

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	2
1.1	Typen von Zahlen	2
1.2	Rechenregeln für Zahlen	3
1.2.1	Bruchrechnung	4
1.2.2	Prozentrechnung und die Begriffe relative Abweichung und relative Änderung	4
1.2.3	Potenzrechnung und die Binomialkoeffizienten $\binom{n}{k}$	6
1.2.4	Binomialkoeffizienten in der Wahrscheinlichkeitsrechnung	10
1.2.5	Runden von Dezimalzahlen auf n Nachkommastellen	11
2	Funktionen	12
2.1	Allgemeines über Variable und Funktionen	12
2.2	Einfache Klassen von Funktionen	15
2.2.1	Proportionalitäten	15
2.2.2	Anwendung: Proportionalität in der Mischungsrechnung	17
2.2.3	Geradengleichungen	18
2.2.4	Anwendung: Interpolation	18
2.2.5	Monome, Polynome und rationale Funktionen	19
2.2.6	Anwendung: Polynome zur näherungsweisen Berechnung stetiger Funktionen	20
2.3	Funktionen mehrerer Variabler	20

3	Einige fundamentale Algorithmen	22
3.1	Lineare Regression	22
3.1.1	Das Drei-Schritt-Verfahren	22
3.1.2	Das Ein-Schritt-Verfahren	23
3.1.3	Wahl zwischen den beiden Verfahren	23
3.1.4	Absicherung des Ergebnisses durch Probe	23
3.1.5	Der Linealtest	23
3.2	Der Gauß-Algorithmus für Lineare Gleichungssysteme	25
3.2.1	Standardaufgabe der Mischungsrechnung	25
3.2.2	Gauß-Algorithmus im Falle $n = 3$	26
3.2.3	Gauß-Algorithmus für $n = 2$ oder $n \geq 4$	27
3.2.4	Anwendung auf die Standardaufgabe der Mischungsrechnung	27
3.2.5	Mischungsrechnung bei überschüssiger Anzahl von Edukten	28
3.3	Konvergente Folgen	30
3.3.1	Grundbegriffe	30
3.3.2	Spezielle Typen von Folgen: Monotone und alternierende Konvergenz	32
3.3.3	Grenzwertregeln und summatorische Folgen	34
3.3.4	Anwendung: Konstante Zufuhr kontra prozentuale Abnahme	37
3.3.5	Die Konvergenzgeschwindigkeit von Folgen	39
II	Analysis	42
4	Differentialrechnung	43
4.1	Der Begriff der mittleren Änderungsrate	43
4.2	Der Begriff der momentanen Änderungsrate	44
4.3	Die Ableitung einer Funktion $y = f(x)$	46
4.3.1	Der Begriff der Ableitung	46
4.3.2	Kriterium zur Erkennung von Ableitungen und Stammfunktionen	47
4.3.3	Anwendung: Wichtige Beispiele von Ableitungen	47
4.4	Regeln für die Berechnung von Ableitungen	49

4.4.1	Berechnung der Ableitung aus einer Funktionsformel für $y = f(x)$. . .	49
4.4.2	Berechnung der Ableitung aus einer Wertetabelle für $y = f(x)$ (numerische Differentiation)	51
4.5	Anwendung: Fehlerrechnung	52
4.5.1	Ungenaue Zahlen	52
4.5.2	Fehlerfortpflanzung bei einer ungenauen Größe	53
4.5.3	Partielle Ableitungen	53
4.5.4	Fehlerfortpflanzung bei mehreren ungenauen Größen	54
4.5.5	Rechenbeispiele	54
4.6	Bestimmung von Maxima und Minima (Kurvendiskussion)	56
4.7	Anwendung: Beweis der Formeln für die Lineare Regression	58
4.7.1	Bestimmung der Konstanten C (Ein-Schritt-Verfahren)	58
4.7.2	Bestimmung der Konstanten A, B (Drei-Schritt-Verfahren)	60
5	Die wichtigsten nicht-elementaren Funktionen	63
5.1	Die natürlichen Wachstums- und Abbaugesetze	63
5.1.1	Beispiele für natürliche Wachstumsgesetze	65
5.1.2	Beispiele für natürliche Abbaugesetze	66
5.2	Berechnungsformel für natürliche Wachstumsgesetze	69
5.2.1	Fall $c = 1$ und $y_0 = 1$: Die Exponentialfunktion $y = \exp(x)$	69
5.2.2	Fall c und y_0 im Wert beliebig: Allgemeine Exponentialfunktionen . .	73
5.2.3	Beispiele	74
5.3	Eigenschaften der Exponentialfunktion $y = \exp(x)$	75
5.3.1	Historischer Exkurs: Erklärung der Namen “Exponentialfunktion“ und “e-Funktion“ für die natürliche Wachstumsfunktion $y = \exp(x)$	76
5.3.2	Graph und qualitative Eigenschaften der Exponentialfunktion	77
5.4	Der natürliche Logarithmus \ln (= logarithmus naturalis)	79
5.5	Drei Anwendungen des natürlichen Logarithmus	82
5.5.1	Graphischer Test für natürliches Wachstum/Abbau	82
5.5.2	Die Arrheniusgleichung	83

5.5.3	Der Begriff der Halbwertszeit	85
5.6	Die Schreibweise a^b für beliebige $a > 0$ und $b \in \mathbb{R}$	86
5.7	Exponentialfunktion zur Basis a , Logarithmus zur Basis a	87
5.7.1	Anwendung: Photometrie	90
5.8	Verschiedene Wachstumsgesetze im Vergleich, Allometrie	91
5.8.1	Natürliches (exponentielles, prozentuales) Wachstum/Abbau	91
5.8.2	Logarithmisches Wachstum/Abbau	92
5.8.3	Lineares Wachstum/Abbau	93
5.8.4	Allometrisches (potentielles) Wachstum/Abbau	94
5.9	Potenzfunktionen und Wurzelfunktionen	96
5.9.1	Potenzfunktionen	96
5.9.2	Wurzelfunktionen	99
5.10	Anwendung: Potenzfunktionen in der Kinetik	99
5.10.1	Verschiedene Maße für die Reaktionsgeschwindigkeit	99
5.10.2	Ordnung einer Reaktion bezüglich eines Edukts A	101
5.10.3	Geschwindigkeitsgesetz und Geschwindigkeitskonstante einer chemischen Reaktion	104
5.10.4	Graphische Tests zum Erkennen einer Reaktion von n -ter Ordnung bezüglich des Edukts A_1	106
5.10.5	Berechnungsformel für $[A_1](t)$	108
5.10.6	Graphische Tests zur Bestimmung der Reaktionsordnung	109
5.10.7	Halbwertszeiten bei Reaktionen der Ordnung n	112
5.10.8	Beispiel für ein biologisches Wachstumsgesetz mit Ähnlichkeit zur che- mischen Reaktion n -ter Ordnung	115
5.11	Die Winkelfunktionen und ihre Abkömmlinge	116
5.11.1	Cosinus, Sinus und Bogenlänge eines Winkels	116
5.11.2	Symmetrie-Eigenschaften von $\cos t$ und $\sin t$	117
5.11.3	Wertetabelle und Graph von $\cos t$ und $\sin t$	119
5.11.4	Bedeutung von Cosinus und Sinus in den Naturwissenschaften	121
5.11.5	Berühmte Formeln für Cosinus und Sinus	123

6	Integralrechnung	127
6.1	Das bestimmte Integral	127
6.1.1	Das Windrad-Beispiel	127
6.1.2	Das bestimmte Integral und seine numerische Berechnung	129
6.1.3	Umformungsregeln für bestimmter Integrale	131
6.1.4	Anwendung: Der Begriff des mittleren (durchschnittlichen) Wertes einer Funktion $y = f(x)$ im Bereich $a \leq x \leq b$	133
6.2	Stammfunktionen	135
6.3	Summatorische Funktionen zu einer Funktion $y = f(x)$	135
6.3.1	Wichtige Beispiele von summatorischen Funktionen	136
6.4	Der Hauptsatz der Differential- und Integralrechnung	138
6.5	Zwei Anwendungen des Hauptsatzes	141
6.5.1	Numerische Berechnung von Stammfunktionen	141
6.5.2	Unbestimmtes Integral und partielle Integration	142
III	Wahrscheinlichkeitsrechnung und Statistik	145
7	Grundlagen aus der Wahrscheinlichkeitsrechnung	146
7.1	Die Begriffe Zufallsvariable, Messmethode, Experiment	146
7.2	Messreihen und ihre statistischen Daten	148
7.3	Dichtefunktionen und Verteilungsfunktionen	150
7.4	Die drei wichtigsten Typen von Zufallsvariablen	155
8	Normalverteilung	156
8.1	Gauß-Glocke und Gauß'sche Φ -Funktion	156
8.2	Sicherheitsvereinbarungen, Fehler 1. und 2. Art	160
8.3	Entfernung fehlerhafter Messdaten: Der Ausreißertest	161
8.4	Der Streubereich und seine Schätzung	163
8.5	Der Vertrauensbereich für \bar{x} und seine Schätzung	165
8.5.1	Anwendung: Qualitätstest für quantitative Eigenschaften	166
8.6	Der F-Test zum Vergleich zweier Streuungen s_1, s_2	166

8.6.1	Anwendung: Test auf gleichmäßige Qualität einer Ware	167
8.7	Der Vertrauensbereich für s und seine Schätzung	169
8.8	Der t-Test zum Vergleich zweier Mittelwerte \bar{x}_1, \bar{x}_2	170
8.8.1	Anwendung 1: Zusammenfassung zweier Messreihen zu einer	171
8.8.2	Anwendung 2: Untersuchung von Einflüssen auf die normalverteilte Zufallsvariable x	172
8.9	Simultaner Vergleich von mehr als zwei empirischen Messreihen	172
8.9.1	Der Bartlett-Test zum Vergleich von Streuungen s_1, \dots, s_m (Verallgemeinerter F-Test)	172
8.9.2	Die Einfache Varianzanalyse zum Vergleich von Mittelwerten $\bar{x}_1, \dots, \bar{x}_m$ (Verallgemeinerter t-Test)	173
9	Poissonverteilung und Binomialverteilung	177
9.1	Allgemeines über Zufallsvariable mit Wertebereich in \mathbb{Z}	177
9.2	Poissonverteilung	180
9.2.1	Rechenbeispiele	181
9.3	Binomialverteilung	183
9.3.1	Zufallsvariable mit Befund positiv/negativ	183
9.3.2	Theorie der Binomialverteilung	184
9.3.3	Seltene Ereignisse: Poisson- statt Binomialverteilung	188
9.3.4	Viele Messungen: Normal- statt Binomialverteilung	189
9.4	Schätzung von unbekanntem p bei Binomialverteilung	191
9.5	Schätzung von unbekanntem λ bei Poissonverteilung	194
10	Tests für beliebige Zufallsvariable	196
10.1	Der Chi-Quadrat-Anpassungstest	196
10.2	Der Chi-Quadrat-Unabhängigkeitstest	198
A	Gebrauchsanleitung für logarithmisches Papier	202
A.1	Die Lage der $\ln x$ -Werte auf der senkrechten Achse	202
A.2	Die Lage der \ln -Werte auf der waagerechten Achse	203
A.3	Die zwei Sorten von logarithmischem Papier und ihr Zweck	204

A.3.1	Halblogarithmisches Papier	204
A.3.2	Doppeltlogarithmisches Papier	205
A.4	Zum praktischen Umgang mit logarithmischem Papier	206
B	Von der Wertetabelle zur Berechnungsformel	210
C	Tabellen zur Statistik	217
C.1	Φ -Tabelle	218
C.2	F-Tabelle	220
C.3	Dichtefunktion zur Poissonverteilung	226
C.4	χ^2 -Tabelle	228
C.5	r-Tabelle und t-Tabelle	230
D	Systematik mathematischer Funktionen	231
D.1	\ln -abhängige Funktionen	232
D.2	Winkelfunktionen und Verwandte	233
D.3	Statistische Funktionen	234