Mathematik für Studierende der Biologie und des Lehramtes Chemie

Dominik Schillo

Universität des Saarlandes

12. Vorlesung, 19.01.2018
(Stand: 19.01.2018, 15:52 Uhr)

Es seien Messdaten $(t_1, y_1), \dots, (t_m, y_m) \in \mathbb{R}^2$ gegeben. Wir haben versucht immer den gleichen Wert zu messen, sodass wir als Modellfunktion eine Konstante annehmen:

$$f_{x_1} \colon \mathbb{R} \to \mathbb{R}, t \mapsto x_1.$$

Wie sieht der optimale Parameter x_1^* aus? Dazu berechnen wir

$$A = \begin{pmatrix} 1 \\ \vdots \\ 1 \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{m \times 1} \quad \text{und} \quad y = \begin{pmatrix} y_1 \\ \vdots \\ y_m \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^m,$$

sodass

$$A^T A = m \quad \text{und} \quad A^T y = y_1 + \dots + y_m.$$

Damit erhalten wir

$$x_1^* = (A^T A)^{-1} A^T y = \frac{1}{m}(y_1 + \dots + y_m) =: \overline{y},$$

wobei $\overline{y}$ der sogenannte *Mittelwert* ist.

Gibt es einfache Darstellung oder eine Interpretation der optimalen Parameter, wenn wir als Modellfunktion

$$f_{x_1, x_2} \colon \mathbb{R} \to \mathbb{R}, \; t \mapsto x_1 + x_2 t$$

nehmen? Dazu berechnen wir

$$A = \begin{pmatrix} 1 & t_1 \\ \vdots & \vdots \\ 1 & t_m \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{m \times 2} \quad \text{und} \quad y = \begin{pmatrix} y_1 \\ \vdots \\ y_m \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^m,$$

sodass

$$A^T A = \begin{pmatrix} m & t_1 + \dots + t_m \\ t_1 + \dots + t_m & t_1^2 + \dots + t_m^2 \end{pmatrix}, \; A^T y = \begin{pmatrix} y_1 + \dots + y_m \\ t_1 y_1 + \dots + t_m y_m \end{pmatrix}.$$

Die Lösung ergibt sich mit $\overline{t} = \frac{1}{m}(t_1 + \dots + t_m)$ und $\overline{y} = \frac{1}{m}(y_1 + \dots + y_m)$ zu

$$x_1^* = \overline{y} - \frac{s_{t,y}}{s_{t,t}} \overline{t} \quad \text{und} \quad x_2^* = \frac{s_{t,y}}{s_{t,t}},$$

wobei

$$s_{t,y} = \frac{1}{m-1} \sum_{i=1}^m (t_i - \overline{t})(y_i - \overline{y}) = \frac{1}{m-1} \left(\sum_{i=1}^m t_i y_i - m \overline{t}\,\overline{y} \right)$$

die *(korrigierte) Stichprobenkovarianz* und

$$s_{t,t} = \frac{1}{m-1} \sum_{i=1}^m (t_i - \overline{t})^2 = \frac{1}{m-1} \left(\sum_{i=1}^m t_i^2 - m \overline{t}^2 \right)$$

die *(korrigierte) Stichprobenvarianz* ist.

Bemerkung

1. Der Koeffizient $\frac{1}{m-1}$ wird nicht einheitlich verwendet. Man sollte also immer die Definition im jeweiligen Kontext nachschlagen.
2. Gilt $s_{t,y} = 0$, so heißen $t = (t_1, \dots, t_n)^T$ und y *unkorreliert*.
3. Sind t und y unkorreliert, so gilt $x_2^* = 0$, sodass wir
$$x_1^* = \overline{y}$$
erhalten, d.h. wir befinden uns im Setting von Folie 2.

Beispiel

Betrachte die folgenden Messdaten

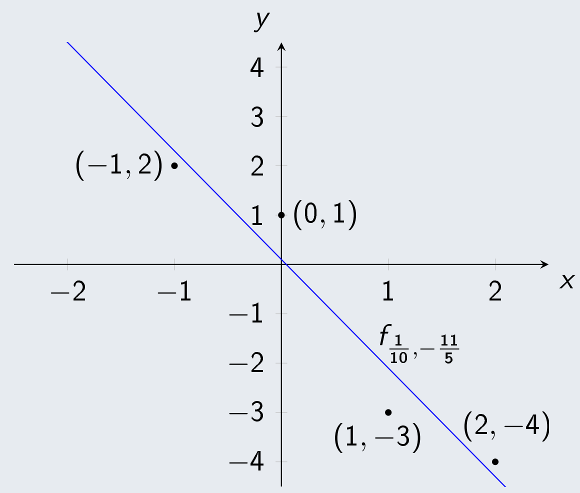
t	-1	0	1	2
y	2	1	-3	-4

und die Funktion
$$f_{x_1,x_2} : \mathbb{R} \to \mathbb{R}, \ t \mapsto x_1 + x_2 t$$
mit Parametern $x_1, x_2 \in \mathbb{R}$. Die Mittelwerte ergeben sich zu
$$\overline{t} = \frac{1}{4}(-1+0+1+2) = \frac{1}{2} \quad \text{und} \quad \overline{y} = \frac{1}{4}(2+1-3-4) = -1.$$

Beispiel

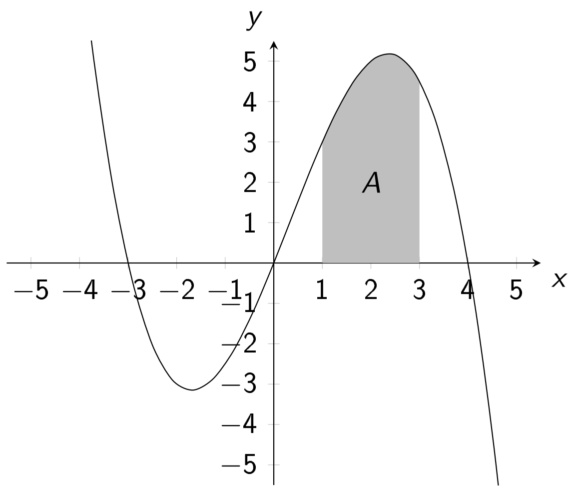
Für die Stichprobenkovarianz erhalten wir
$$\begin{aligned} s_{t,y} &= \frac{1}{4-1}\left(((-1)\cdot 2 + 0\cdot 1 + 1\cdot(-1) + 2\cdot(-4)) - 4\frac{1}{2}\cdot(-1)\right) \\ &= -\frac{11}{3} \end{aligned}$$
und für die Stichprobenvarianz
$$\begin{aligned} s_{t,t} &= \frac{1}{4-1}\left(((-1)^2 + 0^2 + 1^2 + 2^2) - 4\cdot\left(\frac{1}{2}\right)^2\right) \\ &= \frac{5}{3}. \end{aligned}$$
Also
$$x_1^* = -1 - \frac{\frac{-11}{3}}{\frac{5}{3}}\cdot\frac{1}{2} = \frac{1}{10} \quad \text{und} \quad x_2^* = \frac{\frac{-11}{3}}{\frac{5}{3}} = -\frac{11}{5}.$$

Beispiel



Integralrechnung

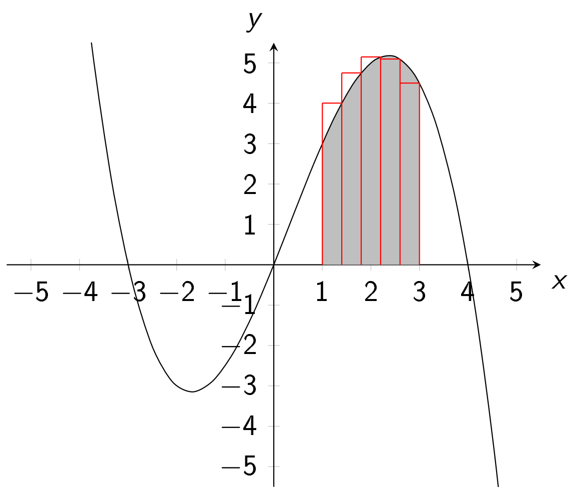
Wir wollen uns im Folgenden mit der Berechnung des Flächeninhalts zwischen einem Funktionsgraphen und der x-Achse beschäftigen. Im Folgenden sollen die betrachteten Funktionen f immer „hinreichend gut“ sein (stetig, differenzierbar etc) und stets $a, b \in \mathbb{R}$ mit $a < b$ sein.



Wir unterteilen das Intervall $[a; b]$ in kleinere Teilintervalle, z. B. können wir eine *äqudistante Zerlegung* uns anschauen, d. h.

$$[a; b] = [a; a + \Delta x] \cup [a + \Delta x; a + 2\Delta x] \cup \ldots \cup [a + (n-1)\Delta x; b]$$

für ein $n \in \mathbb{N}^*$, wobei $\Delta x = \frac{b-a}{n}$.



Der Flächeninhalt A lässt sich also durch die Summe der Flächeninhalte der Rechtecke approximieren:

$$\begin{aligned} &\Delta x \cdot f(a+\Delta x) + \Delta x \cdot f(a+2\Delta x) + \cdots + \Delta x \cdot f(b) \\ =&\left(f(a+\Delta x) + f(a+2\Delta x) + \cdots + f(b)\right)\Delta x \\ =&\sum_{k=1}^{n} f(a+k\Delta x)\Delta x. \end{aligned}$$

Wenn wir zum Grenzwert für $n \to \infty$ übergehen, erhalten wir den Flächeninhalt.

Definition

Das *Integral von f über $[a;b]$* ist definiert durch

$$\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x = \lim_{n\to\infty} \sum_{k=1}^{n} f(a+k\Delta x)\Delta x.$$

Die Funktion f heißt dann *Integrand*.

Rechenregeln

Seien $f, g\colon \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ Funktionen und $\alpha \in \mathbb{R}$. Dann gilt:

1. $\int_a^b 0\,\mathrm{d}x = 0$,
2. $\int_a^b f(x) + g(x)\,\mathrm{d}x = \int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x + \int_a^b g(x)\,\mathrm{d}x$,
3. $\int_a^b \alpha f(x)\,\mathrm{d}x = \alpha \int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x$,
4. $\int_a^a f(x)\,\mathrm{d}x = 0$,
5. $\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x = \int_a^c f(x)\,\mathrm{d}x + \int_c^b f(x)\,\mathrm{d}x$ *für* $a \le c \le b$,
6. $\int_b^a f(x)\,\mathrm{d}x = -\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x$,
7. $\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x \le \int_a^b g(x)\,\mathrm{d}x$, *falls* $f(x) \le g(x)$ *für alle* $x \in [a;b]$.

Frage

Gibt es eine weitere Möglichkeit Integrale auszurechnen ohne Approximation durch Rechtecke?

Definition

Sei $f\colon \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ eine Funktion. Wir nennen $F\colon \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ *eine Stammfunktion von f*, falls $F' = f$.

Bemerkung

Sind F_1 und F_2 zwei Stammfunktionen von f, dann gibt es eine reelle Zahl c, sodass

$$F_1(x) - F_2(x) = c$$

für alle $x \in \mathbb{R}$. Zwei Stammfunktionen unterscheiden sich also höchstens um eine Konstante.

Beispiel

1. Sei $f\colon \mathbb{R} \to \mathbb{R},\ x \mapsto x^2$. Dann ist $F\colon \mathbb{R} \to \mathbb{R},\ x \mapsto \frac{1}{3}x^3$ eine Stammfunktion f, da
$$F'(x) = \frac{1}{3}\left(3 \cdot x^{3-1}\right) = x^2 = f(x)$$
für alle $x \in \mathbb{R}$. Die Funktion $\tilde{F}\colon \mathbb{R} \to \mathbb{R},\ x \mapsto \frac{1}{3}x^3 + 5$ ist ebenfalls eine Stammfunktion von f.
2. Sei $g\colon (0;\infty) \to \mathbb{R},\ x \mapsto \frac{1}{x}$. Dann ist $G\colon (0;\infty) \to \mathbb{R},\ x \mapsto \ln(x)$ eine Stammfunktion von g.
3. Da
$$\exp'(x) = \exp(x)$$
für alle $x \in \mathbb{R}$ gilt, ist exp eine Stammfunktion exp.

Der nächste Satz verknüpft die Differentialrechnung mit der Integralrechnung und gibt uns eine Möglichkeit Integrale mit Hilfe von Stammfunktionen zu berechnen.

Satz (Hauptsatz der Differential- und Integralrechnung)

Sei $f\colon \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ eine Funktion. Dann gilt:

1. *Die Funktion $F\colon \mathbb{R} \to \mathbb{R},\ x \mapsto \int_a^x f(t)\,\mathrm{d}t$ ist eine Stammfunktion von f.*
2. *Ist $\tilde{F}\colon \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ eine Stammfunktion von f, dann gilt*

$$\int_a^b f(t)\,\mathrm{d}t = [\tilde{F}(x)]_a^b = \tilde{F}(b) - \tilde{F}(a).$$

Bemerkung

Aufgrund des letzten Satzes schreibt man auch oft

$$F = \int f(x)\,\mathrm{d}x.$$

Dies ist eine reine Schreibweise! Hierbei ist wieder zu beachten, dass eine Stammfunktion nur eindeutig bis auf eine Konstante ist.

Im Folgenden wollen wir einige wichtige Stammfunktionen festhalten:

f(x)	F(x)
x^r	$\frac{1}{r+1}x^{r+1} \quad (r \in \mathbb{R} \setminus \{-1\})$
$\frac{1}{x}$	$\ln(\lvert x\rvert)$
$\exp(x)$	$\exp(x)$
$\ln(x)$	$x\ln(x) - x$
$\cos(x)$	$\sin(x)$
$\sin(x)$	$-\cos(x)$

Wir wollen nun mit Hilfe von Stammfunktionen Integrale berechnen.

Beispiel

1. Wir wollen das Integral von $f\colon \mathbb{R} \to \mathbb{R},\ x \mapsto \exp(x) + x^2$ über $[0;1]$ berechnen. Es gilt

$$\begin{aligned}
\int_0^1 f(x)\,\mathrm{d}x &= \int_0^1 \exp(x) + x^2\,\mathrm{d}x \\
&= \int_0^1 \exp(x)\,\mathrm{d}x + \int_0^1 x^2\,\mathrm{d}x \\
&= [\exp(x)]_0^1 + \left[\frac{1}{3}x^3\right]_0^1 \\
&= \exp(1) - \exp(0) + \frac{1}{3} - 0 \\
&= e - \frac{2}{3}.
\end{aligned}$$

Beispiel

2 Wir wollen das Integral von

$$g\colon (0;\infty) \to \mathbb{R},\ x \mapsto \sin(x) - 2\cos(x)$$

über $[\pi; 2\pi]$ bestimmen. Es gilt

$$\begin{aligned}\int_\pi^{2\pi} g(x)\,\mathrm{d}x &= \int_\pi^{2\pi} \sin(x) - 2\cos(x)\,\mathrm{d}x\\ &= \int_\pi^{2\pi} \sin(x)\,\mathrm{d}x - 2\int_\pi^{2\pi} \cos(x)\,\mathrm{d}x\\ &= [-\cos(x)]_\pi^{2\pi} - [\sin(x)]_\pi^{2\pi}\\ &= (-\cos(2\pi) + \cos(\pi)) - (\sin(2\pi) - \sin(\pi))\\ &= (-1-1) - (0-0) = -2.\end{aligned}$$

Beispiel

3 Wir wollen das Integral

$$\int_{-1}^0 x\exp(x)\,\mathrm{d}x$$

berechnen. Unsere bisherigen Rechenregeln helfen uns nicht weiter, da wir ein Produkt als Integranden haben.

Um das Beispiel berechnen zu können benötigen wir folgende Regel, die sich aus der Produktregel herleiten lässt.

Satz (Partielle Integration)

Seien f, g Funktionen. Dann gilt

$$\int_a^b f(x)g(x)\,\mathrm{d}x = [F(x)g(x)]_a^b - \int_a^b F(x)g'(x)\,\mathrm{d}x$$

bzw.

$$\int f(x)g(x)\,\mathrm{d}x = F(x)g(x) - \int F(x)g'(x)\,\mathrm{d}x.$$

Beispiel

Setzen wir

$$f\colon \mathbb{R} \to \mathbb{R},\ x \mapsto \exp(x) \quad \text{und} \quad g\colon \mathbb{R} \to \mathbb{R},\ x \mapsto x,$$

so folgt

$$\begin{aligned}\int_{-1}^0 x\exp(x)\,\mathrm{d}x &= \int_{-1}^0 f(x)g(x)\,\mathrm{d}x\\ &= [F(x)g(x)]_{-1}^0 - \int_{-1}^0 F(x)g'(x)\,\mathrm{d}x\\ &= [\exp(x)x]_{-1}^0 - \int_{-1}^0 \exp(x)\cdot 1\,\mathrm{d}x\\ &= (0 - \exp(-1)(-1)) - [\exp(x)]_{-1}^0\\ &= \exp(-1) - (\exp(0) - \exp(-1))\\ &= -1 + 2\exp(-1).\end{aligned}$$

Bemerkung

Würden wir im letzten Beispiel die Rollen von f und g vertauschen, so würden wir mit der partiellen Integration nicht weiterkommen. Es ist also wichtig die Funktionen geeignet zu wählen!

Beispiel

1. Wir wollen nun die Stammfunktion von ln bestimmen. Es gilt mit partieller Integration

$$\int \ln(x)\, \mathrm{d}x = \int 1 \cdot \ln(x)\, \mathrm{d}x = x\ln(x) - \int x\frac{1}{x}\, \mathrm{d}x$$
$$= x\ln(x) - \int 1\, \mathrm{d}x = x\ln(x) - x,$$

wobei

$$f\colon \mathbb{R} \to \mathbb{R},\ x \mapsto 1 \quad \text{und} \quad g = \ln .$$

Beispiel

2. Wie finden wir eine Stammfunktion zu $\sin^2$? Mit $f = g = \sin$ erhalten wir

$$\int \sin(x)^2\, \mathrm{d}x = \int \sin(x)\cdot\sin(x)\, \mathrm{d}x$$
$$= -\cos(x)\sin(x) - \int (-\cos(x))\cdot\cos(x)\, \mathrm{d}x$$
$$= -\cos(x)\sin(x) + \int \cos(x)^2\, \mathrm{d}x$$
$$= -\cos(x)\sin(x) + \int 1 - \sin(x)^2\, \mathrm{d}x$$
$$= -\cos(x)\sin(x) + x - \int \sin(x)^2\, \mathrm{d}x.$$

Beispiel

Durch Umformen erhalten wir schließlich

$$\int \sin(x)^2\, \mathrm{d}x = \frac{1}{2}\left(-\cos(x)\sin(x) + x\right).$$

Damit ist

$$F\colon \mathbb{R} \to \mathbb{R},\ x \mapsto \frac{1}{2}\left(-\cos(x)\sin(x) + x\right)$$

eine Stammfunktion von $\sin^2$.