahlwerte aller übrigen Folgenglieder von \hat{a} um höchstens $\pm\varepsilon$. Anders gesagt, es gilt:

$$\hat{a} - \varepsilon \leq a_n \leq \hat{a} + \varepsilon \text{ für alle } n \in \mathbb{N} \text{ mit endlich vielen Ausnahmen.}$$

Man sagt dann auch: Die Folge a_1, a_2, a_3, \dots **strebt (konvergiert) gegen \hat{a}** ,

$$(\text{Schreibweise: } a_n \rightarrow \hat{a}).$$

Merke: $\lim a_n = \hat{a}$ und $a_n \rightarrow \hat{a}$ bedeuten dasselbe. (Falsch: $\lim a_n \rightarrow \hat{a}$)

Bemerkung: Im Falle $a_n \rightarrow \hat{a}$ gilt: Je kleiner $\varepsilon > 0$, umso größer wird die Zahl der Ausnahmen, d.h. für umso mehr Indexwerte n liegen die Zahlwerte a_n außerhalb der Bandbreite $\hat{a} \pm \varepsilon$, aber stets nur für endlich viele. Daher gibt es zu jedem $\varepsilon > 0$ einen Indexwert n_ε , von dem ab dann gar keine weiteren Folgenglieder mehr außerhalb der Bandbreite $\hat{a} \pm \varepsilon$ liegen.

- Folgen, die gegen keinen Grenzwert streben, heißen **divergent**.

Beispiel: Die Folge $1, 2, 3, \dots$ ist nach oben unbeschränkt und divergent, die Folge $1, -1, 1, -1, \dots$ ist nach oben und unten beschränkt und divergent. Die Folge $\frac{1}{2}, \frac{1}{3}, \frac{1}{4}, \dots$ konvergiert gegen den Grenzwert 0.

- Die unendlich vielen Punkte $(n|a_n)$, ($n = 1, 2, 3, \dots$), in ein Koordinatensystem eingetragen, heißen der (vollständige) **Graph der Folge** a_1, a_2, a_3, \dots

Definition von stetigen Funktionen: Die Funktion $y = f(x)$ heißt **stetig**, wenn für alle x_n, \hat{x} aus dem Definitionsbereich von f gilt: Aus $x_n \rightarrow \hat{x}$ folgt stets $f(x_n) \rightarrow f(\hat{x})$.

Graphische Bezeichnung: Ist $y = \hat{a}$ eine beliebige horizontale Gerade und ε eine kleine positive Zahl, so heißt die Fläche (= schmaler horizontaler Streifen) zwischen der (etwas niedrigeren) horizontalen Geraden $y = \hat{a} - \varepsilon$ und der (etwas höheren) horizontalen Geraden $y = \hat{a} + \varepsilon$ der **ε -Schlauch um \hat{a}** .

Graphischer Konvergenztest:

Die Folge a_1, a_2, a_3, \dots strebt genau dann gegen den Grenzwert \hat{a} , wenn ihr Graph die horizontale Gerade $y = \hat{a}$ als Asymptote besitzt,

d.h. wenn für **jedes** noch so kleine positive ε gilt: Bis auf endlich viele Ausnahmen liegen alle Punkte des Graphen der Folge im ε -Schlauch um \hat{a} .

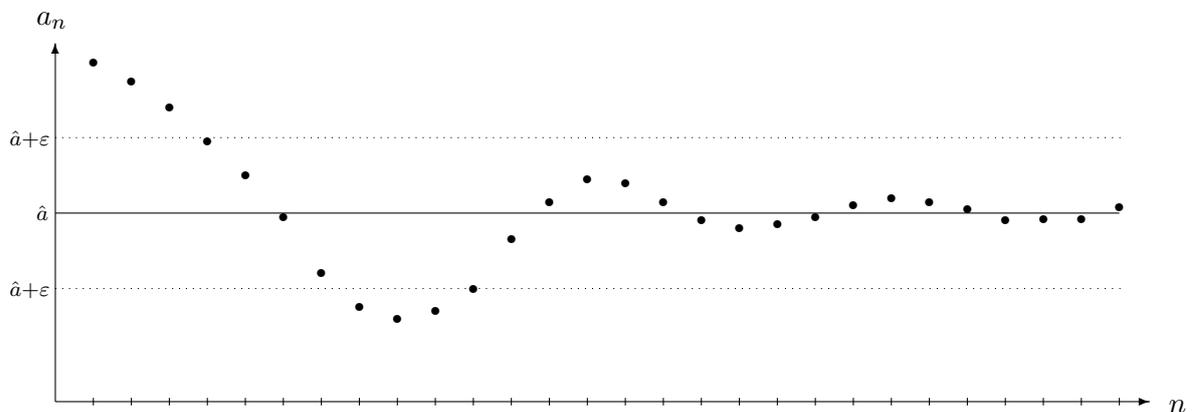


Abbildung 3.1: Graph einer konvergenten Folge

3.3.2 Spezielle Typen von Folgen: Monotone und alternierende Konvergenz

Jede konvergente Folge ist nach oben und unten beschränkt, aber nicht jede nach oben und unten beschränkte Folge ist konvergent (s. Gegenbeispiel $1, -1, 1, -1, 1, -1, \dots$). Es gilt aber

R 5 Regel 5 (Monotone Konvergenz):

Jede Folge, die monoton wachsend und **nach oben beschränkt** ist, besitzt einen Grenzwert. Dieser ist zugleich ihre **kleinste obere Schranke**.

Jede Folge, die monoton fallend und **nach unten beschränkt** ist, besitzt einen Grenzwert. Dieser ist zugleich ihre **größte untere Schranke**.

Monoton wachsende Folgen ohne obere Schranke besitzen auch keinen Grenzwert, ebenso besitzen monoton fallende Folgen ohne untere Schranke keinen Grenzwert.

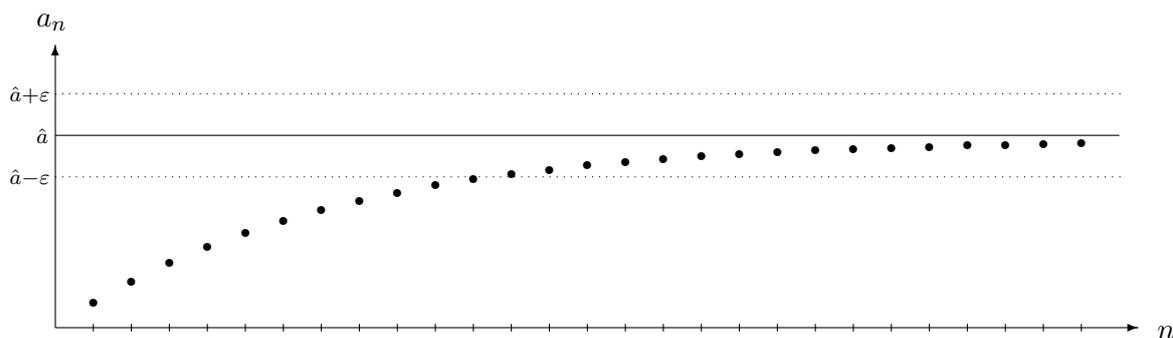


Abbildung 3.2: Graph einer Folge bei monoton wachsender Konvergenz

WARNUNG: Ob eine monoton wachsende Folge eine obere Schranke C besitzt, ist nicht aus dem Graph abzulesen, sondern muss argumentativ entschieden werden. Es gibt Folgen, die wachsen unbeschränkt, aber so langsam, dass der trügerische optische Eindruck besteht, sie seien nach oben beschränkt. (Beispiel: $a_n = \lg n$, $n = 1, 2, 3, \dots$).

Die analoge Warnung gilt für monoton fallende Folgen, wenn sie auch negative Werte annehmen (andernfalls ist $C = 0$ eine untere Schranke).

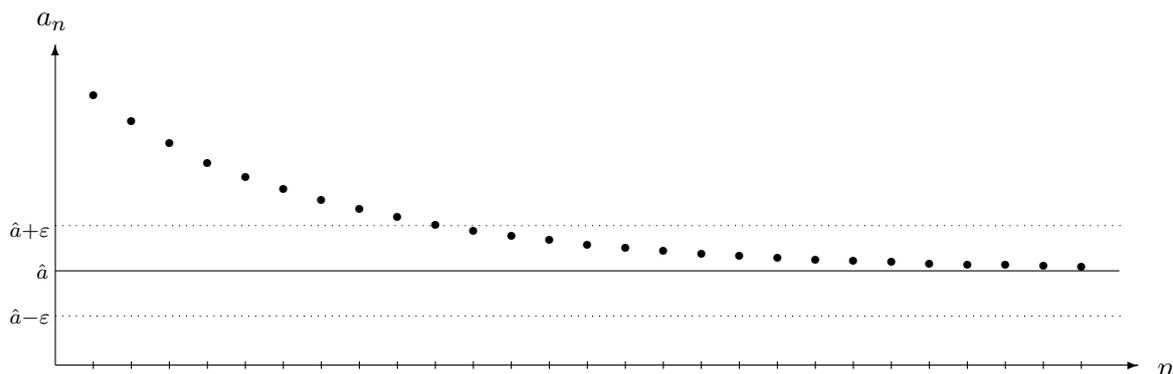


Abbildung 3.3: Graph einer Folge bei monoton fallender Konvergenz

Bei monoton wachsenden und monoton fallenden Folgen ist das Konvergenzverhalten also besonders übersichtlich. Bei einem dritten Typ von Folgen ebenfalls:

Regel 6 (Alternierende Konvergenz):

R 6

Sei $c \in \mathbb{R}$ und $d_1, d_2, d_3 \dots$ eine Folge positiver Zahlen, die monoton fallend gegen den Grenzwert 0 konvergiert. Dann konvergiert die Folge, die aus c durch abwechselndes Addieren und Subtrahieren (oder Subtrahieren und Addieren) aller d_n entsteht, d.h. die Folge

$$\begin{aligned} a_1 &= c + d_1 \\ a_2 &= c + d_1 - d_2 \\ a_3 &= c + d_1 - d_2 + d_3 \\ &\vdots \\ a_n &= c + d_1 - d_2 + d_3 - \dots \pm d_n \\ &\vdots \end{aligned}$$

gegen einen Grenzwert \hat{a} , der zwischen a_n und a_{n+1} liegt (für alle $n \in \mathbb{N}$).

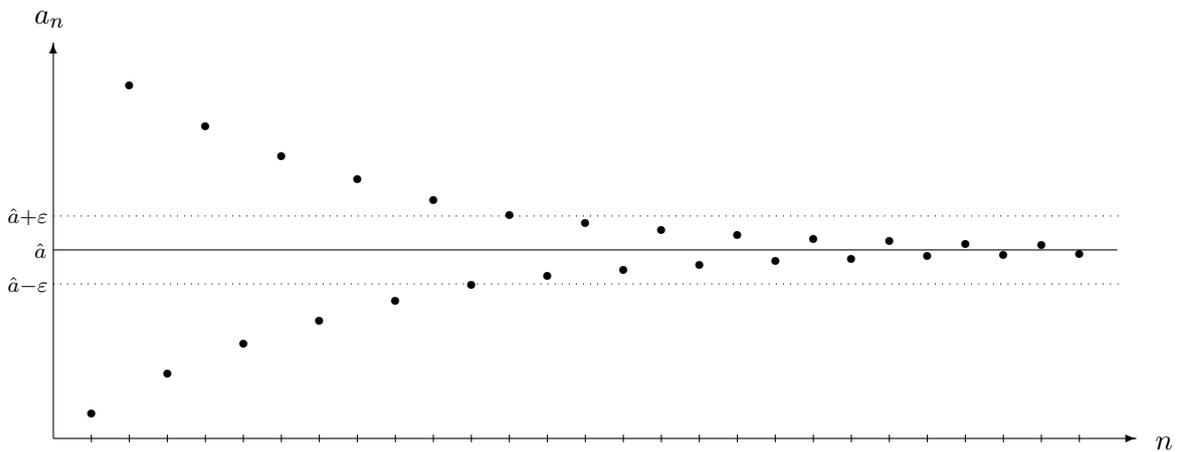


Abbildung 3.4: Graph einer Folge bei alternierender Konvergenz

3.3.3 Grenzwertregeln und summatorische Folgen

Allgemeine Grenzwertregeln

- (G.1) Aus $a_n \rightarrow \hat{a}$ und $c \in \mathbb{R}$ folgt $c \cdot a_n \rightarrow c \cdot \hat{a}$ **Faktorregel**
- (G.2) Aus $a_n \rightarrow \hat{a}$ und $b_n \rightarrow \hat{b}$ folgt $a_n \pm b_n \rightarrow \hat{a} \pm \hat{b}$ **Summenregel**
- (G.3) Aus $a_n \rightarrow \hat{a}$ und $b_n \rightarrow \hat{b}$ folgt $a_n \cdot b_n \rightarrow \hat{a} \cdot \hat{b}$ **Produktregel**
- (G.4) Aus $a_n \rightarrow \hat{a}$ und $b_n \rightarrow \hat{b}$ folgt,
wenn außerdem $\hat{b} \neq 0$ ist, $\frac{a_n}{b_n} \rightarrow \frac{\hat{a}}{\hat{b}}$ **Quotientenregel**

Bezeichnung: Aus einer gegebenen Folge a_1, a_2, a_3, \dots kann man dadurch eine neue Folge s_1, s_2, s_3, \dots erzeugen, dass man die Folgenglieder a_n nacheinander aufsummiert und die sämtlichen Zwischenergebnisse notiert, also

$$\begin{aligned} s_1 &= a_1 \\ s_2 &= a_1 + a_2 \\ s_3 &= a_1 + a_2 + a_3 \\ &\vdots \\ s_{n-1} &= a_1 + a_2 + a_3 + \dots + a_{n-1} \\ s_n &= a_1 + a_2 + a_3 + \dots + a_{n-1} + a_n \\ &\vdots \end{aligned}$$

Die so gebildete Folge s_1, s_2, s_3, \dots heißt die zur Folge a_1, a_2, a_3, \dots gehörige **summatorische Folge** oder die **Reihe über die a_n** ,

$$\text{Traditionelle Schreibweise: } \sum a_n \text{ oder genauer: } \sum_{n=1}^{\infty} a_n$$

Wenn die summatorische Folge gegen einen Grenzwert \hat{s} konvergieren soll, dürfen sich s_n und s_{n-1} mit wachsendem n immer weniger voneinander unterscheiden (da ja beide gegen \hat{s} streben), d.h. dann müssen die a_n gegen den Grenzwert 0 streben. Das allein ist aber i.a. noch keine Garantie für Konvergenz. Das berühmteste Gegenbeispiel ist die summatorische Folge zur Folge $1, \frac{1}{2}, \frac{1}{3}, \frac{1}{4}, \dots$. Sie ist monoton wachsend und nicht nach oben beschränkt (also divergent nach *Regel 5*) und heißt “die **harmonische Reihe**“.

Jetzt lässt sich *Regel 6* so aussprechen:

R 6' **Regel 6 (neue Fassung):**

Ist d_1, d_2, d_3, \dots eine **monoton fallende Folge positiver Zahlen** mit Grenzwert Null, so ist die zur Folge $d_1, -d_2, d_3, -d_4, d_5, -d_6, \dots$ gehörige summatorische Folge **alternierend konvergent**.

Schwieriger ist die Frage der Konvergenz zu entscheiden für die zur monoton fallenden Folge d_1, d_2, d_3, \dots selbst gehörige summatorische Folge. Da alle ihre Summanden d_n positives Vorzeichen haben, ist sie streng monoton wachsend. Folglich besteht die Gefahr, dass sie keine obere Schranke besitzt und daher auch keinen Grenzwert hat.

Besonders wichtig ist der Spezialfall $d_n = c^n$, wobei $c \in \mathbb{R}$ eine Konstante ist. Wir untersuchen ihn jetzt:

R 7 **Regel 7 (Grenzwert der Folge c^n , ($n = 0, 1, 2, \dots$)):**

Für $-1 < c < 1$ gilt stets

$$\lim_{n \rightarrow \infty} c^n = 0$$

und zwar ist die Folge **monoton fallend konvergent**, wenn $0 \leq c < 1$, **hingegen alternierend konvergent**, wenn $-1 < c < 0$.

Für $c > 1$ ist die Folge c^n ($n = 1, 2, 3, \dots$) monoton wachsend und nach oben unbeschränkt, also divergent, für $c < -1$ ist die Folge c^n ($n = 1, 2, 3, \dots$) nach oben und unten unbeschränkt, also divergent.

Bezeichnung: Ist $c \in \mathbb{R}$, so heißt die zur Folge $1 (= c^0), c, c^2, c^3, \dots$ gehörige summatorische Folge

$$\sum_{n=0}^{\infty} c^n \text{ eine geometrische Reihe.}$$

Ihre endlichen Teilsummen $s_n = 1 + c + c^2 + c^3 + \dots + c^n$ ($n = 1, 2, 3, \dots$) heißen **geometrische Summen**.

Das Konvergenzverhalten der geometrischen Reihe hängt vom Zahlwert der Konstanten c ab: Für $c \geq 1$ und für $c \leq -1$ streben die Potenzen c^n nach *Regel 7* nicht gegen 0, daher kann die zugehörige summatorische Folge nicht konvergieren.

Für $0 < c < 1$ liegt $-c$ zwischen 0 und -1 und die Potenzen $(-c)^n$ unterscheiden sich von den monoton fallend gegen 0 strebenden c^n nur durch das wechselnde Vorzeichen. Daher ist die zu $-c$ gehörige geometrische Reihe alternierend konvergent nach *Regel 6*.

Bleibt der Fall $0 < c < 1$ selber zu klären. Hier hilft

Regel 8 (Geometrische Summenformel):

R 8

Für konstantes $c \in \mathbb{R}$ mit $c \neq 1$ gilt stets: $1 + c + c^2 + c^3 + \dots + c^{n-1} = \frac{1 - c^n}{1 - c}$.

Beweis : Multipliziere beide Seiten der Gleichung mit $(1 - c)$ und rechne dann die linke Seite nach dem Distributivgesetz aus. \square

Für $-1 < c < 1$ gilt nach *Regel 7* $c^n \rightarrow 0$, mit den allgemeinen Grenzwertregeln folgt

$$\begin{aligned} \frac{1}{1-c} \cdot c^n &\xrightarrow{(G.1)} \frac{1}{1-c} \cdot 0 \\ \frac{c^n}{1-c} &\longrightarrow 0 \\ \frac{1}{1-c} - \frac{c^n}{1-c} &\xrightarrow{(G.2)} \frac{1}{1-c} - 0 \\ \frac{1-c^n}{1-c} &\longrightarrow \frac{1}{1-c} \\ 1 + c + c^2 + c^3 + \dots + c^{n-1} &\longrightarrow \frac{1}{1-c} \end{aligned}$$

Damit erhalten wir

Regel 9 (Grenzwert der geometrischen Reihe):

R 9

Für $-1 < c < 1$ gilt

$$\lim_{n \rightarrow \infty} (1 + c + c^2 + \dots + c^n) = \frac{1}{1-c},$$

und zwar mit monoton wachsender Konvergenz für positives c , mit alternierender Konvergenz für negatives c .

Für $c > 1$ ebenso wie für $c < -1$ ist die geometrische Reihe divergent.

3.3.4 Anwendung: Konstante Zufuhr kontra prozentuale Abnahme

Die für diesen Kurs wichtigste Anwendung ist

R 10 Regel 10 (Konstante Zufuhr kontra prozentuale Abnahme):

Eine zeitabhängige Variable y sei simultan zwei gegensätzlichen Einflüssen wie folgt ausgesetzt: Pro Zeiteinheit werde y einerseits um eine konstante additive Zufuhr z vergrößert, zugleich werde y in dieser Zeiteinheit aber auch um $p\%$ ($0 < p < 100$) verringert. Dann gilt

(1) y strebt mit der Zeit gegen den Grenzwert

$$\hat{y} = \frac{z}{p} \cdot 100 \quad \text{“dynamisches Gleichgewicht“,}$$

Wenn man die prozentuale Verringerung mit dem dimensionslosen Faktor $v = \frac{p}{100}$ bezeichnet ($0 < v < 1$), so gilt

$$\hat{y} = \frac{z}{v}.$$

(2) Die Konvergenz erfolgt streng monoton wachsend, wenn der Startwert y_0 zu Beginn des Beobachtungszeitraums kleiner als der Grenzwert \hat{y} ist, streng monoton fallend, wenn er größer als dieser Grenzwert ist.³

Beweis von (1): Bezeichnet y_n den Wert von y nach n Zeiteinheiten, so gilt: y_n verringert sich in einer Zeiteinheit um $\frac{p}{100} \cdot y_n$ bzw. um $v \cdot y_n$, andererseits wird z hinzugefügt. Also gilt

$$y_{n+1} = y_n - \frac{p}{100} \cdot y_n + z = \left(1 - \frac{p}{100}\right) y_n + z = (1 - v) y_n + z \quad (3.1)$$

Setzen wir zur Abkürzung $1 - v = c$, dann ist $0 < c < 1$ und wir erhalten das Bildungsgesetz

$$y_{n+1} = z + c y_n,$$

mit dem ein y -Wert jeweils aus dem vorigen errechnet werden kann. Damit ergibt sich

$$\begin{aligned} y_1 &= z + c y_0 \\ y_2 &= z + c y_1 = z + c(z + c y_0) = z + c z + c^2 y_0 \\ y_3 &= z + c y_2 = z + c(z + c z + c^2 y_0) = z + c z + c^2 z + c^3 y_0 \\ y_4 &= z + c y_3 = z + c(z + c z + c^2 z + c^3 y_0) = z + c z + c^2 z + c^3 z + c^4 y_0 \\ &\vdots \\ y_n &= z + c z + c^2 z + \dots + c^{n-1} z + c^n y_0 \end{aligned}$$

Durch Ausklammern von z erhalten wir

$$y_n = z(1 + c + c^2 + \dots + c^{n-1}) + y_0 c^n. \quad (3.2)$$

³siehe die Graphen von monoton wachsend bzw. monoton fallend konvergenten Folgen S.34

Wegen $0 < c < 1$ strebt die geometrische Summe nach *Regel 9* gegen $\frac{1}{1-c}$, die n -te Potenz c^n nach *Regel 8* gegen 0, das Ganze mit den allgemeinen Grenzwertregeln also gegen

$$\hat{y} = z \cdot \frac{1}{1-c} + y_0 \cdot 0 = \frac{z}{1-c}.$$

Wegen $1 - c = v = \frac{p}{100}$ bedeutet das

$$\hat{y} = \frac{z}{v} = \frac{z \cdot 100}{p}. \quad (3.3)$$

□

Beweis von (2): Aus 3.1 folgt durch Subtraktion von y_n auf beiden Seiten der Gleichung

$$\begin{aligned} y_{n+1} - y_n &= z - \frac{p}{100} \cdot y_n && | z \text{ ausklammern} \\ &= z \left(1 - \frac{p}{z \cdot 100} \cdot y_n \right) && | \frac{p}{z \cdot 100} = \frac{1}{\hat{y}} \text{ einsetzen} \\ &= z \left(1 - \frac{1}{\hat{y}} \cdot y_n \right) \\ &= \frac{z}{\hat{y}} \cdot (\hat{y} - y_n) && | \frac{z}{\hat{y}} = \frac{p}{100} \text{ einsetzen} \end{aligned}$$

Insgesamt also

$$y_{n+1} - y_n = \frac{p}{100} (\hat{y} - y_n) \quad (3.4)$$

Multiplikation beider Seiten mit -1 liefert zusätzlich

$$y_n - y_{n+1} = \frac{p}{100} (y_n - \hat{y}) \quad (3.5)$$

Hieraus folgt zweierlei:

1. Die Differenzen $y_{n+1} - y_n$ und $\hat{y} - y_n$ haben stets dasselbe Vorzeichen: Genau dann, wenn $y_n < \hat{y}$ ist, gilt auch $y_n < y_{n+1}$, d.h.: Genau so bald und so lange, wie y_n kleiner als das dynamische Gleichgewicht \hat{y} ist, wächst die Folge weiter; sobald und solange y_n größer ist, fällt sie.
2. Die Folge kann nicht aus Folgengliedern bestehen, die teils größer, teils kleiner als das dynamische Gleichgewicht \hat{y} sind. Andernfalls fände man nämlich einen Indexwert n , so dass entweder $y_n < \hat{y} < y_{n+1}$ oder $y_{n+1} < \hat{y} < y_n$ gelten würde.

$$\begin{aligned} \text{1. Fall: } y_n < \hat{y} < y_{n+1} &&& | -y_n \\ 0 < \hat{y} - y_n < y_{n+1} - y_n &&& | (3.4) \text{ einsetzen} \\ 0 < \hat{y} - y_n < \frac{p}{100} \cdot (\hat{y} - y_n) \end{aligned}$$

Aber die positive Zahl $\hat{y} - y_n$ kann nicht kleiner als $p\%$ von ihr selber sein. Der 1. Fall ist also unmöglich.

2. Fall: $y_{n+1} < \hat{y} < y_n$ | zu den negativen Werten übergehen

$$-y_n < -\hat{y} < -y_{n+1} \quad | +y_n$$

$$0 < y_n - \hat{y} < y_n - y_{n+1} \quad | (3.5) \text{ einsetzen}$$

$$0 < y_n - \hat{y} < \frac{p}{100} \cdot (y_n - \hat{y})$$

Aber die positive Zahl $y_n - \hat{y}$ kann nicht kleiner als $p\%$ von ihr selber sein. Der 2. Fall ist also ebenfalls unmöglich.

Aus 2. folgt: Wenn y_0 kleiner ist als das dynamische Gleichgewicht \hat{y} , so gilt $y_n < \hat{y}$ für alle $n = 1, 2, 3, \dots$, und daraus folgt mit 1., dass $y_n < y_{n+1}$ für alle $n = 1, 2, 3, \dots$, d.h. die Folge ist streng monoton wachsend. Entsprechend folgt aus $y_0 > \hat{y}$ mit 2., dass $y_n > \hat{y}$ für alle $n = 1, 2, 3, \dots$, und daraus folgt mit 1., dass $y_n > y_{n+1}$ für alle $n = 1, 2, 3, \dots$, d.h. die Folge ist streng monoton fallend.

Damit ist *Regel 10* vollständig bewiesen. \square

3.3.5 Die Konvergenzgeschwindigkeit von Folgen

Mittels des Begriffs der relativen Abweichung einer Zahl von einer anderen⁴ lässt sich die Geschwindigkeit beschreiben, mit der eine konvergente Folge gegen ihren Grenzwert strebt.

Bezeichnung: *Konvergiert eine Folge a_1, a_2, a_3, \dots gegen einen Grenzwert \hat{a} , so sagt man: Der Grenzwert ist ab $n = K$ zu 99% erreicht, wenn gilt: Für alle $n \geq K$ beträgt die relative Abweichung der a_n vom Grenzwert \hat{a} höchstens 1% , allgemein:*

Der Grenzwert \hat{a} ist ab $n = K$ zu $x\%$ erreicht, wenn gilt:

$$\frac{|a_n - \hat{a}|}{|\hat{a}|} \leq \left(1 - \frac{x}{100}\right) \text{ für alle } n \geq K. \quad (3.6)$$

Je kleiner K , umso schneller konvergiert die Folge.

Konvergiert eine Folge monoton (wachsend oder fallend), so wird der Abstand zwischen a_n und \hat{a} von mal zu mal kleiner, d.h. es gilt automatisch $|a_{n+1} - \hat{a}| \leq |a_n - \hat{a}|$ für alle $n = 1, 2, 3, \dots$. Um dann zu einem gegebenen Prozentsatz x ($0 < x < 100$) das passende K zu bestimmen, muss man also nur untersuchen, für welchen Zahlwert von n die Gleichung

$$\frac{|a_n - \hat{a}|}{|\hat{a}|} = \left(1 - \frac{x}{100}\right)$$

erfüllt ist. Dieser Wert von n ist dann das gesuchte K .

Mit Logarithmusrechnung⁵ kann man die Konvergenzgeschwindigkeit im Falle des dynamischen Gleichgewichts ausrechnen, d.h. die Antwort auf die folgende Frage geben:

⁴siehe 1.2.2, S.6

⁵siehe 5.7, insbesondere S.90

Wann ist das dynamische Gleichgewicht zu $x\%$ erreicht ($0 < x < 100$)?

Mit den Bezeichnungen des vorigen Paragraphen gilt: Die Folge y_1, y_2, y_3, \dots strebt gegen einen Grenzwert $\hat{y} \geq 0$, und zwar monoton wachsend, falls $y_0 < \hat{y}$, sonst monoton fallend. Zur Bestimmung von K ist also die Gleichung

$$|y_n - \hat{y}| = \left(1 - \frac{x}{100}\right) \cdot \hat{y} \quad (3.7)$$

nach n aufzulösen.

1. Fall: Die Folge ist monoton wachsend.

Dann ist $y_n < \hat{y}$, also $|y_n - \hat{y}| = \hat{y} - y_n$, eingesetzt:

$$\begin{aligned} \hat{y} - y_n &= \left(1 - \frac{x}{100}\right) \cdot \hat{y} && | -\hat{y} \\ -y_n &= -\frac{x}{100} \cdot \hat{y} && | \cdot (-1) \\ y_n &= \frac{x}{100} \cdot \hat{y} && | (3.3) \text{ einsetzen} \\ y_n &= \frac{x}{100} \cdot \frac{z}{v} && | (3.2) \text{ einsetzen} \\ z(1 + c + \dots + c^{n-1}) + y_0 c^n &= \frac{x}{100} \cdot \frac{z}{v} && | \text{ Regel 8} \\ z \cdot \frac{1-c^n}{1-c} + y_0 c^n &= \frac{x}{100} \cdot \frac{z}{v} && | 1 - c = v \text{ einsetzen} \\ \frac{z}{v} \cdot (1 - c^n) + y_0 c^n &= \frac{x}{100} \cdot \frac{z}{v} && | \cdot \frac{v}{z} \\ 1 - c^n + \frac{y_0}{z} \cdot v \cdot c^n &= \frac{x}{100} && | +c^n - \frac{y_0}{z} \cdot v \cdot c^n - \frac{x}{100} \\ 1 - \frac{x}{100} &= c^n - \frac{y_0}{z} \cdot v \cdot c^n && | v = \frac{p}{100} \text{ einsetzen, klammern} \\ 1 - \frac{x}{100} &= \left(1 - \frac{y_0}{z} \cdot \frac{p}{100}\right) \cdot c^n && | \lg \\ \lg\left(1 - \frac{x}{100}\right) &= \lg\left(1 - \frac{y_0}{z} \cdot \frac{p}{100}\right) + n \lg c && | c = 1 - v = 1 - \frac{p}{100} \\ \lg\left(1 - \frac{x}{100}\right) - \lg\left(1 - \frac{y_0}{z} \cdot \frac{p}{100}\right) &= n \cdot \lg\left(1 - \frac{p}{100}\right) && | \cdot \frac{1}{\lg\left(1 - \frac{p}{100}\right)} \end{aligned}$$

Hieraus folgt der

1. Zusatz zu Regel 10:

Startet der in Regel 10 beschriebene Prozess mit einem Anfangswert y_0 , der kleiner ist als das dynamische Gleichgewicht \hat{y} , dann ist der Grenzwert \hat{y} zu $x\%$ (mit $0 < x < 100$) erreicht nach n Zeiteinheiten, wobei

$$n = \frac{\lg\left(1 - \frac{x}{100}\right) - \lg\left(1 - \frac{y_0}{z} \cdot \frac{p}{100}\right)}{\lg\left(1 - \frac{p}{100}\right)}.$$

2. Fall: Die Folge ist monoton fallend.

Dann ist $\hat{y} < y_n$, also $|y_n - \hat{y}| = y_n - \hat{y}$. Setzt man dies in (3.7) ein, so erhält man

$$\begin{aligned}
y_n - \hat{y} &= \left(1 - \frac{x}{100}\right) \cdot \hat{y} && | +\hat{y} \\
y_n &= \left(2 - \frac{x}{100}\right) \cdot \hat{y} && | (3.3) \text{ einsetzen} \\
y_n &= \left(2 - \frac{x}{100}\right) \cdot \frac{z}{v} && | (3.2) \text{ einsetzen} \\
z(1 + c + \dots + c^{n-1}) + y_0 c^n &= \left(2 - \frac{x}{100}\right) \cdot \frac{z}{v} && | \text{Regel 8, } v = 1 - c \text{ einsetzen} \\
z \cdot \frac{1-c^n}{1-c} + y_0 c^n &= \left(2 - \frac{x}{100}\right) \cdot \frac{z}{1-c} && | \cdot \frac{1-c}{z} \\
1 - c^n + \frac{y_0(1-c)}{z} \cdot c^n &= 2 - \frac{x}{100} && | -1, c^n \text{ ausklammern} \\
\left(\frac{y_0(1-c)}{z} - 1\right) \cdot c^n &= 1 - \frac{x}{100} && | 1 - c = v = \frac{p}{100} \text{ einsetzen} \\
1 - \frac{x}{100} &= \left(\frac{y_0}{z} \cdot \frac{p}{100} - 1\right) \cdot c^n && | \lg \\
\lg\left(1 - \frac{x}{100}\right) &= \lg\left(\frac{y_0}{z} \cdot \frac{p}{100} - 1\right) + n \lg c && | c = 1 - \frac{p}{100} \text{ einsetzen} \\
\lg\left(1 - \frac{x}{100}\right) - \lg\left(\frac{y_0}{z} \cdot \frac{p}{100} - 1\right) &= n \cdot \lg\left(1 - \frac{p}{100}\right) && | \cdot \frac{1}{\lg\left(1 - \frac{p}{100}\right)}
\end{aligned}$$

Dies liefert uns den

2. Zusatz zu Regel 10:

Startet der in Regel 10 beschriebene Prozess mit einem Anfangswert y_0 , der größer ist als das dynamische Gleichgewicht \hat{y} , dann ist der Grenzwert \hat{y} zu $x\%$ (mit $0 < x < 100$) erreicht nach n Zeiteinheiten, wobei

$$n = \frac{\lg\left(1 - \frac{x}{100}\right) - \lg\left(\frac{y_0}{z} \cdot \frac{p}{100} - 1\right)}{\lg\left(1 - \frac{p}{100}\right)}.$$

Beispiel: Ein in Pflasterform auf der Haut aufgebrachtes Medikament mit Depotwirkung gebe 3 Wochen lang stündlich $9\mu\text{g}$ eines Wirkstoffes S an den Körper ab, stündlich werde aber auch 15% der insgesamt im Körper befindlichen Masse von S abgebaut. Auf welche Gesamtdosis von S wird der Körper hierdurch dauerhaft eingestellt, und wann ist dieser Zustand zu 95% erreicht?

Hier ist $z = 9\mu\text{g}$, $p = 15$, $y_0 = 0\mu\text{g}$, $x = 95$. Daraus folgt mit Regel 10 und dem 1. Zusatz:

$$\begin{aligned}
\hat{y} &= \frac{z}{p} \cdot 100 = \frac{9\mu\text{g}}{15} \cdot 100 = 60\mu\text{g} \\
n &= \frac{\lg\left(1 - \frac{x}{100}\right) - \lg\left(1 - \frac{y_0}{z} \cdot \frac{p}{100}\right)}{\lg\left(1 - \frac{p}{100}\right)} = \frac{\lg(1 - 0,95) - \lg(1 - 0)}{\lg(1 - 0,15)} = \frac{\lg 0,05}{\lg 0,85} \approx 18,4
\end{aligned}$$

d.h. der Körper wird auf eine Dosis von konstant $60\mu\text{g}$ eingestellt, und dieser Zustand ist nach 18,4 Stunden zu 95% erreicht.

Weitere Beispiele für derartige Prozesse finden sich zahlreich, insbesondere in der Medizin und der Biologie.

Teil II

Analysis

Kapitel 4

Differentialrechnung

Die Differentialrechnung ist die Theorie der kleinen Differenzen. Insbesondere untersucht sie, wie sich kleine Änderungen einer Variablen x auf eine Variable y auswirken, wenn diese eine Funktion von x ist.

4.1 Der Begriff der mittleren Änderungsrate

Gegeben sei eine stetige Funktion $y = f(x)$ (ohne Sprünge), ein **festes Wertepaar** (x_0, y_0) und ein **nahe benachbartes** Wertepaar (x_1, y_1) (also wahlweise $x_0 < x_1$ oder $x_1 < x_0$, aber jedenfalls $\Delta x = x_1 - x_0$ **klein**). Wir wissen:

Die Idee der **Interpolation**¹ besteht darin, **zwecks näherungsweise Berechnung von $y = f(x)$ mittels einer Geradengleichung** die Funktion $y = f(x)$ **im Bereich zwischen x_0 und x_1** (nur dort) durch diejenige Gerade zu ersetzen, welche durch die Punkte $(x_0|y_0)$ und $(x_1|y_1)$ verläuft.

(Sie heißt die **Sekante** durch diese zwei Punkte und interessiert nur im Bereich zwischen x_0 und x_1 .)

Für alle beliebigen x -Werte **zwischen x_0 und x_1 (nur dort)** gilt also näherungsweise die Berechnungsformel

$$y = f(x) \approx y_0 + \frac{y_1 - y_0}{x_1 - x_0} \cdot (x - x_0) \quad (\text{Interpolationsformel}). \quad (4.1)$$

Gleichzeitig gilt dort für die Änderungen von x und y näherungsweise die für Geraden charakteristische Proportionalität

$$\Delta y \approx c_1 \cdot \Delta x, \quad \text{wobei } c_1 = \frac{y_1 - y_0}{x_1 - x_0} \text{ ist.} \quad (4.2)$$

Die Konstante c_1 heißt auch die **mittlere Änderungsrate der Variablen y als Funktion von x im Bereich zwischen x_0 und x_1** .

¹siehe 2.2.4, S.20

4.2 Der Begriff der momentanen Änderungsrate

Die Näherungsformeln (4.2) sind einzig durch den Zahlwert der mittleren Änderungsrate c_1 bestimmt.

Wir wissen: Je kleiner Δx ist, umso besser werden i.a. die näherungsweise Berechnungsformeln für y und für Δy . Durch vorsätzliche Verkleinerung von Δx kann man also verbesserte Näherungsformeln gewinnen. **Der Wunsch nach optimalen Näherungsformeln für y und Δy nahe der Stelle x_0** führt zu folgender Idee:

1. Schritt: Man wähle das feste Wertepaar (x_0, y_0) der Funktion $y = f(x)$.
2. Schritt: Man nehme irgendeine Zahlenfolge x_1, x_2, x_3, \dots im Definitionsbereich von f ($x_i \neq x_0$ für alle i), die gegen den Grenzwert x_0 strebt.
3. Schritt: Für jedes x_i berechne man den zugehörigen Funktionswert $y_i = f(x_i)$.
4. Schritt: Für jedes i berechne man die mittlere Änderungsrate $c_i = \frac{y_i - y_0}{x_i - x_0}$ (= Steigung der Sekante).

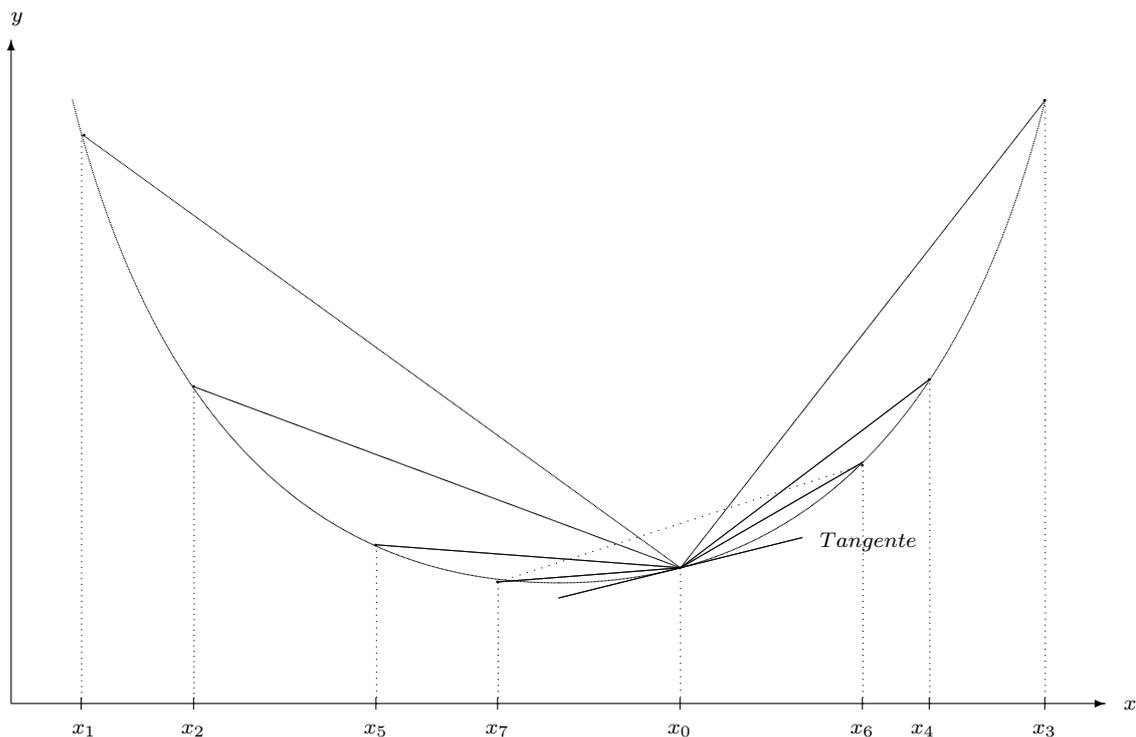


Abbildung 4.1: Gegen x_0 strebende Folge von x -Werten mit zugehörigen Sekanten

Man erhält auf diese Weise unendlich viele Näherungsformeln, die durch (x_0, y_0) und die mittlere Änderungsrate c_i von y im Bereich zwischen x_0 und x_i bestimmt sind,

$$y \approx y_0 + c_i \cdot (x - x_0) \quad \text{und} \quad \Delta y \approx c_i \cdot \Delta x,$$

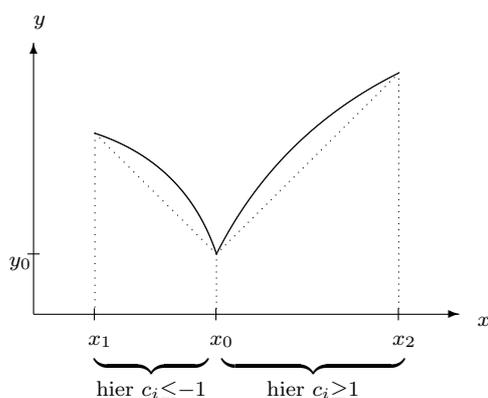
und jeweils nur **zwischen** x_0 und x_i gelten (also nur rechts von x_0 , falls $x_0 < x_i$, nur links von x_0 , falls $x_i < x_0$), die aber letztlich immer besser werden, je näher x_i bei x_0 liegt.

Frage: Besitzt die Folge c_1, c_2, c_3, \dots einen Grenzwert? Der würde optimale Formeln liefern!

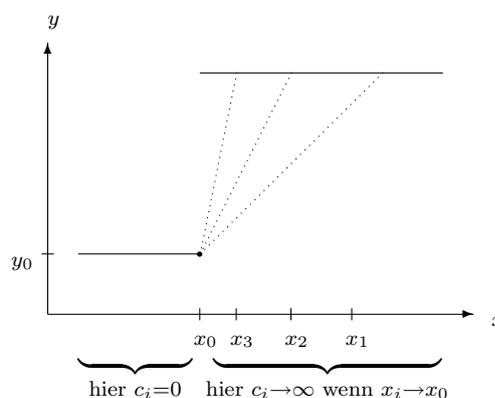
Antwort: Nicht immer, z.B. dann nicht, wenn der Graph von $y = f(x)$ an der Stelle x_0 einen Knick oder einen Sprung hat.

Abbildung 4.2: Verläuft der Graph linksseits von x_0 z.B. monoton fallend mit mittleren Änderungsraten $c_i \leq -1$ und rechtsseits von x_0 monoton steigend mit mittleren Änderungsraten $c_i \geq 1$ (siehe linke Skizze), so kann die Folge c_1, c_2, c_3, \dots der mittleren Änderungsraten eine beliebig unregelmäßige Abfolge von Werten ≤ -1 und Werten ≥ 1 sein, also ohne Grenzwert. Bei einem Sprung nach oben (siehe rechte Skizze) bzw. nach unten wachsen bzw. fallen die c_i auf einer Seite von x_0 unbeschränkt, und unbeschränkte Folgen sind divergent. (siehe Abschnitt 3.3.2, insbesondere S.33)

Graph mit Knick bei x_0 :



Graph mit Sprung bei x_0 :



Bezeichnung: Liege x_0 im Definitionsbereich von $y = f(x)$. Wenn bei jeder (!) beliebigen Wahl einer Folge x_1, x_2, x_3, \dots (alle $x_i \neq x_0$) mit dem Grenzwert x_0 die zugehörige Folge der mittleren Änderungsraten c_1, c_2, c_3, \dots gegen einen Grenzwert \hat{c} strebt, so heißt dieser Grenzwert \hat{c} die **momentane Änderungsrate der Variablen y bezüglich x an der Stelle x_0** .

In diesem Fall sind für alle x **beidseits** (!) von x_0 und **nahe** x_0

$$y \approx y_0 + \hat{c} \cdot (x - x_0) \quad \text{und} \quad \Delta y \approx \hat{c} \cdot \Delta x \quad \text{optimale Näherungsformeln}$$

Bezeichnung: Die Gerade mit der Gleichung $y = y_0 + \hat{c} \cdot (x - x_0)$ heißt die **Tangente** der Funktion $y = f(x)$ im Punkte x_0 (siehe Abb.4.1, S.46).

Sie ist nur interessant für x -Werte **beidseits** **nahe** x_0 , wegen ihrer Verwendbarkeit als Näherungsformel.

Merke: Der Begriff der momentanen Änderungsrate von $y = f(x)$ an der Stelle x_0 entsteht aus der Idee der Interpolation durch Grenzwertbildung.

4.3 Die Ableitung einer Funktion $y = f(x)$

4.3.1 Der Begriff der Ableitung

Bezeichnung: Falls $y = f(x)$ an **jeder** Stelle x seines Definitionsbereichs eine momentane Änderungsrate \hat{c} bezüglich x besitzt, so heißt die Variable y bzw. die Funktion f **differenzierbar nach x** .

Da der Zahlwert von \hat{c} i.a. von Stelle zu Stelle verschieden ist, ist dann

\hat{c} selbst eine **Variable**, die mit $\frac{dy}{dx}$ oder kurz mit y' bezeichnet wird.

Da andererseits (bei fest gegebener Funktion f) der Zahlwert von \hat{c} durch die Stelle x , an der er berechnet wird, eindeutig determiniert ist, ist

die Variable \hat{c} eine **Funktion von x** , die mit $\frac{df}{dx}$ oder kurz mit f' bezeichnet wird

und die **Ableitung von y nach x** heißt.

Diese Funktion hat denselben Definitionsbereich wie die Funktion $y = f(x)$.

Unterscheide:

Ableitung (von y nach x) = eine Variable, die eine Funktion von x ist.

Schreibweisen: $\frac{dy}{dx} = \frac{df}{dx}$, abgekürzt:
 $y' = f'(x)$

momentane Änderungsrate (von y bzgl. x) = Zahlwert der Variablen y' an der Stelle x_0 .

Schreibweisen: $\hat{c} = \frac{dy}{dx}(x_0) = \frac{df}{dx}(x_0)$, abgekürzt:
 $\hat{c} = y'(x_0)$ oder $\hat{c} = f'(x_0)$

In Anwendungen kann häufig dieselbe Variable y je nach Betrachtungsweise als Funktion einer Variablen u oder einer Variablen v oder einer Variablen $w \dots$ betrachtet werden². Dann werden die abkürzenden Bezeichnungen unbrauchbar, weil mehrdeutig, und der Name der freien Variablen, als deren Funktion y gerade betrachtet wird, muss in der Bezeichnung der Ableitung bzw. momentanen Änderungsrate explizit genannt werden.³

Die Ableitung einer Funktion ist nützlich für näherungsweise Berechnungen dieser Funktion:

Näherungsweise Berechnung differenzierbarer Funktionen:

Ist die Funktion $y = f(x)$ differenzierbar und x_0 eine beliebige Stelle des Definitionsbereichs, so gilt für alle x -Werte **nahe x_0** in **optimaler Näherung**

$$y \approx y_0 + f'(x_0) \cdot (x - x_0) \quad \text{und} \quad \Delta y \approx f'(x_0) \cdot \Delta x.$$

²siehe 2.3, S.21

³Näheres, insbesondere zur Schreibweise der Ableitung in diesen Fällen, in 4.5.3, S.55

4.3.2 Kriterium zur Erkennung von Ableitungen und Stammfunktionen

In der Schulmathematik verraten Variable ihre Beziehung zueinander schon durch ihren Namen: y ist (scheinbar!) allein schon deshalb eine Funktion von x , weil es “ y “ heißt, y' ist Ableitung, weil es “ y' “ heißt usw.

In der naturwissenschaftlichen Praxis verraten Variable ihre Eigenschaften und Beziehungen zueinander **nicht im Namen**. Deshalb ist **die wichtigste Merkregel für den Naturwissenschaftler im Zusammenhang mit Ableitungen**:

Regel 11 (Kriterium zur Erkennung von Ableitungen und Stammfunktionen):

R 11

Sind x, y, z drei Variable und gilt für alle **kleinen Differenzen** $\Delta x = x_2 - x_1$ die **optimale Formel**

$$\Delta y \approx z \cdot \Delta x,$$

so sind y und z Funktionen von x , und z ist die **Ableitung von y bezüglich x** , d.h.

$$z = y' = \frac{dy}{dx}.$$

In diesem Fall heißt y eine **Stammfunktion** von z bezüglich x .

4.3.3 Anwendung: Wichtige Beispiele von Ableitungen

Beispiel 1: Bezeichnet v die **Geschwindigkeit** (in $\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$ bzw. $\text{km}\cdot\text{h}^{-1}$) eines Körpers zum **Zeitpunkt t** (in s bzw. h) und $s(t)$ die bis zum Zeitpunkt t **insgesamt** zurückgelegte **Wegstrecke** (in m bzw. km), so gilt für alle **kleinen** Zeitspannen $\Delta t = t_2 - t_1$ und für die **zwischen** den Zeitpunkten t_1 und t_2 zurückgelegte Strecke $\Delta s = s(t_2) - s(t_1)$ die optimale Formel

$$\Delta s \approx v \cdot \Delta t,$$

folglich mit *Regel 11*: Die Geschwindigkeit v ist die Ableitung der Gesamtstrecke s nach der Zeit t und $s(t)$ eine Stammfunktion von $v(t)$:

$$v = s'(t) = \frac{ds}{dt}.$$

Beispiel 2: Entsteht die Substanz A als **Produkt** einer chemischen Reaktion, so kann man die momentane **Reaktionsgeschwindigkeit** v daran messen, wie schnell die **Konzentration** c_A (in $\text{mol}\cdot\text{l}^{-1}$) von A mit der **Zeit t** (in s) zunimmt. Für alle **kleinen** Zeitspannen $\Delta t = t_2 - t_1$ und für die **zwischen** den Zeitpunkten t_1 und t_2 erfolgte positive Konzentrationsänderung $\Delta c_A = c_A(t_2) - c_A(t_1)$ besteht die Beziehung

$$\Delta c_A \approx v \cdot \Delta t.$$

Mit *Regel 11* lässt sich daher sagen: Misst man die Reaktionsgeschwindigkeit v anhand der Konzentrationszunahme des Produkts A, so ist v die Ableitung der Konzentration c_A nach der Zeit t und $c_A(t)$ eine Stammfunktion von $v(t)$:

$$c_A'(t) = \frac{dc_A}{dt} = v \text{ ist ein Maß für die Reaktionsgeschwindigkeit.}$$

Es ist abhängig von der Wahl des untersuchten Produkts der Reaktion. Wegen der besseren Messbarkeit höherer Konzentrationen eignet sich dieses Geschwindigkeitsmaß nicht so sehr für die Anfangsphase der Reaktion.

Wird A als **Edukt** einer chemischen Reaktion abgebaut, so kann man die momentane **Reaktionsgeschwindigkeit** v auch daran messen, wie schnell die **Konzentration** c_A (in $\text{mol}\cdot\text{l}^{-1}$) von A mit der **Zeit** t (in s) abnimmt. Für alle **kleinen** Zeitspannen $\Delta t = t_2 - t_1$ und für die **zwischen** den Zeitpunkten t_1 und t_2 erfolgte negative Konzentrationsänderung $\Delta c_A = c_A(t_2) - c_A(t_1)$ besteht die Beziehung

$$\Delta c_A \approx -v \cdot \Delta t \text{ bzw. } -\Delta c_A \approx v \cdot \Delta t$$

Mit *Regel 11* lässt sich daher sagen: Misst man die Reaktionsgeschwindigkeit v anhand der Konzentrationsabnahme des Edukts A, so ist $-v$ die Ableitung der Konzentration c_A nach der Zeit t und $c_A(t)$ eine Stammfunktion von $-v(t)$:

$$-c_A'(t) = -\frac{dc_A}{dt} = v \text{ ist ein Maß für die Reaktionsgeschwindigkeit.}$$

Es ist abhängig von der Wahl des untersuchten Edukts der Reaktion. Wegen der besseren Messbarkeit höherer Konzentrationen eignet sich dieses Geschwindigkeitsmaß besonders für die Anfangsphase der Reaktion.

Bei Kenntnis der stöchiometrischen Formel lassen sich alle verschiedenen Masse für die Reaktionsgeschwindigkeit ineinander umrechnen. Näheres hierzu in 5.10, S.101.

Beispiel 3: Bezeichnet **I** die **Stromstärke** (in Ampère) zum **Zeitpunkt** t (in s) und **Q(t)** die bis zum Zeitpunkt t **insgesamt** durch den Querschnitt geflossene **Ladung** (in Coulomb), so gilt für alle **kleinen** Zeitspannen $\Delta t = t_2 - t_1$ und für die **zwischen** den Zeitpunkten t_1 und t_2 geflossene Ladung $\Delta Q = Q(t_2) - Q(t_1)$ die optimale Formel

$$\Delta Q \approx I \cdot \Delta t,$$

folglich mit *Regel 11*: Die Stromstärke I ist die Ableitung der Gesamtladung Q nach der Zeit t und $Q(t)$ eine Stammfunktion von $I(t)$:

$$I = Q'(t) = \frac{dQ}{dt}.$$

Beispiel 4: Treibt eine zeitabhängige **Kraft** (in N) eine Kugel in konstanter Richtung und ist **p(t)** der **Impuls** (in Ns) zum **Zeitpunkt** t (in s), so gilt für alle **kleinen** Zeitspannen $\Delta t = t_2 - t_1$ und für die **zwischen** den Zeitpunkten t_1 und t_2 erfolgte Impulsänderung $\Delta p = p(t_2) - p(t_1)$ die optimale Formel

$$\Delta p \approx F \cdot \Delta t,$$

folglich mit *Regel 11*: Die Kraft F ist die Ableitung des Impulses p nach der Zeit t und $p(t)$ eine Stammfunktion von $F(t)$:

$$F = p'(t) = \frac{dp}{dt}.$$

Beispiel 5: Wird ein Körper auf einer Geraden (= x -Achse) mit einer vom **Ort** \mathbf{x} (in m) abhängigen **Kraft** \mathbf{F} (in N) verschoben und ist $\mathbf{W}(\mathbf{x})$ die für das Verschieben vom Startpunkt ($x = 0$) bis zum Ort x **insgesamt** geleistete **Arbeit** (in J=Nm), so gilt für alle **kleinen** Ortsänderungen Δx und die **zwischen** den Orten x_1 und x_2 geleistete Arbeit $\Delta W = W(x_2) - W(x_1)$ die optimale Formel

$$\Delta W \approx F \cdot \Delta x,$$

folglich mit *Regel 11*: Die Kraft F ist die Ableitung der Gesamtarbeit W nach dem Ort x und $W(t)$ eine Stammfunktion von $F(t)$:

$$F = W'(x) = \frac{dW}{dx}.$$

4.4 Regeln für die Berechnung von Ableitungen

4.4.1 Berechnung der Ableitung aus einer Funktionsformel für $y = f(x)$

Regel 12 (Ableitung von Geraden):

R 12

Jede Gerade $y = a + b \cdot x$ hat konstante Ableitung $y' = b$.

Spezialfälle:

$a' = 0$ für a unabhängig von x (= konstant) (=Fall $b = 0$),

$x' = 1$ (=Fall $a = 0$ und $b = 1$).

Regel 13 (Ableitung von n -ten Potenzen):

R 13

$$(x^n)' = n \cdot x^{n-1} \quad \text{für alle } n \in \mathbb{N}.$$

Beweis : Sei $y = f(x) = x^n$. Sei x_0 fest gewählt und x_1, x_2, x_3, \dots eine beliebige Folge mit $x_i \rightarrow x_0$ ($x_i \neq x_0$ für alle $i = 1, 2, 3, \dots$).

Sei $c_i = \frac{y_i - y_0}{x_i - x_0}$. Zu zeigen ist: Die Folge c_1, c_2, c_3, \dots konvergiert und $\lim c_i = n \cdot x_0^{n-1}$.

Das sieht man so: Setze $h_i = x_i - x_0$. Dann strebt h_i nach der *allgemeinen Grenzwertregel* ⁴(G.2) gegen 0, und es ist $x_i = x_0 + h_i$. Setze dies in die Gleichung für c_i ein und benutze die *Abstrakte binomische Formel* ⁵:

$$\begin{aligned} c_i &= \frac{x_i^n - x_0^n}{x_i - x_0} = \frac{(x_0 + h_i)^n - x_0^n}{h_i} \\ &= \frac{1}{h_i} \left(\left(x_0^n + \binom{n}{1} x_0^{n-1} h_i + \binom{n}{2} x_0^{n-2} h_i^2 + \binom{n}{3} x_0^{n-3} h_i^3 + \dots + h_i^n \right) - x_0^n \right) \\ &= \binom{n}{1} x_0^{n-1} + \binom{n}{2} x_0^{n-2} h_i + \binom{n}{3} x_0^{n-3} h_i^2 + \dots + h_i^{n-1} \\ &\xrightarrow{(G.2)} \binom{n}{1} x_0^{n-1} + \lim_{i \rightarrow \infty} \binom{n}{2} x_0^{n-2} h_i + \lim_{i \rightarrow \infty} \binom{n}{3} x_0^{n-3} h_i^2 + \dots + \lim_{i \rightarrow \infty} h_i^{n-1} \\ &\stackrel{(G.1)}{=} \binom{n}{1} x_0^{n-1} + 0 + \dots + 0 = n \cdot x_0^{n-1} \end{aligned}$$

Damit ist gezeigt, dass $\lim c_i$ existiert und gleich $n \cdot x_0^{n-1}$ ist. □

⁴siehe 3.3.3, S.35

⁵siehe 1.2.3, S.8

Allgemeine Differentiationsregeln:

Seien $y = f(x)$ und $z = g(x)$ zwei differenzierbare Funktionen und a eine Konstante. Dann gilt

$$\begin{array}{ll} \text{(D.1)} & (a \cdot f(x))' = a \cdot f'(x) & \text{Faktorregel} \\ \text{(D.2)} & (f(x) \pm g(x))' = f'(x) \pm g'(x) & \text{Summenregel} \\ \text{(D.3)} & (f(x) \cdot g(x))' = f'(x) \cdot g(x) + f(x) \cdot g'(x) & \text{Produktregel} \\ \text{(D.4)} & \left(\frac{f(x)}{g(x)}\right)' = \frac{f'(x) \cdot g(x) - f(x) \cdot g'(x)}{(g(x))^2} & \text{Quotientenregel} \\ \text{(D.5)} & (g(f(x)))' = g'(f(x)) \cdot f'(x) & \text{Kettenregel} \end{array}$$

Beweis der Kettenregel: Sei $u = g(y)$ und $y = f(x)$. Dann folgt aus der *Näherungsweise Berechnung differenzierbarer Funktionen* ⁶

$$\begin{array}{ll} (1) & \Delta u \approx g'(y) \cdot \Delta y \quad \text{für alle kleinen } \Delta y, \\ (2) & \Delta y \approx f'(x) \cdot \Delta x \quad \text{für alle kleinen } \Delta x. \end{array}$$

Wenn Δx klein ist, ist nach (2) Δy ungefähr proportional zu Δx und daher ebenfalls klein. Deshalb darf man (2) in (1) einsetzen und erhält:

$$\Delta u \approx g'(y) \cdot f'(x) \cdot \Delta x \quad \text{für alle kleinen } \Delta x.$$

Mit *Regel 11* folgt: $g'(y) \cdot f'(x)$ ist die Ableitung von u nach x . Wegen $u = g(f(x))$ ist hiermit die Kettenregel bewiesen. \square

Aus den *Allgemeinen Differentiationsregeln* (D.1) bis (D.3) und *Regel 13* folgt leicht:

R 14 Regel 14 (Ableitung und Stammfunktion von Polynomen):

$$\text{Das Polynom} \quad y = a_0 + a_1x + a_2x^2 + a_3x^3 + \dots + a_nx^n$$

$$\text{hat die Ableitung} \quad y' = a_1 + 2a_2x + 3a_3x^2 + \dots + na_nx^{n-1}$$

$$\text{und die Stammfunktion} \quad a_0x + \frac{a_1}{2}x^2 + \frac{a_2}{3}x^3 + \frac{a_3}{4}x^4 + \dots + \frac{a_n}{n+1}x^{n+1} (+const).$$

Wendet man die *Kettenregel* speziell auf den Fall $f(x) = 1$ und $g(x) = x^n$ an, so erhält man, da $f'(x) = 0$ nach *Regel 12* und $g'(x) = nx^{n-1}$ nach *Regel 13*

R 15 Regel 15 (Ableitung und Stammfunktion von Potenzen mit negativem Exponenten):

$$\text{Die rationale Funktion} \quad \frac{1}{x^n}$$

$$\text{hat die Ableitung} \quad \left(\frac{1}{x^n}\right)' = -n \cdot \frac{1}{x^{n+1}} \quad \text{für alle } n \in \mathbb{N}, \text{ oder auch:}$$

$$(x^{-n})' = -n \cdot x^{-n-1} \quad \text{für alle } n \in \mathbb{N}$$

$$\text{und die Stammfunktion} \quad -\frac{1}{n-1} \cdot \frac{1}{x^{n-1}} (+const) \quad \text{für alle } n \in \mathbb{N} \text{ mit } n \neq 1.$$

⁶siehe 4.4.2, S.48

4.4.2 Berechnung der Ableitung aus einer Wertetabelle für $y = f(x)$ (numerische Differentiation)

Problem: Von $y = f(x)$ sei keine Berechnungsformel bekannt, sondern nur eine Wertetabelle. Diese sei auf- oder absteigend sortiert nach x -Werten. Gesucht seien die zugehörigen Werte der Ableitung $z = dy/dx$.

bekannt:	x	x_1	x_2	\dots	x_{i-1}	x_i	x_{i+1}	\dots	x_{n-1}	x_n
	$y = f(x)$	y_1	y_2	\dots	y_{i-1}	y_i	y_{i+1}	\dots	y_{n-1}	y_n
gesucht:	$z = y' = f'(x)$	z_1		\dots		z_i		\dots		z_n

Da die momentane Änderungsrate der Grenzwert von mittleren Änderungsraten ist⁷, gilt, wenn die Wertetabelle nicht allzu große Schrittweiten Δx hat, für den ersten gesuchten Tabellenwert die Näherungsformel

$$f'(x_1) = z_1 \approx \frac{y_2 - y_1}{x_2 - x_1},$$

für den letzten gesuchten Tabellenwert die Näherungsformel

$$f'(x_n) = z_n \approx \frac{y_n - y_{n-1}}{x_n - x_{n-1}},$$

während für die inneren gesuchten Tabellenwerte zunächst zwei Formeln zur Auswahl stehen:

$$f'(x_i) = z_i \approx \frac{y_i - y_{i-1}}{x_i - x_{i-1}} \quad \text{und} \quad f'(x_i) = z_i \approx \frac{y_{i+1} - y_i}{x_{i+1} - x_i}$$

Hier wird z_i einmal mittels der Steigung der Sekanten durch $(x_i|y_i)$ und den linken Nachbarpunkt $(x_{i-1}|y_{i-1})$ geschätzt, das andere mal mittels der Steigung durch $(x_i|y_i)$ und den rechten Nachbarpunkt $(x_{i+1}|y_{i+1})$. Eine i.a. erheblich bessere Schätzung als beide liefert die Steigung der Sekanten durch den linken und den rechten Nachbarpunkt (unter Auslassung von $(x_i|y_i)$ selber), wie ein Blick auf Abb.4.1⁸ deutlich erkennen lässt.

Regeln zur numerischen Differentiation:

$$f'(x_1) = z_1 \approx \frac{y_2 - y_1}{x_2 - x_1} \quad \text{Tabellenanfang}$$

$$f'(x_i) = z_i \approx \frac{y_{i+1} - y_{i-1}}{x_{i+1} - x_{i-1}} \quad \text{innere Tabellenwerte}$$

$$f'(x_n) = z_n \approx \frac{y_n - y_{n-1}}{x_n - x_{n-1}} \quad \text{Tabellenende}$$

Für die Randwerte der Tabelle werden hiermit i.a. erheblich schlechtere Näherungswerte geliefert als für die inneren Tabellenwerte.

⁷siehe 4.2, S.47

⁸siehe S.46

4.5 Anwendung: Fehlerrechnung

4.5.1 Ungenaue Zahlen

Ist eine Waage in Gramm skaliert, so kann der abgelesene Wert bei bestem Bemühen vom exakten Wert der Masse m um bis zu $\pm 0,5\text{g}$ abweichen, ist sie in Kilogramm skaliert, so hat die mögliche Abweichung eine Größenordnung von $\pm 0,5\text{kg}$ (**Messungengenauigkeit**).

Die Zahl $\sqrt{2}$ ist nicht $\in \mathbb{Q}$ und besitzt somit unendlich viele von Null verschiedene Nachkommastellen. Gibt ein Taschenrechner sie z.B. mit 9 Nachkommastellen an, so muss der Benutzer des Taschenrechners davon ausgehen, dass die angezeigte Zahl vom wahren Wert der Wurzel aus 2 um bis zu $\pm 0,5 \cdot 10^{-9}$ abweicht (**Rechnerungenauigkeit**).

Wenn man eine Zahl mit vielen Nachkommastellen bequemlichkeitshalber auf n Nachkommastellen rundet⁹, so weicht man damit von der Vorgabe um die Größenordnung von bis zu $\pm 0,5 \cdot 10^{-n}$ ab (**Rundungsfehler**).

Beim bloßen Abschneiden der Zahl auf n Nachkommastellen kann die Abweichung doppelt so groß werden, nämlich $\pm 10^{-n}$. **Deshalb gilt Abschneiden ohne Runden grundsätzlich als Methodenfehler.**

Bezeichnung: Die maximal mögliche Abweichung (nach oben oder unten, ohne Vorzeichenangabe) zwischen dem benutzten Zahlwert x einer Größe (Konstante oder Variable) und ihrem (oft unbekanntem) exakten Wert heißt der **absolute Fehler** $|\Delta x|$ von x . Er hat dieselbe Dimension wie x .

Das Größenverhältnis $\frac{|\Delta x|}{|x|}$ heißt der **relative Fehler** von x . Er ist dimensionslos und wird i.a. in % ausgedrückt.¹⁰

Fehlertoleranz-Regel: Wird nichts anderes vereinbart, so gilt i.a. ein relativer Fehler von maximal 2% als akzeptabel.

Zahlen-Verlässlichkeitsregel: Wird in den Anwendungen ein Zahlwert x als Dezimalzahl mit n Nachkommastellen angegeben, so gilt er automatisch als gerundet, und es wird von einem absoluten Fehler $|\Delta x| = 0,5 \cdot 10^{-n}$ ausgegangen, es sei denn, dass ausdrücklich ein anderer absoluter Fehler angegeben wird.

Beispiel: Die Gewichtsangabe “500mg“ auf dem Beipackzettel eines Medikaments sichert zu, dass das de-facto-Gewicht im Bereich zwischen 499,5mg und 500,5mg liegt. Die (scheinbar gleiche) Angabe “0,5g“ garantiert nur ein de-facto-Gewicht zwischen 0,45g und 0,55g, d.h. zwischen 450mg und 550mg.

⁹siehe 1.2.5, S.12

¹⁰Der relative Fehler von x ist die maximal mögliche relative Abweichung des wahren Werts vom benutzten Zahlwert x . Zum Begriff “relative Abweichung“ siehe 1.2.2, S.6.

4.5.2 Fehlerfortpflanzung bei einer ungenauen Größe

Bezeichnung: Setzt man in eine Berechnungsformel $y = f(x)$ einen ungenauen x -Wert ein, so kann als Ergebnis der Rechnung auch der y -Wert nur ungenau sein. Dieser unvermeidliche Effekt, mit dem Ungenauigkeiten der Eingangsdaten mittels einer Berechnungsformel auf das Rechenergebnis übertragen werden, heißt **Fehlerfortpflanzung**.

Aus den Abschnitten 4.2 und 4.3 folgt wegen $\Delta y \approx f'(x) \cdot \Delta x$ sofort

Regel 16 (Fehlerfortpflanzung bei einer ungenauen Größe):

Ist $y = f(x)$ differenzierbar nach x und ist der zur Rechnung verwendete Zahlwert von x ungenau, so gilt für den absoluten Fehler von y die **optimale Schätzung**

$$|\Delta y| \approx \left| \frac{dy}{dx} \right| \cdot |\Delta x|, \quad \text{oder anders gesagt:} \quad |\Delta y| \approx |f'(x)| \cdot |\Delta x|.$$

R 16

4.5.3 Partielle Ableitungen

Ist $y = f(u, v, w, \dots)$ eine Funktion mehrerer Variabler¹¹, so kann man die Variablen v, w, \dots künstlich auf irgendwelchen konstanten Werten halten und y währenddessen als Funktion der **einen** Variablen u **auffassen**, also auch **ganz normal die Ableitung von y nach u bilden**¹².

Die durch diesen Kunstgriff berechnete Ableitung von y nach u ist damit zunächst selber eine Funktion von u , **aber**: Ihre Werte hängen ja **auch** noch von den Werten ab, auf denen v, w, \dots bei der Ableitungsberechnung künstlich konstant gehalten wurden, sind ohne Vorgabe dieser Werte gar nicht berechenbar, und daher ist die Ableitung von y nach u selber letztendlich auch wieder eine Funktion von u, v, w, \dots

Merke:

Ist $y = f(u, v, w, \dots)$ eine Funktion **mehrerer** Variabler, so ist die Ableitung von y nach irgendeiner dieser Variablen, z.B. nach u , selber wieder eine Funktion all dieser Variabler und wird mit

$$\frac{\partial y}{\partial u} \quad \text{bzw.} \quad \frac{\partial f}{\partial u}$$

bezeichnet, in Worten: die **partielle Ableitung von y nach u** .

Die Schreibweise dy/du bzw. df/du wird hier vermieden, da sie - fälschlich - suggeriert, y und damit auch die Ableitung von y nach u , sei eine Funktion einer einzigen Variablen u , und man brauche zu ihrer Berechnung die Werte nicht zu kennen, auf denen die Variablen v, w, \dots stehen.

Die Schreibweisen y' und f' hingegen sind völlig unerlaubt, da $y = f(u, v, w, \dots)$ ja so viele verschiedene Ableitungen wie freie Variable u, v, w, \dots besitzt und durch den hochgestellten Strich überhaupt nicht erkennbar wird, welche davon gerade gemeint ist.

Merke:

- Für Funktionen mehrerer Variabler gilt:
 - Nur die Schreibweise ist anders, nicht der Begriff der Ableitung.
 - Alle Rechenregeln (siehe 4.4) gelten unverändert.
 - Die abkürzenden Schreibweisen y' und f' sind **verboten**.

¹¹siehe 2.3, S.21

¹²falls diese Ableitung existiert. Zur Existenzfrage siehe 4.2, S.47

4.5.4 Fehlerfortpflanzung bei mehreren ungenauen Größen

Da Ungenauigkeiten des Rechenergebnisses, die aus verschiedenen Quellen stammen, nämlich von Ungenauigkeiten von u, v, w, \dots sich schlimmstenfalls **summieren** können, folgt aus *Regel 16* sofort

R 17 Regel 17 (Fehlerfortpflanzung bei mehreren ungenauen Größen):

Ist $y = f(u, v, w, \dots)$ differenzierbar nach u, v, w, \dots und sind die zur Rechnung benutzten Zahlenwerte von u, v, w, \dots ungenau, so gilt für den absoluten Fehler von y die optimale Schätzung

$$|\Delta y| \approx \left| \frac{\partial y}{\partial u} \right| \cdot |\Delta u| + \left| \frac{\partial y}{\partial v} \right| \cdot |\Delta v| + \left| \frac{\partial y}{\partial w} \right| \cdot |\Delta w| + \dots$$

Der. 1. Summand gibt den Effekt aus ungenauem u , der 2. den Effekt aus ungenauem v usw.

4.5.5 Rechenbeispiele

Beispiel 1: Von einer Lösung L des Stoffes A sei die Konzentration $c = 0,4$ [mol/l] bestimmt worden. Wie viel mol von A enthält ein 100-Liter-Behälter voll L ?

Naive Antwort: $n = c \cdot V$, also $n = 0,4 \cdot 100 = 40$ [mol].

Aber: Aufgrund der Angabe $c = 0,4$ [mol/l] ist eine Messungenauigkeit $|\Delta c| = 0,5 \cdot 10^{-1}$ [mol/l] zu befürchten, außerdem aufgrund der groben Angabe $V = 100$ [l] eine Abfüllungenauigkeit $|\Delta V| = 0,5$ [l].

Wegen $n = c \cdot V$ ist n eine Funktion zweier Variabler c und V , die beide ungenau sind, mit *Regel 17* gilt also

$$|\Delta n| \approx \left| \frac{\partial n}{\partial c} \right| \cdot |\Delta c| + \left| \frac{\partial n}{\partial V} \right| \cdot |\Delta V|.$$

Berechnung der partiellen Ableitung von $n = c \cdot V$ nach c :

Setze $c \hat{=} x$, also $n = V \cdot x$, und betrachte V als Konstante. Dann folgt mit *Regel 12*¹³:

$$\frac{dn}{dx} = V, \quad \text{also} \quad \left| \frac{\partial n}{\partial c} \right| = |V|.$$

Analog die Berechnung der partiellen Ableitung von $n = c \cdot V$ nach V :

Setze $V \hat{=} x$, also $n = c \cdot x$, und betrachte c als Konstante. Dann folgt mit *Regel 12*

$$\frac{dn}{dx} = c, \quad \text{also} \quad \left| \frac{\partial n}{\partial V} \right| = |c|.$$

Das ergibt eingesetzt:

$$|\Delta n| \approx |V| \cdot |\Delta c| + |c| \cdot |\Delta V|.$$

Zuletzt für alles die Zahlen eingesetzt: $|\Delta n| \approx 100 \cdot 0,5 \cdot 10^{-1} + 0,4 \cdot 0,5 = 5 + 0,2 = 5,2$ [mol].

Die **korrekte Antwort** muss nun lauten: Der Behälter enthält $40 \pm 5,2$ mol von A , d.h. zwischen 34,8 und 45,2 mol.

Die naive Antwort suggeriert also eine Genauigkeit, die aufgrund der Datenlage gar nicht möglich ist.

¹³siehe 4.4.1, S.51

Qualitätsbeurteilung des Ergebnisses: Der relative Fehler des Ergebnisses beträgt $\frac{5,2}{40} = 0,13 = 13\%$ und ist damit unbefriedigend groß.

Ursachenanalyse: Der absolute Fehler setzt sich aus den Summanden 5 und 0,2 zusammen, das sind Fehler, die aus c bzw. aus V herrühren. Der mit Abstand größte Beitrag zum Gesamtfehler hat also seine Ursache im ungenauen c : Wäre c auf 2 Nachkommastellen genau bekannt, statt auf eine, so würde $|\Delta c|$ auf 1/10 des bisherigen Wertes schrumpfen und damit auch der aus c herrührende Fehler auf 1/10 des bisherigen Wertes, also von 5 auf 0,5. Damit wäre der absolute Fehler insgesamt 0,7 und der relative Fehler $\frac{0,7}{40} = 0,0175 = 1,75\%$, also akzeptabel klein.

Fazit: Erst c auf 2 Nachkommastellen gerundet neu ermitteln und dann die Berechnung mit dem präziseren Wert von c neu durchführen!

Beispiel 2: Zu berechnen sei das Dreifache des Quotienten von 20 und 0,4. Die letzteren beiden Zahlen seien aber aus früheren Rechnungen schon gerundet.
Naives Resultat: $3 \cdot \frac{20}{0,4} = 150$.

Berechnung der Ungenauigkeit:

- Schritt: Nenne das zu berechnende Ergebnis y , die ungenauen Größen $20 = u$ und $0,4 = v$ (oder sonstwie) und bestimme die absoluten Fehler von u und von v :
 $|\Delta u| = 0,5 \cdot 10^0 = 0,5$ und $|\Delta v| = 0,5 \cdot 10^{-1} = 0,05$. (Diese beiden absoluten Fehler, aus Rundung entstanden, sind die Ursache der Ungenauigkeit des naiven Ergebnisses.)
- Schritt: Bilde die abstrakte Berechnungsformel $y = 3\frac{u}{v}$, dazu die abstrakte Fehlerformel

$$|\Delta y| \approx \left| \frac{\partial y}{\partial u} \right| \cdot |\Delta u| + \left| \frac{\partial y}{\partial v} \right| \cdot |\Delta v|.$$

- Schritt: Betrachte y als Funktion der beiden freien Variablen u und v und berechne die partiellen Ableitungen von y nach u und nach v :
 Berechnung der partiellen Ableitung nach u :
 Setze $u \hat{=} x$, also $y = \frac{3}{v} \cdot x$ und betrachte $\frac{3}{v}$ als Konstante. Dann folgt

$$\frac{dy}{dx} = \frac{3}{v}, \quad \text{also} \quad \left| \frac{\partial y}{\partial u} \right| = \left| \frac{3}{v} \right|.$$

- Berechnung der partiellen Ableitung nach v :
 Setze $v \hat{=} x$, also $y = 3u \cdot \frac{1}{x}$ und betrachte $3u$ als Konstante. Mit *Regel 15* (4.4.1, S.52) folgt

$$\frac{dy}{dx} = -3u \cdot \frac{1}{x^2}, \quad \text{also} \quad \left| \frac{\partial y}{\partial v} \right| = \left| \frac{-3u}{v^2} \right|.$$

4. Schritt: Einsetzen der berechneten partiellen Ableitungen in die abstrakte Fehlerformel, danach Einsetzen aller Zahlwerte (beachte die Betragstriche, also den Wegfall negativer Vorzeichen!):

$$\begin{aligned} |\Delta y| &\approx \left| \frac{\partial y}{\partial u} \right| \cdot |\Delta u| + \left| \frac{\partial y}{\partial v} \right| \cdot |\Delta v| \\ &= \left| \frac{3}{v} \right| \cdot |\Delta u| + \left| \frac{-3u}{v^2} \right| \cdot |\Delta v| \\ &= \frac{3}{0,4} \cdot 0,5 + \frac{3 \cdot 20}{0,4^2} \cdot 0,05 = 3,75 + 18,75 = 22,5 \end{aligned}$$

Die **korrekte Auswertung** der Rechnung lautet also: Der Wert von y liegt irgendwo zwischen 127,5 und 172,5.

Qualitätsbeurteilung des Ergebnisses: Der relative Fehler von y ist in diesem Beispiel $\frac{22,5}{150} = 0,15 = 15\%$, also wieder inakzeptabel groß.

Ursachenanalyse: Daran Schuld ist ganz überwiegend der Fehlerbeitrag von v ($= 18,75$). Die Angabe $v = 0,400$ (statt $v = 0,4$) hätte $|\Delta v| = 0,5 \cdot 10^{-3}$ ergeben und damit den von v beigesteuerten Fehler auf 1 Hundertstel des bisherigen gesenkt, also auf 0,1875. Damit hätte man für y den absoluten Fehler $|\Delta y| = 3,75 + 0,1875 = 3,9375$ erhalten mit einem daraus resultierenden relativen Fehler von 2,6%, mit überwiegendem Beitrag aus der Ungenauigkeit von u .

Die Ursache der großen Ungenauigkeit im 2. Beispiel basiert auf folgendem allgemeineren Sachverhalt, den jeder Anwender von Mathematik beachten muss:

Merke: Bei Division durch eine Zahl zwischen 0 und 1 muss diese Zahl zuvor auf möglichst viele Nachkommastellen berechnet sein, und zwar umso genauer, je näher sie bei Null liegt. Andernfalls wird das Ergebnis der Division völlig unzuverlässig.

4.6 Bestimmung von Maxima und Minima (Kurvendiskussion)

Aufgrund der geometrischen Bedeutung der momentanen Änderungsrate als Steigung der Tangente gilt

R 18 Regel 18 (Bedeutung des Vorzeichens der Ableitung):

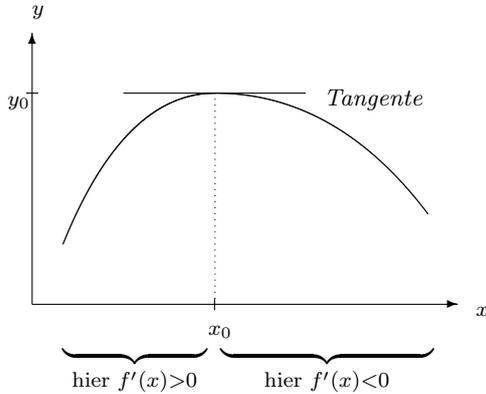
$y = f(x)$ sei nach x differenzierbar und die Ableitung $y' = f'(x)$ sei stetig (= ohne Sprünge; ist für alle in diesem Kurs behandelten Funktionen der Fall). Dann gilt:

An allen Stellen x mit

- $y' = f'(x) > 0$ verläuft der Graph von f streng monoton wachsend,
- $y' = f'(x) < 0$ verläuft der Graph von f streng monoton fallend,
- $y' = f'(x) = 0$ hat der Graph von f ein lokales Maximum oder Minimum oder einen Sattelpunkt.

Abbildung 4.3: Bei einem lokalen Extremum von $y = f(x)$ wechselt die Ableitung y' ihr Vorzeichen:

Lokales Maximum bei x_0 :



Lokales Minimum bei x_0 :

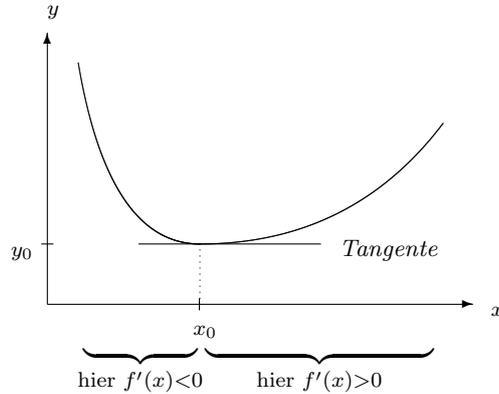
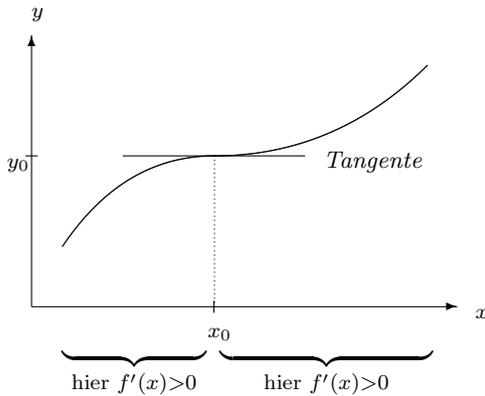
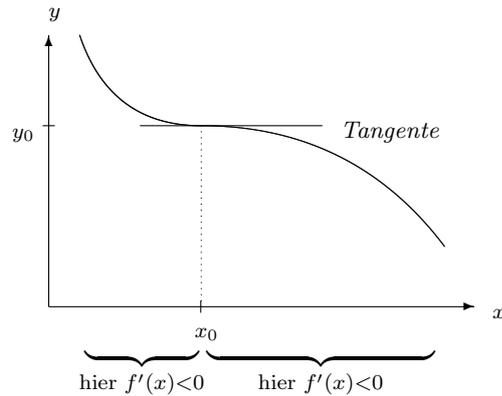


Abbildung 4.4: Auf beiden Seiten eines Sattelpunktes von $y = f(x)$ hat die Ableitung y' dasselbe Vorzeichen:

Sattelpunkt bei x_0 :



Sattelpunkt bei x_0 :



Regel 19 (Auffinden lokaler Maxima und Minima von $y = f(x)$):

R 19

1. Schritt: Bestimme die Berechnungsformel für $y' = f'(x)$.
2. Schritt: Setze $f'(x) = 0$ und berechne daraus die Nullstellen x der Ableitung.
3. Schritt: Für jede Nullstelle x der Ableitung bestimme das Vorzeichen von y' links und rechts von x , nahe bei x . Es gilt:
 - y' links > 0 , rechts < 0 \iff Maximum
 - y' links < 0 , rechts > 0 \iff Minimum
 - y' beidseits gleiches Vorzeichen \iff Sattelpunkt.

Der 3. Schritt in *Regel 18* ist i.a. eine wesentliche Arbeitsvereinfachung gegenüber der in der Schule geübten Technik, das Vorzeichen der 2. Ableitung von f an der Stelle x zu bestimmen,

denn die in der Praxis vorkommenden Funktionen sind meist so geartet, dass allein schon die Bestimmung der Berechnungsformel der 2. Ableitung einen enormen Arbeitsaufwand bedeutet, geschweige denn das Ausrechnen an der Stelle x .

In Anwendungen erübrigt sich der 3. Schritt aber sehr oft sogar völlig:

R 20 Regel 20 (Entbehrlichkeit des 3. Schritts in Regel 19):

Wenn in einer Anwendungsaufgabe aus fachwissenschaftlichen Gründen a priori bekannt ist

1. dass die Funktion $y = f(x)$ ein absolutes Minimum besitzt und
2. dass dieses Minimum auf keinen Fall in einem Randpunkt des Definitionsbereichs von f angenommen wird,
und wenn dann der 2. Schritt von Regel 19 ergibt,
3. dass die Ableitung $y' = f'(x)$ nur eine einzige Nullstelle besitzt,

dann darf der 3. Schritt von Regel 19 entfallen.

Das Entsprechende gilt für ein absolutes Maximum von $y = f(x)$.

4.7 Anwendung: Beweis der Formeln für die Lineare Regression

4.7.1 Bestimmung der Konstanten C (Ein-Schritt-Verfahren)

Situation: Zu n Messwerten v_1, v_2, \dots, v_n der freien Variablen v wurden die zugehörigen Werte w_1, w_2, \dots, w_n der abhängigen Variablen w **gemessen**. Dabei ergab sich, dass die Punkte (v_i, w_i) **ungefähr** auf einer Ursprungsgeraden liegen.¹⁴

Mittels einer **Formel** $w = C \cdot v$ für eine Ursprungsgerade würden zu denselben Werten v_1, v_2, \dots, v_n die w -Werte

$$\tilde{w}_i = C \cdot v_i \quad (i = 1, \dots, n) \text{ errechnet.}$$

Zwischen Messung und Rechnung klafft i.a. für jedes $i = 1, \dots, n$

$$\text{ein absoluter Fehler } |\Delta w_i| = |\tilde{w}_i - w_i| = |C \cdot v_i - w_i|.$$

Geometrisch ist dieser Fehler der Abstand zwischen dem **Messpunkt** $(v_i|w_i)$ und dem Punkt auf der Ursprungsgeraden $(v_i|Cv_i)$.

Festlegung eines Maßes für die Güte der Formel, durch welche die Messergebnisse näherungsweise beschrieben werden sollen: Den **Mittelwert der absoluten Fehler** könnte man als Maß für die Güte der Formel ansehen. Er hängt bei gegebener Wertetabelle nur von C ab, ist also eine Funktion von C . Die Aufgabe wäre dann, ein C zu finden, für das dieser Mittelwert minimal wird. Die Stelle finden, wo eine Funktion ihr Minimum annimmt, kann

¹⁴siehe 3.1.2, S.24ff

man mittels *Regel 19* aber nur dann, wenn die Funktion differenzierbar ist. Der Mittelwert ist aber gleich

$$\frac{1}{n}(|Cv_1 - w_1| + \dots + |Cv_n - w_n|), \quad (4.3)$$

also aus n Betragsfunktionen zusammengesetzt, und jede Betragsfunktion hat einen Knick im Graphen, ist also *nicht differenzierbar*¹⁵. Ließe man andererseits die Betragstriche weg, so könnten große Fehler unterschiedlichen Vorzeichens sich beim Addieren wegheben, und der Mittelwert würde fälschlich klein, obwohl alle Formelwerte \tilde{w}_i von allen Messwerten w_i weit entfernt wären; ein solcher Mittelwert wäre also *kein Gütemaß*.

Das Gesagte gilt entsprechend, wenn man die **Summe der absoluten Fehler** als Gütemaß zu nehmen versucht.

Problem: Die Fehler müssen positiv genommen werden, aber nicht in Betragstriche gesetzt!

Lösung: Man macht die Fehler nicht durch Betragstriche positiv, sondern durch Quadrieren:

$$\frac{1}{n}((Cv_i - w_i)^2 + \dots + (Cv_n - w_n)^2). \quad (4.4)$$

Dies ist der **Mittelwert der Fehlerquadrate**. Wenn man daraus wieder die Wurzel zieht, hat man einen guten Ersatz für den Mittelwert aus (4.3):

$$\sqrt{\frac{(Cv_i - w_i)^2 + \dots + (Cv_n - w_n)^2}{n}}. \quad (4.5)$$

Gesucht ist also ein Zahlwert von C , für den die Wurzel (4.5) minimal wird.

(4.5) ist die Wurzel aus (4.4), wird also genau dann minimal, wenn (4.4) selber minimal wird. Und (4.4) wird minimal, wenn **die Summe der Fehlerquadrate**

$$|\Delta w_1|^2 + \dots + |\Delta w_n|^2 = (Cv_i - w_i)^2 + \dots + (Cv_n - w_n)^2 \quad (4.6)$$

minimal wird.

Die Summe der Fehlerquadrate (4.6) ist daher ebenso wie (4.5) als **ein Gütemaß für die Formel** geeignet. Sie heißt der ‘Fehler der Formel $w = C \cdot v$ ’. Ihr Vorzug: Sie ist differenzierbar nach C und einfacher gebaut als (4.5).

Geometrische Interpretation: Zieht man aus der Summe der Fehlerquadrate (4.6) die Wurzel, so erhält man den euklidischen Abstand zwischen dem n -gliedrigen Vektor (Cv_1, \dots, Cv_n) der Formelwerte und dem n -gliedrigen Vektor (w_1, \dots, w_n) der Messwerte für w . Die Formel ist also optimal, wenn dieser Abstand minimal wird.

Berechnung des optimalen C : Gesucht ist das Minimum von

$$F = (C \cdot v_1 - w_1)^2 + \dots + (C \cdot v_n - w_n)^2.$$

Dabei sind die v_i, w_i ($i = 1, \dots, n$) lauter tabellarisch gegebene Zahlen, also Konstanten. F ist also **eine Funktion der freien Variablen C** .

¹⁵siehe 4.2, S.47

1. Schritt: Berechne die Formel für die Ableitung dF/dC (Mit *Summenregel* und *Kettenregel* (siehe 4.4.1, S.52):

$$\begin{aligned}\frac{dF}{dC} &= 2(Cv_1 - w_1) \cdot v_1 + \dots + 2(Cv_n - w_n) \cdot v_n \\ &= 2Cv_1^2 - 2v_1w_1 + \dots + 2Cv_n^2 - 2v_nw_n \\ &= 2 \sum v_i^2 \cdot C - 2 \sum v_iw_i\end{aligned}$$

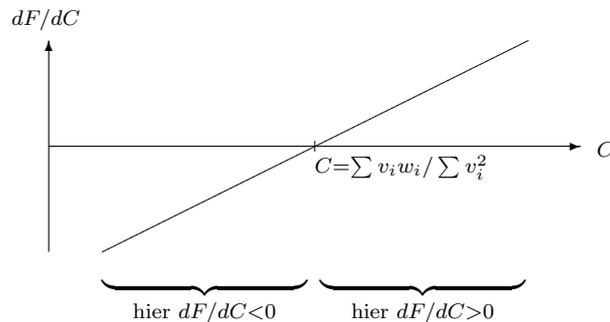
dF/dC erfüllt also als Funktion von C eine Geradengleichung $dF/dC = b \cdot C - a$ mit der positiven Steigung $b = 2 \sum v_i^2$ und mit $a = 2 \sum v_iw_i$.

2. Schritt: Setze die Ableitung $dF/dC = 0$ und berechne daraus die einzige Nullstelle C der Ableitung:

Aus $b \cdot C - a = 0$ folgt $C = a/b$, nach Kürzen durch 2 also

$$C = \frac{\sum v_iw_i}{\sum v_i^2} \quad (\text{Ein-Schritt-Verfahren})$$

3. Schritt: Bestimme das Vorzeichen der Ableitung links und rechts von der Nullstelle C : Da dF/dC als Funktion von C eine Gerade mit positiver Steigung b ist, ist dF/dC negativ links von der Nullstelle und positiv rechts von der Nullstelle. Nach *Regel 19* (S.59) haben wir ein Minimum von F gefunden.



4.7.2 Bestimmung der Konstanten A , B (Drei-Schritt-Verfahren)

Wieder wird als Formelfehler die Summe der Fehlerquadrate genommen:

$$F = |\Delta w_1|^2 + \dots + |\Delta w_n|^2, \quad \text{wobei } |\Delta w_i| = |\tilde{w}_i - w_i| \text{ ist.}$$

Aber diesmal ist $\tilde{w}_i = A + B \cdot v_i$, also ist F eine **Funktion der zwei freien Variablen A und B** :

$$F = (A + Bv_1 - w_1)^2 + \dots + (A + Bv_n - w_n)^2. \quad (4.7)$$

Berechnung der Werte von A und B , für welche F minimal wird, mit *Regel 19*:

1. Schritt: Differenziere F mit der *Kettenregel* einmal nach A , das andere Mal nach B :

$$\begin{aligned}
\text{(i)} \quad \frac{\partial F}{\partial A} &= 2(A + Bv_1 - w_1) + \dots + 2(A + Bv_n - w_n) \\
&= 2n \cdot A + 2 \sum v_i \cdot B - 2 \sum w_i \\
\text{(ii)} \quad \frac{\partial F}{\partial B} &= 2(A + Bv_1 - w_1) \cdot v_1 + \dots + 2(A + Bv_n - w_n) \cdot v_n \\
&= 2 \sum v_i \cdot A + 2 \sum v_i^2 \cdot B - 2 \sum v_i w_i
\end{aligned}$$

2. Schritt: Setze diese *partiellen Ableitungen* beide = 0 und berechne daraus A und B :

$$\begin{aligned}
\text{(I)} \quad 2n \cdot A + 2 \sum v_i \cdot B - 2 \sum w_i &= 0 \quad | +2 \sum w_i \\
\text{(II)} \quad 2 \sum v_i \cdot A + 2 \sum v_i^2 \cdot B - 2 \sum v_i w_i &= 0 \quad | +2 \sum v_i w_i \\
\text{(I)} \quad 2n \cdot A + 2 \sum v_i \cdot B &= 2 \sum w_i \\
\text{(II)} \quad 2 \sum v_i \cdot A + 2 \sum v_i^2 \cdot B &= 2 \sum v_i w_i
\end{aligned}$$

Dies ist ein Lineares Gleichungssystem für die Unbekannten A und B . Wegen $\bar{v} = \sum v_i/n$ und $\bar{w} = \sum w_i/n$ kann man für $\sum v_i = n\bar{v}$ und für $\sum w_i = n\bar{w}$ einsetzen und erhält:

$$\begin{aligned}
\text{(I)} \quad 2n \cdot A + 2n\bar{v} \cdot B &= 2n\bar{w} \\
\text{(II)} \quad 2n\bar{v} \cdot A + 2 \sum v_i^2 \cdot B &= 2 \sum v_i w_i
\end{aligned}$$

Der *Gauß'sche Algorithmus*¹⁶ liefert hieraus im 1. Schritt:

$$\begin{aligned}
\text{(I')} \quad A + \bar{v} \cdot B &= \bar{w} \\
\text{(II')} \quad 2n\bar{v} \cdot A + 2 \sum v_i^2 \cdot B &= 2 \sum v_i w_i
\end{aligned}$$

sodann im 2. Schritt:

$$\begin{aligned}
\text{(I')} \quad A + \bar{v} \cdot B &= \bar{w} \\
\text{(II')} \quad (2n\bar{v}^2 - 2 \sum v_i^2) \cdot B &= 2n\bar{v}\bar{w} - 2 \sum v_i w_i
\end{aligned}$$

Damit ist Dreiecksgestalt erreicht.

$$\text{Aus (II')} \text{ folgt } B = \frac{2n\bar{v}\bar{w} - 2 \sum v_i w_i}{2n\bar{v}^2 - 2 \sum v_i^2}.$$

Kürzt man diesen Bruch durch 2 und erweitert ihn dann oben und unten mit -1 , so folgt

$$B = \frac{\sum v_i w_i - n\bar{v}\bar{w}}{\sum v_i^2 - n\bar{v}^2} \quad (\text{Drei-Schritt-Verfahren}),$$

$$\text{und nun aus (I')} \quad A = \bar{w} - B \cdot \bar{v}.$$

Die Begründung dafür, dass es sich bei dieser einzigen Lösung des Linearen Gleichungssystems tatsächlich um eine Wertekombination für A und B handelt, für die der Fehler F **minimal** wird (dass also kein Maximum und kein Sattelpunkt vorliegt), kann hier nur teilweise gegeben werden. Wir können nur so viel sagen:

1. Der Definitionsbereich von F besitzt keine Randpunkte, da die freien Variablen A und B in der Berechnungsformel für F unabhängig voneinander sämtliche reellen Werte durchlaufen können. Deshalb werden alle Extremwerte von F im Innern des Definitionsbereichs angenommen. Daraus folgt, dass da, wo Extremwerte von F vorliegen, sicher sämtliche partiellen

¹⁶siehe 3.2, S.26ff

Ableitungen von F gleich Null sind.

2. Da unsere Rechnung nur eine Lösung ergeben hat, haben wir also die einzige Stelle gefunden, wo F minimal sein könnte. Wir wissen aber noch nicht, ob dort nicht doch ein Maximum oder ein Sattelpunkt vorliegt.

3. Indem man in die Berechnungsformel (4.7) für A immer größere Werte einsetzt, während man für $B = 0$ einsetzt, kann man den Wert von F beliebig groß machen, d.h. ein Maximum besitzt F sicher nicht.

4. Bei der von uns gefundenen Lösung muss es sich also entweder um das einzige Minimum von F oder um einen Sattelpunkt handeln.

5. Dass F ein Minimum besitzen **muss**, kann man mit Kenntnissen aus der Theorie der Funktionen mehrerer Variabler beweisen, die den Rahmen dieser Darstellung sprengen. (Wir wissen aber immerhin, dass der Wertebereich von F keine negativen Zahlen enthält, also durch die Konstante $K = 0$ nach unten beschränkt ist. Die größte untere Schranke des Wertebereichs ist zugleich der minimale Wert, den F annimmt.)

Kapitel 5

Die wichtigsten nicht-elementaren Funktionen

5.1 Die natürlichen Wachstums- und Abbaugesetze

Ist $y = f(x)$ differenzierbar nach x und $z = y' = dy/dx$ die Ableitung von y nach x , so gibt z für jeden festen x -Wert die **momentane Änderungsrate von y bezüglich x** an.

Bezeichnung: *Das Größenverhältnis zwischen der momentanen Änderungsrate von y und y selbst, d.h. also der Quotient*

$$\frac{z}{y} = \frac{y'}{y} = \frac{f'(x)}{f(x)},$$

heißt die **momentane relative Änderungsrate von y bezüglich x** .

Da y' und y jeweils Funktionen von x sind, ist auch y'/y i.a. wieder eine Funktion von x .

Beispiel: Untersucht man das Volumen V (in cm^3) eines Tumors als Funktion der Zeit t (in Tagen (=d)), so misst die momentane Änderungsrate $V' = dv/dt$ die augenblickliche Wachstumsgeschwindigkeit des Tumors in Kubikzentimeter pro Tag ($cm^3 \cdot d^{-1}$).

Misst man zu einem Zeitpunkt t die Werte $V = 10[cm^3]$ und $V' = 0,1[cm^3 \cdot d^{-1}]$, so erhält man

$$\frac{V'}{V} = \frac{0,1[cm^3 \cdot d^{-1}]}{10[cm^3]} = 0,01[d^{-1}] = 1[\% \cdot d^{-1}]$$

d.h. die momentane relative Änderungsrate beträgt, abhängig von dem gegebenen Zeitpunkt t , 1 Prozent pro Tag.

Merke: Die momentane relative Änderungsrate von y bezüglich x beschreibt das momentane Änderungsverhalten von y in Prozent. Sie variiert i.a. in Abhängigkeit von x .

Häufig trifft man in der Empirie aber folgende besonders primitive Gesetzmäßigkeit an:

(1) **“Die momentane relative Änderungsrate von y bezüglich x ist konstant.“**

Als Formel:

$$\frac{y'}{y} = c,$$

mit einer vom x -Wert unabhängigen, für die Funktion $y = f(x)$ **spezifischen Konstanten c** . Das besagt mit anderen Worten:

(2) **“Die momentane Änderungsrate von y bezüglich x ist proportional zur bisherigen Größe von y .“**

Als Formel:

$$y' = c \cdot y.$$

Für positives y folgt aus dieser Formel mit *Regel 18*¹

– Wenn c positiv ist, so ist y' permanent positiv, also $y = f(x)$ streng monoton wachsend.

– Wenn c negativ ist, so ist y' permanent negativ, also $y = f(x)$ streng monoton fallend.

Daraus erklärt sich folgende

Bezeichnung: $y = f(x)$ erfüllt ein **natürliches Wachstumsgesetz** (bzw. ein **natürliches Abbaugesetz**), wenn es eine **positive** (bzw. **negative**) Konstante c gibt, so dass

$$y' = \frac{dy}{dx} = c \cdot y \text{ ist.}$$

Mit *Regel 11*² folgt die für den Anwender sehr wichtige

R 21 Regel 21 (Kriterium zur Erkennung von natürlichem Wachstum bzw. Abbau): $y = f(x)$ erfüllt genau dann ein natürliches Wachstums- bzw. Abbaugesetz, wenn es eine für die Funktion spezifische positive bzw. negative Konstante c gibt, so dass für alle kleinen Δx gilt:

$$\Delta y \approx c \cdot y \cdot \Delta x,$$

in Worten gesagt, wenn gilt:

(3) **“Bei kleinen Änderungen von x ist die Änderung von y proportional zur Änderung von x und zum bisherigen Wert von y .“**

Dividiert man beide Seiten noch durch y , so erhält man

$$\frac{\Delta y}{y} \approx c \cdot \Delta x,$$

in Worten:

(4) **“Bei kleinen Änderungen von x ist die relative Änderung von y proportional zur Änderung von x .“**

Die Formulierungen (1), (2), (3) und (4) beschreiben also alle dieselbe Gesetzmäßigkeit, nämlich natürliches Wachstum bzw. natürlichen Abbau.

¹siehe 4.6, S.58

²siehe 4.3.2, S.49

5.1.1 Beispiele für natürliche Wachstumsgesetze

Beispiele für das Wirken natürlicher Wachstumsgesetze finden sich vorwiegend in der Biologie und in der Ökonomie. Sie kommen stets nur in einem begrenzten Wertebereich der freien Variablen zur Entfaltung, danach tritt einer von folgenden zwei Fällen ein:

1. Entweder treten zunehmend wachstumshemmende äußere Faktoren auf, bis das Wachstum praktisch ganz aufhört und die abhängige Variable y gegen eine Konstante \hat{y} als Grenzwert strebt (= sog. "dynamisches Gleichgewicht")³ oder aber
2. das Wachstum bricht in einer Katastrophensituation zusammen.

Aus $\Delta y \approx c \cdot y \cdot \Delta x$ ist abzulesen, dass im Falle des natürlichen Wachstums das Wachstum von x und y sehr wenig koordiniert ist: Ist y nahe Null, so wächst y extrem schwach im Vergleich zu x , ist y im mehrstelligen Bereich, so wächst y extrem stark im Vergleich zu x , was das eigentliche Problem bildet, denn ist y schon sehr groß, so wird die momentane Wachstumsrate von y "unerträglich" groß.

Die Gesetzmäßigkeit des natürlichen Wachstums ist zu primitiv, um eine selbststeuernde Wachstumsregulierung zu leisten. Wachstumsabschwächung wird vielmehr durch äußere Umstände erzwungen, ohne Rücksicht auf die daraus folgende Dramatik bzw. Konfliktsituation (Überpopulation, Nahrungsmangel, explosionsartiges Wachstum großer Vermögen und großer Schulden). Zwei einfache Gesetze von gebremstem Wachstum (die aber nicht - wie bei der logistischen Differentialgleichung in der untenstehenden Fußnote - den Wert von y durch eine spezifische Konstante nach oben beschränken) sind das lineare Wachstum sowie die Allometrie. Beide werden näher behandelt in 5.8, S.93 ff.

1. Beispiel (Biologie):

Wächst eine Population (Zellen, Bakterien, Algen. . .) ungehemmt pro Zeiteinheit um p Prozent ($0 < p < 100$) und ist $m(t)[g]$ ihre Masse zum Zeitpunkt $t[h]$, so gilt für alle **kleinen Zeitspannen** $\Delta t[h]$ und den **innerhalb** dieser Zeitspanne eingetretenen Massenzuwachs $\Delta m[g]$ das Gesetz: **Der Massenzuwachs Δm ist proportional zur schon vorhandenen Masse m und zur Zeitspanne Δt .**

Mit *Regel 4*⁴ gibt es eine von t und m unabhängige Konstante c , so dass gilt:

$$\Delta m \approx c \cdot m \cdot \Delta t$$

$c \approx \frac{\Delta m[g]}{m[g] \cdot \Delta t[h]}$ hat dabei die Dimension $[h^{-1}]$ und einen Zahlwert, welcher ein wenig kleiner als p Prozent ist. (Genau gilt: $c = \ln(1 + \frac{p}{100}) \leq \frac{p}{100}$, wie mit den Mitteln von 5.4 folgt.)

Es folgt mit *Regel 11*⁵

$$\frac{dm}{dt} = m'(t) = c \cdot m$$

³Dieses Phänomen kann man beim Populationswachstum in der Biologie öfter beobachten, aber auch beim Wachstum von Volkswirtschaften. Es wird durch folgende Gesetzmäßigkeit beschrieben:

Die momentane relative Änderungsrate von y bezüglich x ist proportional zum Abstand zwischen dem (kleineren) y und dem (größeren) Grenzwert \hat{y} .

Die zugehörige Formel

$$\frac{y'}{y} = c \cdot (\hat{y} - y)$$

ist unter dem Namen **logistische Differentialgleichung** bekannt. Sie besagt, dass die prozentuale Wachstumsrate am größten ist, je weiter y noch von seinem maximal möglichen Wert entfernt ist.

⁴siehe 2.3, S.21

⁵siehe 4.3.2, S.49

In Worten: Die **momentane Änderungsrate** der Masse m bezüglich der Zeit t ist **proportional** zur schon vorhandenen Masse, und die Proportionalitätskonstante c ist die **konstante momentane relative Änderungsrate der Masse bezüglich der Zeit**. Entsprechendes gilt in der Epidemiologie für in der Anfangsphase ungehemmt sich ausbreitende Seuchen.

2. Beispiel (Ökonomie):

In der Ökonomie wirken natürliche Wachstumsgesetze bei mit konstantem Zinssatz verzinstem Kapital, auch bei ebensolchen Schulden, allgemein bei jedem prozentualen Wachstum (z.B. Bruttosozialprodukt, Preissteigerungen, Umsatzsteigerungen), *solange der Prozentsatz p konstant bleibt*. Es gilt dann stets:

Die **momentane Änderungsrate** (des Kapitals, der Schulden,...) bezüglich der Zeit ist **proportional** zur schon vorhandenen Größe (des Kapitals, der Schulden,...), und die **momentane relative Änderungsrate** bezüglich der Zeit ist **konstant** $\approx p\%$ (genauer: $= \ln(1 + p/100)$).

Speziell für Schulden lässt sich das Gesetz mit *Regel 21*⁶ z.B. so formulieren:

Für alle kleineren Zeitspannen gilt:

Der Schuldenzuwachs ist proportional zur schon vorhandenen Schuldenhöhe und zur verstrichenen Zeitspanne.

3. Beispiel (Physik, Thermodynamik):

Im gemäßigten Temperaturbereich und für alle kleineren Temperaturänderungen ΔT gilt für gestreckte Festkörper:

Die Längenänderung ΔL ist proportional zur bisherigen Länge L und zur Temperaturänderung ΔT .

Mit *Regel 4* gibt es eine von T und L unabhängige positive Konstante α , so dass gilt:

$$\Delta L \approx \alpha \cdot L \cdot \Delta T$$

Es folgt mit *Regel 11*:

$$\frac{dL}{dT} = L'(T) = \alpha \cdot L$$

In Worten: **Die momentane Änderungsrate** der Länge bezüglich der Temperatur ist **proportional** zur schon vorhandenen Länge.

Die Proportionalitätskonstante α heißt der **Längenausdehnungskoeffizient**. $\alpha \approx \frac{\Delta L[m]}{L[m] \cdot \Delta T[K]}$ hat die Dimension $[K^{-1}]$ und ist eine Stoffkonstante. Sie ist die **konstante momentane relative Änderungsrate der Länge bezüglich der Temperatur**.

5.1.2 Beispiele für natürliche Abbaugesetze

Beispiele für das Wirken natürlicher Abbaugesetze finden sich vorwiegend in der Physik und in der Chemie. Sie sind im Unterschied zu den natürlichen Wachstumsgesetzen stets unbefristet wirksam, d.h. durch nichts außer Kraft zu setzen oder zu beeinflussen.

⁶siehe 5.1, S.66

1. Beispiel (Atomphysik):

Bei radioaktivem Zerfall gilt für alle **kleinen** Zeitspannen Δt :

Die Abnahme der Partikel ΔN (auch: die Strahlungsabnahme) ist proportional zur bisherigen Anzahl der Partikel (auch: zur bisherigen Strahlung) und zur verstrichenen Zeitspanne.

Nach *Regel 4* gibt es eine von N und t unabhängige positive Konstante λ , so dass gilt:

$$\Delta N \approx -\lambda \cdot N \cdot \Delta t$$

Es folgt mit *Regel 11*:

$$\frac{dN}{dt} = -\lambda \cdot N$$

Die stoffspezifische Proportionalitätskonstante λ heißt die **Zerfallskonstante** der radioaktiven Substanz. Sie ist die **konstante momentane relative Änderungsrate der Partikelzahl N (und der Strahlung) bezüglich der Zeit**. Wird in der Proportionalitätsformel die Zeit in [h], [d] oder [a] gemessen, so hat λ entsprechend die Dimension $[h^{-1}]$, $[d^{-1}]$ oder $[a^{-1}]$.

2. Beispiel (Optik):

Die verbleibende Intensität I von monochromem Licht nach Eintritt in ein lichtdurchlässiges Medium ist eine Funktion der Eindringtiefe d in das Medium. Dabei gilt für alle **kleinen** Δd und die innerhalb dieser geringen Schichtdicke Δd erfolgte Intensitätsabnahme:

Die Intensitätsabnahme ΔI ist proportional zur bisher vorhandenen Lichtintensität I und zur durchdrungenen Schichtdicke Δd .

Nach *Regel 4* gibt es eine von I und D unabhängige positive Konstante μ , so dass gilt:

$$\Delta I \approx -\mu \cdot I \cdot \Delta d$$

Es folgt mit *Regel 11*:

$$\frac{dI}{dd} = I'(d) = -\mu \cdot I$$

In Worten: Die **momentane Änderungsrate** der Lichtintensität bezüglich der Eindringtiefe ist **proportional** zur noch vorhandenen Lichtintensität.

Die Proportionalitätskonstante μ heißt der **Absorptionskoeffizient**. μ ist nur vom Medium und der Wellenlänge des Lichts abhängig und ist die **konstante momentane relative Änderungsrate der Lichtintensität bezüglich der Eindringtiefe**. Wird in der Proportionalitätsformel die Eindringtiefe d in [cm] gemessen, so hat μ die Dimension $[cm^{-1}]$.

Bezeichnet $I_0 = I(0)$ die Anfangsintensität des Lichts vor Eindringen in das Medium, so heißt das Größenverhältnis $\frac{I(d)}{I_0}$ die **Transmission** τ (dimensionslos, mit Werten zwischen 0 und 1, evtl. in % ausgedrückt). Weil τ sich von I nur um einen konstanten Normierungsfaktor I_0^{-1} unterscheidet, gilt auch⁷

$$\tau'(d) = -\mu \cdot \tau$$

⁷denn nach der Faktorregel (D.1) gilt $\tau'(d) = (I_0^{-1} \cdot I(d))' = I_0^{-1} \cdot I'(d) = I_0^{-1} \cdot (-\mu \cdot I) = -\mu \cdot I_0^{-1} \cdot I = -\mu \cdot \tau$

In Worten: Die **momentane Änderungsrate** der Transmission bezüglich der Eindringtiefe ist **proportional** zur noch vorhandenen Transmission.

Der Absorptionskoeffizient μ ist also auch die **konstante momentane relative Änderungsrate der Transmission bezüglich der Eindringtiefe**.

Dieses optische Gesetz hat eine **wichtige Anwendung in der Chemie**:

Ist das Medium eine spezifisch eingefärbte Lösung des Stoffes A , so ist die Farbtintensität ein Indikator für die Konzentration der Lösung. Die Farbkraft wächst proportional zur Konzentration der Lösung, die Lichtdurchlässigkeit nimmt dabei ab. Genauer gilt dann:

Der Absorptionskoeffizient μ ist proportional zur Stoffmengenkonzentration c (Lambert⁸).

Da man μ durch Messungen bestimmen und dann daraus c errechnen kann, liefert dies die Grundlage für alle Techniken der **Konzentrationsbestimmung von Lösungen mittels Photometrie**⁹.

3. Beispiel (Reaktionskinetik):

Bei chemischen Reaktionen $A \longrightarrow$ Produkte verringert sich die Konzentration c_A des Edukts A (und seine Masse m , sein Volumen V) in Abhängigkeit von der Zeit t . Erfolgt der Abbau, was häufig, aber nicht immer der Fall ist, bei konstant gehaltener Temperatur nach einem natürlichen Abbaugesetz, so gilt

$$c_A'(t) = -k \cdot c_A(t)$$

mit einer (positiven) reaktionsspezifischen Konstanten k , welche temperatur-, aber nicht zeitabhängig ist. Wird die Zeit t in Sekunden gemessen, so hat k die Dimension s^{-1} . Die momentane Änderungsrate $c_A'(t)$ ohne ihr negatives Vorzeichen, also

$$\left| \frac{dc_A}{dt} \right| = |c_A'(t)| = -c_A'(t)$$

ist bekanntlich ein Maß für die **momentane Reaktionsgeschwindigkeit v** der chemischen Reaktion.¹⁰ Es gilt bei natürlichem Abbau von A daher die Gleichung

$$v = k \cdot c_A$$

Diese Formel heißt das **Geschwindigkeitsgesetz** der Reaktion, die spezifische Konstante k heißt die **Geschwindigkeitskonstante**.

Ersetzt man in dieser Formel c_A durch $0,99 \cdot c_A$, so ändert sich v in $0,99 \cdot v$, in Worten: Reduziert man die Konzentration des (einzigsten) Edukts um 1%, so reduziert sich auch die Geschwindigkeit der Reaktion um 1%. Mit dem Begriff der Ordnung einer chemischen Reaktion¹¹ folgt:

Verläuft eine chemische Reaktion $A \longrightarrow$ Produkte nach einem natürlichen Abbaugesetz, so ist sie eine chemische Reaktion 1. Ordnung.

⁸Johann Heinrich Lambert (1728 - 1777), elsässischer Mathematiker, Naturforscher und Philosoph, Begründer der Photometrie

⁹siehe 5.7.1, S.92 ff

¹⁰siehe 4.3.3, S.49

¹¹siehe 1.2.2

Erst im Abschnitt 5.10.2, S.105 werden wir nachweisen können, dass darüber hinaus keine anderen Reaktionen $A \rightarrow$ Produkte die Reaktionsordnung 1 haben.

Weil die Masse m , das Volumen V und die Stoffmenge n von A proportional zur Konzentration von A sind, genügen dann auch sie alle einem natürlichen Abbaugesetz mit der selben Konstanten k .

Die **Abhängigkeit** der Geschwindigkeitskonstanten k **von der Temperatur T** genügt, ganz grob gesagt, stets dem Muster "hohe Temperatur \Rightarrow schnelle Reaktion \Rightarrow großes k ". Bei vielen chemischen Reaktionen gibt es aber sogar eine präzise Berechnungsformel für k als Funktion von T in Form der sog. "Arrheniusgleichung".¹²

5.2 Berechnungsformel für natürliche Wachstumsgesetze

Problem: Seien c und y_0 beliebige reelle Konstante. Sei $y = f(x)$ eine Funktion von x , von welcher man nur weiß, dass sie das natürliche Wachstums-/Abbaugesetz

$$y' = c \cdot y$$

erfüllt und den

$$\text{Anfangswert } y(0) = y_0$$

hat.

Gesucht ist ein **Algorithmus**, um y aus x zu berechnen.

5.2.1 Fall $c = 1$ und $y_0 = 1$: Die Exponentialfunktion $y = \exp(x)$

Da alle stetigen Funktionen näherungsweise durch Polynome berechenbar sind,¹³ folgender

Lösungsansatz: Suche ein **Näherungspolynom**

$$f_n(x) = a_0 + a_1x + a_2x^2 + \dots + a_nx^n, \quad (5.1)$$

also ein Polynom n -ten Grades mit der Bedingung $y = f(x) \approx f_n(x)$.

1. Frage: Welches sind die optimalen Zahlwerte für die Konstanten $a_0, a_1, a_2, \dots, a_n$?

- f hat die Eigenschaft $f(0) = y_0 = 1$, andererseits ist $f_n(0) = a_0$ nach (5.1). Wähle also

$$a_0 = 1.$$

- f hat wegen $y' = c \cdot y = y$ die Eigenschaft $f'(x) = f(x)$. Deshalb soll das Polynom f_n die Eigenschaft

$$f'_n(x) \approx f_n(x)$$

¹²siehe unten, 5.5.2, S.85 ff

¹³siehe 2.2.6, S.21

haben. Aus dieser Forderung folgt durch Differenzieren von (5.1) gemäß *Regel 14*¹⁴

$$a_1 + 2a_2x + 3a_3x^2 + 4a_4x^3 + \dots + na_nx^{n-1} \approx a_0 + a_1x + a_2x^2 + a_3x^3 + \dots + a_{n-1}x^{n-1} + a_nx^n$$

Koeffizientenvergleich ergibt: Wähle

$$\begin{array}{llll} a_1 = a_0 & \implies & & a_1 = 1 \\ 2a_2 = a_1 & \implies & a_2 = \frac{a_1}{2} & \implies & a_2 = \frac{1}{2} \\ 3a_3 = a_2 & \implies & a_3 = \frac{a_2}{3} & \implies & a_3 = \frac{1}{2 \cdot 3} \\ 4a_4 = a_3 & \implies & a_4 = \frac{a_3}{4} & \implies & a_4 = \frac{1}{2 \cdot 3 \cdot 4} \\ & & \vdots & & \\ na_n = a_{n-1} & \implies & a_n = \frac{a_{n-1}}{n} & \implies & a_n = \frac{1}{2 \cdot 3 \cdot 4 \cdot \dots \cdot n} = \frac{1}{n!} \end{array}$$

Resultat: Wählt man

$$f_n(x) = 1 + x + \frac{1}{2}x^2 + \frac{1}{3!}x^3 + \dots + \frac{1}{n!}x^n, \quad (5.2)$$

so gilt $f_n(0) = 1$ und $f'_n(x) \approx f_n(x)$ mit dem

$$\text{absoluten Fehler } |f'_n(x) - f_n(x)| = \left| \frac{1}{n!}x^n \right|$$

Nenne diesen absoluten Fehler d_n . Dann liefern die unendlich vielen Polynome aus (5.2) ein Angebot von näherungsweise Berechnungsformeln für $y = f(x)$ nur dann, wenn der absolute Fehler d_n hinreichend klein wird. Dessen Wert hängt aber von x ab.

2. Frage: Sei für x ein fester Zahlwert eingesetzt. Wann wird der absolute Fehler d_n besonders klein?

- 1. Fall: $x = 0$: Dann ist $d_n = 0$ für alle $n \in \mathbb{N}$.
- 2. Fall: $x > 0$: Nimm ein $N \geq 2x$. Dann gilt für alle $n \geq N$

$$\begin{aligned} 2x &\leq n && | : 2n \\ \frac{x}{n} &\leq \frac{1}{2} \\ d_n &= \frac{1}{n!}x^n = \frac{1}{(n-1)!}x^{n-1} \cdot \frac{x}{n} = d_{n-1} \cdot \frac{x}{n} \leq \frac{1}{2} \cdot d_{n-1}. \end{aligned}$$

¹⁴siehe 4.4.1, S.52

$$\begin{aligned}
\text{Daraus folgt } d_{N+1} &\leq \frac{1}{2} \cdot d_N \\
d_{N+2} &\leq \frac{1}{2} \cdot d_{N+1} \leq \left(\frac{1}{2}\right)^2 \cdot d_N \\
d_{N+3} &\leq \frac{1}{2} \cdot d_{N+2} \leq \left(\frac{1}{2}\right)^3 \cdot d_N \\
&\vdots \\
d_{N+k} \dots &\leq \left(\frac{1}{2}\right)^k \cdot d_N \\
&\vdots
\end{aligned}$$

d.h. ab $n \geq N \geq 2x$ bilden die absoluten Fehler d_n eine monoton fallende Folge mit Grenzwert Null, die rascher gegen Null strebt, als die Folge $\left(\frac{1}{2}\right)^k d_N$ ($k = 1, 2, 3, \dots$).

- 3. Fall: $x < 0$: Da der Fehler absolut genommen wird, hat er denselben Wert wie für $|x|$, also gilt: Ab $n \geq N \geq 2|x|$ bilden die absoluten Fehler d_n eine monoton fallende Folge mit Grenzwert Null.

Daraus folgt: Für $x = 0$ tritt kein Fehler auf, für $x \neq 0$ werden die näherungsweisen Berechnungsformeln (5.2) ab $n \geq 2|x|$ allmählich brauchbar, und zwar umso besser, je größer n ist.

Sei für x ein fester Zahlwert gewählt und dazu der Zahlwert von $y = f(x)$ gesucht. Dann ist also

$$y_n = 1 + x + \frac{1}{2}x^2 + \frac{1}{3!}x^3 + \dots + \frac{1}{n!}x^n \quad (5.3)$$

eine Folge von Zahlen, die ab $n \geq 2|x|$ immer bessere Näherungswerte für y liefert.

3. Frage: Konvergiert die Folge y_1, y_2, y_3, \dots gegen einen Grenzwert \hat{y} ? Das wäre der exakte Wert von y !

- $x = 0$: Dann ist nach (5.3) $y_n = 1$ für alle n , die Folge y_1, y_2, y_3, \dots also konstant und somit konvergent gegen den Grenzwert $\hat{y} = 1 = y$.
- $x > 0$: Aus (5.3) ersieht man, dass

$$y_n = d_0 + d_1 + d_2 + d_3 + \dots + d_n$$

gilt, d.h. die Folge y_1, y_2, y_3, \dots ist die **summatorische Folge** zur Folge der d_n . Da die d_n alle positiv sind, ist die Folge y_1, y_2, y_3, \dots also **monoton wachsend**. Sie konvergiert nach *Regel 5 über monotone Konvergenz*¹⁵ nur dann, wenn sie eine obere Schranke besitzt.

¹⁵siehe 3.3.2, S.34

Nun gilt aber für alle $n \geq N \geq 2x$, wenn man $n = N + k$ setzt,

$$\begin{aligned}
 y_n &= y_N + d_{N+1} + d_{N+2} + d_{N+3} + \dots + d_n \\
 &= y_N + d_{N+1} + d_{N+2} + d_{N+3} + \dots + d_{N+k} \\
 &\leq y_N + \frac{1}{2}d_N + \left(\frac{1}{2}\right)^2 d_N + \left(\frac{1}{2}\right)^3 d_N + \dots + \left(\frac{1}{2}\right)^{N+k} d_N \\
 &= y_N + \frac{1}{2}d_N \left(\frac{1}{2} + \left(\frac{1}{2}\right)^2 + \left(\frac{1}{2}\right)^3 + \dots + \left(\frac{1}{2}\right)^{N+k} \right) \\
 &\stackrel{\text{Regel 8}}{=} y_N + \frac{1}{2}d_N \cdot \frac{1 - \left(\frac{1}{2}\right)^{N+k+1}}{1 - \frac{1}{2}} \\
 &< y_N + \frac{1}{2}d_N \cdot \frac{1}{1 - \frac{1}{2}} = y_N + d_N
 \end{aligned}$$

Für alle $n \geq N \geq 2x$ gilt somit $y_N \leq y_n \leq y_N + d_N$. Die Konstante $C = y_N + d_N$ ist also eine obere Schranke, und mit *Regel 5* ergibt sich: Für $x > 0$ konvergiert die Folge y_1, y_2, y_3, \dots monoton wachsend gegen einen Grenzwert \hat{y} , welcher zwischen den Eckwerten y_N und $y_N + d_N$ liegt. **Der Abstand zwischen \hat{y} und y_N ist also kleiner als d_N .**

- $x < 0$: Da sich $\frac{1}{n!}x^n$ vom absoluten Fehler $d_n = \left|\frac{1}{n!}x^n\right|$ nur bei allen ungeraden n durch das Vorzeichen unterscheidet, erkennt man aus (5.3), dass die Folge y_1, y_2, y_3, \dots nun dadurch entsteht, dass man die absoluten Fehler d_n abwechselnd addiert und subtrahiert. Die bilden aber ab $n \geq N \geq 2|x|$ eine monoton fallende Folge mit Grenzwert Null. Jetzt besagt *Regel 6 über alternierende Konvergenz*¹⁶: Die Folge y_1, y_2, y_3, \dots konvergiert ab $n \geq N \geq 2|x|$ alternierend gegen einen Grenzwert \hat{y} , der zwischen den Eckwerten y_{N-1} und y_N liegt. Deren Abstand ist gerade $= d_N$. **Also ist der Abstand zwischen \hat{y} und y_N wieder kleiner als d_N .**

Damit ist das Problem der Berechnung der Funktion $y = f(x)$, welche ein natürliches Wachstums-/Abbaugesetz $y' = c \cdot y$ erfüllt und den Anfangswert $y(0) = y_0$ hat, im Spezialfall $c = 1$ und $y_0 = 1$ vollständig gelöst. Wir erhalten:

R 22 Regel 22 (Algorithmus zur Berechnung der Exponentialfunktion):

Sei eine beliebige reelle Zahl als fester x -Wert gewählt. Für $n = 1, 2, 3, \dots$ berechne die Zahlen

$$y_n = 1 + x + \frac{1}{2}x^2 + \frac{1}{3!}x^3 + \dots + \frac{1}{n!}x^n,$$

kurz:

$$y_n = \sum_{k=0}^n \frac{1}{k!}x^k.$$

Dann konvergiert die Folge y_1, y_2, y_3, \dots (=die summatorische Folge¹⁷ zur Folge der $d_k = \frac{1}{k!}x^k$) stets gegen einen Grenzwert \hat{y} . Der Zahlwert von \hat{y} ist durch den Zahlwert von x total determiniert.

¹⁶siehe 3.3.2, S.35

¹⁷siehe 3.3.3, S.35

\hat{y} ist also eine Funktion von x und besitzt ganz \mathbb{R} als Definitionsbereich. Sie heißt **die natürliche Wachstumsfunktion** oder **die Exponentialfunktion** (ältere Sprechweise: **e-Funktion**).

Schreibweisen:

$$\hat{y} = \exp(x) \text{ oder (älter) } y = e^x. \text{ Für } \hat{y} \text{ schreibt man vereinfacht } y.$$

$y = \exp(x)$ ist die einzige Funktion, welche die Eigenschaften

$$y' = y \quad \text{und} \quad f(0) = y_0 = 1$$

besitzt. Sie ist durch diese beiden Eigenschaften vollständig determiniert.

Regel 23 (Absoluter Fehler bei der Berechnung der Exponentialfunktion):

R 23

Für $y = \exp(x)$ gibt es keine elementare Berechnungsmethode, d.h. kein Verfahren, den exakten Wert in endlich vielen Schritten mit Punkt- und Strichrechnung auszurechnen, sondern nur Näherungsverfahren.

Bei der näherungsweise Berechnung mittels

$$y_n = 1 + x + \frac{1}{2}x^2 + \frac{1}{3!}x^3 + \dots + \frac{1}{n!}x^n$$

gilt für den absoluten Fehler $\Delta y = |y_n - \exp(x)|$ die Abschätzung

$$|\Delta y| \leq \frac{|x|^n}{n!} \quad \text{sobald nur } n \geq 2|x| \text{ ist.}$$

Regel 24 (Wert der Exponentialfunktion an der Stelle 0):

R 24

$$\exp(0) = 1.$$

Regel 25 (Ableitung der Exponentialfunktion):

R 25

$$\exp'(x) = \exp(x).$$

5.2.2 Fall c und y_0 im Wert beliebig: Allgemeine Exponentialfunktionen

Regel 26 (Berechnungsformel für alle natürlichen Wachstums-/Abbauprozesse):

R 26

Ist x irgendeine Variable und sind c und y_0 beliebige Konstanten (auch negativ möglich), so gibt es stets genau eine einzige mathematische Funktion $y = f(x)$, welche das natürliche Wachstums- bzw. Abbaugesetz $y' = c \cdot y$ mit dem Anfangswert $f(0) = y_0$ erfüllt.

Ihr Name: **allgemeine Exponentialfunktion**

Ihre Berechnungsformel: $y = y_0 \cdot \exp(cx)$ ältere Schreibweise: $y = y_0 \cdot e^{cx}$.

Ihre Ableitung: $y' = c \cdot y_0 \cdot \exp(cx)$ bzw. $y' = c \cdot y_0 \cdot e^{cx}$.

Eine Stammfunktion: $u = \frac{1}{c} \cdot y_0 \cdot \exp(cx)$ bzw. $u = \frac{1}{c} \cdot y_0 \cdot e^{cx}$.

Beweis von Regel 26: Die Bedingungen

$$y' = c \cdot y \quad \text{und} \quad y(0) = y_0 \quad (5.4)$$

werden von der Funktion $y = y_0 \cdot \exp(cx)$ erfüllt, wie Nachrechnen¹⁸ zeigt:

$$\begin{aligned} y' &= (y_0 \cdot \exp(cx))' && | \text{Faktorregel (D.1)} \\ &= y_0 \cdot (\exp(cx))' && | \text{Kettenregel (D.5)} \\ &= y_0 \cdot \exp'(cx) \cdot (cx)' && | \text{Regel 25 und Regel 12} \\ &= y_0 \cdot \exp(cx) \cdot c \\ &= c \cdot (y_0 \cdot \exp(cx)) \\ &= c \cdot y \\ y(0) &= y_0 \cdot \exp(0) && | \text{Regel 24} \\ &= y_0 \cdot 1 \\ &= y_0 \end{aligned}$$

Einzigkeit dieser Funktion: Sei $u = g(x)$ noch eine Funktion von x mit den entsprechenden Eigenschaften, also

$$u' = c \cdot u \quad \text{und} \quad u(0) = y_0 \quad (5.5)$$

Für die Quotientenfunktion $q(x) = \frac{u(x)}{y(x)}$ (= das Größenverhältnis $u : y$) gilt:

$$\begin{aligned} q' &= \left(\frac{u}{y}\right)' && | \text{Quotientenregel (D.4)} \\ &= \frac{u' \cdot y - u \cdot y'}{y^2} && | \text{Einsetzen von (5.4) und (5.5)} \\ &= \frac{c \cdot u \cdot y - u \cdot c \cdot y}{y^2} \\ &= 0, && \text{und zwar für alle Zahlwerte von } x. \end{aligned}$$

Eine Funktion von x , deren Ableitung konstant $= 0$ ist, besitzt als Graph eine horizontale Gerade, d.h. es gibt eine Konstante a , so dass $q(x) = a$ gilt für alle Werte von x .

Berechnung von a : Setze $x = 0$ ein. Dann gilt nach (5.4) und (5.5)

$$a = q(0) = \frac{u(0)}{y(0)} = \frac{y_0}{y_0} = 1,$$

also ist $q(x) = 1$ und somit $u(x) = y(x)$ für alle Zahlwerte von x , was zu zeigen war. \square

5.2.3 Beispiele

1. Beispiel (Biologie):¹⁹

Wächst die Masse $m[g]$ einer Bakterienpopulation mit der Anfangsmasse $m(0) = m_0[g]$ im Laufe der Zeit $t[h]$ ungehemmt nach einem natürlichen Wachstumsgesetz $m'(t) = c \cdot m$,

¹⁸zu den zitierten Rechenregeln siehe 4.4.1, S.51 ff

¹⁹siehe 5.1.1, S.67

so hat die konstante momentane relative Änderungsrate c die Dimension $[h^{-1}]$, und die Masse berechnet sich aus der Zeit nach der Formel

$$m[g] = m_0[g] \cdot \exp(c[h^{-1}] \cdot t[h]),$$

kurz:

$$m = m_0 \cdot \exp(ct) [g].$$

2. Beispiel (Optik):²⁰

Ist τ (dimensionslos) die Transmission von monochromem Licht bei Durchtritt durch ein Medium und $\mu[cm^{-1}]$ der Absorptionskoeffizient, so gilt, weil $\tau(0) = \tau_0 = 1$ ist und das Abbaugesetz $\tau'(t) = -\mu \cdot \tau$ erfüllt ist, folgende Berechnungsformel für τ als Funktion der Eindringtiefe d :

$$\tau = \exp(-\mu[cm^{-1}] \cdot d[cm]),$$

kurz:

$$\tau = \exp(-\mu d).$$

3. Beispiel (Reaktionskinetik):²¹

Genügt die Reaktion $A \rightarrow$ Produkte einem natürlichen Abbaugesetz (und ist somit eine chemische Reaktion 1. Ordnung), und ist $k[s^{-1}]$ bei gegebener konstanter Temperatur ihre Geschwindigkeitskonstante, so gilt für die Konzentration $c_A([mol \cdot l^{-1}])$ als Funktion der Zeit $t[s]$ das natürliche Abbaugesetz

$$c_A'(t) = -k \cdot c_A(t).$$

Ist $(c_A)_0$ die Anfangskonzentration, so berechnet sich folglich die Konzentration als Funktion der Zeit nach der Formel

$$c_A[mol \cdot l^{-1}] = (c_A)_0[mol \cdot l^{-1}] \cdot \exp(-k[s^{-1}] \cdot t[s]),$$

kurz:

$$c_A = (c_A)_0 \cdot \exp(-kt) \quad [mol \cdot l^{-1}].$$

Entsprechende Berechnungsformeln besitzen die übrigen Beispiele von natürlichen Wachstums- bzw. Abbauprozessen aus 5.1.1 und 5.1.2.

5.3 Eigenschaften der Exponentialfunktion $y = \exp(x)$

Wähle eine beliebige Zahl $a \in \mathbb{R}$ und errechne dazu die Zahl $y_0 = \exp(a)$. Dann hat die Funktion

$$y = \exp(a + x) \tag{5.6}$$

den Anfangswert $y(0) = \exp(a) = y_0$, und für ihre Ableitung gilt nach der Kettenregel (D.5)

$$y' = (\exp(a + x))' = \exp'(a + x) \cdot (a + x)' \stackrel{\text{Regel 25}}{=} \exp(a + x) \cdot 1 \stackrel{(5.6)}{=} 1 \cdot y$$

²⁰ siehe 5.1.2, S.69

²¹ siehe ebenda, S.70

Die Funktion erfüllt also das Wachstumsgesetz $y' = 1 \cdot y$ mit dem Anfangswert $y(0) = y_0$. Nach *Regel 26*²² gibt es aber nur eine einzige solche Funktion, und die hat die Berechnungsformel

$$y = y_0 \cdot \exp(1 \cdot x) = \exp(a) \cdot \exp(x). \quad (5.7)$$

Daher sind (5.6) und (5.7) gleichzusetzen, und es ergibt sich

$$\exp(a + x) = \exp(a) \cdot \exp(x) \quad \text{für alle } x \in \mathbb{R}.$$

Da aber auch a beliebig in \mathbb{R} gewählt war, erhalten wir

R 27 **Regel 27 (Additionstheorem der Exponentialfunktion):**

Für alle $a, b \in \mathbb{R}$ gilt

$$\exp(a + b) = \exp(a) \cdot \exp(b).$$

Setzt man in dieser Formel speziell $b = -a$ ein, so erhält man

$$\exp(a) \cdot \exp(-a) = \exp(a + (-a)) = \exp(0) \stackrel{\text{Regel 24}}{=} 1$$

und daraus

R 28 **Regel 28 (Wert von $\exp(-a)$):**

Für alle $a \in \mathbb{R}$ gilt

$$\exp(-a) = \frac{1}{\exp(a)}.$$

5.3.1 Historischer Exkurs: Erklärung der Namen “Exponentialfunktion“ und “e-Funktion“ für die natürliche Wachstumsfunktion $y = \exp(x)$

Bezeichnung: *Die Konstante*

$$\exp(1) = \lim_{n \rightarrow \infty} \sum_{k=0}^n \frac{1}{k!} = \lim_{n \rightarrow \infty} \left(1 + 1 + \frac{1}{2} + \frac{1}{2 \cdot 3} + \frac{1}{2 \cdot 3 \cdot 4} + \dots + \frac{1}{n!} \right)$$

heißt die **Eulersche**²³ **Zahl e**.

Nach *Regel 23*²⁴ ist der absolute Fehler $|\Delta e|$ zwischen e und dem Näherungswert $y_7 = 1 + 1 + \frac{1}{2} + \dots + \frac{1}{7!} = 2,71825\dots$ kleiner als $d_7 = \frac{1}{7!} < 2 \cdot 10^{-4}$. Also liegt e zwischen den Eckwerten $2,71805\dots$ und $2,71845\dots$. Damit ist e auf 3 Stellen gerundet berechnet:

$$e \approx 2,718$$

(Es gilt $e \notin \mathbb{Q}$, d.h. e hat unendlich viele, nicht periodisch geordnete Nachkommastellen).

Die Funktion $y = \exp(x)$ ist für alle $x \in \mathbb{R}$ erklärt und beliebig genau näherungsweise berechenbar (siehe *Regeln 22, 23*). Potenzen e^n der Konstante e sind hingegen ursprünglich nur für

²²siehe 5.2.2, S.75

²³Leonhard Euler (1707 - 1783), schweizer Mathematiker

²⁴siehe 5.2.1, S.75

ganzzahlige Exponenten n erklärt und durch einfaches Ausmultiplizieren berechenbar. Dabei ergibt sich aber aufgrund des *Additionstheorems Regel 27* folgender Zusammenhang:

$$\begin{array}{ll} \exp(2) = \exp(1 + 1) = \exp(1) \cdot \exp(1) = e \cdot e, \text{ also} & \exp(1) = e \\ \exp(3) = \exp(2 + 1) = \exp(2) \cdot \exp(1) = e^2 \cdot e, \text{ also} & \exp(2) = e^2 \\ \exp(4) = \exp(3 + 1) = \exp(3) \cdot \exp(1) = e^3 \cdot e, \text{ also} & \exp(3) = e^3 \\ & \exp(4) = e^4 \\ & \vdots \\ \text{insgesamt:} & \exp(n) = e^n \quad \text{für alle } n \in \mathbb{N} \\ \exp(-n) \stackrel{\text{Regel 28}}{=} \frac{1}{\exp(n)} = \frac{1}{e^n}, \text{ also} & \exp(-n) = e^{-n} \quad \text{für alle } n \in \mathbb{N}. \end{array}$$

Zwischen der Eulerschen Konstanten e und der natürlichen Wachstumsfunktion $y = \exp(x)$ besteht also die Beziehung

$$\exp(n) = e^n \quad \text{für alle **ganzen Zahlen** } n \in \mathbb{Z}.$$

Das hat der natürlichen Wachstumsfunktion $y = \exp(x)$ den Namen “e-Funktion“ beschert und zur symbolischen Schreibweise “ e^x “ anstelle von $\exp(x)$ auch dann geführt, wenn der Wert von x nicht ganzzahlig ist und somit $\exp(x)$ gar nicht durch mehrfaches Multiplizieren der Zahl e mit sich selbst berechenbar ist. Da bei der traditionellen Schreibweise $y = e^x$ die freie Variable x im Exponenten auftaucht, hat sich darüber hinaus für diese Funktion der Name “Exponentialfunktion“ eingebürgert.

Merke: Für nicht ganzzahliges x ergibt sich der Sinn und die beliebig genaue Berechnungsmöglichkeit von e^x nur mit Hilfe der *Regeln 22 und 23*:

$$“e^x“ \approx 1 + x + \frac{x^2}{2} + \frac{x^3}{3!} + \dots + \frac{x^n}{n!},$$

wobei der absolute Fehler kleiner als $|x^n|/n!$ ist, sobald $n \geq 2|x|$ ist.

Heute berechnet der Taschenrechner e^x mit dieser Näherungsformel.

5.3.2 Graph und qualitative Eigenschaften der Exponentialfunktion

Weil die Exponentialfunktion ein natürliches Wachstumsgesetz erfüllt, also streng monoton wachsend ist²⁵, und für $x = 0$ den Wert 1 hat, gilt

$$\exp(x) > 1 \quad \text{für alle } x > 0$$

und folglich mit *Regel 28*: $\exp(-x) = \frac{1}{\exp(x)}$ ist größer als 0 und kleiner als 1 für $x > 0$. Daraus folgt

Regel 29 (Vorzeichen der Exponentialfunktion):

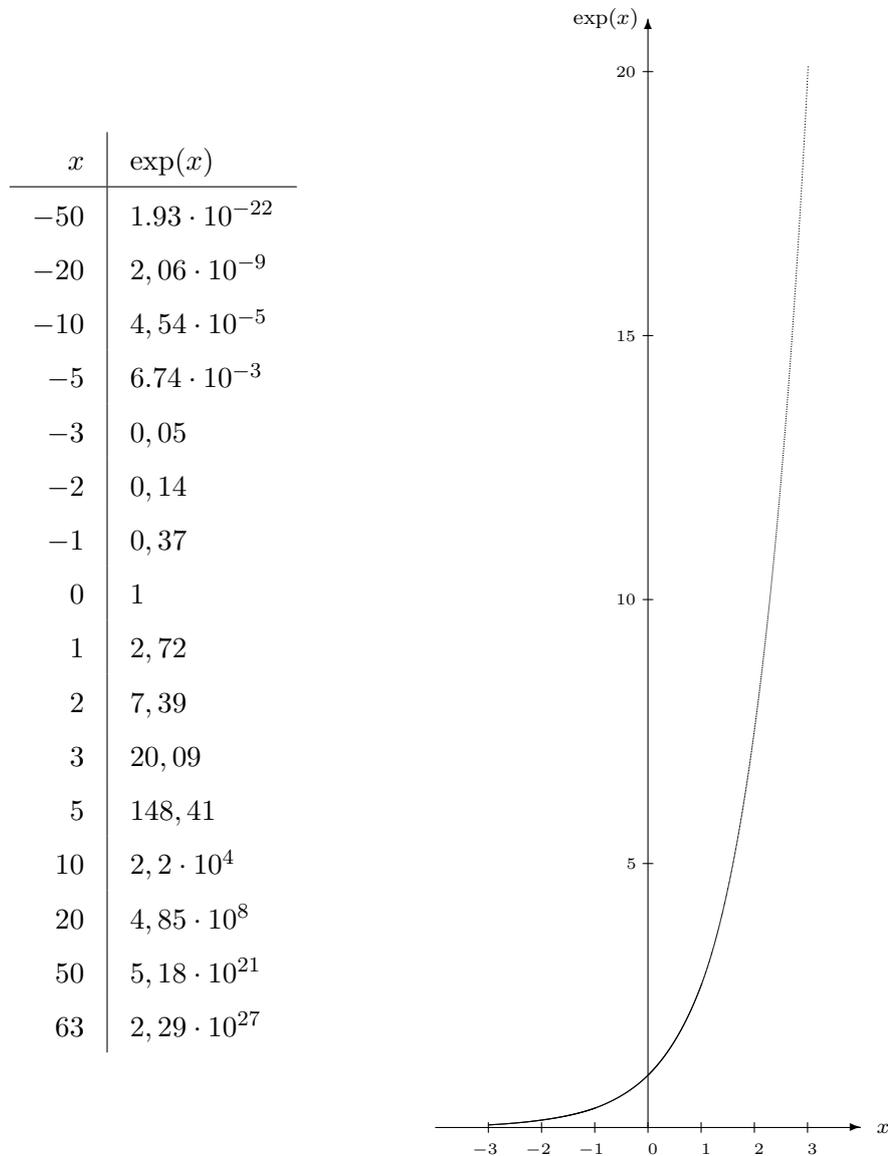
$y = \exp(x)$ nimmt für alle $x \in \mathbb{R}$ nur positive Werte an, d.h.

$$\exp(x) > 0 \quad \text{für alle } x \in \mathbb{R}.$$

R 29

²⁵siehe 5.1, S.66

Abbildung 5.1: Wertetabelle und Graph der Exponentialfunktion

**Das Verhalten der Exponentialfunktion ist für $x > 1$ katastrophal:**

Während der Graph über der halben x -Achse (nämlich für alle negativen x) nahezu bei $y = 0$ verläuft und das Wachstum extrem schwach ist, biegt der Graph für $x > 1$ plötzlich fast senkrecht nach oben mit einer Steigung, die dramatisch schnell immer mehr zunimmt.

Würde man den Graphen an einer Wandtafel veranschaulichen im Maßstab $1 \hat{=} 10\text{cm}$, so entspräche $\exp(10)$ schon mehr als 2km und $\exp(63)$ dem doppelten Durchmesser des Universums, welcher ungefähr 10^{10} Lichtjahre beträgt ($1 \text{ Lichtjahr} = 9,46 \cdot 10^{12}\text{km} \approx 10^{16}\text{m}$).

Das hat eine für den Anwender sehr wichtige Konsequenz hinsichtlich der Fehlerrechnung: Für $x > 1$ hat schon ein kleiner absoluter Fehler $|\Delta x|$ einen sehr großen absoluten Fehler $|\Delta y|$ zur Folge!

WARNUNG: Soll auf eine Zahl $x > 1$ später noch die Exponentialfunktion angewandt werden, so muss diese Zahl zunächst auf möglichst viele Nachkommastellen genau bestimmt werden. Andernfalls ergibt sich für $\exp(x)$ ein unbrauchbarer, weil zu ungenauer Wert.

Trägt man auf der waagerechten Achse statt der Variablen x die Variable $u = c \cdot x$ ab (das entspricht einer Maßstabsänderung auf der waagerechten Achse) und auf der senkrechten Achse statt der Variablen y die Variable $w = \frac{y}{y_0}$ (das entspricht einer Maßstabsänderung auf der senkrechten Achse), so ist der Graph von $y = y_0 \cdot \exp(cx)$ identisch mit dem Graphen von $w = \exp(u)$. Das bedeutet:

Typischer Graph bei natürlichem Wachstum:

Der Graph einer beliebigen allgemeinen Exponentialfunktion

$$y = y_0 \cdot \exp(cx) \text{ mit } c > 0$$

unterscheidet sich von dem der Exponentialfunktion $y = \exp(x)$ nur durch Maßstabsänderungen auf beiden Achsen. Das katastrophale Wachstumsverhalten bleibt dabei prinzipiell erhalten.

Die Abbaufunktion $y = y_0 \cdot \exp(-cx)$ kann aus der Wachstumsfunktion $y = y_0 \cdot \exp(cx)$ dadurch erzeugt werden, dass man x durch $-x$ ersetzt. Daraus folgt:

Typischer Graph bei natürlichem Abbau:

Der Graph einer beliebigen allgemeinen Exponentialfunktion

$$y = y_0 \cdot \exp(-cx) \text{ mit } c > 0$$

entsteht aus dem Graphen von $y = y_0 \cdot \exp(cx)$ durch Spiegelung an der senkrechten Achse:

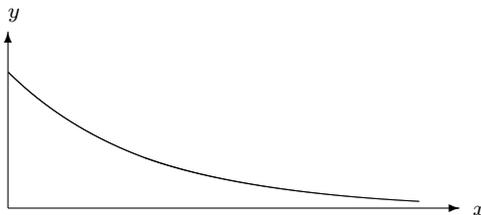


Abbildung 5.2: Graph bei natürlichem Abbau, Verlauf für $x \geq 0$

5.4 Der natürliche Logarithmus ln (= logarithmus naturalis)

Da streng monoton wachsend, besitzt die Funktion $y = \exp(x)$ gemäß *Regel 1²⁶* eine Umkehrfunktion.

Bezeichnung: *Die Umkehrfunktion der natürlichen Wachstumsfunktion $y = \exp(x)$ heißt der natürliche Logarithmus ln, d.h.*

$$y = \exp(x) \text{ und } x = \ln y \text{ sind gleichbedeutend.}$$

²⁶siehe 2.2, S.16

Der Zusammenhang zwischen den Graphen von Funktion und Umkehrfunktion²⁷ liefert:

Graph und Wertebereich des natürlichen Logarithmus \ln :

Der Graph des natürlichen Logarithmus \ln entsteht aus dem Graphen der Exponentialfunktion $y = \exp(x)$ durch Spiegelung an der 1. Winkelhalbierenden.

Insbesondere ist $\ln(x)$ nur für positive x definiert.

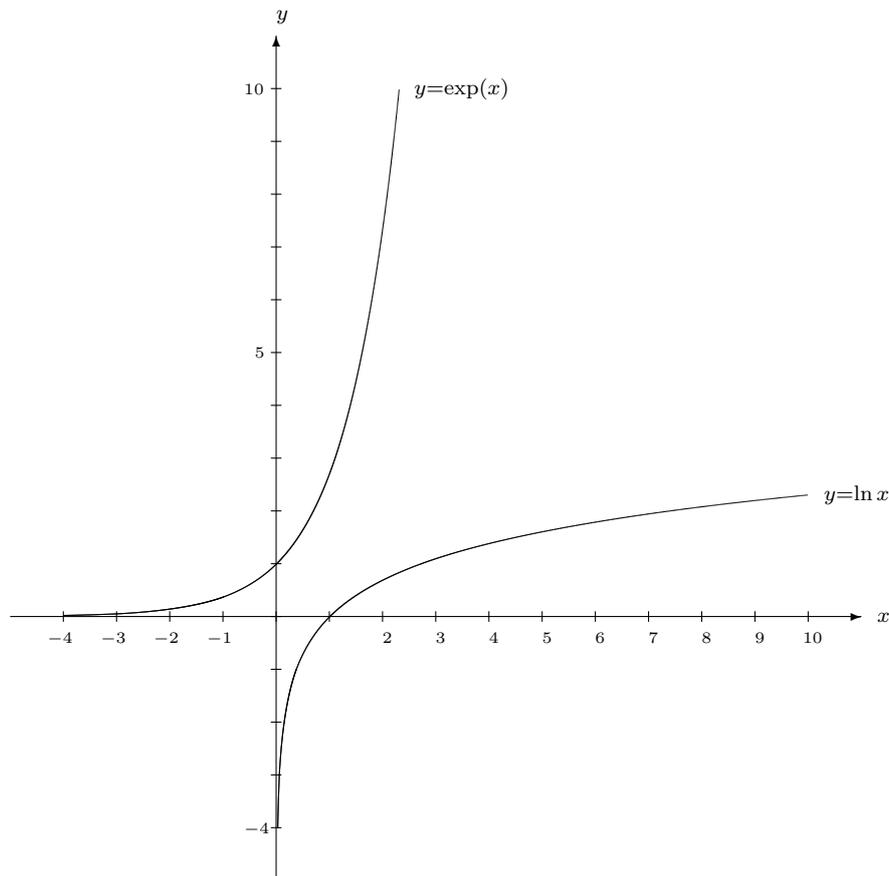


Abbildung 5.3: Graph von \exp und \ln

R 30 Regel 30 (ln hebt exp auf und umgekehrt):

$$\begin{aligned} \ln(\exp(x)) &= x && \text{für alle } x \in \mathbb{R}, \\ \exp(\ln(x)) &= x && \text{für alle } x > 0. \end{aligned}$$

R 31 Regel 31 (Vorzeichen von ln):

$$\begin{aligned} \ln 1 &= 0. \\ \text{Für } 0 < x < 1 &\text{ ist } \ln x \text{ negativ.} \\ \text{Für } x > 1 &\text{ ist } \ln x \text{ positiv.} \end{aligned}$$

²⁷siehe 2.2, S.15

Wachstumsverhalten des ln:

Der natürliche Logarithmus \ln ist eine streng monoton wachsende Funktion. Für x -Werte zwischen 0 und 1 ist dieses Wachstum extrem stark, für $x > 1$ extrem schwach.

Das hat eine für den Anwender sehr wichtige Konsequenz hinsichtlich der Fehlerrechnung: Für $x < 1$ hat schon ein kleiner absoluter Fehler $|\Delta x|$ einen sehr großen absoluten Fehler $|\Delta y|$ zur Folge!

WARNUNG: Soll auf eine Zahl $x < 1$ später noch der Logarithmus angewandt werden, so muss diese Zahl zunächst auf möglichst viele Nachkommastellen genau bestimmt werden. Andernfalls ergibt sich für $\ln(x)$ ein unbrauchbarer, weil zu ungenauer Wert.

Die Rechenregeln des natürlichen Logarithmus folgen aus denen der Exponentialfunktion:

- Zu $a, b > 0$ bilde $c = \ln a$ und $d = \ln b$. Also gilt
 $\exp(c) = \exp(\ln a) \stackrel{\text{Regel 30}}{=} a$ und $\exp(d) = \exp(\ln b) \stackrel{\text{Regel 30}}{=} b$. Daraus folgt
 $\ln(a \cdot b) = \ln(\exp(c) \cdot \exp(d)) \stackrel{\text{Regel 27}}{=} \ln \exp(c + d) \stackrel{\text{Regel 30}}{=} c + d = \ln a + \ln b$.

$$\ln(a \cdot b) = \ln a + \ln b \quad \text{für alle positiven } a \text{ und } b. \quad (5.8)$$

- Wähle speziell $b = \frac{1}{a}$. Dann gilt
 $\ln \frac{1}{a} = \ln \frac{1}{a} + \ln a - \ln a \stackrel{(5.8)}{=} \ln\left(\frac{1}{a} \cdot a\right) - \ln a = \ln 1 - \ln a \stackrel{\text{Regel 31}}{=} -\ln a$.

$$\ln \frac{1}{a} = -\ln a \quad \text{für alle positiven } a. \quad (5.9)$$

- $\ln\left(\frac{a}{b}\right) = \ln\left(a \cdot \frac{1}{b}\right) \stackrel{(5.8)}{=} \ln a + \ln\left(\frac{1}{b}\right) \stackrel{(5.9)}{=} \ln a - \ln b$.

$$\ln\left(\frac{a}{b}\right) = \ln a - \ln b \quad (5.10)$$

Mit (5.8), (5.9) und (5.10) erhalten wir die

Rechenregeln des natürlichen Logarithmus:

- (L.1) $\ln(a \cdot b) = \ln a + \ln b$ für alle positiven a und b .
 (L.2) $\ln \frac{1}{a} = -\ln a$ für alle positiven a .
 (L.3) $\ln\left(\frac{a}{b}\right) = \ln a - \ln b$ für alle positiven a und b .

WARNUNG: ~~$\ln(a \pm b) = ?$~~

Für alle $x > 0$ gilt $x = \exp(\ln x)$ (nach Regel 30)
 $x' = (\exp(\ln x))'$
 $1 = \exp'(\ln x) \cdot \ln'(x)$ (nach der Kettenregel)
 $1 = \exp(\ln x) \cdot \ln'(x)$ (nach Regel 25)
 $1 = x \cdot \ln'(x)$ (nach Regel 30)

Dividiert man die letzte Gleichung auf beiden Seiten durch x , so folgt

R 32 Regel 32 (Ableitung des natürlichen Logarithmus):

$$\ln'(x) = \frac{1}{x} \quad \text{für alle positiven } x.$$

5.5 Drei Anwendungen des natürlichen Logarithmus

5.5.1 Graphischer Test für natürliches Wachstum/Abbau

Folgende Aussagen sind äquivalent:

$y = f(x)$ genügt einem natürlichen Wachstum-/Abbaugesetz $y' = c \cdot y$ mit dem Anfangswert $y(0) = y_0$

$$\begin{array}{l} \iff \\ \text{Regel 26} \end{array} \quad y = y_0 \cdot \exp(cx)$$

$$\begin{array}{l} \iff \\ \text{(L.1)} \end{array} \quad \ln y = \ln y_0 + \ln(\exp(cx))$$

$$\begin{array}{l} \iff \\ \text{Regel 30} \end{array} \quad \ln y = \ln y_0 + cx$$

$$\iff \quad \ln y = A + B \cdot x$$

$$\iff \quad \text{Geradengleichung für } \ln y \text{ als Funktion von } x \\ \text{mit } A = \ln y_0 \text{ und } B = c.$$

R 33 Regel 33 (Graphischer Test auf allgemeine Exponentialfunktion und Bestimmung einer bestmöglichen Berechnungsformel):

Von $y = f(x)$ sei keine Berechnungsformel, aber eine Wertetabelle bekannt. Dann gilt:

a) $y = f(x)$ erfüllt dann, aber auch nur dann, ein natürliches Wachstums-/Abbaugesetz $y' = c \cdot y$ mit dem Anfangswert $y(0) = y_0$ und hat somit die Berechnungsformel $y = y_0 \cdot \exp(cx)$, wenn die Punkte $(x | \ln y)$ ungefähr auf einer Geraden liegen: $\ln y = A + B \cdot x$.

Dies testet man graphisch entweder, indem man zunächst in einer dritten Rubrik der Wertetabelle zu den gegebenen y -Werten die zugehörigen $\ln y$ -Werte berechnet und dann in einem selbstkonstruierten Koordinatensystem mit normaler äquidistanter Skalierung auf jeder der beiden Achsen die Punkte $(x | \ln y)$ einträgt,

oder schneller, indem man direkt die vorgegebenen Punkte $(x | y)$ der Wertetabelle in halblogarithmisches Papier²⁸ einträgt, wobei die senkrechte Achse (= y -Achse) eine logarithmische Skalierung besitzen muss.

Ob die Punkte im Graphen ungefähr auf einer Geraden liegen, muss durch **Linealtest** geklärt werden.²⁹

b) Liegen die Punkte im Testgraphen auf einer Geraden, so kann man anschließend eine nach Datenlage **bestmögliche Berechnungsformel** $y = y_0 \cdot \exp(cx)$ ermitteln wie folgt: Man berechnet zunächst durch Lineare Regression (Drei-Schritt-Verfahren), angewandt auf $v = x$ und $w = \ln y$, die Konstanten B und A der Geradengleichung (Beachte: Hat man den graphischen Test mit halblogarithmischem Papier ausgeführt, so muss man jetzt ggf. zunächst die $\ln y$ -Werte berechnen). Daraus bestimmt man sodann $c = B$ und $y_0 = e^A$. (Achtung! Ist A größer als 1, so muss A sehr genau berechnet werden.³⁰)

²⁸Näheres zur Benutzung dieses Spezialpapiers im Anhang A, S.207ff

²⁹siehe 3.1.5, S.24

³⁰siehe Warnung in 5.3.2, S.79ff

Weiß man, dass y als Funktion von x einem natürlichen Wachstums- oder Abbaugesetz genügt (aus naturwissenschaftlicher Fachkenntnis oder als Ergebnis des graphischen Tests in *Regel 33a*) und will man den Aufwand einer Linearen Regressionsrechnung vermeiden, so kann man folgende Regel ausnutzen:

Regel 34 (Berechnung allgemeiner Exponentialfunktionen aus 2 Wertepaaren):

R 34

Ist dem Fachwissenschaftler prinzipiell schon bekannt, dass $y = f(x)$ einem natürlichen Wachstums- oder Abbaugesetz genügt, also eine Berechnungsformel vom Typ $y = y_0 \cdot \exp(cx)$ besitzt, so kann man den Zahlwert der Konstanten c und y_0 schon aus zwei Wertepaaren (x_1, y_1) und (x_2, y_2) wie folgt berechnen:

$$1. \text{ Schritt: } c = \frac{\ln y_2 - \ln y_1}{x_2 - x_1} \quad (\text{Steigung der Geraden durch } (x_1 | \ln y_1) \text{ und } (x_2 | \ln y_2)),$$

$$2. \text{ Schritt: } y_0 = \frac{y_i}{\exp(cx_i)} \quad (\text{wahlweise für } i = 1 \text{ oder } 2).$$

Da nur ein Minimum an Wertepaaren der Funktion verwendet wurde, liefert dieses Verfahren evtl. eine nicht besonders genau passende Formel.

5.5.2 Die Arrheniusgleichung

Erfolgt eine chemische Reaktion $A \rightarrow$ Produkte nach einem natürlichen Abbaugesetz (und ist somit von 1. Ordnung³¹), dann liegen nach *Regel 33a* die Punkte $(t | \ln c_A)$ auf einer Geraden. Es gilt dann

$$c_A = (c_A)_0 \cdot \exp(-kt) \quad \text{mit der Geschwindigkeitskonstanten } \mathbf{k}.$$

k ist (bis auf das fehlende negative Vorzeichen) die konstante momentane relative Änderungsrate der Konzentration c_A (auch der Masse, des Volumens) bezüglich der Zeit und berechnet sich, wenn man nur zwei Wertepaare benutzt, nach *Regel 34* wie folgt:

$$-k = \frac{\ln(c_A)_2 - \ln(c_A)_1}{t_2 - t_1} \quad \left(\text{oder speziell für } t_1 = 0 : -k = \frac{\ln(c_A)_2 - \ln(c_A)_0}{t_2} \right). \quad (5.11)$$

Auch bei chemischen Reaktionen, die nicht von 1. Ordnung sind, ist die Reaktionsgeschwindigkeit unter anderem durch eine sog. Geschwindigkeitskonstanten k charakterisiert (Genauerer dazu s.u., 5.10.3, S.106). Stets gilt dabei: Je größer k , umso schneller die Reaktion.

Es wurde zu Recht vermutet, dass der Zahlwert von k nicht nur von der chemischen Reaktion abhängt, sondern auch von der Temperatur $T[\text{K}]$, unter der die Reaktion abläuft. Schon Ende des 19. Jahrhunderts wurde von Arrhenius³² für verschiedene Reaktionen die Temperaturabhängigkeit von k untersucht. Für viele chemische Reaktionen (auch solche, die nicht von 1. Ordnung sind) ergab sich: Bestimmt man für verschiedene Temperaturwerte die zugehörigen k -Werte gemäß Formel (5.11), so gilt:

$$\text{Die Punkte } (T^{-1} | \ln k) \text{ liegen auf einer Geraden mit der Steigung } -b. \quad (5.12)$$

³¹siehe 5.1.2, S.70 f, und 5.2.3, S.77

³²Svante Arrhenius (1859 - 1927), schwedischer Physiker und Chemiker

Das bedeutet nach *Regel 33*: Die Geschwindigkeitskonstante k als Funktion der Variablen $x = T^{-1}$ erfüllt das natürliche Abbaugesetz $k' = \frac{dk}{dx} = -b \cdot k$ und genügt daher der Formel

$$k = k_0 \cdot \exp\left(-b \cdot \frac{1}{T}\right) \quad (\text{Arrhenius-Gleichung, 1889}) \quad (5.13)$$

Dabei ist

- k_0 der Wert der Geschwindigkeitskonstante für $T^{-1} = 0$, d.h. bei Temperatur $T = \infty$ (wird nie erreicht!); in die Nähe dieses Maximalwertes für k kommt man etwa bei Temperaturen von weit über 1000 Kelvin.
- b eine reaktionsspezifische Konstante der Dimension [K], für die gilt:

$$b = \frac{E_a}{R},$$

wobei E_a die Aktivierungsenergie [$\text{J} \cdot \text{mol}^{-1}$] und $R = 8,3144\,126$ [$\text{J} \cdot \text{K}^{-1} \cdot \text{mol}^{-1}$] die universelle Gaskonstante ist.

Abbildung 5.4: Arrheniusgleichung: k als Funktion von T^{-1}

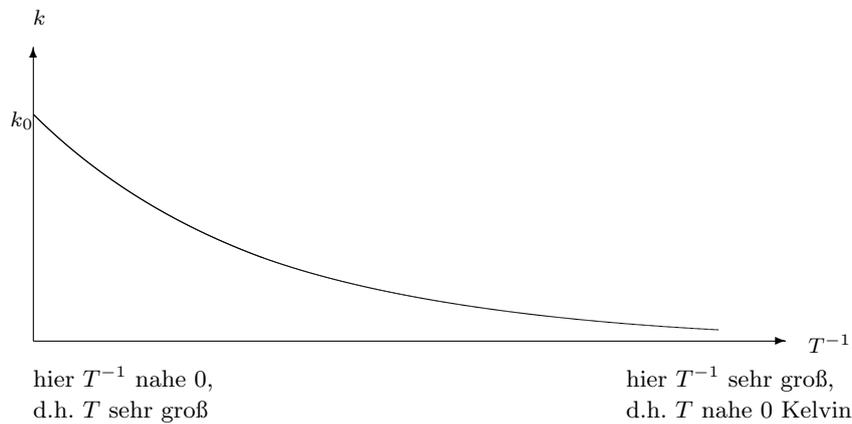
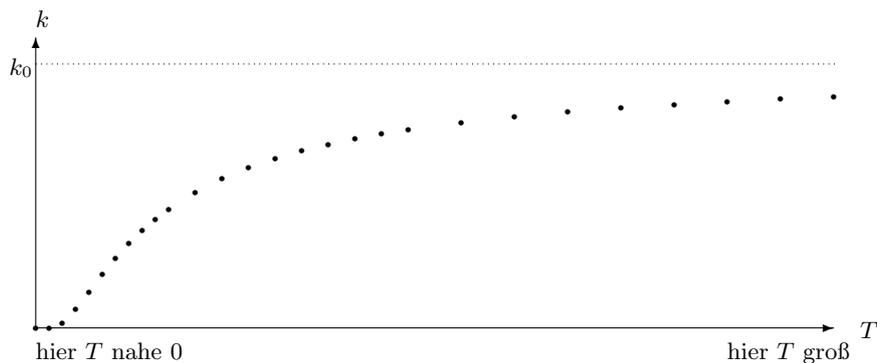


Abbildung 5.5: Arrheniusgleichung: Graph einiger Wertepaare $(T|k)$



Merke: Da Chemiker die **Aktivierungsenergie** $E_a = R \cdot b$ eines chemischen Prozesses häufig kennen möchten, ist die Berechnung von b mittels (5.12) von großem Interesse.

5.5.3 Der Begriff der Halbwertzeit

Bezeichnung: In der Physik und in der Chemie bezeichnet man bei Abbauprozessen aller Art diejenige Zeitspanne als **Halbwertzeit** $t_{1/2}$, die erforderlich ist, um einen Stoff bis auf die Hälfte seiner Ausgangsmenge abzubauen.

Mathematisch gesprochen: Ist $y = f(t)$ eine streng monoton fallende Funktion der Zeit t und $f(0) = y_0$ der Anfangswert zum Zeitpunkt $t = 0$, so ist $t_{1/2}$ die Lösung der Bestimmungsgleichung

$$f(t_{1/2}) = \frac{y_0}{2}.$$

Hieraus ersieht man, daß die Halbwertzeit i.a. nicht nur von dem Abbauprozess (also der Funktion f) abhängt, sondern auch von dem Anfangswert y_0 .³³

Eine spezielle Situation findet man bei allen natürlichen Abbauprozessen. Nach *Regel 26* ist die Funktion $y = f(t)$ dann von der Bauart $y = y_0 \cdot \exp(-ct)$ mit einer abbauspezifischen positiven Konstante c .³⁴ Die Bestimmungsgleichung zur Berechnung von $t_{1/2}$ lautet dann

$$\begin{aligned} y_0 \cdot \exp(-c \cdot t_{1/2}) &= \frac{y_0}{2} && | : y_0 \\ \exp(-c \cdot t_{1/2}) &= \frac{1}{2} && | \text{Regel 28} \\ \frac{1}{\exp(c \cdot t_{1/2})} &= \frac{1}{2} && | \text{Kehrwert} \\ \exp(c \cdot t_{1/2}) &= 2 && | \ln, \text{Regel 30} \\ c \cdot t_{1/2} &= \ln 2 \end{aligned}$$

Aus der letzten Zeile entnimmt man

Regel 35 (Halbwertzeit bei natürlichen Abbauprozessen):

R 35

Bei allen natürlichen Abbauprozessen

$$y = y_0 \cdot \exp(-ct)$$

sind die abbauspezifische positive Konstante c und die Halbwertzeit $t_{1/2}$ antiproportional zueinander mit der Proportionalitätskonstante $\ln 2$, d.h. es gilt

$$t_{1/2} = \frac{\ln 2}{c} \quad \text{und} \quad c = \frac{\ln 2}{t_{1/2}},$$

insbesondere ist die Halbwertzeit bei dieser Art von Abbauprozessen unabhängig vom Anfangswert.

Beispiele: Bei chemischen Reaktionen $A \longrightarrow$ Produkte, die nach einem natürlichen Abbaugesetz erfolgen, ist $c = k$ die Geschwindigkeitskonstante, welche ja temperaturabhängig³⁵ ist. Also ist hier die Halbwertzeit $t_{1/2} = \frac{\ln 2}{k}$ ebenfalls temperaturabhängig. Bei radioaktivem Zerfall ist $c = \lambda$ die temperaturunabhängige Zerfallskonstante, somit ist hier die Halbwertzeit $t_{1/2} = \frac{\ln 2}{\lambda}$ anfangswert- und temperaturunabhängig, also eine Stoffkonstante.

³³Näheres hierzu in 5.10.7, S.114 ff.

³⁴siehe die Beispiele in 5.2.3, S.69 ff

³⁵s.o., Arrheniusgleichung, S.86

5.6 Die Schreibweise a^b für beliebige $a > 0$ und $b \in \mathbb{R}$

Für $a > 0$ und $n \in \mathbb{N}$ gilt nach der Logarithmusregel (L.1)³⁶

$$\ln(a^n) = n \cdot \ln a \quad | \text{ exp, Regel 30 (siehe S.82)}$$

$$a^n = \exp(n \cdot \ln a)$$

und $\frac{1}{a^n} = \frac{1}{\exp(n \cdot \ln a)}$ | Kehrwert, Regel 28 (siehe S.78)

$$a^{-n} = \exp(-n \ln a)$$

Insgesamt ergibt sich folgende Beziehung zwischen der Exponentialfunktion und den **ganzzahligen** Potenzen der Zahl $a > 0$:

$$a^n = \exp(n \ln a) \quad \text{für alle } n \in \mathbb{Z}.$$

Das hat zur folgenden verallgemeinerten Schreibweise auch im Falle nicht ganzzahliger Exponenten geführt:

Bezeichnung: Sei $a > 0$ und $b \in \mathbb{R}$ beliebig.

$$y = a^b \text{ ist eine traditionelle abkürzende Schreibweise für } y = \exp(b \ln a). \quad (5.14)$$

Daraus folgen die

Allgemeinen Potenzregeln

$$(P.1) \quad \ln(a^b) = b \cdot \ln a \quad \text{für alle } a > 0 \text{ und } b \in \mathbb{R},$$

$$(P.2) \quad (a^b)^c = a^{b \cdot c} \quad \text{für alle } a > 0 \text{ und } b, c \in \mathbb{R},$$

$$(P.3) \quad a^b \cdot a^c = a^{b+c} \quad \text{für alle } a > 0 \text{ und } b, c \in \mathbb{R},$$

$$(P.4) \quad a^c \cdot b^c = (ab)^c \quad \text{für alle } a, b > 0 \text{ und } c \in \mathbb{R}.$$

WARNUNG: a^{b^c} bedeutet $a^{(b^c)}$ und ist i.a. $\neq (a^b)^c$.

Beweis der Allgemeinen Potenzregeln:

$$\text{Zu (P.1):} \quad \ln(a^b) \stackrel{(5.14)}{=} \ln(\exp(b \ln a))$$

$$\stackrel{\text{Regel 30}}{=} b \ln a$$

$$\text{Zu (P.2):} \quad (a^b)^c \stackrel{(5.14)}{=} \exp(c \cdot \ln(a^b))$$

$$\stackrel{(P.1)}{=} \exp(c \cdot (b \cdot \ln a))$$

$$= \exp((bc) \cdot \ln a)$$

$$\stackrel{(5.14)}{=} a^{bc}$$

³⁶siehe 5.4, S.83

$$\begin{aligned}
\text{Zu (P.3): } \quad a^b \cdot a^c &\stackrel{(5.14)}{=} \exp(b \ln a) \cdot \exp(c \ln a) \\
&\stackrel{\text{Regel 27}}{=} \exp(b \ln a + c \ln a) \\
&= \exp((b+c) \ln a) \\
&\stackrel{(5.14)}{=} a^{b+c}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\text{Zu (P.4) } \quad a^c \cdot b^c &\stackrel{(5.14)}{=} \exp(c \ln a) \cdot \exp(c \ln b) \\
&\stackrel{\text{Regel 27}}{=} \exp(c \ln a + c \ln b) \\
&= \exp(c \cdot (\ln a + \ln b)) \\
&\stackrel{(L.1)}{=} \exp(c \cdot \ln(ab)) \\
&\stackrel{(5.14)}{=} (ab)^c
\end{aligned}$$

□

Läßt man in dem Ausdruck a^b , der eine Funktion von **zwei** Variablen a und b ist, die eine der beiden Größen a, b künstlich auf konstantem Wert und die andere von beiden frei variieren, so erhält man jeweils eine Funktion **einer** Variablen.

Man gelangt aber zu zwei ganz unterschiedlichen Klassen von Funktionen, je nachdem, ob man die Basis a konstant hält oder den Exponenten b konstant hält, nämlich einerseits zu den allgemeinen Exponentialfunktionen (Basis konstant), andererseits zu den allgemeinen Potenzfunktionen und Wurzelfunktionen (Exponent konstant):

5.7 Exponentialfunktion zur Basis a , Logarithmus zur Basis a

Bezeichnung: Die Funktion

$$y = a^x \quad (\text{Basis } a > 0 \text{ konstant, Exponent } x \text{ variabel in ganz } \mathbb{R})$$

heißt **Exponentialfunktion zur Basis a** und ist identisch mit der

$$\text{allgemeinen Exponentialfunktion } y = \exp(\ln a \cdot x) \text{ zum Anfangswert } y_0 = y(0) = 1.$$

Da sie das natürliche Wachstums-/Abbaugesetz $y' = \ln a \cdot y$ erfüllt und $\ln a$ nach *Regel 31* positiv ist, wenn $a > 1$, negativ, wenn $a < 1$, folgt sofort

Regel 36 (Ableitung, Wachstumsverhalten der Exponentialfunktion zur Basis a): **R 36**

$$(a^x)' = \ln a \cdot a^x.$$

$y = a^x$ ist streng monoton wachsend, falls $a > 1$, aber streng monoton fallend, wenn $0 < a < 1$.

Nach *Regel 1*³⁷ existiert eine Umkehrfunktion.

³⁷siehe 2.2, S.16

Bezeichnung: Die Umkehrfunktion der Exponentialfunktion zur Basis a ,

$$y = a^x = \exp(\ln a \cdot x),$$

heißt der **Logarithmus zur Basis a** ,

$$\text{Schreibweise: } y = \log_a(x) \quad \text{oder kürzer ohne Klammern: } y = \log_a x,$$

d.h. $y = a^x$ ist gleichbedeutend mit $x = \log_a y$.

Insbesondere ist der natürliche Logarithmus \ln identisch mit dem Logarithmus zur Basis e .

Sei nun $a > 0$, $a \neq 1$, $y = a^x$, also $x = \log_a y$.

$$y = a^x \quad | \ln$$

$$\ln y = \ln(a^x)$$

$$\ln y \stackrel{(P.1)}{=} x \cdot \ln a \quad | : \ln a \quad (\neq 0)$$

$$x = \log_a y = \frac{\ln y}{\ln a}$$

Daraus folgt:

R 37 Regel 37 (Umrechnung zwischen \log_a und \ln):

Der Logarithmus zur Basis a , \log_a , ist **proportional** zum natürlichen Logarithmus \ln mit der Proportionalitätskonstante $\frac{1}{\ln a}$, d.h.

$$\log_a x = \frac{1}{\ln a} \cdot \ln x \quad \text{für alle } x > 0.$$

Da sich somit alle Logarithmen vom natürlichen Logarithmus \ln jeweils nur um einen konstanten Faktor unterscheiden, übertragen sich die Rechenregeln (L.1) - (L.4) auf alle Logarithmen:

Rechenregeln für \log_a ($a > 0$):

$$\text{(LOG.1)} \quad \log_a(c \cdot d) = \log_a c + \log_a d \quad \text{für alle positiven } c \text{ und } d.$$

$$\text{(LOG.2)} \quad \log_a \frac{1}{c} = -\log_a c \quad \text{für alle positiven } c.$$

$$\text{(LOG.3)} \quad \log_a \left(\frac{c}{d} \right) = \log_a c - \log_a d \quad \text{für alle positiven } c \text{ und } d.$$

Außerdem folgt für die Ableitung von \log_a mit der Faktorregel (D.1) und *Regel 32*³⁸ sofort:

Ableitung von $\log_a x$:

$$(\log_a x)' = \frac{1}{\ln a} \cdot \frac{1}{x} \quad \text{für alle } x > 0.$$

An dieser Ableitungsformel erkennt man das typisch logarithmische Wachstumsgesetz:

Die Logarithmusfunktion $y = \log_a x$ erfüllt ein

³⁸siehe 5.4, S.84

Logarithmisches Wachstums-/Abbaugesetz:

- (1) “Die momentane Änderungsrate von y bezüglich x ist antiproportional zur bisherigen Größe von x .“

Als Formel:

$$y' = c \cdot \frac{1}{x} \quad \text{mit } c = \frac{1}{\ln a} \begin{cases} > 0 & \text{für } a > 1, \\ < 0 & \text{für } 0 < a < 1. \end{cases}$$

Dividiert man beide Seiten der Gleichung durch y , so erhält man die gleichwertige Aussage

- (2) “Die momentane relative Änderungsrate von y bezüglich x ist antiproportional zur bisherigen Größe von x und von y .“

Als Formel:

$$\frac{y'}{y} = c \cdot \frac{1}{x} \cdot \frac{1}{y}.$$

Gibt es noch weitere Funktionen, die dieses Gesetz erfüllen? Das können nur alle Funktionen $y = f(x)$ sein, welche die Ableitung $y' = c \cdot \frac{1}{x}$ besitzen, also alle Stammfunktionen³⁹ von $c \cdot \frac{1}{x}$. Das sind aber einfach die Funktionen der Bauart $y = c \cdot \ln x + \text{const.}$ Das ist eine Geradengleichung der Bauart $y = B \cdot \ln x + A$ mit $B = c$.

Bezeichnung: Jede Funktion der Bauart $y = A + B \cdot \ln x$ heißt eine **allgemeine Logarithmusfunktion**.

Regel 38 (Graphischer Test auf Allgemeine Logarithmusfunktion und Bestimmung einer bestmöglichen Berechnungsformel):

R 38

Von $y = f(x)$ sei keine Berechnungsformel, aber eine Wertetabelle bekannt. Dann gilt:

a) $y = f(x)$ erfüllt genau dann ein logarithmisches Wachstumsgesetz $y' = c \cdot \frac{1}{x}$ und hat somit die Berechnungsformel $y = c \cdot \ln x + \text{const.}$, wenn die Punkte $(\ln x | y)$ ungefähr auf einer Geraden liegen: $y = A + B \cdot \ln x$ mit Steigung $B = c$.

Dies **testet man graphisch** entweder, indem man zunächst in einer dritten Rubrik der Wertetabelle zu den gegebenen x -Werten die zugehörigen $\ln x$ -Werte berechnet und dann in einem selbstkonstruierten Koordinatensystem mit normaler äquidistanter Skalierung auf jeder der beiden Achsen die Punkte $(\ln x | y)$ einträgt,

oder schneller, indem man direkt die vorgegebenen Punkte $(x | y)$ der Wertetabelle in halblogarithmisches Papier⁴⁰ einträgt, wobei die waagerechte Achse (= x -Achse) eine logarithmische Skalierung besitzen muss.

Ob die Punkte im Graphen ungefähr auf einer Geraden liegen, muss durch **Linealtest** geklärt werden.⁴¹

b) Liegen die Punkte im Testgraphen auf einer Geraden, so kann man anschließend eine nach Datenlage **bestmögliche Berechnungsformel** $y = A + B \cdot \ln x$ ermitteln wie folgt: Man berechnet durch Lineare Regression (Drei-Schritt-Verfahren), angewandt auf $v = \ln x$ und $w = y$, die Konstanten B und A der Geradengleichung (Beachte: Hat man den graphischen Test mit halblogarithmischem Papier ausgeführt, so muss man jetzt ggf. zunächst die $\ln x$ -Werte berechnen). Damit ist man bereits fertig. Ist $B \neq 1$, so kann man wahlweise noch probieren, ob vielleicht $B = \frac{1}{\ln 10}$ ist. In diesem Fall erhält man die Formel $y = \lg x + A$.

³⁹siehe 6.2, S.137ff

⁴⁰Näheres zur Benutzung dieses Spezialpapiers im Anhang A, S.207ff

⁴¹siehe 3.1.5, S.24

5.7.1 Anwendung: Photometrie

Der nach dem natürlichen Logarithmus \ln am häufigsten benutzte Logarithmus ist der Logarithmus zur Basis 10:

$$\log_{10} = \lg \quad (\text{Zehnerlogarithmus, dekadischer Logarithmus})$$

mit der Ableitung

$$\lg'(x) = \frac{1}{\ln 10} \cdot \frac{1}{x}.$$

Seine Anwendung in der Photometrie ergibt sich wie folgt:

Ist τ (dimensionslos) die Transmission eines monochromen Lichts, das ein homogenes Medium der Schichtdicke $d[\text{cm}]$ durchdringt, so gilt bekanntlich⁴²

$$\tau = \exp(-\mu \cdot d) \quad (\mu[\text{cm}^{-1}] \text{ Absorptionskoeffizient}),$$

folglich

$$\ln \tau = -\mu \cdot d. \quad (5.15)$$

Ist das Medium die spezifisch eingefärbte Lösung eines Stoffes A , so gilt: μ ist proportional zur Konzentration $[A]$ (in mol/l), als Formel:

$$\mu = \varepsilon_0 \cdot [A], \quad (5.16)$$

dabei ist $\varepsilon_0[\text{l} \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{cm}^{-1}]$ eine stoffspezifische Konstante (abhängig vom Färbeverfahren). Setzt man (5.16) in (5.15) ein, ergibt sich

$$\begin{aligned} \ln \tau &= -\varepsilon_0 \cdot [A] \cdot d \\ \lg \tau &\stackrel{\text{Regel 37}}{=} -\frac{\varepsilon_0}{\ln 10} \cdot [A] \cdot d \end{aligned} \quad (5.17)$$

Bezeichnung: Die Größe

$$E = -\lg \tau$$

(positiv, da $\tau < 1$, und dimensionslos) heißt die **dekadische Extinktion**, der Faktor

$$\varepsilon = \frac{\varepsilon_0}{\ln 10} \left[\frac{l}{\text{mol} \cdot \text{cm}} \right]$$

heißt der **molare dekadische Extinktionskoeffizient**.

Mit diesen Bezeichnungen lautet die grundlegende Formel der Photometrie

$$\boxed{E = \varepsilon \cdot [A] \cdot d}$$

Ihre Benutzung geschieht wie folgt:

⁴²siehe 5.1.2, S.69 f und 5.1.2, S.77

1. Schritt: **(Justierung des Geräts)**

Man nimmt zunächst eine spezifisch eingefärbte Lösungsportion von A , deren Konzentration $[A]$ [mol/l] sehr genau bekannt ist, füllt sie in eine Küvette genau bekannter Schichtdicke d [cm] und misst nun in einem Photometer die Transmission τ . Man berechnet zunächst aus τ die Extinktion $E = -\lg \tau$, sodann hiermit den molaren dekadischen Extinktionskoeffizienten

$$\varepsilon = \frac{E}{[A] \cdot d} \left[\frac{l}{\text{mol} \cdot \text{cm}} \right]$$

des Messverfahrens für A .

2. Schritt: **(photometrische Konzentrationsbestimmung)**

Danach misst man die Transmission τ für beliebig viele eingefärbte Lösungsportionen unbekannter Konzentration $[A]$ in Küvetten immer derselben Schichtdicke d , berechnet daraus zuerst $E = -\lg \tau$ und dann die Konzentration

$$[A] = \frac{E}{\varepsilon \cdot d} [\text{mol/l}].$$

5.8 Verschiedene Wachstumsgesetze im Vergleich, Allometrie

Erinnerung: Ist x eine Variable, so heißt bekanntlich das Größenverhältnis zwischen der Änderung von x und dem früheren Wert von x , also $\frac{\Delta x}{x}$ (dimensionslos, meist in % ausgedrückt), die **relative Änderung von x** ⁴³. Dagegen heißt das Größenverhältnis zwischen der momentanen Änderungsrate $y' = f'(x)$ einer Funktion und ihrem Wert y , also $\frac{y'}{y}$ (mit der Dimension $(\dim x)^{-1}$) die **momentane relative Änderungsrate von y bezüglich x** .

Sei $c \in \mathbb{R}$ eine Konstante. Wachstums-/Abbaugesetze zwischen zwei Variablen x und y studiert man meist zuerst anhand der momentanen relativen Änderungsrate $\frac{y'}{y}$ der Funktion $y = f(x)$.

5.8.1 Natürliches (exponentielles, prozentuales) Wachstum/Abbau

$$\frac{y'}{y} = c \quad \text{“ungebremstes Wachstum/Abbau“}$$

In Worten:

- (1) **“Die momentane relative Änderungsrate von y bezüglich x ist konstant.“**

Dies ist das primitivste in der Natur zu beobachtende Wachstums-/Abbaugesetz. Multiplikation beider Seiten mit y ergibt

$$y' = c \cdot y$$

In Worten:

- (2) **Die momentane Änderungsrate von y bezüglich x ist proportional zum augenblicklichen Wert von y .“**

⁴³siehe 1.2.2, S.6

Für kleine Δx gilt

$$\frac{\Delta y}{\Delta x} \approx c \cdot y$$

In Worten:

- (3) **“Das Größenverhältnis der Änderungen $\frac{\Delta y}{\Delta x}$ ist ungefähr proportional zum bisherigen Wert von y (nur für kleine Δx).“**

sowie

$$\Delta y \approx c \cdot y \cdot \Delta x$$

In Worten:

- (4) **“Die Änderung von y ist ungefähr proportional zur Änderung von x und zum bisherigen Wert von y (nur für kleine Δx).“**

und

$$\frac{\Delta y}{y} \approx c \cdot \Delta x$$

In Worten:

- (5) **“Die relative Änderung von y ist ungefähr proportional zur Änderung von x (nur für kleine Δx).“**

Die Regeln (1) bis (5) sind gleichbedeutend und charakteristisch für allgemeine Exponentialfunktionen.

Eigenschaften im Falle von Wachstum ($c > 0$):⁴⁴

Für $x < 0$ extrem schwaches, dissoziiertes Wachstum (riesigem Δx entspricht winziges Δy).

Beispiel (Fall $c = 1$): Für $x = -80$ gilt: Erhöht man den x -Wert um $\Delta x = 50$, so erhöht sich der zugehörige y -Wert bloß um $\Delta y \approx 9,3 \cdot 10^{-14}$.

Für $x > 1$ extrem starkes, dissoziiertes Wachstum (winzigem Δx entspricht riesiges Δy).

Beispiel (Fall $c = 1$): Für $x = 10$ gilt: Erhöht man den x -Wert um bloß $\Delta x = 0,1$, so erhöht sich der zugehörige y Wert bereits um $\Delta y \approx 2316,5$.

5.8.2 Logarithmisches Wachstum/Abbau

$$\frac{y'}{y} = c \cdot \frac{1}{x} \cdot \frac{1}{y} \quad \text{“doppelt gebremstes Wachstum/Abbau“}$$



doppelte Wachstumsbremse

In Worten:

- (1) **“Die momentane relative Änderungsrate von y bezüglich x ist antiproportional zu den augenblicklichen Werten von x und y .“**

Multiplikation beider Seiten mit y liefert

$$y' = c \cdot \frac{1}{x}$$

⁴⁴siehe Abb.5.1, S.80, Graph der Exponentialfunktion

In Worten:

- (2) **“Die momentane Änderungsrate von y bezüglich x ist antiproportional zum augenblicklichen Wert von x .“**

Für kleine Δx gilt

$$\frac{\Delta y}{\Delta x} \approx c \cdot \frac{1}{x}$$

In Worten:

- (3) **“Das Größenverhältnis der Änderungen $\frac{\Delta y}{\Delta x}$ ist ungefähr antiproportional zum bisherigen Wert von x (nur für kleine Δx).“**

sowie

$$\Delta y \approx c \cdot \frac{\Delta x}{x}$$

In Worten:

- (4) **“Die Änderung von y ist ungefähr proportional zur relativen Änderung von x (nur für kleine Δx).“**

und

$$\frac{\Delta y}{y} \approx c \cdot \frac{\Delta x}{x} \cdot \frac{1}{y}$$

In Worten:

- (5) **“Die relative Änderung von y ist ungefähr proportional zur relativen Änderung von x und antiproportional zum bisherigen Wert von y (nur für kleine Δx).“**

Die Eigenschaften (1) bis (5) sind gleichbedeutend und charakteristisch für allgemeine Logarithmusfunktionen.

Eigenschaften im Falle von Wachstum ($c > 0$):⁴⁵

Für $0 < x < 1$ extrem starkes, dissoziiertes Wachstum (kleinem Δx entspricht großes Δy).

Beispiel (Fall $c = 1$): Für $x = 10^{-8}$ gilt: Erhöht man den x -Wert um $\Delta x = 0,9 \cdot 10^{-7}$, so erhöht sich der zugehörige y -Wert um $\Delta y \approx 2,3$.

Für $x > 1$ extrem schwaches, dissoziiertes Wachstum (riesigem Δx entspricht kleines Δy).

Beispiel (Fall $c = 1$): Für $x = 100$ gilt: Erhöht man den x -Wert um $\Delta x = 1000$, so erhöht sich der zugehörige y -Wert um $\Delta y \approx 2,4$.

Zwischen diesen zwei extremen, schlecht koordinierten Wachstumsformen liegen **zwei Varianten von gut koordiniertem Wachstum/Abbau** der Variablen x und y . Beide entstehen aus dem logarithmischen Wachstums-/Abbaugesetz, indem man von den zwei Wachstumsbremsen $\frac{1}{x}$ und $\frac{1}{y}$ jeweils nur eine beibehält:

5.8.3 Lineares Wachstum/Abbau

$$\frac{y'}{y} = c \cdot \frac{1}{y} \quad \text{“einfach gebremstes Wachstum/Abbau“}$$

↙
einfache Wachstumsbremse

⁴⁵siehe Abb.5.3, S.82, Graph des natürlichen Logarithmus

In Worten:

- (1) **“Die momentane relative Änderungsrate von y bezüglich x ist antiproportional zum bisherigen Wert von y .“**

Multiplikation der Gleichung mit y ergibt

$$y' = c$$

In Worten:

- (2) **“Die momentane Änderungsrate von y bezüglich x ist konstant.“**

Eine Funktion mit konstanter Ableitung c ist aber eine Gerade (mit der Steigung c):

$$y = a + cx \quad \text{Geradengleichung}$$

Für beliebig große Δx gilt also:

$$\frac{\Delta y}{\Delta x} = c$$

In Worten:

- (3) **“Das Größenverhältnis der Änderungen $\Delta y : \Delta x$ ist konstant.“**

sowie

$$\Delta y = c \cdot \Delta x$$

In Worten:

- (4) **“Die Änderung von y ist proportional zur Änderung von x .“**

Die Regeln (1) bis (4) sind gleichbedeutend und charakteristisch für Geradengleichungen. Es besteht das folgende

Symmetriegesetz für Lineares Wachstum:

Erfüllt y als Funktion von x ein lineares Wachstums-/Abbaugesetz mit der Proportionalitätskonstanten c , so erfüllt auch x als Funktion von y ein lineares Wachstums-/Abbaugesetz, aber mit der Proportionalitätskonstanten $\frac{1}{c}$.

5.8.4 Allometrisches (potentielles) Wachstum/Abbau

$$\frac{y'}{y} = c \cdot \frac{1}{x} \quad \text{“einfach gebremstes Wachstum/Abbau“}$$

↙
einfache Wachstumsbremse

In Worten:

- (1) **“Die momentane relative Änderungsrate von y bezüglich x ist antiproportional zum augenblicklichen Wert von x .“**

Multipliziert man diese Gleichung mit y , so erhält man

$$y' = c \cdot \frac{y}{x}$$

In Worten:

- (2) “Die momentane Änderungsrate von y bezüglich x ist proportional zum augenblicklichen Größenverhältnis der Variablen $y : x$.“

Beachtet man, dass $y' \approx \frac{\Delta y}{\Delta x}$ ist für kleine Änderungen Δx , so erhält man weiter:

$$\frac{\Delta y}{\Delta x} \approx c \cdot \frac{y}{x}$$

In Worten:

- (3) Das Größenverhältnis der Änderungen $\Delta y : \Delta x$ ist ungefähr proportional zum bisherigen Größenverhältnis der Variablen $y : x$ (nur für kleine Δx).“

Multipliziert man letztere Gleichung mit Δx und dividiert sie durch y , so ergibt sich:

$$\frac{\Delta y}{y} \approx c \cdot \frac{\Delta x}{x}$$

In Worten:

- (4) “Die relative Änderung von y ist ungefähr proportional zur relativen Änderung von x (nur für kleine Δx).“

Die Regeln (1) bis (4) sind gleichbedeutend und, wie wir im nächsten Abschnitt sehen werden, charakteristisch für allgemeine Potenzfunktionen.

Bezeichnung: Die Regeln (1) bis (4) heißen **allometrische Wachstumsgesetze** (im Falle $c > 0$) bzw. **Abbaugesetze** (im Falle $c < 0$). Genügen zwei Variablen x und y einer dieser Regeln (und damit allen), so sagt man, zwischen ihnen herrsche **Allometrie**.

Man beobachtet Allometrie vielfach bei der Größe von verschiedenen Körperorganen desselben Organismus, auch beim Zusammenhang zwischen Größe und Artenvielfalt eines Biotops, insgesamt bei höher organisiertem, gut koordiniertem Wachstum in Biologie und Medizin⁴⁶. Dieses Vorkommen, sowie die mathematische Beziehung zu den allgemeinen Potenzfunktionen erklären, dass man gelegentlich auch von **potentiellen** oder **organischen Wachstumsgesetzen bzw. Abbaugesetzen** spricht.

Aus den Formulierungen (3) und (4) erkennt man das

Symmetriegesetz für Allometrie:

Erfüllt y als Funktion von x ein allometrisches Wachstumsgesetz mit der Proportionalitätskonstanten c , so erfüllt auch x als Funktion von y ein allometrisches Wachstumsgesetz, aber mit der Proportionalitätskonstanten $\frac{1}{c}$.

⁴⁶In der Biologie und Medizin bezeichnet Allometrie (= “andere Abmessung“) die unterschiedliche Größe verschiedener Körperorgane.

5.9 Potenzfunktionen und Wurzelfunktionen

5.9.1 Potenzfunktionen

Bezeichnung: Die Funktion

$$y = x^b \quad (\text{Basis } x > 0 \text{ variabel, Exponent } b \in \mathbb{R} \text{ konstant})$$

heißt eine **Potenzfunktion**.

Jede dazu proportionale Funktion $y = a \cdot x^b$ heißt eine **allgemeine Potenzfunktion**.

Ist der Exponent b ganzzahlig, so ist eine Potenzfunktion dasselbe wie ein Monom⁴⁷ und die freie Variable x darf in ganz \mathbb{R} variieren. Für nicht ganzzahliges b berechnet sich die Potenzfunktion mittels der Gleichung⁴⁸

$$y = x^b = \exp(b \cdot \ln x). \quad (5.18)$$

Daraus folgt, dass x nur Werte > 0 annehmen darf.⁴⁹ Weiterhin ergibt sich für die Ableitung:

$$\begin{aligned} y' &= (\exp(b \cdot \ln x))' && | \text{ Kettenregel} \\ y' &= \exp'(b \cdot \ln x) \cdot (b \cdot \ln x)' && | \text{ Regel 25, Faktorregel, Regel 32} \\ y' &= \exp(b \cdot \ln x) \cdot b \cdot \frac{1}{x} && | (5.18) \\ y' &= x^b \cdot b \cdot x^{-1} \underset{(P.3)}{=} bx^{b-1} \end{aligned}$$

R 39 Regel 39 (Ableitung der Potenzfunktionen):

$$(x^b)' = bx^{b-1} \quad \text{für variables } x > 0 \text{ und beliebiges konstantes } b \in \mathbb{R}.$$

Die Wichtigkeit der allgemeinen Potenzfunktionen und ihr weit verbreitetes Vorkommen in den Naturwissenschaften ergibt sich daraus, dass sie und nur sie die allometrischen Wachstums- bzw. Abbaugesetze erfüllen, wie gleich gezeigt wird.

Im Einzelnen gilt:

R 40 Regel 40 (Berechnungsformel für beliebige Allometrien):

Ist x irgendeine Variable und sind $a \neq 0$ und $b \neq 0$ beliebige reelle Konstanten (auch negativ möglich), so gibt es stets genau eine einzige mathematische Funktion $y = f(x)$, welche für $x = 1$ den Wert a annimmt und die allometrischen Wachstums- bzw. Abbaugesetze mit der Proportionalitätskonstante b erfüllt, also z.B.

$$\frac{\Delta y}{y} = b \cdot \frac{\Delta x}{x} \quad \text{oder} \quad \frac{y'}{y} = b \cdot \frac{1}{x}.$$

⁴⁷ siehe 2.2.5, S.20

⁴⁸ siehe Formel (5.14), S.88

⁴⁹ siehe 5.4, S.82

<i>Ihr Name:</i>	allgemeine Potenzfunktion		
<i>Ihr Definitionsbereich:</i>	nur alle $x > 0$		
<i>Ihre Berechnungsformel:</i>	$y = a \cdot \exp(b \cdot \ln x)$	<i>ältere Schreibweise:</i>	$y = ax^b$
<i>Ihre Ableitung:</i>	$y' = ba \cdot \exp((b-1) \ln x)$	<i>bzw.</i>	$y' = bax^{b-1}$.
<i>Eine Stammfunktion:</i>	$u = \frac{a}{b+1} \exp((b+1) \ln x)$	<i>bzw.</i>	$u = \frac{a}{b+1} \cdot x^{b+1}$.

Beweis von Regel 40: (vgl. den ganz analog geführten Beweis von *Regel 26*⁵⁰)

$y = ax^b$ erfüllt das allometrische Gesetz und hat den geforderten Wert a für $x = 1$, denn nach *Regel 39* ist

$$\frac{y'}{y} = \frac{bax^{b-1}}{ax^b} = \frac{b \cdot ax^{b-1}}{ax^{b-1} \cdot x} = b \cdot \frac{1}{x} \quad (5.19)$$

und $y(1) = a \cdot \exp(b \cdot \ln x) \Big|_{x=1} = a \cdot \exp(b \cdot \ln 1) \stackrel{\text{Regel 31}}{=} a \cdot \exp(b \cdot 0) = a \cdot \exp(0) \stackrel{\text{Regel 24}}{=} a \cdot 1 = a$.

Einzigkeit dieser Funktion: Sei $u = g(x)$ noch irgendeine Funktion von x mit denselben beiden Eigenschaften, d.h. gelte auch

$$\frac{u'}{u} = b \cdot \frac{1}{x} \quad \text{und} \quad u(1) = a. \quad (5.20)$$

Bilde die Quotientenfunktion $q(x) = \frac{u(x)}{y(x)}$ (= das Größenverhältnis $u : y$). Für die Ableitung dieser Funktion von x gilt

$$\begin{aligned} q' &= \left(\frac{u}{y}\right)' && | \text{Quotientenregel (D.4)} \\ &= \frac{u' \cdot y - u \cdot y'}{y^2} && | \text{künstlich erweitern} \\ &= \frac{\frac{u'}{u} \cdot u \cdot y - u \cdot \frac{y'}{y} \cdot y}{y^2} && | \text{Einsetzen von (5.19) und (5.20)} \\ &= \frac{b \cdot \frac{1}{x} \cdot u \cdot y - u \cdot b \cdot \frac{1}{x} \cdot y}{y^2} \end{aligned}$$

$= 0$, und zwar für alle Zahlwerte von x .

Eine Funktion von x , deren Ableitung konstant $= 0$ ist, besitzt als Graph eine horizontale Gerade, d.h. es gibt eine Konstante c , so dass $q(x) = c$ gilt für alle Werte von x .

Berechnung von c : Setze $x = 1$ ein. Dann gilt

$$c = q(1) = \frac{u(1)}{y(1)} = \frac{a}{a} = 1,$$

also ist $q(x) = 1$ und somit $u(x) = y(x)$ für alle Zahlwerte von x , was zu zeigen war. \square

⁵⁰siehe 5.2.2, S.75

Folgende Aussagen sind äquivalent:

$y = f(x)$ genügt einem allometrischen Wachstums-/Abbaugesetz $\frac{y'}{y} = b \cdot \frac{1}{x}$ mit dem Anfangswert $y(1) = a$

$$\stackrel{\text{Regel 40}}{\iff} y = a \cdot x^b$$

$$\stackrel{(L.1)}{\iff} \ln y = \ln a + \ln(x^b)$$

$$\stackrel{(P.1)}{\iff} \ln y = \ln a + b \cdot \ln x$$

$$\iff \ln y = A + B \cdot \ln x, \quad \text{Geradengleichung mit } A = \ln a \text{ und } B = b.$$

Regel 41 (Graphischer Test auf allgemeine Potenzfunktion und Bestimmung einer bestmöglichen Berechnungsformel):

R 41

Von $y = f(x)$ sei keine Berechnungsformel, aber eine Wertetabelle bekannt. Dann gilt:

a) $y = f(x)$ erfüllt dann, aber auch nur dann, ein allometrisches Wachstums-/Abbaugesetz mit der Proportionalitätskonstante b und dem Anfangswert a , d.h. z.B.:

$$\frac{\Delta y}{y} = b \cdot \frac{\Delta x}{x} \quad \text{und } y(1) = a,$$

und hat somit die Berechnungsformel $y = ax^b$, wenn die Punkte $(\ln x | \ln y)$ ungefähr auf einer Geraden liegen: $\ln y = A + B \cdot \ln x$.

Dies **testet man graphisch** entweder, indem man zunächst in einer dritten und vierten Rubrik der Wertetabelle zu den gegebenen x - und y -Werten die zugehörigen $\ln x$ - und $\ln y$ -Werte berechnet und dann in einem selbstkonstruierten Koordinatensystem mit normaler äquidistanter Skalierung auf jeder der beiden Achsen die Punkte $(\ln x | \ln y)$ einträgt, oder schneller, indem man direkt die vorgegebenen Punkte $(x|y)$ der Wertetabelle in doppeltlogarithmisches Papier⁵¹ einträgt.

Ob die Punkte im Graphen ungefähr auf einer Geraden liegen, muss durch **Linealtest** geklärt werden.⁵²

b) Liegen die Punkte im Testgraphen auf einer Geraden, so kann man anschließend eine nach Datenlage **bestmögliche Berechnungsformel** $y = ax^b$ ermitteln wie folgt: Man berechnet zunächst durch Lineare Regression (Drei-Schritt-Verfahren), angewandt auf $v = \ln x$ und $w = \ln y$, die Konstanten B und A der Geradengleichung (Beachte: Hat man den graphischen Test mit doppeltlogarithmischem Papier ausgeführt, so muss man jetzt ggf. zunächst die $\ln x$ - und $\ln y$ -Werte berechnen). Daraus bestimmt man sodann $b = B$ und $a = e^A$. (Achtung! Ist A größer als 1, so muss A sehr genau berechnet werden.⁵³)

Weiß man, dass y als Funktion von x einem allometrischen Wachstums- oder Abbaugesetz genügt (aus naturwissenschaftlicher Fachkenntnis oder als Ergebnis des graphischen Tests in Regel 41a) und will man den Aufwand einer Linearen Regressionsrechnung vermeiden, so kann man folgende Regel ausnutzen:

⁵¹Näheres zur Benutzung dieses Spezialpapiers im Anhang A, S.207ff

⁵²siehe 3.1.5, S.24

⁵³siehe Warnung in 5.3.2, S.79ff

Regel 42 (Berechnung einer allgemeinen Potenzfunktion aus zwei Wertepaaren): **R 42**
 Ist dem Fachwissenschaftler prinzipiell schon bekannt, dass zwischen den Variablen x und y Allometrie herrscht, also eine Berechnungsformel $y = ax^b$ besteht, so kann man den Zahlwert der Konstanten a und b schon aus zwei Wertepaaren (x_1, y_1) und (x_2, y_2) wie folgt berechnen:

$$1. \text{ Schritt: } b = \frac{\ln y_2 - \ln y_1}{\ln x_2 - \ln x_1} \quad (\text{Steigung der Geraden durch } (\ln x_1 | \ln y_1) \text{ und } (\ln x_2 | \ln y_2)),$$

$$2. \text{ Schritt: } a = \frac{y_i}{x_i^b} \quad (\text{wahlweise für } i = 1 \text{ oder } 2).$$

5.9.2 Wurzelfunktionen

Mit dem Symmetriegesetz für Allometrien⁵⁴ folgt: $y = x^b \iff x = y^{\frac{1}{b}}$, d.h. die Umkehrung der Potenzfunktion mit Exponent b ist die Potenzfunktion mit Exponent $\frac{1}{b}$.

Spezialfall $b = n \in \mathbb{N}$:

$$\sqrt[n]{x} = x^{\frac{1}{n}}$$

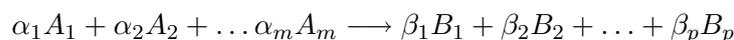
Mit *Regel 39* folgt:

$$(\sqrt[n]{x})' = \frac{1}{n} \cdot x^{\frac{1}{n}-1} \quad \text{oder auch} \quad (\sqrt[n]{x})' = \frac{\sqrt[n]{x}}{nx}$$

5.10 Anwendung: Potenzfunktionen in der Kinetik

5.10.1 Verschiedene Maße für die Reaktionsgeschwindigkeit

Seien $\alpha_1, \dots, \alpha_m$ sowie β_1, \dots, β_p endlich viele natürliche Zahlen und



eine chemische Reaktion.

Im Folgenden kann man unter der Bezeichnung $[A_i](t)$ bzw. $[B_i](t)$ wahlweise die Stoffmengenkonzentration c , die Masse m , die Stoffmenge n oder das Volumen V von A_i bzw. B_i zum Zeitpunkt t [s] verstehen. Dann kann man stets die momentane Reaktionsgeschwindigkeit zu einem bestimmten Zeitpunkt t_0 **näherungsweise** daran erkennen, wieviel von A_i in einer kleinen Zeitspanne $\Delta t = t_1 - t_0$ abgebaut wird (t_1 nahe t_0). Man bestimmt also die (negativen) Differenzenquotienten $\frac{\Delta[A_i]}{\Delta t}$ ($i = 1, \dots, m$). Ihre Dimension ist $[\text{mol} \cdot \text{l}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}]$ bzw. $[g \cdot \text{s}^{-1}]$, $[\text{mol} \cdot \text{s}^{-1}]$ oder $[\text{cm}^3 \cdot \text{s}^{-1}]$.

Wie unterscheiden sich diese Differenzenquotienten im Zahlwert voneinander? Aus der stöchiometrischen Formel folgt: Wenn in der Zeitspanne Δt α_1 Teile von A_1 abgebaut worden sind,

⁵⁴siehe 5.8.4, S.97

sind gleichzeitig α_i Teile von A_i abgebaut worden ($i = 2, \dots, m$). Das Größenverhältnis $\Delta[A_1] : \Delta[A_i]$ ist also gleich $\alpha_1 : \alpha_i$ ($i = 2, \dots, m$), als Formel:

$$\begin{aligned} \frac{\Delta[A_1]}{\Delta[A_i]} &= \frac{\alpha_1}{\alpha_i} && \left| \cdot \frac{\Delta[A_i]}{\alpha_1} \right. \\ \frac{\Delta[A_1]}{\alpha_1} &= \frac{\Delta[A_i]}{\alpha_i} && \left| : \Delta t \right. \\ \frac{1}{\alpha_1} \cdot \frac{\Delta[A_1]}{\Delta t} &= \frac{1}{\alpha_i} \cdot \frac{\Delta[A_i]}{\Delta t} && (i = 2, \dots, m) \end{aligned}$$

Resultat: Die Differenzenquotienten $\frac{\Delta[A_i]}{\Delta t}$ sind untereinander nicht gleich, falls die α_i nicht alle gleich 1 sind, wohl aber sind sie untereinander alle proportional. Es genügt also, einen davon, etwa $\frac{\Delta[A_1]}{\Delta t}$, zu bestimmen, die übrigen errechnen sich daraus mittels der Gleichung

$$\frac{\Delta[A_i]}{\Delta t} = \frac{\alpha_i}{\alpha_1} \cdot \frac{\Delta[A_1]}{\Delta t}$$

Man kann die momentane Reaktionsgeschwindigkeit näherungsweise aber auch mittels der (positiven) Differenzenquotienten $\frac{\Delta[B_i]}{\Delta t}$ ($i = 1, \dots, p$) (Δt klein) untersuchen. Wieder gilt, analog zu oben:

$$\frac{1}{\beta_1} \cdot \frac{\Delta[B_1]}{\Delta t} = \frac{1}{\beta_i} \cdot \frac{\Delta[B_i]}{\Delta t} \quad (i = 2, \dots, p)$$

Da schließlich immer dann, wenn α_1 Teile von A_1 abgebaut sind, gleichzeitig β_1 Teile von B_1 entstanden sind, gilt weiterhin:

$$\begin{aligned} -\frac{\Delta[A_1]}{\Delta[B_1]} &= \frac{\alpha_1}{\beta_1} && \left| \cdot \frac{\Delta[B_1]}{\alpha_1} \right. \\ -\frac{\Delta[A_1]}{\alpha_1} &= \frac{\Delta[B_1]}{\beta_1} && \left| : \Delta t \right. \\ -\frac{1}{\alpha_1} \cdot \frac{\Delta[A_1]}{\Delta t} &= \frac{1}{\beta_1} \cdot \frac{\Delta[B_1]}{\Delta t} \end{aligned}$$

Insgesamt ergibt sich so: Es genügt, den Differenzenquotienten (= mittlere Änderungsrate in der kleinen Zeitspanne Δt) exemplarisch anhand irgendeines Edukts oder Produkts zu messen, alle anderen errechnen sich daraus mittels der Gleichung

$$-\frac{1}{\alpha_1} \cdot \frac{\Delta[A_1]}{\Delta t} = \dots = -\frac{1}{\alpha_m} \cdot \frac{\Delta[A_m]}{\Delta t} = \frac{1}{\beta_1} \cdot \frac{\Delta[B_1]}{\Delta t} = \dots = \frac{1}{\beta_p} \cdot \frac{\Delta[B_p]}{\Delta t}$$

Durch Grenzübergang $\Delta t \rightarrow \infty$ gehen diese mittleren Änderungsraten über in die momentanen Änderungsraten von $[A_i]$ bzw. $[B_i]$ bezüglich t zum Zeitpunkt t_0 , die untereinander wieder in dem entsprechenden Größenverhältnis zueinander stehen.

Fazit: Die positiv genommenen momentanen Änderungsraten

$$|[A_i]'(t)| = -\frac{d[A_i]}{dt} \text{ der Edukte } A_i \text{ bzw. } [B_i]'(t) = \frac{d[B_i]}{dt} \text{ der Produkte}$$

sind lauter brauchbare Maße für die momentane Reaktionsgeschwindigkeit. Sie sind untereinander alle proportional und haben die Dimension $\left[\frac{\text{mol}}{\text{l}\cdot\text{s}}\right]$. Ein **standardisiertes Maß für die momentane Reaktionsgeschwindigkeit** erhält man wie folgt:

Bezeichnung: Die **momentane Reaktionsrate** einer chemischen Reaktion



wird mit dem Symbol

$$\frac{d\xi}{dt} \quad \text{oder kurz mit} \quad \dot{\xi}$$

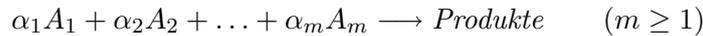
bezeichnet. Sie ist positiv, hat die Dimension $\left[\frac{\text{mol}}{\text{l}\cdot\text{s}}\right]$ und berechnet sich wahlweise wie folgt:

$$\dot{\xi} = -\frac{1}{\alpha_1} \cdot \frac{d[A_1]}{dt} = -\frac{1}{\alpha_2} \cdot \frac{d[A_2]}{dt} = \dots = -\frac{1}{\alpha_m} \cdot \frac{d[A_m]}{dt} = \frac{1}{\beta_1} \cdot \frac{d[B_1]}{dt} = \frac{1}{\beta_2} \cdot \frac{d[B_2]}{dt} = \dots = \frac{1}{\beta_p} \cdot \frac{d[B_p]}{dt}$$

5.10.2 Ordnung einer Reaktion bezüglich eines Edukts A

Bei vielen chemischen Reaktionen lässt sich beobachten, dass die momentane Reaktionsgeschwindigkeit bei konstant gehaltener Temperatur von den jeweiligen Konzentrationen der beteiligten Edukte abhängig ist. Sie ist dann eine Funktion der m freien Variablen $[A_1], \dots, [A_m]$. Eine erste Typeneinteilung erfolgte über den Begriff der Reaktionsordnung⁵⁵:

Erinnerung: Eine chemische Reaktion

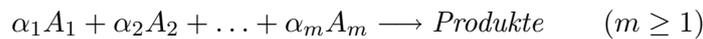


heißt **von n-ter Ordnung**, wenn gilt:

Wird (bei konstanter Temperatur) **jedes** $[A_i]$ um 1% erniedrigt, so erniedrigt sich die Reaktionsgeschwindigkeit um $n\%$ (n auf eine Zahl des Formats 0; 0,5; 1; 1,5; 2; 2,5; 3... gerundet).

Eine verfeinerte Typeneinteilung chemischer Reaktionen gelingt mit nachfolgendem Begriff:

Bezeichnung: Eine chemische Reaktion



heißt **bezüglich des Edukts A_1 von n-ter Ordnung**, wenn gilt:

Wird (bei konstanter Temperatur) $[A_1]$ um 1% erniedrigt, während alle übrigen $[A_i]$ ($i = 2, \dots, m$) ungefähr konstant bleiben, so reduziert sich die Reaktionsgeschwindigkeit um $n\%$ (n auf eine Zahl des Formats 0; 0,5; 1; 1,5; 2; 2,5; 3... gerundet).

⁵⁵siehe 1.2.2, S.7

Gegen diesen Begriff kann man zunächst einen grundsätzlichen Einwand erheben: Die Formel

$$\alpha_1 A_1 + \alpha_2 A_2 + \dots + \alpha_m A_m \longrightarrow \text{Produkte} \quad (m \geq 1)$$

besagt doch, dass alle Edukte miteinander reagieren, insbesondere, dass nicht $[A_1]$ erniedigt werden kann, während die anderen $[A_i]$ konstant bleiben. Bedeutet das nicht, dass es chemische Reaktionen der Ordnung n bezüglich eines Edukts nur dann geben kann, wenn es auch nur ein Edukt gibt (das ist der Spezialfall $m = 1$), wobei der neue Begriff dann mit dem alten Begriff der Reaktionsordnung zusammenfällt?

Die Antwort lautet, dass es bei Reaktionen mit mehreren Edukten das Phänomen der konstant bleibenden $[A_i]$ bei geringer werdendem $[A_1]$ in der Natur streng genommen nicht gibt, dass man aber durch geschickte Experimente dennoch das Verhalten der Reaktionsgeschwindigkeit v als Funktion einer einzigen Variablen $[A_1]$ untersuchen kann, obwohl v bei unkontrolliert ablaufender Reaktion eine Funktion mehrerer Variabler $[A_1], \dots, [A_m]$ ist.

Dabei stehen zwei Methoden zur Wahl:

1. Methode: Die Methode der großen Überschüsse.

Gib alle Edukte $[A_2], \dots, [A_m]$ im großen Überschuss zu. Lass dann die Reaktion laufen, bis sie zum Stillstand kommt (das wird spätestens dann geschehen, wenn $[A_1] = 0$ ist), und miss während des Ablaufs zu möglichst vielen Zeitpunkten t_i den Wert von $[A_1]$. Zwar wird im Verlauf der gesamten Reaktion auch $[A_i]$ ($i = 2, \dots, m$) um einen festen Wert $\Delta[A_i]$ verringert, doch hat diese Verringerung trotzdem kaum einen nennenswerten Einfluss, weil wegen des großen Überschusses die **relative Änderung** $\frac{\Delta[A_i]}{[A_i]}$ nur wenige Prozent beträgt, der Überschuss als solcher also in nahezu unverändertem Umfang bestehen bleibt. Prozentual gesehen, bleiben also die $[A_i]$ ($i = 2, \dots, m$) ungefähr konstant.

Fazit: Die Abhängigkeit der momentanen Reaktionsgeschwindigkeit vom Edukt A_1 wird erkennbar, wenn man alle anderen Edukte im großen Überschuss zugibt und die Reaktion dann bis zum Stillstand laufen lässt. **Man erhält zunächst eine Wertetabelle für $[A_1]$ als Funktion der Zeit t .**

Mathematische Auswertung: Durch anschließende numerische Differentiation⁵⁶ kann man in einer dritten Rubrik Näherungswerte für die Reaktionsgeschwindigkeit $v = -\frac{d[A_1]}{dt}$ gewinnen. Die Wertepaare $([A_1](t_i)|v_i)$ bilden **dann eine Wertetabelle für v als Funktion von $[A_1]$.** **Beachte:** Nur wenn die zeitlichen Abstände der Messungen $\Delta t = t_i - t_{i-1}$ klein sind, liefert die numerische Differentiation verlässliche Werte für die Reaktionsgeschwindigkeit.

2. Methode: Die Anfangswertmethode.

Man legt für $[A_i]$ ($i = 2, \dots, m$) beliebige Anfangswerte fest. Unter diesen konstanten Voraussetzungen startet man die Reaktion wiederholt, indem man jedesmal nur den Anfangswert von $[A_1]$ deutlich variiert. Nach einer stets gleich kurzen Zeitspanne Δt stoppt man die Reaktion und misst erneut $[A_1]$. Die Differenzenquotienten $-\frac{\Delta[A_1]}{\Delta t}$ sind Näherungswerte für die Reaktionsgeschwindigkeit v , welche bei unterschiedlichem $[A_1]$, aber stets denselben $[A_i]$ ($i = 2, \dots, m$) gemessen wurde.

Fazit: Mit der Anfangswertmethode erhält man **eine Wertetabelle für $v = -\frac{d[A_1]}{dt}$ als Funktion von $[A_1]$,** wobei als Vorzug gegenüber der 1. Methode die zugehörigen, konstant bleibenden Werte für $[A_i]$ ($i = 2, \dots, m$) zusätzlich beliebig (auch klein) wählbar sind. Ein

⁵⁶siehe 4.4.2, S.53

Nachteil ist aber, dass keine Abhängigkeit des $[A_1]$ oder des v von der fortschreitenden Zeit t bei längerem Reaktionsablauf erkennbar wird. Falls eine Reaktion im späteren Verlauf ein anderes Verhalten als in der Anfangsphase zeigt, ist diese Methode ungeeignet.

Mit jeder der beiden Methoden kann man zu einer Wertetabelle für die Wertepaare $([A_1], v)$ gelangen (wobei $v = -\frac{d[A_1]}{dt}$ gewählt wurde). Der Graph zur Wertetabelle kann je nach Reaktion, und bei derselben Reaktion auch je nach betrachtetem Edukt A_1 , ganz verschieden aussehen. Stets aber besitzt er ein charakteristisches Merkmal: Ist $[A_1] = 0$, so kommt die Reaktion notwendigerweise zum Stillstand, d.h. dann ist auch $v = 0$. Also gilt immer:

Der Graph der momentanen Reaktionsgeschwindigkeit v als Funktion der Konzentration $[A_1]$ verläuft durch den Ursprung.

Meist gilt noch zusätzlich:

Je größer $[A_1]$, umso schneller die Reaktion, d.h. dieser Graph ist i.a. monoton wachsend.

Ist eine chemische Reaktion bezüglich des Edukts A_1 von n -ter Ordnung, so gilt für alle kleinen Änderungen von $[A_1]$:

Die relative Änderung von v ist gleich n mal der relativen Änderung von $[A_1]$

$$\Leftrightarrow \frac{\Delta v}{v} = n \cdot \frac{\Delta[A_1]}{[A_1]}$$

$\Leftrightarrow v$ als Funktion von $[A_1]$ erfüllt ein allometrisches Wachstumsgesetz⁵⁷ mit der Proportionalitätskonstante n

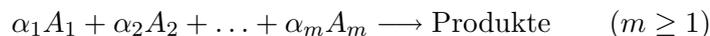
$$\stackrel{\text{Regel 40}}{\Leftrightarrow} v = c \cdot [A_1]^n,$$

wobei c noch vom gewählten Maß für v und dem Wert der $[A_i]$ ($i \neq 1$) abhängt.

$\Leftrightarrow v$ ist proportional zu $[A_1]^n$,
wenn nur $[A_1]$ variiert.

Damit erhalten wir eine zweite Charakterisierung der chemischen Reaktionen n -ter Ordnung bezüglich A_1 :

Merke: Eine chemische Reaktion



ist genau dann bezüglich des Edukts A_1 von n -ter Ordnung, wenn gilt:

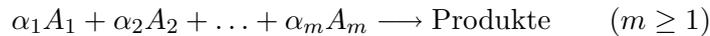
Die momentane Reaktionsgeschwindigkeit ist proportional zur n -ten Potenz von $[A_1]$, wenn nur $[A_1]$ variiert.

Als Formel:

$$v = -\frac{d[A_1]}{dt} = c \cdot [A_1]^n.$$

Im Spezialfall $n = 1$ erhält man hieraus die Formel $\frac{d[A_1]}{dt} = -c \cdot [A_1]$. Das ist aber ein natürliches Abbaugesetz für $[A_1]$ als Funktion der Zeit t . Folglich gilt:

Merke: Eine chemische Reaktion



ist genau dann bezüglich des Edukts A_1 von erster Ordnung, wenn gilt:

Der Abbau von A_1 als Funktion der Zeit t erfolgt nach einem natürlichen Abbaugesetz.

Da der Graph von v als Funktion von $[A_1]$ immer durch den Ursprung verläuft und i.a. monoton wächst, geschieht es recht häufig (aber nicht immer), dass zu diesem Graph als Berechnungsformel eine allgemeine Potenzfunktion mit geeignetem Exponenten n gehört, dass die Reaktion also bezüglich A_1 eine gewisse Ordnung n besitzt.

5.10.3 Geschwindigkeitsgesetz und Geschwindigkeitskonstante einer chemischen Reaktion

Besitze eine Reaktion nun bezüglich jedes Edukts A_i eine gewisse Ordnung n_i . Dann gilt also: Die Reaktionsgeschwindigkeit ist

- proportional zu $[A_1]^{n_1}$, wenn nur $[A_1]$ variiert, während $[A_2], \dots, [A_m]$ künstlich konstant gehalten werden,
- proportional zu $[A_2]^{n_2}$, wenn nur $[A_2]$ variiert, während $[A_1], [A_3], \dots, [A_m]$ künstlich konstant gehalten werden,
- ⋮
- proportional zu $[A_m]^{n_m}$, wenn nur $[A_m]$ variiert, während $[A_1], \dots, [A_{m-1}]$ künstlich konstant gehalten werden.

Da aber die Konzentrationen $[A_1], \dots, [A_m]$ in beliebigen Wertekombinationen vorkommen können, also voneinander unabhängige freie Variable sind, folgt mit *Regel 4*⁵⁸:

Das Geschwindigkeitsgesetz chemischer Reaktionen:

Ist die chemische Reaktion



bezüglich A_1 von der Ordnung n_1, \dots , bezüglich A_m von der Ordnung n_m , so gibt es bei konstant gehaltener Temperatur eine vom Wert der $[A_i]$ unabhängige spezifische Konstante k , so dass für alle Werte von $[A_1], \dots, [A_m]$ die Gleichung

$$v = k \cdot [A_1]^{n_1} \cdot [A_2]^{n_2} \cdot \dots \cdot [A_m]^{n_m}$$

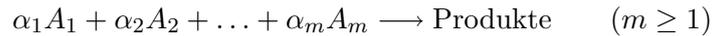
*gilt. Diese Gleichung heißt das **Geschwindigkeitsgesetz der Reaktion**, die Proportionalitätskonstante k heißt die **Geschwindigkeitskonstante der Reaktion**.*

⁵⁸siehe 2.3, S.21

k ist noch abhängig von dem benutzten Maß für die Reaktionsgeschwindigkeit⁵⁹, doch sind, bei gleicher Reaktion und Temperatur, alle k -Werte untereinander proportional, gemäß der Proportionalität zwischen den Maßen.

Wichtiger ist, dass k noch temperaturabhängig ist (meist gemäß einer Arrhenius-Gleichung⁶⁰), während die Exponenten n_1, \dots, n_m temperaturunabhängige spezifische Konstanten der Reaktion sind.

Besitzt nun eine chemische Reaktion



das Geschwindigkeitsgesetz

$$v = k \cdot [A_1]^{n_1} \cdot [A_2]^{n_2} \cdot \dots \cdot [A_m]^{n_m},$$

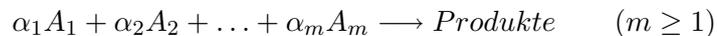
so kann man umgekehrt daraus ablesen, dass v proportional zu $[A_i]^{n_i}$ ist, wenn nur $[A_i]$ variiert ($i = 1, \dots, m$), d.h. aber⁶¹, dass die Reaktion bezüglich A_i von der Ordnung n_i ist (für alle $i = 1, \dots, m$).

Definitionsgemäß⁶² besagt das:

- Wird nur $[A_1]$ um 1% reduziert, so reduziert sich v um $n_1\%$,
- Wird nur $[A_2]$ um 1% reduziert, so reduziert sich v um $n_2\%$,
- ⋮
- Wird nur $[A_m]$ um 1% reduziert, so reduziert sich v um $n_m\%$,

Werden aber alle $[A_i]$ gleichzeitig um jeweils 1% reduziert, so summieren sich die Wirkungen und es gilt: v wird um $n_1 + n_2 + \dots + n_m$ Prozent reduziert. Damit haben wir aber die Reaktionsordnung⁶³ errechnet.

Merke: Besitzt eine chemische Reaktion



das Geschwindigkeitsgesetz

$$v = k \cdot [A_1]^{n_1} \cdot [A_2]^{n_2} \cdot \dots \cdot [A_m]^{n_m},$$

so errechnet sich ihre Reaktionsordnung zu $n = n_1 + n_2 + \dots + n_m$.

⁵⁹siehe 5.10.1, S.101f

⁶⁰siehe 5.5.2, S.85

⁶¹siehe 5.10.2, S.106

⁶²siehe 5.10.2, S.104

⁶³siehe 5.10.2, S.103

5.10.4 Graphische Tests zum Erkennen einer Reaktion von n -ter Ordnung bezüglich des Edukts A_1

Erste Ausgangslage:

Man benutzt eine Wertetabelle für die Reaktionsgeschwindigkeit v als Funktion von $[A_1]$. (Diese Wertetabelle konnte wahlweise mit der Methode der großen Überschüsse oder mit der Anfangswertmethode gewonnen werden⁶⁴.)

Folgende Aussagen sind äquivalent:

Die Reaktion ist bezüglich A_1 von n -ter Ordnung

$$\iff v \text{ als Funktion von } [A_1] \text{ genügt einer Formel } v = c \cdot [A_1]^n$$

$$\stackrel{(L.1)}{\iff} \ln v = \ln c + \ln([A_1]^n)$$

$$\stackrel{(P.1)}{\iff} \ln v = \ln c + n \cdot \ln[A_1]$$

$$\iff \ln v = A + B \cdot \ln[A_1],$$

Geradengleichung mit $A = \ln c$ und Steigung $B = n$.

So ergibt sich ein

Erster Graphischer Test zur Bestimmung der Ordnung bezüglich A_1 :

Gegeben sei kein Geschwindigkeitsgesetz der Reaktion, aber eine Wertetabelle für die Reaktionsgeschwindigkeit v als Funktion von $[A_1]$, welche mit der Methode der großen Überschüsse oder der Anfangswertmethode gewonnen wurde. Dann gilt:

Die Reaktion besitzt genau dann eine Ordnung n bezüglich des Edukts A_1 , wenn die Punkte

$$(\ln[A_1] | \ln v) \text{ ungefähr auf einer Geraden liegen: } \ln v = A + B \cdot \ln[A_1]$$

Dies testet man graphisch entweder, indem man zunächst in einer dritten und vierten Rubrik der Wertetabelle zu den gegebenen $[A_1]$ - und v -Werten die zugehörigen $\ln[A_1]$ - und $\ln v$ -Werte berechnet und dann in einem selbstkonstruierten Koordinatensystem mit normaler äquidistanter Skalierung auf jeder der beiden Achsen die Punkte $(\ln[A_1] | \ln v)$ einträgt, oder schneller, indem man direkt die vorgegebenen Punkte $([A_1] | v)$ der Wertetabelle in doppeltlogarithmisches Papier⁶⁵ einträgt.

*Ob die Punkte im Graphen ungefähr auf einer Geraden liegen, muss durch **Linealtest** geklärt werden.*⁶⁶

b) Liegen die Punkte im Testgraphen auf einer Geraden, so ist $n = B =$ Steigung der Geraden. Weil n auf das Format "ganze Zahl" oder "ganze Zahl +0,5" gerundet werden soll, genügt es, n anschließend mittels zweier Wertepaare $([A_1] | v_1)$ und $([A_2] | v_2)$ zu berechnen:

$$n \approx \frac{\ln v_2 - \ln v_1}{\ln[A_1]_2 - \ln[A_1]_1}$$

⁶⁴siehe 5.10.2, S.103

⁶⁵Näheres zur Benutzung dieses Spezialpapiers im Anhang A, S.207ff

⁶⁶siehe 3.1.5, S.24

Zweite Ausgangslage:

Man benutzt eine Wertetabelle für $[A_1]$ als Funktion von t . (Diese Wertetabelle konnte im Fall mehrerer Edukte A_i ($m \geq 2$) nur mittels der Methode der großen Überschüsse gewonnen werden⁶⁷.)

Folgende Aussagen sind äquivalent:

Die Reaktion ist bezüglich A_1 von n -ter Ordnung

$$\iff v \text{ als Funktion von } [A_1] \text{ genügt einer Formel } v = c \cdot [A_1]^n$$

$$\iff -\frac{d[A_1]}{dt} = c \cdot [A_1]^n$$

$$1. \text{ Fall: } n = 0: \quad -\frac{d[A_1]}{dt} = c \quad | \text{ beiderseits Stammfunktion bilden}$$

$$\iff -[A_1] = c \cdot t + \text{const}$$

$$\iff [A_1] = -c \cdot t - \text{const}$$

$$\iff \text{Die Punkte } (t|[A_1]) \text{ liegen auf einer Geraden}$$

$$\text{mit Steigung} = -c$$

$$2. \text{ Fall: } n = 1: \quad -\frac{d[A_1]}{dt} = c \cdot [A_1]$$

$$\iff \frac{d[A_1]}{dt} = -c \cdot [A_1]$$

$$\iff \text{Natürliches Abbaugesetz für } [A_1] \text{ als Funktion von } t$$

$$\iff \text{Die Punkte } (t|\ln[A_1]) \text{ liegen auf einer Geraden}$$

Regel 33

$$\text{mit Steigung } -c$$

$$3. \text{ Fall: } n \neq 0 \text{ und } n \neq 1:$$

$$-\frac{d[A_1]}{dt} = c \cdot [A_1]^n$$

$$\iff -[A_1]'(t) = c \cdot [A_1]^n(t) \quad | \cdot [A_1]^{-n}(t)$$

$$\iff -[A_1]^{-n}(t) \cdot [A_1]'(t) = c \quad | \cdot (n-1) \text{ (Es ist } n-1 \neq 0)$$

$$\iff -(n-1)[A_1]^{-n}(t) \cdot [A_1]'(t) = (n-1)c \quad | \text{ beidseits Stammfunktion bilden}$$

(Kettenregel beachten)

$$\iff [A_1]^{-(n-1)}(t) = (n-1)c \cdot t + \text{const}$$

$$\iff [A_1]^{-(n-1)} = B \cdot t + A \quad \text{Geradengleichung für}$$

$$[A_1]^{-(n-1)} \text{ als Funktion von } t \text{ mit } B = (n-1)c$$

$$\iff \text{Die Punkte } \left(t \left| \frac{1}{[A_1]^{n-1}} \right. \right) \text{ liegen auf einer Geraden}$$

$$\text{mit Steigung } (n-1)c$$

Damit erhalten wir einen Katalog von lauter einzelnen, für je einen Wert von n gültigen graphischen Tests, alle basierend auf einer Wertetabelle für $[A_1]$ als Funktion von t :

⁶⁷siehe 5.10.2, S.103

Zweiter Graphischer Test zur Bestimmung der Ordnung bezüglich A_1 :

Gegeben sei kein Geschwindigkeitsgesetz der Reaktion, aber eine Wertetabelle für die Konzentration $[A_1]$ als Funktion von t , welche im Fall mehrerer Edukte ($m \geq 2$) mit der Methode der großen Überschüsse gewonnen wurde. Dann gilt:

Die Reaktion besitzt genau dann bezüglich des Edukts A_1 die Ordnung

- $n = 0$, wenn die Punkte $(t|[A_1])$ auf einer Geraden liegen,
- $n = 1$, wenn die Punkte $(t|\ln[A_1])$ auf einer Geraden liegen,
- $n = 2$, wenn die Punkte $(t|\frac{1}{[A_1]})$ auf einer Geraden liegen,
- $n = 3$, wenn die Punkte $(t|\frac{1}{[A_1]^2})$ auf einer Geraden liegen,
- \vdots
- sonstiges n , wenn die Punkte $(t|\frac{1}{[A_1]^{n-1}})$ auf einer Geraden liegen.

Ob die Punkte im Graphen ungefähr auf einer Geraden liegen, muss durch **Linealtest** geklärt werden.⁶⁸

5.10.5 Berechnungsformel für $[A_1](t)$

Mit einem der obigen Testverfahren sei die Ordnung n der Reaktion bezüglich A_1 ermittelt worden.

Dann gilt, wenn $[A_2], \dots, [A_m]$ konstant gehalten werden:

$$[A_1]'(t) = -c \cdot [A_1]^n(t)$$

Aus dieser Beziehung kann man eine Berechnungsformel für $[A_1](t)$ gewinnen:

- Im Falle $n = 0$ gilt⁶⁹

$$[A_1] = -c \cdot t - const \tag{5.21}$$

Setzt man auf beiden Seiten dieser Gleichung $t = 0$ ein, so erhält man den Anfangswert

$$[A_1]_0 = -const$$

Hieraus und aus (5.21) ergibt sich die Berechnungsformel

$$[A_1] = [A_1]_0 - c \cdot t$$

- Im Falle $n = 1$ liegt ein natürliches Abbaugesetz $[A_1]'(t) = -c \cdot [A_1](t)$ vor, und mit Regel 33 erhält man sofort die Berechnungsformel

$$[A_1] = [A_1]_0 \cdot e^{-ct}.$$

⁶⁸siehe 3.1.5, S.24

⁶⁹siehe 5.10.4, S.109

- Im Falle $n \neq 0$ und $n \neq 1$ liegen die Punkte $\left(t \mid \frac{1}{[A_1]^{n-1}}\right)$ auf einer Geraden mit der positiven Steigung $B = (n-1) \cdot c$,⁷⁰ d.h.

$$\frac{1}{[A_1]^{n-1}(t)} = A + (n-1)c \cdot t \quad | \text{speziell für } t = 0:$$

$$\frac{1}{[A_1]_0^{n-1}} = A \quad | \text{in die obere Gleichung eingesetzt:}$$

$$\frac{1}{[A_1]^{n-1}(t)} = \frac{1}{[A_1]_0^{n-1}} + (n-1)c \cdot t \quad | \text{Kehrwert bilden}$$

$$[A_1]^{n-1}(t) = \frac{1}{\frac{1}{[A_1]_0^{n-1}} + (n-1)c \cdot t} \quad (n-1)\text{-te Wurzel ziehen}$$

$$[A_1](t) = \sqrt[n-1]{\frac{1}{\frac{1}{[A_1]_0^{n-1}} + (n-1)c \cdot t}} \quad \text{Fall } n \neq 0 \text{ und } n \neq 1 \text{ allgemein}$$

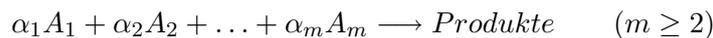
Für $n = 2$ ergibt dies einfach

$$[A_1](t) = \frac{1}{\frac{1}{[A_1]_0} + c \cdot t} \quad \text{Spezialfall } n = 2$$

5.10.6 Graphische Tests zur Bestimmung der Reaktionsordnung

Bei einer Reaktion $A \rightarrow$ Produkte mit nur einem Edukt fallen die Begriffe Ordnung bezüglich A und Reaktionsordnung bedeutungsmäßig zusammen, und der vorige Paragraph lieferte bereits zwei Testverfahren zur Bestimmung der Reaktionsordnung n .

Bei einer Reaktion mit mehreren Edukten



kann man sich die Mühe machen, zunächst die Ordnungen n_1, \dots, n_m bezüglich aller Edukte mit obigen Verfahren zu bestimmen (falls sie alle existieren), und daraus dann die Reaktionsordnung $n = n_1 + n_2 + \dots + n_m$ berechnen⁷¹.

Es geht aber auch einfacher: Gibt man zu Beginn der chemischen Reaktion



alle Edukte in ihrem "idealen", der stöchiometrischen Gleichung entsprechenden Mischungsverhältnis zu, nämlich im Verhältnis

$$[A_1] : [A_2] : \dots : [A_m] = \alpha_1 : \alpha_2 : \dots : \alpha_m,$$

und betrachtet den Abbau während einer Zeitspanne Δt , dann bleibt dieses Mischungsverhältnis wegen⁷²

$$\Delta[A_1] : \Delta[A_2] : \dots : \Delta[A_m] = \alpha_1 : \alpha_2 : \dots : \alpha_m$$

⁷⁰siehe 5.10.4, S.109

⁷¹siehe 5.10.3, S.107

⁷²siehe 5.10.1, S.101

während des gesamten Verlaufs der Reaktion stets erhalten.

Aus der Proportionalität

$$\frac{[A_i]}{[A_1]} = \frac{\alpha_i}{\alpha_1}$$

folgt

$$[A_i] = \frac{\alpha_i}{\alpha_1} \cdot [A_1] \quad (i = 2, \dots, m). \quad (5.22)$$

Ist die Reaktion nun von n -ter Ordnung und gilt das Geschwindigkeitsgesetz

$$v = k \cdot [A_1]^{n_1} \cdot [A_2]^{n_2} \cdot \dots \cdot [A_m]^{n_m} \quad (n_1 + n_2 + \dots + n_m = n), \quad (5.23)$$

so folgt durch Einsetzen von $v = -\frac{d[A_1]}{dt}$ und von (5.22) in (5.23)

$$\begin{aligned} v = -\frac{d[A_1]}{dt} &= k \cdot \left(\frac{\alpha_1}{\alpha_1} \cdot [A_1]\right)^{n_1} \cdot \left(\frac{\alpha_2}{\alpha_1} \cdot [A_1]\right)^{n_2} \cdot \dots \cdot \left(\frac{\alpha_m}{\alpha_1} \cdot [A_1]\right)^{n_m} \\ &= k \cdot \frac{\alpha_1^{n_1} \alpha_2^{n_2} \cdot \dots \cdot \alpha_m^{n_m}}{\alpha_1^{n_1+n_2+\dots+n_m}} \cdot [A_1]^{n_1+n_2+\dots+n_m} \\ v = -\frac{d[A_1]}{dt} &= \text{const.} \cdot [A_1]^n \end{aligned}$$

Dadurch ergeben sich zwei Verfahren zur Bestimmung der Reaktionsordnung:

Erster Graphischer Test zur Bestimmung der Reaktionsordnung n (anhand einer Wertetabelle für v als Funktion von $[A_1]$):

Messmethode: *Starte die chemischen Reaktion*



mit Anfangswerten $[A_1]_0, \dots, [A_m]_0$ im "idealen", der stöchiometrischen Gleichung entsprechenden Mischungsverhältnis, nämlich im Verhältnis

$$[A_1]_0 : [A_2]_0 : \dots : [A_m]_0 = \alpha_1 : \alpha_2 : \dots : \alpha_m.$$

Miss während des Ablaufs in kürzeren zeitlichen Abständen Δt die Zeiten t_i und den Wert von $[A_1]$. Man erhält eine Wertetabelle für $[A_1]$ als Funktion von t .

Mathematische Auswertung: Berechne durch numerische Differentiation⁷³ in einer dritten Rubrik Näherungswerte für die Reaktionsgeschwindigkeit⁷⁴ $v = -[A_1]'(t)$. Die Wertepaare $([A_1](t_i) | v_i)$ bilden **dann eine Wertetabelle für v als Funktion von $[A_1]$.**

Dann gilt: Die Reaktionsordnung ist genau dann gleich n , wenn die Punkte

$(\ln[A_1] | \ln v)$ ungefähr auf einer Geraden liegen: $\ln v = A + B \cdot \ln[A_1]$ mit Steigung $B = n$.

Dies testet man graphisch entweder, indem man zunächst in einer dritten und vierten Rubrik der Wertetabelle zu den gegebenen $[A_1]$ - und v -Werten die zugehörigen $\ln[A_1]$ - und $\ln v$ -Werte berechnet und dann in einem selbstkonstruierten Koordinatensystem mit normaler

⁷³siehe 4.4.2, S.53

⁷⁴Nur wenn die zeitlichen Abstände $\Delta t = t_i - t_{i-1}$ klein sind, sind diese Näherungswerte verlässlich.

äquidistanter Skalierung auf jeder der beiden Achsen die Punkte $(\ln[A_1]|\ln v)$ einträgt, oder schneller, indem man direkt die vorgegebenen Punkte $([A_1]|v)$ der Wertetabelle in doppeltlogarithmisches Papier⁷⁵ einträgt.

Ob die Punkte im Graphen ungefähr auf einer Geraden liegen, muss durch **Linealtest** geklärt werden.⁷⁶

b) Liegen die Punkte im Testgraphen auf einer Geraden, so ist die Reaktionsordnung $n = B =$ Steigung der Geraden. Weil n auf das Format "ganze Zahl" oder "ganze Zahl + 0,5" gerundet werden soll, genügt es, n anschließend mittels zweier Wertepaare $([A_1]|v_1)$ und $([A_2]|v_2)$ zu berechnen:

$$n \approx \frac{\ln v_2 - \ln v_1}{\ln[A_1]_2 - \ln[A_1]_1}$$

Zweiter Graphischer Test zur Bestimmung der Reaktionsordnung n (anhand einer Wertetabelle für $[A_1]$ als Funktion von t):

Messmethode: Starte die chemischen Reaktion



mit Anfangswerten $[A_1]_0, \dots, [A_m]_0$ im "idealen", der stöchiometrischen Gleichung entsprechenden Mischungsverhältnis, nämlich im Verhältnis

$$[A_1]_0 : [A_2]_0 : \dots : [A_m]_0 = \alpha_1 : \alpha_2 : \dots : \alpha_m.$$

Miss während des Ablaufs in kürzeren zeitlichen Abständen Δt die Zeiten t_i und den Wert von $[A_1]$. Man erhält eine Wertetabelle für $[A_1]$ als Funktion von t .

Graphisches Testverfahren: Dann gilt: Die Reaktion besitzt genau dann die Reaktionsordnung

- $n = 0$, wenn die Punkte $(t|[A_1])$ auf einer Geraden liegen,
- $n = 1$, wenn die Punkte $(t|\ln[A_1])$ auf einer Geraden liegen,
- $n = 2$, wenn die Punkte $\left(t|\frac{1}{[A_1]}\right)$ auf einer Geraden liegen,
- $n = 3$, wenn die Punkte $\left(t|\frac{1}{[A_1]^2}\right)$ auf einer Geraden liegen,
- ⋮
- sonstiges n , wenn die Punkte $\left(t|\frac{1}{[A_1]^{n-1}}\right)$ auf einer Geraden liegen.

Ob die Punkte im Graphen ungefähr auf einer Geraden liegen, muss durch **Linealtest** geklärt werden.⁷⁷

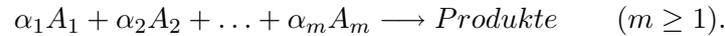
⁷⁵Näheres zur Benutzung dieses Spezialpapiers im Anhang A, S.207ff

⁷⁶siehe 3.1.5, S.24

⁷⁷siehe 3.1.5, S.24

5.10.7 Halbwertzeiten bei Reaktionen der Ordnung n

Betrachtet sei wieder die Reaktion



Weiter sei in diesem Paragraphen vorausgesetzt, dass im Falle mehrerer Edukte ($m \geq 2$) die Anfangskonzentrationen der Edukte im "idealen" Mischungsverhältnis

$$[A_1]_0 : [A_2]_0 : \dots : [A_m]_0 = \alpha_1 : \alpha_2 : \dots : \alpha_m$$

gewählt worden seien. Dann bleibt, wie oben gezeigt, dieses Mischungsverhältnis während des Reaktionsablaufs ständig erhalten, d.h. es gilt

$$\frac{[A_i](t)}{\alpha_i} = \frac{[A_1](t)}{\alpha_1} \quad \text{für alle } t \geq 0 \quad (i = 2, \dots, m) \quad (5.24)$$

Bezeichnung: Die Variable

$$\xi = -\frac{[A_1](t)}{\nu_1} = -\frac{[A_2](t)}{\nu_2} = \dots = -\frac{[A_m](t)}{\alpha_m}$$

heißt dann die **Umsatzvariable der Reaktion**.

Ihre Ableitung nach der Zeit t ist gerade die in 5.10.1 eingeführte Reaktionsrate $\dot{\xi}$.⁷⁸
Aus der Umrechnungsformel

$$[A_i](t) = \frac{\alpha_i}{\alpha_1} \cdot [A_1](t) \quad \text{für alle } t \geq 0 \quad (5.25)$$

folgt, dass alle Edukte zur selben Zeit ihren halben Anfangswert erreichen:

Beweis: Sei $t_{1/2}$ der Zeitpunkt, zu dem A_1 auf den halben Anfangswert reduziert worden ist. Dann gilt nicht nur

$$[A_1](t_{1/2}) = \frac{[A_1]_0}{2}, \quad (5.26)$$

$$\begin{aligned} \text{sondern für } i=2, \dots, m \text{ auch} \quad [A_i](t_{1/2}) & \stackrel{(5.25)}{=} \frac{\alpha_i}{\alpha_1} \cdot [A_1](t_{1/2}) \\ & \stackrel{(5.26)}{=} \frac{\alpha_i}{\alpha_1} \cdot \frac{[A_1]_0}{2} \\ & = \frac{1}{2} \cdot \frac{\alpha_i}{\alpha_1} \cdot [A_1](0) \\ & \stackrel{(5.25)}{=} \frac{1}{2} [A_i](0) \\ & = \frac{[A_i]_0}{2} \end{aligned}$$

d.h. $t_{1/2}$ ist auch der Zeitpunkt, zu dem A_i auf den halben Anfangswert reduziert worden ist. \square

Bezeichnung: Dieser Zeitpunkt heißt die **Halbwertzeit der chemischen Reaktion**.

⁷⁸siehe S.103

Wir untersuchen nun für Reaktionen n -ter Ordnung die Abhängigkeit der Halbwertszeit $t_{1/2}$ von der Anfangskonzentration $[A_1]_0$ (wobei $[A_i]_0 = [A_1]_0$ gilt für alle $i = 1, \dots, m$):

Wir wissen, dass $[A_1]'(t) = -c \cdot [A_1]^n(t)$ gilt. Daraus lässt sich eine Berechnungsformel für $[A_1](t)$ herleiten:⁷⁹

- Im Falle $n = 0$ gilt die Berechnungsformel $[A_1](t) = [A_1]_0 - c \cdot t$. Einsetzen von $t_{1/2}$ auf beiden Seiten der Gleichung liefert

$$\frac{1}{2}[A_1]_0 = [A_1]_0 - c \cdot t_{1/2}$$

$$-\frac{1}{2}[A_1]_0 = -c \cdot t_{1/2}$$

$$[A_1]_0 = 2c \cdot t_{1/2},$$

d.h. Halbwertszeit und Anfangswert sind proportional zueinander.

- Im Falle $n = 1$ erfüllt $[A_1](t)$ ein natürliches Abbaugesetz und die Halbwertszeit ist bekanntlich eine Konstante, unabhängig vom Anfangswert.⁸⁰
- Im Fall $n \neq 0$ und $n \neq 1$ bestimmt man $t_{1/2}$ mittels der Berechnungsformel für $[A_1](t)$:⁸¹

$$[A_1](t) = \sqrt[n-1]{\frac{1}{\frac{1}{[A_1]_0^{n-1}} + (n-1)c \cdot t}} \quad | \ t_{1/2} \text{ einsetzen}$$

$$[A_1](t_{1/2}) = \sqrt[n-1]{\frac{1}{\frac{1}{[A_1]_0^{n-1}} + (n-1)c \cdot t_{1/2}}}$$

$$\frac{[A_1]_0}{2} = \sqrt[n-1]{\frac{1}{\frac{1}{[A_1]_0^{n-1}} + (n-1)c \cdot t_{1/2}}} \quad | \ (n-1)\text{-te Potenz bilden}$$

$$\frac{[A_1]_0^{n-1}}{2^{n-1}} = \frac{1}{\frac{1}{[A_1]_0^{n-1}} + (n-1)c \cdot t_{1/2}} \quad | \ \text{Kehrwert bilden}$$

$$\frac{2^{n-1}}{[A_1]_0^{n-1}} = \frac{1}{\frac{1}{[A_1]_0^{n-1}} + (n-1)c \cdot t_{1/2}} \quad | \ -\frac{1}{[A_1]_0^{n-1}}$$

$$\frac{2^{n-1} - 1}{[A_1]_0^{n-1}} = (n-1)c \cdot t_{1/2} \quad | \ : (n-1)c$$

$$t_{1/2} = \frac{2^{n-1} - 1}{(n-1)c} \cdot \frac{1}{[A_1]_0^{n-1}} \quad | \ \cdot [A_1]_0^{n-1}$$

$$t_{1/2} \cdot [A_1]_0^{n-1} = \frac{2^{n-1} - 1}{(n-1)c} = \text{const.}, \text{ d.h. } t_{1/2} \text{ und } [A_1]_0^{n-1} \text{ sind antiproportional.}$$

⁷⁹siehe 5.10.5, S.110

⁸⁰siehe 5.5.3, S.87

⁸¹siehe 5.10.5, S.111

Da A_1 exemplarisch für jedes andere Edukt betrachtet wurde, folgt:

Abhängigkeit der Halbwertzeit von der Anfangskonzentration:

Beginnt die Reaktion n -ter Ordnung



mit Anfangskonzentrationen in demjenigen Mischungsverhältnis, wie es die stöchiometrische Formel angibt, d.h.

$$[A_1]_0 : [A_2]_0 : \dots : [A_m]_0 = \alpha_1 : \alpha_2 : \dots : \alpha_m,$$

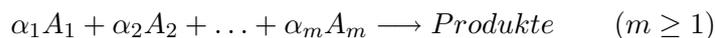
so gilt:

- Im Falle $n = 0$ ist $t_{1/2}$ proportional zu $[A_1]_0$,
- Im Falle $n = 1$ ist $t_{1/2}$ eine von $[A_1]_0$ unabhängige Konstante,
- Im Falle $n = 2$ ist $t_{1/2}$ antiproportional zu $[A_1]_0$,
- Im Falle $n = 3$ ist $t_{1/2}$ antiproportional zu $[A_1]_0^2$,
- Im Falle $n = 4$ ist $t_{1/2}$ antiproportional zu $[A_1]_0^3$,
- ⋮
- Im Falle $n \neq 0$ und $n \neq 1$ ganz allgemein ist $t_{1/2}$ antiproportional zu $[A_1]_0^{n-1}$.

Hierauf beruht dank *Regel 2*⁸² ein

Dritter Graphischer Test zur Bestimmung der Reaktionsordnung n (mittels Halbwertzeiten):

Starte die Reaktion



im Falle $m \geq 2$ mit Anfangskonzentrationen in demjenigen Mischungsverhältnis, wie es die stöchiometrische Formel angibt, d.h.

$$[A_1]_0 : [A_2]_0 : \dots : [A_m]_0 = \alpha_1 : \alpha_2 : \dots : \alpha_m.$$

Bestimme bei konstanter Temperatur für mehrere verschiedene Anfangskonzentrationen $[A_1]_0$ die zugehörigen Halbwertzeiten. Dann ist die Reaktion genau dann von

- nullter Ordnung, wenn $t_{1/2}$ und $[A_1]_0$ proportional sind, d.h. wenn die Punkte $([A_1]_0 | t_{1/2})$ auf einer Ursprungsgeraden liegen,
- erster Ordnung, wenn $t_{1/2}$ im Wert gleichbleibt, d.h. wenn die Punkte $([A_1]_0 | t_{1/2})$ auf einer horizontalen Geraden liegen,

⁸²siehe 2.2.1, S.16

- zweiter Ordnung, wenn $t_{1/2}$ und $[A_1]_0$ antiproportional sind, d.h. wenn die Punkte $\left(\frac{1}{[A_1]_0} \mid t_{1/2}\right)$ auf einer Ursprungsgeraden liegen,
- allgemein von n -ter Ordnung ($n \neq 0$ und $n \neq 1$), wenn die Punkte

$$\left(\frac{1}{[A_1]_0^{n-1}} \mid t_{1/2}\right) \text{ auf einer Ursprungsgeraden liegen.}$$

5.10.8 Beispiel für ein biologisches Wachstumsgesetz mit Ähnlichkeit zur chemischen Reaktion n -ter Ordnung

Ist eine Variable y irgendeine monoton wachsende bzw. fallende Funktion **der Zeit** t , so wird die momentane Änderungsrate (ohne ihr bei monotonem Fallen negatives Vorzeichen), also $|y'(t)|$, generell auch gern als die momentane (Wachstums- bzw. Abbau-) **Geschwindigkeit** bezeichnet.

Im Beispiel der chemischen Reaktion n -ter Ordnung gilt bei "idealem" Mischungsverhältnis der Anfangskonzentrationen für jedes der Edukte A_i das **Abbaugesetz**⁸³

"Die momentane Abbaugeschwindigkeit von $[A_i]$ ist proportional zur n -ten Potenz der augenblicklichen Größe von $[A_i]$."

$$-[A_i]'(t) = c \cdot [A_i]^n$$

Für die Masse m von Zellen gilt ein entsprechendes **Wachstumsgesetz**:

"Die momentane Wachstumsgeschwindigkeit von m ist proportional zur b -ten Potenz der augenblicklichen Größe von m , wobei $b = \frac{2}{3}$."

Als Formel:

$$m'(t) = c \cdot m^{2/3}(t)$$

mit einer zellspezifischen positiven Konstante c .

Ähnlich wie bei der Berechnung der Formel für $[A_1](t)$ ⁸⁴ folgt

$$\frac{m'(t)}{m^{2/3}(t)} = c \quad | \text{ Stammfunktion ist eine Gerade}$$

$$3 \cdot m^{1/3}(t) = A + c \cdot t \quad | t = 0 \text{ einsetzen}$$

$$3\sqrt[3]{m_0} = A \quad | \text{ für } A \text{ einsetzen}$$

$$3 \cdot m^{1/3}(t) = 3\sqrt[3]{m_0} + c \cdot t \quad |: 3$$

$$m^{1/3}(t) = \sqrt[3]{m_0} + \frac{c}{3} \cdot t \quad |^3$$

$$m(t) = \left(\sqrt[3]{m_0} + \frac{c}{3} \cdot t\right)^3 \quad \text{Formel für das Massenwachstum von Zellen}$$

in Abhängigkeit von der Zeit t .

⁸³siehe 5.10.6; S.??

⁸⁴siehe 5.10.5, S.111

5.11 Die Winkelfunktionen und ihre Abkömmlinge

5.11.1 Cosinus, Sinus und Bogenlänge eines Winkels

Man betrachte einen **Einheitskreis**, d.h. einen Kreis mit Radius $r = 1$, Mittelpunkt $M(0|0)$ und Umfang $U = 2\pi$ ($\pi = 3,14\dots$ ist irrational, ca. 1 Milliarde Nachkommastellen sind berechnet, die restlichen sind unbekannt...)

Ein Winkel α mit Scheitelpunkt im Ursprung $M(0|0)$, dessen rechter Schenkel die positive x -Achse ist, schneidet mit seinem anderen Schenkel den Einheitskreis in einem Punkt P :

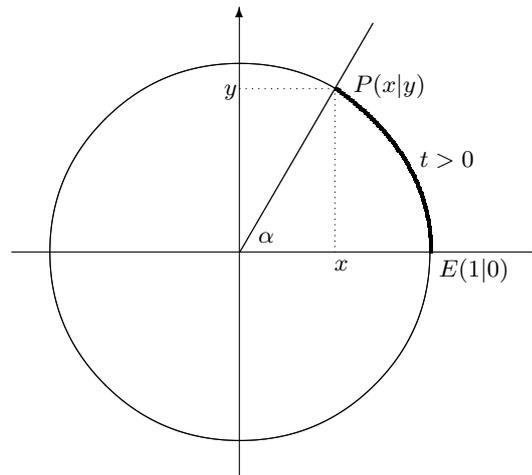


Abbildung 5.6: Winkel mit positiver Bogenlänge t

Durch den Punkt P ist der Winkel α eindeutig bestimmt. Umgekehrt bestimmt jeder Punkt P auf dem Einheitskreis einen solchen Winkel.

Man beschreibt den Winkel α durch **Ortsangabe von P** :

1. Methode:

Mit x - y -Koordinaten.

Bezeichnung: Die x -Koordinate von P heißt $\cos \alpha$.

Die y -Koordinate von P heißt $\sin \alpha$.

2. Methode:

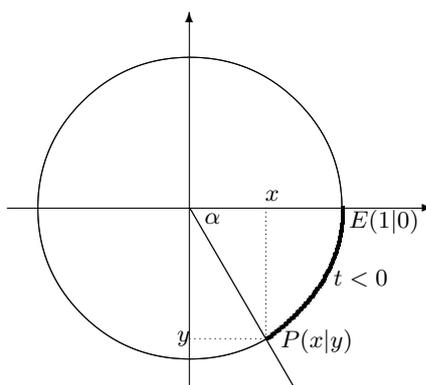
Der gerichtete Kreisbogen von $E(1|0)$ bis $P(\cos \alpha | \sin \alpha)$ innerhalb des Winkelraums von α hat eine bestimmte Länge t ($0 \leq t \leq 2\pi$). Diese Länge t wird mit dem positiven Vorzeichen versehen, wenn der Kreisbogen im Gegenuhrzeigersinn gerichtet ist (s. Abb.5.6), mit dem negativen Vorzeichen, wenn der Kreisbogen im Uhrzeigersinn gerichtet ist.

Durch die (mit Vorzeichen versehene) Bogenlänge t ist der Punkt P und damit der Winkel α eindeutig bestimmt. Man schreibt $P = P_t$.

Bezeichnung: Die vorzeichenbehaftete Zahl t heißt das **Bogenmaß des Winkels**.

Schreibweise: $\cos \alpha = x = \cos t$

$\sin \alpha = y = \sin t$

Abbildung 5.7: Winkel mit negativer Bogenlänge t

5.11.2 Symmetrie-Eigenschaften von $\cos t$ und $\sin t$

Lässt man das Bogenmaß t alle Werte von 0 bis 2π durchlaufen, so durchläuft der Punkt P_t im Gegenuhrzeigersinn alle Punkte des Einheitskreises genau einmal. Vergrößert man t über den Wert 2π hinaus, so beginnt der Punkt P_t , dieselben Punkte des Einheitskreises mit denselben Koordinaten erneut zu durchlaufen, erst zum zweiten Mal, dann zum dritten Mal, usw. Entsprechendes geschieht, wenn man t negative Werte durchlaufen lässt, die kleiner als -2π sind. Aus der Beziehung $P_{t \pm 2\pi} = P_t$ und dem Sachverhalt $P_t = (x|y) = (\cos t | \sin t)$ folgt

Regel 43 (Definitionsbereich und Periodizität von $\cos t$ und $\sin t$):

R 43

Cosinus und Sinus als Funktionen des Bogenmaßes t sind für alle Werte $t \in \mathbb{R}$ definiert und 2π -periodisch, d.h.

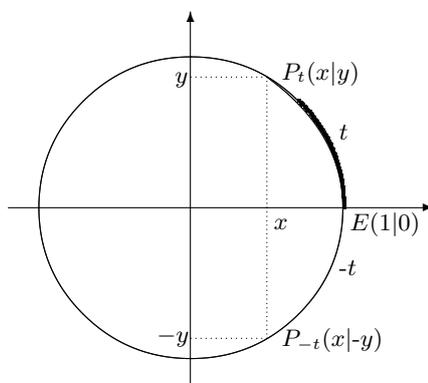
$$\begin{aligned}\cos(t \pm 2\pi) &= \cos t \\ \sin(t \pm 2\pi) &= \sin t\end{aligned}$$

P_t liegt auf dem Einheitskreis, für die Koordinaten gilt $x^2 + y^2 = 1$. Damit erhalten wir

Regel 44 (Lage auf dem Einheitskreis):

R 44

$$(\cos t)^2 + (\sin t)^2 = 1$$

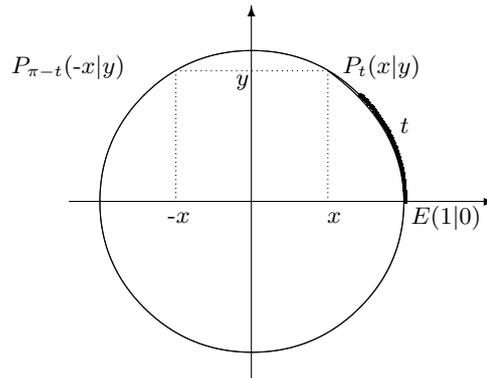
Abbildung 5.8: Spiegelung an der x -Achse:

Bei Spiegelung an der x -Achse geht t über in $-t$, $x = \cos t$ bleibt gleich, $y = \sin t$ ändert sein

Vorzeichen. Daraus folgt:

- R 45 Regel 45 (Übergang von t zu $-t$):**
 $\cos t$ ist eine gerade, $\sin t$ eine ungerade Funktion, d.h.
 $\cos(-t) = \cos t$
 $\sin(-t) = -\sin t$

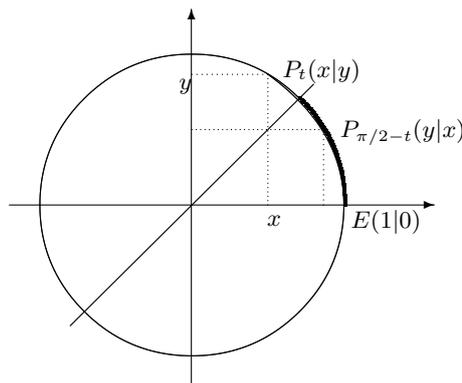
Abbildung 5.9: Spiegelung an der y -Achse:



Bei Spiegelung an der y -Achse geht t über in $\pi - t$, $x = \cos t$ wechselt das Vorzeichen, $y = \sin t$ bleibt gleich. Daraus folgt:

- R 46 Regel 46 (Übergang von t zu $\pi - t$):**
 $\cos(\pi - t) = -\cos t$
 $\sin(\pi - t) = \sin t$

Abbildung 5.10: Spiegelung an der Winkelhalbierenden:



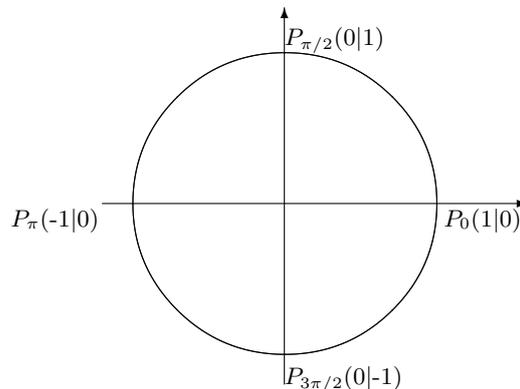
Bei Spiegelung an der 1. Winkelhalbierenden geht t über in $\frac{\pi}{2} - t$, die Koordinaten $x = \cos t$ und $y = \sin t$ werden vertauscht. Daraus folgt:

- R 47 Regel 47 (Übergang von t zu $\frac{\pi}{2} - t$):**
 $\cos(\frac{\pi}{2} - t) = \sin t$
 $\sin(\frac{\pi}{2} - t) = \cos t$

5.11.3 Wertetabelle und Graph von $\cos t$ und $\sin t$

Mit elementaren geometrischen Überlegungen gewinnt man eine Wertetabelle für $\cos t$ und $\sin t$, noch ohne eine allgemeine Berechnungsformel für diese Funktionen zu kennen:

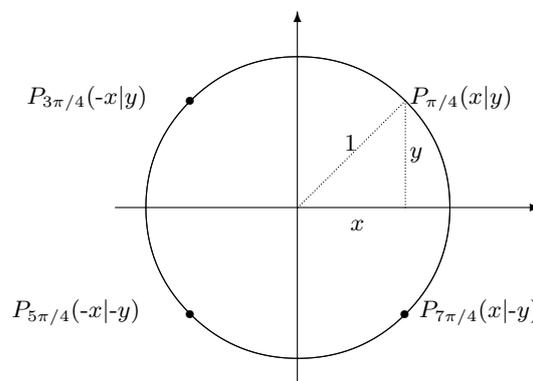
Abbildung 5.11: Zum Winkel $\alpha = 0^\circ$ gehört die Bogenlänge $t = 0$ und der Punkt $P_0(1|0)$, zum Winkel $\alpha = 90^\circ$ gehört die Bogenlänge $t = \pi/2$ und der Punkt $P_{\pi/2}(0|1)$, zum Winkel $\alpha = 180^\circ$ gehört die Bogenlänge $t = \pi$ und der Punkt $P_\pi(-1|0)$, zum Winkel $\alpha = 270^\circ$ gehört die Bogenlänge $t = 3\pi/2$ und der Punkt $P_{3\pi/2}(0|-1)$, zum Winkel $\alpha = 360^\circ$ gehört die Bogenlänge $t = 2\pi$, aber der Punkt $P_{2\pi} = P_0(1|0)$:



Das ergibt die folgenden Werte:

t	0	$\pi/2$	π	$3\pi/2$	2π
$x = \cos t$	1	0	-1	0	1
$y = \sin t$	0	1	0	-1	0

Abbildung 5.12: Zum Winkel $\alpha = 45^\circ$ gehört die Bogenlänge $t = \pi/4$ und der Punkt $P_{\pi/4}(x|y)$ mit zwei gleichen Koordinaten $x = y$. Im Einheitskreis entsteht ein gleichschenkeliges rechtwinkliges Dreieck mit einer Hypotenuse der Länge $r = 1$ und zwei Schenkeln der Länge $x = y$:

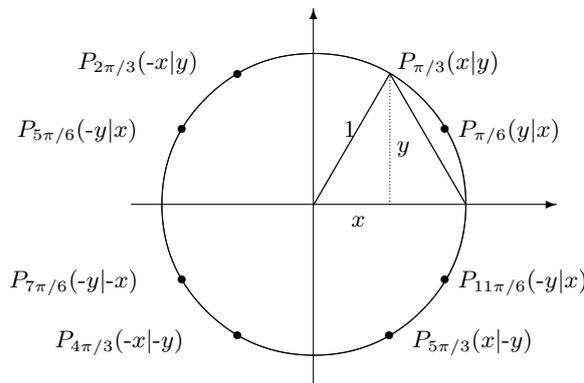


Mit Pythagoras folgt $x^2 + y^2 = 1$, wegen $x = y$ also $2x^2 = 1$, $x^2 = 1/2$, also $x = 1/\sqrt{2} \approx 0,707$ und $y = 1/\sqrt{2} \approx 0,707$.

Das ergibt folgende Werte:

t	$\pi/4$	$3\pi/4$	$5\pi/4$	$7\pi/4$
$x = \cos t$	$1/\sqrt{2}$	$-1/\sqrt{2}$	$-1/\sqrt{2}$	$1/\sqrt{2}$
$y = \sin t$	$1/\sqrt{2}$	$1/\sqrt{2}$	$-1/\sqrt{2}$	$-1/\sqrt{2}$

Abbildung 5.13: Zum Winkel $\alpha = 60^\circ$ gehört die Bogenlänge $t = \pi/3$ und der Punkt $P_{\pi/3}(x|y)$. Die Punkte $M(0|0)$, $E(1|0)$ und $P_{\pi/3}(x|y)$ bilden ein gleichseitiges Dreieck mit Seitenlängen $r = 1$. Die Höhe des Dreiecks ist gleich y und hat den Fußpunkt mit den Koordinaten $(\frac{1}{2}|0)$. Durch die Höhe wird das gleichseitige Dreieck in zwei rechtwinklige Dreiecke unterteilt mit Schenkeln der Länge x und y und einer Hypotenuse der Länge $r = 1$.



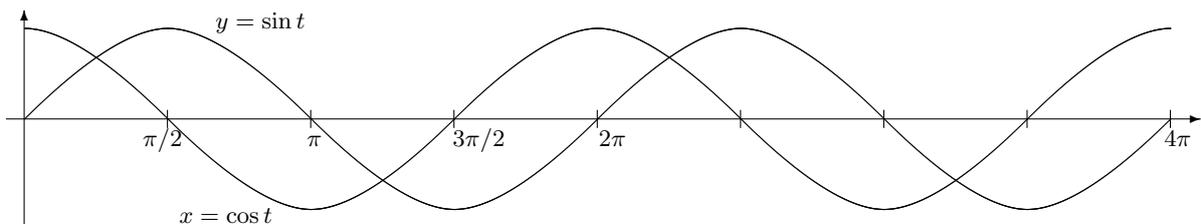
Daraus folgt $x = 1/2$, und mit Pythagoras $y = \sqrt{1 - x^2} = \sqrt{3/4} = \sqrt{3}/2 \approx 0,866$. Durch Spiegelung an der Winkelhalbierenden bekommt man den Punkt $P_{\pi/6}(y|x)$. Aus diesen beiden Punkte erhält man durch Spiegelung an beiden Achsen die Punkte $P_{k\pi/6}$ für $k = 1, \dots, 11$.

Das ergibt folgende zusätzliche Werte:

t	$\pi/6$	$\pi/3$	$2\pi/3$	$5\pi/6$	$7\pi/6$	$4\pi/3$	$5\pi/3$	$11\pi/6$
$x = \cos t$	$1/2$	$\sqrt{3}/2$	$-\sqrt{3}/2$	$-1/2$	$-1/2$	$-\sqrt{3}/2$	$\sqrt{3}/2$	$1/2$
$y = \sin t$	$\sqrt{3}/2$	$1/2$	$1/2$	$\sqrt{3}/2$	$-\sqrt{3}/2$	$-1/2$	$-1/2$	$-\sqrt{3}/2$

Mit diesen ganz elementar errechneten Funktionswerten ist es bereits möglich, die Graphen von $x = \cos t$ und $y = \sin t$ zu skizzieren:

Abbildung 5.14: Graph von Sinus und Cosinus als Funktionen des Bogenmaßes t



5.11.4 Bedeutung von Cosinus und Sinus in den Naturwissenschaften

Der Graph der Funktion $x = \cos(bt)$ ($b > 0$ konstant) unterscheidet sich vom Graphen des Cosinus $x = \cos t$ nur um eine Maßstabsänderung auf der waagerechten Achse.

Der Graph der Funktion $x = a \cdot \cos(bt)$ ($a > 0$ konstant) unterscheidet sich vom Graphen von $x = \cos(bt)$ nur um eine Maßstabsänderung auf der senkrechten Achse:

Beispiel: Sei $b = 2$, $a = 4$. Wertetabelle für $x = \cos(2t)$ und $x = 3 \cdot \cos(2t)$:

t	0	$\pi/4$	$\pi/2$	$3\pi/4$	π	$5\pi/4$	$3\pi/2$	$7\pi/4$	2π
$\cos t$	1	$1/\sqrt{2}$	0	$-1/\sqrt{2}$	-1	$-1/\sqrt{2}$	0	$1/\sqrt{2}$	1
$\cos(2t)$	1	0	-1	0	1	0	-1	0	1
$3 \cdot \cos(2t)$	3	0	-3	0	3	0	-3	0	3

Bedeutung des Faktors b :

$x = \cos(2t)$ durchläuft alle Werte des Cosinus, benötigt dafür aber nur eine Periodenlänge π (statt 2π), d.h. für $b = 2$ halbiert sich die Periodenlänge gegenüber der von $x = \cos t$, auf gleichlangen Abschnitten der t -Achse macht der Graph von $x = \cos(2t)$ also doppelt so viele Wellenbewegungen wie der Cosinus.

Interpretiert man t nicht als Bogenmaß, sondern als Zeit, so bedeutet das: Der Faktor b in der Funktion $x = \cos(bt)$ steuert das Tempo der Wellenbewegung. b heißt deshalb die **Frequenz**.

Verdoppelung von b bedeutet Verdoppelung der Frequenz.

Da der Faktor $b > 0$ beliebig $\in \mathbb{R}$ sein darf, sind mit ihm beliebige Frequenzen erzeugbar.

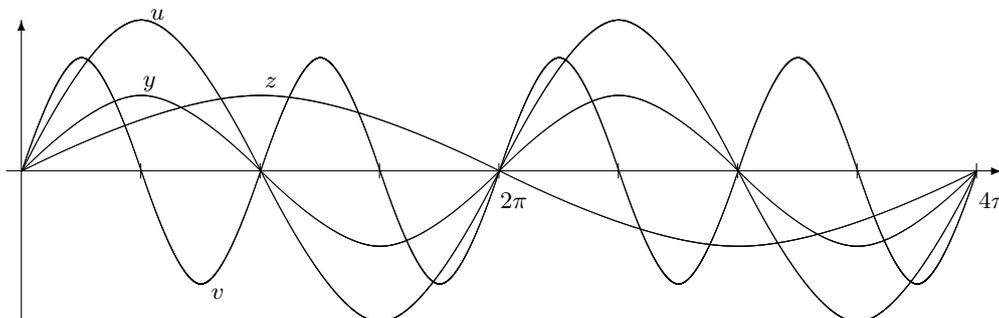
Interpretiert man t nicht als Zeit, sondern als räumliche Länge, so folgt: Der Faktor b steuert die **Wellenlänge**.

Verdoppelung von b bedeutet Halbierung der Wellenlänge.

Bedeutung des Faktors a : Die Wellenbewegungen von $x = 3 \cdot \cos(2t)$ sind synchron zu denen von $x = \cos(2t)$, aber der obere und untere Ausschlag der Wellenbewegungen ist jeweils verdreifacht. Das bedeutet: Der Faktor a in der Funktion $x = a \cdot \cos(bt)$ steuert die Breite der Wellenbewegung und heißt deshalb die **Amplitude**.

Die gleichen Betrachtungen gelten sich für Funktionen des Typs $y = a \cdot \sin(bt)$.

Abbildung 5.15: Die Graphen von $y = \sin(t)$, $z = \sin(0,5 \cdot t)$, $u = 2 \sin(t)$, $v = 1,5 \cdot \sin(2t)$



Bezeichnung: Alle Funktionen des Typs

$$x = a \cdot \cos(bt) \text{ und } y = a \cdot \sin(bt), (a, b \text{ positive reelle Konstante})$$

heißen **trigonometrische Funktionen**. Durch Addition endlich vieler trigonometrischer Funktionen erhält man **trigonometrische Polynome**.⁸⁵

Die Graphen aller trigonometrischen Funktionen beschreiben periodische Wellenbewegungen. Der **Überlagerung** von Wellenbewegungen entspricht die **Addition** der sie beschreibenden Funktionen. Deshalb spielen trigonometrische Polynome eine enorme Rolle bei der Beschreibung periodischer Prozesse aller Art (mechanische, akustische, optische, elektromagnetische). Es gilt (mit kleinen Einschränkungen) der grundlegende⁸⁶

Approximationssatz von Dirichlet-Jordan⁸⁷

Ist die Funktion $z = f(t)$ stetig und periodisch mit Periodenlänge L und ist $\varepsilon > 0$ eine beliebig kleine, frei gewählte positive Zahl (z.B. 10^{-9}), so gibt es stets ein trigonometrisches Polynom f_n mit maximal $2n + 1$ Summanden der Bauart

$$f_n(t) = a_0 + a_1 \cos\left(\frac{2\pi}{L}t\right) + b_1 \sin\left(\frac{2\pi}{L}t\right) + a_2 \cos\left(\frac{4\pi}{L}t\right) + b_2 \sin\left(\frac{4\pi}{L}t\right) + \dots + a_n \cos\left(\frac{2n\pi}{L}t\right) + b_n \sin\left(\frac{2n\pi}{L}t\right)$$

derart, dass sich die Funktionswerte dieses trigonometrischen Polynoms von den Funktionswerten von $z = f(t)$ um garantiert weniger als $\pm\varepsilon$ unterscheiden.

Je kleiner die Abweichung ε vorgegeben wurde, umso größer ist n zu wählen.

Auch bei den Polynomen $p_n(x) = a_0 + a_1x + a_2x^2 + \dots + a_nx^n$, die zur Approximation **beliebiger stetiger Funktionen** $y = f(x)$ in einem Bereich $a \leq x \leq b$ verwendet werden, hängt der Grad n (und damit die Anzahl der benötigten Summanden) in dieser Weise von ε ab. Darüber hinaus muss aber i.a. auch der Satz von Koeffizienten a_0, a_1, \dots, a_n komplett ausgetauscht werden, sobald ein anderes, noch kleineres ε gewählt wird. Das ist bei der Approximation **periodischer stetiger Funktionen** durch trigonometrische Polynome wesentlich bequemer:

Bezeichnung: Die Zahlen $a_0, a_1, b_1, a_2, b_2, a_3, b_3 \dots$ (in dieser Reihenfolge) bilden eine ganz bestimmte, zur periodischen Funktion $z = f(t)$ gehörige Folge von **spezifische Konstanten**. Sie heißen die **Fourierkoeffizienten** der periodischen Funktion.⁸⁸

Sie sind unabhängig von der gewählten Genauigkeitsschranke ε . Letztere beeinflusst nur die zur Approximation benötigte Anzahl von Fourierkoeffizienten.

Die sogenannte **Fouriertheorie** ist ein riesiges, stark expandierendes Forschungsgebiet der Mathematik, das nicht nur mit der Physik, sondern immer stärker auch mit der Medizin zusammenarbeitet, seit man zunehmend auch periodische Prozesse mit Wellenlängen im Nano-Bereich messen und auswerten will. Medizinische Diagnoseverfahren wie Ultraschall und Computertomographie basieren auf dieser mathematischen Theorie.

Noch kompliziertere Funktionen als die trigonometrischen Funktionen $x = a \cdot \cos(bt)$ und $y = a \cdot \sin(bt)$ erhält man, wenn die Amplitude a nicht konstant, sondern zeitabhängig ist,

⁸⁵in Analogie zu den Polynomen, die durch Addition endlich vieler Monome entstehen, siehe 2.2.5, S.20

⁸⁶vgl. den Approximationssatz von Weierstraß für Polynome, siehe 2.2.6, S.21

⁸⁷Gustav Peter Lejeune Dirichlet (1805 - 1859), deutscher Mathematiker; Camille Jordan (1838 - 1922), französischer Mathematiker

⁸⁸Jean Baptiste Joseph Fourier (1768 - 1830), französischer Mathematiker und Physiker

also $a = a(t)$:

$$x = a(t) \cdot \cos(bt) \text{ und } y = a(t) \cdot \sin(bt)$$

Dabei kann a selber wieder eine periodische Funktion von t sein, muss aber nicht. Die Graphen solcher Funktionen beschreiben anschwellende oder sich abschwächende Wellenbewegungen konstanter Länge, je nachdem, ob a eine wachsende oder fallende Funktion von t ist.

Außerdem kann die Frequenz (Wellenlänge) b zeitabhängig sein, $b = b(t)$:

$$x = a(t) \cdot \cos(b(t) \cdot t) \text{ und } y = a(t) \cdot \sin(b(t) \cdot t)$$

Dann folgen die Wellenbewegungen in kürzer werdenden Zeitabständen (schneller) aufeinander, wenn b monoton wächst, in wachsenden Zeitabständen (langsamer), wenn b monoton fällt.

Periodisch sind diese Funktionen nur noch dann, wenn a und b periodische Funktionen von t sind (oder konstant). Auch sie spielen in den Naturwissenschaften eine große Rolle.

5.11.5 Berühmte Formeln für Cosinus und Sinus

Angesichts der ungeheuren Nützlichkeit von Cosinus und Sinus zur Beschreibung naturwissenschaftlicher Phänomene besteht ein dringender Bedarf, ein Berechnungsverfahren zu kennen, um $\cos(t)$ und $\sin(t)$ für beliebige Zahlwerte von t und mit jeder gewünschten Genauigkeit zu berechnen. Elementargeometrische Überlegungen wie in 5.11.3, S.121ff helfen da nicht weiter.

Trotzdem bringt eine geometrische Entdeckung den Durchbruch: So wie man die reellen Zahlen als Punkte auf der Zahlengeraden veranschaulicht, veranschaulicht man bekanntlich⁸⁹ die komplexen Zahlen $x + iy$ ($x, y \in \mathbb{R}$, $i =$ imaginäre Einheit, d.h. eine erfundene Zahl mit der Eigenschaft $i^2 = -1$) durch die Punkte $(x|y)$ der Ebene ("Gauß'sche Zahlenebene").⁹⁰ Dabei heißt die reelle Zahl x der "Realteil", die reelle Zahl y der "Imaginärteil" der komplexen Zahl $x + iy$. Die Menge \mathbb{R} der reellen Zahlen ist eine Teilmenge der Menge \mathbb{C} der komplexen Zahlen: Eine komplexe Zahl ist reell, wenn ihr Imaginärteil gleich Null ist.

Eindeutigkeitsregel für komplexe Zahlen:

Zwei komplexe Zahlen $x_1 + iy_1$ und $x_2 + iy_2$ sind genau dann gleich, wenn sie in Real- und Imaginärteil übereinstimmen, als Formel:

$$x_1 + iy_1 = x_2 + iy_2 \iff x_1 = x_2 \text{ und } y_1 = y_2$$

Daraus folgt insbesondere:

$$x + iy = 0 \iff x = 0 \text{ und } y = 0.$$

$$x + iy \neq 0 \iff x \neq 0 \text{ oder } y \neq 0 \iff x^2 + y^2 \neq 0.$$

Wendet man alle Rechenregeln, die man von den reellen Zahlen gewohnt ist, auch auf die komplexen Zahlen an und beachtet dabei die Regel

$$i^2 = -1,$$

⁸⁹ siehe 1.1, S.3f

⁹⁰ Carl Friedrich Gauß (1777 - 1855), deutscher Mathematiker

so erhält man die

Rechenregeln für komplexe Zahlen:

Für $x_1 + iy_1, x_2 + iy_2 \in \mathbb{C}$ gilt

$$(C.1) \quad (x_1 + iy_1) \pm (x_2 + iy_2) = (x_1 \pm x_2) + i(y_1 \pm y_2)$$

$$(C.2) \quad (x_1 + iy_1) \cdot (x_2 + iy_2) = (x_1x_2 - y_1y_2) + i(x_1y_2 + x_2y_1)$$

$$(C.3) \quad \frac{1}{x + iy} = \frac{x}{x^2 + y^2} - i \frac{y}{x^2 + y^2}, \text{ falls } x + iy \neq 0.$$

Die Regel (C.3) erhält man, indem man Zähler und Nenner des Bruchs $\frac{1}{x+iy}$ mit der komplexen Zahl $x - iy$ erweitert und dann im Nenner ausmultipliziert: $(x + iy) \cdot (x - iy) = x^2 - i^2y^2 = x^2 + y^2$.

Die Exponentialfunktion $y = \exp(z)$ lässt sich für alle komplexen Zahlen $z = x + iy$ berechnen mittels *Regel 27*:⁹¹

$$\exp(x + iy) = \exp(x) \cdot \exp(iy)$$

und *Regel 22*:⁹²

$$\exp(iy) = \lim_{n \rightarrow \infty} \left(1 + (iy) + \frac{1}{2}(iy)^2 + \frac{1}{3!}(iy)^3 + \dots + \frac{1}{n!}(iy)^n \right) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!}(iy)^k. \quad (5.27)$$

Da x eine reelle Zahl ist, ist auch $\exp(x)$ wieder reell. Nicht so $\exp(iy)$. Euler⁹³ studierte die Lage der komplexen Zahl $\exp(iy)$ in der Gaußschen Zahlenebene und machte folgende berühmte Entdeckung:

R 48 Regel 48 (Eulersche Formel):

Ist $t \in \mathbb{R}$ eine beliebige reelle Zahl, so wird die komplexe Zahl $\exp(it)$ repräsentiert durch den Punkt $P_t(\cos t | \sin t)$ auf dem Einheitskreis, d.h. durch den Punkt, der zur Bogenlänge t gehört.⁹⁴

Das bedeutet: $\cos t$ ist der Realteil, $\sin t$ der Imaginärteil der komplexen Zahl $\exp(it)$.

Als Formel:

$$\exp(it) = \cos t + i \sin t \quad (\text{Gleichung zwischen komplexen Zahlen})$$

Das ist der Schlüssel, um für $\cos t$ und $\sin t$ Berechnungsformeln zu finden, die die gleichen Dienste leisten wie die *Regeln 22 und 23* für die Exponentialfunktion:

Zunächst berechnen wir die Potenzen i^k ($k = 1, 2, 3, \dots$):

⁹¹siehe 5.3, S.78

⁹²siehe 5.2.1, S.74

⁹³Leonhard Euler (1707 - 1783), schweizer Mathematiker

⁹⁴siehe 5.11.1, S.118ff

$$\begin{aligned}
i^1 &= i \\
i^2 &= -1 \\
i^3 &= i^2 \cdot i = -1 \cdot i = -i \\
i^4 &= (i^2)^2 = (-1)^2 = 1 \\
i^5 &= i^4 \cdot i = 1 \cdot i = i \\
i^6 &= i^4 \cdot i^2 = 1 \cdot (-1) = -1 \\
i^7 &= i^4 \cdot i^3 = 1 \cdot (-i) = -i \\
i^8 &= i^4 \cdot i^4 = 1 \cdot 1 = 1 \\
&\vdots
\end{aligned}$$

Man sieht, dass die Potenzen i^k ($k = 1, 2, 3, \dots$) zyklisch immer wieder die Werte i , -1 , $-i$ und 1 durchlaufen. Nun setzen wir $(it)^k = i^k t^k$ ein:

$$\begin{aligned}
\exp(it) &= 1 + it + \frac{1}{2}i^2t^2 + \frac{1}{3!}i^3t^3 + \frac{1}{4!}i^4t^4 + \frac{1}{5!}i^5t^5 + \frac{1}{6!}i^6t^6 + \frac{1}{7!}i^7t^7 + \frac{1}{8!}i^8t^8 \dots \\
&= 1 + it - \frac{1}{2}t^2 - i\frac{1}{3!}t^3 + \frac{1}{4!}t^4 + i\frac{1}{5!}t^5 - \frac{1}{6!}t^6 - i\frac{1}{7!}t^7 + \frac{1}{8!}t^8 \dots
\end{aligned}$$

und fassen einerseits alle Summanden ohne, andererseits alle mit dem Faktor i zusammen:

$$\begin{aligned}
\exp(it) &= \left(1 - \frac{1}{2}t^2 + \frac{1}{4!}t^4 - \frac{1}{6!}t^6 + \frac{1}{8!}t^8 \dots\right) + i\left(t - \frac{1}{3!}t^3 + \frac{1}{5!}t^5 - \frac{1}{7!}t^7 \dots\right) \\
&= \cos t + i \sin t
\end{aligned}$$

Mit der Eindeutigkeitsregel für komplexe Zahlen⁹⁵ folgt hieraus

Regel 49 (Berechnungsformeln für $\cos t$ und $\sin t$):

R 49

Ist t das **Bogenmaß** eines Winkels α , und ist

$$x_n = 1 - \frac{1}{2}t^2 + \frac{1}{4!}t^4 - \frac{1}{6!}t^6 + \frac{1}{8!}t^8 - \dots + (-1)^n \frac{1}{(2n)!}t^{2n}, \quad (n = 1, 2, 3, \dots),$$

sowie

$$y_n = t - \frac{1}{3!}t^3 + \frac{1}{5!}t^5 - \frac{1}{7!}t^7 + \dots + (-1)^n \frac{1}{(2n+1)!}t^{2n+1}, \quad (n = 1, 2, 3, \dots),$$

so konvergiert ab $n \geq 2|t|$ die Folge x_1, x_2, x_3, \dots alternierend gegen $\cos t$ und die Folge y_1, y_2, y_3, \dots alternierend gegen $\sin t$.

Der wahre Wert von $\cos t$ bzw. $\sin t$ liegt dann also stets zwischen zwei aufeinanderfolgenden Folgengliedern.

Ableiten von $\exp(it)$ nach t liefert einerseits mit der Kettenregel und der *Eulerschen Formel*:⁹⁶

$$(\exp(it))' = \exp'(it) \cdot (it)' = \exp(it) \cdot i = (\cos t + i \sin t) \cdot i = -\sin t + i \cos t,$$

andererseits mit der *Summenregel* (D.2)⁹⁷

$$(\exp(it))' = (\cos t + i \sin t)' = (\cos t)' + i(\sin t)'$$

⁹⁵siehe oben, S.125

⁹⁶siehe S.126

⁹⁷siehe 4.4.1, 52

Gleichsetzen ergibt

$$-\sin t + i \cos t = (\cos t)' + i(\sin t)',$$

mit der *Eindeutigkeitsregel für komplexe Zahlen* also

R 50 **Regel 50 (Ableitung von Cosinus und Sinus):**

$$(\cos t)' = -\sin t$$

$$(\sin t)' = \cos t$$

Auch wie sich Cosinus und Sinus beim Addieren von Winkeln verändern, läßt sich mittels der *Eulerschen Formel* studieren: Sind t_1 und t_2 die Bogenmaße zweier Winkel α und β , so gilt einerseits

$$\exp(i(t_1 + t_2)) = \cos(t_1 + t_2) + i \sin(t_1 + t_2),$$

andererseits mit dem *Additionstheorem der Exponentialfunktion*⁹⁸ und der *Eulerschen Formel*

$$\begin{aligned} \exp(i(t_1 + t_2)) &= \exp(it_1 + it_2) \\ &= \exp(it_1) \cdot \exp(it_2) \\ &= (\cos t_1 + i \sin t_1) \cdot (\cos t_2 + i \sin t_2) && | i^2 = -1 \\ &= \cos t_1 \cos t_2 + i \cos t_1 \sin t_2 + i \sin t_1 \cos t_2 - \sin t_1 \sin t_2 \\ &= (\cos t_1 \cos t_2 - \sin t_1 \sin t_2) + i(\cos t_1 \sin t_2 + \sin t_1 \cos t_2) \end{aligned}$$

Gleichsetzen ergibt

$$\cos(t_1 + t_2) + i \sin(t_1 + t_2) = (\cos t_1 \cos t_2 - \sin t_1 \sin t_2) + i(\cos t_1 \sin t_2 + \sin t_1 \cos t_2),$$

mit der *Eindeutigkeitsregel für komplexe Zahlen* also

R 51 **Regel 51 (Additionstheoreme für Cosinus und Sinus):**

$$\cos(t_1 + t_2) = \cos t_1 \cos t_2 - \sin t_1 \sin t_2$$

$$\sin(t_1 + t_2) = \cos t_1 \sin t_2 + \sin t_1 \cos t_2$$

⁹⁸siehe 5.3, S.78

Kapitel 6

Integralrechnung

6.1 Das bestimmte Integral

6.1.1 Das Windrad-Beispiel

Ein privat betriebenes Windrad sei mit dem überregionalen Stromnetz verbunden. An der Netzschnittstelle sitze ein Messgerät, welches laufend die (schwankende) elektrische Leistung $P[\text{kW}]$ misst, und zwar positiv, wenn privater Strom in das Netz eingespeist wird, negativ, wenn aus dem Netz Strom an die Privatperson abfließt. (Die umgekehrte Vorzeichenkonvention wäre genauso gut brauchbar.)

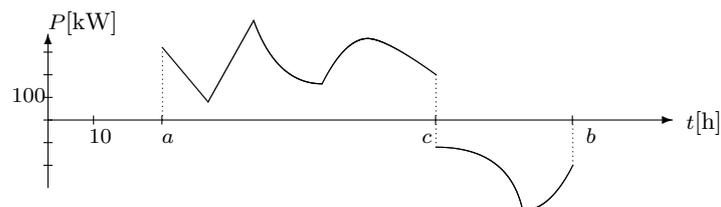
Entscheidend ist, dass die Variable P als Funktion der Zeit t positive und negative Werte in beliebigem Wechsel annehmen kann.

1. Variante: Das Messgerät misst für den Abrechnungszeitraum $a \leq t \leq b$ im Minuten- oder Sekundentakt und druckt während dieser Zeitspanne eine **Wertetabelle** aus für die Variablen $t[\text{h}]$ und $P[\text{kW}]$:

$t[\text{h}]$	$t_0 = a$...	t_{i-1}	t_i	t_{i+1}	...	$t_n = b$
$P[\text{kW}]$	$P_0 = P(a)$...	P_{i-1}	P_i	P_{i+1}	...	$P_n = P(b)$

2. Variante: Das Messgerät misst während des Abrechnungszeitraums $a \leq t \leq b$ permanent und druckt auf Endlospapier die Leistungskurve, d.h. den **Graph** von P als Funktion von t . Durch plötzliches Zu- und Abschalten von elektrisch betriebenen Großgeräten, Windböen bzw. Flauten u.ä. kann diese Leistungskurve Knicke und endlich viele Sprünge haben.

*Das bedeutet mathematisch: P als Funktion von t braucht **nicht differenzierbar** zu sein und darf auch einzelne **Unstetigkeitsstellen** besitzen (hier im Beispiel: bei $t = c$.)*



Aufgabe: Zu Abrechnungszwecken soll für den Zeitraum $a \leq t \leq b$ die Gesamtarbeit W [kWh] berechnet werden, wobei angenommen werde, dass der Netzbetreiber dem Windradbesitzer für 1kW genauso soviel zahlt, wie er umgekehrt für dieselbe Menge von ihm fordert.

*Das bedeutet mathematisch: Es wird eine **Gesamtsumme** gebildet, bei der Plus und Minus, Soll und Haben sich gegenseitig aufheben können.*

Die Grundregel für die Berechnung lautet:

$$\text{Arbeit} = \text{Leistung mal Zeit, d.h.} \quad W[\text{kWh}] = P[\text{kW}] \cdot t[\text{h}].$$

Problem: Diese einfache Formel unterstellt Konstanz der Leistung während der Gesamtzeit. Genau diese Voraussetzung ist hier nicht erfüllt: P ist eine Variable und Funktion der Zeit.

Lösungsansatz im Falle einer vorliegenden Wertetabelle: Da die Wertetabelle eine kleine Schrittweite Δt besitzt, kann man annehmen, dass P in der kleinen Zeitspanne $t_{i-1} \leq t \leq t_i$ ungefähr konstant ist, wobei die Tabelle als Näherungswerte P_{i-1} und P_i anbietet. Daraus errechnet sich als **bestmögliche Schätzung** für P der Mittelwert

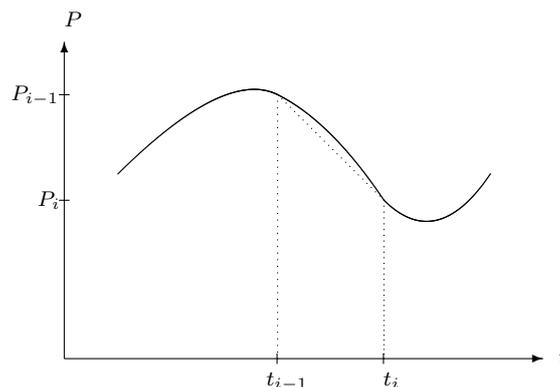
$$P \approx \frac{P_{i-1} + P_i}{2}$$

und das liefert als **bestmögliche Schätzung** für W die

Elementare Trapezregel am Beispiel:

$$W \approx \frac{P_{i-1} + P_i}{2} \cdot (t_i - t_{i-1}) \quad \text{für alle **kleinen** } \Delta t = t_i - t_{i-1}. \quad (6.1)$$

Der Name dieser Regel erklärt sich geometrisch: Die Formel liefert, falls P_{i-1} und P_i beide positiv sind, gerade den Flächeninhalt des folgenden Trapezes:



Da der Graph von P als Funktion von t sich im Bereich $t_{i-1} \leq t \leq t_i$ nur wenig von der Geraden durch die Punkte $(t_{i-1}|P_{i-1})$ und $(t_i|P_i)$ unterscheidet, (= Prinzip der Interpolation¹), ist der Trapezinhalt auch ungefähr gleich dem Flächeninhalt, den dieser Graph im Bereich $t_{i-1} \leq t \leq t_i$ mit der waagerechten Achse einschließt.

¹siehe 2.2.4, S.20

Das alles gilt **nur für kleine** Δt , wird aber immer präziser, je kleiner Δt ist. Genauer gilt: Der Fehler bei der näherungsweise Berechnung von W mit der elementaren Trapezregel (6.1) strebt gegen Null, wenn $\Delta t \rightarrow 0$.

Einen Näherungswert von W für die gesamte Zeitspanne $a \leq t \leq b$ bekommt man nun durch Aufsummieren sämtlicher Näherungswerte für die kleinen Zeitspannen $t_{i-1} \leq t \leq t_i$:

Trapezregel (am Beispiel von P als Funktion von t):

$$W \approx \frac{P_0+P_1}{2} \cdot (t_1 - t_0) + \frac{P_1+P_2}{2} \cdot (t_2 - t_1) + \dots + \frac{P_{n-1}+P_n}{2} \cdot (t_n - t_{n-1})$$

kurz: $W \approx \sum_{i=1}^n \frac{P_{i-1}+P_i}{2} \cdot (t_i - t_{i-1}),$

wobei die Summanden teils positiv, teils negativ sein können.

Sind die P -Werte alle positiv, so gibt dies zugleich auch ungefähr die Fläche an, die der Graph von P als Funktion von t im Bereich $a \leq t \leq b$ mit der waagerechten Achse einschließt. Andernfalls ist es ungefähr die Summe der eingeschlossenen Flächen oberhalb der waagerechten Achse **minus** die Summe der eingeschlossenen Flächen unterhalb der waagerechten Achse.

Die ungefähre Gleichheit strebt gegen exakte Gleichheit, wenn die Schrittweiten Δt der Wertetabelle gegen 0 streben. Damit erhalten wir auch den

Lösungsansatz im Falle eines vorliegenden Graphen: Es muss der Flächeninhalt aller eingeschlossenen Flächen oberhalb sowie unterhalb der waagerechten Achse technisch bestimmt werden, dann muss die Summe der Flächeninhalte unterhalb der Achse subtrahiert werden von der Summe der Flächeninhalte oberhalb der Achse. Das Ergebnis ist $\approx W$.

6.1.2 Das bestimmte Integral und seine numerische Berechnung

Derartige aus Wertetabellen oder Graphen gebildete Summen treten in Anwendungen sehr oft auf. Der Mittelwert $\bar{P}_i = \frac{P_{i-1}+P_i}{2}$ in der Berechnungsformel könnte auch (allerdings in weniger guter Näherung!) durch irgendeinen beliebigen Messwert von P ersetzt werden, der im Bereich $t_{i-1} \leq t \leq t_i$ gemessen wurde, also durch einen Wert $\bar{P}_i = P(\tilde{t}_i)$ mit $t_{i-1} \leq \tilde{t}_i \leq t_i$.

Bezeichnung: Seien a, b zwei Zahlen im Wertebereich der Variablen x (nicht notwendig a kleiner als b) und sei $y = f(x)$ eine Funktion von x , welche im Bereich zwischen a und b bis auf endlich viele Sprünge stetig ist. Seien x_i endlich viele nach Größe sortierte Zwischenwerte, d.h. gelte

$$\text{im Falle } a \leq b: \quad a = x_0 \leq x_1 \leq x_2 \leq \dots \leq x_{n-1} \leq x_n = b$$

$$\text{bzw. im Falle } a \geq b: \quad a = x_0 \geq x_1 \geq x_2 \geq \dots \geq x_{n-1} \geq x_n = b.$$

(Die Schrittweite $\Delta x_i = x_i - x_{i-1}$ darf unterschiedlich groß sein für $i = 1, \dots, n$.)

Sei weiterhin $\bar{y}_i = f(\tilde{x}_i)$ ein Funktionswert mit \tilde{x}_i zwischen x_{i-1} und x_i oder sei $\bar{y}_i = \frac{y_{i-1}+y_i}{2}$ (=Mittelwert), dann heisst

$$S = \sum_{i=1}^n \bar{y}_i \cdot (x_i - x_{i-1})$$

eine Riemannsches² Summe von $y = f(x)$ im Abschnitt zwischen a und b . Die größte der n Schrittweiten $|\Delta x| = |x_i - x_{i-1}|$ heißt der **Feinheitsgrad** δ der Summe.

²Bernhard Georg Friedrich Riemann (1826 - 1866), deutscher Mathematiker

R 52 Regel 52 (Das bestimmte Integral als Grenzwert):

Seien $a, b \in \mathbb{R}$ (nicht notwendig $a < b$) und $y = f(x)$ eine im Bereich zwischen a und b bis auf endlich viele Sprünge stetige Funktion (mit beliebig wechselndem Vorzeichen). Bildet man eine unendliche Folge S_1, S_2, S_3, \dots von Riemannschen Summen von y im Abschnitt zwischen a und b ,

$$S_k = \sum_{i=1}^n \bar{y}_i \cdot (x_i - x_{i-1}) \text{ mit jeweiligem Feinheitseitsgrad } \delta_k \quad (k = 1, 2, 3 \dots)$$

(wobei für jede Summe S_k die Größen n, x_i, \bar{y}_i neu gewählt werden), so besitzt diese Folge von Summen S_1, S_2, S_3, \dots stets einen Grenzwert $\hat{S} = \lim S_k$, **wenn** nur die Folge der Feinheitseitsgrade $\delta_1, \delta_2, \delta_3, \dots$ gegen Null strebt.

Der Zahlwert von $\hat{S} = \lim S_k$ hängt nicht von der speziellen Konstruktion der Summen ab, sondern nur von $y = f(x)$ und den Konstanten a und b , und heißt **das bestimmte Integral von a bis b über $y dx$ (oder: über $f(x) dx$)**.

$$\text{Unterrichts-Schreibweise: } \int_a^b f(x) dx \quad \text{Anwender-Schreibweise: } \int_a^b y dx.$$

Die Funktion f bzw. die Variable y heißt in diesem Zusammenhang **der Integrand**, die Konstante a die **untere Integrationsgrenze** und die Konstante b die **obere Integrationsgrenze**. (Beachte, dass die untere Integrationsgrenze im Wert größer als die obere sein darf.)

Zusatz: Für Berechnungszwecke ist es erlaubt, den Namen der freien Variablen x beliebig durch einen anderen Buchstaben zu ersetzen (solange damit nicht eine echte andere Variable gemeint ist), d.h. es gilt

$$\int_a^b f(x) dx = \int_a^b f(z) dz = \int_a^b f(u) du \quad \text{usw.}$$

Da der Grenzwert einer Folge sich von allen späten Folgengliedern nur wenig unterscheidet, erhalten wir sofort ein Verfahren zur praktischen Berechnung bestimmter Integrale:

R 57 Regel 57 (Numerische Integration mit der Trapezregel):

Soll das bestimmte Integral $\int_a^b y dx$ berechnet werden und ist eine möglichst engmaschige und nach x -Werten auf- oder absteigend sortierte **Wertetabelle** für $y = f(x)$ im Bereich zwischen a und b gegeben (wobei $a = x_0, b = x_n$ zu setzen ist), so ist der bestmögliche Näherungswert für das Integral gegeben durch

$$\int_a^b y dx \approx \sum_{i=1}^n \frac{y_{i-1} + y_i}{2} \cdot (x_i - x_{i-1}).$$

Dies ist die allgemeine Fassung der Trapezregel, die im Windrad-Beispiel schon für den Spezialfall $x = t[h]$ und $y = P[kW]$ formuliert wurde.³

³siehe 6.1.1, S.131

Besitzt man von $y = f(x)$ keine Wertetabelle, sondern nur einen durch ein geeignetes Messinstrument aufgezeichneten Graphen, so macht man sich den Zusammenhang zwischen Wert des bestimmten Integrals und Fläche unter dem Graphen zunutze⁴ sowie die Tatsache, dass die Fläche eines Stücks Papier proportional zu ihrem Gewicht ist:

Graphische Integration:

Es sei die untere Integrationsgrenze a kleiner als die obere b .

Soll das bestimmte Integral $\int_a^b y dx$ berechnet werden und ist keine Wertetabelle, aber ein möglichst präzise hergestellter **Graph** von $y = f(x)$ im Abschnitt von a bis b gegeben, so verfährt man wie folgt:

1. Schritt: Die zwischen dem Graphen und der x -Achse im Bereich $a \leq x \leq b$ eingeschlossene Fläche schneidet man sorgfältig aus dem Papier aus.
Dabei zerfällt die Fläche ggf. in mehrere Teilflächen A_+ über und Teilflächen A_- unter der x -Achse.
2. Schritt: Durch Wiegen mit einer Präzisionswaage bestimmt man
- das Gesamtgewicht G_+ aller Teilflächen A_+ über der x -Achse sowie
- das Gesamtgewicht G_- aller Teilflächen A_- unter der x -Achse.
3. Schritt: Zum Vergleich schneidet man eine Rechtecksfläche bekannter Größe A_\square (z.B.: 100 (im x -Achsenmaßstab) mal 10 (im y -Achsenmaßstab)) aus, misst ihr Papiergewicht G_\square und errechnet daraus das Gewicht G_{norm} der Einheitsfläche $A_{norm} = 1$:

$$G_{norm} = \frac{G_\square}{A_\square}.$$

4. Schritt: Jetzt berechnet man (dimensionslos)

$$\int_a^b y dx \approx \frac{G_+ - G_-}{G_{norm}}.$$

6.1.3 Umformungsregeln für bestimmter Integrale

Da der Bereich $a \leq x \leq b$ zusammen mit dem Bereich $b \leq x \leq c$ den Bereich $a \leq x \leq c$ ergibt, und da im Falle $b < a$ die Differenzen $\Delta x = x_i - x_{i-1}$ alle negativ sind, folgt

Regel 53 (Regeln für die Integrationsgrenzen bestimmter Integrale):

R 53

$$(I.1) \quad \int_a^b f(x) dx + \int_b^c f(x) dx = \int_a^c f(x) dx,$$

$$(I.2) \quad \int_b^a f(x) dx = - \int_a^b f(x) dx,$$

$$(I.3) \quad \int_a^a f(x) dx = 0.$$

Aus der Bauart der Riemannschen Summen folgt beim Grenzübergang mittels der Allgemeinen Grenzwertregeln (G.1) - (G.3)⁵

⁴siehe das Windrad-Beispiel 6.1.1, S.131

⁵siehe 3.3.3, S.35

R 54 Regel 54 (Faktorregel):

$$\int_a^b c \cdot f(x) dx = c \cdot \int_a^b f(x) dx.$$

R 55 Regel 55 (Summenregel):

$$\int_a^b (f_1(x) \pm f_2(x)) dx = \int_a^b f_1(x) dx \pm \int_a^b f_2(x) dx.$$

Ist $x = g(z)$ seinerseits eine monoton wachsende oder fallende und **differenzierbare** Funktion von z und $x_i = g(z_i)$ ($i = 0, \dots, n$), sowie \tilde{x}_i zwischen x_{i-1} und x_i mit $\tilde{x}_i = g(\tilde{z}_i)$, so sind die z_i, \tilde{z}_i genauso oder umgekehrt der Größe nach sortiert wie die x_i, \tilde{x}_i und es gilt⁶: $x_i - x_{i-1} \approx g'(\tilde{z}_i) \cdot (z_i - z_{i-1})$. Insbesondere strebt $\Delta x = x_i - x_{i-1}$ genau dann gegen 0, wenn auch $\Delta z = z_i - z_{i-1}$ dies tut. Setzt man dies in die Riemannschen Summen ein (wobei $\bar{y}_i = f(\tilde{x}_i)$) und nennt noch $z_0 = \alpha$, $z_n = \beta$, so folgt

$$S = \sum_{i=1}^n \bar{y}_i \cdot (x_i - x_{i-1}) = \sum_{i=1}^n f(\tilde{x}_i) \cdot (x_i - x_{i-1}) \approx \sum_{i=1}^n f(g(\tilde{z}_i)) \cdot g'(\tilde{z}_i) \cdot (z_i - z_{i-1}),$$

und letztere Summe ist eine Riemannsche Summe von $f(g(z)) \cdot g'(z)$ im Abschnitt zwischen α und β . Das führt beim Grenzprozess $\Delta x \rightarrow 0$ bzw. $\Delta z \rightarrow 0$ zu

R 56 Regel 56 (Substitutionsregel):

$$\int_{\alpha}^{\beta} f(g(z))g'(z)dz = \int_a^b f(x)dx.$$

Beispiel zur Substitutionsregel: $\int_2^3 \exp(3z^2)6zdz = \int_{12}^{27} \exp(x)dx$ (mit $x = g(z) = 3z^2$).

Die *Regeln 53 bis 56* liefern - außer im trivialen Falle von (I.3) - keinerlei Handhabe zum Ausrechnen von bestimmten Integralen, sondern lediglich Möglichkeiten, ein (unausgerechnetes) Integral umzuformen und durch andere (ebenso unausgerechnete) Integrale auszudrücken, mit der Zielrichtung, kompliziert gebaute Integrale durch einfacher gebaute zu ersetzen.

Die Bestimmung des Zahlwerts eines Integrals geschieht in der Praxis in rund 99% aller Fälle **näherungsweise** durch numerische Integration gemäß *Regel 57*.⁷

Eine **exakte** Berechnung des bestimmten Integrals mit dem sog. Hauptsatz der Differential- und Integralrechnung⁸ gelingt nur bei solchen Funktionen $y = f(x)$, für die eine Berechnungsformel existiert und für die - oft erst nach Anwendung der *Regeln 53 bis 56* - zusätzlich eine Stammfunktion bekannt ist. Dabei ist die Existenz einer Berechnungsformel in der Praxis schon selten genug, in der Wissenschaftstheorie eher häufig anzutreffen. Die Existenz einer Stammfunktion dagegen ist auch in der Theorie eher die Ausnahme.

⁶siehe 4.3.1, S.48

⁷siehe 6.1.2, S.132

⁸siehe unten 6.4, S.140

6.1.4 Anwendung: Der Begriff des mittleren (durchschnittlichen) Wertes einer Funktion $y = f(x)$ im Bereich $a \leq x \leq b$

Beispiel 1: Die mittlere Leistung des Windrades im Zeitraum $a \leq t \leq b$:

Wird im Windrad-Beispiel⁹ die variable Leistung $P[\text{kW}]$ über den Zeitraum $a \leq t \leq b[\text{h}]$ gemessen, so ergibt sich die Gesamtarbeit W bekanntlich als das bestimmte Integral

$$W = \int_a^b P dt [\text{kWh}].$$

Die **mittlere Leistung** P_{mitt} während desselben Zeitraums erhält man, indem man die Gesamtarbeit $W[\text{kWh}]$ durch die Zeitspanne $b - a$ [h] dividiert:

$$P_{\text{mitt}} = \frac{W}{b-a} = \frac{1}{b-a} \int_a^b P dt \quad (6.2)$$

Beispiel 2: Die mittlere Temperatur an einem Ort im Zeitraum $a \leq t \leq b$:

Die Celsiustemperatur ϑ an einem Ort kann zwischen Plus- und Minusgraden schwanken, die Durchschnittstemperatur ϑ_{mitt} in einem 24-Stunden-Zeitraum (z.B.) solle berechnet werden. Hat man etwa folgende fünf Messungen gemacht:

$t[\text{h}]$	0	5	12	16	24
$\vartheta[^\circ\text{C}]$	-5	-10	8	12	0

so ist es **falsch**, einfach das arithmetische Mittel aller 5 Messwerte $\bar{\vartheta} = \sum \vartheta_i / 5 = 1[^\circ\text{C}]$ zu berechnen: Indem man in der kalten Nacht häufiger, am warmen Nachmittag aber seltener misst (oder umgekehrt), kann man den Zahlwert des arithmetischen Mittels beliebig nach unten oder oben manipulieren!

Vielmehr muss man Temperaturwerte ermitteln, deren (evtl. unterschiedliche) Gültigkeitsdauer man angeben kann, und diese Werte gemäß ihrer Gültigkeitsdauer gewichten. Wie lange jeder einzelne Temperaturwert aus der Tabelle gültig war, ist nicht feststellbar. Aber es gilt:

- Von 0 bis 5 Uhr herrschte eine Durchschnittstemperatur von $\approx \bar{\vartheta}_1 = \frac{(-5)+(-10)}{2} = -7,5$ Grad, und dieser Zeitraum hat an 24 Stunden den Anteil $a_1 = \frac{5-0}{24}$,
- von 5 bis 12 Uhr herrschte eine Durchschnittstemperatur von $\approx \bar{\vartheta}_2 = \frac{-10+8}{2} = -1$ Grad, zeitlicher Anteil: $a_2 = \frac{12-5}{24}$
- von 12 bis 16 Uhr herrschte eine Durchschnittstemperatur von $\approx \bar{\vartheta}_3 = \frac{8+12}{2} = 10$ Grad, zeitlicher Anteil: $a_3 = \frac{16-12}{24}$,
- von 16 bis 24 Uhr herrschte eine Durchschnittstemperatur von $\approx \bar{\vartheta}_4 = \frac{12+0}{2} = 6$ Grad, zeitlicher Anteil: $a_4 = \frac{24-16}{24}$.

Wie in der Mischungsrechnung setzt sich nun der Gesamtwert ϑ_{mitt} aus diesen $\bar{\vartheta}_i$ gemäß ihren prozentualen Anteilen additiv zusammen: $\vartheta_{\text{mitt}} = \bar{\vartheta}_1 \cdot a_1 + \bar{\vartheta}_2 \cdot a_2 + \bar{\vartheta}_3 \cdot a_3 + \bar{\vartheta}_4 \cdot a_4$, in Zahlen:

$$\begin{aligned} \vartheta_{\text{mitt}} &\approx -7,5 \cdot \frac{5-0}{24} + (-1) \cdot \frac{12-5}{24} + 10 \cdot \frac{16-12}{24} + 6 \cdot \frac{24-16}{24} \\ &\approx \frac{(-5)+(-10)}{2} \cdot \frac{5-0}{24} + \frac{-10+8}{2} \cdot \frac{12-5}{24} + \frac{8+12}{2} \cdot \frac{16-12}{24} + \frac{12+0}{2} \cdot \frac{24-16}{24} = 1,8125 \end{aligned}$$

⁹siehe 6.1.1, S.129

Bezeichnet man die 5 Zeitwerte in der Wertetabelle aufsteigend mit $a = t_0 = 0$ bis $b = t_4 = 24$, die entsprechenden Temperaturwerte mit ϑ_0 bis ϑ_4 , so liest sich diese Rechnung wie folgt:

$$\begin{aligned}\vartheta_{\text{mitt}} &\approx \frac{\vartheta_0 + \vartheta_1}{2} \cdot \frac{t_1 - t_0}{b - a} + \frac{\vartheta_1 + \vartheta_2}{2} \cdot \frac{t_2 - t_1}{b - a} + \frac{\vartheta_2 + \vartheta_3}{2} \cdot \frac{t_3 - t_2}{b - a} + \frac{\vartheta_3 + \vartheta_4}{2} \cdot \frac{t_4 - t_3}{b - a} \\ &= \frac{1}{b - a} \cdot \left(\frac{\vartheta_0 + \vartheta_1}{2} \cdot (t_1 - t_0) + \frac{\vartheta_1 + \vartheta_2}{2} \cdot (t_2 - t_1) + \frac{\vartheta_2 + \vartheta_3}{2} \cdot (t_3 - t_2) + \frac{\vartheta_3 + \vartheta_4}{2} \cdot (t_4 - t_3) \right)\end{aligned}$$

Dies ist noch eine grobe Näherung, aber wenn man die zeitlichen Abstände $\Delta t = t_i - t_{i-1}$ der Messungen verkleinert, also über denselben Zeitraum $a \leq t \leq b$ mehr Daten sammelt, und dann die entsprechende Rechnung durchführt, wird das Ergebnis zwar rechenaufwendiger, aber auch immer präziser, für $\Delta t \rightarrow \infty$ erhält man den exakten Wert von ϑ_{mitt} . Andererseits ist die Summe in großen Klammern nach *Regel 57*¹⁰ ein Näherungswert für das bestimmte Integral von $a = 0[h]$ bis $b = 24[h]$ über ϑdt und strebt für $\Delta t \rightarrow \infty$ gegen dieses Integral. Damit gilt:

$$\vartheta_{\text{mitt}} = \frac{1}{b - a} \int_a^b \vartheta dt \quad (6.3)$$

An beiden Beispielen erkennt man bei Betrachtung von (6.2) und (6.3) den allgemeinen Fall:

Durchschnittlicher Wert einer Variablen $y = f(x)$ im Bereich $a \leq x \leq b$:

Sind $a < b$ zwei Zahlen im Wertebereich der Variablen x und ist die Variable y eine Funktion von x , so errechnet sich der **mittlere (durchschnittliche) Wert von y** im Bereich von a bis b mittels der Formel

$$y_{\text{mitt}} = \frac{1}{b - a} \int_a^b y dx \quad (6.4)$$

Beachte: Die Bedeutung von y_{mitt} erklärt sich erst im Bezug auf einen bestimmten, endlichen Gültigkeitsbereich $a \leq x \leq b$.

Weitere Beispiele:

- Die mittlere Niederschlagsmenge an einem bestimmten Ort, bezogen auf einen langjährigen Zeitraum $a \leq t \leq b$ [Jahre],
- der mittlere Pegelstand eines Flusses gemessen an einem bestimmten Ort, bezogen auf einen Sommerzeitraum $a \leq t \leq b$ [Monate] eines bestimmten Jahres,
- der mittlere Pegelstand eines Flusses, gemessen an einem bestimmten Datum, bezogen auf einen Streckenabschnitt $a \leq x \leq b$ [km],
- die mittlere Steigung einer Straße, bezogen auf einen Streckenabschnitt $a \leq x \leq b$ [km],
- der mittlere Kurswert einer Währung, bezogen auf einen Zeitraum $a \leq t \leq b$ [Wochen].

¹⁰siehe 6.1.2, S.132

6.2 Stammfunktionen

Wie in *Regel 11*¹¹ nachzulesen, gilt die folgende

Bezeichnung: Ist $y = f(x)$ die Ableitung einer differenzierbaren Funktion $u = F(x)$, so heißt $u = F(x)$ eine Stammfunktion von $y = f(x)$.

Regel 58 (Regeln für Stammfunktionen):

R 58

- (S.1) Ist $u = F(x)$ eine Stammfunktion von $y = f(x)$ und $c \in \mathbb{R}$ eine Konstante, so ist auch $u_c = F(x) + c$ eine Stammfunktion von $y = f(x)$.
Insbesondere hat eine Funktion entweder gar keine oder unendlich viele Stammfunktionen.
- (S.2) Zwei Stammfunktionen $u_1 = F_1(x)$ und $u_2 = F_2(x)$ zur selben Funktion $y = f(x)$ unterscheiden sich nur um eine additive Konstante $c \in \mathbb{R}$, d.h. es gilt $u_2(x) = u_1(x) \pm c$ für alle Werte von x , oder kurz:

$$u_1 - u_2 = c \text{ (const).}$$

- (S.3) Wenn zwei Stammfunktionen $u_1 = F_1(x)$ und $u_2 = F_2(x)$ zur selben Funktion $y = f(x)$ an irgendeiner Stelle x_0 im Wert übereinstimmen, so stimmen sie in allen Funktionswerten überein.

Beweis von Regel 58:

Zu (S.1): Ist $u = F(x)$ Stammfunktion von $y = f(x)$, so gilt $u' = F'(x) = f(x) = y$. Daraus folgt

$$u'_c = (F(x) + c)' \stackrel{(D.1)}{=} F'(x) + c' \stackrel{\text{Regel 12}}{=} f(x) + 0 = y,$$

also ist y die Ableitung von u_c nach x und somit $u_c = F(x) + c$ ebenfalls Stammfunktion von $y = f(x)$.

Zu (S.2): Sind $u_1 = F_1(x)$ und $u_2 = F_2(x)$ zwei Stammfunktionen von $y = f(x)$, so folgt

$$(u_2 - u_1)' \stackrel{(D.1)}{=} u'_2 - u'_1 = f(x) - f(x) = 0 \text{ für alle } x,$$

d.h. die Variable $u = u_1 - u_2$ ist als Funktion von x eine Gerade mit Steigung 0, also = const.

Zu (S.3): Nach (S.2) gilt $u_2 - u_1 = c$ (const). Einsetzen von x_0 liefert $c = u_2(x_0) - u_1(x_0) = 0$, also $u_2(x) = u_1(x)$ für alle x -Werte. \square

6.3 Summatorische Funktionen zu einer Funktion $y = f(x)$

Wieder zum Windradbeispiel: Ist $P(t)$ die zum Zeitpunkt t momentan stattfindende Leistung, so bezeichne $W(t)$ die seit dem Zeitpunkt der Installation des Windrades oder irgendeinem anderen Anfangszeitpunkt t_0 bis zum Zeitpunkt t **insgesamt** geleistete Arbeit (negative und positive gegeneinander verrechnet!).

¹¹siehe 4.3.2, S.49

Bezeichnung: $W(t)$ heißt eine zu $P(t)$ gehörige **summatorische Funktion**. Sie hängt noch ab von der Wahl des Anfangszeitpunkts t_0 und hat an diesem den Wert $W = 0$. Für $t \neq t_0$ ist $W(t)$ auszurechnen durch das bestimmte Integral von t_0 bis t über P .

Mit Hilfe einer solchen Funktion läßt sich die innerhalb einer **beliebigen großen** Zeitspanne $a \leq t \leq b$ geleistete Arbeit schreiben als

$$(1) \quad W(b) - W(a) = \int_a^b P(t) dt.$$

Für **kleine** Zeitspannen $\Delta t = t_i - t_{i-1}$ hingegen gilt einfach $W(t_i) - W(t_{i-1}) \approx P(\tilde{t}_i) \cdot (t_i - t_{i-1})$, kurz

$$\Delta W \approx P \cdot \Delta t.$$

Mit *Regel 11*¹² folgt:

- (2) P ist die momentane Änderungsrate von W bezüglich t , d.h. $u = W(t)$ besitzt die Ableitung $u' = P(t)$, und $u = W(t)$ ist eine Stammfunktion von $y = P(t)$.

Nun vom Beispiel zur allgemeinen Theorie. Gestützt auf *Regel 52*¹³ erhalten wir:

Bezeichnung: Ist $y = f(x)$ eine bis auf einzelne Sprünge stetige Funktion und x_0 eine beliebige reelle Zahl in ihrem Definitionsbereich D_f , so existiert zu jedem $x \in D_f$ das bestimmte Integral $\int_{x_0}^x f(x) dx$ und ist durch x eindeutig im Wert bestimmt, also eine Funktion von x . Die so konstruierte Funktion

$$S(x) = \int_{x_0}^x f(x) dx$$

heißt eine **summatorische Funktion zu $y = f(x)$ mit dem Anfangswert $S(x_0) = 0$** .

Bessere Lesbarkeit erzielt man, wenn man die Integrationsvariable durch einen beliebig geänderten Buchstaben bezeichnet, z.B. $S(x) = \int_{x_0}^x f(z) dz$ oder $S(x) = \int_{x_0}^x f(u) du \dots$

6.3.1 Wichtige Beispiele von summatorischen Funktionen

Die Beispiele für Ableitungen in 4.3.3¹⁴ liefern zugleich Beispiele für summatorische Funktionen:

Beispiel 1: Bezeichnet $v(t)$ die variable Geschwindigkeit eines bewegten Körpers zum Zeitpunkt t und $s(t)$ die seit einem beliebigen Anfangszeitpunkt t_0 bis zum Zeitpunkt t insgesamt zurückgelegte Entfernung, so gilt für alle kleinen Zeitspannen $\Delta t = t_i - t_{i-1}$ die Formel $\Delta s = v \cdot \Delta t$, genauer:

$$s_i - s_{i-1} \approx v(\tilde{t}_i) \cdot (t_i - t_{i-1}) \quad (6.5)$$

Zerlegt man die beliebig lange Zeitspanne von t_0 bis t in n kleine aufeinanderfolgende Zeitspannen t_0 bis t_1 , t_1 bis t_2 , \dots , t_{i-1} bis t_i , \dots , t_{n-1} bis t_n , so erhält man n Gleichungen vom Typ (6.5), durch Aufsummieren der kleinen Wegstrecken also die Gesamtwegstrecke:

¹²siehe 4.3.2, S.49

¹³siehe 6.1.2, S.132

¹⁴siehe S.49

$$\begin{aligned}
s(t) &= (s_1 - s_0) + (s_2 - s_1) + \dots + (s_i - s_{i-1}) + \dots + (s_n - s_{n-1}) \\
&= \sum_{i=1}^n (s_i - s_{i-1}) \\
&\approx \sum_{i=1}^n v(\tilde{t}_i) \cdot (t_i - t_{i-1}) \\
&\approx \int_{t_0}^t v(t) dt
\end{aligned}$$

Mit $\Delta t \rightarrow 0$ strebt die ungefähre Gleichheit gegen exakte Gleichheit. Damit gilt

$$s(t) = \int_{t_0}^t v(t) dt,$$

d.h. $s(t)$ ist eine summatorische Funktion zur Funktion $v(t)$, die für den willkürlich gewählten Anfangswert t_0 den Wert $s = 0$ hat. Nach *Regel 11* war $s(t)$ außerdem eine Stammfunktion von $v(t)$.

Beispiel 2: Bezeichnet $I(t)$ die variable Stromstärke zum Zeitpunkt t und $Q(t)$ die seit einem beliebigen Anfangszeitpunkt t_0 bis zum Zeitpunkt t insgesamt geflossene Ladung, so gilt für kleine Zeitspannen Δt die Formel $\Delta Q \approx I \cdot \Delta t$, genauer:

$$Q_i - Q_{i-1} \approx I(\tilde{t}_i) \cdot (t_i - t_{i-1})$$

Durch Aufsummieren über viele kleine aufeinanderfolgende Zeitspannen erhält man durch eine ganz analoge Rechnung

$$Q(t) = \int_{t_0}^t I(t) dt,$$

d.h. $Q(t)$ ist eine summatorische Funktion zur Funktion $I(t)$, die für den willkürlich gewählten Anfangswert t_0 den Wert $Q = 0$ hat. Nach *Regel 11* war $Q(t)$ außerdem eine Stammfunktion von $I(t)$.

Beispiel 3: Bezeichnet $F(t)$ die variable Kraft, die eine geradeaus rollende Kugel zum Zeitpunkt t treibt und $p(t)$ den Impuls seit einem beliebigen Anfangszeitpunkt t_0 bis zum Zeitpunkt t , so gilt für kleine Zeitspannen Δt die Formel $\Delta p \approx F \cdot \Delta t$, und daraus folgt durch Summieren

$$p(t) = \int_{t_0}^t F(t) dt,$$

d.h. $p(t)$ ist eine summatorische Funktion zur Funktion $F(t)$, die für den willkürlich gewählten Anfangswert t_0 den Wert $p = 0$ hat. Nach *Regel 11* war $p(t)$ außerdem eine Stammfunktion von $F(t)$.

Beispiel 4: Wird ein Körper geradlinig bewegt, bezeichnet $F(x)$ die variable Kraft, die am Ort x auf ihn einwirkt, sowie $W(x)$ die Arbeit, die insgesamt geleistet wurde, um ihn von einem beliebigen Anfangspunkt x_0 bis zum Ort x zu bewegen, so gilt für kleine Ortsveränderungen Δx die Formel $\Delta W \approx F \cdot \Delta x$, und daraus folgt durch Summieren

$$W(x) = \int_{x_0}^x F(x) dx,$$

d.h. $W(x)$ ist eine summatorische Funktion zur Funktion $F(x)$, die für den willkürlich gewählten Anfangswert x_0 den Wert $W = 0$ hat. Nach *Regel 11* war $W(x)$ außerdem eine Stammfunktion von $F(x)$.

6.4 Der Hauptsatz der Differential- und Integralrechnung

Alle oben aufgeführten konkreten Beispiele von summatorischen Funktionen zu einer gegebenen Funktion hatten die Eigenschaft, dass sie eine Stammfunktion zu dieser Funktion waren. Sind Stammfunktionen und summatorische Funktionen dasselbe?

Nein, aus mehreren Gründen:

- Es gibt summatorische Funktionen, die keine Stammfunktionen sind:
Auch Funktionen mit Sprüngen besitzen summatorische Funktionen¹⁵. Diese summatorischen Funktionen sind aber i.a. stellenweise nicht differenzierbar. Alle Stammfunktionen sind hingegen differenzierbar, denn sie besitzen ja diejenige Funktion als Ableitung, deren Stammfunktion sie sind.
- Es gibt Stammfunktionen, die keine summatorischen Funktionen sind:
Man nehme eine differenzierbare Funktion $y = f(x)$, die keine Nullstelle besitzt, z.B. $y = \exp(x)$ oder $y = 1 + x^2$. Da jede summatorische Funktion an ihrem Anfangswert x_0 den Wert $y = 0$ hat, kann $y = f(x)$ keine summatorische Funktion sein, weil ohne Nullstelle. Trotzdem ist $y = f(x)$ sicher eine Stammfunktion zu $z = f'(x)$.

Welche engen theoretischen Zusammenhänge zwischen Stammfunktionen, summatorischen Funktionen und bestimmten Integralen trotzdem existieren, formuliert der wohl berühmteste Satz der Analysis überhaupt:

R 59 Regel 59 (Hauptsatz der Differential- und Integralrechnung):

Vorausgesetzt sei, dass $y = f(x)$ eine **stetige** Funktion ist (keine Sprünge, aber nicht notwendig differenzierbar).

- a) Ist x_0 irgendeine Zahl im Definitionsbereich von f und ist u_0 eine beliebige reelle Konstante, so besitzt $y = f(x)$ genau eine Stammfunktion $u = F(x)$ mit dem Anfangswert $F(x_0) = u_0$.

Diese **Stammfunktion** läßt sich erforderlichenfalls **mittels bestimmter Integrale** über $y = f(x)$ **berechnen** nach der Formel

$$(1) \quad F(x) = u_0 + \int_{x_0}^x f(t) dt.$$

Insbesondere ist die summatorische Funktion zu $y = f(x)$ mit dem Anfangswert x_0 auch eine Stammfunktion von $y = f(x)$, (setze $u_0 = 0$).

- b) Ist von der Funktion $y = f(x)$ irgendeine beliebige (!) Stammfunktion $w = F(x)$ bekannt, so läßt sich das **bestimmte Integral** von a bis b über $f(x)dx$ **mittels der Stammfunktion exakt (!) berechnen** nach der Formel

$$(2) \quad \int_a^b f(x) dx = F(b) - F(a).$$

¹⁵siehe 6.3, S.138

Beweis des Hauptsatzes:

Zu a) Jedenfalls existiert zu $y = f(x)$ die summatorische Funktion $S(x) = \int_{x_0}^x f(t)dt$ mit dem Anfangswert $S(x_0) = 0$. Also existiert auch die Funktion

$$u = F(x) = u_0 + \int_{x_0}^x f(t)dt$$

und es gilt $F(x) = u_0 + S(x)$. Weil $S(x_0) = 0$ ist, hat die Funktion F den geforderten Anfangswert $F(x_0) = u_0 + S(x_0) = u_0$.

Bleibt zu zeigen: Wenn f stetig ist, gilt: $u' = F'(x) = f(x)$ (Daraus folgt dann, dass $u = F(x)$ eine Stammfunktion von $y = f(x)$ ist.)

Beweis hierfür: Sei für x irgendein beliebiger fester Wert im Definitionsbereich D_f von f gewählt, und sei x_1, x_2, x_3, \dots eine Folge in D_f mit $x_i \rightarrow x$, dabei alle $x_i \neq x$. Sei weiterhin

$$c_i = \frac{F(x_i) - F(x)}{x_i - x}$$

die Folge der mittleren Änderungsraten. Nach 4.3.1 gilt: Wenn die Folge c_1, c_2, c_3, \dots einen Grenzwert \hat{c} besitzt, dann ist die Funktion $u = F(x)$ differenzierbar. Wenn außerdem dieser Grenzwert $= f(x)$ ist, dann ist $F'(x) = f(x)$. Nachzuprüfen ist also, dass gilt:

$$c_i \rightarrow f(x).$$

Rechnung hierzu:

$$F(x_i) - F(x) = \left(u_0 + \int_{x_0}^{x_i} f(t)dt \right) - \left(u_0 + \int_{x_0}^x f(t)dt \right).$$

u_0 hebt sich weg, und *Regel 53*¹⁶ liefert

$$\begin{aligned} F(x_i) - F(x) &= \int_{x_0}^{x_i} f(t)dt - \int_{x_0}^x f(t)dt \\ &\stackrel{(I.2)}{=} \int_{x_0}^{x_i} f(t)dt + \int_x^{x_0} f(t)dt \\ &= \int_x^{x_0} f(t)dt + \int_{x_0}^{x_i} f(t)dt \\ &\stackrel{(I.1)}{=} \int_x^{x_i} f(t)dt \end{aligned}$$

Sei nun i ein großer Indexwert. Wegen $x_i \rightarrow x$ ist dann $x_i - x$ klein. Deshalb genügt dann zur Abschätzung von $\int_x^{x_i} f(t)dt$ eine Riemannsche Summe mit einem einzigen Summanden ($n = 1, x = x_0$), also die *elementare Trapezregel*¹⁷:

$$F(x_i) - F(x) = \int_x^{x_i} f(t)dt \approx \frac{f(x) + f(x_i)}{2} \cdot (x_i - x)$$

¹⁶siehe 6.1.3, S.133

¹⁷siehe 6.1.1, S.130

und diese Abschätzung wird immer besser, je größer i wird, ja strebt gegen Gleichheit für $i \rightarrow \infty$. Da $x_i \neq x$ vorausgesetzt war, ist Division durch $x_i - x$ erlaubt und liefert

$$\begin{aligned} \frac{F(x_i) - F(x)}{x_i - x} &\approx \frac{f(x) + f(x_i)}{2} \\ c_i &\approx \frac{f(x) + f(x_i)}{2} \end{aligned}$$

und der Fehler in dieser Abschätzung, d.h. die Differenz zwischen beiden Seiten

$$\Delta c_i = c_i - \frac{f(x) + f(x_i)}{2} \quad (6.6)$$

strebt gegen 0 für $i \rightarrow \infty$, als Formel:

$$\Delta c_i \rightarrow 0 \quad (6.7)$$

Addiert man in Gleichung (6.6) auf beiden Seiten $\frac{f(x)+f(x_i)}{2}$, so erhält man für c_i die Darstellung

$$c_i = \Delta c_i + \frac{f(x) + f(x_i)}{2} \quad (6.8)$$

Nun untersuchen wir das Verhalten von $\frac{f(x)+f(x_i)}{2}$ für $i \rightarrow \infty$. Dazu benutzen wir die genaue Definition der Stetigkeit¹⁸:

Aus $x_i \rightarrow x$ folgt, weil f stetig vorausgesetzt wurde, dass $f(x_i) \rightarrow f(x)$. Daraus folgt mit den *Allgemeinen Grenzwertregeln*¹⁹ (G.2) und (G.3)

$$\frac{f(x) + f(x_i)}{2} \rightarrow \frac{f(x) + f(x)}{2} = f(x) \quad (6.9)$$

$$\begin{aligned} \lim c_i &\stackrel{(6.8)}{=} \lim \left(\Delta c_i + \frac{f(x) + f(x_i)}{2} \right) \\ &\stackrel{(G.2)}{=} \lim \Delta c_i + \lim \frac{f(x) + f(x_i)}{2} \\ &\stackrel{(6.7), (6.9)}{=} 0 + f(x) \end{aligned}$$

also $c_i \rightarrow f(x)$, was zu zeigen war.

Zu b) Sei $w = F(x)$ irgendeine (!) schon bekannte Stammfunktion von $y = f(x)$, und sei $\int_a^b f(x)dx$ zu berechnen. Die Stammfunktion $w = F(x)$ nimmt für $x_0 = a$ den Wert $u_0 = F(a)$ an. Nach Teil a) gibt es aber nur eine einzige solche Stammfunktion, und zwar

$$u = F(a) + \int_a^x f(t)dt.$$

Also ist $w = u$, d.h.

$$F(x) = F(a) + \int_a^x f(t)dt \quad \text{für alle } x \in D_f.$$

Einsetzen von $x = b$ und Subtrahieren von $F(a)$ auf beiden Seiten liefert

$$F(b) - F(a) = \int_a^b f(t)dt = \int_a^b f(x)dx.$$

Damit ist der Hauptsatz vollständig bewiesen. □

¹⁸siehe 3.3.1, S.33

¹⁹siehe 3.3.3, S.35

6.5 Zwei Anwendungen des Hauptsatzes

6.5.1 Numerische Berechnung von Stammfunktionen

Eine berühmte Anwendung von Teil a) des *Hauptsatzes* ist die folgende: In der Statistik benötigt man Stammfunktionen zur folgenden Klasse von Funktionen (sog. “Glockenfunktionen”²⁰):

$$y = p(x) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \cdot \exp\left(-\frac{1}{2}\left(\frac{x-\mu}{\sigma}\right)^2\right), \quad (6.10)$$

wobei $\sigma > 0$ und μ gegebene reelle Konstante sind. Die **einzige** Berechnungsmöglichkeit für diese Stammfunktionen (und für viele andere Stammfunktionen), wird durch den *Hauptsatz*, Teil a) eröffnet: In der Formel

$$u = F(x) = u_0 + \int_{x_0}^x f(t)dt \quad (6.11)$$

(hier für $f(t)$ die konkrete Funktion $y = p(t)$ eingesetzt) muss man das bestimmte Integral rechtsseits für ganz viele Werte von x numerisch möglichst genau berechnen und erhält so eine Wertetabelle mit Näherungswerten für $u = F(x)$. Mehr ist nicht machbar! Insbesondere gibt es außer (6.11) keine Berechnungsformel für u als Funktion von x .

Dieses **Verfahren zur Berechnung von Wertetabellen für Stammfunktionen** wird im Folgenden allgemein vorgestellt:

Gegeben sei eine **stetige** Funktion $y = f(x)$, gesucht die Stammfunktion $u = F(x)$ mit vorgeschriebenem Anfangswert $\bar{u} = F(\bar{x})$.

1. Schritt: Beschaffe eine Wertetabelle für $y = f(x)$, auf- oder absteigend sortiert nach x -Werten, mit möglichst kleinen Schrittweiten Δx (nicht unbedingt gleich groß), welche den Wert \bar{x} enthält, etwa an i -ter Position, d.h. $x_i = \bar{x}$.
2. Schritt: Richte eine zusätzliche Rubrik für die (zu berechnenden) Werte $u_i = F(x_i)$ ein wie folgt:

Trage zunächst den vorgeschriebenen Anfangswert $u_i = \bar{u}$ ein.

x	x_0	\dots	x_{i-2}	x_{i-1}	$x_i = \bar{x}$	x_{i+1}	x_{i+2}	\dots	x_n
y	y_0	\dots	y_{i-2}	y_{i-1}	y_i	y_{i+1}	y_{i+2}	\dots	y_n
$u = F(x)$					$u_i = \bar{u}$				

Es ist $u' = y$, also $\Delta u \approx y \cdot \Delta x$, und mit der elementaren Trapezregel gilt in bestmöglicher Näherung:

$$u_i - u_{i-1} \approx \frac{y_{i-1} + y_i}{2} \cdot (x_i - x_{i-1}) \quad \text{und} \quad u_{i+1} - u_i \approx \frac{y_i + y_{i+1}}{2} \cdot (x_{i+1} - x_i)$$

Durch Auflösen dieser beiden Gleichungen nach u_{i-1} bzw. nach u_{i+1} erkennt man, wie weiter zu verfahren ist:

²⁰siehe 8.1, S.134ff

3. Schritt: Berechne ggf. die u -Werte linksseits vom Anfangswert $u_i = \bar{u}$ sukzessive in absteigender Reihenfolge wie folgt:

$$\begin{aligned} u_{i-1} &\approx u_i - \frac{y_{i-1} + y_i}{2} \cdot (x_i - x_{i-1}) \\ u_{i-2} &\approx u_{i-1} - \frac{y_{i-2} + y_{i-1}}{2} \cdot (x_{i-1} - x_{i-2}) \\ &\vdots \\ u_0 &\approx u_1 - \frac{y_0 + y_1}{2} \cdot (x_1 - x_0) \end{aligned}$$

4. Schritt: Berechne die u -Werte rechtsseits vom Anfangswert $u_i = \bar{u}$ sukzessive in aufsteigender Reihenfolge wie folgt:

$$\begin{aligned} u_{i+1} &= u_i + \frac{y_i + y_{i+1}}{2} \cdot (x_{i+1} - x_i) \\ u_{i+2} &= u_{i+1} + \frac{y_{i+1} + y_{i+2}}{2} \cdot (x_{i+2} - x_{i+1}) \\ &\vdots \\ u_n &\approx u_{n-1} + \frac{y_{n-1} + y_n}{2} \cdot (x_n - x_{n-1}) \end{aligned}$$

WARNUNG: u_{i-1} und u_{i+1} werden jeweils nur näherungsweise, also mit einem absoluten Fehler berechnet. Da sie als Summand in der Näherungsformel für u_{i-2} bzw. u_{i+2} auftreten, pflanzt sich dieser Fehler fort, und zwar additiv: Ist der absolute Fehler, den die Näherungsformel erzeugt, z.B. von der Größenordnung $0,5 \cdot 10^{-2}$, so ist der Fehler nach k sukzessiven Berechnungen von der Größenordnung $k \cdot 0,5 \cdot 10^{-2}$. Daher möglichst genau arbeiten.

6.5.2 Unbestimmtes Integral und partielle Integration

Der *Hauptsatz*, Teil b), zeigt die Möglichkeit auf, alle bestimmten Integrale über $f(x)dx$ ohne die Mühsal der Ausnutzung einer Wertetabelle oder eines Graphen für $y = f(x)$ zu berechnen, auch ohne die damit verbundene Ungenauigkeit, wenn man nur **irgendeine** Stammfunktion von $y = f(x)$ kennt. Daher rührt folgende traditionelle

Bezeichnung: Ist $u = F(x)$ eine beliebige Stammfunktion von $y = f(x)$, so nennt man $u = F(x)$ auch **ein unbestimmtes Integral von f** .

$$\text{Schreibweise hierfür: } F(x) = \int f(x)dx$$

(wie bestimmtes Integral, aber ohne Eintragung von Integrationsgrenzen a und b).

Das Finden von **Wertetabellen für Stammfunktionen** ist mittels der im vorigen Paragraphen vorgestellten Technik immer möglich. Hat man eine solche Wertetabelle für die

Stammfunktion $F(x)$ zur Verfügung, so schlägt man lediglich die Werte $F(a)$ und $F(b)$ in der Tabelle nach und hat damit schon das bestimmte Integral $\int_a^b f(x)dx = F(b) - F(a)$ berechnet. Für die Berechnung eines einzigen bestimmten Integrals über $f(x)dx$ lohnt sich diese Praxis gegenüber der numerischen Berechnung des bestimmten Integrals mittels der Trapezregel nur dann, wenn eine veröffentlichte Wertetabelle greifbar ist. Die eigene Herstellung einer solchen Wertetabelle macht erst dann Sinn, wenn man viele bestimmte Integrale über dieselbe Funktion $y = f(x)$, aber mit verschiedenen Integrationsgrenzen ausrechnen soll.

Noch begehrt als Wertetabellen für Stammfunktionen sind natürlich **Berechnungsformeln für Stammfunktionen**. Einen generellen Algorithmus, aus einer Berechnungsformel für $y = f(x)$ eine Berechnungsformel für eine Stammfunktion zu gewinnen, gibt es aber nicht (siehe die Glockenfunktionen (6.10), S.143). Von Wissenschaftlern empirisch gefundene Stammfunktionen werden daher über die Jahrhunderte gesammelt und in Buchform veröffentlicht. Vor allem von Physikern werden solche Sammlungen reichlich benutzt.

Da aber auch eine solche Sammlung niemals erschöpfend sein kann, auch nicht immer zur Hand ist, gewinnen alle Regeln an Bedeutung, die es gestatten, ein bestimmtes Integral in ein anderes umzuformen, d.h. die zeigen, wie man den Wert eines Integrals $\int_a^b f(x)dx$ dadurch finden kann, dass man den Wert eines geeigneten anderen Integrals $\int_c^d g(x)dx$ bestimmt: Wenn sich zu f keine Stammfunktion finden lassen will, dann vielleicht zu g !

Dazu gehören die *Regeln 53 bis 56*²¹. Mittels des *Hauptsatzes*, Teil b), gewinnt man noch eine zusätzliche solche Regel:

Partielle Integration: *Ist das bestimmte Integral*

$$\int_a^b f(x)g(x)dx$$

zu berechnen und kennt man von $f(x)$ irgendeine Stammfunktion $F(x)$ sowie von $g(x)$ die Ableitung $g'(x)$, so kann man wie folgt umformen:

$$\int_a^b f(x)g(x)dx = F(b)g(b) - F(a)g(a) - \int_a^b F(x)g'(x)dx.$$

Beweis der partiellen Integrationsregel: Die Funktion $u = F(x)g(x)$ besitzt die Ableitung

$$\begin{aligned} u' &= (F(x)g(x))' && | \text{Produktregel (D.3)}^{22} \\ &= F'(x)g(x) + F(x)g'(x) && | F'(x) = f(x) \text{ einsetzen} \\ &= f(x)g(x) + F(x)g'(x) \end{aligned}$$

Folglich ist umgekehrt $u = F(x)g(x)$ eine Stammfunktion von $y = f(x)g(x) + F(x)g'(x)$. Daraus folgt mit dem *Hauptsatz*, Teil b), für bestimmte Integrale über die letztere Funktion:

$$\begin{aligned} \int_a^b (f(x)g(x) + F(x)g'(x))dx &= u(b) - u(a) && | \text{Regel 55 (Summenregel)} \\ \int_a^b f(x)g(x)dx + \int_a^b F(x)g'(x)dx &= F(b)g(b) - F(a)g(a) && | - \int_a^b F(x)g'(x)dx \\ \int_a^b f(x)g(x)dx &= F(b)g(b) - F(a)g(a) - \int_a^b F(x)g'(x)dx \end{aligned}$$

□

²¹ siehe 6.1.3, S.133f: Regeln für die Integrationsgrenzen bestimmter Integrale, Faktorregel, Summenregel und Substitutionsregel

Beispiel 1: Berechnung des **bestimmten Integrals** $\int_2^5 x \exp(x) dx$:

Setze $f(x) = \exp(x)$ mit Stammfunktion $F(x) = \exp(x)$, und $g(x) = x$ mit $g'(x) = 1$.
Dann folgt mit der *partiellen Integrationsregel*

$$\begin{aligned} \int_2^5 \exp(x) \cdot x dx &= F(5)g(5) - F(2)g(2) - \int_2^5 F(x)g'(x) dx && | \text{ Für } F \text{ und } g \text{ einsetzen:} \\ &= 5 \exp(5) - 2 \exp(2) - \int_2^5 \exp(x) dx \end{aligned}$$

Das jetzt noch zu berechnende Integral $\int_2^5 \exp(x) dx$ hat aber den Integranden $f(x) = \exp(x)$, zu dem wir die Stammfunktion $F(x) = \exp(x)$ kennen. Also können wir dieses Integral mit dem *Hauptsatz*, Teil b), ausrechnen:

$$\begin{aligned} \int_2^5 \exp(x) \cdot x dx &= 5 \exp(5) - 2 \exp(2) - (F(5) - F(2)) && | \text{ Für } F \text{ einsetzen:} \\ &= 5 \exp(5) - 2 \exp(2) - (\exp(5) - \exp(2)) \\ &= 4 \exp(5) - \exp(2) \end{aligned}$$

Beispiel 2: Berechnung **einer Stammfunktion** $u = F(x)$ von $y = \ln x$, ($x > 0$), mit dem Anfangswert $F(1) = 5$ (z.B.):

Nach dem *Hauptsatz*, Teil a), ist diese Stammfunktion gegeben durch

$$F(x) = 5 + \int_1^x \ln t dt \quad \text{für alle } x > 0.$$

Jetzt kommt einer der vielen beim Integrieren benötigten Tricks: Setze $f(t) = 1$ mit $F(t) = t$ und $g(t) = \ln t$ mit $g'(t) \stackrel{\text{Regel 32}}{=} \frac{1}{t}$, und wende *partielle Integration* an:

$$\begin{aligned} F(x) &= 5 + \int_1^x 1 \cdot \ln t dt \\ &= 5 + \int_1^x f(t)g(t) dt \\ &= 5 + F(x)g(x) - F(1)g(1) - \int_1^x F(t)g'(t) dt && | \text{ rückerinsetzen} \\ &= 5 + x \cdot \ln x - 1 \cdot \ln 1 - \int_1^x t \cdot \frac{1}{t} dt && | \ln 1 = 0 \text{ einsetzen} \\ &= 5 + x \ln x - \int_1^x 1 dt \end{aligned}$$

Das jetzt noch zu berechnende Integral $\int_1^x 1 dt$ hat den Integranden $f(t) = 1$ mit der bekannten Stammfunktion $u(t) = t$. Daher kann es mit dem *Hauptsatz*, Teil b) ausgerechnet werden:

$$\begin{aligned} F(x) &= 5 + x \ln x - (u(x) - u(1)) \\ &= 5 + x \ln x - (x - 1) \\ &= 6 + x \ln x - x \end{aligned}$$

Da sich alle anderen Stammfunktionen von $y = \ln x$ von $F(x) = 6 + x \ln x - x$ nur um eine additive Konstante unterscheiden²³, sind sie alle von der Bauart $u = x \ln x - x + \text{const.}$ Traditionelle Schreibweise hierfür:

$$\int \ln x dx = x \ln x - x + \text{const.}$$

²³siehe *Regeln für Stammfunktionen*, (S.2), S.137

Teil III

Wahrscheinlichkeitsrechnung und Statistik

Kapitel 7

Grundlagen aus der Wahrscheinlichkeitsrechnung

7.1 Die Begriffe Zufallsvariable, Messmethode, Experiment

Die Abhängigkeit einer Variablen x von Einflussgrößen kann unterschiedlich geartet sein:

1. Fall: Monokausale Abhängigkeit: $x = f(u)$.
Beispiele: $x =$ Fläche des Quadrats, $u =$ Kantenlänge,
 $x =$ Volumen der Kugel, $u =$ Radius.
2. Fall: Multikausale Abhängigkeit: $x = f(u_1, u_2, \dots, u_k)$
Anzahl k der Einflussgrößen genau bekannt, jedes u_i genau kontrollierbar ($i = 1, 2, \dots, k$).
Beispiele: $x =$ Fläche des Dreiecks, $u_1, u_2 =$ zwei Dreiecksseiten, $u_3 =$ der eingeschlossene Winkel.
 $x =$ Volumen des Zylinders, $u_1 =$ Radius der Grundfläche, $u_2 =$ Höhe des Zylinders.

Im 1. und 2. Fall gilt: Setzt man die Variablen u bzw. u_1, \dots, u_k n -mal auf exakt die gleichen Werte, so ergibt sich auch n -mal exakt der gleiche x -Wert.
3. Fall: Multikausale Abhängigkeit: $x = f(u_1, u_2, \dots, u_k, v_1, v_2, \dots)$,
wobei u_1, \dots, u_k bei Messungen von x genau unter Kontrolle sind, d.h. wiederholt auf exakt die gleichen Werte gesetzt werden können, v_1, v_2, \dots dagegen nicht oder nicht so exakt.
Beispiele: $x =$ systolischer Blutdruck, $u_1 =$ Person, $u_2 =$ Tageszeit, $u_3 =$ Körperlage (sitzend, liegend, pedaltretend, ...), $v_1 =$ seelische Verfassung der Person, $v_2 =$ körperliche Verfassung der Person, $v_3 =$ Wetter, ...
 $x =$ Augenzahl beim Würfeln, $u_1 =$ Würfelexemplar, $u_2 =$ Würfelbecher, $u_3 =$ Würfelunterlage, $u_4 =$ Person des Würflers, $v_1 =$ Schüttelbewegung beim Würfeln.

Bezeichnung: Eine Variable x , deren Wert von Einflussgrößen abhängig ist, die nicht alle, oder nicht alle vollständig unter der Kontrolle des Beobachters stehen, heißt eine **Zufallsvariable**.

Eine **Messmethode** für die Zufallsvariable x besteht in der genauen Festlegung dessen, wie viele und welche Einflussgrößen u_1, \dots, u_k bei Messungen von x exakt konstant gehalten werden sollen und innerhalb welcher Bandbreiten sonstige Einflussgrößen v_1, v_2, \dots unkontrolliert variieren.

Die Messmethode ist also definiert durch die konkrete Festlegung der Funktion

$$x = f(u_1, u_2, \dots, u_k, v_1, v_2, \dots)$$

und ihres Definitionsbereichs. Dadurch wird aber auch x selbst erst als spezifische Zufallsvariable festgelegt.

Merke: Messmethode und Zufallsvariable legen sich gegenseitig fest/ sind untrennbar.

Bezeichnung: Ein **Experiment** oder **Versuchsaufbau** zur Messung von x beruht auf einer wohlbestimmten Messmethode und legt darüber hinaus noch fest, auf **welchen Werten** die exakt kontrollierbaren u_1, \dots, u_k jeweils konstant gehalten werden sollen, wenn x gemessen wird.

Ein Experiment ist also ein detailliert ausgearbeiteter theoretischer Plan zur Messung von x , der dem Messenden alle gestalterischen Entscheidungen abnimmt.

Wir illustrieren die Begriffe “Messmethode“ und “Experiment“ sowie die Untrennbarkeit von Messmethode und Zufallsvariablen am Beispiel der Pulsmessung:

Beispiel 1: Eine **Messmethode** besteht z.B. darin, das zu messende Individuum ($= u_1$) vorzuschreiben sowie eine bestimmte körperliche ($= u_2$) Verfassung. Die seelische Verfassung ($= v_1$) ist nicht unter Kontrolle.

Zwei verschiedene **Experimente** A und B zu dieser Messmethode entstehen nun dadurch, dass A und B zwei verschiedene Individuen messen sollen (den übergewichtigen Herrn X bzw. die magersüchtige Frau Y), und/oder dass A und B dieselbe vorgeschriebene Person einerseits unter körperlicher Belastung messen (Laufband, Heimtrainer, ...), andererseits in Ruhelage.

Beispiel 2: Eine andere **Messmethode** besteht darin, die körperliche Verfassung ($= u_1$) vorzuschreiben, nicht aber die zu messende Person ($= v_1$). Präzise festgelegt ist diese Methode aber erst, wenn geklärt ist, ob die zu messende Person a) der gesamten Breite der Bevölkerung entstammen darf, oder b) einer bestimmten Altersklasse zugehören soll und/oder c) einem Personenkreis mit charakteristischen Lebensumständen (Raucher, Jogger, Schichtarbeiter, ...), d.h. zur Messmethode gehört jetzt die Angabe, innerhalb welcher Bandbreite von Werten die Variable v_1 frei variieren darf.

Zwei Experimente A und B zu dieser Messmethode können sich nun wieder darin unterscheiden, welche körperliche Verfassung vorgeschrieben wird (A misst Personen unter Narkose, B Personen nach 20 Kniebeugen), oder, bei gleicher körperlicher Verfassung, welcher Altersklasse (A misst bei Säuglingen, B bei Erwachsenen), welcher Personenkreis (A misst Leistungssportler, B misst Rekonvaleszenten).

Die verschiedenen Messmethoden messen zwangsläufig auch verschiedene Zufallsvariable x : Im 1. Beispiel ist x = Pulsfrequenz eines bestimmten Individuums in bestimmter körperlicher Verfassung. Im 2. Beispiel ist, je nach Ausgestaltung der Messmethode

x = Pulsfrequenz von Personen in bestimmter körperlicher Verfassung,

x = Pulsfrequenz von Personen bestimmten Alters in bestimmter körperlicher Verfassung,

x = Pulsfrequenz von Personen unter bestimmten Lebensumständen in bestimmter körperlicher Verfassung,

x = Pulsfrequenz von Personen bestimmten Alters unter bestimmten Lebensumständen und in bestimmter körperlicher Verfassung.

Merke: Die Ergebnisse von Messungen mit verschiedenen Messmethoden stehen grundsätzlich konkurrenzlos nebeneinander. Insbesondere können sie sich wechselseitig weder bestätigen noch widerlegen. Liegt dieser Sachverhalt vor, so sagt man kurz, die Ergebnisse seien **nicht vergleichbar**.

7.2 Messreihen und ihre statistischen Daten

Bezeichnung: Eine **Messreihe** (auch **empirische Messreihe**) zur Zufallsvariablen x besteht aus n konkret durchgeführten Messungen **im Rahmen desselben Experiments**, und liefert als Ergebnis n konkrete Messwerte x_1, \dots, x_n .

Da im Rahmen des Experiments zwar die Einflussgrößen u_1, \dots, u_k bei allen n Messungen exakt auf demselben konstanten Wert gehalten werden, nicht aber v_1, v_2, \dots , sind die n Messergebnisse x_1, \dots, x_n einer Messreihe im Wert nicht exakt gleich, sondern unterscheiden sich mehr oder weniger, wobei gewisse Messwerte evtl. häufiger, andere seltener auftreten. Dieses Phänomen bedarf einer **mathematischen Nachbehandlung**, bevor die Messergebnisse fachwissenschaftlich ausgewertet und interpretiert werden können. Im Folgenden geht es um Theorie und Praxis dieser Nachbehandlung.

Aus der Fülle der einzelnen Messwerte einer Messreihe bestimmt man zunächst drei Zahlen, die als **Standardkenndaten** oder **statistische Daten der Messreihe** bezeichnet werden:

n : die **Anzahl der Messungen** n in einer Messreihe ist ein wichtiges Maß zur Beurteilung der Sicherheit des Resultats, zeigt den Messaufwand an und wird für alle weiteren statistischen Auswertungen benötigt.

\bar{x} : Das arithmetische Mittel der n einzelnen Messergebnisse x_1, \dots, x_n einer Messreihe

$$\bar{x} = \frac{x_1 + x_2 + \dots + x_n}{n} = \frac{\sum x_i}{n} \text{ heißt der } \mathbf{Mittelwert} \text{ der Messreihe.}$$

Wenn man als Gesamtergebnis der Messreihe eine Zahl erwartet, so ist dieser Durchschnittswert die am besten gesicherte Angabe. Mit welcher Wahrscheinlichkeit dieser

Durchschnittswert aber auch selber als ein Messwert auftritt, oder wie nahe alle konkreten Messungen bei diesem Durchschnittswert liegen, ist durch diese Angabe nicht erkennbar. Zum Beispiel kann der Mittelwert $\bar{x} = 10$ von den vier Messergebnissen 9.8 / 9.95 / 10.05 / 10.1 herrühren oder von den vier Messergebnissen 5 / 8 / 12 / 15.

s: Die **empirische Streuung**¹ oder **Näherungsstandardabweichung** einer Messreihe

$$s = \sqrt{\frac{(x_1 - \bar{x})^2 + (x_2 - \bar{x})^2 + \dots + (x_n - \bar{x})^2}{n - 1}}$$

ist die aufschlussreichste Größe² zur Bewertung der **Qualität der Messmethode**.

Sie misst die durchschnittliche Abweichung des einzelnen Messwertes x_i vom Mittelwert \bar{x} . Die empirische Streuung s fällt umso kleiner aus, je mehr Einflussgrößen konstant gehalten werden und je enger der Rahmen ist, in dem die übrigen Einflussgrößen variieren. Sie reagiert empfindlich auf Änderungen dieser Festlegungen und ist daher ein wichtiger Indikator für Methodenunterschiede bei verschiedenen Messreihen.

Wegen $\sum_{i=1}^n x_i = n\bar{x}$ ist $\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2 = \sum_{i=1}^n x_i^2 - 2\sum_{i=1}^n x_i\bar{x} + \sum_{i=1}^n \bar{x}^2 = \sum_{i=1}^n x_i^2 - 2n\bar{x} \cdot \bar{x} + n\bar{x}^2 = \sum_{i=1}^n x_i^2 - n\bar{x}^2$, und man erhält zur Berechnung von s die wesentlich bequemere Formel

$$s = \sqrt{\frac{\sum x_i^2 - n\bar{x}^2}{n - 1}}$$

1. Grenzwertsatz:

*Verlängert man eine Messreihe im Rahmen eines Experiments um immer mehr Messungen, d.h. lässt man n gegen Unendlich streben, und berechnet man dabei den Mittelwert \bar{x} und die empirische Streuung s mit wachsendem n immer wieder neu, so strebt die Folge der Mittelwerte ebenso wie die Folge der empirischen Streuungen je **gegen einen Grenzwert**:*

$$\hat{x} = \lim_{n \rightarrow \infty} \bar{x} = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{x_1 + x_2 + \dots + x_n}{n} \text{ heißt der } \mathbf{Erwartungswert}$$

$$\sigma = \lim_{n \rightarrow \infty} s = \lim_{n \rightarrow \infty} \sqrt{\frac{(x_1 - \bar{x})^2 + (x_2 - \bar{x})^2 + \dots + (x_n - \bar{x})^2}{n - 1}} \text{ heißt } \mathbf{Standardabweichung,}$$

Streuung oder mittlerer Fehler.

$$\sigma^2 = \lim_{n \rightarrow \infty} s^2 \text{ heißt die } \mathbf{Varianz.}$$

Merke: Der **Erwartungswert** \hat{x} hängt nicht von den konkret durchgeführten Messreihen ab, sondern er ist eine **spezifische Konstante des Experiments**. Die **Streuung** σ hängt nicht von den konkret durchgeführten Messreihen ab, nicht einmal davon, auf welchen Werten die Einflussgrößen u_1, \dots, u_k konstant gehalten werden (also nicht vom Experiment), sondern sie ist eine **spezifische Konstante der Messmethode**.

¹Vorsicht! Im Zähler stehen große Zahlen x_i, \bar{x} mit kleiner Differenz. Mit allen bekannten Nachkommastellen arbeiten, sonst wird der absolute Fehler $|\Delta s|$ zu groß!

²vgl. das Konzept des "mittleren Fehlers" bei der Linearen Regression, siehe 4.7, S.61, Formel (4.5)

Bezeichnung: Eine ideale Messreihe zu einem Experiment wäre eine Messreihe mit unendlich vielen Messungen. Sie ist die begriffliche Abstraktion einer Messreihe mit mehreren tausend Messungen.

Regel 60 (Statistische Daten der idealen Messreihe):

R 60

Die ideale Messreihe zu einem Experiment besitzt die statistischen Daten

$$n = \infty, \bar{x} = \hat{x}, s = \sigma.$$

7.3 Dichtefunktionen und Verteilungsfunktionen

Hat man zu einem Experiment eine längere Messreihe (vorzugsweise $n \geq 50$), so kann man über die Bestimmung der drei statistischen Daten n , \bar{x} und s hinaus eine **feinere (auch graphische) Auswertung** der Messergebnisse x_1, \dots, x_n vornehmen wie folgt:

1. Schritt: **Strichliste:**

Ist x_{min} der kleinste, x_{max} der größte gemessene Wert, so teilt man die x -Achse im Bereich $x_{min} \leq x \leq x_{max}$ in eine gewisse Anzahl - etwa m -**gleichlange** Intervalle I_1, \dots, I_m , der Länge Δx und zählt für jedes dieser Intervalle die **Häufigkeit** H , mit der Messwerte dieser Messreihe in dem Intervall liegen. Messwerte auf der Intervallgrenze werden dabei zu je $\frac{1}{2}$ beiden Nachbarintervallen zugerechnet. Das Auszählungsergebnis nennt man eine Strichliste.

Bezeichnet ξ_j den Mittelpunkt des Intervalls I_j ($j = 1, \dots, m$), so erhält man folgende Daten:

Intervall	$\xi_1 \pm \frac{\Delta x}{2}$...	$\xi_j \pm \frac{\Delta x}{2}$...	$\xi_m \pm \frac{\Delta x}{2}$
Häufigkeit H	H_1	...	H_j	...	H_m

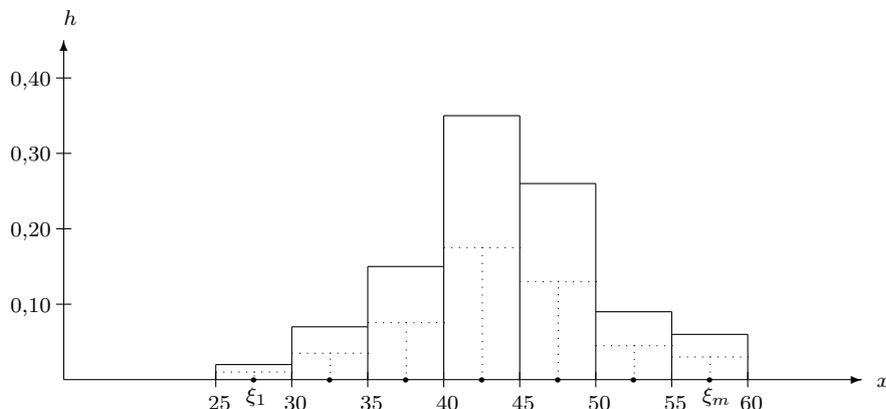
Beispiel: Ein Prüfer lässt n Personen dieselbe Klausur schreiben. x = Klausurnote. Die hier beschriebene Art der Auswertung ist unter der Bezeichnung "Notenspiegel" bekannt. Der Notenspiegel hängt von der Anzahl n der Klausurteilnehmer und der Feinheit der benutzten Notenskala (5 Noten oder 15 Noten) ab.

2. Schritt: **Säulendiagramm:**

Eine **1. Standardisierung** erhält man, wenn man die Anzahl der Messungen, die in ein bestimmtes Intervall fallen, jeweils durch die Gesamtzahl n aller Messungen teilt. Dies ist der Übergang von der Häufigkeit H der Messwerte in einem Intervall zur **relativen Häufigkeit** h , einer Zahl zwischen 0 und 1, wobei $1 = 100\% \hat{=} n$. Zugehörige Daten:

Intervall	$\xi_1 \pm \frac{\Delta x}{2}$...	$\xi_j \pm \frac{\Delta x}{2}$...	$\xi_m \pm \frac{\Delta x}{2}$
relative Häufigkeit h	h_1	...	h_j	...	h_m

Diese Daten werden üblicherweise graphisch repräsentiert in Form eines **Säulendiagramms**. Charakteristisch ist dabei, dass sich die Höhen aller Säulen zu 1 (= 100%) aufsummieren.



Die Optik der Säulengraphik ist unabhängig von der Anzahl der Messungen n , aber noch stark abhängig von der Säulenbreite Δx :

Liegen 35% der Messergebnisse im Intervall $40 \leq x \leq 45$, so können jeweils nur rund halb so viele Messergebnisse in jedem einzelnen der zwei Intervalle $40 \leq x \leq 42,5$ bzw. $42,5 \leq x \leq 45$ liegen. Bei Halbierung der Intervallbreite (und damit bei Verdoppelung der Anzahl m der Säulen) halbiert sich also auch ungefähr die Höhe der einzelnen Säulen (siehe gestrichelte Linien).

Und im Beispiel der Klausurergebnisse gilt: Geht man von der Einteilung in 5 Noten über zu der dreifach so feinen Einteilung in 15 Noten, so dritteln sich in etwa alle relativen Häufigkeiten, also auch alle Säulenhöhen.

Insgesamt erkennt man: Vergrößert oder verkleinert man die Säulenbreite Δx um einen gewissen Faktor, so vergrößert bzw. verkleinert sich gleichzeitig die relative Häufigkeit h_j um denselben Faktor, das heißt aber, dass der Quotient aus beiden dabei unverändert, also konstant bleibt.

3. Schritt: **Dichtefunktion:**

Wenn der Quotient zweier variabler Größen immer konstant bleibt, sind sie proportional.³ Im vorliegenden Fall bedeutet das:

Die relative Häufigkeit h_j und damit die Höhe der j -ten Säule ist für kleine Δx ungefähr proportional zur Intervallbreite Δx , mit einem Proportionalitätsfaktor p_j , der für $j = 1, \dots, m$ verschieden sein kann.

$$h_j \approx p_j \cdot \Delta x \quad \text{für kleine } \Delta x. \quad (7.1)$$

Da Δx für alle Intervalle gleich groß ist, ist die relative Häufigkeit h_j wesentlich bestimmt durch die Größe des Faktors p_j . Je dichter die Messergebnisse sich im Intervall I_j drängen, umso größer ist der Faktor p_j . Also ist

$$p_j \approx \frac{h_j}{\Delta x} \quad (7.2)$$

³siehe 2.2.1, S.16

ein Maß für diese Dichte, welches **nicht** mehr von der Intervallbreite abhängig ist, sondern nur noch von der Lage des Intervalls auf der x -Achse. Man ordnet den Faktor p_j daher nicht mehr dem Intervall als solchem zu, sondern dem Intervallmittelpunkt ξ_j . Das ergibt folgende Daten:

Intervallmittelpunkt ξ	ξ_1	\dots	ξ_j	\dots	ξ_m
Dichtefaktor p	p_1	\dots	p_j	\dots	p_m

Verändert man die Anzahl m der Intervalle, in die man den Bereich $x_{min} \leq x \leq x_{max}$ einteilt (z.B. von 7 auf 9, 11, 13, ...), so bekommt man zur selben Messreihe eindeutig andere Intervallmittelpunkte ξ_j und dazu eindeutig andere p_j . Man betrachtet deshalb jede so gewonnene Datensammlung (ξ_j, p_j) , ($j = 1, \dots, m$) als eine von vielen möglichen (und miteinander verträglichen) Wertetabellen für eine gewisse, zur Messreihe gehörige Funktion der reellen Variablen x . Damit hat man die **2. Standardisierung** erreicht:

Bezeichnung: Die zur Wertetabelle (ξ_j, p_j) , ($j = 1, \dots, m$) gehörige Funktion $z = p(x)$ heißt die **Dichtefunktion zur Messreihe** x_1, \dots, x_n . Sie wird durch die Vereinbarung

$$p(x) = 0 \text{ für alle } x\text{-Werte außerhalb von } x_{min} \leq x \leq x_{max}$$

zu einer auf ganz \mathbb{R} definierten Funktion erweitert.

Diese Funktion gibt entsprechende Information wie die relative Häufigkeit h , aber nicht nur unabhängig von der Anzahl n der Messungen, sondern zusätzlich auch **unabhängig von der Säulenbreite** Δx . Den Graph zur Wertetabelle von $z = p(x)$ skizziert man, wie bei Funktionen üblich, nicht als Säulendiagramm, sondern, indem man die Punkte $(\xi_j | p_j)$, ($j = 1, \dots, m$) durch eine bogenförmige Linie verbindet. Wegen (7.2) gilt:

Graph der Dichtefunktion:

Der Graph der Dichtefunktion $z = p(x)$ zu einer Messreihe ähnelt (bis auf den Proportionalitätsfaktor $\frac{1}{\Delta x}$, der einer Maßstabsänderung auf der senkrechten Achse entspricht), dem Höhenverlauf des Säulendiagramms.

Bezeichnung: Sei $\mathbf{F}(\mathbf{x})$ die relative Häufigkeit, mit der die Messwerte einer Messreihe einen Zahlwert $\leq x$ haben. $y = F(x)$ heißt die **Verteilungsfunktion** zur Messreihe. Sie ist auf ganz \mathbb{R} definiert.

Graph der Verteilungsfunktion:

Der Graph der Verteilungsfunktion $y = F(x)$ ist monoton wachsend, und es gilt

$$F(x) = 0 \text{ für alle } x \leq x_{min}, \quad F(x) = 1 \text{ für alle } x \geq x_{max}.$$

Ist nun $x_{j-1} \leq x \leq x_j$ irgendein **kleines** Intervall I_j , so gilt

$$\begin{aligned} F(x_j) - F(x_{j-1}) &= \text{relative Häufigkeit, mit der Messwerte im Intervall } I_j \text{ liegen} \\ &= h_j \underset{(7.1)}{\approx} p_j \cdot (x_i - x_{i-1}) \end{aligned}$$

kurz:

$$\Delta F \approx p(x) \cdot \Delta x.$$

Mit *Regel 11*⁴ folgt hieraus die grundlegende

⁴siehe 4.3.2, S.49

R 61 Regel 61 (Beziehung zwischen Dichte- und Verteilungsfunktion):

Die Dichtefunktion $z = p(x)$ zu einer Messreihe ist die Ableitung der Verteilungsfunktion $y = F(x)$ zu dieser Messreihe.

Umgekehrt ist die Verteilungsfunktion eine Stammfunktion der Dichtefunktion, genauer: Sie ist die summatorische Funktion⁵ zu $z = p(x)$ mit dem Anfangswert $F(-\infty) = 0$.

(Dabei stehe $x_0 = -\infty$ für eine Zahl, die kleiner ist als der kleinstmögliche Messwert der Zufallsvariablen x .)

$$\text{Als Formel: } F(x) = \int_{-\infty}^x p(t) dt.$$

Mit dem Hauptsatz der Differential- und Integralrechnung⁶, Teil b) folgt

R 62 Regel 62 (Relative Häufigkeit als bestimmtes Integral):

Die relative Häufigkeit, mit der die Messungen einer Messreihe x_1, \dots, x_n einen Zahlwert im Bereich $a \leq x \leq b$ haben ist gleich

$$F(b) - F(a) = \int_a^b p(x) dx.$$

Insbesondere gilt

$$\int_{-\infty}^{\infty} p(x) dx = 1.$$

Die graphische Ausdeutung dessen lautet:

R 63 Regel 63 (Relative Häufigkeit als Fläche):

Die relative Häufigkeit, mit der Messwerte einer Messreihe einen Zahlwert im Bereich $a \leq x \leq b$ haben, ist gleich der Fläche, die der Graph der Dichtefunktion $z = p(x)$ zur Messreihe im Bereich $a \leq x \leq b$ mit der x -Achse einschließt.

Die Fläche, die der Graph der Dichtefunktion $z = p(x)$ mit der x -Achse insgesamt einschließt, ist gleich 1.

Von zentraler Bedeutung ist nun der

2. Grenzwertsatz.

Verlängert man eine Messreihe im Rahmen eines Experiments um immer mehr Messungen, d.h. lässt man n gegen Unendlich streben, und berechnet man dabei die Dichtefunktion $z = p(x)$ und die Verteilungsfunktion $y = F(x)$ für wachsendes n immer wieder neu, so ändern sich beide für große n immer weniger, d.h. sie streben beide gegen Grenzfunktionen.

Bezeichnung: Diese Grenzfunktionen werden als die Dichtefunktion $z=p(x)$ bzw. die Verteilungsfunktion $y=F(x)$ zum Experiment oder zur idealen Messreihe bezeichnet. Sie sind nicht mehr von der konkreten Messreihe abhängig, sondern nur noch vom Experiment.

Die für die Dichtefunktionen und Verteilungsfunktionen zu empirischen Messreihen geltenden Eigenschaften und Zusammenhänge übertragen sich beim Prozess $n \rightarrow \infty$ auch auf die Grenzfunktionen, d.h.:

⁵siehe 6.3, S.137

⁶siehe 6.4, S.127

- Die Verteilungsfunktion $y = F(x)$ zu einem Experiment ist stets monoton wachsend, und es gilt

$$F(x) = 0 \text{ für alle } x \leq x_{\min}, \quad F(x) = 1 \text{ für alle } x \geq x_{\max}.$$

- Die Dichtefunktion $z = p(x)$ zu einem Experiment ist die Ableitung der Verteilungsfunktion $y = F(x)$ zu diesem Experiment. Umgekehrt ist die Verteilungsfunktion $y = F(x)$ zum Experiment eine Stammfunktion der Dichtefunktion $z = p(x)$ zu diesem Experiment, genauer: Sie ist die summatorische Funktion⁷ zu $z = p(x)$ mit dem Anfangswert $F(-\infty) = 0$. (Dabei stehe $x_0 = -\infty$ für eine Zahl, die kleiner ist als der kleinstmögliche Messwert der Zufallsvariablen x .)

Als Formel:
$$F(x) = \int_{-\infty}^x p(t) dt.$$

- Die Fläche, die der Graph der Dichtefunktion $z = p(x)$ zu einem Experiment mit der x -Achse insgesamt einschließt, ist stets = 1.

Die Unabhängigkeit der Dichte- und der Verteilungsfunktion eines Experiments von der Empirie gestattet es nun, aus dem an die empirische Messreihe gebundenen Begriff der relativen Häufigkeit den von der Empirie unabhängigen Begriff der Wahrscheinlichkeit zu entwickeln und Wahrscheinlichkeiten auch **zu berechnen**:

Bezeichnung: Die relative Häufigkeit, mit der Messungen der idealen Messreihe (n mindestens vierstellig) zu einem Experiment Messwerte im Bereich $a \leq x \leq b$ liefern, heißt die **Wahrscheinlichkeit** dafür, dass eine Messung der Zufallsvariablen x im Rahmen dieses Experiments einen Messwert im Bereich $a \leq x \leq b$ liefert.

Schreibweise:
$$P(a \leq x \leq b) \quad \text{oder} \quad P_{a \leq x \leq b}.$$

Für $P(-\infty \leq x \leq b)$ schreibt man abkürzend $P(x \leq b)$, für $P(a \leq x \leq \infty)$ schreibt man kürzer auch $P(a \leq x)$.

Regel 64 (Berechnung von Wahrscheinlichkeiten):

R 64

Ist $z = p(x)$ die Dichtefunktion und $y = F(x)$ die Verteilungsfunktion zu einem Experiment und sind $a, b \in \mathbb{R}$ mit $a \leq b$, so läßt sich die Wahrscheinlichkeit $P(a \leq x \leq b)$ wahlweise wie folgt berechnen:

$$P(a \leq x \leq b) = \int_a^b p(x) dx \quad \text{oder auch} \quad P(a \leq x \leq b) = F(b) - F(a).$$

Graphisch ausgedrückt: Die Wahrscheinlichkeit $P(a \leq x \leq b)$ ist die Fläche, die der Graph der Dichtefunktion zum Experiment im Bereich $a \leq x \leq b$ mit der x -Achse einschließt.

⁷siehe 6.3, S.137

7.4 Die drei wichtigsten Typen von Zufallsvariablen

Eine Messreihe zu einer Variablen $x = f(u_1, \dots, u_k)$, bei der im Rahmen eines Experiments alle u_1, \dots, u_k auf vorgeschriebenen Werten konstant gehalten werden und gar keine variablen Einflussgrößen v_1, v_2, \dots im Spiel sind (wo also x gar **keine Zufallsvariable** ist), wird zwangsläufig n identische Messwerte $x_1 = x_2 = \dots = x_n = c$ (const.) liefern.

Diese Messreihe hat die statistischen Daten $n, \bar{x} = c, s = 0$ und die Verteilungsfunktion

$$y = F(x) = \begin{cases} 0 & -\infty < x < c, \\ 1 & c \leq x < \infty. \end{cases}$$

Für die Dichtefunktion $z = p(x)$ als Ableitung von $y = F(x)$ erhalten wir $p(x) = F'(x) = 0$ für alle $x \neq c$ und $p(c)$ nicht definiert bzw. " $= \infty$ ", weil F an der Stelle c einen senkrechten Sprung nach oben hat. Und da diese Ergebnisse für wachsende Werte von n stets gleich bleiben, hat die ideale Messreihe zu diesem Experiment die statistischen Daten $n = \infty, \hat{x} = c, \sigma = 0$ und die Verteilungsfunktion und Dichtefunktion sind wie oben.

Spielen hingegen noch variable Einflussgrößen v_1, v_2, \dots bei der Messreihe zum Experiment mit, d.h. ist $x = f(u_1, \dots, u_k, v_1, v_2, \dots)$ wirklich **eine Zufallsvariable**, so schwanken die Messwerte x_1, \dots, x_n um den Wert c herum, auch der Mittelwert \bar{x} schwankt etwas (wenn auch weniger als die Einzelmessungen) um c herum, und man erhält eine empirische Streuung $s > 0$. Die Dichtefunktion und die Verteilungsfunktion nehmen nicht nur, wie oben, zwei Werte an (0 und ∞ die Dichtefunktion, 0 und 1 die Verteilungsfunktion), sie ändern sich auch zunächst mit wachsendem n , ehe sie gegen ihre Grenzfunktionen streben, welche ebenfalls mehr als zwei Werte annehmen. Nur der Erwartungswert ist nach wie vor $\hat{x} = \lim_{n \rightarrow \infty} \bar{x} = c$.

Merke: Bei einem Experiment zur Messung einer Zufallsvariablen

$$x = f(u_1, \dots, u_k, v_1, v_2, \dots)$$

sind die konstant gehaltenen u_1, \dots, u_k kausal verantwortlich für die Größe des Erwartungswertes \hat{x} . (Dieser heißt auch das Ergebnis des Experiments.)

Die variabel gehaltenen v_1, v_2, \dots hingegen sind kausal verantwortlich für die Streuung σ sowie für den Kurvenverlauf der Dichtefunktion $y = p(x)$ und damit auch der Verteilungsfunktion $y = F(x)$ zum Experiment.

In der Empirie treten bei der Messung von Zufallsvariablen x vor allem **drei wichtige Typen** von Dichtefunktionen mit zugehörigen Verteilungsfunktionen auf, und zwar **je nachdem, von welchem Datentyp** die Messdaten x_1, \dots, x_n der Messreihe sind, d.h. in welchem Wertebereich sie variieren:

- $x_i \in \mathbb{R}$ (mit Nachkommastellen) : Bei Instrumentenmessungen, beim Ablesen von Messskalen \rightsquigarrow **Normalverteilung**,
- $x_i \in \mathbb{Z}$ (ganzzahlig): Hier unterscheidet man noch
 - a) Auszählung von k Partikeln u.ä. in einem räumlichen oder zeitlichen Kontinuum \rightsquigarrow **Poissonverteilung**,
 - b) Auszählung von k positiven Befunden innerhalb einer endlichen Menge von n Personen oder Ereignissen \rightsquigarrow **Binomialverteilung**.
Dabei können seltene Befunde auch unter a) behandelt werden.

Kapitel 8

Normalverteilung

8.1 Gauß-Glocke und Gauß'sche Φ -Funktion

Die Zufallsvariable $x = f(u_1, \dots, u_k, v_1, v_2, \dots)$ habe als Wertebereich die Menge aller reellen Zahlen \mathbb{R} oder aber die Menge aller reellen Zahlen, die im Bereich $a \leq x \leq b$ liegen. Sorgt man bei der Durchführung eines Experiments dafür, dass die Einflussgrößen v_1, v_2, \dots , die nicht auf vorgeschriebene konstante Werte gesetzt werden, **die ganze Fülle ihrer** im Rahmen der gewählten Messmethode **zulässigen Werte annehmen**, d.h. einen repräsentativen Querschnitt ihres jeweils zugelassenen Wertebereichs, so ergibt sich sehr oft folgender Effekt:

Der Graph der Dichtefunktion des Experiments hat glockenförmige Gestalt.

Der Einfluss der nicht konstant gehaltenen Größen ist also standardisiert worden. Er ist hierdurch gleichsam neutralisiert, nicht weiter interpretierbar, als erklärender Kausalfaktor für die Messergebnisse weitestgehend ausgeschaltet. Und dieser Effekt stellt sich unabhängig davon ein, auf welchen Werten das Experiment die kontrollierten Einflussgrößen u_1, \dots, u_k konstant hält, er ist also spezifisch für die Messmethode und das heißt für die Zufallsvariable x selbst.¹

Bezeichnung: *Ergibt sich für eine Zufallsvariable x als Dichtefunktion zur idealen Messreihe eine Funktion $y = p(x)$ mit symmetrischem, glockenförmigem Graphen, so nennt man die Zufallsvariable **normalverteilt** oder **zufallsverteilt**.*

Der Erwartungswert \hat{x} wird in diesem Fall allgemein mit μ bezeichnet.

Regel 65 (Berechnungsformel der Dichtefunktion bei Normalverteilung):

R 65

Ist eine Zufallsvariable x normalverteilt, so hängt die Dichtefunktion $y = p(x)$ zur idealen Messreihe/zum Experiment nur vom Erwartungswert μ des Experiments und der Streuung σ der Messmethode ab, und zwar nach der Formel

$$p(x) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \cdot \exp\left(-0,5 \cdot \left(\frac{x - \mu}{\sigma}\right)^2\right)$$

Diese Dichtefunktion heißt die zu μ und σ gehörige Glockenfunktion.

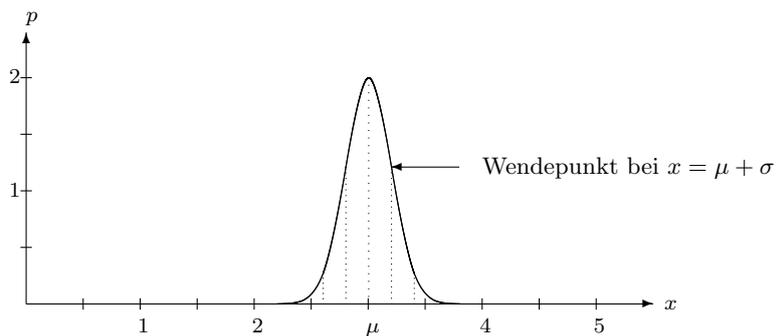
¹Zum untrennbaren Zusammenhang zwischen Messmethode und Zufallsvariable siehe 7.1, S.150

Ihr Graph gleicht der Silhouette einer auf der x -Achse aufsitzenden symmetrischen Glocke. Die senkrechte Symmetrieachse verläuft bei $x = \mu$ durch den höchsten Punkt der Glocke.

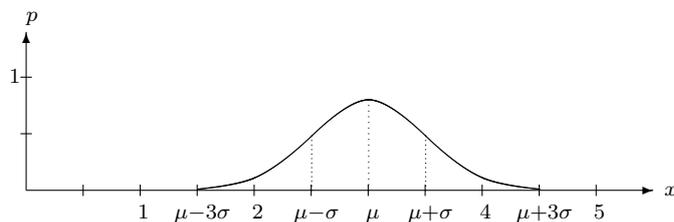
Bei $x = \mu - \sigma$ und $x = \mu + \sigma$ hat der Graph Wendepunkte von konvex zu konkav bzw. umgekehrt.

Da die Exponentialfunktion nur positive Werte annimmt, gilt strenggenommen $p(x) > 0$ für alle $x \in \mathbb{R}$, aber für $x < \mu - 3\sigma$ und für $x > \mu + 3\sigma$ ist $p(x)$ schon recht nahe Null. Deshalb kann man, vergrößert gesprochen, sagen, dass die Breite der Glocke an der Basis etwas mehr als 6σ beträgt.

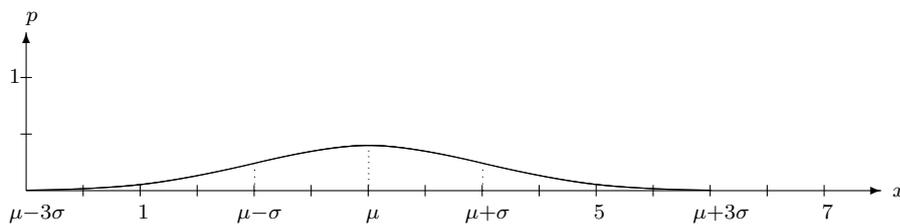
Da die Gesamtfläche zwischen der Glockenkurve und der x -Achse stets $=1$ ist,² gilt: Je kleiner die Streuung σ , umso schmaler und folglich umso höher die Glocke, je größer die Streuung σ , umso breiter und flacher die Glocke:



Glockenfunktion zu $\mu = 3$ und $\sigma = 0.2$



Glockenfunktion zu $\mu = 3$ und $\sigma = 0.5$



Glockenfunktion zu $\mu = 3$ und $\sigma = 1$

Da die Gesamtfläche unter dem Graphen $=1$ ist, ist die Fläche unter dem Graphen links der Symmetrieachse $=\frac{1}{2}$. Somit kennen wir von der zugehörigen Verteilungsfunktion $y = F(x)$ schon den Anfangswert $F(\mu) = \frac{1}{2}$, denn $F(\mu) = \int_{-\infty}^{\mu} p(t) dt$ = die Fläche unter der Glocke linksseits von μ .

²siehe 7.3, S.133

Bezeichnung: Die zu einer Glockenfunktion gehörige Stammfunktion $y = F(x)$ mit dem Anfangswert $F(\mu) = \frac{1}{2}$ heißt Verteilungsfunktion zur Normalverteilung mit dem Erwartungswert μ und der Streuung σ , kurz:

Verteilungsfunktion zur $N(\mu; \sigma)$ -Verteilung.

Entsprechend heißt die Glockenfunktion auch die Dichtefunktion zur $N(\mu; \sigma)$ -Verteilung.

Für die Verteilungsfunktion zu einer Glockenfunktion gibt es außer der Formel

$$F(x) = \int_{-\infty}^x p(t) dt \quad \text{für alle } x \in \mathbb{R}$$

keine andere Berechnungsformel. Da aber der Anfangswert $F(\mu) = \frac{1}{2}$ bekannt ist, kann für sie durch numerische Integration³ eine beliebig genaue Wertetabelle berechnet werden.

Die einfachste Berechnungsformel für die Glockenfunktion ergibt sich im Spezialfall $\mu = 0$ und $\sigma = 1$:

Bezeichnung: Die Dichtefunktion zur $N(0; 1)$ -Verteilung ist

$$z = \varphi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \cdot \exp\left(-\frac{x^2}{2}\right) \quad (8.1)$$

Sie wird traditionell als die **Gauß-Glocke**, auch **Gaußsche Fehlerfunktion** oder **Gaußsche Dichtefunktion** bezeichnet.

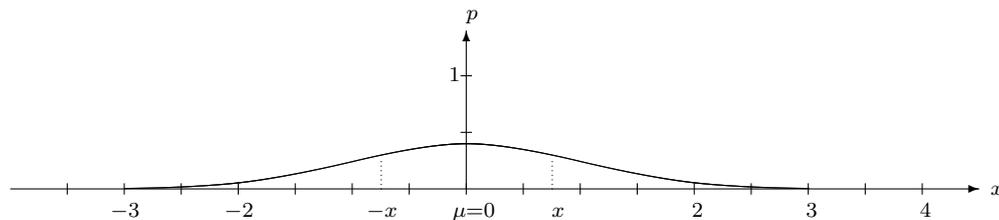
Die zugehörige Verteilungsfunktion zur $N(0; 1)$ -Verteilung

$$y = \Phi(x) = \int_{-\infty}^x \varphi(t) dt = \int_{-\infty}^x \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \cdot \exp\left(-\frac{t^2}{2}\right) dt \quad (8.2)$$

heißt **Gaußsche-Normalverteilung** oder **Gaußsche Φ -Funktion**.

Sie ist sehr genau tabelliert worden (sog. **Φ -Tabelle**⁴).

Bei der Φ -Tabelle macht man sich zunutze, dass die Gauß-Glocke wegen $\mu = 0$ symmetrisch zur senkrechten Achse liegt:



Die Gauß-Glocke ($\mu = 0$, $\sigma = 1$)

Die Fläche unter der Gauß-Glocke im Bereich zwischen $-\infty$ und $-x$ ist genauso groß wie die zwischen x und ∞ . Also gilt

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{-x} \varphi(t) dt &= \int_x^{\infty} \varphi(t) dt \\ \Phi(-x) - \Phi(-\infty) &= \Phi(\infty) - \Phi(x) \\ \Phi(-x) - 0 &= 1 - \Phi(x) \end{aligned}$$

³siehe 6.5.1, S.143

⁴siehe Tabellen zur Statistik, S.224

Symmetrieregeln der Φ -Funktion:

$$\Phi(-x) = 1 - \Phi(x) \quad \text{für alle } x \in \mathbb{R}. \quad (8.3)$$

Wegen dieser Symmetrieregeln sind in der Φ -Tabelle nur die Funktionswerte für positive x ausgedrückt.

Der eigentliche Nutzen der Φ -Tabelle besteht darin, dass sie auch zur Berechnung von Werten aller anderen Verteilungsfunktionen im Falle beliebiger μ und σ benutzt werden kann, denn es besteht folgender

Zusammenhang zwischen der Normalverteilung $y = F(x)$ zur $N(\mu; \sigma)$ -Verteilung und der Gaußschen Normalverteilung $y = \Phi(x)$:

$$F(x) = \Phi\left(\frac{x - \mu}{\sigma}\right).$$

Beweis : Die Normalverteilung $y = F(x)$ zur $N(\mu; \sigma)$ -Verteilung ist nach *Regel 65*⁵ eine Stammfunktion zur Glockenfunktion

$$p(x) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \cdot \exp\left(-0,5 \cdot \left(\frac{x - \mu}{\sigma}\right)^2\right) \quad (8.4)$$

und hat für $x = \mu$ den Wert $F(\mu) = \frac{1}{2}$. Wenn wir zeigen, dass auch die Funktion $u = \Phi\left(\frac{x - \mu}{\sigma}\right)$ eine Stammfunktion zu dieser Glockenfunktion ist und an der Stelle $x = \mu$ den Wert $\frac{1}{2}$ hat, dann folgt nach den *Regeln für Stammfunktionen* (S.3)⁶, dass beide Funktionen gleich sind.

$$\begin{aligned} u' &= \left(\Phi\left(\frac{x - \mu}{\sigma}\right)\right)' && | \text{ Kettenregel} \\ &= \Phi'\left(\frac{x - \mu}{\sigma}\right) \cdot \left(\frac{1}{\sigma} \cdot (x - \mu)\right)' && | \Phi'(x) = \varphi(x) \\ &= \varphi\left(\frac{x - \mu}{\sigma}\right) \cdot \frac{1}{\sigma} \cdot 1 && | \text{ für } \varphi \text{ einsetzen} \\ &= \frac{1}{\sigma} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \cdot \exp\left(-0,5 \cdot \left(\frac{x - \mu}{\sigma}\right)^2\right) \\ &\stackrel{(8.4)}{=} p(x), \end{aligned}$$

also ist $u = \Phi\left(\frac{x - \mu}{\sigma}\right)$ eine Stammfunktion zur vorgeschriebenen Glockenfunktion.

Der Erwartungswert der $N(0; 1)$ -Verteilung ist 0, $y = \Phi(x)$ ist die zugehörige Verteilungsfunktion, daher gilt $\Phi(0) = \frac{1}{2}$. Daraus folgt

$$u(\mu) = \Phi\left(\frac{\mu - \mu}{\sigma}\right) = \Phi(0) = \frac{1}{2}.$$

Damit ist alles gezeigt. □

Daraus gewinnt man mit *Regel 64*⁷ als vielgebrauchte praktische Anwendung

⁵siehe 8.1, S.159

⁶siehe 6.2, S.137

⁷siehe 7.3, S.157

Regel 66 (Berechnung von Wahrscheinlichkeiten bei Normalverteilung):**R 66**

Ist x eine normalverteilte Zufallsvariable mit Erwartungswert μ und Streuung σ , so gilt für die Wahrscheinlichkeit, dass eine Messung von x einen Wert im Bereich $a \leq x \leq b$ liefert,

$$P(a \leq x \leq b) = \int_a^b p(x)dx = \Phi\left(\frac{b-\mu}{\sigma}\right) - \Phi\left(\frac{a-\mu}{\sigma}\right) \quad (8.5)$$

Da $\Phi(-\infty) = 0$ und $\Phi(\infty) = 1$ ist, folgen als Spezialfälle die Formeln

$$P(x \leq b) = \int_{-\infty}^b p(x)dx = \Phi\left(\frac{b-\mu}{\sigma}\right) \quad (8.6)$$

$$P(a \leq x) = \int_a^{\infty} p(x)dx = 1 - \Phi\left(\frac{a-\mu}{\sigma}\right) \quad (8.7)$$

WARNUNG: Ist eine Zufallsvariable x normalverteilt, so ist die Wahrscheinlichkeit dafür, dass eine Messung **exakt** einen bestimmten Wert a annimmt, immer gleich Null ($\hat{=}$ Fall $a = b$).

Um ein sinnvolles Ergebnis zu bekommen, muss man die Messungenauigkeit $|\Delta x|$ (=den absoluten Fehler bei der empirischen Messung) miteinbeziehen und die Wahrscheinlichkeit

$$P(a - |\Delta x| \leq x \leq a + |\Delta x|)$$

berechnen.

Beispiel: Man kann also nicht fragen, wie wahrscheinlich es ist, dass eine 170cm große Zwanzigjährige 60kg wiegt, sondern nur, wie wahrscheinlich es ist, dass sie $60\text{kg} \pm 0,5\text{kg}$ oder $60\text{kg} \pm 100\text{g}$... wiegt.

8.2 Sicherheitsvereinbarungen, Fehler 1. und 2. Art

In den folgenden Paragraphen dieses Kapitels geht es immer wieder um Beurteilungen, die jeweils (nur) mit 95%-iger, 99%-iger oder 99,9%-iger Sicherheit gemacht werden können. Dabei ist folgende Sprechweise gebräuchlich:

Bezeichnung: Ergebnisse, die mit 95%-iger Sicherheit ausgesprochen werden, heißen **wahrscheinlich**, solche, die auf 99%-iger Sicherheit basieren, heißen **signifikant**, solche mit 99,9%-iger Sicherheit **hochsignifikant**.

In verschiedenen Anwendungsbereichen sind, wenn nicht ausdrücklich etwas anderes vereinbart wurde, jeweils die folgenden charakteristischen Sicherheitsanforderungen üblich:

Regel 67 (Sicherheitsbestimmungen):**R 67**

Bei Produktbeurteilungen/Qualitätskontrollen werden Urteile mit 95% Sicherheit getroffen, bei wissenschaftlichen Untersuchungen trifft man nur Urteile mit 99% Sicherheit, bei patentrechtlichen und sehr kapitalintensiven Fragestellungen (z.B. bei hohen Investitionen) werden Entscheidungen nur auf Basis 99,9%-iger Sicherheit gefällt.

Diese Praxis birgt zwangsläufig ein unvermeidliches **Restrisiko**:

Bezeichnung: *Stützt man sich auf ein Urteil, weil es mit der vereinbarten Sicherheit getroffen wurde, und es entspricht trotzdem nicht der Realität, so spricht man von einem Fehler*

1. Art. *(Ein Fehler 1. Art ist also ein übereifriges Urteil.)*

Wird ein Urteil verworfen, weil es nicht mit der geforderten Sicherheit ausgesprochen werden kann, und es entspricht trotzdem der Realität, so spricht man von einem Fehler

2. Art. *(Ein Fehler 2. Art ist also übergroße Reserve beim Beurteilen und Stellungnehmen.)*

Konsequenz: Je niedriger die vereinbarte Sicherheit ist (= bei Produktbeurteilungen), umso eher passieren Fehler 1. Art (also vorschnelle Urteile), aber umso seltener passieren Fehler 2. Art (also keine Stellungnahme). Je höher die vereinbarte Sicherheit ist (= bei wissenschaftlichen Untersuchungen oder sehr kapitalintensiven Fragestellungen), umso seltener passieren Fehler 1. Art (vorschnelle Urteile), aber umso eher passieren Fehler 2. Art (Verweigerung angebrachter Stellungnahme).

Die unterschiedlichen Sicherheitsvereinbarungen der verschiedenen Anwendungsbereiche erklären sich aus dem jeweiligen Interesse des Urteilenden:

Bei Qualitätskontrollen besteht das fragliche Urteil in einer Mängelfeststellung. Für den Hersteller/Lieferanten einer Ware ist es geschäftlich gesehen aber unvergleichlich viel günstiger, eine Ware schon bei wahrscheinlichen Mängeln rasch vorsorglich aus dem Verkehr zu nehmen und/oder zu ersetzen, als das Risiko einzugehen, dass ihm von anderer Seite in einem Prozess nachgewiesen wird, wahrscheinlich mangelhafte Produkte vorsätzlich weiter zu liefern. Sowohl in Hinsicht auf den guten Ruf der Firma wie auf die Kostenseite ist jede noch so umfangreiche Rückrufaktion der Mühe wert. Man nimmt dabei ein Risiko von 5% in Kauf, dass die eingezogene Ware doch einwandfrei ist.

Bei wissenschaftlichen Aussagen und sehr kapitalintensiven Entscheidungen hingegen besteht allerhöchster Anspruch, dass das Urteil auch den Tatsachen entspricht (= signifikant ist). Deshalb gilt es hier als oberstes Gebot, lieber gar keine Aussage zu machen als eine, die tatsächlich unzutreffend ist. Man nimmt nur ein Risiko von 1% bzw. 1 Promille in Kauf, dass die Aussage unzutreffend ist.

Folgerung: Hersteller, die ihre Warentests nicht mit 95%-iger Sicherheit durchführen (sondern mit höherer) und Wissenschaftler, die ihre Aussagen nicht mit 99%-iger Sicherheit machen (sondern mit niedrigerer), gelten als wenig seriös.

8.3 Entfernung fehlerhafter Messdaten: Der Ausreißertest

Die entscheidenden Schlüssel zur Kenntnis einer normalverteilten Zufallsvariablen x sind der Erwartungswert μ und die Streuung σ .⁸ Liegen nur kürzere Messreihen vor, so benutzt man \bar{x} und s behelfsweise als Näherungswerte für μ und σ . In späteren Abschnitten wird auch gezeigt, wie man die absoluten Fehler $|\bar{x} - \mu|$ und $|s - \sigma|$ abschätzen kann.⁹ Dazu müssen aber zunächst einmal sowohl \bar{x} als auch s korrekt aus den Messdaten x_1, \dots, x_n berechnet

⁸Das liegt nicht nur in der Eigenbedeutung beider Größen (siehe 7.2, S.151 f), begründet, sondern auch darin, dass ihre Kenntnis genügt, um die Dichtefunktion und die Verteilungsfunktion zu berechnen (siehe 7.3, Regeln 65, 66).

⁹siehe die Abschnitte über den Vertrauensbereich für \bar{x} (8.5, S.153) bzw. für s (8.7, S.156)

worden sein. Es tritt nun das Problem auf, dass einzelne unglaubwürdige Messdaten, die durch fehlerhafte Messung oder fehlerhafte Notierung des Messergebnisses zustande gekommen sein können, sowohl bei der Berechnung von \bar{x} wie bei der von s gravierende Verzerrungen des Ergebnisses verursachen können, und zwar umso mehr, je kleiner die Anzahl n der Messwerte ist. Es ist also erforderlich, solche Fehldaten aus der Messreihe zu entfernen.

Genauere wissenschaftliche Untersuchungen darüber, wie die empirische Dichtefunktion einer Messreihe sich mit wachsendem n der charakteristischen Glockenfunktion $y = p(x)$ des Experiments annähert, haben zu einem Instrumentarium geführt, das es gestattet, auch und gerade bei kürzeren Messreihen solche Daten herauszufinden, die allzu weit abseits liegen, um mit der Normalverteilung von x verträglich zu sein.

Der folgende Test setzt also voraus, dass die Zufallsvariable x normalverteilt ist, und entscheidet unter dieser Prämisse, ob Daten innerhalb einer Messreihe unglaubwürdig sind (sog. **Ausreißer**).

Der Ausreißertest (nach Nalimov):

Ziel: Entfernung unglaubwürdiger Daten aus einer Messreihe bei normalverteilter Zufallsvariabler x .

Man benötigt: Eine empirische Messreihe mit n , \bar{x} und s ($n > 3$) und die **r-Tabelle**.¹⁰

Durchführung:

1. Schritt: Ermittle einen Messwert mit maximalem Abstand zu \bar{x} (in Frage kommen der kleinste oder der größte Messwert der Messreihe) und nenne diesen Messwert x^* (d.h. der Abstand $|x^* - \bar{x}|$ ist maximal).

2. Schritt: Berechne

$$r^* = \frac{|x^* - \bar{x}|}{s} \cdot \sqrt{\frac{n}{n-1}} \text{ und } f = n - 2.$$

3. Schritt: Schlage für dieses f den Eintrag in der r-Tabelle nach und vergleiche r^* mit dem Tabellenwert $\text{tab-}r$.

Auswertung:

- Ist $r^* < \text{tab-}r(95\%)$, so ist durch den Test ein Ausreißer "nicht feststellbar".
 - Ist $r^* \geq \text{tab-}r(95\%)$, so ist x^* **wahrscheinlich** ein Ausreißer und wird aus der Messreihe entfernt.
 - Ist $r^* \geq \text{tab-}r(99\%)$, so ist x^* **signifikant** ein Ausreißer und wird aus der Messreihe entfernt.
 - Ist $r^* \geq \text{tab-}r(99,9\%)$, so ist x^* **hochsignifikant** ein Ausreißer und wird aus der Messreihe entfernt.
4. Schritt: Nach Entfernung eines Ausreißers müssen für die verkürzte Messreihe n , \bar{x} und s neu berechnet werden und der Ausreißertest an der verkürzten Messreihe wiederholt werden. Das Verfahren bricht ab, sobald der Test zum ersten Mal keinen Ausreißer feststellen konnte.

¹⁰siehe Tabellen zur Statistik, S.236

Der Test ist sehr scharf, besonders bei größerem n .

Bezeichnung: Nach der Entfernung aller Ausreißer heißt eine Messreihe **statistisch homogen** oder **ausreißerfrei**.

WARNUNG: Ausreißer sind “unglaubliche” Daten unter der Hypothese der Normalverteilung. Trotzdem müssen Messdaten, die mit diesem Test aus der Messreihe entfernt werden, nicht unbedingt fehlerhaft sein, sondern können eventuell hochwichtige Einzelphänomene anzeigen, die nicht “normal” (d.h. durch bloßen Zufall) erklärlich sind, sondern auf besondere Ursachen hindeuten, denen nachzugehen wäre. Über die **Weiterbehandlung der Ausreißer nach ihrer Entfernung aus der Messreihe** kann nur der Fachmann des Arbeitsgebietes entscheiden.

8.4 Der Streubereich und seine Schätzung

Bezeichnung: Sei x eine normalverteilte Zufallsvariable. Ein Bereich $a \leq x \leq b$, in dem ein Messwert im Rahmen eines gegebenen Experiments mit (mindestens) 95%iger Wahrscheinlichkeit zu liegen kommt, heißt ein **95%-Streubereich der Variablen x** .

In einem solchen Bereich liegen bei langen Messreihen also mindestens 95% aller Messergebnisse.

Analog spricht man vom **99%-Streubereich** (ist größer) und vom **99,9%-Streubereich** (ist noch größer).

Der 95%-Streubereich einer Variablen x hat keine eindeutig bestimmten Eckwerte a und b : Wenn man a noch verkleinert und b noch vergrößert, erhält man erst recht einen 95%-Streubereich von x . Auch leichte seitliche Verschiebungen sind im Allgemeinen erlaubt. Vorrangig interessiert aber, den Streubereich möglichst eng einzugrenzen, also ein Intervall möglichst kleiner Länge zu kennen, welches ein 95%-Streubereich von x ist.

Gibt es zu einer normalverteilten Zufallsvariablen Tausende von Messdaten (also eine ideale Messreihe), so lassen sich kleinstmögliche Streubereiche leicht ermitteln. Dann ist nämlich der Zahlwert von μ und σ konkret bekannt (weil in sehr guter Näherung $\approx \bar{x}$ bzw. $\approx s$) und man kann folgende Rechnung anstellen: Sei $k = 1, 2$ oder 3 und $a = \mu - k\sigma$, $b = \mu + k\sigma$, dann gilt

$$\begin{aligned}
 P(\mu - k\sigma \leq x \leq \mu + k\sigma) &= P(a \leq x \leq b) && | \text{ Regel 66} \\
 &= \Phi\left(\frac{b-\mu}{\sigma}\right) - \Phi\left(\frac{a-\mu}{\sigma}\right) && | \text{ für } a \text{ und } b \text{ einsetzen} \\
 &= \Phi\left(\frac{\mu+k\sigma-\mu}{\sigma}\right) - \Phi\left(\frac{\mu-k\sigma-\mu}{\sigma}\right) \\
 &= \Phi(k) - \Phi(-k) && | \text{ Symmetrieregeln für } \Phi \text{ (8.3)} \\
 &= \Phi(k) - (1 - \Phi(k)) \\
 &= 2\Phi(k) - 1 && k = 1, 2, 3
 \end{aligned}$$

Nachschlagen in der Φ -Tabelle für $k = 1, 2, 3$ liefert hieraus folgende Wahrscheinlichkeiten:

Regel 68 (Grobe Abschätzung von Streubereichen mittels der Streuung σ):

R 68

$$P(\mu - \sigma \leq x \leq \mu + \sigma) = 0,6826 = 68,26\%,$$

$$P(\mu - 2\sigma \leq x \leq \mu + 2\sigma) = 0,9544 = 95,44\%,$$

$$P(\mu - 3\sigma \leq x \leq \mu + 3\sigma) = 0,9974 = 99,74\%,$$

d.h. bei normalverteilten Zufallsvariablen liegen mehr als zwei Drittel aller Messergebnisse im Bereich $\mu - \sigma \leq x \leq \mu + \sigma$, gut 95% im Bereich $\mu - 2\sigma \leq x \leq \mu + 2\sigma$ und 99,7% im Bereich $\mu - 3\sigma \leq x \leq \mu + 3\sigma$.

Das erklärt, warum man die Streuung σ auch den "mittleren Fehler" der Messmethode nennt: Erst nach Kenntnis des Streubereichs kann der Informationswert des Erwartungswertes μ eines Experiments richtig beurteilt werden.¹¹

Regel 67 macht schärfstmögliche Angaben, basierend auf genauer Kenntnis von μ und σ . Sie liefert Streubereiche der Bauart

$$\mu - t \cdot \sigma \leq x \leq \mu + t \cdot \sigma$$

mit $t = 2$ (im Fall 95,44%) bzw. $t = 3$ (im Fall 99,74%).

Es gibt aber zwei Einwände: Einerseits sind die Prozentangaben nicht exakt gleich 95%, 99% und 99,9%, andererseits ist man auch stark daran interessiert, Streubereiche ebenfalls von solchen normalverteilten Zufallsvariablen zu kennen, zu denen nur kleinere Messreihen existieren und damit \bar{x} und s nur grobe Schätzwerte für μ und σ liefern, und zwar umso größere, je kleiner die Anzahl n der Messungen.

Eine berühmte wissenschaftlichen Studie (die ein junger Wissenschaftler unter dem Pseudonym "student" veröffentlichte) lieferte eine Tabelle, die angibt, wie man in Abhängigkeit von n den Faktor t möglichst vorsichtig zu verändern hat, wenn man für μ und σ die Schätzwerte \bar{x} und s einsetzt. Dabei wird der Faktor einerseits so korrigiert, dass die drei gefragten Prozentbereiche (95%, 99% bzw. 99,9%) genau erfasst werden, zum andern wird der Faktor t (und damit auch der Streubereich) jeweils so vergrößert, dass die mit immer kleinerem n sich verschlimmernde Ungenauigkeit der Schätzwerte \bar{x} und s gerade noch abgefangen wird. Die Tabelle ist als **t-Tabelle**¹² bekannt, der tabellierte Faktor t heisst auch **student-Faktor**.

Regel 69 (Schärfstmögliche Angabe der 95%-, 99%- und 99,9%-Streubereiche):

R 69

Sind von einer statistisch homogenen Messreihe n , \bar{x} und s berechnet worden, so ist die hiernach bestmögliche Schätzung des Streubereichs gegeben durch $\bar{x} - ts \leq x \leq \bar{x} + ts$, kurz:

$$\bar{x} \pm ts,$$

wobei der student-Faktor t aus der t-Tabelle zu entnehmen ist, und zwar in Abhängigkeit von dem sog. Freiheitsgrad $f = n - 1$ und der gewünschten Sicherheit in %.

Liegt die ideale Messreihe vor, so benutzt man entsprechend μ , σ und $f = \infty$.

In der **Medizin** benutzt man Streubereiche zur raschen Einschätzung des Seltenheitswertes einer Einzelmessung am Patienten.

¹¹siehe 7.2, S.151. Vergleiche auch das Konzept des "mittleren Fehlers" bei der Linearen Regression, 4.7, S.61, Formel (4.5)

¹²siehe Tabellen zur Statistik, S.236

Beispiel: Kinderärzte tragen bei den Vorsorgeuntersuchungen für Kleinkinder die gemessenen Werte für Kopfumfang, Körperlänge und Gewicht jeweils in vorgedruckte Graphiken ein, aus denen die 95%- und 99%-Streubereiche dieser Zufallsvariablen in Abhängigkeit vom Lebensalter ablesbar sind. (Die Daten basieren auf idealen Messreihen für die Bevölkerung, könnten aber nach Jahrzehnten veraltet sein.)

Da die Vorsorgeuntersuchung der Kleinkinder in den wissenschaftlichen Bereich fällt, wird man ein Messergebnis (nur) dann als medizinisch auffällig, als außerhalb des normalen Bereichs liegend einstufen, wenn es nicht im 99%-Streubereich liegt.

8.5 Der Vertrauensbereich für \bar{x} und seine Schätzung

R 70 Regel 70 (Schätzung des Abstandes zwischen \bar{x} und μ):

Ist eine statistisch homogene Messreihe mit n , \bar{x} und s gegeben, so gilt mit 95% bzw. 99% bzw. 99,9% Sicherheit folgende Abschätzung für den Abstand zwischen \bar{x} und μ :

$$|\bar{x} - \mu| \leq \frac{t \cdot s}{\sqrt{n}},$$

wobei der student-Faktor t aus der t -Tabelle zu entnehmen ist, abhängig vom Freiheitsgrad $f = n - 1$ und der gewünschten Sicherheit in %.

Anwendungen:

[1] Ist der Erwartungswert μ bekannt, so kann man den Abstand $|\bar{x} - \mu|$ direkt ausrechnen und mit der Aussage der Regel vergleichen:

Wenn er tatsächlich $\leq \frac{t \cdot s}{\sqrt{n}}$ ist, ist mit der jeweiligen Sicherheit die Erhebung der Messdaten korrekt erfolgt und **der Zahlwert von \bar{x} vertrauenswürdig**, ist der Abstand hingegen größer, so hat man mit der jeweiligen Sicherheit **einen systematischen Messfehler aufgedeckt**.

[2] Ist der Erwartungswert μ unbekannt, so kann man hiermit **den Wert von μ schätzen**: Mit der jeweiligen Sicherheit gilt

$$\bar{x} - \frac{t \cdot s}{\sqrt{n}} \leq \mu \leq \bar{x} + \frac{t \cdot s}{\sqrt{n}}.$$

Bezeichnung: *Der Bereich*

$$\bar{x} - \frac{t \cdot s}{\sqrt{n}} \leq x \leq \bar{x} + \frac{t \cdot s}{\sqrt{n}}.$$

heißt, je nach der gewählten Sicherheit, der **95%-**, **99%-** bzw. **99,9%-Vertrauensbereich für \bar{x}** .

8.5.1 Anwendung: Qualitätstest für quantitative Eigenschaften

Eine dritte Anwendungsvariante von *Regel 70* ergibt sich wie folgt:

Wird für eine Ware zugesichert, daß eine Variable x einen gewissen Sollwert X annimmt (z.B. sei x das reale Nettogewicht einer abgepackten Portion und $X = 500g$ das Sollgewicht), und wird diese Zusicherung auch praktisch eingehalten, so liefern immer weiter verlängerte Messreihen zu x Mittelwerte \bar{x} , die für $n \rightarrow \infty$ gegen X streben, d.h. dann (und nur dann) erweist sich X als identisch mit μ und nach *Regel 70* gilt

$$|\bar{x} - X| \leq \frac{t \cdot s}{\sqrt{n}} \quad \text{oder auch} \quad \frac{|\bar{x} - X| \cdot \sqrt{n}}{s} \leq t.$$

Damit erhält man einen vielbenutzten

Qualitätstest an Waren auf Einhaltung eines Sollwertes X einer Variablen x

Ziel: Überprüfung, ob eine gewisse quantitative Eigenschaft der Ware eingehalten wird.

Man benötigt: Eine **statistisch homogene** empirische Messreihe mit n , \bar{x} und s , den Sollwert X und die **t-Tabelle**.¹³

Durchführung:

1. Schritt: Berechne

$$TAU = \frac{|\bar{x} - X| \cdot \sqrt{n}}{s} \quad \text{und} \quad f = n - 1.$$

2. Schritt: Schlage für dieses f und 95% Sicherheit den Eintrag in der t-Tabelle nach und vergleiche TAU mit dem Tabellenwert t .

Auswertung:

- Ist $TAU < t$, so ist durch den Test eine Abweichung vom Sollwert X "nicht feststellbar".
- Ist $TAU \geq t$, so gilt die Ware als mangelhaft, da der Sollwert X nicht eingehalten wird.

8.6 Der F-Test zum Vergleich zweier Streuungen s_1, s_2

In 7.1 wurde dargelegt, dass zwei Messreihen nur dann wirklich von derselben Zufallsvariablen x handeln, wenn sie dieselbe Messmethode benutzen. Und nur dann können ihre inhaltlichen Ergebnisse (= Mittelwerte) sinnvollerweise auf Gleichheit oder Verschiedenheit untersucht werden. Es ist daher entscheidend wichtig, einen Test auf Gleichheit der Messmethode zu besitzen.

Da die Streuung σ eine spezifische Konstante der Messmethode ist und die empirische Streuung s ein Näherungswert für σ , können zwei Messreihen, denen dieselbe Messmethode zu

¹³siehe Tabellen zur Statistik, S.236

Grunde liegt, sich in ihren empirischen Streuungen s_1, s_2 nicht beliebig stark unterscheiden, und zwar umso weniger, je größer die Anzahl der Messungen n_1, n_2 ist.

Sollen mehr als zwei Streuungen gleichzeitig auf Gleichheit getestet werden, so muss statt des F-Tests ein anderer Test verwendet werden, z.B. der Bartlett-Test¹⁴.

Der F-Test:

Ziel: Überprüfung der Streuungen zweier Messreihen auf Gleichheit.

Man benötigt: Zwei **statistisch homogene** Messreihen mit n_1, s_1 und n_2, s_2 und die **F-Tabelle**.¹⁵ (Die Mittelwerte werden nicht gebraucht.)

Durchführung:

1. Schritt: Richte die Nummerierung der Messreihen so ein, dass $s_1 \geq s_2$ ist (notfalls Nummerierung bei s und(!) n vertauschen).

2. Schritt: Berechne

$$F = \left(\frac{s_1}{s_2}\right)^2, \quad f_1 = n_1 - 1 \text{ und } f_2 = n_2 - 1.$$

(Achtung! Wenn der 1. Schritt richtig durchgeführt wurde, ist $F \geq 1$.)

3. Schritt: Schlage für diese f_1 und f_2 den Eintrag in der F-Tabelle nach und vergleiche F mit dem Tabellenwert $\text{tab-}F$.

Auswertung:

- Ist $F < \text{tab-}F(95\%)$, so ist durch den Test ein Unterschied zwischen den Streuungen s_1, s_2 "nicht feststellbar".
- Ist $F \geq \text{tab-}F(95\%)$, so sind s_1 und s_2 **wahrscheinlich** verschieden.
- Ist $F \geq \text{tab-}F(99\%)$, so sind s_1 und s_2 **signifikant** verschieden.
- Ist $F \geq \text{tab-}F(99,9\%)$, so sind s_1 und s_2 **hochsignifikant** verschieden.

Anwendungen:

- [1] Stimmt es, dass **zwei empirische** Messreihen **dasselbe Experiment** durchgeführt zu haben? Nur wenn ein Unterschied zwischen s_1 und s_2 nicht feststellbar ist, darf man sich der nächstfolgenden Frage zuwenden, ob die Ergebnisse die gleichen sind.
- [2] Stimmt es, dass **zwei empirische** Messreihen unterschiedliche Experimente zu **derselben Zufallsvariablen** x durchgeführt zu haben? Nur wenn ein Unterschied zwischen s_1 und s_2 nicht feststellbar ist, darf man sich der Frage zuwenden, ob die Ergebnisse sich unterscheiden.
- [3] Stimmt es, dass **eine empirische** Messreihe mit n_1 und s_1 eine wohlbekannte Methode benutzt (und also eine wohlbekannte Zufallsvariable x gemessen) hat? Wenn ja, muss der Test an ihr und der idealen Messreihe mit $n_2 = \infty, s_2 = \sigma$ ($\Rightarrow f_2 = \infty$) ergeben, dass ein Unterschied zwischen s_1 und σ nicht feststellbar ist. (Im 1. Schritt ggf. unnummerieren!)

8.6.1 Anwendung: Test auf gleichmäßige Qualität einer Ware

Eine praktische Anwendung des F-Tests ergibt sich wie folgt: Besteht eine quantitative Eigenschaft x einer Ware darin, dass sie einen bestimmten Sollwert X erfüllt¹⁶ (bei Medikamenten z.B. ist für die

¹⁴siehe 8.9.1, S.175

¹⁵siehe Tabellen zur Statistik, S.226

¹⁶siehe 8.5.1, S.169

Menge x eines enthaltenen Wirkstoffs stets eine Sollmenge X vorgeschrieben), so ist es oft dennoch unvermeidlich, dass bei Kontrollmessungen von x das Messergebnis in einem gewissen Maße um den Sollwert X herum schwankt. Man kann jedoch verlangen, dass diese Schwankung ein produktionsbedingtes Mindestmaß nicht überschreitet. Dieses zulässige Mindestmaß nennt man die **Sollstreuung** S . Wünschenswert und erstrebt ist also stets eine möglichst kleine Sollstreuung.

Ist für ein Produkt eine Sollstreuung S zugesichert und wird diese Zusicherung auch praktisch eingehalten, so liefern immer weiter verlängerte Messreihen zu x empirische Streuungen s , die für $n \rightarrow \infty$ gegen S streben, d.h. dann (und nur dann) erweist sich S als identisch mit σ .

Damit erhält man einen vielbenutzten

Qualitätstest an Waren auf Einhaltung einer Sollstreuung

Ziel: Gewährleistung gleichbleibender Qualität einer Ware.

Man benötigt: Eine **statistisch homogene** empirische Messreihe zu x mit n und s , die Sollstreuung S und die **F-Tabelle**.¹⁷

Durchführung:

1. Schritt: Ist $s \geq S$, so nummeriere $n_1 = n$, $s_1 = s$ sowie $n_2 = \infty$, $s_2 = S$, sonst umgekehrt.
2. Schritt: Berechne

$$F = \left(\frac{s_1}{s_2} \right)^2, \quad f_1 = n_1 - 1 \text{ und } f_2 = n_2 - 1.$$

(Achtung! Wenn der 1. Schritt richtig durchgeführt wurde, ist $F \geq 1$. Einer der f -Werte ist $= \infty$.)

3. Schritt: Schlage für diese f_1 und f_2 und 95% Sicherheit den Eintrag in der F-Tabelle nach und vergleiche F mit dem Tabellenwert $\text{tab-}F(95\%)$.

Auswertung:

- Ist $F < \text{tab-}F(95\%)$, so ist durch den Test eine Abweichung von der Sollstreuung S "nicht feststellbar".
- Ist $F \geq \text{tab-}F(95\%)$, so gilt die Ware als mangelhaft, da die Sollstreuung S nicht eingehalten wurde.

Bemerkung 1: Ist $s \leq S$, so wird man im Allgemeinen hoch zufrieden sein, die Ware nicht als mangelhaft sondern als über Erwarten gleichmäßig gelungen betrachten und den Test schon im 1. Schritt abbrechen. Anders steht es, wenn man probeweise zu einer neuen Produktionsmethode übergegangen ist und an deren Produkten nun testen will, ob mit der neuen Methode echt geringere Streuungen als die alte Sollstreuung S erzielt werden können. Dann wird man den obigen Qualitätstest weiter durchführen, allerdings eventuell mit 99% Sicherheit, wenn die Produktionsumstellung im großen Stil sehr kapitalintensiv wäre, sogar mit 99,9% Sicherheit.

Bemerkung 2: Dem Abnehmer der Ware wird die Sollstreuung von x in der Regel nicht ausdrücklich deklariert, sondern die zugesicherte Qualitätsgarantie versteckt sich in der Genauigkeit, mit der der Sollwert X bekanntgemacht wird.¹⁸ Wird im Beipackzettel eines Medikaments angegeben, dass Wirkstoff A in der Konzentration $X = 0,5\text{g}/100\text{ml}$ enthalten ist, so wird damit indirekt eine Sollstreuung $S = 0,05\text{g}/100\text{ml}$ zugesichert. Lautet die Inhaltsangabe hingegen $X = 500\text{mg}/100\text{ml}$, so beträgt die zugesicherte Sollstreuung nur noch $S = 0,5\text{mg}/100\text{ml}$.

¹⁷ siehe Tabellen zur Statistik, S.226

¹⁸ siehe die *Zahlenverlässlichkeitsregel* in 4.5.1, S.54

8.7 Der Vertrauensbereich für s und seine Schätzung

Der F-Test basiert auf genauen wissenschaftlichen Untersuchungen darüber, wie nah, in Abhängigkeit von n , die Streuung s einer Messreihe ihrem Grenzwert σ , der Streuung der Messmethode, kommt. Dies kann man dazu verwenden, um bei gegebener empirischer Messreihe und unbekanntem σ unter Ausnutzung des F-Tests eine Schätzung für σ zu erhalten:

R 71

Regel 71 (Schätzung des Wertes von σ und des Abstandes zwischen s und σ):

Gegeben sei eine **statistisch homogene empirische Messreihe** mit n und s , eine vereinbarte Sicherheit (wahlweise 95%, 99% oder 99,9%) und die F-Tabelle.

Schlage unter der vereinbarten Sicherheit für $f_1 = n - 1$, $f_2 = \infty$ den Eintrag in der F-Tabelle nach und nenne ihn F_u .

Schlage unter der vereinbarten Sicherheit für $f_1 = \infty$, $f_2 = n - 1$ den Eintrag in der F-Tabelle nach und nenne ihn F_o .

Dann liegt mit der vereinbarten Sicherheit σ zwischen folgenden Eckwerten

$$\frac{s}{\sqrt{F_u}} < \sigma < s\sqrt{F_o}$$

und für den Abstand $|s - \sigma|$ gilt die Abschätzung

$$|s - \sigma| \leq s\sqrt{F_o} - \frac{s}{\sqrt{F_u}}.$$

Bezeichnung: Der Bereich

$$\frac{s}{\sqrt{F_u}} < x < s\sqrt{F_o}$$

heißt, je nach der gewählten Sicherheit, der **95%-**, **99%-** bzw. **99,9%-Vertrauensbereich für s** .

Der Name dieses Intervalls erklärt sich wie folgt: Ist die Methodenstreuung σ bekannt, so kann man den Abstand $|s - \sigma|$ direkt ausrechnen und mit der Aussage der Regel vergleichen: Wenn er tatsächlich der Abschätzung der Regel entspricht, ist mit der jeweiligen Sicherheit die Erhebung der Messdaten methodisch korrekt erfolgt und der Zahlwert von \bar{x} entsprechend brauchbar, ist der Abstand hingegen größer, so liegt mit der jeweiligen Sicherheit ein Methodenfehler vor. (Bequemer testet man dies aber gemäss Anwendung [3] des F-Tests, S.170). Ist der Erwartungswert σ unbekannt, so kann man darauf vertrauen, dass s den Wert von σ in der angegebenen Weise eingrenzt.

Beweis von Regel 71: Wir wählen die gewünschte Sicherheit und wenden den F-Test an auf die gegebene empirische Messreihe und die ideale Messreihe mit $n = \infty$ und einem σ , das zwar zahlenmäßig unbekannt ist, aber tatsächlich als Grenzwert zu s gehört.

1. Fall: $s \geq \sigma$:

Laut 1. Schritt bekommt die empirische Messreihe die Nr.1, die ideale die Nr. 2.

Laut 2. Schritt berechnen wir $F = \left(\frac{s}{\sigma}\right)^2$, $f_1 = n - 1$ und $f_2 = \infty$.

Wir schlagen im 3. Schritt den tab-F-Wert nach und nennen ihn F_u .

Da σ und s zusammengehören, ist im 4. Schritt ein Unterschied zwischen beiden nicht feststellbar, d.h. es gilt $F < \text{tab-F}$, eingesetzt:

$$\begin{aligned} \left(\frac{s}{\sigma}\right)^2 &< F_u \\ \frac{s}{\sigma} &< \sqrt{F_u} \\ \frac{s}{\sqrt{F_u}} &< \sigma \end{aligned} \tag{8.8}$$

Nach Fallannahme ist $\sigma \leq s$. Weil alle Einträge der F-Tabelle > 1 sind, auch F_o , ist weiterhin $s < s\sqrt{F_o}$, zusammengenommen daher $\sigma \leq s < s\sqrt{F_o}$. In Kombination mit (8.8) ergibt sich mit der gewählten Sicherheit

$$\frac{s}{\sqrt{F_u}} < \sigma \leq s < s\sqrt{F_o}. \quad (8.9)$$

2. Fall: $s < \sigma$:

Laut 1. Schritt bekommt die ideale Messreihe die Nr.1, die empirische die Nr. 2.

Laut 2. Schritt berechnen wir $F = \left(\frac{\sigma}{s}\right)^2$, $f_1 = \infty$ und $f_2 = n - 1$.

Wir schlagen im 3. Schritt den tab- F -Wert nach und nennen ihn F_o .

Da σ und s zusammengehören, ist im 4. Schritt ein Unterschied zwischen beiden nicht feststellbar, d.h. es gilt $F < \text{tab-}F$, eingesetzt:

$$\begin{aligned} \left(\frac{\sigma}{s}\right)^2 &< F_o \\ \frac{\sigma}{s} &< \sqrt{F_o} \\ \sigma &< s\sqrt{F_o} \end{aligned} \quad (8.10)$$

Weil auch $F_u > 1$ ist, ist $s < s\sqrt{F_u}$, also $\frac{s}{\sqrt{F_u}} < s$, außerdem nach Fallannahme $s < \sigma$, zusammengenommen daher $\frac{s}{\sqrt{F_u}} < s < \sigma$. In Kombination mit (8.10) ergibt sich mit der gewählten Sicherheit

$$\frac{s}{\sqrt{F_u}} < s < \sigma < s\sqrt{F_o}. \quad (8.11)$$

Damit ist die in *Regel 71* behauptete Lage von σ in dem angegebenen Vertrauensbereich in jedem Fall bewiesen.

Da nach (8.9) und (8.11) mit σ stets auch s in diesem Vertrauensbereich liegt, kann der Abstand $|s - \sigma|$ höchstens so groß sein wie der zwischen den Eckdaten dieses Bereichs. Damit ist auch die Abschätzung für den Abstand bewiesen. \square

8.8 Der t-Test zum Vergleich zweier Mittelwerte \bar{x}_1, \bar{x}_2

Die Ergebnisse (= Mittelwerte) zweier empirischer Messreihen darf man bekanntlich nur miteinander in Beziehung bringen/vergleichen, wenn sie **dieselbe** Zufallsvariable x gemessen haben, d.h. wenn sie dieselbe Messmethode benutzt haben, was wiederum unbedingt dadurch abgesichert werden muss, dass der F-Test (Tabelle für 95%) keinen Unterschied zwischen den empirischen Streuungen feststellt.

Der t-Test:

Ziel: Prüfung, ob die Mittelwerte \bar{x}_1, \bar{x}_2 **zweier empirischer** Messreihen sich unterscheiden.

Man benötigt: Zwei **statistisch homogene** empirische Messreihen mit n_1, \bar{x}_1, s_1 und n_2, \bar{x}_2 und s_2 (also n_1, n_2 beide $\neq \infty$), **die den F-Test bestanden haben**, d.h. dass ein Unterschied zwischen s_1 und s_2 nicht feststellbar war, sowie die **t-Tabelle**.

Durchführung:

1. Schritt: Berechne

$$s_d = \sqrt{\frac{(n_1 - 1) \cdot s_1^2 + (n_2 - 1) \cdot s_2^2}{n_1 + n_2 - 2}}.$$

2. Schritt: Berechne

$$T = \frac{|\bar{x}_1 - \bar{x}_2|}{s_d} \cdot \sqrt{\frac{n_1 \cdot n_2}{n_1 + n_2}} \quad \text{sowie} \quad f = n_1 + n_2 - 2.$$

3. Schritt: Schlage für dieses f den Eintrag in der t-Tabelle nach und vergleiche T mit dem Tabellenwert t .

Auswertung:

- Ist $T < t(95\%)$, so ist durch den Test ein Unterschied zwischen \bar{x}_1 und \bar{x}_2 "nicht feststellbar".
- Ist $T \geq t(95\%)$, so sind \bar{x}_1 und \bar{x}_2 **wahrscheinlich** verschieden.
- Ist $T \geq t(99\%)$, so sind \bar{x}_1 und \bar{x}_2 **signifikant** verschieden.
- Ist $T \geq t(99,9\%)$, so sind \bar{x}_1 und \bar{x}_2 **hochsignifikant** verschieden.

Sollen mehr als zwei Mittelwerte simultan auf Gleichheit getestet werden, so muss statt des t-Tests ein anderer Test verwendet werden, z.B. die Einfache Varianzanalyse¹⁹.

8.8.1 Anwendung 1: Zusammenfassung zweier Messreihen zu einer

Wenn zwei **statistisch homogene** empirische Messreihen zur Messung derselben Zufallsvariablen x mit n_1, \bar{x}_1, s_1 und n_2, \bar{x}_2 und s_2 (also n_1, n_2 beide $\neq \infty$), **sowohl den F-Test als auch den t-Test bestanden haben**, d.h. dass ein Unterschied weder zwischen s_1 und s_2 noch zwischen \bar{x}_1 und \bar{x}_2 feststellbar war, so darf man sie zu einer einzigen, längeren Messreihe zusammenfassen. Der Mittelwert \bar{x} und die Streuung s der zusammengefassten Reihe ergeben verbesserte Näherungswerte für μ und σ .

Die Berechnung der statistischen Daten n, \bar{x} und s der zusammengefassten Messreihe geschieht wie folgt:

1. Schritt: Berechne $n = n_1 + n_2$.

2. Schritt: Berechne

$$\bar{x} = \frac{n_1 \cdot \bar{x}_1 + n_2 \cdot \bar{x}_2}{n}.$$

3. Schritt: Berechne

$$s = \sqrt{\frac{(n_1 - 1) \cdot s_1^2 + (n_2 - 1) \cdot s_2^2}{n - 1} + \frac{n_1 \cdot n_2 \cdot (\bar{x}_1 - \bar{x}_2)^2}{n \cdot (n - 1)}}.$$

Wiederholte Anwendung gestattet es, viele kleine Datensammlungen zu einer nahezu idealen Messreihe zusammenzufügen und somit μ und σ möglichst genau zu berechnen. Dieses ermöglicht dann einerseits die Berechnung von Wahrscheinlichkeiten mit der Φ -Tabelle²⁰, andererseits eine scharfe Berechnung von Streubereichen²¹.

Wissenschaftliche Arbeiten auf dem Gebiet der Medizin etwa bemühen sich, Datensammlungen, die aus den verschiedensten Kliniken und Publikationen stammen, zu immer größeren Datenpools zusammenzufassen.

¹⁹siehe 8.9.2, S.176

²⁰siehe 8.1, *Regel 66*, S.163

²¹siehe 8.4, *Regel 69*, S.167, und Anwendungsbeispiel dazu

8.8.2 Anwendung 2: Untersuchung von Einflüssen auf die normalverteilte Zufallsvariable x

Will man die Abhängigkeitsbeziehungen der Zufallsvariablen

$$x = f(u_1, \dots, u_k, v_1, v_2, \dots)$$

von den u_i genauer untersuchen, so kann man verschiedene Ansätze verfolgen:

Entweder man betrachtet x künstlich als Funktion einer einzigen Variablen (z.B. u_1) und konzipiert verschiedene Experimente, in denen alle u_2, \dots, u_k auf immer dieselben konstanten Werte gesetzt werden sowie alle v_1, v_2, \dots immer innerhalb derselben Bandbreiten variieren, nur u_1 setzt man in den verschiedenen Experimenten auf verschiedene Werte.

Oder man betrachtet x als Funktion von zwei Variablen u_1, u_2 (oder noch mehr) und plant Experimente, in denen die zu untersuchenden Einflussgrößen u_1, u_2 (oder mehr) auf unterschiedlichen interessierenden Wertekombinationen konstant gehalten werden, während für alle anderen u_i und für die v_i in allen Experimenten dieselben Bedingungen gelten.

Vergleicht man nun zwei Messreihen zu zwei verschiedenen derartigen Experimenten mittels des t-Tests, so wird erkennbar, ob die Experimente zu unterschiedlichen Ergebnissen führen.

8.9 Simultaner Vergleich von mehr als zwei empirischen Messreihen

Sollen die Streuungen und Mittelwerte von mehr als zwei Messreihen auf Gleichheit miteinander verglichen werden, so besteht das genaueste Verfahren darin, alle Teilmengen von je zwei dieser Messreihen mittels des F-Tests und anschließenden t-Tests zu untersuchen. Das ergibt aber rasch einen extrem hohen Arbeitsaufwand: Ist m die Anzahl der Messreihen, so sind $\binom{m}{2} = \frac{m \cdot (m-1)}{2}$ verschiedene Paare von je zwei Messreihen zu überprüfen.

Will man diesen Arbeitsaufwand vermeiden und ist bereit, dafür eine geringere Ergebnisschärfe in Kauf zu nehmen, so kann man alle m Messreihen auf einmal vergleichen mit den zwei nachfolgenden Tests.

8.9.1 Der Bartlett-Test zum Vergleich von Streuungen s_1, \dots, s_m (Verallgemeinerter F-Test)

Ziel: Simultane Überprüfung von mehr als zwei Messreihen auf Gleichheit der Streuungen.

Man benötigt: m statistisch homogene Messreihen mit n_1, s_1 bis n_m, s_m und die χ^2 -Tabelle²² (Die Mittelwerte werden nicht gebraucht.)

Durchführung:

1. Schritt: Berechne $n = n_1 + \dots + n_m = \sum n_i$
2. Schritt: Berechne $f_i = n_i - 1$ ($i = 1, \dots, m$) und $f = n - m$
3. Schritt: Berechne

$$s_{\text{mitt}} = \sqrt{\frac{f_1 s_1^2 + \dots + f_m s_m^2}{f}} = \sqrt{\frac{\sum f_i s_i^2}{f}}$$

²²siehe Tabellen zur Statistik, S.234

4. Schritt: Berechne

$$c = \frac{(\sum \frac{1}{f_i}) - \frac{1}{f}}{3(m-1)} + 1$$

5. Schritt: Berechne die Prüfgröße

$$PB = \frac{(f \cdot \ln(s_{mitt}) - (\sum f_i \cdot \ln s_i)) \cdot 2}{c}$$

6. Schritt: Schlage für f in der χ^2 -Tabelle nach und vergleiche PB mit dem Tabellenwert.

Auswertung:

- Ist $PB < \chi^2(95\%)$, so sind durch den Test Unterschiede der Streuungen s_1, \dots, s_m "nicht feststellbar".
- Ist $PB > \chi^2(95\%)$, so sind die Streuungen s_i **wahrscheinlich** verschieden (= nicht alle gleich).
- Ist $PB > \chi^2(99\%)$, so sind die Streuungen s_i **signifikant** verschieden (= nicht alle gleich).
- Ist $PB > \chi^2(99,9\%)$, so sind die Streuungen s_i **hochsignifikant** verschieden (= nicht alle gleich).

Bezeichnung: m Messreihen, bei denen Unterschiede der Streuungen nicht erkennbar sind, heißen **bezüglich der Streuung homogen**.

Hat der Bartlett-Test ergeben, dass die Streuungen wahrscheinlich, signifikant oder hochsignifikant verschieden sind, und möchte man daraufhin solche Messreihen aussondern, die für dieses Ergebnis verantwortlich sind, so verfährt man wie folgt:

Während die einzelnen s_i die mittlere Abweichung der Messergebnisse innerhalb der i -ten Messreihe angeben, wird bei s_{mitt} nachträglich und zusätzlich noch über alle Messreihen gemittelt, s_{mitt} gibt also eine Art von mittlerem Wert der s_i an.

Bezeichnung: $s_{mitt} = \sqrt{\frac{\sum f_i s_i^2}{f}}$ heißt die **mittlere Streuung INNERHALB der Messreihen**.

Aus allen s_i bestimmt man nun ein solches, für das der Abstand $|s_i - s_{mitt}|$ maximal wird, (s_i ist sozusagen ein "Streuungs-Ausreißer") und sondert die zugehörige Messreihe aus. Für die verbleibenden $m - 1$ Messreihen führt man sämtliche Schritte des Bartlett-Tests erneut durch. Kann der Test nun keine Unterschiede der Streuungen mehr erkennen, so ist man fertig. Andernfalls wiederholt man das Aussonderungsverfahren so lange, bis die verbleibenden Messreihen bezüglich der Streuung homogen sind.

8.9.2 Die Einfache Varianzanalyse zum Vergleich von Mittelwerten $\bar{x}_1, \dots, \bar{x}_m$ (Verallgemeinerter t-Test)

Die Ergebnisse (= Mittelwerte) von m ausreißerfreien Messreihen darf man bekanntlich nur dann in Beziehung zueinander bringen/vergleichen, wenn sie **dieselbe** Zufallsvariable x gemessen haben, wenn sie also bezüglich der Streuung homogen sind. Die sog. **Nullhypothese** für solche Messreihen lautet:

Nullhypothese: Unterschiede zwischen den Mittelwerten \bar{x}_i sind nicht feststellbar, d.h. alle Messreihen haben denselben Erwartungswert μ .

Die Einfache Varianzanalyse:

Ziel: Prüfung, ob die sog. **Nullhypothese** verworfen werden muss.

Man benötigt: m statistisch homogene empirische Messreihen mit den statistischen Daten

$$n_i, \bar{x}_i, s_i \quad (i = 1, \dots, m),$$

die den **Bartlett-Test** oder $\binom{n}{2}$ **F-Tests** bestanden haben, d.h. dass Unterschiede zwischen den Streuungen s_i nicht feststellbar waren, sowie die **F-Tabelle**.

Durchführung:

1. Schritt: Im Bartlett-Test schon berechnet worden sind die Größen

$$n = \sum n_i,$$

$$f_i = n_i - 1 \text{ für } i = 1, \dots, m \quad \text{und} \quad f = n - m \text{ sowie}$$

$$s_{\text{mitt}} = \sqrt{\frac{\sum f_i s_i^2}{f}}.$$

2. Schritt: Berechne

$$\bar{x} = \frac{\sum n_i \bar{x}_i}{n}$$

3. Schritt: Berechne

$$s_{\bar{x}} = \sqrt{\frac{\sum n_i (\bar{x}_i - \bar{x})^2}{m - 1}}$$

4. Schritt: Berechne

$$F = \left(\frac{s_{\bar{x}}}{s_{\text{mitt}}} \right)^2 \text{ sowie } f_1 = m - 1 \text{ und } f_2 = f.$$

5. Schritt: Ist $F > 1$, so schlage für f_1 und f_2 in der F-Tabelle nach und vergleiche F mit tab- F .

Auswertung:

- Ist $F \leq 1$ oder $F < \text{tab-}F(95\%)$, so ist ein Unterschied der \bar{x}_i "nicht feststellbar", die Nullhypothese ist anzunehmen.
- Ist $F \geq \text{tab-}F(95\% \text{ bzw. } 99\% \text{ bzw. } 99,9\%)$, so sind die \bar{x}_i wahrscheinlich bzw. signifikant bzw. hochsignifikant verschieden (= nicht alle gleich), d.h. die Nullhypothese ist abzulehnen. Die Messreihen gehören mit der entsprechenden Sicherheit zu Experimenten, die nicht alle denselben Erwartungswert besitzen.

Bezeichnung: $s_{\bar{x}} = \sqrt{\frac{\sum n_i (\bar{x}_i - \bar{x})^2}{m - 1}}$ wird auch als **mittlere Streuung ZWISCHEN den Messreihen** bezeichnet.

Ist die Nullhypothese richtig, so ist die mittlere Streuung **zwischen** den Messreihen $s_{\bar{x}}$ kleiner oder kaum größer als die mittlere Streuung **innerhalb** der Messreihen s_{mitt} . Ist das Größenverhältnis $F = \frac{s_{\bar{x}}^2}{s_{mitt}^2}$ besonders klein, so ist die Nullhypothese besonders glaubwürdig, übersteigt dieses Größenverhältnis ein gewisses Maß, so ist die Nullhypothese zu verwerfen. Da in Zähler und Nenner von F zwei Varianzen stehen, heißt der Test "Varianzanalyse".

Anwendungen:

[1] **Aufbau einer größeren Datensammlung zwecks Gewinnung einer idealen Messreihe:**

m ausreißerfreie Messreihen zum selben Experiment, die sowohl den Bartlett-Test als auch die Einfache Varianzanalyse bestanden haben, d.h. dass Unterschiede weder bei den Streuungen s_1, \dots, s_m noch bei den Mittelwerten $\bar{x}_1, \dots, \bar{x}_m$ feststellbar waren, dürfen zu einer einzigen, längeren Messreihe mit den statistischen Daten n , \bar{x} und s zusammengefasst werden. Dabei gilt

$$n = \sum n_i,$$

$$\bar{x} = \frac{\sum n_i \bar{x}_i}{n},$$

$$s = \sqrt{\frac{(n-m)s_{mitt}^2 + (m-1)s_{\bar{x}}^2}{n-1}}.$$

Hinweis: n , \bar{x} , s_{mitt} und $s_{\bar{x}}$ wurden bereits im Verlauf der Einfachen Varianzanalyse berechnet.

[2] **Auswertung verschiedener Experimente zur selben Zufallsvariablen x**

Die Einfache Varianzanalyse zeigt ganz generell, ob die verschiedenen Experimente überhaupt zu unterschiedlichen Ergebnissen (= Erwartungswerten) führen.

Eine besonders häufige Versuchsanordnung ist die Folgende: Man will feststellen, ob die Zufallsvariable

$$x = f(u_1, \dots, u_k, v_1, v_2, \dots)$$

von einem einzelnen u_i , z.B. von u_1 , überhaupt abhängig ist, oder ob u_1 aus der Liste der Einflussgrößen gestrichen werden kann. Dazu betrachtet man x künstlich als Funktion der einen Variablen u_1 und entwirft m verschiedene Experimente, in denen alle u_2, \dots, u_k jedesmal auf denselben Werten konstant gehalten werden sowie alle v_1, v_2, \dots jedesmal innerhalb der gleichen Bandbreiten variieren, nur u_1 setzt man in den m Experimenten auf m verschiedene Werte. Zu jedem Experiment veranstaltet man eine Messreihe.

Ergibt nun die Einfache Varianzanalyse, dass die Nullhypothese anzunehmen ist, so bedeutet das nicht, dass sie richtig ist, sondern lediglich, dass weniger als 95% Wahrscheinlichkeit für die These spricht, dass u_1 irgendeinen Einfluss auf x hat. Ein anderer Ausgang der Einfachen Varianzanalyse gibt an, wie stark/hochgradig der Einfluss von u_1 auf x ist.

Will man das Verhalten von x als Funktion **zweier** Variabler, etwa u_1 und u_2 , studieren, lässt man also in verschiedenen Experimenten beide Variable verschiedene Werte annehmen, so bescheinigt die Einfache Varianzanalyse lediglich, ob sämtliche Experimente zum gleichen Erwartungswert gehören oder nicht. Erweiterte Möglichkeiten ergeben sich mit folgender Versuchsplanung:

8.9. SIMULTANER VERGLEICH VON MEHR ALS ZWEI EMPIRISCHEN MESSREIHEN 179

Man lasse für **zwei** Variable u_1 und u_2 jeweils m_1 bzw. m_2 verschiedene Werte zu. Durch Kombination dieser zulässigen Werte ergeben sich insgesamt $m_1 \cdot m_2$ verschiedene mögliche Experimente. Besitzt man zu jedem davon eine ausreißerfreie Messreihe, sind all diese Messreihen bezüglich der Streuung homogen und wendet man auf ihre statistischen Daten dann einen anderen Test an, die sog. **Doppelte oder Zweifache Varianzanalyse**, so erhält man in einem Arbeitsgang einen Entscheid, ob keine, eine oder jede der zwei folgenden Nullhypothesen zu verwerfen ist: a) Der Wert von u_1 ist ohne Einfluss auf x , b) der Wert von u_2 ist ohne Einfluss auf x .

Kapitel 9

Poissonverteilung und Binomialverteilung

9.1 Allgemeines über Zufallsvariable mit Wertebereich in \mathbb{Z}

In medizinischen Untersuchungen **zählt** man unter dem Mikroskop **die Anzahl k bestimmter Zellen** oder Partikel in Blut/Urin/Lymphe/Zellgewebe **pro Flächeneinheit**, in biologischen Untersuchungen die Anzahl k von Schädlingen/seltenen Spezies pro Flächeneinheit, in chemisch-physikalischen Untersuchungen die Anzahl k gewisser Partikel (z.B. Asbest) in der Luft oder im Wasser **pro Raumeinheit** oder die Häufigkeit k eines gewissen Ereignisses **pro Zeiteinheit** (z.B. das Aussenden eines Heliumions durch ein radioaktives Präparat), in Medizin, Pharmazie, Biologie, Soziologie zählt man das Vorkommen von gewissen Individuen/Ereignissen **pro Population** oder in einer repräsentativen Auswahl dieser Population ...

Das Ergebnis der Untersuchung ist jedesmal die konkret gefundene Anzahl k der gesuchten Phänomene, aber

- entweder bezogen auf ein physikalisches Kontinuum, dessen Größe durch ein **Flächen-, Raum- oder Zeitmaß** angegeben wird,
- oder bezogen auf eine Population oder eine sonstige Gesamtheit, deren Größe durch die **Anzahl n ihrer Elemente** angegeben wird.

Wiederholt man die Auszählung an einer anderen Probe der untersuchten Fläche/des untersuchten Raums/ zu einem anderen Zeitpunkt, oder an einer anderen Auswahl aus der Population, so wird man in der Regel nicht exakt denselben Zahlwert k als Ergebnis bekommen, sondern nur einen ähnlichen, und die Zählergebnisse werden um einen häufigsten Wert herum schwanken, d.h.

k ist eine Zufallsvariable, die allerdings (im Unterschied zu den normalverteilten Zufallsvariablen x , welche innerhalb \mathbb{R} variieren,) nur ganzzahlige Werte ≥ 0 annehmen kann.

Die Auszählung selber ist ein Experiment zur Messung von k , und wenn man dasselbe Experiment n mal durchführt, so erhält man eine Messreihe mit Messwerten k_1, k_2, \dots, k_n und einem Mittelwert \bar{k} , der nach dem 1. Grenzwertsatz¹ für $n \rightarrow \infty$ gegen einen Grenzwert \hat{k} , den Erwartungswert des Experiments strebt.

Schreibkonvention: Während man reellwertige Zufallsvariable üblicherweise mit x und ihren Erwartungswert mit μ bezeichnet, bezeichnet man **ganzzahlige** Zufallsvariable, wie sie bei Auszählungen auftreten und die daher nur nichtnegative Werte $\in \mathbb{Z}$ annehmen können, üblicherweise mit k , ihren Erwartungswert mit λ .

Bei der Feinauswertung der Messreihe k_1, \dots, k_n beginnt man wieder mit der Strichliste, welche die absoluten Häufigkeiten H_j zählt, erhält als 1. Standardisierung ein Säulendiagramm, welches die relativen Häufigkeiten $h_j = \frac{J_j}{n}$ darstellt, und macht sich im Rahmen der 2. Standardisierung dadurch von unterschiedlichen Säulenbreiten unabhängig, dass man die für die ganzzahlige Zufallsvariable k kleinste sinnvolle Säulenbreite, nämlich die Breite 1, wählt², und als Mittelpunkt dieser Achsenabschnitte jedesmal eine ganze Zahl.

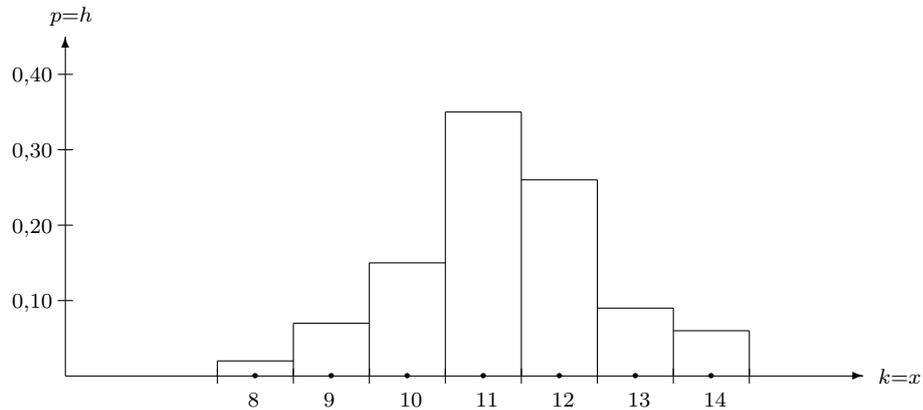


Abbildung 9.1: Graph einer Dichtefunktion bei ganzzahliger Zufallsvariabler k

Nach (7.1) galt ganz allgemein³ $h_j \approx p_j \cdot \Delta x$ für kleine Δx .

Daraus folgt hier wegen $\Delta x = \Delta k = 1$, dass $h_j \approx p_j$ ist für alle j , wobei die Näherungsformel für $n \rightarrow \infty$ gegen Gleichheit strebt, d.h.:

Graph der Dichtefunktion:

Der Graph der Dichtefunktion $z = p(x)$ zu einer Messreihe k_1, \dots, k_n einer ganzzahligen Zufallsvariablen ist gleich der Silhouette eines Säulendiagramms der Säulenbreite 1.

Da jetzt in jedem Abschnitt der waagerechten Achse genau eine ganze Zahl liegt und da h die relative Häufigkeit misst, mit der das Messergebnis in diesen Abschnitt fällt, bedeutet das inhaltlich:

¹siehe 7.2, S.152

²Da ja Zwischenwerte zwischen den ganzen Zahlen bei der Auszählung gar nicht vorkommen, ist eine feinere Säuleneinteilung sinnlos.

³siehe 7.3, S.154

Bedeutung der Dichtefunktion:

Ist $y = p(x)$ die empirische **Dichtefunktion** zu einer Messreihe k_1, \dots, k_n einer ganzzahligen Zufallsvariablen, so gibt $p(k)$ für $k \in \mathbb{Z}$ die relative Häufigkeit an, mit der die Messwerte der Messreihe den Zahlwert k haben.

Ist $y = F(k)$ die Verteilungsfunktion zur Messreihe, so gibt diese per Definition⁴ die relative Häufigkeit an, mit der die Messwerte einer Messreihe einen Zahlwert $\leq k$ haben.

Daraus folgt unmittelbar: Für $a \in \mathbb{Z}$ gilt

$$F(a) = \begin{cases} 0 & \text{falls } a < 0, \\ \sum_{k=0}^a p(k) & \text{falls } a \geq 0. \end{cases}$$

Da nur ganzzahlige Messwerte vorkommen, ist $F(a) = F(a+0,5)$. Betrachtet man den stufenförmigen Graphen von $z = p(x)$ (Abb.9.1, S.182), so erkennt man: Für alle $a \in \mathbb{Z}$ gilt

$$F(a+0,5) = F(a) = \sum_{k=0}^a p(k) = \int_{-\infty}^{a+0,5} p(k)dk$$

wie die ganz allgemein formulierte *Regel 61*⁵ es verlangt.

Sind a und b ganzzahlig, so gilt: Die relative Häufigkeit, mit der die Messwerte der Messreihe einen Zahlwert $a \leq k \leq b$ haben, ist gleich

$$\sum_{k=a}^b p(k) = F(b) - F(a-1).$$

Die Integralschreibweise hierzu erhält man wie folgt: $F(b) - F(a-1) = F(b+0,5) - F(a-0,5) = \int_{a-0,5}^{b+0,5} p(k)dk$.

Nach dem 2. Grenzwertsatz⁶ streben Dichtefunktion und Verteilungsfunktion der empirischen Messreihe für $n \rightarrow \infty$ gegen die Dichtefunktion bzw. Verteilungsfunktion zum Experiment, und das Experiment besteht bei ganzzahliger Zufallsvariabler in einer Auszählung nach einer bestimmten Methode. Somit gilt

Regel 72 (Berechnung von Wahrscheinlichkeiten bei ganzzahliger Zufallsvariabler $k \in \mathbb{Z}$):

R 72

Ist k eine ganzzahlige Zufallsvariable und sind $z = p(x)$ bzw. $y = F(x)$ die Dichtefunktion bzw. Verteilungsfunktion zu einem Experiment, so gilt

$$F(a) = \sum_{k=0}^a p(k) \quad \text{für } a \geq 0, \quad F(a) = 0 \quad \text{für } a < 0.$$

Die Wahrscheinlichkeit, dass bei einer einzelnen Auszählung die Zufallsvariable k den Wert a bzw einen Wert im Bereich $a \leq k \leq b$ annimmt, berechnet sich wie folgt :

$$P(k = a) = p(a),$$

$$P(a \leq k \leq b) = \sum_{k=a}^b p(k) \quad \text{oder auch} \quad P(a \leq k \leq b) = F(b) - F(a-1).$$

In Anlehnung an die Formulierung von *Regel 64*⁷ läßt sich sagen:

$$P(a \leq k \leq b) = \int_{a-0,5}^{b+0,5} p(k)dk = \text{Fläche unter dem Graph der Dichtefunktion im Abschnitt } a-0,5 \leq k \leq b+0,5.$$

⁴siehe 7.3, S.155
⁵siehe 7.3, S.156
⁶siehe 7.3, S.156
⁷siehe 7.3, S.157

Die Dichtefunktionen und zugehörigen Verteilungsfunktionen der meisten ganzzahligen Zufallsvariablen k gehören einer von bloß zwei unterschiedlichen Klassen von Funktionen an, die im Folgenden vorgestellt werden.

Um welche der beiden Klassen es sich im Einzelfall handelt, hängt dabei nicht von der konkreten Zufallsvariablen k ab, sondern bloß davon, ob die mit k betriebene Auszählung sich auf ein physikalisches Kontinuum bezieht, dessen Größe durch ein Flächen-, Raum- oder Zeitmaß beschrieben wird, oder aber auf eine Population oder eine Gesamtmenge von Ereignissen, deren Größe durch die Anzahl n ihrer Elemente beschrieben wird.⁸

9.2 Poissonverteilung

Bezeichnung: *Bezieht sich die Auszählung auf eine Flächen-, Raum- oder Zeiteinheit und ist der Gegenstand der Auszählung in Fläche, Raum und/oder Zeit ungefähr gleichverteilt, so heißt die Zufallsvariable k poissonverteilt⁹, die Dichtefunktion zum Experiment heißt Dichtefunktion zur Poissonverteilung.*

R 73 Regel 73 (Streuung und Dichtefunktion zur Poissonverteilung):

Ist k eine poissonverteilte Zufallsvariable mit Erwartungswert λ , so besitzt k die Streuung

$$\sigma = \sqrt{\lambda}$$

und die Dichtefunktion

$$p_{\lambda}(k) = \frac{\lambda^k}{k!} \cdot e^{-\lambda}.$$

$p_{\lambda}(k)$ ($k = 0, 1, 2, \dots$) ist für vielbenutzte Werte von λ tabelliert¹⁰ worden, aber wenn man nur wenige Werte benötigt, geht es heute mindestens ebenso schnell mit dem Taschenrechner.

Merke: Poissonverteilung gehört zum Experiment **“Zählung der Vorkommnisse eines Ereignisses E pro Flächen- Raum- oder Zeiteinheit,“** wobei der Erwartungswert für die Anzahl gleich λ ist.

Aus den allgemeinen Resultaten des vorigen Paragraphen ergibt sich sofort

R 74 Regel 74 (Berechnung von Wahrscheinlichkeiten bei Poissonverteilung):

Die Dichtefunktion $p_{\lambda}(k) = \frac{\lambda^k}{k!} \cdot e^{-\lambda}$ gibt für jeden festen ganzzahligen Wert $k \geq 0$ die Wahrscheinlichkeit an, daß bei Poissonverteilung eine einzelne konkrete Auszählung die Anzahl k liefert, während der Erwartungswert $= \lambda$ ist.

Die Wahrscheinlichkeit $P(a \leq k \leq b)$, daß bei Poissonverteilung mit Erwartungswert λ eine einzelne Auszählung eine Anzahl $a \leq k \leq b$ liefert, ist gleich der Summe der Einzelwahrscheinlichkeiten, d.h.

$$P(a \leq k \leq b) = \sum_{k=a}^b p_{\lambda}(k) = \left(\sum_{k=a}^b \frac{\lambda^k}{k!} \right) \cdot e^{-\lambda},$$

⁸siehe oben, S.181

⁹Simeon Denis Poisson (1781 - 1840), französischer Mathematiker und Physiker

¹⁰siehe Tabellen zur Statistik, S.232

$$\begin{aligned} \text{ausf\u00fchrlich:} \quad P(a \leq k \leq b) &= \left(\frac{\lambda^a}{a!} + \frac{\lambda^{a+1}}{(a+1)!} + \dots + \frac{\lambda^b}{b!} \right) \cdot e^{-\lambda}, \\ \text{sowie} \quad P(k \leq b) &= P(0 \leq k \leq b) \quad \text{und} \quad P(k \geq a) = 1 - P(0 \leq k \leq a-1). \end{aligned}$$

9.2.1 Rechenbeispiele

Beispiel 1: Die Berechnung von Wahrscheinlichkeiten bei bekanntem Erwartungswert λ und mit selbstberechneten Werten $p_\lambda(k)$:

Auf einer Fläche von 5cm^2 seien tausend Bakterien einer bestimmten Art, in etwa gleichverteilt, vorhanden.

Frage 1: Wie groß ist die Wahrscheinlichkeit, auf einer Teilfläche von 5mm^2 genau 6 Bakterien zu finden?

Hier ist die Zufallsvariable $k = \text{Anzahl der Bakterien auf Teilflächen à } 5\text{mm}^2$.

Lösung: 5mm^2 ist ein Hundertstel von 5cm^2 . Der Erwartungswert von k errechnet sich also zu $\lambda = \frac{1000}{100} = 10$. Die gefragte Wahrscheinlichkeit ist deshalb

$$P(k = 6) = p_\lambda(6) = p_{10}(6) = \frac{10^6}{6!} \cdot e^{-10} \approx 0,063 = 6,3\%.$$

Frage 2: Wie groß ist die Wahrscheinlichkeit, auf irgendeiner Teilfläche von 5mm^2 höchstens 6 Bakterien anzutreffen?

Lösung: Diese Wahrscheinlichkeit ist gleich

$$\begin{aligned} P(0 \leq k \leq 6) &= p_{10}(0) + p_{10}(1) + p_{10}(2) + p_{10}(3) + p_{10}(4) + p_{10}(5) + p_{10}(6) \\ &= \left(\frac{10^0}{0!} + \frac{10^1}{1!} + \frac{10^2}{2!} + \dots + \frac{10^6}{6!} \right) \cdot e^{-10} \\ &= \left(\frac{1}{1} + \frac{10}{1} + \frac{100}{2} + \frac{1000}{6} + \frac{10000}{24} + \frac{100000}{120} + \frac{1000000}{720} \right) \cdot e^{-10} \\ &\approx 2866,556 \cdot e^{-10} \\ &\approx 0,130 \\ &= 13,0\% \end{aligned}$$

Beispiel 2: Eine Methode zur ungefähren Bestimmung des Erwartungswertes λ :

Gegeben sei eine Bakteriensuspension. Die Bakterien seien ungefähr gleichverteilt in der Flüssigkeit, Anzahl unbekannt.

Frage: Wie groß ist die durchschnittliche Anzahl von Bakterien in 1 ml Suspension?

Hier ist die Zufallsvariable $k = \text{Anzahl von Bakterien pro 1 ml Suspension}$. **Gefragt ist nach dem Erwartungswert λ .**

Den Erwartungswert einer Zufallsvariablen k kann man nur schätzen, wenn man eine längere Messreihe ($n \geq 100$) durchgeführt hat. Man braucht also mindestens 100 Proben à 1 ml Suspension.

Die allgemeine Theorie sagt, dass dann der Mittelwert \bar{k} von k_1, \dots, k_n als Näherungswert für λ dienen kann. Um diesen Mittelwert berechnen zu können, müsste man also alle Proben vollständig auszählen, um die Anzahlen k_1, \dots, k_n zu gewinnen, eine äußerst mühselige Zählarbeit.

Sehr viel weniger Zählarbeit erfordert folgendes geschickte Verfahren:

100 Proben à 1 ml Suspension werden auf 100 Nährböden gegeben. Nach angemessener Zeit zählt man lediglich, wie viele der 100 Böden steril geblieben sind (d.h. dass die entsprechende Impfflüssigkeit bakterienfrei war). Man erhalte z.B. 13 sterile Böden. Daraus errechnet man λ wie folgt:

Bei $n = 100$ Proben enthielten 13 Proben $k = 0$ Bakterien. Die Messreihe k_1, \dots, k_{100} ist zahlenmäßig nicht bekannt. Aber man weiss, dass die relative Häufigkeit, mit der in der Messreihe der Wert $k = 0$ auftrat, $= \frac{13}{100} = 0,13$ war. Dies ist aber auch der Wert der empirischen Dichtefunktion¹¹ für $k = 0$. Weil n relativ groß war, ist diese Dichtefunktion schon ungefähr gleich der Poissonschen Dichtefunktion, d.h.

$$0,13 \approx p_\lambda(0) \quad | \text{ mit noch unbekanntem } \lambda$$

$$0,13 = \frac{\lambda^0}{0!} \cdot e^{-\lambda} \quad | \lambda^0 = 1, 0! = 1 \text{ einsetzen}$$

$$0,13 = e^{-\lambda} \quad | \ln$$

$$\ln 0,13 = -\lambda$$

$$-2,04 \approx -\lambda$$

d.h. die mittlere Anzahl von Bakterien in 1 ml Suspension = Erwartungswert $\lambda \approx 2,04$.¹²

Merke: Bei poissonverteilter Zufallsvariabler k kann man den Erwartungswert λ näherungsweise berechnen, indem man mittels einer längeren Messreihe den Wert von $P(k = 0) = p_\lambda(0)$ schätzt.

Beispiel 3: Interpolation bei der Benutzung der Wertetabelle¹³ für $p_\lambda(k)$:

Der Erwartungswert λ hängt noch von der gewählten räumlichen oder zeitlichen Bezugseinheit ab, ist proportional dazu (siehe Beispiel 1, wo λ sich von 1000 auf 10 verkleinert, wenn man nicht cm^2 auszählt, sondern mm^2). Daher kann λ sehr wohl eine gebrochene Zahl werden, obwohl k selbst nur ganzzahlige Werte annimmt (siehe Beispiel 2, $\lambda = 2,04$). Benötigt man z.B. den Zahlwert von $p_\lambda(1)$ für $\lambda = 2,04$, so liefert die Tabelle nur den Wert für $k = 1$ und $\lambda = 2$: $p_2(1) = 0,270671$.

$$\text{Tabellenwert:} \quad p_2(1) \approx 27,07\%$$

Interpolation liefert den verbesserten Wert

$$\begin{aligned} p_{2,04}(1) &\approx p_2(1) + \frac{p_3(1) - p_2(1)}{3 - 2} \cdot (2,04 - 2) \\ &= p_2(1) + (p_3(1) - p_2(1)) \cdot 0,04 \\ &= 0,265819 \end{aligned}$$

$$\text{Interpolierter Wert:} \quad p_{2,04}(1) \approx 26,58\%$$

Den genauesten Wert erhält man allerdings bei Benutzung der Berechnungsformel für $p_\lambda(k)$:

$$p_{2,04}(1) = \frac{2,04^1}{1!} \cdot e^{-2,04} = 2,04 \cdot e^{-2,04} = 0,265259.$$

¹¹siehe 9.1, S.183

¹²Zur Abschätzung des absoluten Fehlers $|\Delta\lambda|$, der bei diesem Verfahren entsteht, siehe 9.5, S.198.

¹³siehe Tabellen zur Statistik, S.232

Formelwert: $p_{2,04}(1) \approx 26,53\%$

Auf ganze Prozente gerundet sind indes alle Ergebnisse gleich 27%.

9.3 Binomialverteilung

9.3.1 Zufallsvariable mit Befund positiv/negativ

Besonders in der Medizin (bei Diagnosen) treten häufig Zufallsvariable x auf, **die keine Zahlen als Wertebereich haben**, sondern bei Messungen nur **zwei mögliche Ergebnisse** liefern, nämlich ja/nein, Befund positiv/negativ. Ein Experiment besteht wieder darin, mit einer festgelegten Methode diesen Befund zu erheben.

Hier ist eine Messreihe zur Variablen x mit n Messwerten schon dadurch vollständig ausgewertet, dass man die **Anzahl k der positiven Befunde** unter n Befunden **auszählt** (= die Häufigkeit). Ist h_n die relative Häufigkeit des positiven Befundes, also

$$h_n = \frac{k}{n}, \quad (9.1)$$

so strebt h_n für $n \rightarrow \infty$ gegen einen **Grenzwert p** .

p = Wahrscheinlichkeit des positiven Befundes für x . ($0 \leq p \leq 1$)

$1 - p$ = Wahrscheinlichkeit des negativen Befundes für x .

Die Werte p und $1 - p$ sind die einzigen Funktionswerte der Dichtefunktion zum Experiment.

Problem der Unabhängigkeit der Messergebnisse:

Bei solchen Zufallsvariablen x mit Befund positiv/negativ kann eine große Schwierigkeit auftreten: Bei einer Messreihe zu x kommt es ja immer darauf an, die Messung wiederholt unter den gleichen Rahmenbedingungen durchzuführen. In der Medizin kann es aber leicht passieren, dass der erste Messbefund die Rahmenbedingungen für eine später durchgeführte 2. Messung verändert.

Bei Erb- und Infektionskrankheiten und allen Krankheitsbefunden mit Folgeschäden ist dies z.B. der Fall: Untersucht man 20 Schüler einer Klasse auf Sehschwäche (x = Sehschwäche ja/nein), so sind die Messbefunde sicherlich unabhängig voneinander. Untersucht man dieselben 20 Schüler auf Windpocken (x = Windpocken ja/nein) und findet man am Montag einen einzigen Erkrankten unter 20, so sind die Rahmenbedingungen für Windpockenuntersuchungen derselben Klasse am Freitag völlig verändert: Die Wahrscheinlichkeit p für den positiven Befund von x ist zwischen Montag und Freitag stark gestiegen. Da eine Zufallsvariable aber immer nur eine Wahrscheinlichkeit p besitzt, welche für sie eine spezifische Konstante ist, werden in dieser Klasse am Montag und am Freitag de facto zwei verschiedene Zufallsvariable gemessen: Am Montag handelte es sich bei x um die Zufallsvariable "Vorkommen von Windpocken in einem gesunden Milieu", am Freitag um eine ganz andere Zufallsvariable, nämlich das "Vorkommen von Windpocken in einem (mehr oder weniger) durchseuchten Milieu".

9.3.2 Theorie der Binomialverteilung

Merke: Im folgenden sei immer unterstellt, dass die Ergebnisse wiederholter Messungen der Zufallsvariablen x mit Befund positiv/negativ sich nicht untereinander beeinflussen können, sondern garantiert **unabhängig voneinander** sind. Das bedeutet mathematisch:
Es wird im Folgenden vorausgesetzt, dass die Wahrscheinlichkeit p für den positiven Befund bei allen Messungen gleich groß ist (d.h. $p = \text{const}$).

Ist nun x eine Zufallsvariable mit konstanter Wahrscheinlichkeit p für den positiven Befund und eine empirischen Messreihe zu x mit n Messungen gegeben, so ist nach (9.1) die relative Häufigkeit des positiven Befunds

$$h_n = \frac{k}{n}.$$

Daraus folgt durch Multiplikation beider Seiten mit n

$$k = h_n \cdot n.$$

Je größer n , umso näher strebt k gegen seinen Erwartungswert λ , zugleich h_n gegen seinen Grenzwert p . Je größer n , umso genauer gilt also die Abschätzung

$$k = h_n \cdot n \approx p \cdot n \tag{9.2}$$

Sei nun für $n \in \mathbb{N}$ ein **fester** Zahlwert gewählt. Betrachtet man zum selben Experiment nun alle erdenklichen Messreihen **derselben festen Länge** n , so gilt zwar stets (9.2), aber h_n schwankt doch zufällig um den Wert p herum. Folglich schwankt k zufällig um den Wert $p \cdot n$ herum.

R 75 Regel 75 (Erwartungswert für die Anzahl k positiver Befunde bei n Messungen):
Sei x eine Zufallsvariable, die nur die Befunde positiv/negativ liefert. Sei p die Wahrscheinlichkeit für den positiven Befund, n eine feste natürliche Zahl und

k = Anzahl der positiven Befunde für x bei einer Messreihe der Länge n .

Dann ist k eine ganzzahlige Zufallsvariable mit dem

$$\text{Erwartungswert } \lambda = p \cdot n \text{ und der Streuung } \sigma = \sqrt{p \cdot (1 - p) \cdot n}$$

*Eine solche Zufallsvariable heißt **binomialverteilt**.*

Hierfür gelten die schon in Kapitel 1 als Beispiel für die Anwendung von Binomialkoeffizienten genannten *Regeln für unabhängig voneinander wiederholte Experimente*¹⁴, die aber jetzt erst beweisbar sind.

R 76 Regel 76 (Unabhängigkeitsregel):
Sind Ereignisse E_1, E_2, \dots, E_k in ihrem Auftreten unabhängig voneinander und ist die Wahrscheinlichkeit für ihr einzelnes Auftreten gleich p_1, p_2, \dots, p_k , so ist die Wahrscheinlichkeit für ihr gemeinsames (kumulatives) Auftreten gleich dem Produkt der Einzelwahrscheinlichkeiten, also gleich $p_1 \cdot p_2 \cdot \dots \cdot p_k$.

R 77 Regel 77 (Dichtefunktion zur Binomialverteilung):

Hat der einzelne positive Befund zu x die Wahrscheinlichkeit p , ($0 \leq p \leq 1$), sind die Befunde voneinander unabhängig und ist die Zufallsvariable k definiert als die Anzahl der positiven Befunde bei n Messungen, so hängt die zu k gehörige Dichtefunktion nicht von der speziellen gemessenen Variablen x ab, sondern **einzig von der Wahrscheinlichkeit p und der Anzahl der Messungen n und lautet**

$$p_{n,p}(k) = \binom{n}{k} \cdot p^k \cdot (1-p)^{n-k} \quad (0 \leq k \leq n).$$

Bezeichnung: $z = p_{n,p}(k)$ heißt die **Dichtefunktion der Binomialverteilung zu den Parametern n und p .**

Beweis von Regel 77: Wir betrachten eine Messreihe zu x mit n durchnummerierten Ergebnissen x_1, \dots, x_n (jedes Ergebnis lautet entweder "positiv" oder "negativ").

Bezeichnet man mit E_j das Ereignis, dass bei der j -ten Messung ein positiver Befund auftritt, dass also $x_j = \text{positiv}$ gilt. Dann haben alle Ereignisse E_j dieselbe Wahrscheinlichkeit $p_j = p$ ($j = 1, 2, \dots, n$).

Analog bezeichne \bar{E}_j das Ereignis, dass bei der j -ten Messung ein negativer Befund auftritt, dass also $x_j = \text{negativ}$ gilt. Dann haben alle Ereignisse \bar{E}_j dieselbe Wahrscheinlichkeit $p_j = 1 - p$ ($j = 1, 2, \dots, n$).

Für die Zufallsvariable k sei nun ein **fester Wert** $a \in \mathbb{Z}$, $0 \leq a \leq n$, betrachtet, es sei also $k = a$. Nach *Regel 72*¹⁵ gibt die Dichtefunktion zum Experiment jeweils gerade die Wahrscheinlichkeit $P(k = a)$ an, im vorliegenden Fall also:

$$p_{n,p}(a) = P(k = a).$$

Um den Wert von $p_{n,p}(a)$ zu bekommen, müssen wir daher die Wahrscheinlichkeit $P(k = a)$ ausrechnen, dass bei n Messungen von x genau a positive Befunde auftreten. Weil nach Voraussetzung die Befunde zu x voneinander unabhängig sind, kann hierzu die Unabhängigkeitsregel angewandt werden:

Die Wahrscheinlichkeit dafür, dass die ersten a Befunde x_1, \dots, x_a positiv sind, die restlichen $(n - a)$ Befunde negativ, ist die Wahrscheinlichkeit dafür, daß bei der Auswertung der Messreihe zu x folgende Ereignisse kumulativ auftreten: $E_1, E_2, \dots, E_a, \bar{E}_{a+1}, \bar{E}_{a+2}, \dots, \bar{E}_n$. Dieses Resultat hat nach der *Unabhängigkeitsregel* die Wahrscheinlichkeit

$$(p_1 \cdot p_2 \cdot \dots \cdot p_a) \cdot (p_{a+1} \cdot p_{a+2} \cdot \dots \cdot p_n)$$

In diesem Produkt haben die ersten a Faktoren alle den Wert p , die restlichen $n - a$ Faktoren alle den Wert $1 - p$. Also ist der Wert dieses Produkts gleich

$$p^a \cdot (1 - p)^{n-a}.$$

Der Fall $E_1, E_2, \dots, E_a, \bar{E}_{a+1}, \bar{E}_{a+2}, \dots, \bar{E}_n$ ist aber nur eine von vielen Varianten, wie es sich ereignen kann, dass bei n Messungen genau a positive Befunde auftreten. Wie viele solche Varianten gibt es? So viele, wie es Möglichkeiten gibt, aus der n -elementigen Menge von

¹⁴siehe 1.2.4, S.11

¹⁵siehe 9.1, S.183

Messungen x_1, \dots, x_n eine genau a -elementige Menge von Messungen herauszugreifen, deren Messergebnisse positiv sein sollen.

Nach der *Kombinatorischen Regel 1*¹⁶ ist die Anzahl der verschiedenen a -elementigen Teilmengen einer n -elementigen Menge gleich $\binom{n}{a}$. Also ist die gefragte Anzahl der Varianten gleich $\binom{n}{a}$, und jede dieser Varianten hat dieselbe Wahrscheinlichkeit $p^a(1-p)^{n-a}$.

Die **Summe** der Wahrscheinlichkeiten aller dieser Varianten, $\binom{n}{a} \cdot p^a(1-p)^{n-a}$, ergibt nun die Wahrscheinlichkeit dafür, dass (egal durch welche Variante) bei n Messungen genau a positive Befunde auftreten. Damit erhalten wir insgesamt:

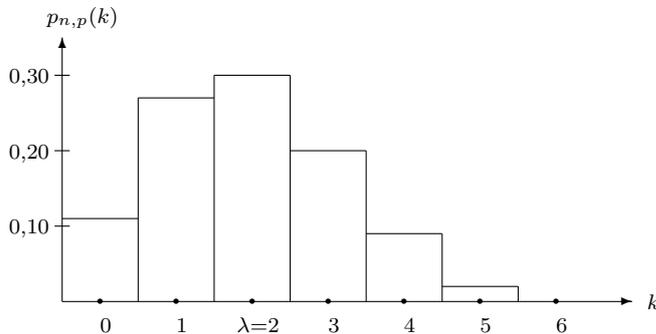
$$p_{n,p}(a) = P(k = a) = \binom{n}{a} \cdot p^a(1-p)^{n-a} \quad \text{für } 0 \leq a \leq n.$$

□

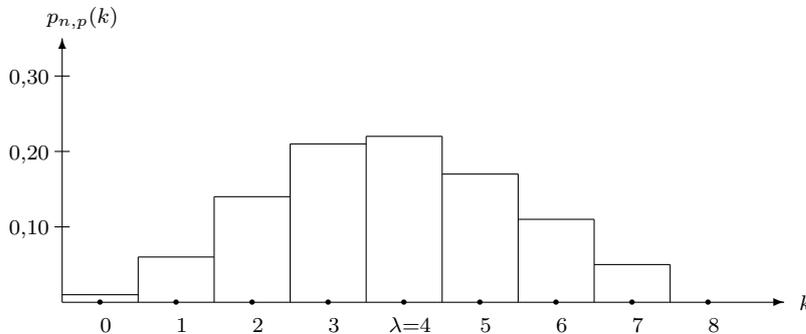
Graphisch veranschaulicht man die Dichtefunktionen der Binomialverteilung durch Säulendiagramme mit Säulen der Breite 1 über den Zahlen $k = 0, 1, \dots, n$.¹⁷

Beispiel: Sei x eine Zufallsvariable mit ja/nein-Befund und der Wahrscheinlichkeit $p = 0,20$ (= 20%) für positiven Befund.

Säulendiagramme der Dichtefunktionen $p_{n,p}(k)$ für $n = 10, 20$ und 40 :



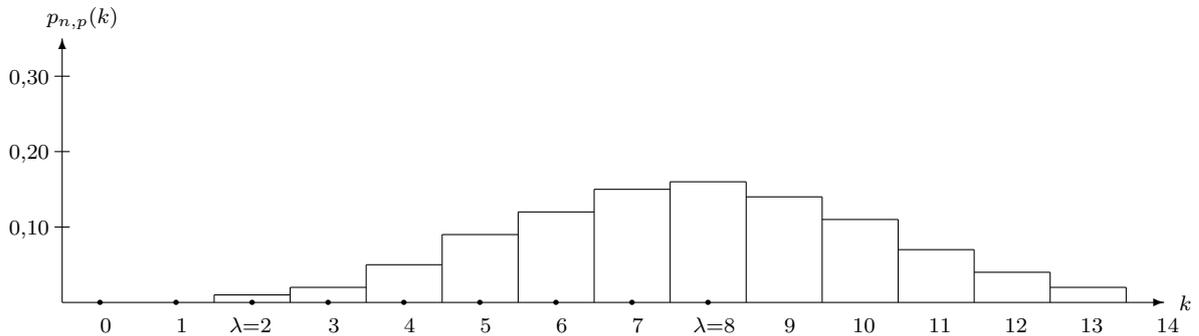
Graph von $p_{n,p}(k)$ für $p = 0,20$ und $n = 10$, Erwartungswert $\lambda = p \cdot n = 2$



Graph von $p_{n,p}(k)$ für $p = 0,20$ und $n = 20$, Erwartungswert $\lambda = p \cdot n = 4$

¹⁶siehe 1.2.3, S.9

¹⁷siehe 9.1, S.182



Graph von $p_{n,p}(k)$ für $p = 0,20$ und $n = 40$, Erwartungswert $\lambda = p \cdot n = 8$

Man sieht,

- dass der Erwartungswert $\lambda = n \cdot p$ stets in dem Abschnitt der k -Achse mit der höchsten Säule liegt, d.h. dass λ der häufigste Wert für k ist,
- wie der Erwartungswert $\lambda = n \cdot p$ bei gleichbleibendem p mit wachsendem n mitwächst, so dass sich das Säulendiagramm immer weiter nach rechts verschiebt,
- dass das Diagramm mit wachsendem n immer flacher und breiter, aber zugleich auch immer symmetrischer wird, mit senkrechter Symmetrieachse bei $k = \lambda$.

Aus der allgemeinen *Regel 72*¹⁸ folgt die konkrete Regel für den Fall der Binomialverteilung:

Regel 78 (Berechnung von Wahrscheinlichkeiten bei Binomialverteilung):

R 78

Ist x eine Zufallsvariable mit ja/nein-Befund, hat der einzelne positive Befund zu x die Wahrscheinlichkeit p , ($0 \leq p \leq 1$), sind die Befunde voneinander unabhängig und ist die Zufallsvariable k definiert als die Anzahl der positiven Befunde bei n Messungen, so gilt:

Die Dichtefunktion $p_{n,p}(k) = \binom{n}{k} p^k (1-p)^{n-k}$ gibt für jeden festen ganzzahligen Wert $k \geq 0$ die Wahrscheinlichkeit an, dass eine einzelne empirische Messreihe der Länge n zu x genau k positive Befunde ergibt.

Die Wahrscheinlichkeit $P(a \leq k \leq b)$, dass eine solche Messreihe eine Anzahl $a \leq k \leq b$ liefert, ist gleich der Summe der Einzelwahrscheinlichkeiten, d.h.

$$P(a \leq k \leq b) = \sum_{k=a}^b p_{n,p}(k) = \sum_{k=a}^b \binom{n}{k} p^k (1-p)^{n-k},$$

ausführlich:

$$P(a \leq k \leq b) = \binom{n}{a} p^a (1-p)^{n-a} + \binom{n}{a+1} p^{a+1} (1-p)^{n-a-1} + \dots + \binom{n}{b} p^b (1-p)^{n-b} \quad (9.3)$$

sowie $P(k \leq b) = P(0 \leq k \leq b)$ und $P(k \geq a) = 1 - P(0 \leq k \leq a-1)$.

Die Formel (9.3) für die Binomialverteilung ist ziemlich umständlich zu berechnen, insbesondere wenn p besonders klein und/oder n sehr groß ist, oder auch, wenn die Summe über viele Summanden gebildet werden muss.

Da ist es gut zu wissen, dass sie unter gewissen Voraussetzungen durch die Formel für die Poissonverteilung¹⁹ oder durch die Formel für die $N(\lambda; \sigma)$ -Verteilung ersetzt werden kann:

¹⁸siehe 9.1, S.183

¹⁹siehe 9.2, S.184, *Regel 74*

9.3.3 Seltene Ereignisse: Poisson- statt Binomialverteilung

Je seltener ein positiver Befund ist, umso mehr Messungen zu x müssen stattfinden, damit dieses Ereignis überhaupt einmal eintritt: Wenn $p \leq 1$ Prozent ist, muss schon $n \geq 300$ sein, damit der Erwartungswert $\lambda = p \cdot n$ wenigstens $= 3$ ist, wenn $p \leq 1$ Promille ist, muss $n \geq 3\,000$ sein usw.

Die Berechnung von Wahrscheinlichkeiten mit *Regel 78* kann dann für Mensch und Taschenrechner äußerst arbeitsaufwendig werden, evtl. sogar die Rechnerkapazität sprengen.

Gerade in der Medizin und Pharmakologie muss aber die Wahrscheinlichkeit von seltenen Ereignissen (Komplikationen, Nebenwirkungen, Spätfolgen von Medikationen u.a.) besonders oft berechnet werden. Da macht man sich folgende Gesetzmäßigkeit zunutze: Wenn die Population, auf die sich die Wahrscheinlichkeit bezieht, sehr groß ist (n vier, fünf, sechsstellig oder größer), und das seltene Ereignis sich darin ungefähr gleichverteilt, dann verhält sich dieses Ereignis statistisch wie ein Teilchen im physikalischen Raum, d.h. die Zufallsvariable k zur Auszählung des Ereignisses ist poissonverteilt!

Der Übergang von k aus einer binomialverteilten in eine poissonverteilte Zufallsvariable ist gleitend. Mathematisch gesprochen drückt sich dieses Phänomen so aus:

R 79 Regel 79 (1. Grenzwertregel für die Binomialverteilung):

Sei $\lambda = p \cdot n$ der Erwartungswert für die binomialverteilte Zufallsvariable k . **Je kleiner p** (etwa $\leq 0,01$) **und je größer n** , umso mehr strebt die Dichtefunktion

$$z = p_{n,p}(k) \text{ der Binomialverteilung}$$

gegen die Dichtefunktion

$$z = p_{\lambda}(k) = \frac{\lambda^k}{k!} \cdot e^{-\lambda} \text{ der Poissonverteilung.}$$

Als praktische Nutzenanwendung erhält man

R 80 Regel 80 (Schätzregel für seltene Ereignisse):

Ist x eine Zufallsvariable mit ja/nein-Befund, ist der positive Befund zu x selten ($p \leq 0,01$), sind die Befunde voneinander unabhängig, ist die Zufallsvariable k definiert als die Anzahl der positiven Befunde bei n Messungen und ist

$$\lambda = p \cdot n \text{ der Erwartungswert für } k,$$

so ist $P(k = a)$ bzw. $P(a \leq k \leq b)$ **bequem und in guter Näherung berechenbar durch**

$$P(k = a) \approx p_{\lambda}(k) = \frac{\lambda^k}{k!} \cdot e^{-\lambda} \quad \text{bzw.}$$

$$P(a \leq k \leq b) \approx \left(\frac{\lambda^a}{a} + \frac{\lambda^{a+1}}{(a+1)!} + \dots + \frac{\lambda^b}{b} \right) \cdot e^{-\lambda}.$$

Am Beispiel $\lambda = 2$ soll nachfolgend gezeigt werden, wie der in *Regel 79* genannte Grenzprozess konkret abläuft:

Es sind kolonnenweise die Wertetabellen einiger binomialer Dichtefunktionen $z = p_{n,p}(k)$ mit demselben Erwartungswert $\lambda = p \cdot n = 2$ aufgeführt. Simultan mit $p \rightarrow 0$ findet $n \rightarrow \infty$ statt (weil $n = \frac{2}{p}$).

Dabei kann man beobachten, dass

$$p_{n,p} \xrightarrow{n \rightarrow \infty} p_\lambda = p_{n \cdot p}$$

$\lambda = 2$	$p_{n,p}(k)$					$\dots \longrightarrow$	$p_\lambda(k)$
p	0,50	0,20	0,10	0,05	0,01	$\dots \longrightarrow$	0
n	4	10	20	40	200	$\dots \longrightarrow$	∞
k							
0	0,062 500	0,107 374	0,121 577	0,128 512	0,133 980	$\dots \longrightarrow$	0,135 335
1	0,250 000	0,268 435	0,270 170	0,270 552	0,270 666	$\dots \longrightarrow$	0,270 671
2	0,375 000	0,301 990	0,285 180	0,277 672	0,272 033	$\dots \longrightarrow$	0,270 671
3	0,250 000	0,201 327	0,190 120	0,185 114	0,181 355	$\dots \longrightarrow$	0,180 447
4	0,062 500	0,088 080	0,084 498	0,090 122	0,090 220	$\dots \longrightarrow$	0,090 224
5		0,026 424	0,031 921	0,034 151	0,035 723	$\dots \longrightarrow$	0,036 089
6		0,005 505	0,008 276	0,010 485	0,011 727	$\dots \longrightarrow$	0,012 030
7		0,000 786	0,001 970	0,002 680	0,003 283	$\dots \longrightarrow$	0,003 437
8		0,000 090	0,000 356	0,000 582	0,000 800	$\dots \longrightarrow$	0,000 859
9		0,000 004	0,000 053	0,000 109	0,000 172	$\dots \longrightarrow$	0,000 191
10			0,000 006	0,000 018	0,000 033	$\dots \longrightarrow$	0,000 038
11				0,000 003	0,000 006	$\dots \longrightarrow$	0,000 007
12					0,000 001	$\dots \longrightarrow$	0,000 001

9.3.4 Viele Messungen: Normal- statt Binomialverteilung

Sei k wieder eine binomialverteilte Zufallsvariable mit Erwartungswert $\lambda = p \cdot n$ und Streuung $\sigma = \sqrt{p \cdot (1 - p) \cdot n}$. Ganz unabhängig davon, ob p klein, der positive Befund also selten ist, oder nicht, gilt:

Mit wachsender Anzahl von Messungen n wird sowohl der Erwartungswert λ als auch die Streuung σ immer größer. Da kann schnell z.B. eine Frage wie die Folgende aufkommen:

Beispiel:

Die Wahrscheinlichkeit für den positiven Befund bei einer Messung sei $p = 0,22$. Wie wahrscheinlich ist es, dass bei $n = 378$ Messungen die Anzahl k der positiven Befunde zwischen 91 und 120 liegt? Nach *Regel 78*²⁰ muss dazu

$$P(91 \leq k \leq 120) = \sum_{k=91}^{120} \binom{378}{k} 0,22^k \cdot 0,78^{378-k}$$

berechnet werden, eine Summe mit 30 (!) unangenehm zu berechnenden Summanden.

²⁰siehe 9.3, S.191

Eine große Erleichterung bietet in dieser Situation die

R 81 Regel 81 (2. Grenzwertregel für die Binomialverteilung):

Sei k eine binomialverteilte Zufallsvariable mit Erwartungswert $\lambda = p \cdot n$ und Streuung

$$\sigma = \sqrt{p \cdot (1-p) \cdot n}$$

Je größer σ (etwa $\sigma > 3$, was gleichbedeutend ist mit $n > \frac{9}{p(1-p)}$), umso mehr strebt die Verteilungsfunktion der Binomialverteilung

$$P(k \leq a) = \sum_{k=0}^a \binom{n}{k} p^k (1-p)^{n-k}$$

gegen die Verteilungsfunktion der $N(\lambda; \sigma)$ -Verteilung

$$P(k \leq a) = \Phi\left(\frac{a - \lambda}{\sigma}\right).$$

Für die Praxis folgt daraus

R 82 Regel 82 (Schätzregel für zahlreiche Messungen):

Ist x eine Zufallsvariable mit ja/nein-Befund, sind die Befunde voneinander unabhängig, ist die Zufallsvariable k definiert als die Anzahl der positiven Befunde bei n Messungen und ist die **Bedingung**

$$n > \frac{9}{p(1-p)}$$

erfüllt, so berechne

$$\lambda = p \cdot n$$

sowie

$$\sigma = \sqrt{\lambda \cdot (1-p)}.$$

Dann gilt in guter Näherung

$$P(a \leq k \leq b) \approx \Phi\left(\frac{b - \lambda}{\sigma}\right) - \Phi\left(\frac{a - 1 - \lambda}{\sigma}\right).$$

Gelegentlich sind die Bedingungen “seltenes Ereignis“ ($p \leq 0,01$) und “zahlreiche Messungen“ ($n > \frac{9}{p(1-p)}$) beide erfüllt. Dann stellt sich die Frage, welche Schätzregel vorteilhafter, d.h. bequemer in der Anwendung ist. Als ungefähre Richtlinie kann gelten:

- Ist $P(k = a)$ zu berechnen oder $P(a \leq k \leq b)$ mit nahe beieinander liegenden a und b , so dass die Summe $\sum_{k=a}^b$ nicht viel mehr als 3 bis 5 Summanden umfasst, so macht die Schätzregel mittels Poissonverteilung wahrscheinlich weniger Arbeit.
- Die Anwendung der Schätzregel mittels Normalverteilung ist hingegen immer vorteilhafter, wenn andernfalls sehr viele Summanden $p_{\lambda}(k)$ oder gar $p_{n,p}(k)$ berechnet und addiert werden müssten.

Anwendung auf das eingangs genannte Beispiel:

Aus $p = 0,22$ und $n = 378$ folgt

$$\lambda = 0,22 \cdot 378 = 83,16 \text{ und } \sigma = \sqrt{0,22 \cdot 0,78 \cdot 378} = \sqrt{64,8648} \approx 8,054.$$

Also ist *Regel 82* anwendbar.

$$\text{Aus } a = 91 \text{ folgt } \Phi\left(\frac{a - \lambda}{\sigma}\right) = \Phi\left(\frac{91 - 83,16}{8,054}\right) = \Phi(0,97) = 0,8340$$

Aus $b = 120$ folgt $\Phi\left(\frac{b - \lambda}{\sigma}\right) = \Phi\left(\frac{120 - 83,16}{8,054}\right) = \Phi(4,57)$. Dieser Wert ist größer als der größte Tabellenwert $\Phi(3,62) = 0,9999$, und kann damit ≈ 1 gesetzt werden.

Damit ergibt sich insgesamt $P(91 \leq k \leq 120) \approx 1 - 0,8340 = 0,166 = 16,6\%$.

9.4 Schätzung von unbekanntem p bei Binomialverteilung

Sei x eine Zufallsvariable, die nur die Befunde positiv/negativ liefert und p die konstante, aber unbekannte Wahrscheinlichkeit des positiven Befunds.

Macht man eine Messreihe mit n Messungen und ist dabei H_n die Anzahl der positiven Befunde, so weiß man zwar, dass die relative Häufigkeit

$$h_n = \frac{H_n}{n}$$

für $n \rightarrow \infty$ gegen den Grenzwert p strebt, aber wie weit ist dieser Näherungswert für p im konkreten Fall noch von p entfernt?

Bezeichnung: Ist γ eine beliebige Wahrscheinlichkeit mit $0 < \gamma < 1$, so gibt es Zahlen a und $\varepsilon > 0$ derart, dass p mit der Sicherheit γ im Bereich

$$a - \varepsilon \leq p \leq a + \varepsilon$$

liegt. Dieser Bereich heißt **ein Vertrauensbereich für p zur Sicherheit γ** .

In diesem Fall ist a ein Näherungswert für p , und mit der Sicherheit γ gilt für den absoluten Fehler

$$|\Delta p| = |a - p| = \varepsilon.$$

Regel 83 (Schätzregel für unbekanntes p):

Ist H_n die Anzahl der positiven Befunde bei n Messungen, so berechnet sich der Vertrauensbereich für p zu einer beliebigen Sicherheit γ

$$a - \varepsilon \leq p \leq a + \varepsilon$$

wie folgt:

1. Schritt: Berechne $\frac{1 + \gamma}{2}$

2. Schritt: *Schlage in der Φ -Tabelle denjenigen x -Wert nach, für den*

$$\Phi(x) = \frac{1 + \gamma}{2}$$

ist und nenne diesen x -Wert gleich c .

Hinweis: Für $\gamma = 0,95$ ist $c = 1,96$, für $\gamma = 0,99$ ist $c = 2,576$, für $\gamma = 0,999$ ist $c = 3,30$.

3. Schritt: *Berechne*

$$a = \frac{H_n + 0,5 \cdot c^2}{n + c^2} \quad (= \text{Näherungswert für } p)$$

sowie

$$\varepsilon = \frac{c}{n + c^2} \cdot \sqrt{\frac{H_n \cdot (n - H_n)}{n} + \frac{c^2}{4}} \quad (= |\Delta p|).$$

Zusatz:

- *Stets ist mit der Sicherheit γ*

$$|\Delta p| = |a - p| \leq \frac{c}{2\sqrt{n + c^2}}.$$

- *Ist $p \leq 0,10$ und $n \geq 100$, so gilt mit der Sicherheit γ die schärfere Abschätzung*

$$|\Delta p| = |a - p| \leq \frac{c}{\sqrt{n}} \cdot \sqrt{0,09 + \frac{c^2}{400}}.$$

Der Zusatz gestattet folgende

Anwendung:

Um zu wissen, wie groß die Anzahl n der Messungen gewählt werden muss, damit der wahre Wert von p vom Schätzwert a mit der Sicherheit γ um höchstens $\pm \frac{x}{100}$ abweicht, berechnet man n je nach Sachlage aus einer der beiden Bestimmungsgleichungen

$$\frac{c}{2\sqrt{n + c^2}} = \frac{x}{100}$$

oder, wenn $p \leq 0,10$ und $n \geq 100$,

$$\frac{c}{\sqrt{n}} \cdot \sqrt{0,09 + \frac{c^2}{400}} = \frac{x}{100}.$$

Man errechnet, dass es in jedem Fall genügt,

$$n = \left(\frac{2500}{x^2} - 1 \right) \cdot c^2$$

Messungen zu machen.

Ist voraussichtlich $p \leq 0,10$ und wählt man bestimmt $n \geq 100$, so ergibt sich, dass schon die kleinere Anzahl

$$n = \frac{c^2}{x^2} \cdot (90 + 10 \cdot c^2)$$

von Messungen ausreicht.

Beispiel: Es soll das Risiko p einer gewissen Nebenwirkung eines Medikaments so genau eingeschätzt werden, dass mit 99% Sicherheit das wahre Risiko vom Schätzwert um höchstens $\pm 0,5\%$ abweicht.

Hier ist $\gamma = 0,99$, also $c = 2,576$ und $x = 0,5$. Es genügt daher jedenfalls, an

$$n = \left(\frac{2500}{0,5^2} - 1 \right) \cdot 2,576^2 \approx 66351$$

Patienten das Medikament zu verabreichen und dabei die absolute Häufigkeit H_n der fraglichen Nebenwirkung zu ermitteln.

Sodann errechnet man den gesuchten Schätzwert für das Risiko nach *Regel 83*:

$$p \approx a = \frac{H_n + 0,5 \cdot c^2}{n + c^2} \approx \frac{H_n + 3,3}{66356,6}.$$

Sei z.B. bei 995 der 66351 Patienten die fragliche Nebenwirkung aufgetreten. Dann ist also

$$p \approx a \approx \frac{995 + 3,3}{66356,6} \approx 0,01504$$

und mit *Regel 83* folgt für den absoluten Fehler mit 99% Sicherheit:

$$\begin{aligned} |\Delta p| &= \varepsilon = \frac{c}{n+c^2} \cdot \sqrt{\frac{H_n \cdot (n-H_n)}{n} + \frac{c^2}{4}} \\ &\approx \frac{2,576}{66356,6} \cdot \sqrt{\frac{995 \cdot 65356}{66351} + 1,66} \\ &\approx \frac{2,576}{66356,6} \cdot \sqrt{980,08 + 1,66} \\ &\approx \frac{80,7}{66356,6} \\ &\approx 0,00122 \end{aligned}$$

Der tatsächlich gemachte absolute Fehler erweist sich im vorliegenden Fall als noch kleiner als die geforderten 0,5%: Er beträgt de facto nur 0,12%. (Dieses erfreuliche Phänomen tritt umso deutlicher auf, je näher p bei 0 oder bei 1 liegt.) Die Auswertung der Messreihe bringt somit folgendes Ergebnis: Das Risiko für die untersuchte Nebenwirkung liegt mit 99% Sicherheit zwischen 1,382% und 1,626%.

Ist aufgrund von Erfahrungen mit dem Medikament schon im Voraus die Vermutung erlaubt, dass das Risiko p höchstens 10% beträgt, so kann man die erforderliche Anzahl wesentlich günstiger wie folgt berechnen:

$$n = \frac{c^2}{x^2} \cdot (90 + 10 \cdot c^2) = \frac{2,576^2}{0,25} \cdot (90 + 10 \cdot 2,576^2) \approx 4150,2$$

Man macht also nur eine Messreihe mit $n = 4151$ Patienten und ermittelt hierfür die Häufigkeit H_n der Nebenwirkung. Ergäbe sich tatsächlich auch eine relative Häufigkeit von rund 1,5%, also beispielsweise eine absolute Häufigkeit von $H_n = 64$ Fällen, so erhielte man

$$p \approx a = \frac{H_n + 0,5 \cdot c^2}{n + c^2} \approx 0,01619 = 1,619\%$$

sowie $|\Delta p| = \frac{c}{n+c^2} \cdot \sqrt{\frac{H_n \cdot (n-H_n)}{n} + \frac{c^2}{4}} \approx 0,00498 = 0,489\%$

d.h., der absolute Fehler von p bleibt jetzt nur noch ganz knapp unter der geforderten Schranke von 0,5%.

Aus dem Beispiel kann man einen pauschalen Zusammenhang zwischen der Länge der Messrei-

he und der Größe des absoluten Fehlers ersehen: Bei der langen Messreihe mit $n = 66351$ war n rund 16 mal so groß wie bei der kürzeren mit $n = 4151$. Der absolute Fehler war hingegen mit 0,12% nur 1/4 so groß wie der der kürzeren Reihe. Dahinter steht ein allgemeineres Gesetz:

Merke: Will man den absoluten Fehler bei der Schätzung von p um den Faktor $1/m$ verkleinern, so muss man die Anzahl der Messungen um den Faktor m^2 vergrößern.

9.5 Schätzung von unbekanntem λ bei Poissonverteilung

Sei eine poissonverteilte Zufallsvariable k gegeben, bezogen auf eine fest vorgegebene Raum-Zeiteinheit ("RZE"). Ihr Erwartungswert λ sei unbekannt.

Wir wissen, dass

$$p_\lambda(0) = e^{-\lambda} \quad (9.4)$$

ist, also kann man λ näherungsweise ausrechnen, wenn man $p_\lambda(0)$ näherungsweise kennt.²¹ Hier soll die Frage des dabei auftretenden absoluten Fehlers $|\Delta\lambda|$ untersucht werden.

Sei x die ja/nein-Zufallsvariable, ob die Auszählung einer Portion der RZE im konkreten Einzelfall ja oder nein den Wert $k = 0$ ergibt, und p die (unbekannte) Wahrscheinlichkeit des positiven Befundes. Damit ist $1 - p$ die Wahrscheinlichkeit, dass die Auszählung im Einzelfall eine Anzahl $k \geq 1$ ergibt. Es gilt die Gleichung

$$p = p_\lambda(0). \quad (9.5)$$

Nun macht man eine Messreihe, in der für n Portionen der RZE nicht die Anzahlen k_1, \dots, k_n korrekt ausgezählt werden (das wäre eine Auswertung der Messreihe für die poissonverteilte Zufallsvariable k , und es wäre sehr viel Zählerarbeit), sondern wo pro Portion lediglich überprüft wird, ob, ja oder nein, die Anzahl $k = 0$ vorliegt (= Auswertung der Messreihe für die ja/nein-Zufallsvariable x : Sobald erkennbar wird dass $k \geq 1$ ist, ist die Portion fertig überprüft). Sei H_n die Anzahl der positiven Befunde für x .

Jetzt kann man mit der *Schätzregel für unbekanntes p* ²² einen Schätzwert für p und den zugehörigen absoluten Fehler $|\Delta p|$ mit jeder gewünschten Sicherheit γ bestimmen. Außerdem kann man mittels des Zusatzes zu dieser Regel vorausberechnen, wie groß die Anzahl n der Messungen sein muss, um die gewünschte Genauigkeit mit der gewünschten Sicherheit γ garantiert zu erzielen.

Sind nun p und $|\Delta p|$ mit der gewünschten Sicherheit γ ausgerechnet, so folgt aus (9.4) und (9.5) $p = e^{-\lambda}$, also

$$\lambda = -\ln p \quad (9.6)$$

Nach *Regel 16*²³ für Fehlerfortpflanzung bei einer ungenauen Variablen gilt

$$|\Delta\lambda| = \left| \frac{d\lambda}{dp} \right| \cdot |\Delta p|.$$

²¹siehe das Rechenbeispiel in 9.2.1, S.185

²²siehe *Regel 83* in 9.4, S.195

²³siehe 4.5.2, S.55

Angewandt auf (9.6) ergibt sich hieraus

$$|\Delta\lambda| = \frac{1}{p} \cdot |\Delta p| \quad (9.7)$$

In (9.6) und (9.7) besitzt man nun Formeln zur Berechnung von λ samt dem absoluten Fehler $|\Delta\lambda|$ zur gewünschten Sicherheit γ .

Die Größe der Raum-Zeiteinheit RZE kann man ja frei wählen. Aus (9.7) ist ersichtlich, was zweckmäßig ist:

$|\Delta\lambda|$ ist antiproportional zu p . Damit $|\Delta\lambda|$ möglichst klein bleibt, sollte also $p = p_\lambda(0)$ möglichst groß sein. Das erreicht man dadurch, dass man die Raum-Zeiteinheit so klein wie technisch möglich wählt. Hiermit wird zugleich der Arbeitsaufwand zur Feststellung, ob, ja oder nein, der positive Befund $k = 0$ eingetreten ist, möglichst klein gehalten.

Gleichzeitig bewirkt eine solche Wahl der Raum-Zeiteinheit natürlich auch, dass der Erwartungswert λ für k klein wird, im Allgemeinen einstellig. Hieraus erklärt sich wiederum, wieso gedruckte Wertetabellen für die Dichtefunktion $p_\lambda(k)$ sich auf den Bereich $0,1 \leq \lambda \leq 9$ beschränken.

Kapitel 10

Tests für beliebige Zufallsvariable

10.1 Der Chi-Quadrat-Anpassungstest

Sei x eine ganz beliebige Zufallsvariable, deren Dichtefunktion nicht oder nicht genau bekannt ist.

Beispiel: Es seien z.B. mittels einer Messreihe mit n , \bar{x} und s erste Schätzwerte für den Erwartungswert \hat{x} zum Experiment und für die Streuung σ zur Messmethode bekannt. Nun soll hiermit die Dichtefunktion aufgestellt werden, aber es sei noch unklar, ob die Schätzwerte wirklich gut genug dafür sind, eine passende Formel zu liefern.
Oder es sei sogar noch unklar, ob x normalverteilt oder poissonverteilt oder binomialverteilt ist oder keins von diesen.

In solchen Fällen stellt man probenhalber, also als Hypothese, eine Formel oder eine Wertetabelle für die Dichtefunktion auf und überprüft dann anhand einer Messreihe zu x mit n Messungen x_1, \dots, x_n und dem nachfolgenden Test, ob und mit welcher Sicherheit diese Hypothese zu verwerfen oder anzunehmen ist.

Der χ^2 -Anpassungstest:

1. Schritt: Zunächst wird zur Auswertung der gegebenen Messreihe eine Strichliste vorbereitet wie folgt:

- Der Wertevorrat von x wird in endlich viele Abteilungen E_1, \dots, E_r eingeteilt derart, dass jedes überhaupt nur denkbare Messergebnis zu x in genau eine Abteilung E_i fällt (in Symbolen: $x \in E_i$).
- Anhand der hypothetischen Dichtefunktion werden die Wahrscheinlichkeiten

$$P(x \in E_i) = p_i \quad (i = 1, \dots, r)$$

vorausberechnet. (Zur Kontrolle überprüft man, dass sich tatsächlich $\sum p_i = 1$ ergibt.)

- Es muss die Bedingung

$$n \cdot p_i \geq 5 \quad \text{für alle } i$$

erfüllt sein. Trifft dies auf einzelne Abteilungen E_i nicht zu, so sind sie mit anderen zu wenigeren größeren Abteilungen geeignet zusammenzufassen, oder die Anzahl n der Messungen ist so weit zu erhöhen, bis die Bedingung für alle i erfüllt ist.

2. Schritt: Man trägt die Messergebnisse x_1, \dots, x_n in die so vorbereitete Strichliste ein und ermittelt die absoluten Häufigkeiten

$$H_i = \text{Anzahl der Striche in der Abteilung } E_i \quad (i = 1, \dots, r).$$

3. Schritt: Berechne die Prüfgröße

$$\chi^2 = \sum_{i=1}^r \frac{(H_i - n \cdot p_i)^2}{n \cdot p_i} = \sum_{i=1}^r \frac{H_i^2}{n \cdot p_i} - n$$

4. Schritt: Berechne den "Freiheitsgrad" f wie folgt:

- Besagt die Hypothese, dass x normalverteilt ist mit einer Glockenfunktion als Dichtefunktion, hat man Schätzwerte für μ und σ benutzt und die p_i mit Hilfe der Φ -Tabelle berechnet, so wähle

$$f = r - 3,$$

- besagt die Hypothese, dass x poissonverteilt ist, hat man einen Schätzwert für λ benutzt und die p_i mit Hilfe der Funktion $p_\lambda(k)$ berechnet, so wähle

$$f = r - 2,$$

- besagt die Hypothese, dass x binomialverteilt ist, hat man einen Schätzwert für p benutzt und die p_i mit Hilfe der Funktion $p_{n,p}(k)$ berechnet, so wähle

$$f = r - 2,$$

- trifft keiner dieser Fälle zu und hat man die p_i -Werte frei geschätzt mit der einzigen Zusatzbedingung, dass $\sum p_i = 1$ ergibt, so wähle

$$f = r - 1.$$

5. Schritt: Schlage für dieses f in der χ^2 -Tabelle¹ nach und vergleiche χ^2 mit tab- χ^2 .

Auswertung:

- Ist $\chi^2 \leq \text{tab-}\chi^2(95\%)$, so ist durch den Test die Falschheit der Nullhypothese nicht feststellbar. Es darf also angenommen werden, dass die benutzte Dichtefunktion zutreffend ist (ohne dass der Test die Richtigkeit dieser Annahme bestätigen kann!).

¹siehe Tabellen zur Statistik, S.234

- Ist $\chi^2 > \text{tab-}\chi^2(95\%)$, so ist die Hypothese **wahrscheinlich** falsch, also die benutzte Dichtefunktion unzutreffend.
- Ist $\chi^2 > \text{tab-}\chi^2(99\%)$, so ist die Hypothese **signifikant** falsch, also die benutzte Dichtefunktion unzutreffend.
- Ist $\chi^2 > \text{tab-}\chi^2(99,9\%)$, so ist die Hypothese **hochsignifikant** falsch, also die benutzte Dichtefunktion unzutreffend.

Erläuterung: Ist der Zahlwert von p_i zutreffend angesetzt worden, so strebt für $n \rightarrow \infty$ die relative Häufigkeit $\frac{H_i}{n}$ gegen die Wahrscheinlichkeit p_i , die absolute Häufigkeit H_i also gegen den Wert $n \cdot p_i$. Das Größenverhältnis $\frac{|H_i - n \cdot p_i|}{n \cdot p_i}$ ist somit der relative Abstand zwischen H_i und $n \cdot p_i$, auch der relative Fehler, den man macht, wenn man den einen durch den anderen Wert ersetzt, und muss umso kleiner werden, je größer n ist. Die Größe

$$\chi = \sqrt{\sum_{i=1}^r \frac{(H_i - n \cdot p_i)^2}{n \cdot p_i}}$$

ist also ein Fehlermaß: Sie misst die Summe der relativen Fehler ($i = 1, \dots, r$). Führt der Test zu einer Ablehnung der Nullhypothese, so gehört der größte der r Summanden zu demjenigen p_i , das am schlechtesten zur Sachlage passt. Genauer gilt:

Merke: Stimmt die Nullhypothese im Anpassungstest, so strebt jeder Summand und damit auch χ^2 für $n \rightarrow \infty$ gegen Null. Ist ein p_i -Wert falsch, so wächst der zu H_i gehörige Summand ungefähr proportional zu n .

10.2 Der Chi-Quadrat-Unabhängigkeitstest

Zwei beliebige Zufallsvariable x und y heißen **unabhängig**², wenn für alle a, b, c, d stets gilt

$$P(a \leq x \leq b \text{ und zugleich } c \leq y \leq d) = P(a \leq x \leq b) \cdot P(c \leq y \leq d).$$

Es ist wissenschaftlich üblich, je zwei beliebige Zufallsvariable x und y a priori zunächst einmal als unabhängig anzusehen (= sog. "Nullhypothese"), und zwar so lange, bis mit der gewünschten Sicherheit (i.a. 99%) das Gegenteil erwiesen ist.

Der Chi-Quadrat-Unabhängigkeitstest prüft anhand einer Messreihe mit n Messungen, ob die Nullhypothese der Unabhängigkeit für zwei Zufallsvariable abgelehnt werden kann. Theoretisch gesehen ist er ein Abkömmling des Anpassungstests, in der praktischen Handhabung jedoch eigenständig.

1. Schritt: Wie beim Chi-Quadrat-Anpassungstest wird der Wertevorrat von x in r Klassen E_1, \dots, E_r eingeteilt, analog der Wertevorrat von y in m Klassen E'_1, \dots, E'_m . Misst man nun bei jeder Einzelmessung sowohl den Wert von x wie den von y ,

²vergleiche die *Unabhängigkeitsregel (Regel 66)*, 8.1, S.163

so tritt genau einer der $r \cdot m$ folgenden Fallkombinationen ein: Der x -Wert liegt in genau einem E_k ($k \in \{1, \dots, r\}$), gleichzeitig liegt der y -Wert in genau einem E'_i ($i \in \{1, \dots, m\}$).

Für die Strichliste bereite nun eine zweidimensionale Tabelle vor mit r Spalten für die Klassen E_1, \dots, E_r und m Zeilen für die Klassen E'_1, \dots, E'_m . Zusätzlich eine letzte Spalte, um Zeilensummen zu berechnen, sowie eine letzte Zeile, um Spaltensummen zu berechnen.

2. Schritt: Trage die n Messergebnisse in die so vorbereitete Strichtabelle ein: Liegt bei einer Einzelmessung der x -Wert in E_k , der y -Wert in E'_i , so wird ein Strich in der k -ten Spalte und i -ten Zeile gemacht. Anschließend berechne die absoluten Häufigkeiten und trage sie in eine gleichgebaute Tabelle ein:

$$H_{ik} = \text{Anzahl der Striche in der } i\text{-ten Zeile und } k\text{-ten Spalte}$$

3. Schritt: Es muss die Bedingung

$$H_{ik} \geq 5 \quad \text{für alle } i \text{ und } k$$

erfüllt sein. Ist dies nicht der Fall, so muss entweder die Klasseneinteilung weniger fein gewählt werden oder die Anzahl n der Messungen so weit erhöht werden, bis die Bedingung erfüllt ist.

4. Schritt: Berechne die i -te Zeilensumme Z_i für $i = 1, \dots, m$ und trage sie in der i -ten Zeile und letzten Spalte ein.

Berechne die k -te Spaltensumme S_k für $k = 1, \dots, r$ und trage sie in der k -ten Spalte und letzten Zeile ein.

Bezeichnung: Die vollständig ausgefüllte Tafel heißt **Kontingenztafel**.

5. Schritt: Mache die Probe: Es muss gelten $\sum Z_i = n$ und $\sum S_k = n$.

6. Schritt: Berechne

$$\chi^2 = \sum_{i=1}^r \sum_{k=1}^m \frac{\left(H_{ik} - \frac{Z_i \cdot S_k}{n}\right)^2}{\frac{Z_i \cdot S_k}{n}}$$

7. Schritt: Berechne

$$f = (r - 1) \cdot (m - 1)$$

8. Schritt: Schlage für dieses f in der χ^2 -Tabelle³ nach und vergleiche χ^2 mit $\text{tab-}\chi^2$.

Auswertung:

- Ist $\chi^2 \leq \text{tab-}\chi^2(95\%)$, so ist durch den Test die Falschheit der Nullhypothese nicht feststellbar. Es ist also weiterhin anzunehmen, dass die Variablen x und y unabhängig sind (ohne dass der Test die Richtigkeit dieser Annahme bestätigen kann!).
- Ist $\chi^2 > \text{tab-}\chi^2(95\%)$, so sind die Variablen x und y **wahrscheinlich** abhängig.
- Ist $\chi^2 > \text{tab-}\chi^2(99\%)$, so sind die Variablen x und y **signifikant** abhängig.
- Ist $\chi^2 > \text{tab-}\chi^2(99,9\%)$, so sind die Variablen x und y **hochsignifikant** abhängig.

³siehe Tabellen zur Statistik, S.234

Erläuterung: Für $n \rightarrow \infty$ strebt auf jeden Fall

$$\begin{aligned} \frac{Z_i}{n} &= \text{relative Häufigkeit von } y \in E'_i \quad \text{gegen } P(y \in E'_i) \text{ und} \\ \frac{S_k}{n} &= \text{relative Häufigkeit von } x \in E_k \quad \text{gegen } P(x \in E_k). \end{aligned}$$

Nach den Grenzwertregeln folgt

$$\frac{Z_i \cdot S_k}{n} = n \cdot \frac{Z_i}{n} \cdot \frac{S_k}{n} \longrightarrow n \cdot P(y \in E'_i) \cdot P(x \in E_k)$$

Falls nun die Nullhypothese der Unabhängigkeit stimmt, so strebt außerdem jedes

$\frac{H_{ik}}{n}$ = relative Häufigkeit, dass $y \in E'_i$ und zugleich $x \in E_k$ gilt, gegen $P(y \in E'_i) \cdot P(x \in E_k)$. Daraus würde folgen, dass

$$H_{ik} \longrightarrow n \cdot P(y \in E'_i) \cdot P(x \in E_k) \quad \text{für alle } i \text{ und } k$$

gilt. In diesem Fall streben also H_{ik} und $\frac{Z_i \cdot S_k}{n}$ gegen denselben Wert, und der Abstand zwischen beiden muss immer kleiner werden. Das Größenverhältnis

$$\left| \frac{H_{ik} - \frac{Z_i \cdot S_k}{n}}{\frac{Z_i \cdot S_k}{n}} \right|$$

ist der relative Abstand zwischen H_{ik} und $\frac{Z_i \cdot S_k}{n}$, auch der relative Fehler, den man macht, wenn man den einen Wert durch den anderen ersetzt. Die Größe

$$\chi = \sqrt{\sum_{i=1}^r \sum_{k=1}^m \frac{\left(H_{ik} - \frac{Z_i \cdot S_k}{n} \right)^2}{\frac{Z_i \cdot S_k}{n}}}$$

ist somit ein Fehlermaß: Sie misst die Summe sämtlicher $r \cdot m$ relativen Fehler.

Führt der Test zu einer Ablehnung der Nullhypothese, so gehört der größte aller $r \cdot m$ Summanden in dieser Summe zu demjenigen H_{ik} , an dem sich am stärksten die Abhängigkeit der Variablen erkennen lässt.

Merke: Stimmt die Nullhypothese im Unabhängigkeitstest, so strebt jeder Summand und damit auch χ^2 für $n \rightarrow \infty$ gegen Null. Ist für eine Kombination (i, k) die Unabhängigkeitsbedingung

$$P(x \in E_k \text{ und zugleich } y \in E'_i) = P(x \in E_k) \cdot P(y \in E'_i)$$

nicht erfüllt, so wächst der zu H_{ik} gehörige Summand ungefähr proportional zur Anzahl n der Messungen.

Spezialfall:

Der einfachste Spezialfall liegt vor, wenn x und y beide ja/nein-Variable sind. Dann ist $r = 2$, $m = 2$, also $f = 1$, und die Kontingenztafel besteht nur aus 4 Feldern plus letzter Spalte und letzter Zeile (sog. "Vierfeldertafel").

x misst dann, ob ein Ereignis A eintritt, ja oder nein; y misst, ob ein Ereignis B eintritt, ja oder nein. Die Berechnung der Prüfgröße vereinfacht sich dann sehr, man kann folgende Formel benutzen:

$$\chi^2 = \frac{n(H_{11}H_{22} - H_{12}H_{21})^2}{Z_1 Z_2 S_1 S_2}$$

Mit diesem χ^2 und mit $f = 1$ ist der χ^2 -Unabhängigkeitstest durchzuführen.

Hinweis:

Aus der Schule sind eventuell Vierfeldertafeln bekannt, aber in einem anderen Zusammenhang: Es werden nicht absolute Häufigkeiten eingetragen, sondern Wahrscheinlichkeiten. Einige dieser Wahrscheinlichkeiten sind vorgegeben, die übrigen lassen sich ergänzend bestimmen, und man errechnet dann mit diesen Tafeln sogenannte “bedingte Wahrscheinlichkeiten“, kann außerdem auch prüfen, ob Ereignisse A und B unabhängig sind.

In 9.4⁴ haben wir gesehen, dass zum verlässlichen Schätzen einer Wahrscheinlichkeit i.a. schon etliche Tausend Messungen erforderlich sind. In der hier besprochenen Situation sind Vorkenntnisse über Wahrscheinlichkeiten nicht gegeben, es werden auch keine Wahrscheinlichkeiten errechnet: Man besitzt lediglich die auszuwertende Messreihe, die auch kürzer sein darf, solange nur die Bedingung $H_{ik} \geq 5$ für alle i und k erfüllt ist.

⁴Schätzung von unbekanntem p , S.195

Anhang A

Gebrauchsanleitung für logarithmisches Papier

A.1 Die Lage der $\ln x$ -Werte auf der senkrechten Achse

Errechnet man eine Wertetabelle der Funktion $y = \ln x$ für die Werte $x = 1, 2, \dots, 10$, so erhält man (auf 2 Nachkommastellen gerundet):

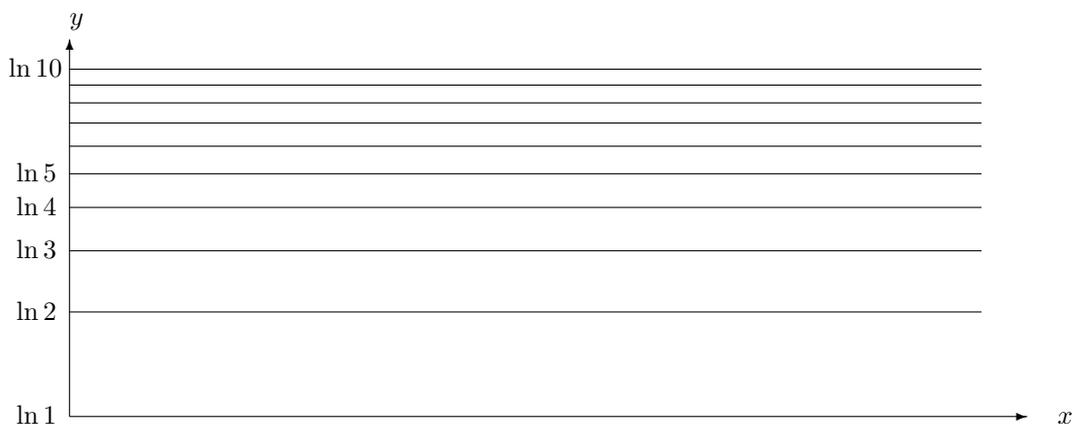
x	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
$\ln x$	0.00	0.69	1.10	1.39	1.61	1.79	1.95	2.08	2.20	2.30

Man sieht, wie der Abstand zweier aufeinander folgender \ln -Werte in dieser Tabelle immer kleiner wird. Skizziert man in einem normalen rechtwinkligen (x, y) -Koordinatensystem die zehn horizontalen Geraden

$$y = \ln 1, \quad y = \ln 2, \quad y = \ln 3, \quad \dots \quad y = \ln 10,$$

so erhält man das folgende charakteristische

logarithmische Streifenmuster für die y -Achse:



Die Bandbreite B (Höhe) dieses logarithmischen Streifenmusters ist

$$B = \ln 10$$

Ist $a \in \mathbb{R}$ irgendeine Zahl im Bereich $1 \leq a < 10$, so lässt sich die Lage von $\ln a$ zwischen $\ln 1 = 0$ und $\ln 10 \approx 2.30$ auf der senkrechten Achse mittels dieser Hilfslinien recht gut lokalisieren, ohne dass man den Zahlwert von $\ln a$ zuvor ausrechnen muss.

(Üblicherweise bereichert man das logarithmische Streifenmuster noch um (dünner eingetragene) Linien für $y = \ln 1.1$ $y = \ln 1.2$ \dots $y = \ln 1.9$ und weitere Hilfslinien.)

Jede **positive** reelle Zahl z lässt sich schreiben in dem Format

$$z = a \cdot 10^k, \quad \text{mit } 1 \leq a < 10 \text{ und } k \in \mathbb{Z}.$$

Beispiel:

$$\begin{aligned} 3781.9 &= 3.7819 \cdot 10^3 \\ 12.568 &= 1.2568 \cdot 10^1 \\ \pi &\approx 3.1416 \cdot 10^0 \\ 0.07635 &= 7.635 \cdot 10^{-2} \end{aligned}$$

Nach den Rechenregeln für Logarithmen gilt

$$z = a \cdot 10^k \implies \ln z = \ln a + k \cdot \ln 10$$

Das bedeutet wegen $B = \ln 10$ graphisch:

Hat man die Lage von $\ln a$ mittels eines logarithmischen Streifenmusters gefunden, so erhält man die Lage von $\ln z = \ln(a \cdot 10^k)$ durch Parallelverschiebung um den Wert $k \cdot B$ (das ist eine Verschiebung nach oben, wenn k positiv ist, nach unten, wenn k negativ ist).

Setzt man nun mehrere logarithmische Streifenmuster optisch aneinander, indem man die oberste horizontale Linie des einen Streifens mit der untersten horizontalen Linie des nächsten Streifens identifiziert, so folgt hieraus:

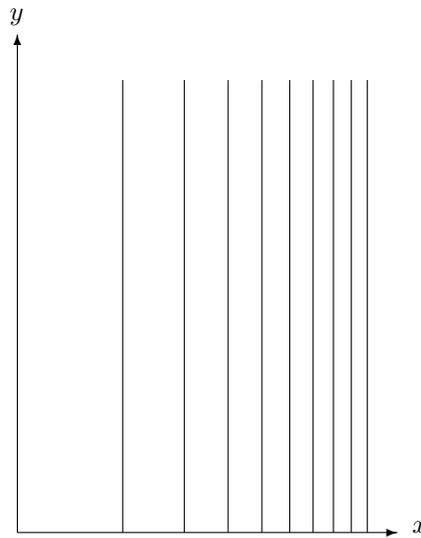
Regel 1: Innerhalb eines logarithmischen Streifenmusters liegen die \ln -Werte aller Zahlen der Bauart $z = a \cdot 10^k$ mit demselben k und unterschiedlichem $1 \leq a < 10$.

Regel 2: Ist ein logarithmisches Streifenmuster der y -Achse für alle Zahlen $z = a \cdot 10^k$ mit einem festen Wert von k reserviert, so ist das nächsthöhere logarithmische Streifenmuster für alle Zahlen $z = a \cdot 10^{k+1}$ reserviert und das nächstniedrigere Streifenmuster für alle Zahlen $z = a \cdot 10^{k-1}$.

A.2 Die Lage der \ln -Werte auf der waagerechten Achse

Ganz analog kann man auf der waagerechten Achse die Lage von \ln -Werten finden, ohne diese zuvor berechnet zu haben, indem man die x -Achse mit logarithmischen Streifenmustern versieht. Die Hilfslinien verlaufen dann nicht waagrecht, sondern senkrecht, und mehrere Streifenmuster sind dann nicht von unten nach oben, sondern von links nach rechts angeordnet.

logarithmisches Streifenmuster für die x -Achse:



Wieder gilt Regel 1. In Analogie zu Regel 2 gilt

Regel 3: Ist ein logarithmisches Streifenmuster der x -Achse für alle Zahlen $z = a \cdot 10^k$ mit einem festen Wert von k reserviert, so ist das rechts benachbarte logarithmische Streifenmuster für alle Zahlen $z = a \cdot 10^{k+1}$ reserviert und das links benachbarte Streifenmuster für alle Zahlen $z = a \cdot 10^{k-1}$.

A.3 Die zwei Sorten von logarithmischem Papier und ihr Zweck

A.3.1 Halblogarithmisches Papier

Eine Achse ist mit einer üblichen Millimeterpapier-Einteilung versehen, die andere mit logarithmischen Streifenmustern.

Häufigster Verwendungszweck: Test auf allgemeine Exponentialfunktion

Gegeben ist eine Wertetabelle für zwei Variable x und y , und es soll graphisch getestet werden, ob, ja oder nein, y als Funktion von x eine allgemeine Exponentialfunktion ist, d.h. ob gilt $y = y_0 \cdot e^{cx}$ mit irgendwelchen unbekanntenen Konstanten y_0 und c .

Charakteristisch hierfür ist, dass die Punkte $(x | \ln y)$ ungefähr auf einer Geraden liegen¹ (nicht auf einem Bogen), was mit Linealtest zu entscheiden ist².

Ohne logarithmisches Papier muss man so verfahren, dass man zunächst die $\ln y$ -Werte berechnet, dann selber ein normales äquidistantes Koordinatensystem zeichnet und die Punkte $(x | \ln y)$ darin einträgt.

¹siehe Regel 33 in 5.5.1, S.84

²siehe 3.1.5, S.24

Mit halblogarithmischem Papier geht dieser Test viel schneller: Man braucht nichts zu rechnen und verwendet ein schon vorgedrucktes Koordinatensystem wie folgt:

Man nimmt die millimeter-skalierte Achse als die waagerechte Achse, die logarithmisch skalierte Achse als senkrechte Achse und beschriftet sie gemäß den Regeln 4 und 7 (s.u., S.211).

Nun liest man einfach die Punkte $(x|y)$ aus der Wertetabelle ab. Bei der Übertragung³ in das halblogarithmische Papier entstehen, dank der besonderen Hilfslinien, automatisch die Punkte $(x|\ln y)$. Diese sollten auf einer Geraden liegen.

Weiterer Verwendungszweck: Test auf allgemeine Logarithmusfunktion

Gegeben ist eine Wertetabelle für zwei Variable x und y , und es soll graphisch getestet werden, ob, ja oder nein, y als Funktion von x eine allgemeine Logarithmusfunktion ist, d.h. ob gilt $y = A + B \cdot \ln x$ mit irgendwelchen unbekanntenen Konstanten A und B .

Charakteristisch hierfür ist, dass die Punkte $(\ln x|y)$ ungefähr auf einer Geraden liegen (nicht auf einem Bogen), was mit Linealtest zu entscheiden ist⁴.

Ohne logarithmisches Papier muss man so verfahren, dass man zunächst die $\ln x$ -Werte berechnet, dann selber ein normales äquidistantes Koordinatensystem zeichnet und die Punkte $(\ln x|y)$ darin einträgt.

Mit halblogarithmischem Papier geht dieser Test viel schneller: Man braucht nichts zu rechnen und verwendet ein schon vorgedrucktes Koordinatensystem wie folgt:

Man nimmt die logarithmisch skalierte Achse als die waagerechte Achse, die millimeter-skalierte Achse als senkrechte Achse und beschriftet sie gemäß den Regeln 4 und 7 (s.u., S.211).

Nun liest man einfach die Punkte $(x|y)$ aus der Wertetabelle ab. Bei der Übertragung⁵ in das halblogarithmische Papier entstehen, dank der besonderen Hilfslinien, automatisch die Punkte $(\ln x|y)$. Diese sollten auf einer Geraden liegen.

A.3.2 Doppeltlogarithmisches Papier

Beide Achsen sind mit logarithmischen Streifenmustern versehen.

Einzigster Verwendungszweck: Test auf allgemeine Potenzfunktion

Gegeben ist eine Wertetabelle für zwei Variable x und y , und es soll graphisch getestet werden, ob, ja oder nein, y als Funktion von x eine allgemeine Potenzfunktion ist, d.h. ob gilt $y = a \cdot x^b$ mit irgendwelchen unbekanntenen Konstanten a und b .

Charakteristisch hierfür ist, dass die Punkte $(\ln x|\ln y)$ ungefähr auf einer Geraden liegen⁶ (nicht auf einem Bogen), was mit Linealtest zu entscheiden ist⁷.

Ohne logarithmisches Papier muss man so verfahren, dass man zunächst die $\ln x$ -Werte und die $\ln y$ -Werte berechnet, dann selber ein normales äquidistantes Koordinatensystem zeichnet

³Details siehe unten, Regel 8, S.212

⁴siehe 3.1.5, S.24

⁵Details siehe unten, Regel 8, S.212

⁶siehe Regel 41 in 5.9.1, S.100

⁷siehe 3.1.5, S.24

und die Punkte $(\ln x | \ln y)$ darin einträgt.

Mit doppeltlogarithmischem Papier geht dieser Test viel schneller: Man braucht nichts zu rechnen und verwendet ein schon vorgedrucktes Koordinatensystem wie folgt: Man beschriftet beide logarithmischen Achsen gemäß den Regeln 4 und 7 (s.u., S.211).

Dann liest man einfach die Punkte $(x|y)$ aus der Wertetabelle ab. Bei der Übertragung⁸ in das doppeltlogarithmische Papier entstehen, dank der besonderen Hilfslinien, automatisch die Punkte $(\ln x | \ln y)$. Diese sollten auf einer Geraden liegen.

Ist mit logarithmischem Papier ein graphischer Test erfolgreich verlaufen, der Funktionstyp also erkannt worden, und sollen nun darüber hinaus die Konstanten in der Berechnungsformel für y als Funktion von x ausgerechnet werden, so müssen alle einschlägigen \ln -Werte nachträglich doch noch berechnet werden. Anleitung dazu siehe die Schritte 4 bis 6 in Anhang B, S.215ff.

A.4 Zum praktischen Umgang mit logarithmischem Papier

Beim praktischen Gebrauch von halb- und doppeltlogarithmischem Papier sind folgende Besonderheiten zu beachten:

Regel 4: (Format der Skalen-Beschriftung) Da, wo auf einer logarithmisch skalierten Achse $\ln a \cdot 10^k$ lokalisiert ist, schreibt man an die Achse einfach $a \cdot 10^k$. Also statt $\ln 1$, $\ln 10$, $\ln 100$ usw. schreibt man einfach 1, 10, 100 usw. Daraus folgt:

Regel 5: (Ablesen eines Punktes aus dem Papier) Liest man von einem beliebigen Punkt des Spezialpapiers seine Koordinaten an den beschrifteten Achsen ab, so erhält man nicht die halb- oder doppeltlogarithmischen Zahlwerte, sondern das Wertepaar (x, y) , welches in der **ursprünglichen Wertetabelle** zu diesem Punkt gehören würde.

Regel 6: (Verbot der Null) Auf einer logarithmisch skalierten Achse darf nirgends die Beschriftung "0" erscheinen, da $\ln 0$ nicht existiert. Insbesondere folgt: Auf halb- und doppeltlogarithmischem Papier gibt es keinen Punkt für den Ursprung $(x|y) = (0|0)$. Dasselbe Verbot gilt für negative Werte.

Regel 7: (Einteilung der Achsen) Während man auf einer Achse mit normaler Millimeterpapier-Skalierung jede Freiheit hat, wie man die vorgegebene Einteilung verwendet, etwa für Schrittweiten 0,01, 0,02 usw. oder 0,5, 1,0, 1,5 usw. oder 600, 800, 1000, 1200 usw., **hat man bei der Verwendung einer logarithmisch skalierten Achse keinerlei Wahlfreiheit:**

Enthält die ursprüngliche Wertetabelle eine Rubrik mit Zahlen z_1, \dots, z_n , und sollen die Werte $\ln z_i$ die 1. oder 2. Koordinate von Punkten im graphischen Test bilden, so geht man wie folgt vor (gemäß Regel 2 und 3):

1. Schritt: Man bestimmt zunächst die kleinste **positive** Zahl in der Rubrik, sie heiße z_i (meist ist dies die erste oder letzte in der Rubrik). (Wertepaare mit $z_i = 0$ werden beim graphischen Test weggelassen!)

⁸Details siehe unten, Regel 8, S.212

2. Schritt: Man schreibt diese kleinste Zahl in der Form

$$z_i = a \cdot 10^n \quad \text{mit } 1 \leq a < 10.$$

3. Schritt: Nun schreibt man bei der entsprechenden logarithmischen Achse (1. Koordinate = waagerechte Achse, 2. Koordinate = senkrechte Achse) an die 1. Linie des 1. logarithmischen Streifens $1 \cdot 10^n$ (wahlweise als Dezimalzahl), an die 2. Linie des 1. logarithmischen Streifens $2 \cdot 10^n$ (wahlweise als Dezimalzahl), usw.

An die 1. Linie des 2. logarithmischen Streifens schreibt man $1 \cdot 10^{n+1}$, an die 2. Linie des 2. logarithmischen Streifens $2 \cdot 10^{n+1}$ usw.

An die 1. Linie des 3. logarithmischen Streifens schreibt man $1 \cdot 10^{n+2}$, an die 2. Linie des 3. logarithmischen Streifens $2 \cdot 10^{n+2}$ usw.

Regel 8: (Übertragung eines Punktes aus der Wertetabelle in das logarithmische Papier) Sind die Achsen fertig beschriftet, so bestimmt man zu einem gegebenen Wertepaar (x, y) aus der Tabelle die Lage des Punktes $(x | \ln y)$ in halblogarithmischem Papier wie folgt: Die x -Koordinate findet man gemäß der selbstgewählten Skalierung auf der waagerechten (normalen) Achse. Die $\ln y$ -Koordinate findet man so:

1. Man bringt die Zahl y zunächst auf das Format $y = a \cdot 10^k$ (mit $1 \leq a < 10$).

2. Anhand des Exponenten k findet man auf der senkrechten Achse den zugehörigen logarithmischen Streifen.

3. In diesem Streifen wählt man die zur Zahl a gehörige Hilfslinie für die Lage von $\ln a$. Auf dieser Linie liegt, mit entsprechender x -Koordinate, der einzutragende Punkt $(x | \ln y)$.

Analog positioniert man die Punkte $(\ln x | y)$ und $(\ln x | \ln y)$ in entsprechend skaliertem halb- bzw. doppeltlogarithmischem Papier.

Beispiel:

Die zur Funktion $y = 0,4 \cdot x^2$ gehörige Wertetabelle

x	0,5	1	2	4	5	10
y	0,1	0,4	1,6	6,4	10	40

wird auf den beiden nachfolgenden Seiten zuerst in ein Blatt halblogarithmisches Papier (die senkrechte Achse mit logarithmischer Skalierung) und danach in ein Blatt doppeltlogarithmisches Papier eingetragen.

Benutzte Skalierung:

Auf dem halblogarithmischen Papier wurde die waagerechte Achse äquidistant mit den Werten 0 1 2 3...20 belegt, auf der senkrechten Achse wurde das erste, unterste logarithmische Streifenmuster für die Werte 0,1 bis 1 verwendet, das zweite darüber für die Werte 1 bis 10, das dritte und oberste für die Werte 10 bis 100.

Auf dem doppeltlogarithmischen Papier wurde auf der waagerechten Achse das erste, linke logarithmische Streifenmuster für die Werte 0,1 bis 1 verwendet, das zweite, rechts danebenliegende für die Werte 1 bis 10. Die Skalierung der senkrechten Achse ist die gleiche wie beim halblogarithmischen Papier.

Eine über den Vordruck hinausgehende Beschriftung der Achsen wurde nicht vorgenommen.

Da es sich um eine allgemeine Potenzfunktion handelt, liegen die Punkte im doppeltlogarithmischen Papier auf einer Geraden (positives Testergebnis), im halblogarithmischen nicht (negatives Testergebnis).

Abbildung A.1: Halblogarithmisches Papier:

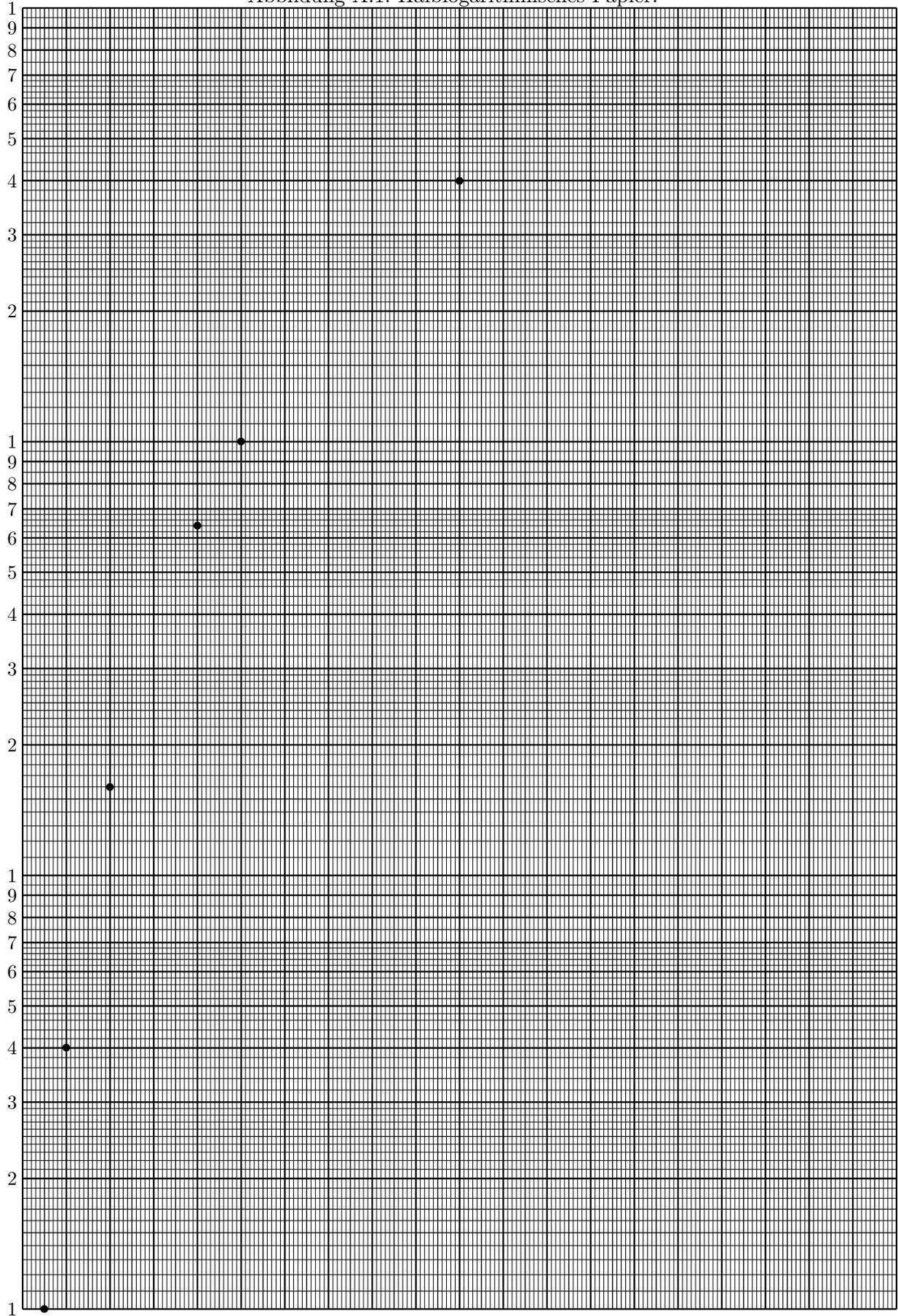
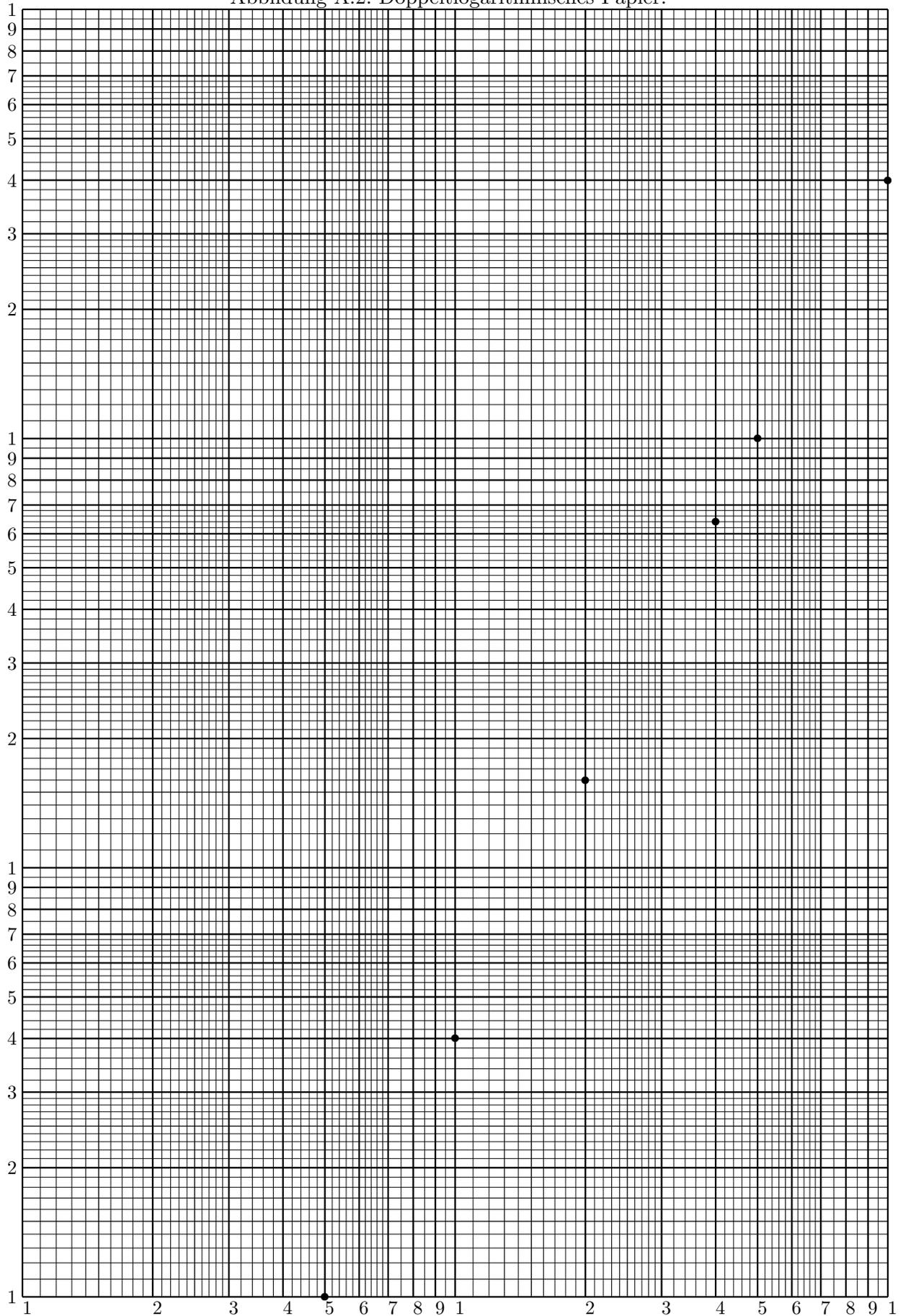


Abbildung A.2: Doppeltlogarithmisches Papier:



Anhang B

Von der Wertetabelle zur Berechnungsformel

Von der Funktion $y = f(x)$ kenne man keine Berechnungsformel, sondern nur eine empirisch gewonnene Wertetabelle¹ mit n Wertepaaren (x_i, y_i) , $(i = 1, \dots, n)$. In etlichen Fällen kann man aus der Wertetabelle eine zugehörige Berechnungsformel für $y = f(x)$ gewinnen. Die gängigsten im vorliegenden Skript behandelten Fälle sind im Folgenden noch einmal zusammenfassend dargestellt.

6 Typen von Funktionen, für die sich aus einer Wertetabelle nach geeigneten graphischen Tests mittels Linearer Regression eine optimale Berechnungsformel bestimmen lässt:

drei Typen von elementaren Funktionen:

- Typ(1) Proportionalität $y = C \cdot x$ (= Spezialfall von Typ(6) mit $b = 1$)
- Typ(2) Geradengleichung $y = A + B \cdot x$
- Typ(3) Antiproportionalität $y = c \cdot \frac{1}{x}$ (= Spezialfall von Typ(6) mit $b = -1$)

und drei Typen von nichtelementaren Funktionen:

- Typ(4) Allgemeine Exponentialfunktion $y = y_0 \cdot e^{cx}$
- Typ(5) Allgemeine Logarithmusfunktion $y = A + B \cdot \ln x$
- Typ(6) Allgemeine Potenzfunktion $y = a \cdot x^b$.

Verfahren zur Formelgewinnung:

Wenn die Wertetabelle

x	x_1	x_2	\dots	x_i	\dots	x_n
y	y_1	y_2	\dots	y_i	\dots	y_n

mit empirischen Messdaten für x und y bereits vorliegt, gewinnt man daraus (wenn es möglich ist!), die zu den Daten optimal passende Berechnungsformel für y als Funktion von x in folgenden Schritten:

¹Es sind mindestens (!) $n \geq 3$ Wertepaare erforderlich. Je größer die Anzahl n der Wertepaare, umso besser.

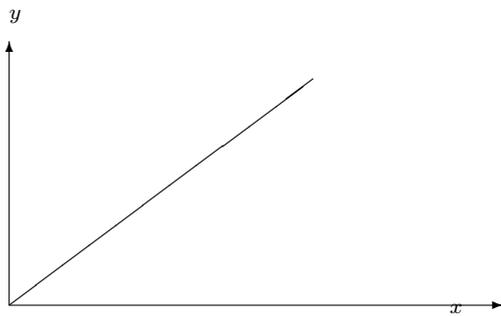
- 1. Schritt:** Aus der Wertetabelle erstellt man den Graphen der Punkte $(x_i|y_i)$ in einem normalen, äquidistanten Koordinatensystem (kein halb- oder doppeltlogarithmisches Papier verwenden).
- 2. Schritt:** Den entstandenen Graphen vergleicht man mit allen im nachfolgenden Katalog aufgeführten typischen Graphen. Jeder dieser Graphen gehört zu einem bestimmten der 6 Funktionentypen. Man entscheidet, welchem dieser typischen Graphen der eigene am ähnlichsten sieht. So gewinnt man eine Hypothese, um welchen der 6 Funktionentypen es sich bei der eigenen Funktion handeln könnte.

Katalog von typischen Graphen:

1. Fall: Die Punkte $(x_i|y_i)$ liegen ungefähr auf einer Geraden:

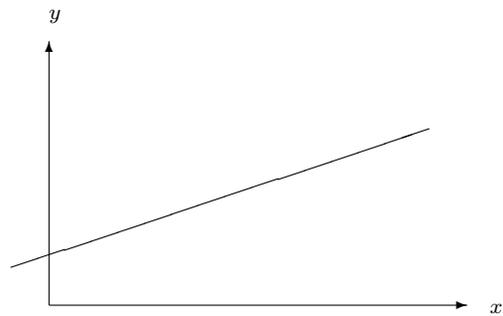
Fall 1A: Verlauf durch den Ursprung

Fall 1B: Verlauf nicht durch den Ursprung



Ursprungsgerade $y = C \cdot x$

Berechne C mit Linearer Regression
(1-Schritt-Verfahren)



Gerade in allgemeiner Lage $y = A + B \cdot x$

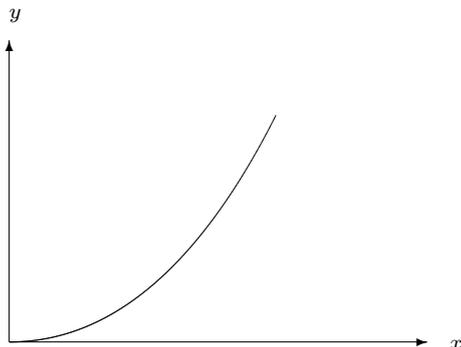
Berechne A, B mit Linearer Regression
(3-Schritt-Verfahren)

Zur Unterscheidung hilft manchmal nur die fachwissenschaftliche Frage: Sollte $y = 0$ oder $y > 0$ sein, wenn $x = 0$?

2. Fall: Ansteigender Bogen, immer steiler steigend:

Fall 2A: Verlauf durch den Ursprung

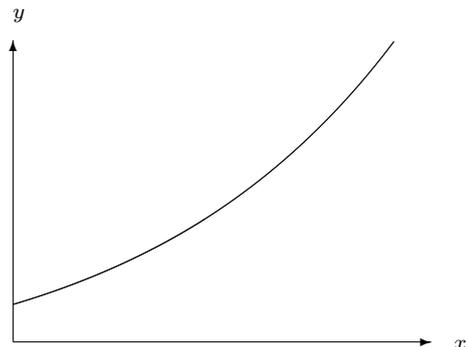
Fall 2B: Schnittpunkt mit der y -Achse



Tangente bei $x = 0$ horizontal

Verdacht auf Typ(6) (weiter S.220)
(=allgemeine Potenzfunktion)

$$y = a \cdot x^b \quad \text{mit } b > 1$$



Tangente bei $x = 0$ steigend

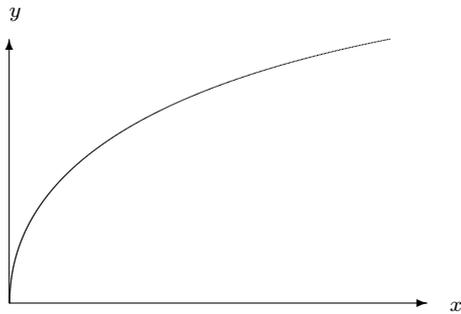
Verdacht auf Typ(4) (weiter S.220)
(=allgemeine Exponentialfunktion)

$$y = y_0 \cdot \exp(cx) \quad \text{mit } c > 0$$

Manchmal hilft eine fachwissenschaftliche Frage: Sollte $y = 0$ oder $y > 0$ sein, wenn $x = 0$?

3. Fall: Ansteigender Bogen, immer schwächer, aber unbegrenzt steigend:

Fall 3A: Verlauf durch den Ursprung



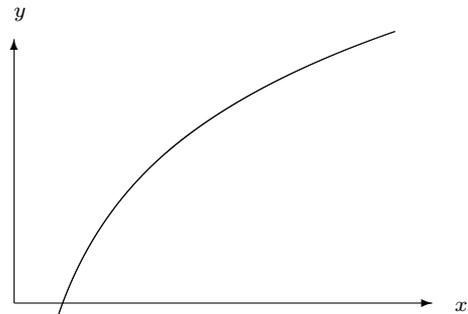
Tangente bei $x = 0$ senkrecht

Verdacht auf Typ(6) (weiter S.220)

(=allgemeine Potenzfunktion)

$$y = a \cdot x^b \quad \text{mit } 0 < b < 1$$

Fall 3B: Schnittpunkt mit der x -Achse



Tangente beim Schnittpunkt schräg steigend

Verdacht auf Typ(5) (weiter S.220)

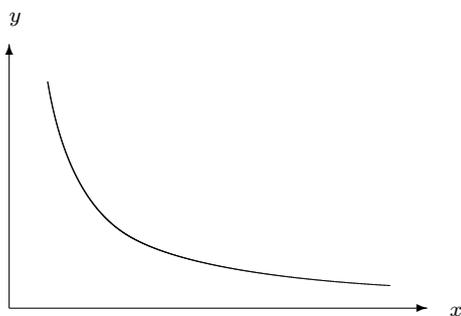
(=allgemeine Logarithmusfunktion)

$$y = c + \log_a x \quad \text{mit } a > 1$$

Manchmal hilft eine fachwissenschaftliche Frage: Sollte $y = 0$ sein, wenn $x = 0$, oder ist der Fall $x = 0$ sinnlos?

4. Fall: Abfallender Bogen, immer flacher fallend, asymptotisch gegen die x -Achse strebend:

Fall 4A: Schnittpunkt mit keiner Achse



Verdacht auf Typ(6) (weiter S.220)

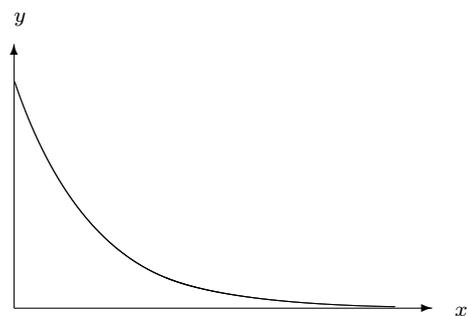
(=allgemeine Potenzfunktion)

$$y = a \cdot x^b \quad \text{mit } b < 0$$

oder spezieller auf Typ(2) (weiter S.220)

(Antiproportionalität) $y = c \cdot \frac{1}{x}$

Fall 4B: Schnittpunkt mit der y -Achse



Verdacht auf Typ(4) (weiter S.220)

(=allgemeine Exponentialfunktion)

$$y = y_0 \cdot \exp(cx) \quad \text{mit } c < 0$$

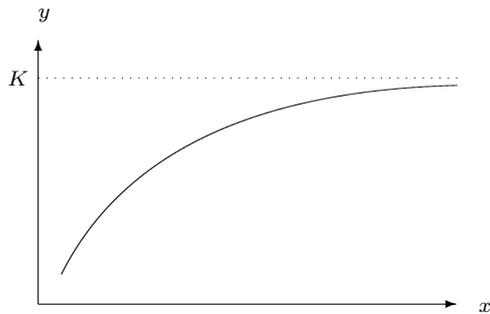
Manchmal hilft eine fachwissenschaftliche Frage: Sollte y einen Wert haben, wenn $x = 0$ ist, oder ist der Fall $x = 0$ sinnlos?

Hiermit sind schon die am häufigsten vorkommenden Standardfälle behandelt.

Die nächsten beiden Fälle sind leicht mit den Fällen 3 und 4 zu verwechseln und kommen in Frage, wenn diese nicht zutreffen. Beispiele dazu sind alle Variablen y , die sich als Funktion der Zeit t nach dem Schema "prozentuale Abnahme kontra konstante Zufuhr" verändern, denn

sie streben für $t \rightarrow \infty$ asymptotisch gegen eine positive Konstante (“dynamisches Gleichgewicht”).²

5. Fall: Ansteigender Bogen, immer flacher steigend, asymptotisch konstant = K:

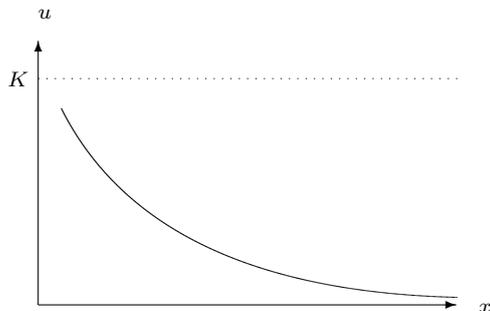


Dieser Fall ist rein optisch kaum von den Fällen 3A und 3B unterscheidbar. Existenz und Zahlwert der Asymptote $y = K$ muss aus anderer (fachwissenschaftlicher) Quelle bekannt sein. Wenn dies der Fall ist:

Erweitere die Wertetabelle um eine Rubrik für die Variable

$$u = K - y$$

und skizziere den Graphen der Punkte $(x|u)$:



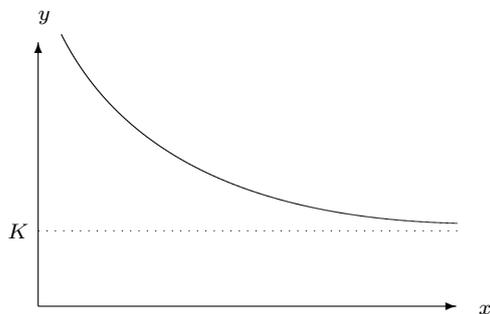
Der Graph der Punkte $(x|u)$ ist dann immer flacher fallend und strebt asymptotisch gegen die x -Achse. Klassifiziere diesen Graphen unter Fall 4A oder 4B und arbeite weiter, bis eine Berechnungsformel

$$u = g(x)$$

gefunden worden ist. Durch Rücksubstitution folgt $K - y = g(x)$ und daraus die gesuchte Formel für y als Funktion von x :

$$y = K - g(x).$$

6. Fall: Graph immer flacher fallend, asymptotisch konstante =K (mit $K \neq 0$):



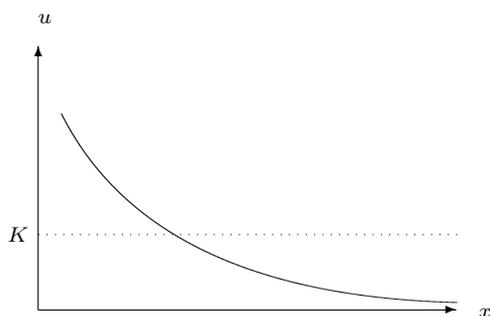
Dieser Fall ist rein optisch kaum von den Fällen 4A und 4B unterscheidbar. Existenz und Zahlwert der Asymptote $y = K$ muss aus anderer (fachwissenschaftlicher) Quelle bekannt sein. Wenn dies der Fall ist:

Erweitere die Wertetabelle um eine Rubrik für die Variable

$$u = y - K$$

und skizziere den Graphen der Punkte $(x|u)$:

²siehe 3.3.4 und 3.3.5, S.38 ff



Der Graph der Punkte $(x|u)$ ist dann immer flacher fallend und strebt asymptotisch gegen die x -Achse. Klassifiziere diesen Graphen unter Fall 4A oder 4B und arbeite weiter, bis eine Berechnungsformel

$$u = g(x)$$

gefunden worden ist. Durch Rücksubstitution folgt $y - K = g(x)$ und daraus die gesuchte Formel für y als Funktion von x :

$$y = K + g(x).$$

Nach Durchsicht dieses Katalogs hat man eine Vermutung, welchem Typ (n) ($n = 1, \dots, 6$) aus diesem Katalog der eigene Graph am ähnlichsten ist.

3. Schritt: Diese Hypothese muss nun durch einen graphischen Test überprüft werden. Für jeden der 6 Funktionstypen gibt es einen eigenen graphischen Test (s.u., S.220f), wobei aber die elementaren Tests auf Proportionalität (Typ (1)) und auf Antiproportionalität (Typ (3)) sich durch den - umfassenderen - Test auf allgemeine Potenzfunktion (Typ (6)) ersetzen lassen.

Jeder dieser Tests funktioniert so, dass er überprüft, ob gewisse Punkte (ungefähr) auf einer Geraden liegen. Das muss mittels **Linealtest** (siehe 3.1.5, S.24) entschieden werden.

Falls der Test negativ verlief, so ist definitiv festgestellt, dass die Funktion nicht dem Typ (n) angehört. Man kann dann anhand des Katalogs von Graphen vielleicht noch eine andere Hypothese aufstellen und durch einen entsprechenden anderen graphischen Test auch diese überprüfen.

Merke: Eine sorgfältige Zeichnung des eigenen Graphen und eine gründliche Sichtung des Katalogs sind für die Auswahl eines auf Anhieb Erfolg versprechenden Tests entscheidend wichtig.

Eventuell muss man den eigenen Graphen an den Enden des Bogens vorsichtig so verlängern, dass sich besser einschätzen lässt, ob er wohl durch den Ursprung verläuft (Typ (6) mit $b > 0$) oder die positive y -Achse trifft (Typ (4)) oder diese Achse als Asymptote besitzt (Typ (6) mit $b < 0$) oder die x -Achse schneidet (Typ (5)).

4. Schritt: Falls ein im 3. Schritt durchgeführter graphischer Test auf Typ (n) erfolgreich verlaufen ist, gewisse Punkte also auf einer Geraden liegen, steht definitiv fest, dass eine Berechnungsformel vom Typ (n) für die Funktion existiert. Man muss nur noch die Konstanten in dieser Formel bestimmen. Dazu müssen zunächst als Vorarbeit die Konstanten in der Geradengleichung errechnet werden (optimal mit Linearer Regression, für Eilige mittels zweier Wertepaare).

5. Schritt: Aus den Konstanten der Geradengleichung kann man jeweils durch geeignete Umrechnung die Konstanten in der Berechnungsformel ermitteln und diese somit fertigstellen.

6. Schritt: Da das Fehlerrisiko bei diesem langwierigen Verfahren nicht unerheblich ist, muss unbedingt die Probe gemacht werden: Für die x -Werte in der Tabelle rechnet man die zugehörigen y -Werte mit der selbstgefundenen Formel aus und trägt sie in eine zusätzliche Tabellenrubrik ein. Danach kann man sie mit den ursprünglichen y -Werten aus der Tabelle vergleichen.

Achtung: Da nicht eine einzelne berechnete Zahl auf Korrektheit überprüft werden soll, sondern eine ganze Funktionsformel, genügt es nicht, eine einzelne Stichprobe zu machen: Es kann z.B. vorkommen, dass die Formel mit den y -Werten am Tabellenanfang gut harmonisiert, mit den nachfolgenden Werten aber nicht.

Im 2. Schritt hat man eine Hypothese aufgestellt, zu welchem Funktionstyp (n) die eigene Funktion gehört. Je nach Wert von (n) verläuft die praktische Durchführung aller weiteren Schritte unterschiedlich. Nachfolgend

Die konkrete Durchführung der Schritte 3 bis 6, je nach Typ (n):

Die elementaren Funktionstypen:

Typ (1)	Proportionalität	Formel: $y = C \cdot x$.	Gesucht: Wert von C .
3. Schritt:	Graphischer Test:	Liegen die Punkte $(x y)$ auf einer Ursprungsgeraden? Nur, wenn ja (Linealtest!), weiter wie folgt:	
4. Schritt:	Lineare Regression:	Berechne C (1-Schritt-Verfahren)	
5. Schritt:	entfällt		
6. Schritt:	Probe: Berechne $y_i = C \cdot x_i$ ($i = 1, \dots, n$) und vergleiche mit Tabellenwerten		
Typ (2)	Allg. Geradengleichung	Formel: $y = A + B \cdot x$.	Gesucht: Wert von A und B .
3. Schritt:	Graphischer Test:	Liegen die Punkte $(x y)$ auf einer Geraden? Nur, wenn ja (Linealtest!), weiter wie folgt:	
4. Schritt:	Lineare Regression:	Setze $v \hat{=} x$, $w \hat{=} y$ Berechne B , dann A (3-Schritt-Verfahren)	
5. Schritt:	entfällt		
6. Schritt:	Probe: Berechne $y_i = A + B \cdot x_i$ ($i = 1, \dots, n$) und vergleiche mit Tabellenwerten		
Typ (3)	Antiproportionalität	Formel: $y = c \cdot \frac{1}{x}$.	Gesucht: Wert von c .
3. Schritt:	Graphischer Test:	Erstelle Wertetabelle für $\frac{1}{x}$ Liegen die Punkte $(\frac{1}{x} y)$ auf einer Ursprungsgeraden? Nur, wenn ja (Linealtest!), weiter wie folgt:	
4. Schritt:	Lineare Regression:	Setze $v \hat{=} 1/x$, $w \hat{=} y$ Berechne C (1-Schritt-Verfahren)	
5. Schritt:	Berechnung von c :	$c = C$	
6. Schritt:	Probe: Berechne $y_i = \frac{c}{x_i}$ ($i = 1, \dots, n$) und vergleiche mit Tabellenwerten		

Bei den nun folgenden Testverfahren kann man halb- bzw. doppeltlogarithmisches Papier³ erfolgreich einsetzen. Dieses gestattet, den graphischen Test (3. Schritt) schon durchzuführen, ohne die fraglichen ln-Werte überhaupt berechnet zu haben.

Falls der Test dann aber erfolgreich verläuft, der richtige Formeltyp also schon bestimmt worden ist, und die Untersuchung mit diesem theoretischen Resultat nicht beendet sein soll, dann muss die Berechnung der ln-Werte zu Beginn des 4. Schrittes doch noch erfolgen - es sei denn, man benutzt einen programmierbaren Taschenrechner, der die Lineare Regression selbstständig durchführt, oder man errechnet die Formelkonstanten nur überschlagsweise mittels zweier Wertepaare.

Die nichtelementaren Funktionstypen:

Typ (4) Allg. Exponentialfunktion	Formel: $y = y_0 \cdot e^{cx}$.	Gesucht: Wert von y_0 und c .
3. Schritt: Graphischer Test:	Liegen die Punkte $(x \ln y)$ auf einer Geraden? Nur, wenn ja (Linealtest!), weiter wie folgt:	
4. Schritt: Lineare Regression:	Es gilt $\ln y = A + B \cdot x$ mit unbekanntem A und B Erstelle Wertetabelle für $\ln y$ Setze $v \hat{=} x$, $w \hat{=} \ln y$ Berechne B und A (3-Schritt-Verfahren)	
5. Schritt: Berechnung von y_0 und c :	$y_0 = e^A$, $c = B$	
6. Schritt: Probe: Berechne $y_i = y_0 \cdot \exp(c \cdot x_i)$ ($i = 1, \dots, n$) und vergleiche mit Tabellenwerten		
Typ (5) Allg. Logarithmusfunktion	Formel: $y = A + B \cdot \ln x$	Gesucht: Wert von A und B .
3. Schritt: Graphischer Test:	Liegen die Punkte $(\ln x y)$ auf einer Geraden? Nur, wenn ja (Linealtest!), weiter wie folgt:	
4. Schritt: Lineare Regression:	Es gilt $y = A + B \cdot \ln x$ mit unbekanntem A und B Erstelle Wertetabelle für $\ln x$ Setze $v \hat{=} \ln x$, $w \hat{=} y$ Berechne B und A (3-Schritt-Verfahren)	
5. Schritt: entfällt		
6. Schritt: Probe: Berechne $y_i = A + B \cdot \ln x_i$ ($i = 1, \dots, n$) und vergleiche mit Tabellenwerten		
Typ (6) Allg. Potenzfunktion	Formel: $y = a \cdot x^b$.	Gesucht: Wert von a und b .
3. Schritt: Graphischer Test:	Liegen die Punkte $(\ln x \ln y)$ auf einer Geraden? Nur, wenn ja (Linealtest!), weiter wie folgt:	
4. Schritt: Lineare Regression	Es gilt $\ln y = A + B \cdot \ln x$ mit unbekanntem A und B Erstelle Wertetabelle für $\ln x$ und $\ln y$ Setze $v \hat{=} \ln x$, $w \hat{=} \ln y$ Berechne B und A (3-Schritt-Verfahren)	
5. Schritt: Berechnung von a und b :	$a = e^A$, $b = B$	
6. Schritt: Probe: Berechne $y_i = a \cdot x_i^b$ ($i = 1, \dots, n$) und vergleiche mit Tabellenwerten		

³siehe Anhang A, S.207ff

Anhang C

Tabellen zur Statistik

C.1 Φ -Tabelle

$$\Phi(-x) = 1 - \Phi(x)$$

Fortsetzung \rightarrow

x	$\Phi(x)$								
0,00	0,5000								
0,01	0,5040	0,41	0,6591	0,81	0,7910	1,21	0,8869	1,61	0,9463
0,02	0,5080	0,42	0,6628	0,82	0,7939	1,22	0,8888	1,62	0,9474
0,03	0,5120	0,43	0,6664	0,83	0,7967	1,23	0,8907	1,63	0,9484
0,04	0,5160	0,44	0,6700	0,84	0,7995	1,24	0,8925	1,64	0,9495
0,05	0,5199	0,45	0,6736	0,85	0,8023	1,25	0,8944	1,65	0,9505
0,06	0,5239	0,46	0,6772	0,86	0,8051	1,26	0,8962	1,66	0,9515
0,07	0,5279	0,47	0,6808	0,87	0,8078	1,27	0,8980	1,67	0,9525
0,08	0,5319	0,48	0,6844	0,88	0,8106	1,28	0,8997	1,68	0,9535
0,09	0,5359	0,49	0,6879	0,89	0,8133	1,29	0,9015	1,69	0,9545
0,10	0,5398	0,50	0,6915	0,90	0,8159	1,30	0,9032	1,70	0,9554
0,11	0,5438	0,51	0,6950	0,91	0,8186	1,31	0,9049	1,71	0,9564
0,12	0,5478	0,52	0,6985	0,92	0,8212	1,32	0,9066	1,72	0,9573
0,13	0,5517	0,53	0,7019	0,93	0,8238	1,33	0,9082	1,73	0,9582
0,14	0,5557	0,54	0,7054	0,94	0,8264	1,34	0,9099	1,74	0,9591
0,15	0,5596	0,55	0,7088	0,95	0,8289	1,35	0,9115	1,75	0,9599
0,16	0,5636	0,56	0,7123	0,96	0,8315	1,36	0,9131	1,76	0,9608
0,17	0,5675	0,57	0,7157	0,97	0,8340	1,37	0,9147	1,77	0,9616
0,18	0,5714	0,58	0,7190	0,98	0,8365	1,38	0,9162	1,78	0,9625
0,19	0,5753	0,59	0,7224	0,99	0,8389	1,39	0,9177	1,79	0,9633
0,20	0,5793	0,60	0,7257	1,00	0,8413	1,40	0,9192	1,80	0,9641
0,21	0,5832	0,61	0,7291	1,01	0,8438	1,41	0,9207	1,81	0,9649
0,22	0,5871	0,62	0,7324	1,02	0,8461	1,42	0,9222	1,82	0,9656
0,23	0,5910	0,63	0,7357	1,03	0,8485	1,43	0,9236	1,83	0,9664
0,24	0,5948	0,64	0,7389	1,04	0,8508	1,44	0,9251	1,84	0,9671
0,25	0,5987	0,65	0,7422	1,05	0,8531	1,45	0,9265	1,85	0,9678
0,26	0,6026	0,66	0,7454	1,06	0,8554	1,46	0,9279	1,86	0,9686
0,27	0,6064	0,67	0,7486	1,07	0,8577	1,47	0,9292	1,87	0,9693
0,28	0,6103	0,68	0,7517	1,08	0,8599	1,48	0,9306	1,88	0,9699
0,29	0,6141	0,69	0,7549	1,09	0,8621	1,49	0,9319	1,89	0,9706
0,30	0,6179	0,70	0,7580	1,10	0,8643	1,50	0,9332	1,90	0,9713
0,31	0,6217	0,71	0,7611	1,11	0,8665	1,51	0,9345	1,91	0,9719
0,32	0,6255	0,72	0,7642	1,12	0,8686	1,52	0,9357	1,92	0,9726
0,33	0,6293	0,73	0,7673	1,13	0,8708	1,53	0,9370	1,93	0,9732
0,34	0,6331	0,74	0,7704	1,14	0,8729	1,54	0,9382	1,94	0,9738
0,35	0,6368	0,75	0,7734	1,15	0,8749	1,55	0,9394	1,95	0,9744
0,36	0,6406	0,76	0,7764	1,16	0,8770	1,56	0,9406	1,96	0,9750
0,37	0,6443	0,77	0,7794	1,17	0,8790	1,57	0,9418	1,97	0,9756
0,38	0,6480	0,78	0,7823	1,18	0,8810	1,58	0,9429	1,98	0,9761
0,39	0,6517	0,79	0,7852	1,19	0,8830	1,59	0,9441	1,99	0,9767
0,40	0,6554	0,80	0,7881	1,20	0,8849	1,60	0,9452	2,00	0,9772

Φ -Tabelle

$$\Phi(-x) = 1 - \Phi(x)$$

(Ende)

x	$\Phi(x)$								
2,01	0,9778	2,41	0,9920	2,81	0,9975	3,21	0,9993	3,61	0,9998
2,02	0,9783	2,42	0,9922	2,82	0,9976	3,22	0,9994	3,62	0,9999
2,03	0,9788	2,43	0,9925	2,83	0,9977	3,23	0,9994		
2,04	0,9793	2,44	0,9927	2,84	0,9977	3,24	0,9994		
2,05	0,9798	2,45	0,9929	2,85	0,9978	3,25	0,9994		
2,06	0,9803	2,46	0,9931	2,86	0,9979	3,26	0,9994		
2,07	0,9808	2,47	0,9932	2,87	0,9979	3,27	0,9995		
2,08	0,9812	2,48	0,9934	2,88	0,9980	3,28	0,9995		
2,09	0,9817	2,49	0,9936	2,89	0,9981	3,29	0,9995		
2,10	0,9821	2,50	0,9938	2,90	0,9981	3,30	0,9995		
2,11	0,9826	2,51	0,9940	2,91	0,9982	3,31	0,9995		
2,12	0,9830	2,52	0,9941	2,92	0,9982	3,32	0,9995		
2,13	0,9834	2,53	0,9943	2,93	0,9983	3,33	0,9996		
2,14	0,9838	2,54	0,9945	2,94	0,9984	3,34	0,9996		
2,15	0,9842	2,55	0,9946	2,95	0,9984	3,35	0,9996		
2,16	0,9846	2,56	0,9948	2,96	0,9985	3,36	0,9996		
2,17	0,9850	2,57	0,9949	2,97	0,9985	3,37	0,9996		
2,18	0,9854	2,58	0,9951	2,98	0,9986	3,38	0,9996		
2,19	0,9857	2,59	0,9952	2,99	0,9986	3,39	0,9997		
2,20	0,9861	2,60	0,9953	3,00	0,9987	3,40	0,9997		
2,21	0,9864	2,61	0,9955	3,01	0,9987	3,41	0,9997		
2,22	0,9868	2,62	0,9956	3,02	0,9987	3,42	0,9997		
2,23	0,9871	2,63	0,9957	3,03	0,9988	3,43	0,9997		
2,24	0,9875	2,64	0,9959	3,04	0,9988	3,44	0,9997		
2,25	0,9878	2,65	0,9960	3,05	0,9989	3,45	0,9997		
2,26	0,9881	2,66	0,9961	3,06	0,9989	3,46	0,9997		
2,27	0,9884	2,67	0,9962	3,07	0,9989	4,47	0,9997		
2,28	0,9887	2,68	0,9963	3,08	0,9990	3,48	0,9997		
2,29	0,9890	2,69	0,9964	3,09	0,9990	3,49	0,9998		
2,30	0,9893	2,70	0,9965	3,10	0,9991	3,50	0,9998		
2,31	0,9896	2,71	0,9966	3,11	0,9991	3,51	0,9998		
2,32	0,9898	2,72	0,9967	3,12	0,9991	3,52	0,9998		
2,33	0,9901	2,73	0,9968	3,13	0,9991	3,53	0,9998		
2,34	0,9904	2,74	0,9969	3,14	0,9992	3,54	0,9998		
2,35	0,9906	2,75	0,9970	3,15	0,9992	3,55	0,9998		
2,36	0,9909	2,76	0,9971	3,16	0,9992	3,56	0,9998		
2,37	0,9911	2,77	0,9972	3,17	0,9992	3,57	0,9998		
2,38	0,9913	2,78	0,9973	3,18	0,9993	3,58	0,9998		
2,39	0,9916	2,79	0,9974	3,19	0,9993	3,59	0,9998		
2,40	0,9918	2,80	0,9974	3,20	0,9993	3,60	0,9998		

C.2 F-Tabelle

Für 95% Sicherheit:

Fortsetzung →

f_2	f_1	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
1		161,4	199,5	215,7	224,6	230,2	234,6	236,8	238,9	240,9	241,9
2		18,51	19,00	19,16	19,25	19,30	19,33	19,35	19,37	19,38	19,39
3		10,13	9,55	9,28	9,12	9,01	8,94	8,88	8,84	8,81	8,78
4		7,71	6,94	6,59	6,39	6,26	6,16	6,09	6,04	6,00	5,96
5		6,61	5,97	5,41	5,19	5,05	4,95	4,88	4,82	4,77	4,74
6		5,99	5,14	4,76	4,53	4,39	4,28	4,21	4,15	4,10	4,06
7		5,59	4,74	4,35	4,12	3,97	3,87	3,79	3,73	3,68	3,63
8		5,32	4,46	4,07	3,84	3,69	3,58	3,50	3,44	3,39	3,34
9		5,12	4,26	3,86	3,63	3,48	3,37	3,29	3,23	3,18	3,13
10		4,96	4,10	3,71	3,48	3,33	3,22	3,13	3,07	3,02	2,97
11		4,84	3,98	3,59	3,36	3,20	3,09	3,01	2,95	2,90	2,86
12		4,75	3,88	3,49	3,26	3,11	3,00	2,91	2,85	2,80	2,75
13		4,67	3,80	3,41	3,18	3,02	2,92	2,83	2,77	2,71	2,67
14		4,60	3,74	3,34	3,11	2,96	2,85	2,76	2,70	2,64	2,60
15		4,54	3,68	3,29	3,06	2,90	2,79	2,70	2,64	2,59	2,54
16		4,49	3,63	3,24	3,01	2,85	2,74	2,65	2,59	2,53	2,49
18		4,41	3,55	3,16	2,93	2,77	2,66	2,57	2,51	2,45	2,41
20		4,35	3,49	3,10	2,87	2,71	2,60	2,51	2,45	2,39	2,35
22		4,30	3,44	3,05	2,82	2,66	2,55	2,46	2,40	2,34	2,30
24		4,26	3,40	3,01	2,78	2,62	2,51	2,42	2,36	2,30	2,25
26		4,22	3,37	2,98	2,74	2,59	2,47	2,38	2,32	2,26	2,22
28		4,20	3,34	2,95	2,71	2,56	2,44	2,35	2,29	2,23	2,19
30		4,17	3,32	2,92	2,69	2,53	2,42	2,33	2,27	2,21	2,16
40		4,08	3,23	2,84	2,61	2,45	2,34	2,25	2,18	2,12	2,07
60		4,00	3,15	2,76	2,52	2,37	2,25	2,16	2,10	2,04	1,99
∞		3,84	2,99	2,99	2,37	2,21	2,09	2,00	1,94	1,88	1,83

F-Tabelle**Für 95% Sicherheit:**

(Ende)

f_2	f_1	12	14	16	18	20	22	24	∞
1		243,9	245,4	246,5	247,3	248,0	248,5	249,0	254,3
2		19,41	19,42	19,43	19,44	19,44	19,45	19,45	19,50
3		8,47	8,71	8,69	8,67	8,66	8,65	8,64	8,53
4		5,91	5,87	5,84	5,82	5,80	5,78	5,77	5,63
5		4,68	4,64	4,60	4,58	4,56	4,54	4,53	4,36
6		4,00	3,96	3,92	3,90	3,87	3,85	3,84	3,67
7		3,57	3,53	3,49	3,47	3,44	3,42	3,41	3,23
8		3,28	3,24	3,20	3,17	3,15	3,13	3,12	2,93
9		3,07	3,03	2,99	2,96	2,94	2,92	2,90	2,71
10		2,91	2,86	2,83	2,80	2,77	2,75	2,74	2,54
11		2,79	2,74	2,70	2,67	2,65	2,63	2,61	2,40
12		2,69	2,64	2,60	2,57	2,54	2,52	2,50	2,30
13		2,60	2,55	2,51	2,48	2,46	2,44	2,42	2,21
14		2,53	2,48	2,44	2,41	2,39	2,37	2,35	2,13
15		2,48	2,42	2,38	2,35	2,33	2,31	2,29	2,07
16		2,42	2,37	2,33	2,30	2,28	2,26	2,24	2,01
18		2,34	2,29	2,25	2,22	2,19	2,17	2,15	1,92
20		2,28	2,22	2,18	2,15	2,12	2,10	2,08	1,84
22		2,23	2,17	2,15	2,10	2,07	2,05	2,03	1,78
24		2,18	2,15	2,09	2,05	2,03	2,00	1,98	1,73
26		2,15	2,09	2,05	2,02	1,99	1,97	1,95	1,96
28		2,12	2,06	2,02	1,99	1,96	1,93	1,91	1,63
30		2,09	2,04	1,99	1,96	1,93	1,91	1,89	1,62
40		2,00	1,95	1,90	1,87	1,84	1,81	1,79	1,51
60		1,92	1,86	1,82	1,78	1,75	1,72	1,70	1,39
∞		1,75	1,69	1,64	1,60	1,57	1,54	1,52	1,00

F-Tabelle

Für 99% Sicherheit:

Fortsetzung →

f_2	f_1	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
1		4052	4999	5403	5625	5764	5859	5929	5981	6023	6056
2		98,49	99,00	99,17	99,25	99,30	99,33	99,35	99,36	99,38	99,40
3		34,12	30,81	29,46	28,71	28,24	27,91	27,67	27,49	27,34	27,23
4		21,20	18,00	16,69	15,98	15,52	15,21	14,98	14,80	14,66	14,54
5		16,26	13,27	12,06	11,39	10,97	10,67	10,44	10,27	10,14	10,04
6		13,47	10,92	9,78	9,15	8,75	8,47	8,26	8,10	7,98	7,87
7		12,25	9,55	8,45	7,85	7,46	7,19	6,99	6,84	6,72	6,62
8		11,26	8,65	7,59	7,01	6,63	6,37	6,18	6,03	5,91	5,81
9		10,56	8,02	6,99	6,42	6,06	5,80	5,61	5,47	5,35	5,26
10		10,04	7,56	6,55	5,99	5,64	5,39	5,20	5,06	4,94	4,85
11		9,65	7,21	6,22	5,67	5,32	5,07	4,89	4,74	4,63	4,54
12		9,33	6,93	5,95	5,41	5,06	4,82	4,64	4,50	4,39	4,30
13		9,07	6,70	5,74	5,21	4,86	4,62	4,44	4,30	4,19	4,10
14		8,86	6,51	5,56	5,04	4,70	4,46	4,28	4,14	4,03	4,94
15		8,68	6,36	5,42	4,89	4,56	4,32	4,11	4,00	3,89	3,80
16		8,53	6,23	5,29	4,77	4,44	4,20	4,03	3,89	3,78	3,69
18		8,29	6,01	5,09	4,58	4,25	4,01	3,84	3,71	3,60	3,51
20		8,10	5,85	4,94	4,43	4,10	3,87	3,70	3,56	3,46	3,37
22		7,94	5,72	4,82	4,31	3,99	3,76	3,58	3,45	3,34	3,25
24		7,82	5,61	4,72	4,22	3,90	3,67	3,49	3,36	3,25	3,16
26		7,72	5,53	4,64	4,14	3,82	3,59	3,42	3,29	3,18	3,09
28		7,64	5,45	4,57	4,07	3,75	3,53	3,36	3,23	3,12	3,03
30		7,56	5,39	4,51	4,02	3,70	3,47	3,30	3,17	3,06	3,97
40		7,31	5,18	4,31	3,83	3,51	3,29	3,12	2,99	2,89	2,80
60		7,08	4,98	4,13	3,65	3,34	3,12	2,95	2,82	2,72	2,63
∞		6,64	4,60	3,78	3,32	3,02	2,80	2,63	2,51	2,40	2,31

F-Tabelle**Für 99% Sicherheit:**

(Ende)

f_2	f_1	12	14	16	18	20	22	24	∞
1	6106	6143	6165	6196	6208	6222	6234	6366	
2	99,42	99,43	99,14	99,45	99,45	99,46	99,46	99,50	
3	27,05	26,92	26,82	26,75	26,69	26,64	26,60	26,12	
4	14,37	14,24	14,15	14,08	14,02	13,97	13,93	13,46	
5	9,89	9,77	9,68	9,61	9,55	9,51	9,47	9,02	
6	7,72	7,60	7,52	7,45	7,40	7,35	7,31	6,88	
7	6,47	6,36	6,27	6,21	6,16	6,11	6,07	5,65	
8	5,67	5,56	5,48	5,41	5,36	5,32	5,28	4,86	
9	5,11	5,00	4,92	4,86	4,81	4,77	4,73	4,31	
10	4,71	4,60	4,52	4,46	4,41	4,37	4,33	3,91	
11	4,40	4,29	4,21	4,15	4,10	4,06	4,02	3,60	
12	4,16	4,05	3,97	3,91	3,86	3,82	3,78	3,36	
13	3,96	3,86	3,78	3,72	3,66	3,62	3,59	3,17	
14	3,80	3,70	3,62	3,56	3,51	3,47	3,43	3,00	
15	3,67	3,56	3,49	3,42	3,37	3,33	3,29	2,87	
16	3,55	3,45	3,37	3,31	3,26	3,22	3,18	2,75	
18	3,37	3,27	3,19	3,13	3,08	3,04	3,00	2,57	
20	3,23	3,13	3,05	2,99	2,94	2,90	2,86	2,42	
22	3,12	3,02	2,94	2,88	2,83	2,79	2,75	2,31	
24	3,03	2,93	2,85	2,79	2,74	2,70	2,66	2,21	
26	2,96	2,86	2,78	2,72	2,66	2,62	2,58	2,13	
28	2,90	2,79	2,72	2,65	2,60	2,56	2,52	2,06	
30	2,84	2,74	2,66	2,60	2,55	2,51	2,47	2,01	
40	2,66	2,56	2,48	2,42	2,37	2,33	2,29	1,80	
60	2,50	2,39	2,31	2,25	2,20	2,16	2,12	1,60	
∞	2,18	2,07	1,99	1,92	1,87	1,83	1,79	1,00	

F-Tabelle**Für 99,9% Sicherheit:**

Fortsetzung →

f_2	f_1	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
1		$4,1 \cdot 10^5$	$5,0 \cdot 10^5$	$5,4 \cdot 10^5$	$5,6 \cdot 10^5$	$5,8 \cdot 10^5$	$5,9 \cdot 10^5$	$5,9 \cdot 10^5$	$6,0 \cdot 10^5$	$6,0 \cdot 10^5$	$6,1 \cdot 10^5$
2		998,2	999,0	999,2	999,2	999,3	999,3	999,3	999,4	999,4	999,4
3		167,5	148,5	141,1	137,1	134,6	132,8	131,5	130,6	129,8	129,2
4		74,14	61,25	56,18	53,44	51,71	50,53	49,66	49,00	48,47	48,05
5		47,04	36,61	33,20	31,09	29,75	28,84	28,15	27,64	27,23	26,91
6		35,51	27,00	23,70	21,90	20,81	20,03	19,46	19,03	18,68	18,41
7		29,22	21,69	18,77	17,19	16,21	15,52	15,01	14,63	14,32	14,08
8		25,42	18,49	15,83	14,39	13,49	12,86	12,39	12,04	11,76	11,53
9		22,86	16,39	13,90	12,56	11,71	11,13	10,70	10,37	10,10	9,89
10		21,04	14,41	12,55	11,28	10,48	9,92	9,51	9,20	8,95	8,75
11		19,69	13,81	11,56	10,35	9,58	9,05	8,65	8,35	8,11	7,92
12		18,64	12,97	10,80	9,63	8,89	8,38	8,00	7,71	7,47	7,28
13		17,81	12,31	10,21	9,07	8,35	7,86	7,49	7,21	6,98	6,80
14		17,14	11,78	9,73	8,62	7,95	7,43	7,07	6,80	6,58	6,40
15		16,59	11,34	9,34	8,25	7,57	7,09	6,74	6,37	6,25	6,07
16		16,12	10,97	9,00	7,94	7,27	6,81	6,46	6,19	5,98	5,81
18		15,38	10,39	8,49	7,46	6,81	6,35	6,01	5,76	5,55	5,38
20		14,82	9,96	8,10	7,10	6,46	6,02	5,69	5,44	5,23	5,07
22		14,38	9,61	7,80	6,81	6,19	5,76	5,43	5,19	4,99	4,82
24		14,03	9,34	7,55	6,59	5,98	5,55	5,23	4,99	4,79	4,63
26		13,74	9,12	7,36	6,41	5,80	5,38	5,07	4,83	4,63	4,48
28		13,50	8,93	7,19	6,25	5,66	5,24	4,93	4,69	4,50	4,34
30		13,29	8,77	7,05	6,12	5,53	5,12	4,81	4,58	4,39	4,23
40		12,61	8,25	6,60	5,70	5,13	4,73	4,43	4,21	4,02	3,87
60		11,97	7,76	6,17	5,32	4,76	4,37	4,08	3,87	3,68	3,53
∞		10,83	6,91	5,42	4,62	4,10	3,74	3,47	3,27	3,11	2,95

F-Tabelle**Für 99,9% Sicherheit:**

(Ende)

f_2	f_1	12	14	16	18	20	22	24	∞
1		$6,1 \cdot 10^5$	$6,1 \cdot 10^5$	$6,2 \cdot 10^5$	$6,4 \cdot 10^5$				
2		999,4	999,4	999,5	999,5	999,5	999,5	999,5	999,5
3		128,3	127,6	127,1	126,7	126,5	126,2	125,9	123,5
4		47,71	47,16	46,74	46,42	46,16	45,95	45,77	44,05
5		26,42	26,05	25,83	25,57	25,40	25,26	25,14	23,78
6		17,99	17,68	17,44	17,26	17,11	16,99	16,89	15,75
7		13,71	13,43	13,22	13,06	12,93	12,82	12,73	11,69
8		11,19	10,94	10,74	10,60	10,48	10,38	10,30	9,34
9		9,57	9,33	9,14	9,00	8,89	8,80	8,72	7,81
10		8,45	8,22	8,03	7,91	7,80	7,71	7,64	6,67
11		7,63	7,41	7,24	7,11	7,01	6,92	6,85	6,00
12		7,00	6,79	6,62	6,50	6,40	6,32	6,25	5,42
13		6,52	6,31	6,15	6,03	5,93	5,85	5,78	4,97
14		6,13	5,92	5,77	5,64	5,55	5,48	5,41	4,60
15		5,81	5,61	5,45	5,34	5,24	5,16	5,10	4,31
16		5,55	5,35	5,20	5,08	4,99	4,91	4,85	4,06
18		5,13	4,94	4,79	4,68	4,59	4,51	4,45	3,67
20		4,82	4,63	4,48	4,37	4,28	4,21	4,15	3,38
22		4,58	4,39	4,25	4,14	4,05	3,98	3,92	3,15
24		4,39	4,20	4,06	3,96	3,87	3,80	3,74	2,97
26		4,24	4,05	3,91	3,81	3,72	3,65	3,59	2,82
28		4,11	3,92	3,78	3,68	3,59	3,52	3,46	2,70
30		4,00	3,82	3,68	3,57	3,49	3,42	3,36	2,59
40		3,64	3,46	3,32	3,22	3,14	3,07	3,01	2,23
60		2,74	2,57	2,43	2,33	2,25	2,19	2,13	1,90
∞		2,74	2,57	2,43	2,33	2,25	2,19	2,13	1,00

C.4 χ^2 -Tabelle

Für 0,5% bis 10% Sicherheit:

Fortsetzung →

f	0,5%	1%	2,5%	5%	10%
1	0,00	0,00	0,00	0,004	0,02
2	0,01	0,02	0,05	0,10	0,21
3	0,07	0,11	0,22	0,35	0,58
4	0,21	0,30	0,48	0,71	1,06
5	0,41	0,55	0,83	1,15	1,61
6	0,68	0,87	1,24	1,64	2,20
7	0,99	1,24	1,69	2,17	2,83
8	1,34	1,65	2,18	2,73	3,49
9	1,73	2,09	2,70	3,33	4,17
10	2,16	2,56	3,25	3,94	4,87
11	2,60	3,05	3,82	4,57	5,58
12	3,07	3,57	4,40	5,23	6,30
13	3,57	4,11	5,01	5,89	7,04
14	4,07	4,66	5,63	6,57	7,79
15	4,60	5,23	6,26	7,26	8,55
16	5,14	5,81	6,91	7,96	9,31
17	5,70	6,41	7,56	8,67	10,09
18	6,26	7,01	8,23	9,39	10,86
19	6,84	7,63	8,91	10,12	11,65
20	7,43	8,26	9,59	10,85	12,44
21	8,03	8,90	10,28	11,59	13,24
22	8,64	9,54	10,98	12,34	14,04
23	9,26	10,20	11,69	13,09	14,85
24	9,89	10,86	12,40	13,85	15,66
25	10,52	11,52	13,12	14,61	16,47
26	11,16	12,20	13,84	15,38	17,29
27	11,81	12,88	14,57	16,15	18,11
28	12,46	13,56	15,31	17,93	18,94
29	13,12	14,26	16,05	17,71	19,77
30	13,79	14,95	16,79	18,49	20,60
31	14,46	15,66	17,54	19,28	21,43
32	15,13	16,36	18,29	20,07	22,27
33	15,82	17,07	19,05	20,87	23,11
34	16,50	17,79	19,81	21,66	23,95
35	17,19	18,51	20,57	22,46	24,80
36	17,89	19,23	21,34	23,27	25,64
37	18,59	19,96	22,11	24,07	26,49
38	19,29	20,69	22,88	24,88	27,34
39	20,00	21,43	23,65	25,70	28,20
40	20,71	22,16	24,43	26,51	29,05

χ^2 -Tabelle

Für 90% bis 99,9% Sicherheit:

(Ende)

f	90%	95%	97,5%	99%	99,5%	99,9%
1	2,71	3,84	5,02	6,63	7,88	10,83
2	4,61	5,99	7,38	9,21	10,60	13,82
3	6,25	7,81	9,35	11,35	12,64	16,27
4	7,78	9,49	11,14	13,28	14,86	18,47
5	9,24	11,07	12,83	15,09	16,75	20,52
6	10,64	12,59	14,45	16,81	18,55	22,46
7	12,02	14,07	16,01	18,48	20,78	24,32
8	13,36	15,51	17,53	20,09	21,96	26,13
9	14,68	16,92	19,02	21,67	23,59	27,88
10	15,99	18,31	20,48	23,21	25,19	29,59
11	17,28	19,68	21,92	24,72	26,76	31,26
12	18,55	21,03	23,34	26,22	28,30	32,91
13	19,81	22,36	24,74	27,69	29,82	34,53
14	21,06	23,68	26,12	29,14	31,32	36,12
15	22,31	25,00	27,49	30,58	32,80	37,70
16	23,54	26,30	28,85	32,00	34,27	39,25
17	24,77	27,59	30,19	33,41	35,72	40,79
19	25,99	28,87	31,53	34,81	37,16	42,31
19	27,20	30,14	32,85	36,19	38,58	43,82
20	28,41	31,41	34,17	37,57	40,00	45,31
21	29,62	32,67	35,48	38,93	41,40	46,80
22	30,81	33,92	36,78	40,29	42,80	48,27
23	32,01	35,17	38,08	41,64	44,18	49,73
24	33,20	36,42	39,36	42,98	45,56	51,18
25	34,38	37,65	40,65	44,31	46,93	52,62
26	35,56	38,89	41,92	45,64	48,29	54,05
27	36,74	40,11	43,19	46,96	49,64	55,48
28	37,92	41,34	44,46	48,28	50,99	56,89
29	39,09	42,56	45,72	49,59	52,34	58,30
30	40,26	43,77	46,98	50,89	53,67	59,70
31	41,42	44,99	48,23	52,19	55,00	61,10
32	42,59	46,19	49,49	53,49	56,33	62,49
33	43,75	47,40	50,73	54,78	57,65	63,87
34	44,90	48,60	51,97	56,06	58,96	65,25
35	46,06	49,80	53,20	57,34	60,27	66,62
36	47,21	51,00	54,44	58,62	61,58	67,98
37	48,36	52,19	55,67	59,89	62,88	69,34
38	49,51	53,38	56,90	61,16	64,18	70,70
39	50,66	54,57	58,12	62,43	65,48	72,05
40	51,81	55,76	59,34	63,69	66,77	73,40

C.5 r-Tabelle und t-Tabelle

r-Tabelle:

f	Sicherheit in %;		
	95%	99%	99,9%
1	1,409	1,414	1,414
2	1,645	1,715	1,730
3	1,757	1,918	1,982
4	1,814	2,051	2,178
5	1,848	2,142	2,329
6	1,870	2,208	2,447
7	1,885	2,256	2,540
8	1,895	2,294	2,616
9	1,903	2,324	2,678
10	1,910	2,348	2,730
11	1,916	2,368	2,774
12	1,920	2,385	2,812
13	1,923	2,399	2,845
14	1,926	2,412	2,874
15	1,928	2,423	2,899
16	1,931	2,432	2,921
17	1,933	2,440	2,941
18	1,935	2,447	2,959
19	1,936	2,454	2,975
20	1,937	2,460	2,990
25	1,942	2,483	3,047
30	1,945	2,498	3,085
35	1,948	2,509	3,113
40	1,949	2,518	3,152
45	1,950	2,524	3,152
50	1,951	2,529	3,166
100	1,956	2,553	3,227
200	1,958	2,553	3,227
300	1,958	2,566	3,271
400	1,959	2,568	3,275
500	1,959	2,570	3,279
600	1,959	2,571	3,281
700	1,959	2,572	3,283
800	1,959	2,573	3,285
∞	1,960	2,576	3,291

t-Tabelle:

f	Sicherheit in %;		
	95%	99%	99,9%
1	12,71	63,66	636,62
2	4,30	9,92	31,60
3	3,18	5,84	12,92
4	2,78	4,60	8,61
5	2,57	4,03	6,86
6	2,45	3,71	5,96
7	2,37	3,50	5,41
8	2,31	3,36	5,04
9	2,26	3,25	4,78
10	2,23	3,17	4,59
11	2,20	3,11	4,44
12	2,18	3,06	4,32
13	2,16	3,01	4,22
14	2,15	2,98	4,14
15	2,13	2,95	4,07
16	2,12	2,92	4,02
17	2,11	2,90	3,96
18	2,10	2,88	3,92
19	2,09	2,86	3,88
20	2,08	2,85	3,85
25	2,060	2,787	3,725
30	2,042	2,750	3,646
35	2,030	2,724	3,592
40	2,021	2,704	3,551
45	2,014	2,689	3,521
50	2,009	2,678	3,496
100	1,984	2,626	3,390
200	1,972	2,601	3,340
300	1,969	2,595	3,328
400	1,967	2,590	3,318
500	1,965	2,586	3,310
600	1,964	2,585	3,307
700	1,963	2,584	3,304
800	1,963	2,583	3,302
∞	1,960	3,576	3,291

Anhang D

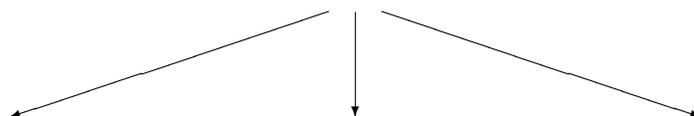
Systematik mathematischer Funktionen

Elementare Funktionen

Elementare Urfunktion = Proportionalität:	$y = c \cdot x$	$c =$ Proportionalitätskonstante
↓		
Familie der Geraden:	$\Delta y = c \cdot \Delta x$ für alle Δx	$c =$ konstante Steigung
↓		
Ableitung y' :	$\Delta y \approx y' \cdot \Delta x$ für kleine Δx	$y' =$ variable Steigung
↓		
Natürliche Wachstums/Abbaugesetze:	$y' = c \cdot y$	$c =$ spezifische Wachstums/Abbau-Konstante (= konstante momentane relative Änderungsrate)
↓		

Nichtelementare Funktionen

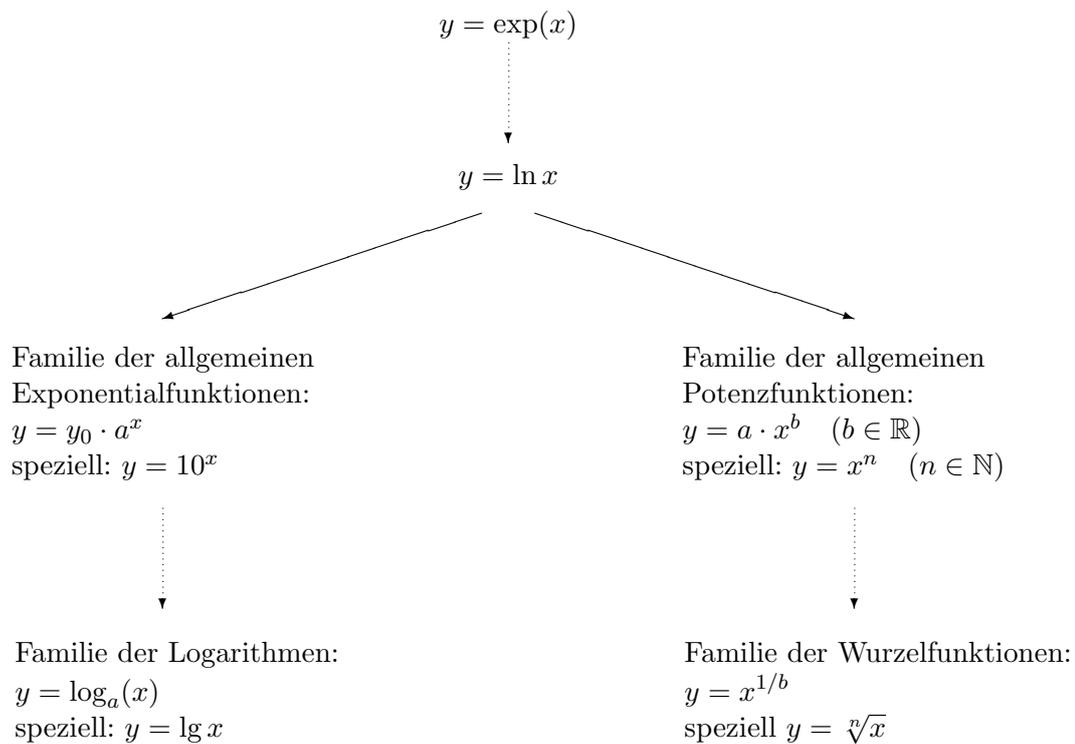
Nichtelementare Urfunktion = Exponentialfunktion:	$y = \exp(x)$ bzw. $y = e^x$
---	---------------------------------



- D.1** \ln -abhängige Funktionen **D.2** Winkelfunktionen und Verwandte **D.3** Statistische Funktionen

D.1 \ln -abhängige Funktionen

Abkömmling: Pfeil
Umkehrfunktion: punktierter Pfeil



Berechnungsformeln mittels \exp und \ln :

Allgemeine Exponentialfunktion: $y = y_0 \cdot a^x = y_0 \cdot \exp(\ln a \cdot x)$

speziell: $y = 10^x = \exp(\ln 10 \cdot x)$

Logarithmus zur Basis a : $y = \log_a x = \frac{1}{\ln a} \cdot \ln x$

speziell: $y = \lg x = \frac{1}{\ln 10} \cdot \ln x$

Allgemeine Potenzfunktion: $y = a \cdot x^b = a \cdot \exp(b \cdot \ln x)$

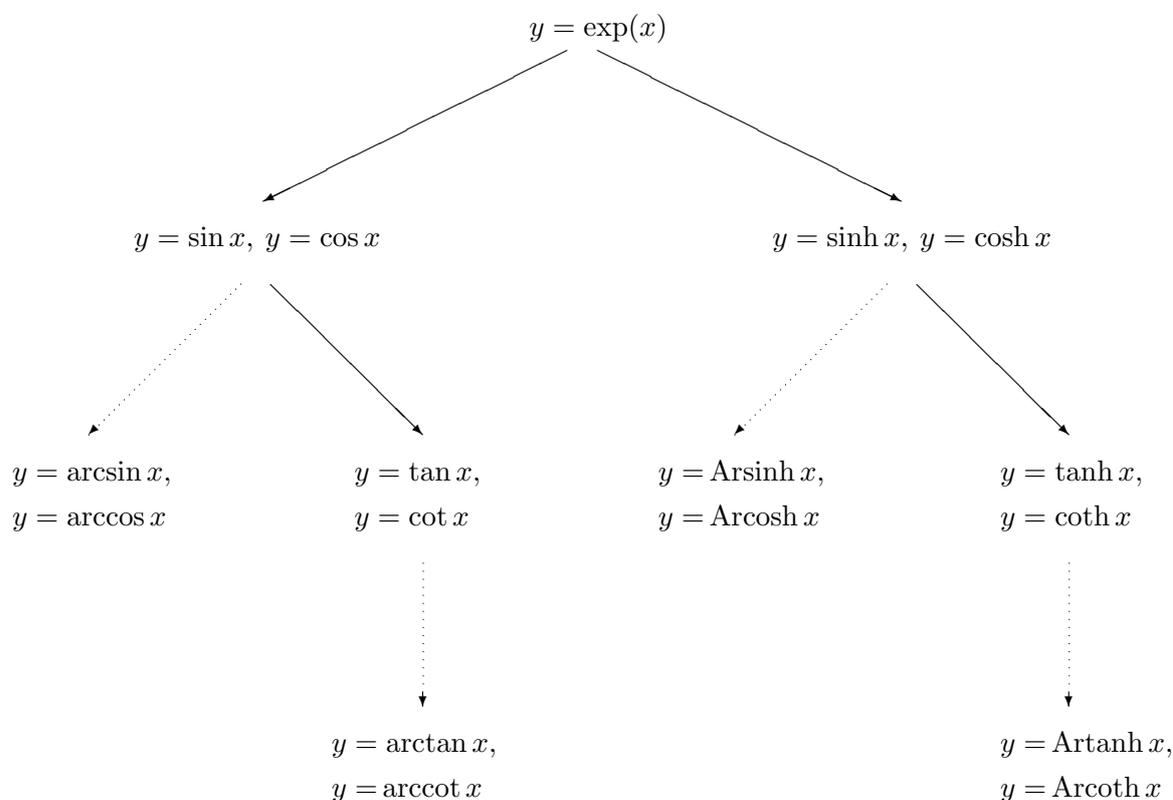
Wurzelfunktion: $y = x^{1/b} = \exp\left(\frac{\ln x}{b}\right)$

speziell: $y = \sqrt[n]{x} = \exp\left(\frac{\ln x}{n}\right)$

Für alle in D.1 genannten Funktionenklassen gibt es Verfahren, von der Wertetabelle zur Berechnungsformel zu kommen mittels graphischer Tests und Linearer Regression (siehe B, S.215 ff).

D.2 Winkelfunktionen und Verwandte

Abkömmling: Pfeil
Umkehrfunktion: punktierter Pfeil



Berechnungsformeln mittels \exp (und komplexer Zahlen):¹

Sinus:	$\sin x$	$= \frac{\exp(ix) - \exp(-ix)}{2i}$
Cosinus:	$\cos x$	$= \frac{\exp(ix) + \exp(-ix)}{2}$
Tangens:	$\tan x$	$= \frac{1}{i} \cdot \frac{\exp(ix) - \exp(-ix)}{\exp(ix) + \exp(-ix)}$
Cotangens:	$\cot x$	$= i \cdot \frac{\exp(ix) + \exp(-ix)}{\exp(ix) - \exp(-ix)}$
Sinus hyperbolicus:	$\sinh x$	$= \frac{\exp(x) - \exp(-x)}{2}$
Cosinus hyperbolicus:	$\cosh x$	$= \frac{\exp(x) + \exp(-x)}{2}$
Tangens hyperbolicus:	$\tanh x$	$= \frac{\exp(x) - \exp(-x)}{\exp(x) + \exp(-x)}$
Cotangens hyperbolicus:	$\coth x$	$= \frac{\exp(x) + \exp(-x)}{\exp(x) - \exp(-x)}$

¹siehe 5.11.5, S.125 ff

D.3 Statistische Funktionen

Normalverteilung

Glockenfunktion (Dichtefunktion

zur $N(\mu; \sigma)$ -Normalverteilung): $y = p(x) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{1}{2}\left(\frac{x-\mu}{\sigma}\right)^2\right)$

speziell: Gauß-Glocke: $y = \varphi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{x^2}{2}\right)$

$N(\mu; \sigma)$ -Normalverteilung: $P(x \leq a) = \int_{-\infty}^a \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{1}{2}\left(\frac{x-\mu}{\sigma}\right)^2\right) dx$
 $= \Phi\left(\frac{a-\mu}{\sigma}\right)$

speziell: Gauß'sche Φ -Funktion: $y = \Phi(a) = \int_{-\infty}^a \varphi(x) dx = \int_{-\infty}^a \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{x^2}{2}\right) dx$

Poissonverteilung

Dichtefunktion: $p_\lambda(k) = \frac{\lambda^k}{k!} \cdot \exp(-\lambda)$

Verteilungsfunktion: $P(k \leq a) = \sum_{k=0}^a p_\lambda(k) = \left(\sum_{k=0}^a \frac{\lambda^k}{k!}\right) \cdot \exp(-\lambda)$

Die Dichtefunktion der **Binomialverteilung**

$$p_{n,p}(k) = \binom{n}{k} \cdot p^k \cdot (1-p)^{n-k}$$

und die zugehörige Verteilungsfunktion

$$P(k \leq a) = \sum_{k=0}^a p_{n,p}(k) = \sum_{k=0}^a \binom{n}{k} \cdot p^k \cdot (1-p)^{n-k}$$

sind auf vielfältige Weise mit der Exponentialfunktion verbunden:

- Nach der 1. Grenzwertregel für die Binomialverteilung² strebt die Dichtefunktion $p_{n,p}(k)$ für $p \leq 0,01$ und große n (n mindestens dreistellig) gegen die Dichtefunktion $p_\lambda(k)$ der Poissonverteilung (wobei $\lambda = p \cdot n$).
- Nach der 2. Grenzwertregel für die Binomialverteilung³ strebt die Verteilungsfunktion $P(k \leq a) = \sum_{k=0}^a p_{n,p}(k)$ für $n > \frac{9}{p(1-p)}$ gegen die Verteilungsfunktion $\Phi\left(\frac{a-\lambda}{\sigma}\right)$ der $N(\lambda; \sigma)$ -Normalverteilung (wobei $\lambda = p \cdot n$ und $\sigma = \sqrt{p \cdot (1-p) \cdot n}$).

²siehe Regel 79, 9.3.3, S.192

³siehe Regel 81, 9.3.4, S.194

- Für die in den Binomialkoeffizienten $\binom{n}{k} = \frac{n!}{k! \cdot (n-k)!}$ auftretende

$$\mathbf{Fakultät} \quad n! = 1 \cdot 2 \cdot 3 \cdot \dots \cdot n$$

gibt es eine berühmte Schätzformel, die besonders für sehr große n benutzt wird:

Stirling'sche Formel:

$$\sqrt{2\pi n} \cdot n^n \cdot \exp(-n) \leq n! \leq \sqrt{2\pi n} \cdot n^n \cdot \exp(-n) \cdot \exp\left(\frac{1}{12n}\right)$$

- Außerdem gibt es eine (beliebig oft) differenzierbare Funktion, welche für alle reellen Zahlen x (auch für negative!) definiert ist und für alle natürlichen Zahlen n gerade den Wert $n!$ annimmt (man nennt diese Funktion "**Verallgemeinerung der Fakultät**"), nämlich

$$y = x \cdot \Gamma(x)$$

mit der berühmten

$$\mathbf{Gammafunktion} \quad \Gamma(x) = \lim_{N \rightarrow \infty} \int_0^N \exp((x-1) \ln t - t) dt$$