

52 Das Newton-Verfahren

52.1 Motivation

Das Konvergenzverhalten von Fixpunkt-Iterationen

$$x_{k+1} = \Phi(x_k), \quad k \in \mathbb{N}$$

zur Lösung nichtlinearer Gleichungen hängt entscheidend von der Wahl der Verfahrensfunktion Φ ab.

Eine geschickte Wahl von Φ führt auf das Newton-Verfahren. Es beruht auf einer Taylorapproximation 1. Ordnung (Linearisierung) und konvergiert sehr schnell, falls es konvergiert.

52.2 Newton-Verfahren für eine nichtlineare Gleichung

Wir suchen eine Nullstelle einer skalaren C^1 -Funktion $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$, d.h. eine Lösung der Gleichung $f(x) = 0$.

Das Newton-Verfahren basiert darauf, bei einem Näherungswert x_0 den Graphen von f durch die Tangente zu ersetzen und dessen Nullstelle als neue Näherung x_1 zu benutzen. Dieses Vorgehen wird iteriert.

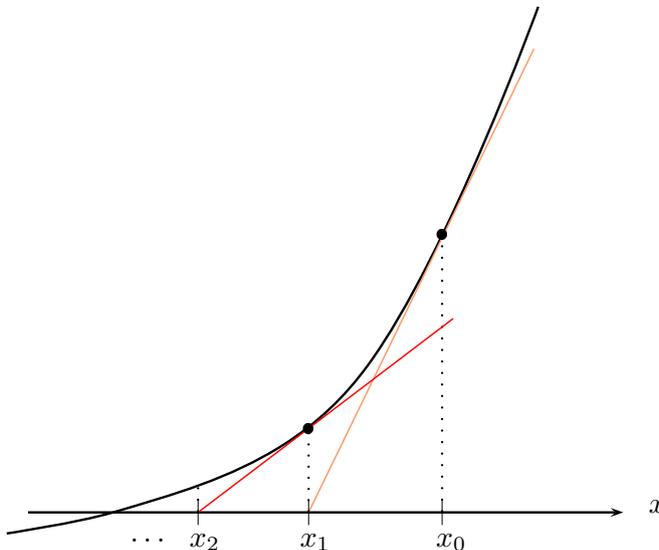


Abbildung 1:

Tangente in x_0 :

$$T_1(x) = f(x_0) + (x - x_0) \cdot f'(x_0)$$

(Taylorpolynom 1. Ordnung)

$x_1 :=$ Nullstelle von T_1 :

$$0 \stackrel{!}{=} f(x_0) + (x_1 - x_0) \cdot f'(x_0)$$
$$\Rightarrow x_1 = x_0 - \frac{f(x_0)}{f'(x_0)}$$

allgemeine Iterationsvorschrift:

$$x_{k+1} = x_k - \frac{f(x_k)}{f'(x_k)} =: \Phi(x_k), \quad k = 0, 1, 2, \dots$$

52.3 Beispiel

$f(x) = x^2 - 2$ hat Nullstellen bei $\pm\sqrt{2} \approx \pm 1.4142136 \dots$

Mit der Iterationsvorschrift

$$x_{k+1} = x_k - \frac{x_k^2 - 2}{2x_k}$$

und Startwert $x_0 := 1$ ergibt sich:

k	x_k
0	1.0000000
1	1.5000000
2	1.4166667
3	1.4142157
4	1.4142136

52.4 Bemerkung:

Das Verfahren konvergiert nicht immer, im Allgemeinen konvergiert es erst, wenn der Startwert x_0 „hinreichend nahe“ bei der Nullstelle liegt (lokale Konvergenz).

Einen wichtigen Fall, in dem Konvergenz auftritt, enthält der folgende Satz:

52.5 Satz: (Konvergenz des Newtonverfahrens)

Es sei $f : [a, b] \rightarrow \mathbb{R}$ eine zweimal differenzierbare konvexe Funktion mit $f(a) < 0$ und $f(b) > 0$. Dann gilt:

- Es gibt genau ein $\xi \in (a, b)$ mit $f(\xi) = 0$.
- Ist $x_0 \in [a, b]$ beliebig mit $f(x_0) \geq 0$, so ist die Folge

$$x_{n+1} := x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)}, \quad n \in \mathbb{N},$$

wohldefiniert und konvergiert monoton fallend gegen ξ .

- Gilt $f'(\xi) \geq C > 0$ und $f''(x) \leq K \quad \forall x \in (\xi, b)$ mit $K > 0$, so hat man für $n \in \mathbb{N}$ die Abschätzungen

$$|x_{n+1} - x_n| \leq |\xi - x_n| \leq \frac{K}{2C} |x_n - x_{n-1}|^2.$$

Beweis von (a) und (b):

- a) Da f konvex ist, gilt $f''(x) \geq 0$ für alle $x \in (a, b)$ und folglich ist f' monoton wachsend in $[a, b]$. Als stetige Funktion nimmt f sein Minimum über dem Intervall $[a, b]$ an, genauer:

$$\exists q \in [a, b] \quad \text{mit} \quad f(q) = \inf\{f(x) : x \in [a, b]\} < 0.$$

Falls $q \neq a$, gilt $f'(q) = 0$ und damit $f'(x) \leq 0$ für $x \leq q$ (f' monoton wachsend).

$\Rightarrow f$ ist im Intervall $[a, q]$ monoton fallend.

$\Rightarrow f$ kann in $[a, q]$ keine Nullstelle haben.

Dies stimmt auch für $q = a$.

Nach dem Zwischenwertsatz 19.2.b) liegt im Intervall (q, b) mindestens eine Nullstelle von f . Nach dem bisher Gezeigten liegen alle Nullstellen in (q, b) .

Angenommen es gäbe zwei Nullstellen $\xi_1 < \xi_2$.

Nach dem Mittelwertsatz (23.2) existiert $t \in (q, \xi_1)$ mit

$$f'(t) = \frac{f(\xi_1) - f(q)}{\xi_1 - q} = \frac{-f(q)}{\underbrace{\xi_1 - q}_{>0}} > 0.$$

$\Rightarrow f'(x) > 0$ für alle $x \geq \xi_1$ (f' monoton wachsend)

$\Rightarrow f$ ist streng monoton wachsend (und positiv) in $(\xi_1, b]$ und kann damit keine zweite Nullstelle $\xi_2 \in (\xi_1, b]$ besitzen.

- b) Sei $x_0 \in [a, b]$ mit $f(x_0) \geq 0$. Nach bisher Gezeigtem gilt: $x_0 \geq \xi$.
Durch Induktion beweisen wir, dass für die Folge $(x_n)_{n \in \mathbb{N}_0}$ definiert durch

$$x_{n+1} := x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)}, \quad (*)$$

gilt: $f(x_n) \geq 0$ und $x_{n-1} \geq x_n \geq \xi \quad \forall n \in \mathbb{N}_0$.

Induktionsanfang: $n = 0$. O.K.

Induktionsschritt: $n \rightarrow n + 1$: Aus $x_n \geq \xi$ folgt $f'(x_n) \geq f'(\xi) > 0$ (vgl. a))

$$\Rightarrow \frac{f(x_n)}{f'(x_n)} \geq 0$$

$$\stackrel{\text{nach } (*)}{\Rightarrow} x_{n+1} \leq x_n.$$

Wir zeigen: $f(x_{n+1}) \geq 0$.

Wir betrachten dazu die Hilfsfunktion

$$g(x) := f(x) - f(x_n) - (x - x_n)f'(x_n).$$

f' ist monoton wachsend.

$\Rightarrow g'(x) = f'(x) - f'(x_n) \leq 0$ für $x \leq x_n$.

Da $g(x_n) = 0$, gilt $g(x) \geq 0$ für $x \leq x_n$, also gilt insbesondere

$$0 \leq g(x_{n+1}) = f(x_{n+1}) - \underbrace{f(x_n) - (x_{n+1} - x_n)f'(x_n)}_{= 0 \text{ nach } (*)} = f(x_{n+1})$$

Aus $f(x_{n+1}) \geq 0$ folgt nach a), dass $x_{n+1} \geq \xi$. Damit ist gezeigt: $(x_n)_{n \in \mathbb{N}_0}$ fällt monoton und ist nach unten beschränkt durch ξ .

\Rightarrow Es existiert $\lim_{n \rightarrow \infty} x_n =: x^*$. Man hat $f(x^*) = 0$ (Fixpunkt-Iteration).

$\Rightarrow x^* = \xi$ wegen der Eindeutigkeit der Nullstelle. □

52.6 Bemerkungen

- a) Analoge Aussagen gelten auch, falls f konkav ist oder $f(a) > 0$ und $f(b) < 0$ gilt.
- b) Die Fehlerabschätzung 52.5.c) besagt, dass beim Newton-Verfahren quadratische Konvergenz vorliegt. Ist etwa $\frac{K}{2C} \approx 1$ und stimmen x_{n-1} und x_n auf k Dezimalen überein, so ist die Näherung x_{n+1} auf $2k$ Dezimalen genau und bei jeder Iteration verdoppelt sich die Zahl der gültigen Stellen.

Teil E

Mehrdimensionale Analysis

53 Partielle Ableitungen

Wir kennen bisher Differential- und Integralrechnung für Funktionen, die von einer Variablen abhängen. In Informatikgebieten wie Optimierung und Visual Computing spielen jedoch sehr oft Funktionen eine Rolle, die von mehreren Variablen abhängen. Wir müssen daher allgemeinere Konzepte betrachten.

53.1 Motivation

Wir können eine skalarwertige Funktion einer Variablen ableiten:

$$f'(\xi) := \lim_{h \rightarrow 0} \frac{f(\xi + h) - f(\xi)}{h}.$$

Dieser Ableitungsbegriff ist auch anwendbar bei vektorwertigen Funktionen einer Variablen:

$$\text{Für } f(x) = \begin{pmatrix} f_1(x) \\ \vdots \\ f_n(x) \end{pmatrix} \text{ definiert man: } f'(\xi) := \begin{pmatrix} f'_1(\xi) \\ \vdots \\ f'_n(\xi) \end{pmatrix}.$$

Wie aber differenziert man eine skalarwertige Funktion mehrerer Variablen, z.B.

$$f(x_1, x_2) = x_1^3 \cos x_2?$$

Differenziert man nach einer Variablen und hält alle anderen fest, gelangt man zu den partiellen Ableitungen. Zuerst verallgemeinern wir aber den Begriff eines offenen oder abgeschlossenen Intervalls.

53.2 Definition: (Offene oder abgeschlossene Mengen)

Es bezeichne $B_r(x) := \{y \in \mathbb{R}^n \mid |x - y| < r\}$ eine (offene) Kugel mit Radius $r > 0$. Eine Menge $D \subset \mathbb{R}^n$ heisst

- offen, falls gilt: $\forall x \in D \exists \varepsilon > 0$ so dass $B_\varepsilon(x) \subset D$.
- abgeschlossen, wenn ihr Komplement $\mathbb{R}^n \setminus D = D^c$ offen ist.

53.3 Definition: (Partielle Differenzierbarkeit)

Sei $D \subset \mathbb{R}^n$ offen, $f : D \rightarrow \mathbb{R}$ und $\xi \in D$.

- Die Funktion $f(x)$ ist in ξ nach x_i , partiell differenzierbar, falls der Grenzwert

$$\frac{\partial f}{\partial x_i}(\xi) := \lim_{h \rightarrow 0} \frac{f(\xi + h e_i) - f(\xi)}{h}$$

existiert. Dabei bezeichnet e_i den i -ten kanonischen Einheitsvektor im \mathbb{R}^n :

$$\begin{pmatrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \\ 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} \leftarrow i\text{-te Stelle .}$$

$\frac{\partial f}{\partial x_i}(\xi)$ heißt partielle Ableitung von f nach x_i im Punkt ξ .

- b) Ist $f(x)$ in jedem beliebigen Punkt $\xi \in D$ partiell differenzierbar nach x_i , so heißt f auf D partiell differenzierbar nach x_i . Trifft dies für alle Variablen x_i , $i = 1, \dots, n$ zu, so heißt f partiell differenzierbar (auf D).

Stetigkeitsbegriffe übertragen sich direkt von Funktionen einer Variablen auf Funktionen mehrerer Variabler, indem man Beträge durch euklidische Normen ersetzt.

Sind alle partiellen Ableitungen $\frac{\partial f}{\partial x_i}(x)$, $i = 1, \dots, n$, stetige Funktionen auf D , so heißt f stetig partiell differenzierbar (C^1 -Funktion) auf D .

Bemerkung: Statt $\frac{\partial f}{\partial x_i}$ schreibt man auch $\partial_{x_i} f$, f_{x_i} oder $D_i f$.

53.4 Beispiel

$$\begin{aligned} f(x_1, x_2) &= x_1^3 \cos x_2 \\ \frac{\partial f}{\partial x_1}(x_1, x_2) &= 3x_1^2 \cos x_2 \\ \frac{\partial f}{\partial x_2}(x_1, x_2) &= -x_1^3 \sin x_2 \end{aligned}$$

$f(x_1, x_2)$ ist auf ganz \mathbb{R}^2 stetig partiell differenzierbar.

Die Ableitungsregeln für Funktionen einer Variabler übertragen sich direkt auf Funktionen mehrerer Variabler.

53.5 Satz: (Differentiationsregeln)

Sind $f, g : D \rightarrow \mathbb{R}$ auf der offenen Menge $D \subset \mathbb{R}^n$ partiell differenzierbar, so gilt:

a) Linearität: $\frac{\partial}{\partial x_i}(\alpha f(x) + \beta g(x)) = \alpha \frac{\partial f}{\partial x_i}(x) + \beta \frac{\partial g}{\partial x_i}(x) \quad \forall \alpha, \beta \in \mathbb{R}$

b) Produktregel: $\frac{\partial}{\partial x_i}(f(x)g(x)) = \frac{\partial f}{\partial x_i}(x)g(x) + f(x)\frac{\partial g}{\partial x_i}(x)$

c) Quotientenregel: $\frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{f(x)}{g(x)} \right) = \frac{\frac{\partial f}{\partial x_i}(x)g(x) - f(x)\frac{\partial g}{\partial x_i}(x)}{g^2(x)} \quad \text{für } g(x) \neq 0.$

53.6 Definition: (Gradient)

Sei $D \subset \mathbb{R}^n$ offen und $f : D \rightarrow \mathbb{R}$ in $\xi \in D$ (nach allen x_i) partiell differenzierbar. Dann nennt man den Vektor

$$\text{grad } f(\xi) := \nabla f(\xi) := \begin{pmatrix} \frac{\partial f}{\partial x_1}(\xi) \\ \vdots \\ \frac{\partial f}{\partial x_n}(\xi) \end{pmatrix}$$

Gradient von f in ξ . Den symbolischen Vektor

$$\nabla := \begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial x_1} \\ \vdots \\ \frac{\partial}{\partial x_n} \end{pmatrix}$$

nennt man Nabla-Operator (nach der Form eines ägyptischen Musikinstruments).

53.7 Bemerkung

- Manche Bücher definieren $\text{grad } f$ als Zeilenvektor und ∇f als Spaltenvektor.
- Mit dem Nablaoperator läßt sich Satz 53.5 schreiben als

$$\begin{aligned} \nabla(\alpha f + \beta g) &= \alpha \nabla f + \beta \nabla g \\ \nabla(f \cdot g) &= g \nabla f + f \nabla g \\ \nabla \left(\frac{f}{g} \right) &= \frac{1}{g^2} (g \nabla f - f \nabla g) \quad \text{für } g \neq 0. \end{aligned}$$

- Der Vektor $\nabla f(\xi)$ zeigt in die Richtung des steilsten Anstiegs von f im Punkt ξ . Seine Länge

$$|\nabla f| = \sqrt{\sum_{i=1}^n \left(\frac{\partial f}{\partial x_i} \right)^2}$$

ist ein Maß für diese Steigung.

53.8 Anwendungsbeispiel

Ein kontinuierliches Grauwertbild kann als Funktion $f(x, y)$ der beiden Ortsvariablen (x, y) aufgefasst werden. $|\nabla f|$ ist ein einfacher Kantendetektor: Kanten befinden sich an den Orten (x, y) , in deren Umgebung der Grauwert stark variiert, d.h. in denen $|\nabla f(x, y)|$ groß ist. Die Kante verläuft senkrecht zur Richtung des steilsten Anstiegs (d.h. senkrecht zu ∇f).

Wir verallgemeinern nun den Begriff der Ableitung höherer Ordnung auf Funktionen mehrerer Variabler.

53.9 Definition: (Partielle Ableitungen höherer Ordnung)

Sei $D \subset \mathbb{R}^n$ offen und $f : D \rightarrow \mathbb{R}$. Ist f partiell differenzierbar auf D und sind die partiellen Ableitungen selbst wieder differenzierbar, erhält man als partielle Ableitungen zweiter Ordnung

$$\frac{\partial^2 f}{\partial x_j \partial x_i} := \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\partial f}{\partial x_i} \right).$$

Induktiv definiert man die partiellen Ableitungen k -ter Ordnung durch $(i_1, \dots, i_k \in \{1, \dots, n\})$

$$\frac{\partial^k f}{\partial x_{i_k} \partial x_{i_{k-1}} \dots \partial x_{i_1}} := \frac{\partial}{\partial x_{i_k}} \left(\frac{\partial^{k-1} f}{\partial x_{i_{k-1}} \dots \partial x_{i_1}} \right) \quad \text{für } k \geq 2.$$

Eine Funktion $f(x)$ heißt k -fach partiell differenzierbar, falls alle partiellen Ableitungen der Ordnung k ,

$$\frac{\partial^k f}{\partial x_{i_k} \dots \partial x_{i_1}} = D_{i_k} \dots D_{i_1} f := \partial_{x_{i_k} \dots x_{i_1}} := f_{x_{i_k} \dots x_{i_1}} \quad \text{existieren.}$$

Sind sie sogar stetig, so heißt $f(x)$ k -fach stetig differenzierbar (C^k -Funktion).
Stetige Funktionen werden auch als C^0 -Funktionen bezeichnet.

Spielt die Reihenfolge, in der man die partiellen Ableitungen berechnet, eine Rolle?
Man kann folgendes Resultat zeigen:

53.10 Satz: (Vertauschbarkeitssatz von Schwarz)

Sei $D \subset \mathbb{R}^n$ offen und $f : D \rightarrow \mathbb{R}$. Falls f eine C^2 -Funktion ist, sind die partiellen Ableitungen vertauschbar.

$$\frac{\partial^2 f}{\partial x_i \partial x_j} = \frac{\partial^2 f}{\partial x_j \partial x_i} \quad \forall i, j \in \{1, \dots, n\}.$$

Folgerung: Ist f eine C^k -Funktion, so kann man die Reihenfolge der partiellen Ableitungen bis zur Ordnung k beliebig vertauschen.

53.11 Beispiel

Für die Funktion $f(x, y, z) = z^2 \sin(x^3) + (\cos y \sin x - e^{-x})z^2$ soll f_{xyz} berechnet werden.
Klar: $f(x, y, z)$ ist C^3 -Funktion. Wenn man zuerst nach y partiell differenziert, fallen einige Terme sofort weg:

$$\begin{aligned} f_{xyz}(x, y, z) &= \frac{\partial^2}{\partial x \partial z} (f_y(x, y, z)) = \frac{\partial^2}{\partial x \partial z} (-(\sin y \sin x) z^2) \\ &= \frac{\partial}{\partial x} (-2z \sin y \sin x) = -2z \sin y \cos x. \end{aligned}$$

Im Gradienten treten alle partiellen Ableitungen 1. Ordnung auf.

Gibt es einen Ausdruck, in dem alle partiellen Ableitungen 2. Ordnung auftreten?

53.12 Definition: (Hesse-Matrix)

Sei $D \subset \mathbb{R}^n$ offen und $f : D \rightarrow \mathbb{R}$ sei im Punkt $\xi \in D$ zweimal partiell differenzierbar. Dann nennt man die Matrix

$$Hf(\xi) := \begin{pmatrix} \frac{\partial^2 f}{\partial x_1^2}(\xi) & \frac{\partial^2 f}{\partial x_1 \partial x_2}(\xi) & \cdots & \frac{\partial^2 f}{\partial x_1 \partial x_n}(\xi) \\ \frac{\partial^2 f}{\partial x_2 \partial x_1}(\xi) & \frac{\partial^2 f}{\partial x_2^2}(\xi) & \cdots & \frac{\partial^2 f}{\partial x_2 \partial x_n}(\xi) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial^2 f}{\partial x_n \partial x_1}(\xi) & \frac{\partial^2 f}{\partial x_n \partial x_2}(\xi) & \cdots & \frac{\partial^2 f}{\partial x_n^2}(\xi) \end{pmatrix}$$

die Hesse-Matrix von f in ξ .

53.13 Bemerkungen

- a) Für eine C^2 -Funktion ist die Hesse-Matrix nach dem Vertauschbarkeitssatz von Schwarz symmetrisch.
- b) Wir werden sehen, dass die Hesse-Matrix eine große Rolle bei der Klassifikation von Extrema einer Funktion mehrerer Variablen spielt (Unterscheidung Maxima-Minima).

Ähnlich wie wir aus ∇f die wichtige rotationsinvariante Größe $|\nabla f|$ abgeleitet haben, können wir auch aus Hf eine rotationsinvariante skalare Größe gewinnen. Hierzu betrachten wir die Summe der Diagonalelemente (Spur) von Hf .

53.14 Definition: (Laplace-Operator)

Sei $D \subset \mathbb{R}^n$ offen und f in $\xi \in D$ zweimal partiell differenzierbar. Dann nennt man

$$\Delta f(\xi) := \sum_{i=1}^n \frac{\partial^2 f}{\partial x_i^2}(\xi)$$

den Laplace-Operator von f in ξ . Bemerkung:

- a) Beachte den Unterschied zwischen dem Nabla-Operator ∇ und dem Laplace-Operator Δ .
- b) In der Bildverarbeitung verwendet man beispielsweise den Laplace-Operator zur Lokalisierung von Kanten. Kanten werden definiert als Orte, an denen der Laplace-Operator einen Nulldurchgang macht.

53.15 Anwendung: Partielle Differentialgleichungen

Viele Prozesse in der Physik und den Ingenieurwissenschaften lassen sich durch Gleichungen beschreiben, die Beziehungen zwischen einer gesuchten Funktion (z.B. Druck, Temperatur, Konzentration, ...) und ihren partiellen Ableitungen der Ordnung ≤ 2 beschreibt (partielle Differentialgleichungen 2. Ordnung).

Beispiele:

- a) Laplace-Gleichung (Potentialgleichung)

$$\Delta u = 0$$

Spielt z.B. eine Rolle in der Physik: Gravitations-, elektrostatische Felder, Elastizitätstheorie. Funktionen, welche die Laplace-Gleichung erfüllen, nennt man harmonische Funktionen.

- b) Wellengleichung

$$u_{tt} = \Delta u$$

Tritt bei Schwingungsproblemen auf, z.B. der Ausbreitung von Schallwellen. t beschreibt hierbei die Zeit, und $\Delta u = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2}$ misst die örtliche Veränderung.

- c) Diffusionsgleichung, Wärmeleitungsgleichung

$$u_t = \Delta u$$

Beschreibt die Dynamik von Ausgleichsprozessen wie Diffusion und Wärmeleitung. u ist hierbei die Konzentration bzw. Temperatur, und t ist die Zeit.

In der Bildverarbeitung verwendet man Diffusionsprozesse zum Entrauschen (Diffusionsfilter). u beschreibt den Grauwert, und die „Diffusionszeit“ t ist ein Maß für die Glättung.

Bisher haben wir nur Ableitungen einer Funktion f von mehreren Variablen x_1, \dots, x_n längs der Koordinatenrichtung e_1, \dots, e_n betrachtet. Können wir dies auf beliebige Richtungen verallgemeinern?

53.16 Definition: (Richtungsableitung)

Sei $D \subset \mathbb{R}^n$ offen, $f : D \rightarrow \mathbb{R}$ und $\xi \in D$.

Für einen Vektor $v \in \mathbb{R}^n$ mit $|v| = 1$ heißt

$$D_v f(\xi) = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{f(\xi + hv) - f(\xi)}{h}$$

die Richtungsableitung (Gateaux-Ableitung) von f in Richtung v .

53.17 Bemerkungen

- a) Für $v = e_1$ liefert die Richtungsableitung gerade die i -te partielle Ableitung:

$$D_{e_i}f(\xi) = \frac{\partial f}{\partial x_i}(\xi)$$

Dies folgt sofort aus Def. 53.3 und Def. 53.16.

- b) Statt $D_v f$ schreibt man oft auch $\frac{\partial f}{\partial v}$.
- c) Die Richtungsableitung $D_v f(\xi)$ beschreibt den Anstieg (die Steigung) von $f(\xi)$ in der Richtung v .

Gibt es ein einfaches Verfahren, wie man Richtungsableitungen berechnet? Man kann zeigen:

53.18 Satz: (Darstellung der Richtungsableitung durch den Gradienten)

Sei $D \subset \mathbb{R}^n$ offen, $\xi \in D$ und $f : D \rightarrow \mathbb{R}$ sei in ξ stetig differenzierbar.

Dann existiert die Richtungsableitung $D_v f$ für jeden Einheitsvektor $v \in \mathbb{R}^n$ und es gilt:

$$D_v f(\xi) = v^\top \nabla f(\xi).$$

53.19 Beispiel

$$f(x, y) = e^{-x} \sin y$$

Gesucht ist die Richtungsableitung in Richtung $v = \begin{pmatrix} 3/5 \\ 4/5 \end{pmatrix}$ im Punkt $\begin{pmatrix} 0 \\ \pi/6 \end{pmatrix}$.

$$f_x(x, y) = -e^{-x} \sin y \Rightarrow f_x\left(0, \frac{\pi}{6}\right) = (-1) \cdot \frac{1}{2} = -\frac{1}{2}$$

$$f_y(x, y) = e^{-x} \cos y \Rightarrow f_y\left(0, \frac{\pi}{6}\right) = 1 \cdot \frac{1}{2} \sqrt{3} = \frac{1}{2} \sqrt{3}$$

$$(D_v f)\left(0, \frac{\pi}{6}\right) = v^\top \nabla f\left(0, \frac{\pi}{6}\right) = \frac{3}{5} \cdot \left(-\frac{1}{2}\right) + \frac{4}{5} \cdot \frac{1}{2} \sqrt{3} = -\frac{3}{10} + \frac{2}{5} \sqrt{3}$$

53.20 Bemerkungen

- a) Für $\nabla f \neq 0$ nimmt die Richtungsableitung ihren größten Wert an für $v = \frac{\nabla f}{|\nabla f|}$.
Dann gilt:

$$D_v f = v^\top \nabla f = \frac{(\nabla f)^\top}{|\nabla f|} \nabla f = \frac{|\nabla f|^2}{|\nabla f|} = |\nabla f|.$$

Daher zeigt der Gradient in Richtung des steilsten Anstiegs.

- b) In der Gegenrichtung $v = -\frac{\nabla f}{|\nabla f|}$ gilt: $D_v f = -\frac{(\nabla f)^\top}{|\nabla f|} \nabla f = -|\nabla f|$.

c) Wählt man eine Richtung v die orthogonal zu ∇f ist, erhält man:

$$D_v f = \frac{(\nabla f^\perp)^\top}{|\nabla f^\perp|} \nabla f = 0.$$

Somit ist die Steigung Null, wenn wir uns senkrecht zum Gradienten bewegen.

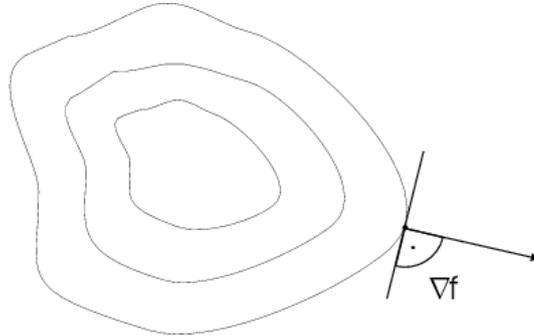


Abbildung 2:

$\nabla f(\xi)$ steht in ξ senkrecht zur Höhenlinie $\{x \in D \mid f(x) = f(\xi)\}$.

54 Ableitungsoperatoren für Vektorwertige Funktionen

54.1 Motivation

Vektorwertige Funktionen mehrerer Variabler treten in der Informatik z.B. bei der Verarbeitung von Farbbildern auf. Kontinuierliche Farbbilder lassen sich als Funktionen $f : D \rightarrow \mathbb{R}^3$ auffassen. D ist ein rechteckiger Bildbereich, und der Wertebereich beschreibt die 3 Kanäle rot, grün, blau.

Wie verallgemeinert man Konzepte wie partielle Ableitungen und Gradient auf vektorwertige Funktionen?

54.2 Definition: (Partielle Differenzierbarkeit)

Sei $D \subset \mathbb{R}^n$ offen und $\xi \in D$. Die vektorwertige Funktion $f : D \rightarrow \mathbb{R}^m$ heißt partiell differenzierbar in ξ , falls

$$\frac{\partial f}{\partial x_i}(\xi) := \lim_{h \rightarrow 0} \frac{f(\xi + he_i) - f(\xi)}{h}$$

für $i = 1, \dots, n$ existieren.

(Dabei ist der Grenzwert vektorwertiger Funktionen im Sinne der euklidischen Norm zu verstehen.)

54.3 Bemerkung

Die partiellen Ableitungen lassen sich also komponentenweise berechnen:

$$\frac{\partial f}{\partial x_i}(\xi) := \begin{pmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial x_i}(\xi) \\ \vdots \\ \frac{\partial f_m}{\partial x_i}(\xi) \end{pmatrix} \quad (i = 1, \dots, n).$$

Diese $m \cdot n$ partiellen Ableitungen lassen sich als Einträge einer $m \times n$ -Matrix deuten. Sie ist die Verallgemeinerung des Gradienten auf den vektorwertigen Fall:

54.4 Definition: (Jacobi-Matrix)

Sei $D \subset \mathbb{R}^n$ offen, $\xi \in D$ und $f : D \rightarrow \mathbb{R}^m$ partiell differenzierbar in ξ . Dann heißt

$$Jf(\xi) := \begin{pmatrix} \nabla^\top f_1(\xi) \\ \vdots \\ \nabla^\top f_m(\xi) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial x_1}(\xi) & \dots & \frac{\partial f_1}{\partial x_n}(\xi) \\ \vdots & & \vdots \\ \frac{\partial f_m}{\partial x_1}(\xi) & \dots & \frac{\partial f_m}{\partial x_n}(\xi) \end{pmatrix}$$

die Jacobi-Matrix (Funktionalmatrix) von f in ξ .

54.5 Bemerkungen

- Verwechseln Sie nicht die Hesse-Matrix (2. Ableitungen einer skalarwertigen Funktion) mit der Jacobi-Matrix (1. Ableitungen einer vektorwertigen Funktion).
- I.A. ist die Jacobi-Matrix weder quadratisch noch symmetrisch.
- Gelegentlich schreibt man statt Jf auch Df oder f' .

54.6 Beispiel

Die Jacobi-Matrix der Funktion $f : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}^3$ mit

$$f : \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} x^2 y \\ \cos y \\ e^{xy} \end{pmatrix}$$

lautet:

$$Jf(x, y) = \begin{pmatrix} 2xy & x^2 \\ 0 & -\sin y \\ ye^{xy} & xe^{xy} \end{pmatrix}.$$

54.7 Definition: (Vektorfeld)

Im Fall $m = n$ ist $f : D \rightarrow \mathbb{R}^n$ mit $D \subset \mathbb{R}^n$ ein Vektorfeld auf D . Ist jede Koordinatenfunktion f_i eine C^k -Funktion, so heißt f ein C^k -Vektorfeld.

Bemerkung: Beispiele für Vektorfelder sind Geschwindigkeitsfelder strömender Gase oder der Temperaturgradient innerhalb eines Festkörpers.

54.8 Definition: (Divergenz)

Sei $D \subset \mathbb{R}^n$ offen. Für ein differenzierbares Vektorfeld $f : D \rightarrow \mathbb{R}^n$ definiert man die Divergenz in $\xi \in D$ durch

$$\operatorname{div} f(\xi) := \sum_{i=1}^n \frac{\partial f_i}{\partial x_i}(\xi).$$

Bemerkung: Formal kann man die Divergenz als Skalarprodukt aus Nabla-Operator und Vektorfeld auffassen. Man schreibt daher manchmal statt $\operatorname{div} f$ auch $\langle \nabla, f \rangle$, $\nabla^\top f$ oder $\nabla \cdot f$. Man zeigt leicht:

54.9 Satz: (Rechenregeln für die Divergenz)

Sei $D \subset \mathbb{R}^n$ offen. Für partiell differenzierbare Vektorfelder $f, g : D \rightarrow \mathbb{R}^n$ und eine skalarwertige Funktion $\varphi : D \rightarrow \mathbb{R}$ gilt:

- Linearität: $\operatorname{div}(\alpha f + \beta g) = \alpha \operatorname{div} f + \beta \operatorname{div} g \quad \forall \alpha, \beta \in \mathbb{R}$
- Produktregel: $\operatorname{div}(\varphi f) = (\nabla \varphi)^\top f + \varphi \operatorname{div} f$.

54.10 Bemerkungen

- a) Obwohl der Nabla-Operator und die Divergenz ähnlich aussehen, unterscheiden sich ihre Wirkung sehr stark:
- Der Nabla-Operator erzeugt aus einer skalarwertigen Funktion eine vektorwertige Funktion.
 - Die Divergenz macht aus einem Vektorfeld eine skalarwertige Funktion.
- b) Mit Hilfe der Divergenz kann man den Laplace-Operatr umschreiben:
Ist $f : D \rightarrow \mathbb{R}$ eine skalarwertige C^2 -Funktion mehrerer Variabler, so gilt:

$$\Delta f = \operatorname{div}(\nabla f)$$

Somit kann man z.B. die Diffusionsgleichung $u_t = \Delta u$ als $u_t = \operatorname{div}(\nabla u)$ schreiben.

Neben der Divergenz gibt es noch einen weiteren wichtigen Differentialausdruck für Vektorfelder:

54.11 Definition: (Rotation)

Sei $D \subset \mathbb{R}^3$ offen. Für ein partiell differenzierbares Vektorfeld $f : D \rightarrow \mathbb{R}^3$ definiert man die Rotation in einem Punkt $\xi \in D$ durch

$$\operatorname{rot} f(\xi) := \begin{pmatrix} \frac{\partial f_3}{\partial x_2}(\xi) - \frac{\partial f_2}{\partial x_3}(\xi) \\ \frac{\partial f_1}{\partial x_3}(\xi) - \frac{\partial f_3}{\partial x_1}(\xi) \\ \frac{\partial f_2}{\partial x_1}(\xi) - \frac{\partial f_1}{\partial x_2}(\xi) \end{pmatrix}.$$

54.12 Bemerkungen

- a) Die Rotation ist nur für Vektorfelder im \mathbb{R}^3 definiert.

- b) Für zwei Vektoren $v = \begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \\ v_3 \end{pmatrix}, w = \begin{pmatrix} w_1 \\ w_2 \\ w_3 \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^3$ kann man das Kreuzprodukt $v \times w$ definieren durch

$$v \times w := \begin{pmatrix} v_2 w_3 - v_3 w_2 \\ v_3 w_1 - v_1 w_3 \\ v_1 w_2 - v_2 w_1 \end{pmatrix}.$$

Mit den kanonischen Einheitsvektoren

$$\begin{aligned} e_1 &= (1, 0, 0)^\top \\ e_2 &= (0, 1, 0)^\top \\ e_3 &= (0, 0, 1)^\top. \end{aligned}$$

kann man symbolisch schreiben (als Merkregel):

$$v \times w = \begin{vmatrix} e_1 & v_1 & w_1 \\ e_2 & v_2 & w_2 \\ e_3 & v_3 & w_3 \end{vmatrix} = e_1 \begin{vmatrix} v_2 & w_2 \\ v_3 & w_3 \end{vmatrix} - e_2 \begin{vmatrix} v_1 & w_1 \\ v_3 & w_3 \end{vmatrix} + e_3 \begin{vmatrix} v_1 & w_1 \\ v_2 & w_2 \end{vmatrix}.$$

Dabei wurde die symbolische Determinante formal nach der 1. Spalte entwickelt.

c) Mit $\nabla = \begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial x_1} \\ \frac{\partial}{\partial x_2} \\ \frac{\partial}{\partial x_3} \end{pmatrix}$ kann man $\text{rot } f$ dann *formal schreiben als* $\nabla \times f$.

54.13 Beispiel

$$f : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}^3 \text{ mit } f(x, y, z) = \begin{pmatrix} 3x^2y - z \\ z^2 + x^2 \\ y + 2x^2 \end{pmatrix}$$

$$\text{rot } f = \begin{pmatrix} \frac{\partial f_3}{\partial y}(\xi) - \frac{\partial f_2}{\partial z}(\xi) \\ \frac{\partial f_1}{\partial z}(\xi) - \frac{\partial f_3}{\partial x}(\xi) \\ \frac{\partial f_2}{\partial x}(\xi) - \frac{\partial f_1}{\partial y}(\xi) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 - 2z \\ -1 - 4x \\ 2x - 3x^2 \end{pmatrix}$$

Man kann ähnliche Rechenregeln wie beim Divergenzoperator zeigen:

54.14 Satz: (Rechenregeln für die Rotation)

Sei $D \subset \mathbb{R}^3$ offen. Für partiell differenzierbare Vektorfelder $f, g : D \rightarrow \mathbb{R}^3$ und eine skalarwertige Funktion $\varphi : D \rightarrow \mathbb{R}$ gilt:

- a) Linearität: $\text{rot } (\alpha f + \beta g) = \alpha \text{rot } f + \beta \text{rot } g \quad \forall \alpha, \beta \in \mathbb{R}.$
- b) Produktregel: $\text{rot } (\varphi f) = (\nabla \varphi) \times f + \varphi \text{rot } f.$

55 Totale Differenzierbarkeit

55.1 Motivation

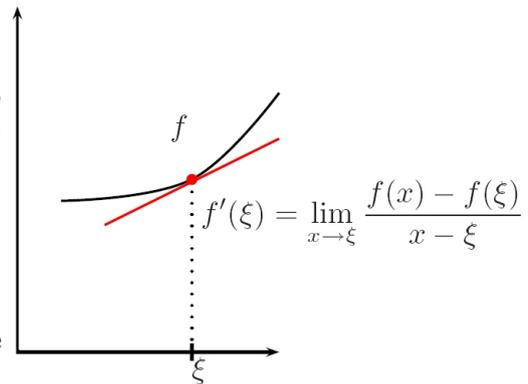
Für eine skalarwertige Funktion f einer reellen Variablen bedeutet Differenzierbarkeit in ξ , dass der Graph der Funktion in ξ eine Tangente besitzt mit Steigung $f'(\xi)$.

Mit anderen Worten:

Die Funktion f wird in einer Umgebung von ξ gut durch die lineare Funktion $g(x) = f'(\xi)(x - \xi) + f(\xi)$ approximiert, d.h.

$$\lim_{x \rightarrow \xi} \frac{f(x) - (f'(\xi)(x - \xi) + f(\xi))}{x - \xi} = 0.$$

Wir wollen nun dieses Konzept auf vektorwertige Funktionen mehrerer Variabler verallgemeinern.



55.2 Definition: (Totale Differenzierbarkeit)

Sei $D \subset \mathbb{R}^n$ offen. Eine Funktion $f : D \rightarrow \mathbb{R}^m$ heißt in $\xi \in D$ (total, vollständig) differenzierbar, falls es eine lineare Abbildung

$$g(x) = A \cdot (x - \xi) + f(\xi)$$

mit $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ gibt, so dass

$$\lim_{x \rightarrow \xi} \frac{f(x) - (A(x - \xi) + f(\xi))}{|x - \xi|} = 0.$$

Wie hängen totale und partielle Differenzierbarkeit zusammen?

55.3 Satz: (Partielle und totale Differenzierbarkeit)

Sei $D \subset \mathbb{R}^n$ offen, $\xi \in D$ und $f : D \rightarrow \mathbb{R}^m$. Dann gilt:

a) Totale Differenzierbarkeit impliziert Stetigkeit:

Ist f in ξ differenzierbar, so ist f auch stetig in ξ .

b) Totale Differenzierbarkeit impliziert partielle Differenzierbarkeit:

Ist f in ξ total differenzierbar, so ist f in ξ auch partiell differenzierbar. Die zugehörige Matrix der linearen Approximation ist identisch mit der Jacobi-Matrix $Jf(\xi)$

c) Stetige partielle Differenzierbarkeit impliziert totale Differenzierbarkeit:

Ist f eine C^1 -Funktion auf D , so ist f auf D auch total differenzierbar.

Beweis: Wir zeigen nur (a) und (b).

a) Ist f in ξ differenzierbar, so gilt wegen:

$$\lim_{x \rightarrow \xi} \frac{f(x) - (A(x - \xi) + f(\xi))}{|x - \xi|} = 0.$$

und der Stetigkeit der euklidischen Norm, dass

$$\lim_{x \rightarrow \xi} |f(x) - f(\xi) - A(x - \xi)| = 0.$$

Damit gilt:

$$\begin{aligned} |f(x) - f(\xi)| &\leq |f(x) - f(\xi) - A(x - \xi)| + |A(x - \xi)| \\ &\rightarrow 0 + 0 = 0 \quad \text{für } x \rightarrow \xi. \end{aligned}$$

Das beweist die Stetigkeitsaussage $\lim_{x \rightarrow \xi} f(x) = f(\xi)$.

b) Mit den kanonischen Einheitsvektoren $e_j = (0, \dots, 0, 1, 0, \dots, 0)^\top$ und $x = \xi + he_j$ folgt aus der totalen Differenzierbarkeit:

$$\begin{aligned} \underbrace{\frac{f(x) - f(\xi) - A(x - \xi)}{\|x - \xi\|_\infty}}_{\rightarrow 0 \text{ für } x \rightarrow \xi} &= \frac{f(\xi + he_j) - f(\xi)}{|h|} - \frac{hAe_j}{|h|} \\ &= \frac{h}{|h|} \left(\frac{f(\xi + he_j) - f(\xi)}{h} - Ae_j \right) \\ &\Rightarrow \lim_{h \rightarrow 0} \frac{f(\xi + he_j) - f(\xi)}{h} = Ae_j \quad j\text{-te Spalte von } A, \end{aligned}$$

d.h. f ist partiell differenzierbar und $\frac{\partial f_i}{\partial x_j} = a_{ij}$. □

Gelten ähnliche Differentiationsregeln wie bei skalarwertigen Funktionen einer Variablen? Man kann zeigen:

55.4 Satz: (Differentiationsregeln)

a) Linearität:

Sei $D \subset \mathbb{R}^n$ offen und $f, g : D \rightarrow \mathbb{R}^m$ seien differenzierbar in $\xi \in D$. Für alle $\alpha, \beta \in \mathbb{R}$ ist dann $\alpha f + \beta g$ in ξ differenzierbar und es gilt:

$$J(\alpha f + \beta g)(\xi) = \alpha Jf(\xi) + \beta Jg(\xi).$$

b) Kettenregel:

Seien $D \subset \mathbb{R}^n$, $E \subset \mathbb{R}^m$ offen, $f : D \rightarrow \mathbb{R}^m$ in $\xi \in D$ differenzierbar und $g : E \rightarrow \mathbb{R}^k$ in $f(\xi) \in E$ differenzierbar.

Dann ist die Verknüpfung $g \circ f$ ebenfalls in ξ differenzierbar und es gilt:

$$J(g \circ f)(\xi) = \begin{array}{cc} Jg(f(\xi)) & \cdot & Jf(\xi) \\ \text{„äußere} & \cdot & \text{„innere} \\ \text{Ableitung“} & & \text{Ableitung“} \end{array}$$

55.5 Bemerkung

Ein wichtiger Spezialfall dieser Kettenregel ergibt sich für $n = k = 1$: $\mathbb{R} \xrightarrow{f} \mathbb{R}^m \xrightarrow{g} \mathbb{R}$.
Wir betrachten also $(g \circ f)(x) = g(f_1(x), \dots, f_m(x))$

$$\Rightarrow (g \circ f)'(\xi) = Jg(f(\xi)) \cdot Jf(\xi) = \nabla^\top g(f(\xi)) \cdot \begin{pmatrix} f'_1(\xi) \\ \vdots \\ f'_m(\xi) \end{pmatrix} = \sum_{j=1}^m \frac{\partial g}{\partial y_j}(f(\xi)) \cdot f'_j(\xi).$$

56 Der Mittelwertsatz und der Satz von Taylor

56.1 Motivation

Ab jetzt betrachten wir wieder skalarwertige Funktionen mehrerer Variabler. Wir wollen dabei weitere Resultate von Funktionen einer Variablen übertragen.

Gibt es einen vergleichbaren Mittelwertsatz und einen entsprechenden Satz von Taylor?

56.2 Satz: (Mittelwertsatz)

Sei $D \subset \mathbb{R}^n$ offen und $f : D \rightarrow \mathbb{R}$ differenzierbar auf D . Ferner seien $a, b \in D$ Punkte, deren Verbindungsstrecke

$$[a, b] := \{a + t(b - a) \mid t \in [0, 1]\}$$

ganz in D liegt. Dann gibt es eine Zahl $\Theta \in (0, 1)$ mit

$$f(b) - f(a) = \nabla^\top f(a + \Theta \cdot (b - a))(b - a).$$

Beweis: Wir parametrisieren die Verbindungsstrecke $[a, b]$ so, dass wir den Mittelwertsatz für Funktionen einer Variablen anwenden können.

Setze $h(t) := f(a + t(b - a))$, $t \in [0, 1]$.

$h(t)$ ist stetig auf $[0, 1]$ und nach der Kettenregel 55.4 (b) auch differenzierbar auf $(0, 1)$. Somit sind die Voraussetzungen für den Mittelwertsatz einer Variablen erfüllt, und es gilt:

$$\begin{aligned} f(b) - f(a) &= h(1) - h(0) \\ &= h'(\Theta) \cdot (1 - 0) \quad \text{mit } 0 < \Theta < 1 \\ &= \nabla^\top f(a + \Theta(b - a))(b - a) \quad \text{Kettenregel 55.5.} \end{aligned}$$

□

56.3 Bemerkung:

Gilt die Bedingung $[a, b] \subset D$ für alle Punkte $a, b \in D$, so heißt die Menge D konvex.

Bei konvexen Mengen gilt der Mittelwertsatz also für beliebige Punkte $a, b \in D$.

56.4 Beispiel

Sei $f(x, y) = \cos x + \sin y$, $a = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$, $b = \begin{pmatrix} \pi/2 \\ \pi/2 \end{pmatrix}$.

Es gilt: $f(0, 0) = 1 = f\left(\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2}\right)$.

Nach dem Mittelwertsatz existiert also ein $\Theta \in (0, 1)$ mit

$$\begin{aligned} 0 &= f\left(\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2}\right) - f(0, 0) = \nabla^\top f\left(\Theta \cdot \begin{pmatrix} \pi/2 \\ \pi/2 \end{pmatrix}\right) \begin{pmatrix} \pi/2 \\ \pi/2 \end{pmatrix} \\ &= \left(-\sin\left(\Theta \frac{\pi}{2}\right), \cos\left(\Theta \frac{\pi}{2}\right)\right) \begin{pmatrix} \pi/2 \\ \pi/2 \end{pmatrix} \\ &= \frac{\pi}{2} \left(\cos\left(\Theta \frac{\pi}{2}\right) - \sin\left(\Theta \frac{\pi}{2}\right)\right) \end{aligned}$$

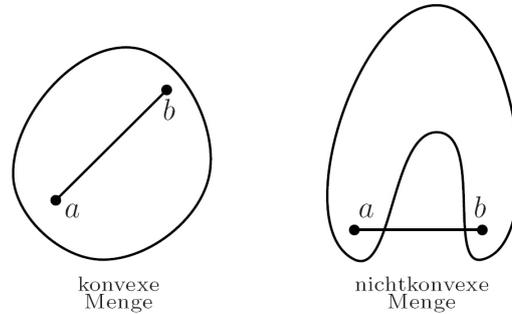


Abbildung 3:

In der Tat ist diese Gleichung für $\Theta = \frac{1}{2}$ erfüllt. \square

56.5 Motivation zur Taylorentwicklung

Eine differenzierbare Funktion lässt sich lokal durch eine lineare Funktion (d.h. ein Polynom 1. Grades) approximieren.

Wir wollen nun eine m -fach differenzierbare Funktion durch ein Polynom m -ten Grades annähern. Dazu verallgemeinern wir den Satz von Taylor auf skalarwertige Funktionen mehrerer Variabler.

Zur Erinnerung der Satz von Taylor für skalarwertige Funktionen einer Variablen (vgl. 22.2):

Sei $(a, b) \subset \mathbb{R}$, $\xi \in (a, b)$ und $f : (a, b) \rightarrow \mathbb{R}$ eine C^{m+1} -Funktion. Dann gilt die folgende Taylorentwicklung um den Punkt ξ :

$$\begin{aligned}
 f(x) &= T_m(x, \xi) + R_m(x, \xi) \\
 \text{mit } T_m(x, \xi) &:= \sum_{k=0}^m \frac{(x - \xi)^k}{k!} f^{(k)}(\xi) && \text{Taylorpolynom } m\text{-ten Grades} \\
 R_m(x, \xi) &:= \frac{(x - \xi)^{m+1}}{(m+1)!} f^{(m+1)}(\xi + \Theta(x - \xi)) && \text{Restglied nach Lagrange } \Theta \in (0, 1)
 \end{aligned}$$

Für $m = 0$ schließt der Satz von Taylor den Mittelwertsatz ein.

56.6 Satz: (Satz von Taylor)

Sei $D \subset \mathbb{R}^n$ offen und konvex, $\xi \in D$ und $f : D \rightarrow \mathbb{R}$ eine (skalare) $C^{(m+1)}$ -Funktion. Dann gilt folgende Taylorentwicklung um ξ :

$$\begin{aligned}
 f(x) &= T_m(x, \xi) + R_m(x, \xi) \\
 \text{mit } T_m(x, \xi) &= \sum_{k=0}^m \frac{1}{k!} [(x - \xi)^\top \nabla]^k f \Big|_{\xi} && \text{Taylorpolynom } m\text{-ten Grades} \\
 R_m(x, \xi) &= \frac{1}{(m+1)!} [(x - \xi)^\top \nabla]^{m+1} f \Big|_{\xi + \Theta(x - \xi)} && \text{Lagrange-Restglied } (\Theta \in (0, 1))
 \end{aligned}$$

56.7 Erläuterungen

$$[(x - \xi)^\top \nabla]^k = \left[\sum_{i=1}^n (x_i - \xi_i) \partial x_i \right]^k$$

Dieser Ausdruck wird formal ausmultipliziert und nach den partiellen Ableitungen sortiert.

Beispiel für $n = 2$:

$$\begin{aligned} [(x - \xi)^\top \nabla]^0 f \Big|_\xi &= f(\xi) \\ [(x - \xi)^\top \nabla]^1 f \Big|_\xi &= (x_1 - \xi_1) f_{x_1}(\xi) + (x_2 - \xi_2) f_{x_2}(\xi) \\ [(x - \xi)^\top \nabla]^2 f \Big|_\xi &= [(x_1 - \xi_1) \partial_{x_1} + (x_2 - \xi_2) \partial_{x_2}]^2 f \Big|_\xi \\ &= (x_1 - \xi_1)^2 f_{x_1 x_1}(\xi) + 2(x_1 - \xi_1)(x_2 - \xi_2) f_{x_1 x_2}(\xi) + (x_2 - \xi_2)^2 f_{x_2 x_2}(\xi) \\ &= (x - \xi)^\top H f(\xi) (x - \xi) \quad (\text{quadratische Form zur Hessematrix}) \end{aligned}$$

56.8 Beweis des Satzes von Taylor

Wie beim Mittelwertsatz 56.2 verwenden wir eine Umparametrisierung, mit der man den Satz von Taylor für Funktionen einer Variablen anwenden kann:

$$\begin{aligned} \varphi(t) &:= f(\underbrace{\xi + t(x - \xi)}) \\ &\in D \text{ für } -\varepsilon < t < \varepsilon, \text{ für kleines } \varepsilon > 0, \text{ da } D \text{ offen} \end{aligned}$$

Damit gilt für ein $\Theta \in (0, 1)$:

$$(*) \quad f(x) = \varphi(1) \stackrel{22.2}{=} \sum_{k=0}^m \frac{1}{k!} \varphi^{(k)}(0) + \frac{1}{(m+1)!} \varphi^{(m+1)}(\Theta).$$

Wie sehen die $\varphi^{(k)}(t)$ konkret aus?

$$\begin{aligned} \varphi(t) &= [(x - \xi)^\top \nabla]^0 f \Big|_{\xi + t(x - \xi)} \\ \varphi'(t) &= \sum_{i=1}^n \frac{\partial f}{\partial x_i}(\xi + t(x - \xi)) (x_i - \xi_i) \quad (\text{Kettenregel 55.5}) \\ &= [(x - \xi)^\top \nabla]^1 f \Big|_{\xi + t(x - \xi)} \\ \varphi''(t) &= \sum_{i=1}^n \left[(x_i - \xi_i) \sum_{j=1}^n \frac{\partial^2 f}{\partial x_i \partial x_j}(\xi + t(x - \xi)) (x_j - \xi_j) \right] \\ &= \left(\sum_{i=1}^n (x_i - \xi_i) \partial x_i \right) \left(\sum_{j=1}^n (x_j - \xi_j) \partial x_j \right) f \Big|_{\xi + t(x - \xi)} \\ &= [(x - \xi)^\top \nabla]^2 f \Big|_{\xi + t(x - \xi)} \end{aligned}$$

Mit vollständiger Induktion zeigt man: $\varphi^{(k)}(t) = [(x - \xi)^\top \nabla]^k f \Big|_{\xi+t(x-\xi)}$

Einsetzen in (*) liefert:

$$f(x) = \sum_{k=0}^n \frac{1}{k!} [(x - \xi)^\top \nabla]^k f \Big|_{\xi} + \frac{1}{(m+1)!} [(x - \xi)^\top \nabla]^{m+1} f \Big|_{\xi+\Theta(x-\xi)}$$

□

56.9 Beispiel

Berechne das Taylorpolynom $T_2(x, \xi)$ zweiten Grades von $f(x, y, z) = xy^2 \sin z$ im Entwicklungspunkt $\xi = (1, 2, 0)^\top$.

$$\begin{aligned} T_2(x, \xi) &= \sum_{k=0}^2 \frac{1}{k!} [(x - \xi)^\top \nabla]^k f \Big|_{\xi} \\ &= f(\xi) + (x - 1)f_x(\xi) + (y - 2)f_y(\xi) + zf_z(\xi) \\ &+ \frac{1}{2} \left[(x - 1)^2 f_{xx}(\xi) + (y - 2)^2 f_{yy}(\xi) + z^2 f_{zz}(\xi) \right. \\ &\quad \left. + 2(x - 1)(y - 2)f_{xy}(\xi) + 2(x - 1)zf_{xz}(\xi) + 2(y - 2)zf_{yz}(\xi) \right] \end{aligned}$$

Ableitungen	Auswertung in $\begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ 0 \end{pmatrix}$
$f(x, y, z) = xy^2 \sin z$	0
$f_x(x, y, z) = y^2 \sin z$	0
$f_y(x, y, z) = 2xy \sin z$	0
$f_z(x, y, z) = xy^2 \cos z$	4
$f_{xx}(x, y, z) = 0$	0
$f_{yy}(x, y, z) = 2x \sin z$	0
$f_{zz}(x, y, z) = -xy^2 \sin z$	0
$f_{xy}(x, y, z) = 2y \sin z$	0
$f_{xz}(x, y, z) = y^2 \cos z$	4
$f_{yz}(x, y, z) = 2xy \cos z$	4

$$\begin{aligned} \Rightarrow T_2(x, \xi) &= 4z + \frac{1}{2} \left(2(x - 1)z \cdot 4 + 2(y - 2)z \cdot 4 \right) \\ &= z \left(4 + 4(x - 1) + 4(y - 2) \right) \\ &= -8z + 4xz + 4yz \end{aligned}$$

□

56.10 Bemerkungen

a) Für $m = 0$ liefert der Satz von Taylor:

$$f(x) = f(\xi) + (x - \xi)^\top \nabla f(\xi + \Theta(x - \xi)), \quad \Theta \in (0, 1)$$

Dies ist äquivalent zum Mittelwertsatz 56.2 angewendet auf $a = \xi$, $b = x$:

$$f(x) - f(\xi) = \nabla^\top f(\xi + \Theta(x - \xi))(x - \xi)$$

Der Mittelwertsatz ist also ein Spezialfall des Satzes von Taylor.

b) Mit Hilfe der Hessematrix

$$Hf = \begin{pmatrix} f_{x_1 x_1} & \cdots & f_{x_1 x_n} \\ \vdots & & \vdots \\ f_{x_1 x_n} & \cdots & f_{x_n x_n} \end{pmatrix}$$

lässt sich das Taylorpolynom 2. Grades darstellen als

$$T_2(x, \xi) = f(\xi) + (x - \xi)^\top \nabla f(\xi) + \frac{1}{2}(x - \xi)^\top Hf(\xi) \cdot (x - \xi)$$

(vgl. Erläuterungen 56.7)

c) Für beschränkte partielle Ableitungen der Ordnung $m + 1$ hat das Restglied die Fehlerordnung $\mathcal{O}(|x - \xi|^{m+1})$. Somit folgt für die Approximationsgüte des Taylorpolynoms:

$$f(x) = T_m(x, \xi) + \mathcal{O}(|x - \xi|^{m+1})$$

d) Mit $h = x - \xi$ lautet eine Alternativschreibweise des Satzes von Taylor:

$$f(\xi + h) = \sum_{k=0}^m \frac{1}{k!} (h^\top \nabla)^k f \Big|_{\xi} + \frac{1}{(m+1)!} (h^\top \nabla)^{m+1} f \Big|_{\xi + \Theta h} \quad \text{mit } \Theta \in (0, 1).$$

57 Numerische Differentiation

57.1 Motivation

In vielen Anwendungen muss man Ableitungen annähern von Funktionen, die nur diskret (d.h. an vereinzeltten Punkten) vorliegen.

Beispiele:

- Geschwindigkeitsmessung durch die Polizei
- Temperaturänderungen an einer Meßstation
- Scannen von Personen mit einem 3D-Scanner

Zur Bestimmung von geeigneten numerischen Approximationsformeln und deren Genauigkeit wird der Satz von Taylor angewandt.

57.2 Problembeschreibung (zunächst für Funktionen einer Variablen)

Annahme: Von einer kontinuierlichen Funktion $u(x)$ sind nur die Funktionswerte auf einem äquidistanten Gitter $\Gamma := \{x_i \mid x_i = ih, i \in \mathbb{Z}\}$ bekannt:

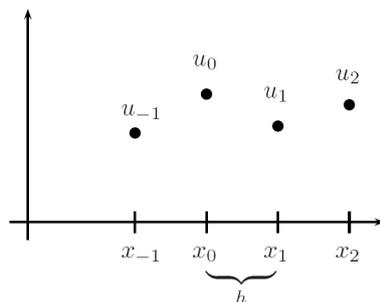


Abbildung 4:

Man setzt $u_i = u(x_i)$, $i \in \mathbb{Z}$
 h heißt die Gitterweite von Γ .

Gesucht: Approximation an eine k -te Ableitung $u^{(k)}$ an der Stelle ξ (die nicht unbedingt auf dem Gitter liegen muss) mit Hilfe der u_i : Finite-Differenzen-Approximation

57.3 Beispiel

u'' soll im Punkt x_i mit Hilfe der 3 Messwerte u_{i-1}, u_i, u_{i+1} approximiert werden. Wir suchen also Koeffizienten α, β, γ , so dass

$$u_i'' \approx \alpha u_{i-1} + \beta u_i + \gamma u_{i+1}$$

Der Approximationsfehler soll dabei höchstens $\mathcal{O}(h)$ betragen.

Lösung:

Wir fordern $u_i'' = \alpha u_{i-1} + \beta u_i + \gamma u_{i+1} + \mathcal{O}(h)$. Mit der Taylorentwicklung um x_i folgt (für eine hinreichend oft differenzierbare Funktion):

$$\begin{aligned} & \alpha u_{i-1} + \beta u_i + \gamma u_{i+1} \\ &= \alpha \left(u_i - hu_i' + \frac{1}{2}h^2u_i'' + \mathcal{O}(h^3) \right) \\ & \quad + \beta u_i \\ & \quad + \gamma \left(u_i + hu_i' + \frac{1}{2}h^2u_i'' + \mathcal{O}(h^3) \right) \\ &= u_i(\alpha + \beta + \gamma) + u_i'(-h\alpha + h\gamma) + u_i'' \left(\frac{h^2}{2}\alpha + \frac{h^2}{2}\gamma \right) + \mathcal{O}(h^3) \end{aligned}$$

Da dies mit $u_i'' = 0 \cdot u_i + 0 \cdot u_i' + 1 \cdot u_i''$ übereinstimmen soll, liefert ein Koeffizientenvergleich das lineare Gleichungssystem:

$$\begin{aligned} \text{(i)} \quad & \alpha + \beta + \gamma = 0 \\ \text{(ii)} \quad & -h\alpha + h\gamma = 0 \Rightarrow \alpha = \gamma \\ \text{(iii)} \quad & \frac{h^2}{2}\alpha + \frac{h^2}{2}\gamma = 1 \Rightarrow h^2\alpha = 1 \end{aligned}$$

Aus (ii) folgt: $\alpha = \gamma$

$$\begin{aligned} \text{in (iii):} \quad & h^2\alpha = 1 \Rightarrow \alpha = \frac{1}{h^2} \\ & \Rightarrow \gamma = \frac{1}{h^2} \end{aligned}$$

$$\text{in (i):} \quad \beta = -\alpha - \gamma = -\frac{2}{h^2}$$

Also gilt:
$$u_i'' \approx \frac{1}{h^2}(u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1}).$$

Wie genau ist diese Approximation?

Mit der ausführlicheren Taylorentwicklung

$$u_{i\pm 1} = u_i \pm hu_i' + \frac{1}{2}h^2u_i'' \pm \frac{1}{6}h^3u_i''' + \frac{1}{24}h^4u_i^{(4)} \pm \frac{1}{120}h^5u_i^{(5)} + \frac{1}{720}h^6u_i^{(6)} + \mathcal{O}(h^7)$$

folgt durch Einsetzen:

$$\frac{1}{h^2}(u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1}) = u_i'' + \underbrace{\frac{1}{12}h^2u_i^{(4)}}_{\text{führender Fehlerterm}} + \mathcal{O}(h^4)$$

Der führende Fehlerterm hat also die Ordnung $\mathcal{O}(h^2)$. Man sagt, die Approximation

$$u_i \approx \frac{1}{h^2}(u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1})$$

hat die Konsistenzordnung $\mathcal{O}(h^2)$:

$$u_i'' = \frac{1}{h^2}(u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1}) + \mathcal{O}(h^2).$$

57.4 Anmerkungen

a) Höhere Konsistenzordnung bedeutet bessere Approximation (für $h \rightarrow 0$). Hat eine Approximation mindestens lineare Konsistenzordnung ($\mathcal{O}(h)$), so heißt sie konsistent. Dies ist die Minimalforderung.

b) Die Konsistenzordnung hängt vom Entwicklungspunkt ab.

Beispiel:

Approximiert man mit u_i, u_{i+1} den Wert u'_i , so folgt aus der Taylorentwicklung um x_i :

$$u_{i+1} = u_i + hu'_i + \frac{1}{2}h^2u''_i + \mathcal{O}(h^3)$$

die Approximation der Ordnung $\mathcal{O}(h)$:

$$u'_i = \frac{u_{i+1} - u_i}{h} + \frac{1}{2}hu''_i + \mathcal{O}(h^2).$$

Entwickelt man u_i, u_{i+1} jedoch um $x_{i+1/2} = (i + \frac{1}{2})h$:

$$\begin{aligned} u_{i+1} &= u_{i+1/2} + \frac{h}{2}u'_{i+1/2} + \frac{1}{2} \frac{h^2}{4}u''_{i+1/2} + \frac{1}{6} \frac{h^3}{8}u'''_{i+1/2} + \mathcal{O}(h^4) \\ u_i &= u_{i+1/2} - \frac{h}{2}u'_{i+1/2} + \frac{1}{2} \frac{h^2}{4}u''_{i+1/2} - \frac{1}{6} \frac{h^3}{8}u'''_{i+1/2} + \mathcal{O}(h^4) \end{aligned}$$

ergibt sich eine $\mathcal{O}(h^2)$ -Approximation:

$$u'_{i+1/2} = \frac{u_{i+1} - u_i}{h} + \frac{1}{24}h^2u''_{i+1/2} + \mathcal{O}(h^4).$$

c) Durch Hinzunahme weiterer Gitterpunkte gelingt es oft, die Konsistenzordnung zu verbessern.

Beispiel:

$$\begin{aligned} u'_i &= \frac{u_{i+1} - u_{i-1}}{2h} + \mathcal{O}(h^2) \\ u'_i &= \frac{-u_{i+2} + 8u_{i+1} - 8u_{i-1} + u_{i-2}}{12h} + \mathcal{O}(h^4). \end{aligned}$$

d) Wichtige Approximationen:

Erste Ableitung:

$$\begin{aligned} u'_i &= \frac{u_{i+1} - u_i}{h} + \mathcal{O}(h) && \text{Vorwärtsdifferenz} \\ u'_i &= \frac{u_i - u_{i-1}}{h} + \mathcal{O}(h) && \text{Rückwärtsdifferenz} \\ u'_i &= \frac{u_{i+1} - u_{i-1}}{2h} + \mathcal{O}(h^2) && \text{zentrale Differenz} \end{aligned}$$

Zweite Ableitung:

$$u''_i = \frac{u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1}}{h^2} + \mathcal{O}(h^2).$$

- e) Will man partielle Ableitungen einer Funktion mehrerer Variabler approximieren, benötigt man oft eine Taylorentwicklung in mehreren Variablen (d.h. Satz 56.6):
Beispiel:

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x \partial y} \Big|_{i,j} \approx \frac{1}{4hk} (u_{i+1,j+1} + u_{i-1,j-1} - u_{i+1,j-1} - u_{i-1,j+1})$$

mit $u_{i,j} = u(x_i, y_j)$ und $x_i = ih, y_j = jk$.

Manchmal hat man aber das Glück, dass eindimensionale Taylorentwicklungen längs der Koordinatenachsen ausreichen:

Beispiel:

$$\Delta u \Big|_{i,j} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \Big|_{i,j} = \frac{u_{i+1,j} - 2u_{i,j} + u_{i-1,j}}{h^2} + \frac{u_{i,j+1} - 2u_{i,j} + u_{i,j-1}}{k^2} + \mathcal{O}(h^2 + k^2).$$

57.5 Anwendung auf die Diskretierung von Differentialgleichungen

Ersetzt man die Ableitungen durch Differenzenapproximationen, entstehen so genannte Finite-Differenzen-Verfahren.

Beispiel:

Die eindimensionale Diffusionsgleichung (vgl. 53.15 (c))

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$$

soll mit einem einfachen Finite-Differenzen-Verfahren numerisch approximiert werden. Bezeichnet u_i^k eine Approximation an $u(x, t)$ im Punkt $(ih, k\tau)$, kann man beispielsweise

$$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial t} \Big|_i^k &= \frac{u_i^{k+1} - u_i^k}{\tau} + \mathcal{O}(\tau) \\ \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \Big|_i^k &= \frac{u_{i+1}^k - 2u_i^k + u_{i-1}^k}{h^2} + \mathcal{O}(h^2) \end{aligned}$$

verwenden. Damit lautet die Approximation

$$\frac{u_i^{k+1} - u_i^k}{\tau} = \frac{u_{i+1}^k - 2u_i^k + u_{i-1}^k}{h^2}$$

Kennt man die Funktionswerte zur Zeitschicht $k = 0$, kann man damit die unbekanntenen Werte der Schichten $k = 1, 2, \dots$ iterativ berechnen: Für $k = 0, 1, \dots$

$$\begin{aligned} u_i^{k+1} &= u_i^k + \frac{\tau}{h^2} (u_{i+1}^k - 2u_i^k + u_{i-1}^k) \\ &= \frac{\tau}{h^2} u_{i+1}^k + \left(1 - 2\frac{\tau}{h^2}\right) u_i^k + \frac{\tau}{h^2} u_{i-1}^k \end{aligned}$$

u_i^{k+1} entsteht somit durch gewichtete Mittelung aus $u_{i+1}^k, u_i^k, u_{i-1}^k$.

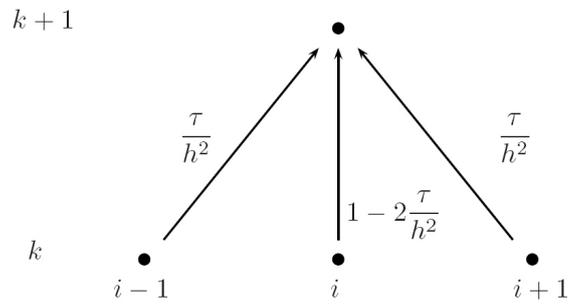


Abbildung 5:

58 Extrema von Funktionen mehrerer Variabler

58.1 Motivation

Bei skalarwertigen Funktionen einer Variablen kennen wir notwendige bzw. hinreichende Bedingungen für das Vorliegen von Extrema

- a) Sei $f : (a, b) \rightarrow \mathbb{R}$ eine C^1 -Funktion.
Besitzt f in $\xi \in (a, b)$ ein lokales Extremum, so gilt $f'(\xi) = 0$.
- b) Sei $f : (a, b) \rightarrow \mathbb{R}$ eine C^2 -Funktion, $\xi \in (a, b)$ und $f'(\xi) = 0$.
Ist ξ ein lokales Minimum (bzw. lokales Maximum), gilt $f''(\xi) \geq 0$ (bzw. $f''(\xi) \leq 0$). Ist umgekehrt $f''(\xi) > 0$ (bzw. $f''(\xi) < 0$), so ist ξ ein striktes lokales Minimum (striktes lokales Maximum).

Können wir ähnliche Aussagen auch im Fall skalarwertiger Funktionen mehrerer Variabler machen?

58.2 Definition: ((Strikte) Lokale Minima/Maxima)

Sei $D \subset \mathbb{R}^n$ offen und $f : D \rightarrow \mathbb{R}$. Ein Punkt $\xi \in D$ heißt lokales Minimum (bzw. lokales Maximum), falls eine Umgebung $U \subset D$ existiert mit $f(\xi) \leq f(y)$ (bzw. $f(\xi) \geq f(y)$) für alle $y \in U$. Tritt Gleichheit nur für $y = \xi$ auf, heißt ξ striktes lokales Minimum (bzw. striktes lokales Maximum).

Damit lautet das Analogon zu 58.1(a):

58.3 Satz: (Notwendige Bedingung für lokale Extrema)

Sei $D \subset \mathbb{R}^n$ offen und $f : D \rightarrow \mathbb{R}$ eine C^1 -Funktion. Hat f in $\xi \in D$ ein lokales Extremum (Minimum oder Maximum), so gilt $\nabla f(\xi) = 0$.

Beweis: Für beliebiges $v \in \mathbb{R}^n$ mit $v \neq 0$ ist

$$\varphi(t) := f(\xi + tv)$$

in einer Umgebung von $t = 0$ erklärt und dort stetig differenzierbar. Ferner habe φ in $t = 0$ ein lokales Extremum. Mit 58.1.(a) und der Kettenregel 55.4 gilt:

$$0 = \varphi'(0) = \nabla^\top f(\xi) \cdot v$$

Da dies für beliebige $v \neq 0$ gilt, ist $\nabla^\top f(\xi) = 0$. □

58.4 Bemerkungen

- a) Ein Punkt $\xi \in D$ mit $\nabla f(\xi) = 0$ heißt auch stationärer Punkt von f .
- b) Bei der Suche nach stationären Punkten, muss man häufig ein nichtlineares System von n Gleichungen mit n Unbekannten lösen.

Beispiel:

$$\begin{aligned} f(x, y) &= e^{xy} + x^2 \sin y \\ 0 &\stackrel{!}{=} \nabla f = \begin{pmatrix} ye^{xy} + 2x \sin y \\ xe^{xy} + x^2 \cos y \end{pmatrix} \end{aligned}$$

2 nichtlineare Gleichungen mit 2 Unbekannten.

Ähnlich wie bei Funktionen einer Variablen kann man hierbei Fixpunktansätze oder Newton-artige Verfahren einsetzen.

c) Nicht jeder stationäre Punkt ist ein Extremum !

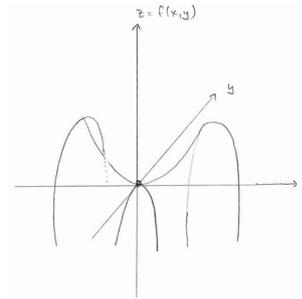
Beispiel:

Die stationären Punkte von $f(x, y) = x^2 - y^2$ erfüllen

$$0 = \nabla f = \begin{pmatrix} 2x \\ -2y \end{pmatrix}$$

$\begin{pmatrix} x_0 \\ y_0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$ ist einziger stationärer Punkt.

Allerdings existieren in jeder Umgebung um diesen stationären Punkt Punkte (x_1, y_1) und (x_2, y_2) mit $f(x_1, y_1) < f(x_0, y_0) < f(x_2, y_2)$. Solche stationären Punkte nennt man Sattelpunkte.



Zur Klassifikation stationärer Punkte betrachten wir das Analogon zu 58.1(b):

58.5 Satz: (Klassifikation stationärer Punkte)

Sei $D \subset \mathbb{R}^n$ offen, $f : D \rightarrow \mathbb{R}$ eine C^2 -Funktion und $\xi \in D$ sowie $\nabla f(\xi) = 0$. Dann gilt:

a) Notwendige Bedingung:

Ist ξ ein lokales Minimum (bzw. lokales Maximum) von f , so ist die Hesse-Matrix $Hf(\xi)$ positiv semidefinit (bzw. negativ semidefinit).

b) Hinreichende Bedingung:

i) Ist $Hf(\xi)$ positiv definit (bzw. negativ definit), so ist ξ ein striktes lokales Minimum (bzw. striktes lokales Maximum) von f .

ii) Ist $Hf(\xi)$ indefinit, so ist ξ ein Sattelpunkt, d.h. in jeder Umgebung $U \subset D$ existieren $y, z \in U$ mit $f(y) < f(\xi) < f(z)$.

Beweis:

a) Sei ξ o.B.d.A. ein lokales Minimum. Für $v \neq 0$ und hinreichend kleines $\varepsilon > 0$ gilt nach dem Satz von Taylor (vgl. 56.6):

$$0 \leq f(\xi + \varepsilon v) - f(\xi) = \underbrace{\nabla^\top f(\xi)}_{0 \text{ nach Vor.}} + \frac{1}{2} \varepsilon v^\top Hf(\xi + \Theta \varepsilon v) \varepsilon v$$

da lokales Minimum

mit $\Theta \in (0, 1)$. Also ist $v^\top Hf(\xi + \Theta \varepsilon v) v \geq 0$.

Für $\varepsilon \rightarrow 0$ folgt: $v^\top Hf(\xi) v \geq 0$. Da v beliebig war, ist $Hf(\xi)$ positiv semidefinit.

- b) i) Sei $Hf(\xi)$ positiv definit. Da f eine C^2 -Funktion ist, ist $Hf(x)$ auch in einer hinreichend kleinen Kreisumgebung $K_\varepsilon(\xi)$ mit Radius ε und Mittelpunkt ξ positiv definit.

Für $x \in K_\varepsilon(\xi) \setminus \xi$ gilt also nach Taylor:

$$\begin{aligned} f(x) - f(\xi) &= \underbrace{\nabla^\top f(\xi)}_{=0}(x - \xi) \\ &+ \frac{1}{2} \underbrace{(x - \xi)^\top Hf(\xi + \Theta(x - \xi))}_{>0}(x - \xi), \quad \text{mit } \Theta \in (0, 1), \\ &> 0 \end{aligned}$$

Da $x \in K_\varepsilon(\xi) \setminus \xi$ beliebig war, folgt aus $f(x) - f(\xi) > 0$, dass ξ ein striktes lokales Minimum ist.

- ii) Sei nun $Hf(\xi)$ indefinit. Dann existieren Eigenwerte λ_1, λ_2 von $Hf(\xi)$ mit $\lambda_1 > 0, \lambda_2 < 0$. Für die entsprechenden Eigenvektoren v, w gilt also:

$$\begin{aligned} v^\top Hf(\xi)v &> 0 \\ w^\top Hf(\xi)w &< 0 \end{aligned}$$

Wie in (a) zeigt man, dass es $\varepsilon_1, \varepsilon_2 > 0$ gibt mit

$$\begin{aligned} f(\xi + \varepsilon v) - f(\xi) &= \frac{1}{2} \varepsilon v^\top Hf(\xi + \Theta_1 \varepsilon v) \varepsilon v > 0 \\ f(\xi + \varepsilon w) - f(\xi) &= \frac{1}{2} \varepsilon w^\top Hf(\xi + \Theta_2 \varepsilon w) \varepsilon w < 0 \end{aligned}$$

für alle $\varepsilon \in (0, \min(\varepsilon_1, \varepsilon_2))$. Somit ist ξ Sattelpunkt von f . □

58.6 Bemerkung

Nach Satz 58.5 gelten folgende Implikationen:

$$\begin{array}{ccc} \xi \text{ lokales Minimum} & \iff & \xi \text{ striktes lokales Minimum} \\ \downarrow & & \uparrow \\ Hf(\xi) \text{ positiv semidefinit} & \iff & Hf(\xi) \text{ positiv definit} \end{array}$$

Keine Implikation ist umkehrbar!

58.7 Beispiel

$$\begin{aligned} f(x, y) &= y^2(x - 1) + x^2(x + 1) \\ \nabla f(x, y) &= \begin{pmatrix} y^2 + 3x^2 + 2x \\ 2y(x - 1) \end{pmatrix} \end{aligned}$$

Stationäre Punkte: $0 \stackrel{!}{=} \nabla f(x, y) \Rightarrow 2y(x - 1) = 0$

Fall 1: $x - 1 = 0 \Rightarrow x = 1$
Einsetzen in $y^2 + 3x^2 + 2x = 0$ liefert $y^2 + 5 = 0$.
Keine Lösung in \mathbb{R} .

Fall 2: $y = 0$
Einsetzen in $y^2 + 3x^2 + 2x = 0$ liefert $x(3x + 2) = 0$
 $\Rightarrow x_1 = 0, x_2 = -\frac{2}{3}$.

Es gibt also 2 stationäre Punkte: $\xi = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \eta = \begin{pmatrix} -2/3 \\ 0 \end{pmatrix}$.

Klassifikation:

$$Hf(x, y) = \begin{pmatrix} 6x + 2 & 2y \\ 2y & 2x - 2 \end{pmatrix}$$

$$Hf(0, 0) = \begin{pmatrix} 2 & 0 \\ 0 & -2 \end{pmatrix} \text{ indefinit} \Rightarrow \text{Sattelpunkt in } \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$Hf\left(-\frac{2}{3}, 0\right) = \begin{pmatrix} -2 & 0 \\ 0 & -10/3 \end{pmatrix} \text{ negativ definit} \Rightarrow \text{striktes Maximum in } \begin{pmatrix} -2/3 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

59 Extrema mit Nebenbedingungen

59.1 Motivation

Im Abschnitt 58 haben wir notwendige und hinreichende Kriterien kennengelernt, um lokale Extrema einer (skalaren) Funktion mehrerer Variabler zu bestimmen. Oft sucht man jedoch die Extrema einer Funktion unter der Einschränkung, dass bestimmte Nebenbedingungen erfüllt sein müssen.

59.2 Beispiel: „Verpackungsminimierung“ im \mathbb{R}^2

Gesucht ist ein Rechteck maximalen Inhalts bei einem vorgegebenen Umfang u . D.h. maximiere

$$f(x, y) = xy \quad (x, y : \text{Seitenlängen})$$

unter der Nebenbedingung

$$g(x, y) = 2x + 2y - u = 0.$$

Lösungsmöglichkeit 1 (spezieller): Löse Nebenbedingung nach einer Variablen auf:

$$2y = u - 2x \Rightarrow y = \frac{u}{2} - x \quad (*)$$

Setze dies in $f(x, y) = xy$ ein. Damit lautet das neue Optimierungsproblem:

$$\text{Maximiere } \tilde{f}(x) = x \left(\frac{u}{2} - x \right)$$

d.h. die Nebenbedingung reduziert die Freiheitsgrade von 2 auf 1.

Notwendige Bedingung für ein Maximum:

$$\begin{aligned} 0 &\stackrel{!}{=} \tilde{f}'(x) = \frac{u}{2} - 2x \\ &\Rightarrow x = \frac{u}{4} \\ \text{in } (*) : y &= \frac{u}{2} - x = \frac{u}{2} - \frac{u}{4} = \frac{u}{4}. \end{aligned}$$

Da $\tilde{f}''\left(\frac{u}{4}\right) = -2 < 0$ ist, handelt es sich tatsächlich um ein Maximum. Das optimale Rechteck ist ein Quadrat mit Seitenlänge $\frac{u}{4}$.

Bem: Diese Lösungsmöglichkeit setzt voraus, dass wir die Nebenbedingung nach einer Variablen auflösen konnten. Falls dies nicht möglich ist oder umständlich erscheint, bietet sich der folgende Weg an: **Lösungsmöglichkeit 2 (allgemeiner):** Wir maximieren eine erweiterte Zielfunktion, in die die Nebenbedingung bereits eingearbeitet ist:

$$\begin{aligned} F(x, y, \lambda) &:= f(x, y) + \lambda g(x, y) \\ &= xy + \lambda(2x + 2y - u) \end{aligned}$$

mit einer zusätzlichen Variablen λ (Lagrange-Multiplikator). Notwendige Bedingung für ein Maximum:

$$0 \stackrel{!}{=} \begin{pmatrix} \frac{\partial F}{\partial x} \\ \frac{\partial F}{\partial y} \\ \frac{\partial F}{\partial \lambda} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} y + 2\lambda \\ x + 2\lambda \\ 2x + 2y - u \end{pmatrix}.$$

Wir sehen: Die dritte Gleichung drückt die Nebenbedingung $g(x, y) = 0$ aus.

Auflösen der 1. und 2. Gleichung nach λ :

$$\left. \begin{array}{l} y = -2\lambda \\ x = -2\lambda \end{array} \right\} \Rightarrow x = y.$$

Einsetzen in 3. Gleichung:

$$4x - u = 0 \Rightarrow x = \frac{u}{4} = y.$$

59.3 Allgemeine Vorgehensweise

Sei $D \subset \mathbb{R}^n$ offen und $f : D \rightarrow \mathbb{R}$. Wir suchen Extrema von $f(x_1, \dots, x_n)$ unter den m Nebenbedingungen:

$$\left. \begin{array}{l} g_1(x_1, \dots, x_n) = 0 \\ \vdots \\ g_m(x_1, \dots, x_n) = 0 \end{array} \right\} g(x) = 0$$

mit $m < n$.

Statt der m Nebenbedingungen $g(x) = 0$ führen wir m zusätzliche Variablen $(\lambda_1, \dots, \lambda_m)^\top =: \lambda$ ein (so genannte Lagrange-Multiplikatoren) und maximieren / minimieren statt $f(x)$ die Lagrange-Funktion

$$F(x, \lambda) = f(x) + \lambda^\top g(x).$$

Damit haben wir ein Extremalproblem mit n Variablen und m Nebenbedingungen in ein Extremalproblem in $n + m$ Variablen ohne explizite Nebenbedingungen umgewandelt.

59.4 Bemerkung

Man kann zeigen, dass der Ansatz 59.3 funktioniert:

Sei $D \subset \mathbb{R}^n$ offen und seien $f, g_1, \dots, g_m : D \rightarrow \mathbb{R}$ C^1 -Funktionen. Ferner sei $\xi \in D$ ein lokales Extremum von $f(x)$ unter der Nebenbedingung $g(x) = 0$, und es gelte die „Regularitätsbedingung“

$$\text{rang}(Jg(\xi)) = m.$$

Dann existieren Lagrange-Multiplikatoren $\lambda_1, \dots, \lambda_m$, so dass die Lagrange-Funktion

$$F(x, \lambda) = f(x) + \lambda^\top g(x)$$

die notwendige Bedingung $\nabla F(\xi) = 0$ erfüllt.

59.5 Beispiel

Sei $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ symmetrisch. Bestimme die Extrema der quadratischen Form $x^\top Ax$ unter der Nebenbedingung $|x| = 1$.

Lösung:

$$\begin{aligned} F(x, \lambda) &= x^\top Ax + \lambda(1 - x^\top x) \\ &= \sum_{i,j=1}^n x_i x_j a_{ij} + \lambda \left(1 - \sum_{i=1}^n x_i^2 \right) \end{aligned}$$

Notwendige Bedingung:

$$0 = \left(\frac{\partial F}{\partial x_1}, \dots, \frac{\partial F}{\partial x_n}, \frac{\partial F}{\partial \lambda} \right)^\top.$$

Mit

$$\frac{\partial}{\partial x_u} \sum_{i,j=1}^n x_i x_j a_{ij} = \sum_{j=1}^n x_j a_{uj} + \sum_{i=1}^n x_i \underbrace{a_{iu}}_{=a_{ui}} = 2 \sum_{j=1}^n a_{uj} x_j$$

folgt:

$$0 = \begin{pmatrix} \frac{\partial F}{\partial x_1} \\ \vdots \\ \frac{\partial F}{\partial x_n} \\ \frac{\partial F}{\partial \lambda} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 \sum_{j=1}^n a_{1j} x_j - 2\lambda x_1 \\ \vdots \\ 2 \sum_{j=1}^n a_{nj} x_j - 2\lambda x_n \\ 1 - \sum_{i=1}^n x_i^2 \end{pmatrix}$$

Gleichungen 1 bis n besagen, dass x Eigenvektor zu einem Eigenwert λ von A ist:

$$\sum_{j=1}^n a_{kj} x_j = \lambda x_k \quad (k = 1, \dots, n).$$

Gleichung $n+1$ fordert, dass $|x|$ auf 1 normiert ist. Für einen Eigenvektor x mit $|x| = 1$ gilt:

$$f(x) = x^\top Ax = x^\top \lambda x = \lambda.$$

Somit wird $F(x)$ durch den Eigenvektor zum größten (kleinsten) Eigenwert maximiert (minimiert).

In der Informatik benötigt man dieses Resultat z.B. bei der Bewegungsanalyse in digitalen Bildfolgen.

59.6 Beispiel

Bestimme eine notwendige Bedingung für das Vorliegen von Extrema von

$$f(x, y, z) = 5x + y - 3z$$

auf dem Schnitt der Ebene

$$x + y + z = 0$$

mit der Kugeloberfläche

$$x^2 + y^2 + z^2 = 1.$$

Lösung:

$$\begin{aligned} F(x, y, z, \lambda, \mu) &= 5x + y - 3z + \lambda(x + y + z) + \mu(x^2 + y^2 + z^2 - 1) \\ 0 &= \begin{pmatrix} F_x \\ F_y \\ F_z \\ F_\lambda \\ F_\mu \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 5 + \lambda + 2\mu x \\ 1 + \lambda + 2\mu y \\ -3 + \lambda + 2\mu z \\ x + y + z \\ x^2 + y^2 + z^2 - 1 \end{pmatrix}, \quad \text{notwendige Bedingung} \end{aligned}$$

Nach einigen Umformungen sieht man, dass

$$\begin{pmatrix} x \\ y \\ z \\ \lambda \\ \mu \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} \\ 0 \\ -1/\sqrt{2} \\ -1 \\ -2\sqrt{2} \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \\ \lambda \\ \mu \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1/\sqrt{2} \\ 0 \\ 1/\sqrt{2} \\ -1 \\ 2\sqrt{2} \end{pmatrix}$$

dieses Gleichungssystem lösen.

Da $f(\frac{1}{\sqrt{2}}, 0, -\frac{1}{\sqrt{2}}) = 4\sqrt{2}$ und $f(-\frac{1}{\sqrt{2}}, 0, \frac{1}{\sqrt{2}}) = -4\sqrt{2}$, ist $(\frac{1}{\sqrt{2}}, 0, -\frac{1}{\sqrt{2}})$ das Maximum und $(-\frac{1}{\sqrt{2}}, 0, \frac{1}{\sqrt{2}})$ das Minimum von $f(x)$ unter der angegebenen Nebenbedingungen.

60 Mehrfachintegrale

60.1 Motivation

Funktionen können von mehreren Variablen abhängen.

Beispiel: $f(x, y) = x^2 - 3y$

Lassen sich für solche Funktionen Begriffe wie das Integral sinnvoll definieren?

Wie beschränken uns zunächst auf Funktion $f : D \rightarrow \mathbb{R}$ mit einem rechteckigen Definitionsbereich

$$D := [a_1, b_1] \times [a_2, b_2] \subset \mathbb{R}^2.$$

Ziel ist die Berechnung des Volumens unterhalb des Graphen von f .

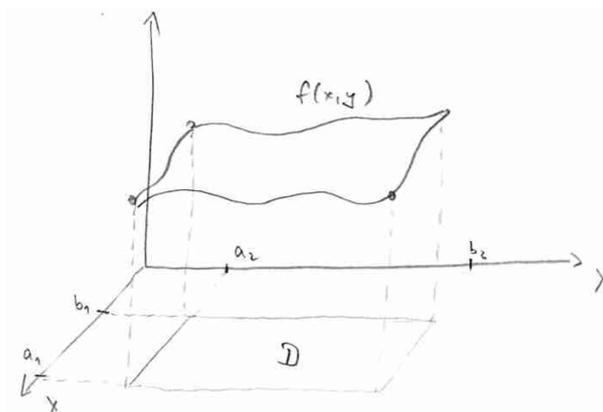


Abbildung 6:

60.2 Definition: (Zerlegung, Feinheit, Flächeninhalt)

- a) $Z = \{(x_0, x_1, \dots, x_n), (y_0, y_1, \dots, y_m)\}$ heißt Zerlegung des Rechtecks
 $D = [a_1, b_1] \times [a_2, b_2]$, falls

$$a_1 = x_0 < x_1 < \dots < x_n = b_1$$

$$a_2 = y_0 < y_1 < \dots < y_m = b_2$$

$\mathfrak{Z}(D)$ ist die Menge der Zerlegungen von D , und

$$\|Z\| := \max_{i,j} \{|x_{i+1} - x_i|, |y_{j+1} - y_j|\}$$

die Feinheit einer Zerlegung $Z \in \mathfrak{Z}(D)$.

- b) Zu einer Zerlegung Z heißen die Mengen

$$Q_{ij} := [x_i, x_{i+1}] \times [y_j, y_{j+1}] \text{ die } \underline{\text{Teilquader}} \text{ von } Z, \text{ und}$$
$$\text{vol}(Q_{ij}) := (x_{i+1} - x_i)(y_{j+1} - y_j) \text{ ist der } \underline{\text{Flächeninhalt}} \text{ von } Q_{ij}.$$

c)

$$U_f(Z) := \sum_{i,j} \inf_{v \in Q_{ij}} (f(v)) \cdot \text{vol}(Q_{ij})$$
$$O_f(Z) := \sum_{i,j} \sup_{v \in Q_{ij}} (f(v)) \cdot \text{vol}(Q_{ij})$$

mit $v = (x, y)$ heißen Riemann'sche Unter- bzw. Obersumme der Funktion f zur Zerlegung von Z .

Für beliebige Punkte $v_{ij} \in Q_{ij}$ heißt

$$R_f(Z) := \sum_{i,j} f(v_{ij}) \cdot \text{vol}(Q_{ij})$$

eine Riemann'sche Summe zur Zerlegung Z .

60.3 Bemerkungen

Analog zu Bem.(23.4) gelten folgende Aussagen:

a) Die Riemann-Summe liegt zwischen Unter- und Obersumme:

$$U_f(Z) \leq R_f(Z) \leq O_f(Z).$$

b) Entsteht eine Zerlegung Z_2 aus Z_1 durch Hinzunahme weiterer Zerlegungspunkte x_i und/oder y_j , so gilt:

$$U_f(Z_2) \geq U_f(Z_1)$$
$$O_f(Z_2) \leq O_f(Z_1).$$

c) Für beliebige Zerlegungen $Z_1, Z_2 \in \mathfrak{Z}$ gilt stets

$$U_f(Z_1) \leq O_f(Z_2)$$

Kann man mit diesen Unter-, Ober- und Riemann-Summen ein Integral definieren?

60.4 Definition: (Unterintegral, Oberintegral, Riemann-Integral)

a) *Existieren die Grenzwerte*

$$\iint_D f(x, y) \, dx \, dy := \sup\{U_f(Z) \mid Z \in \mathfrak{Z}(D)\}$$
$$\overline{\iint}_D f(x, y) \, dx \, dy := \inf\{O_f(Z) \mid Z \in \mathfrak{Z}(D)\}$$

so heißen sie (Riemann'sches) Unter- bzw. Oberintegral von f über D .

- b) $f(x, y)$ heißt (Riemann-)integrierbar über D , falls Unter- und Oberintegral übereinstimmen. Dann heißt

$$\iint_D f(x, y) \, dx \, dy := \iint_{\underline{D}} f(x, y) \, dx \, dy = \iint_{\overline{D}} f(x, y) \, dx \, dy$$

das (Riemann-)Integral von $f(x, y)$ über D .

Ähnlich wie im 1D-Fall zeigt man

60.5 Satz: (Eigenschaften des Doppelintegrals)

- a) Linearität

$$\iint_D (\alpha f(x, y) + \beta g(x, y)) \, dx \, dy = \alpha \iint_D f(x, y) \, dx \, dy + \beta \iint_D g(x, y) \, dx \, dy$$

- b) Monotonie

Gilt $f(x, y) \leq g(x, y)$ für alle $(x, y) \in D$, so folgt

$$\iint_D f(x, y) \, dx \, dy \leq \iint_D g(x, y) \, dx \, dy.$$

- c) Nichtnegativität

$$f(x, y) \geq 0 \quad \forall (x, y) \in D \quad \Rightarrow \quad \iint_D f(x, y) \, dx \, dy \geq 0$$

- d) Zusammensetzung von Integrationsbereichen

Sind D_1, D_2 und D Rechtecke mit $D = D_1 \cup D_2$ und $\text{vol}(D_1 \cap D_2) = 0$, so ist $f(x, y)$ genau dann über D integrierbar, falls $f(x, y)$ über D_1 und über D_2 integrierbar ist. Dann gilt:

$$\iint_D f(x, y) \, dx \, dy = \iint_{D_1} f(x, y) \, dx \, dy + \iint_{D_2} f(x, y) \, dx \, dy.$$

- e) Riemann-Kriterium

$f(x, y)$ ist genau dann über D integrierbar, falls gilt:

$$\forall \varepsilon > 0 \exists Z \in \mathfrak{Z}(D) : O_f(Z) - U_f(Z) < \varepsilon.$$

Schön wäre es, wenn sich die Berechnung von Doppelintegralen auf die Integration von Funktionen mit einer Variablen zurückführen ließe. Dass dies möglich ist, besagt:

60.6 Satz: (Satz von Fubini)

Sei $D = [a_1, b_1] \times [a_2, b_2] \subset \mathbb{R}^2$ ein Rechteck. Ist $f : D \rightarrow \mathbb{R}$ integrierbar und existieren die Integrale

$$F(x) = \int_{a_2}^{b_2} f(x, y) \, dy \quad \text{bzw.} \quad G(y) = \int_{a_1}^{b_1} f(x, y) \, dx$$

für alle $x \in [a_1, b_1]$ bzw. $y \in [a_2, b_2]$, so gilt:

$$\begin{aligned} \iint_D f(x, y) \, dx \, dy &= \int_{a_1}^{b_1} \left(\int_{a_2}^{b_2} f(x, y) \, dy \right) dx \quad \text{bzw.} \\ \iint_D f(x, y) \, dx \, dy &= \int_{a_2}^{b_2} \left(\int_{a_1}^{b_1} f(x, y) \, dx \right) dy \end{aligned}$$

Beweis: Sei $Z = \{(x_0, x_1, \dots, x_n), (y_0, y_1, \dots, y_m)\}$ eine Zerlegung von D . Für beliebige $y \in [y_j, y_{j+1}]$, $\xi_i \in [x_i, x_{i+1}]$ gilt dann:

$$\inf_{(x,y) \in Q_{ij}} f(x, y) \leq f(\xi_i, y) \leq \sup_{(x,y) \in Q_{ij}} f(x, y).$$

Integration bzgl. y liefert

$$\inf_{(x,y) \in Q_{ij}} (f(x, y)) \cdot (y_{j+1} - y_j) \leq \int_{y_j}^{y_{j+1}} f(\xi_i, y) \, dy \leq \sup_{(x,y) \in Q_{ij}} (f(x, y))(y_{i+1} - y_i)$$

Multiplikation mit $(x_{i+1} - x_i)$ und Summation über i, j ergibt

$$U_f(Z) \leq \sum_{i=0}^{n-1} \left(\int_{a_2}^{b_2} f(\xi_i, y) \, dy \right) (x_{i+1} - x_i) \leq O_f(Z)$$

Das ist eine Abschätzung für eine beliebige Riemann-Summe von

$$F(x) = \int_{a_2}^{b_2} f(x, y) \, dy \text{ zur Zerlegung } Z_x = \{x_0, \dots, x_n\} \text{ von } [a_1, b_1].$$

Insbesondere folgt hieraus:

$$U_f(Z) \leq U_f(Z_x) \leq O_f(Z_x) \leq O_f(Z).$$

Für $\|Z\| \rightarrow 0$ erhält man die Behauptung. □

60.7 Beispiel

Sei $D = [0, 1] \times [0, 2]$ und $f(x, y) = 2 - xy$

$$\begin{aligned} \iint_D f(x, y) \, dx \, dy &= \int_{y=0}^{y=2} \left(\int_{x=0}^{x=1} (2 - xy) \, dx \right) dy \\ &= \int_0^2 \left[2x - \frac{1}{2}x^2y \right]_{x=0}^{x=1} dy = \int_0^2 \left(2 - \frac{1}{2}y \right) dy = \left[2y - \frac{1}{4}y^2 \right]_0^2 = 3. \end{aligned}$$

60.8 Bemerkungen

- a) Das Doppelintegral $\iint_D f(x, y) \, dx \, dy$ beschreibt das Volumen zwischen dem Graphen von $f(x, y)$ und der $x - y$ -Ebene.
- b) Die vorangegangenen Betrachtungen lassen sich direkt auf Dreifachintegrale usw. verallgemeinern.

61 Variationsrechnung

61.1 Motivation

Bisher haben wir uns mit Optimierungsproblemen befasst, bei denen ein einzelner optimaler Wert (Max. oder Min. einer Funktion, evtl. mit Nebenbedingungen) gesucht war.

Wir gehen jetzt zu Problemen über, bei denen eine gesamte Funktion gesucht wird, die ein Optimalitätskriterium erfüllt. Solche Probleme treten in der Praxis oft auf, z.B.

- a) Welche Form nimmt ein Bücherbrett an, wenn es gleichmäßig belastet wird?



Abbildung 7:

Die gesuchte Funktion minimiert ein Integral, in dem eine Biegeenergie auftritt. (Verwandtes Problem: Crashtestsimulationen).

- b) Ein verrauschtes Signal $f(x)$, $x \in [0, 1]$ soll so gefiltert werden, dass das resultierende Signal $u(x)$ zwar noch nahe an $f(x)$ liegt, aber nur noch geringe Schwankungen aufweist. Wir suchen also z.B. $u(x)$ als Minimierer des „Energiefunktionals“ (ein Funktional ist eine Abbildung von einer Funktion nach \mathbb{R})

$$E(u) = \frac{1}{2} \int_0^1 \left[\underbrace{(u(x) - f(x))^2}_{\text{Ähnlichkeit}} + \alpha \underbrace{\left(\frac{du}{dx} \right)^2}_{\text{Glattheit}} \right] dx.$$

Der freie Parameter $\alpha > 0$ heißt Regularisierungsparameter. Er steuert die Glattheit der Lösung: Je größer α ist, desto stärker werden Abweichungen von der Glattheit bestraft, d.h. desto glatter ist die Lösung.

61.2 Ein diskretes Beispiel

Das Signal aus 61.1 (b) soll diskret vorliegen: f_0, f_1, \dots, f_N mit $f_i = f(ih)$, $h = \frac{1}{N}$, $i = 0, \dots, N$.

Gesucht ist ein gefiltertes diskretes Signal u_0, \dots, u_N , das die skalare Funktion mehrerer Variabler

$$E(u_0, \dots, u_N) = \frac{1}{2} \sum_{i=0}^N (u_i - f_i)^2 + \frac{\alpha}{2} \sum_{i=0}^{N-1} \left(\frac{u_{i+1} - u_i}{h} \right)^2$$

minimiert. Notwendige Bedingung für ein Minimum:

$$0 \stackrel{!}{=} \left(\frac{\partial E}{\partial u_0}, \dots, \frac{\partial E}{\partial u_N} \right)^\top.$$

61.3 Satz: (Euler-Lagrange-Gleichung)

Jede Lösung des Variationsproblems

Finde eine differenzierbare Funktion $u : [a, b] \rightarrow \mathbb{R}$, die ein Funktional

$$E(u) := \int_a^b F(x, u, u_x) \, dx$$

minimiert und die Randbedingungen

$$\begin{aligned} u(a) &= \alpha \\ u(b) &= \beta \end{aligned}$$

erfüllt.

ist notwendigerweise Lösung der so genannten Euler-Lagrange-Gleichung

$$F_u - \frac{d}{dx} F_{u_x} = 0$$

mit den Randbedingungen

$$\begin{aligned} u(a) &= \alpha \\ u(b) &= \beta. \end{aligned}$$

Beweis: Wir nehmen an, dass $u_0(x)$ eine differenzierbare Lösung des Variationsproblems ist und betten $u_0(x)$ in eine Schar von Konkurrenzfunktionen ein:

$$u(x, \varepsilon) := u_0(x) + \varepsilon h(x)$$

mit einer differenzierbaren Funktion $h(x)$ mit $h(a) = h(b) = 0$. Da $u_0(x)$ das Integral $E(u)$ minimiert, besitzt

$$g(\varepsilon) := E(u_0 + \varepsilon h)$$

in $\varepsilon = 0$ ein Minimum. Daher muss gelten:

$$\begin{aligned} 0 &= g'(0) = \left. \frac{d}{d\varepsilon} E(u_0 + \varepsilon h) \right|_{\varepsilon=0} \\ &= \left. \frac{d}{d\varepsilon} \int_a^b F(x, u_0 + \varepsilon h, u_{0x} + \varepsilon h_x) \, dx \right|_{\varepsilon=0} \\ &\stackrel{\text{Kettenregel}}{=} \int_a^b [F_u(x, u_0, u_{0x}) h(x) + F_{u_x}(x, u_0, u_{0x}) h_x(x)] \, dx. \end{aligned}$$

Mit der partiellen Integration

$$\int_a^b F_{u_x}(x, u_0, u_{0x}) h_x(x) \, dx = \underbrace{F_{u_x}(x, u_0, u_{0x}) h(x)}_{=0 \text{ da } h(a)=h(b)=0} \Big|_a^b - \int_a^b \frac{d}{dx} (F_{u_x}(x, u_0, u_{0x})) h(x) \, dx$$

folgt

$$0 = \int_a^b \left[F_u(x, u_0, u_{0x}) - \frac{d}{dx} F_{u_x}(x, u_0, u_{0x}) \right] h(x) dx$$

für beliebige differenzierbare Funktionen $h(x)$.

$$\Rightarrow 0 = F_u(x, u_0, u_{0x}) - \frac{d}{dx} F_{u_x}(x, u_0, u_{0x}).$$

□

61.4 Erweiterungen von Satz 61.3

Man kann Folgendes zeigen:

a) Keine Randvorgaben

Hat das Variationsproblem keine Randbedingungen, so besitzen die Euler-Lagrange-Gleichungen die „natürlichen Randbedingungen“

$$\left. \frac{du}{dx} \right|_a = 0, \quad \left. \frac{du}{dx} \right|_b = 0.$$

b) Funktionen mehrerer Variabler

Die Variationsgleichung

$$E(u) = \int_{a_1}^{b_1} \dots \int_{a_n}^{b_n} F(x_1, \dots, x_n, u(x_1, \dots, x_n), u_{x_1}, \dots, u_{x_n}) dx_1 \dots dx_n$$

führt auf die Euler-Lagrange-Gleichung

$$0 = F_u - \frac{\partial}{\partial x_1} F_{u_{x_1}} - \dots - \frac{\partial}{\partial x_n} F_{u_{x_n}}$$

c) Höhere Ableitungen

$$E(u) = \int_a^b F(x, u, u_x, u_{xx}, \dots) dx$$

führt auf die Euler-Lagrange-Gleichung

$$0 = F_u - \frac{d}{dx} F_{u_x} + \frac{d^2}{dx^2} F_{u_{xx}} - + \dots$$

d) Vektorwertige Funktionen

$$E(u_1, \dots, u_m) = \int_a^b F(x, u_1, \dots, u_m, u_{1x}, \dots, u_{mx}) dx$$

führt auf ein System von Euler-Lagrange-Gleichungen

$$\begin{aligned} 0 &= F_{u_1} - \frac{d}{dx} F_{u_{1x}} \\ &\vdots \\ 0 &= F_{u_m} - \frac{d}{dx} F_{u_{mx}}. \end{aligned}$$

61.5 Beispiel

Wendet man 61.4.(a) auf Beispiel 61.1.(b) an, folgt aus

$$F(x, u, u_x) = \frac{1}{2}(u - f)^2 + \frac{\alpha}{2}u_x^2$$

durch partielles Ableiten:

$$\begin{aligned} F_u &= u - f \\ F_{u_x} &= \alpha u_x \end{aligned}$$

und somit die Euler-Lagrange-Gleichung

$$0 = F_u - \frac{d}{dx}F_{u_x} = u - f - \alpha u_{xx}$$

wie in 61.2 vermutet. Die Diskretisierung in 61.2 stellt ein praktisches Lösungsverfahren für diese Differentialgleichung dar.

Im zweidimensionalen Fall (Entrauschen von Bildern) führt die Minimierung des Energiefunktional

$$E(u) = \iint [(u - f)^2 + \alpha \underbrace{(u_x^2 + u_y^2)}_{=|\nabla u|^2}] dx dy$$

zur Euler-Lagrange-Gleichung

$$0 = (u - f) - \alpha \underbrace{(u_{xx} + u_{yy})}_{=\Delta u}$$

Nummeriert man im diskreten Fall die Punkte zeilen- oder spaltenweise durch, entsteht ein großes lineares Gleichungssystem, das dünn besetzt ist (max. 5 Einträge pro Zeile):

$$\begin{pmatrix} \cdot & \cdot & & \cdot & & \mathbf{0} \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \\ & \cdot & \cdot & \cdot & \mathbf{0} & \cdot \\ & & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & & \mathbf{0} & \cdot & \cdot & \cdot \\ & \cdot & & \cdot & \cdot & \cdot \\ & & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \mathbf{0} & & & \cdot & \cdot & \cdot \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_1 \\ \vdots \\ \vdots \\ \vdots \\ \vdots \\ \vdots \\ \vdots \\ u_N \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f_1 \\ \vdots \\ \vdots \\ \vdots \\ \vdots \\ \vdots \\ \vdots \\ f_N \end{pmatrix}$$

Es wird z.B. mit Gauß- Seidel oder SOR iterativ gelöst; vgl. Kapitel 38.

62 Umkehrfunktion und Transformationsregel

62.1 Motivation

Wir haben bereits viele Konzepte von Funktionen einer Variablen auf Funktionen mehrerer Variablen verallgemeinert: Differenzierbarkeit, Mittelwertsatz, Satz von Taylor, Extrema von Funktionen.

Wir wollen nun den Begriff der Umkehrbarkeit einer Funktion verallgemeinern. In diesem Zusammenhang finden wir auch ein Analogon zur Substitutionsregel: die Transformationsregel.

62.2 Erinnerung: Umkehrbarkeit von Funktionen einer Variablen (vgl. 18.6.(f)).

Eine C^1 -Funktion $f : (a, b) \rightarrow \mathbb{R}$ lässt sich lokal invertieren (nämlich in einer Umgebung, in der f streng monoton ist): Ist $f'(\xi) \neq 0$, existiert in einer Umgebung von $\eta = f(\xi)$ eine C^1 -Umkehrfunktion g mit

$$g'(\eta) = \frac{1}{f'(\xi)}.$$

Für vektorwertige Funktionen mehrerer Variabler kann man folgendes Resultat zeigen:

62.3 Satz: (Umkehrsatz)

Sei $D \subset \mathbb{R}^n$ offen, und $f : D \rightarrow \mathbb{R}^n$ eine C^1 -Funktion. Ferner sei $\xi \in D$. Ist die Jacobi-Matrix $Jf(\xi)$ invertierbar, so ist f lokal invertierbar: Es gibt offene Umgebungen U_1 von ξ und U_2 von $\eta = f(\xi)$, so dass f die Menge U_1 bijektiv auf U_2 abbildet. Die Umkehrfunktion $g = f^{-1} : U_2 \rightarrow U_1$ ist eine C^1 -Funktion und es gilt:

$$Jg(\eta) = (Jf(\xi))^{-1}.$$

Beweisidee:

Das letzte Resultat folgt aus $g \circ f = \text{id}_{U_1}$ (identische Abbildung auf U_1) mit Hilfe der Kettenregel (vgl. 55.4.(b)):

$$Jg(\eta) \cdot Jf(\xi) = I.$$

Die lokale Existenz einer C^1 -Umkehrfunktion g erfordert ein aufwändiges Resultat, das wir hier nicht durchnehmen (Satz über implizite Funktionen). \square

62.4 Bemerkungen

- Wegen der Umkehrbarkeit müssen sowohl Definitionsbereich als auch Wertebereich im \mathbb{R}^n liegen.
- Bijektive C^1 -Funktion, deren Umkehrung ebenfalls C^1 -Abbildungen sind, heißen auch C^1 -Diffeomorphismen.
- Der Umkehrsatz besagt, dass C^1 -Funktionen mit regulärer Jacobi-Matrix lokal umkehrbar sind. Solche Abbildungen kommen in den Anwendungen oft bei Koordinatentransformationen vor.

62.5 Beispiel: Polarkoordinaten

Einen Vektor $\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^2$ mit $\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} \neq \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$ kann man durch seinen Abstand r zum Ursprung und seinen Winkel φ zur x -Achse beschreiben:

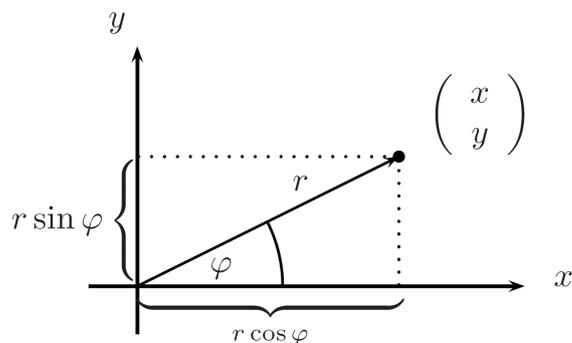


Abbildung 8:

Die Funktion $f : (0, \infty) \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}^2$:

$$\begin{pmatrix} r \\ \varphi \end{pmatrix} \mapsto \begin{pmatrix} r \cos \varphi \\ r \sin \varphi \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}$$

hat die Jacobi-Matrix

$$Jf(r, \varphi) = \begin{pmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial r} & \frac{\partial f_1}{\partial \varphi} \\ \frac{\partial f_2}{\partial r} & \frac{\partial f_2}{\partial \varphi} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \varphi & -r \sin \varphi \\ \sin \varphi & r \cos \varphi \end{pmatrix}.$$

Da $\det(Jf(r, \varphi)) = r \cos^2 \varphi + r \sin^2 \varphi = r > 0$, ist f auf $(0, \infty) \times \mathbb{R}$ lokal invertierbar: Für $r \in (0, \infty)$ und $\varphi \in \left(-\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2}\right)$ lautet die Umkehrfunktion:

$$g : \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} \mapsto \begin{pmatrix} \sqrt{x^2 + y^2} \\ \arctan\left(\frac{y}{x}\right) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} r \\ \varphi \end{pmatrix}.$$

Sie hat die Jacobi-Matrix

$$\begin{aligned}
 Jg(x, y) &= \begin{pmatrix} \frac{\partial g_1}{\partial x} & \frac{\partial g_1}{\partial y} \\ \frac{\partial g_2}{\partial x} & \frac{\partial g_2}{\partial y} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{x}{\sqrt{x^2 + y^2}} & \frac{y}{\sqrt{x^2 + y^2}} \\ \frac{-y}{x^2 + y^2} & \frac{x}{x^2 + y^2} \end{pmatrix} \\
 &= \begin{pmatrix} \frac{r \cos \varphi}{r} & \frac{r \sin \varphi}{r} \\ \frac{-r \sin \varphi}{r^2} & \frac{r \cos \varphi}{r^2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \varphi & \sin \varphi \\ -\frac{\sin \varphi}{r} & \frac{\cos \varphi}{r} \end{pmatrix}. \\
 \text{Damit gilt: } Jg \cdot Jf &= \begin{pmatrix} \cos^2 \varphi + \sin^2 \varphi & -r \cos \varphi \sin \varphi + r \cos \varphi \sin \varphi \\ -\frac{\sin \varphi \cos \varphi}{r} + \frac{\sin \varphi \cos \varphi}{r} & \sin^2 \varphi + \cos^2 \varphi \end{pmatrix} \\
 &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}
 \end{aligned}$$

d.h. $Jg = (Jf)^{-1}$.

Beachte: f bildet $(0, \infty) \times \mathbb{R}$ auf $\mathbb{R}^2 \setminus \left\{ \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} \right\}$ ab, ist aber nicht global umkehrbar, da

$$f(r, \varphi) = f(r, \varphi + 2k\pi) \text{ f\"ur alle } k \in \mathbb{Z}.$$

Die Jacobi-Matrix von Koordinatentransformationen wird u.a. beim Berechnen von Mehrfachintegralen ben\"otigt. Hier verwendet man oft die Transformationsregel, eine Verallgemeinerung der Substitutionsregel.

62.6 Erinnerung: Substitutionsregel (vgl. 24.6).

Zur Berechnung von $\int_c^d f(x) dx$ setze man $x = g(t)$ mit einer streng monotonen C^1 -Funktion g mit $g(a) = c$, $g(b) = d$, und formal/symbolisch: $dx = g'(t)dt$. Dann gilt:

$$\int_{x=c}^{x=d} f(x) dx = \int_{t=a}^{t=b} f(g(t))g'(t) dt \quad .$$

Bemerkung: Ist $c < d$ und $g' < 0$, so ist $a > b$. Somit gilt

$$\int_{x \in [c, d]} f(x) dx = - \int_{t \in [b, a]} f(g(t))g'(t) dt = \int_{t \in [b, a]} f(g(t)) |g'(t)| dt$$

Wie verallgemeinert man dies auf skalarwertige Funktionen mehrerer Variabler? Man kann zeigen:

62.7 Transformationsregel

Sei $D \subset \mathbb{R}^n$ und $f : D \rightarrow \mathbb{R}$. Wir m\"ochten $\int_D f(x) dx$ berechnen. Es existiert eine Menge $E \subset \mathbb{R}^n$ und ein C^1 -Diffeomorphismus $g : E \rightarrow D$. Setze $x = g(t)$. Dann gilt

unter geeigneten technischen Voraussetzungen (auf die wir hier nicht näher eingehen):

$$\int_{x \in D} f(x) \, dx = \int_{t \in g^{-1}(D)} f(g(t)) \, |\det Jg(t)| \, dt$$

Beachte: x, t sind hier Vektoren im \mathbb{R}^n .

62.8 Beispiel: Integration in Kugelkoordinaten

Kugelkoordinaten sind die 3-D Verallgemeinerung von Polarkoordinaten:

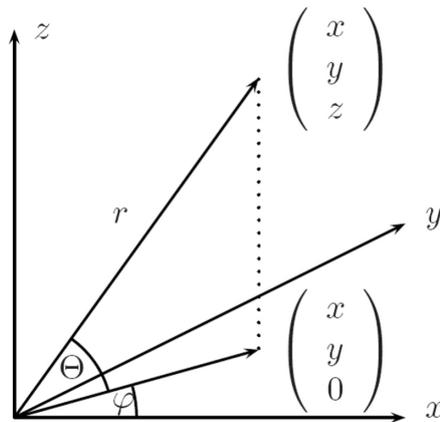


Abbildung 9:

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} r \cos \varphi \cos \Theta \\ r \sin \varphi \cos \Theta \\ r \sin \Theta \end{pmatrix} = g(r, \varphi, \Theta) \\ Jg(r, \varphi, \Theta) &= \begin{pmatrix} \frac{\partial g_1}{\partial r} & \frac{\partial g_1}{\partial \varphi} & \frac{\partial g_1}{\partial \Theta} \\ \frac{\partial g_2}{\partial r} & \frac{\partial g_2}{\partial \varphi} & \frac{\partial g_2}{\partial \Theta} \\ \frac{\partial g_3}{\partial r} & \frac{\partial g_3}{\partial \varphi} & \frac{\partial g_3}{\partial \Theta} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \varphi \cos \Theta & -r \sin \varphi \cos \Theta & -r \cos \varphi \sin \Theta \\ \sin \varphi \cos \Theta & r \cos \varphi \cos \Theta & -r \sin \varphi \sin \Theta \\ \sin \Theta & 0 & r \cos \Theta \end{pmatrix} \\ \det(Jg) &= \sin \Theta \begin{vmatrix} -r \sin \varphi \cos \Theta & -r \cos \varphi \sin \Theta \\ r \cos \varphi \cos \Theta & -r \sin \varphi \sin \Theta \end{vmatrix} + r \cos \Theta \begin{vmatrix} \cos \varphi \cos \Theta & -r \sin \varphi \cos \Theta \\ \sin \varphi \cos \Theta & r \cos \varphi \cos \Theta \end{vmatrix} \\ &= \sin \Theta (r^2 \sin^2 \varphi \sin \Theta \cos \Theta + r^2 \cos^2 \varphi \sin \Theta \cos \Theta) \\ &\quad + r \cos \Theta (r \cos^2 \varphi \cos^2 \Theta + r \sin^2 \varphi \cos^2 \Theta) \\ &= \sin \Theta r^2 \sin \Theta \cos \Theta + r \cos \Theta r \cos^2 \Theta \\ &= r^2 \cos \Theta. \end{aligned}$$

Wir wollen hiermit das Volumen eines Kugeloktanten mit Radius R berechnen:

$$\begin{aligned}
 V &= \left\{ \left(\begin{array}{c} x \\ y \\ z \end{array} \right) \in \mathbb{R}^3 \mid x^2 + y^2 + z^2 \leq R^2 \text{ und } x, y, z \geq 0 \right\} \\
 \int_{(x,y,z) \in V} dx \, dy \, dz &= \int_{(r,\varphi,\Theta) \in g^{-1}(V)} |\det(Jg)| \, dr \, d\varphi \, d\Theta \\
 &= \int_{\Theta=0}^{\pi/2} \int_{\varphi=0}^{\pi/2} \int_{r=0}^R r^2 \cos \Theta \, dr \, d\varphi \, d\Theta \\
 &= \int_{\Theta=0}^{\pi/2} \int_{\varphi=0}^{\pi/2} \frac{R^3}{3} \cos \Theta \, d\varphi \, d\Theta \\
 &= \int_{\Theta=0}^{\pi/2} \frac{R^3}{3} \cdot \frac{\pi}{2} \cos \Theta \, d\Theta \\
 &= \frac{1}{6} \pi R^3 [\sin \Theta]_0^{\pi/2} \\
 &= \frac{1}{6} \pi R^3.
 \end{aligned}$$

Teil F
Stochastik

63 Grundbegriffe der Stochastik

63.1 Motivation

Stochastik (aus dem Griechischen: vermuten, erwarten) ist die Mathematik des Zufalls. Sie ist von großer Bedeutung in der Informatik. **Beispiele:**

- Analyse der Auslastung von Datennetzen
- Modellierung von Antwortzeiten im Rechner
- Zuverlässigkeit von Produkten
- Raytracing in der Computergrafik (Monte-Carlo-Methoden)
- stochastische Optimierungsalgorithmen (genetische Algorithmen, simulated annealing)
- Analyse der mittleren Laufzeit von Algorithmen
- Kombinatorische Probleme in der Bioinformatik

63.2 Gebietsabgrenzung

Stochastik kann man in zwei Gebiete gliedern:

a) Wahrscheinlichkeitstheorie

Ausgehend von einem stochastischen Modell werden Wahrscheinlichkeiten berechnet. **Beispiele:**

- Wurf eines Würfels.
Modellannahme: Die Augenzahlen $1, \dots, 6$ sind gleichberechtigt und gleich wahrscheinlich (mit Wahrscheinlichkeit $\frac{1}{6}$).
Damit ist die Wahrscheinlichkeit für Augenzahl 1 oder 3 gleich $\frac{1}{6} + \frac{1}{6} = \frac{1}{3}$.
- Lebensdauer eines Produktes (oft von nicht deterministisch bestimmt).
Erfordert i.a. kompliziertes Modell, um z.B. die Wahrscheinlichkeit angeben zu koennen, dass der Ausfall in einem Zeitintervall $[0, T]$ passiert.

b) Statistik

Ausgehend von realen Daten/Messungen zieht man Schlussfolgerungen.

Beispiele:

- möglichst gute Approximationsgerade durch fehlerbehaftete Messwerte legen
- Hypothesentest: Ist ein neues Medikament wirksam?

63.3 Definition: (Ergebnismenge, Ereignis, σ -Algebra, Wahrscheinlichkeitsverteilung)

- a) Bei statistischen Experimenten bzw. Zufallsexperiment können die einzelnen möglichen Versuchsausgänge mit den Elementen einer Menge Ω identifiziert werden:

$$\Omega = \{ \omega \mid \omega \text{ möglicher Versuchsausgang} \}$$

Ω heißt die zum Experiment gehörende Ergebnismenge (auch Stichprobenraum, Merkmalsraum, Grundraum).

- b) Ereignisse sind Teilmengen A von Ω : $A \subset \Omega$. Ihnen werden Wahrscheinlichkeiten, reelle Zahlen zwischen 0 und 1, zugeordnet. Um dies sinnvoll tun zu können betrachtet man Systeme \mathcal{A} von Ereignissen, d.h. Systeme von Teilmengen eines Grundraumes Ω .
- c) Ein System \mathcal{A} von Teilmengen von Ω , $\mathcal{A} \subset 2^\Omega$, heißt σ -Algebra (auch Ereignisfeld) wenn gilt:

i) $\emptyset \in \mathcal{A}$

ii) Wenn $A \in \mathcal{A}$ dann auch $\bar{A} \in \mathcal{A}$, wobei $\bar{A} := \Omega \setminus A$

iii) Für jede Folge $(A_n)_{n \in \mathbb{N}}$ von Ereignissen $A_n \in \mathcal{A}$ gilt

$$\bigcup_{n=1}^{\infty} A_n \in \mathcal{A}.$$

- d) Auf so einem Mengensystem lässt sich eine Wahrscheinlichkeitsverteilung (auch Wahrscheinlichkeitsmaß, oder kurz Verteilung) definieren. Dies ist eine Abbildung $P : \mathcal{A} \rightarrow \mathbb{R}$ mit den Eigenschaften

i) Normiertheit: $P(\Omega) = 1$

ii) Nichtnegativität: $P(A) \geq 0 \quad \forall A \in \mathcal{A}$

iii) σ -Additivität: Für jede Folge $(A_n)_{n \in \mathbb{N}}$ von paarweise disjunkten Ereignissen aus \mathcal{A} , d.h. $A_i \cap A_j = \emptyset$ für $i \neq j$, gilt

$$P\left(\bigcup_{n=1}^{\infty} A_n\right) = \sum_{n=1}^{\infty} P(A_n).$$

63.4 Definition: (Wahrscheinlichkeitsraum)

Ist Ω ein Ergebnisraum, \mathcal{A} ein zugehöriges Ereignisfeld und P eine Wahrscheinlichkeitsverteilung auf \mathcal{A} , so nennt man das Tripel (Ω, \mathcal{A}, P) einen Wahrscheinlichkeitsraum.

Bemerkung: Die Aussagen aus 63.3.c.iii) und 63.3.d.iii) gelten sinngemäß auch für endliche Folgen A_1, \dots, A_N von Ereignissen:

$$\bigcup_{n=1}^N A_n \in \mathcal{A} \quad \text{und} \quad P\left(\bigcup_{n=1}^N A_n\right) = \sum_{n=1}^N P(A_n).$$

Man setze dort einfach $A_N = A_{N+1} = A_{N+2} = \dots = \emptyset$.

63.5 Beispiele:

- a) Ist der zu einem Zufallsexperiment gehörige Ergebnisraum Ω höchstens abzählbar, d.h. $\Omega = \{\omega_1, \omega_2, \dots, \omega_N\}$ oder $\Omega = \{\omega_1, \omega_2, \dots\}$, so lässt sich $\mathcal{A} = 2^\Omega$ wählen und jede Wahrscheinlichkeitsverteilung auf \mathcal{A} ist durch Angabe der Punktwahrscheinlichkeiten

$$p(\omega_i) = P(\{\omega_i\})$$

gegeben. Für ein beliebiges Ereignis $A = \{\omega_{j_1}, \omega_{j_2}, \dots\}$ gilt dann

$$P(A) := \sum_k p(\omega_{j_k}).$$

Solche Wahrscheinlichkeitsräume heißen diskrete Wahrscheinlichkeitsräume.

- b) Ist $\Omega = \{\omega_1, \omega_2, \dots, \omega_N\}$, also endlich, und sind alle Punktwahrscheinlichkeiten gleich, $p(\omega_1) = \dots = p(\omega_N)$ so spricht man von einem Laplace-Raum und beim zugrunde liegenden Zufallsexperiment von einem Laplace-Experiment. Für ein Ereignis $A = \{\omega_{j_1}, \dots, \omega_{j_k}\}$ gilt dann:

$$p(\omega_1) = \dots = p(\omega_N) = \frac{1}{N} \quad \text{und} \quad P(A) = \frac{k}{N} = \frac{|A|}{|\Omega|}.$$

($|A|$ bezeichnet die Mächtigkeit der Menge A .)

- c) Einmaliger Wurf einer fairen Münze (Laplace-Experiment):
 $\Omega = \{K, Z\}$, $\mathcal{A} = \{\emptyset, \{K\}, \{Z\}, \{K, Z\}\}$ und $P(\{K\}) = P(\{Z\}) = \frac{1}{2}$.
Weitere Beispiele später.

Bemerkung: Bei überabzählbaren Ergebnismengen (z.B. $\Omega = [0, 100] \subset \mathbb{R}$) darf die Potenzmenge 2^Ω von Ω **nicht** als σ -Algebra gewählt werden. Man kann zeigen, dass man dann auf 2^Ω keine 'interessanten' W-Verteilungen definieren kann.

Deshalb sollte die σ -Algebra möglichst 'klein' sein, aber noch groß genug damit wichtige Mengen (= Ereignisse) zur Beschreibung eines Zufallsexperiments zur Verfügung stehen. Z.B. die kleinste σ -Algebra die alle Punkte, offenen, halboffenen und abgeschlossenen Intervalle aus \mathbb{R} enthält ist die σ -Algebra der Borelschen Mengen.

64 Kombinatorik

64.1 Motivation

Die Kombinatorik liefert wichtige Modelle zum Berechnen von Wahrscheinlichkeiten bei Laplace-Experimenten. Sie spielt eine grundlegende Rolle in der Informatik.

64.2 Zwei äquivalente Sprechweisen

a) Stichprobensprechweise, Urnenmodell

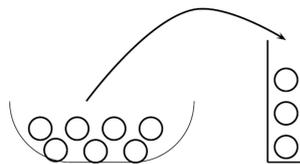


Abbildung 10:

Aus einer Urne mit n unterscheidbaren Kugeln werden k Kugeln gezogen. Dabei kann das Ziehen mit oder ohne Zurücklegen erfolgen, und die Reihenfolge eine oder keine Rolle spielen.

b) Zuordnungssprechweise, Schubladenmodell

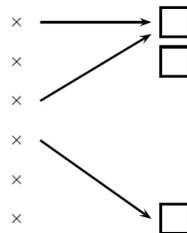


Abbildung 11:

k Objekte werden auf n Schubladen verteilt. Dabei sind die Objekte entweder unterscheidbar oder nicht unterscheidbar, und die Schubladen dürfen einfach oder mehrfach besetzt werden. Urnen- und Schubladenmodell sind äquivalent:

Urnenmodell	Schubladenmodell
mit / ohne Zurücklegen	mit / ohne Mehrfachbesetzung
in / ohne Reihenfolge	unterscheidbare / ununterscheidbare Objekte

64.3 Produktregel der Kombinatorik

Bei einem k -stufigen Experiment habe der Ausgang einer Stufe keinen Einfluss auf die Anzahl der möglichen Ausgänge bei späteren Stufen. Haben die einzelnen Stufen n_1, \dots, n_k Ausgänge, so hat das Gesamtexperiment $n_1 \cdot \dots \cdot n_k$ Ausgänge.

Die Produktregel ist wichtig bei der Beschreibung der vier kombinatorischen Grundsituationen.

64.4 Die vier kombinatorischen Grundsituationen

a) Geordnete Stichprobe mit Wiederholung

Bei k Ziehungen mit Zurücklegen aus einer Urne mit n Objekten gibt es n^k Möglichkeiten, wenn die Reihenfolge eine Rolle spielt.

Beispiel (aus einem älteren Stochastikbuch): Herr Meier will seinen ungezogenen Sohn mit 10 Ohrfeigen bestrafen. Auf wie viele Arten kann er das tun, wenn er bei jedem Schlag zwei Möglichkeiten hat (rechts oder links)? Es gibt $2^{10} = 1024$ Möglichkeiten.

b) Geordnete Stichprobe ohne Wiederholung

Urnenmodell: k Ziehungen aus n Objekten ohne Zurücklegen, aber mit Berücksichtigung der Reihenfolge.

$$\begin{array}{ccccccc} \text{Möglichkeiten:} & n & \cdot & (n-1) & \cdot & (n-2) & \cdot \dots \cdot & (n-k+1) & = & \frac{n!}{(n-k)!} \\ & \uparrow & & & & & & \uparrow & & \\ & \text{1. Ziehung} & & & & & & \text{k-te Ziehung} & & \end{array}$$

Spezialfall: $k = n: \Rightarrow n!$ Möglichkeiten.

Für große n approximiert man $n!$ mit der Stirling-Formel

$$n! \approx \sqrt{2\pi n} n^n e^{-n}.$$

Beispiel: Herr Meier will seine 5 Kinder in einer Reihe anordnen für eine Gruppenaufnahme. Es gibt $5! = 5 \cdot 4 \cdot 3 \cdot 2 \cdot 1 = 120$ Möglichkeiten.

c) Ungeordnete Stichprobe ohne Wiederholung

Wie in (b), jedoch müssen die $k!$ Permutationen der k gezogenen Elemente mit einander identifiziert werden. Daher gibt es nur $\frac{n!}{(n-k)!k!} = \binom{n}{k}$ Möglichkeiten.

Beispiel: Beim Lottoschein gibt es $\binom{49}{6} = \frac{49 \cdot 48 \cdot 47 \cdot 46 \cdot 45 \cdot 44}{1 \cdot 2 \cdot 3 \cdot 4 \cdot 5 \cdot 6} = 13.983.816$ Möglichkeiten, 6 der 49 Zahlen anzukreuzen. Die Wahrscheinlichkeit, 6 Richtige zu tippen, ist daher $\frac{1}{13.983.816} \approx 7 \cdot 10^{-8}$.

d) Ungeordnete Stichprobe mit Wiederholung

Hier ist das Schubladenmodell hilfreich: Es sollen k nicht unterscheidbare Objekte in

n Schubladen verstaut werden, wobei Mehrfachbesetzung möglich ist:



Der Gesamtzustand wird beschrieben durch die Reihenfolge von k Objekten und $n - 1$ Trennungsstrichen.

$$\Rightarrow \frac{(k + n - 1)!}{k!(n - 1)!} = \binom{k + n - 1}{k} = \binom{k + n - 1}{n - 1} \text{ Möglichkeiten.}$$

(Durch die Division durch $k!(n - 1)!$ wurden die Permutationen identifiziert)

Beispiel: Auf wie viele Arten können 60 Parlamentssitze auf 3 Parteien verteilt werden?

$$k = 60, n = 3$$

$$\Rightarrow \binom{62}{60} = \binom{62}{2} = \frac{62 \cdot 61}{2 \cdot 1} = 1891 \text{ Möglichkeiten.}$$

65 Erzeugende Funktionen

65.1 Motivation

Erzeugende Funktionen wirken auf den ersten Blick etwas abstrakt, aber sie sind ein wichtiges Werkzeug, um kombinatorische Probleme systematischer und eleganter zu lösen. Sie sind zudem in verschiedenen anderen Gebieten der Stochastik nützlich.

65.2 Permutationen und Kombinationen

In §64 haben wir geordnete und ungeordnete k -elementige Stichproben einer n -elementigen Menge betrachtet. Im geordneten Fall nennt man eine solche Stichprobe auch k -Permutation, im ungeordneten Fall eine k -Kombination.

65.3 Beispiel einer erzeugenden Funktion

Nach dem Binomialsatz 15.7 gilt:

$$(x + 1)^n = \sum_{k=0}^n \binom{n}{k} x^k 1^{n-k} = \sum_{k=0}^n \binom{n}{k} x^k$$

Der Koeffizient $\binom{n}{k}$ von x^k beschreibt die Zahl der k -Kombinationen einer n -elementigen Menge ohne Wiederholung (vgl. 64.4.(c)). In den Koeffizienten der Funktion

$$f(x) = (x + 1)^n = \binom{n}{0} x^0 + \binom{n}{1} x^1 + \dots + \binom{n}{n} x^n$$

stecken somit alle Informationen über dieses kombinatorische Problem. Dies motiviert die folgende Definition:

65.4 Definition: (Erzeugende Funktion)

Eine Funktion f mit

$$f(x) = \sum_{k=0}^n a_k x^k$$

heißt erzeugende Funktion für die Koeffizienten a_k . Lassen sich die Zahlen a_k mit einem kombinatorischen Problem identifizieren, so nennen wir f die erzeugende Funktion für dieses Problem.

65.5 Beispiel

$f(x) = (1 + x)^n$ ist die erzeugende Funktion der Kombinationen ohne Wiederholung einer n -elementigen Menge.

Schubladeninterpretation

Jeder der n Faktoren $(1 + x)$ wird als Schublade aufgefasst, in die null oder ein Element

passt. Wählt man beim Ausmultiplizieren von $(1 + x)$ den Faktor 1, bleibt die Schublade leer. Wählt man x , wird sie mit einem Element besetzt.

Beispielsweise beschreibt

$$f(x) = (1 + x)^3 = 1 + 3x + 3x^2 + x^3$$

alle Kombinationen, 0,1,2 oder 3 Elemente auf 3 Schubladen zu verteilen. Dabei bedeuten die Summanden:

1	$= 1 \cdot 1 \cdot 1$	1 Möglichkeit bei 0 Elementen
$3x$	$= x \cdot 1 \cdot 1 + 1 \cdot x \cdot 1 + 1 \cdot 1 \cdot x$	3 Möglichkeiten bei 1 Element
$3x^2$	$= x \cdot x \cdot 1 + x \cdot 1 \cdot x + 1 \cdot x \cdot x$	3 Möglichkeiten bei 2 Elementen
x^3	$= x \cdot x \cdot x$	1 Möglichkeit bei 3 Elementen

Wie verallgemeinert man dieses Prinzip, wenn eine Schublade mit mehreren Objekten besetzt werden soll?

65.6 Beispiel

Lassen wir pro Schublade bis zu zwei Objekten zu (die sich wiederholen dürfen), lautet der Faktor $(1 + x + x^2)$ statt $(1 + x)$.

Z.B. können wir die Anzahl der Kombinationen mit Wiederholung aus einer 2-elementigen Menge bestimmen, wenn jedes Element 0-,1- oder 2-mal ausgewählt werden kann:
erzeugende Funktion:

$$\begin{aligned} f(x) &= (1 + x + x^2)^2 \\ &= (1 + x + x^2)(1 + x + x^2) \\ &= 1 \cdot 1 + 1 \cdot x + 1 \cdot x^2 + x \cdot 1 + x \cdot x + x \cdot x^2 + x^2 \cdot 1 + x^2 \cdot x + x^2 \cdot x^2 \\ &= 1 + 2x + 3x^2 + 2x^3 + x^4 \end{aligned}$$

- Es gibt hier 1 Möglichkeit, 0 Objekte zu verteilen.
- Es gibt hier 2 Möglichkeiten 1 Objekt zu verteilen.
- Es gibt hier 3 Möglichkeiten 2 Objekte zu verteilen.
- Es gibt hier 2 Möglichkeiten 3 Objekte zu verteilen.
- Es gibt hier 1 Möglichkeit 4 Objekte zu verteilen.

Man kann sogar für die unterschiedlichen Elemente unterschiedliche Beschränkungen einführen:

65.7 Beispiel

Bestimme die Kombinationen einer 4-elementigen Menge $\{x_1, \dots, x_n\}$ mit den folgenden Beschränkungen:

Element:	Beschränkung	Polynom:
x_1	0-,1- oder 3-mal	$1 + x + x^3$
x_2	1- oder 2-mal	$x + x^2$
x_3	1-mal	x
x_4	0- oder 4-mal	$1 + x^4$

erzeugende Funktion:

$$\begin{aligned} f(x) &= (1 + x + x^3)(x + x^2)x(1 + x^4) \\ &= \dots \\ &= x^2 + 2x^3 + x^4 + x^5 + 2x^6 + 2x^7 + x^8 + x^9 + x^{10} \end{aligned}$$

Es gibt also z.B. zwei 6-Kombinationen.

Diese Beispiele motivieren:

65.8 Satz: (Kombinationen mit vorgegebenen Wiederholungen)

Die erzeugende Funktion der Kombinationen mit Wiederholung aus einer n -elementigen Menge $\{x_1, \dots, x_n\}$, in der x_i in den Anzahlen $v_1^{(i)}, \dots, v_{k_i}^{(i)}$ auftreten darf, ist gegeben durch

$$\prod_{i=1}^n (x^{v_1^{(i)}} + x^{v_2^{(i)}} + \dots + x^{v_{k_i}^{(i)}}).$$

Läßt man beliebige Wiederholungen zu, erhält man mit

$$1 + x + x^2 + \dots = \sum_{k=0}^{\infty} x^k = \frac{1}{1-x} \quad (\text{für } |x| < 1)$$

den folgenden Satz:

65.9 Satz: (Kombinationen mit beliebigen Wiederholungen)

Die erzeugende Funktion der Kombinationen mit beliebigen Wiederholungen von n Elementen lautet

$$f(x) = \frac{1}{(1-x)^n} = (1 + x + x^2 + \dots)^n.$$

65.10 Bemerkungen

- Die gesuchten Koeffizienten vor x^k , $k \in \mathbb{N}_0$ ergeben sich durch eine formale Potenzreihenentwicklung. Dabei kann man Konvergenzbetrachtungen ignorieren, da man o.B.d.A. $|x| < 1$ annehmen darf.
- Muss jedes Element mind. p -mal auftreten, ergibt sich wegen

$$x^p + x^{p+1} + \dots = x^p \sum_{k=0}^{\infty} x^k = \frac{x^p}{1-x}$$

die erzeugende Funktion

$$f(x) = \frac{x^{np}}{(1-x)^n}.$$

Bisher hatten wir nur Kombinationen betrachtet. Sind erzeugende Funktionen auch bei Permutationen nützlich? Hierzu müssen wir den Begriff der erzeugenden Funktion durch den Begriff der exponentiell erzeugenden Funktion ersetzen:

65.11 Definition: (Exponentiell erzeugende Funktion)

Eine Funktion f mit

$$f(x) = \sum_{k=0}^n a_k \frac{x^k}{k!}$$

heißt exponentiell erzeugende Funktion für die Koeffizienten a_k .

Bem.: Der Name wird motiviert durch die Exponentialreihe $e^x = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{x^k}{k!}$.

65.12 Bedeutung für Permutationen

Nach 64.4.(b) gibt es bei einer n -elementigen Menge $n \cdot (n-1) \cdot \dots \cdot (n-k+1) = \frac{n!}{(n-k)!}$ k -Permutationen ohne Wiederholung ($k = 0, \dots, n$). Wegen

$$(x+1)^n = \sum_{k=0}^n \binom{n}{k} x^k = \sum_{k=0}^n \frac{n!}{(n-k)!k!} x^k = \sum_{k=0}^n \frac{n!}{(n-k)!} \frac{x^k}{k!}$$

sind dies die Koeffizienten der exponentiell erzeugenden Funktion

$$f(x) = (1+x)^n.$$

Die exponentiell erzeugende Funktion spielt also bei Permutationen die selbe Rolle wie die erzeugende Funktion bei Kombinationen.

Das Analogon zu Satz 65.8 lautet:

65.13 Satz: (Permutationen mit vorgegebenen Wiederholungen)

Die exponentiell erzeugende Funktion der Permutationen mit Wiederholung aus einer n -elementigen Menge $\{x_1, \dots, x_n\}$, in der x_i in den Anzahlen $v_1^{(i)}, \dots, v_{k_i}^{(i)}$ auftreten darf, lautet:

$$\prod_{i=1}^n \left(\frac{x^{v_1^{(i)}}}{v_1^{(i)}!} + \frac{x^{v_2^{(i)}}}{v_2^{(i)}!} + \dots + \frac{x^{v_{k_i}^{(i)}}}{v_{k_i}^{(i)}!} \right)$$

Läßt man beliebige Wiederholungen zu, folgt mit

$$1 + \frac{x}{1!} + \frac{x^2}{2!} + \dots = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{x^k}{k!} = e^x$$

das Analogon zu Satz 65.9:

65.14 Satz: (Permutationen mit beliebigen Wiederholungen)

Die exponentiell erzeugende Funktion der Permutationen mit beliebigen Wiederholungen von n Elementen lautet

$$f(x) = e^{nx} = (e^x)^n = \left(1 + \frac{x}{1!} + \frac{x^2}{2!} + \dots \right)^n.$$

66 Bedingte Wahrscheinlichkeiten

66.1 Motivation

In §63 haben wir den Begriff der Wahrscheinlichkeit (Ws.) kennengelernt. Oft hat man Zusatzinformationen, mit denen sich präzisere Wahrscheinlichkeitsaussagen machen lassen. Dies führt zu so genannten bedingten Wahrscheinlichkeiten.

66.2 Beispiel

Aufteilung der 1500 Angehörigen eines Betriebs nach Geschlecht und Rauchergewohnheiten:

	Frauen B	Männer \bar{B}
Raucher A	600	200
Nichtraucher \bar{A}	300	400

Ω : Menge der Betriebsangehörigen

A : Menge der Raucher ($\bar{A} = \Omega \setminus A$: Nichtraucher)

B : Menge der Frauen ($\bar{B} = \Omega \setminus B$: Männer)

Wir losen eine Person zufällig aus. Dabei treffen folgende Wahrscheinlichkeit zu ($|A|$: Mächtigkeit von A):

$$\begin{aligned}P(A) &= \frac{|A|}{|\Omega|} = \frac{800}{1500} = \frac{8}{15} && \text{Raucheranteil} \\P(B) &= \frac{|B|}{|\Omega|} = \frac{900}{1500} = \frac{3}{5} && \text{Frauenanteil} \\P(A \cap B) &= \frac{|A \cap B|}{|\Omega|} = \frac{600}{1500} = \frac{2}{5} && \text{Anteil der rauchenden Frauen}\end{aligned}$$

Wie groß ist die Wahrscheinlichkeit $P(A | B)$, dass eine Person raucht, falls es sich um eine Frau handelt?

$$\begin{aligned}P(A | B) &= \frac{|A \cap B|}{|B|} = \frac{\frac{|A \cap B|}{|\Omega|}}{\frac{|B|}{|\Omega|}} = \frac{P(A \cap B)}{P(B)} && (*) \\&= \frac{2/5}{3/5} = \frac{2}{3}.\end{aligned}$$

Man nennt $P(A | B)$ die bedingte Wahrscheinlichkeit von A unter der Bedingung (Hypothese) B . Es gilt stets (vgl. (*))

$$\boxed{P(A \cap B) = P(A | B) \cdot P(B)}$$

Zwei Ereignisse A, B heißen unabhängig, wenn gilt:

$$P(A \cap B) = P(A) \cdot P(B).$$

66.3 Verallgemeinerung

Seien $A_1, \dots, A_n \subset \Omega$ und $P(A_1 \cap \dots \cap A_{n-1}) > 0$. Dann gilt:

$$P(A_1 \cap \dots \cap A_n) = P(A_1) \cdot P(A_2 | A_1) \cdot P(A_3 | A_1 \cap A_2) \cdot \dots \cdot P(A_n | A_1 \cap \dots \cap A_{n-1}).$$

Beweis:

Die rechte Seite läßt sich schreiben als

$$\begin{aligned} & P(A_1) \cdot \frac{P(A_1 \cap A_2)}{P(A_1)} \cdot \frac{P(A_1 \cap A_2 \cap A_3)}{P(A_1 \cap A_2)} \cdot \dots \cdot \frac{P(A_1 \cap A_2 \cap \dots \cap A_n)}{P(A_1 \cap \dots \cap A_{n-1})} \\ &= P(A_1 \cap \dots \cap A_n). \end{aligned}$$

□

66.4 Beispiel

Wie groß ist die Wahrscheinlichkeit, mit 6 Würfeln 6 verschiedene Zahlen zu würfeln?

A_1 : irgend ein Ergebnis für 1. Würfel

A_2 : ein vom 1. Ergebnis verschiedenes Ergebnis für Würfel 2

⋮

A_6 : ein von A_1, \dots, A_5 verschiedenes Ergebnis für Würfel 6.

$$\begin{aligned} P(A_1 \cap \dots \cap A_6) &= P(A_1) \cdot P(A_2 | A_1) \cdot \dots \cdot P(A_6 | A_1 \cap \dots \cap A_5) \\ &= 1 \cdot \frac{5}{6} \cdot \dots \cdot \frac{1}{6} = \frac{6!}{6^6} \approx 0,015. \end{aligned}$$

66.5 Beispiel

Ein Krebstest ist mit 96% iger Sicherheit positiv, falls der Patient Krebs hat, mit 94%iger Sicherheit negativ, falls er keinen Krebs hat. Bei einem Patienten, in dessen Altersgruppe 0,5% aller Personen Krebs haben, verläuft der Test positiv. Wie groß ist die Wahrscheinlichkeit, dass er tatsächlich Krebs hat?

Ereignis K : Patient hat Krebs

Ereignis T : Test ist positiv

$$P(K | T) = \frac{P(K \cap T)}{P(T)} = \frac{0,005 \cdot 0,96}{0,005 \cdot 0,96 + 0,995 \cdot 0,06} \approx 0,074.$$

Der Patient kann also noch relativ beruhigt sein.

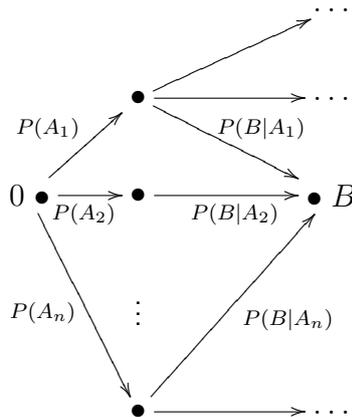
Fazit: Um eine seltene Krankheit zuverlässig zu erkennen, darf ein Test nur sehr wenige „false positives“ haben.

66.6 Satz: (Satz von der totalen Wahrscheinlichkeit)

Sei $\Omega = \bigcup_{i=1}^n A_i$ eine Partition von Ω in mögliche Ereignisse $A_i, i = 1, \dots, n$. Ferner sei $P(A_i) > 0$ für alle i . Dann gilt für jedes Ereignis B :

$$P(B) = \sum_{i=1}^n P(A_i) \cdot P(B | A_i)$$

Veranschaulichung:



Fahrer startet bei 0 und fährt mit Wahrscheinlichkeit $P(A_1), \dots, P(A_n)$ zu A_1, \dots, A_n . Die Wahrscheinlichkeit von dort nach B zu fahren, beträgt $P(B | A_1), \dots, P(B | A_n)$. Die Gesamtwahrscheinlichkeit, dass der Fahrer nach B gelangt, ist die Summe der Wahrscheinlichkeiten aller Pfade von 0 nach B_i

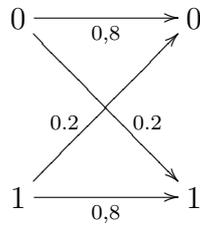
$$P(B) = \sum_{i_1}^n P(A_i)P(B | A_i). \tag{1}$$

Bem.: Im Beispiel 66.5 haben wir im Nenner bereits den Satz von der totalen Wahrscheinlichkeit verwendet.

66.7 Beispiel

Um einen binären Nachrichtenkanal robuster gegenüber Störungen zu machen, sendet man die Bitfolge 0000000 statt 0 und 1111111 statt 1. Störungen treten in 20% aller Fälle auf, und die Wahrscheinlichkeit für 0000000 sei 0,1.

Es wird 0100110 empfangen. Wie groß ist die Wahrscheinlichkeit, dass 0000000 gesendet wurde?



$$P(00000000 \mid 01001110) = \frac{0,1 \cdot 0,2^3 \cdot 0,8^4}{0,1 \cdot 0,2^3 \cdot 0,8^4 + 0,9 \cdot 0,2^4 \cdot 0,8^3} \approx 0,308$$

Man wird den Block also als 1 lesen, obwohl die Mehrzahl der Bits Nullen sind!

Eng verwandt mit dem Satz von der totalen Wahrscheinlichkeit ist

66.8 Satz: (Formel von Bayes)

Sei $P(B) > 0$ und seien die Voraussetzungen von Satz 66.6 erfüllt. Dann gilt:

$$P(A_k \mid B) = \frac{P(A_k)P(B \mid A_k)}{\sum_{i=1}^n P(A_i)P(B \mid A_i)}$$

Beweis:

Folgt aus $P(A_k \mid B) = \frac{P(A_k \cap B)}{P(B)}$, indem man

$$P(B) = \sum_{i=1}^n P(A_i)P(B \mid A_i) \quad (66.6)$$

$$P(A_k \cap B) = P(A_k)P(B \mid A_k) \quad (66.2)$$

einsetzt. □

Bemerkung: In Satz 66.8 wird $P(A_k \mid B)$ aus $P(B \mid A_i)$, $i = 1, \dots, n$ berechnet, d.h. Ursache und Wirkung kehren sich um. Eine typische Anwendung besteht darin, dass man eine Wirkung misst und nach der wahrscheinlichsten Ursache fragt (inverses Problem).

66.9 Anwendungsbeispiele

- Ein Arzt beobachtet bei einem Patienten ein Symptom B . Es kann von n verschiedenen Krankheiten A_k , $k = 1, \dots, n$ herrühren. Um die wahrscheinlichste Ursache zu finden, muss man also $P(A_k \mid B)$ abschätzen.
- Aus einem verrauschten Bild will man das wahrscheinlichste unverrauschte Bild rekonstruieren (vgl. auch 66.7).
- In der Computertomographie schickt man Röntgenstrahlung in verschiedenen Richtungen durch den Patienten und misst die durchgedrungene Intensität. Aus diesen Auswirkungen versucht man, Rückschlüsse auf die Ursache (Gewebe, Knochen, Tumor, ...) zu ziehen.

67 Zufallsvariable, Erwartungswert, Varianz

67.1 Motivation

Oft möchte man dem Resultat eines Zufallsexperiments eine reelle Zahl zuordnen. Der Gewinn bei einem Glücksspiel ist ein Beispiel hierfür. In diesem Fall interessiert man sich auch für den zu erwartenden Gewinn und für ein Maß für die statistischen Schwankungen. Dies führt uns auf Begriffe wie Zufallsvariable, Erwartungswert und Varianz. In der Informatik werden sie u.a. bei der Zuverlässigkeitsanalyse von Systemen benötigt.

67.2 Definition: (Zufallsvariable)

Sei Ω ein Stichprobenraum. Eine Funktion X , die jedem Ergebnis $\omega \in \Omega$ eine reelle Zahl $X(\omega)$ zuordnet, heißt Zufallsvariable.

Bemerkung: Eine Zufallsvariable ist also weder zufällig noch eine Variable, sondern eine Funktion. Man kann sie stets als Gewinn bei einem Glücksspiel interpretieren.

67.3 Beispiel

Eine faire Münze mit Seiten 0 und 1 werde 3 Mal geworfen. Die Anzahl der Einsen sei der Gewinn. Man kann $\Omega = \{000, 001, \dots, 111\}$ als Stichprobenraum und den Gewinn als Zufallsvariable $X(\omega)$ auffassen.

Ergebnis ω	000	001	010	011	100	101	110	111
Gewinn $X(\omega)$	0	1	1	2	1	2	2	3
Ws. $P(\omega)$	1/8	1/8	1/8	1/8	1/8	1/8	1/8	1/8

Verschiedene Ereignisse ω_1, ω_2 können zum selben Gewinn führen.

67.4 Definition: (Verteilung)

Die Verteilung P_X einer Zufallsvariablen X ordnet jedem Wert $x \in X$ eine Wahrscheinlichkeit $P_X(x)$ zu.

67.5 Beispiel

In Beispiel 67.3 können wir dem Gewinn folgende Wahrscheinlichkeiten zuordnen:

Gewinn X	0	1	2	3
Ws. $P_X(x)$	1/8	3/8	3/8	1/8

Oft veranschaulicht man die Verteilung einer Zufallsvariablen durch ein Histogramm:

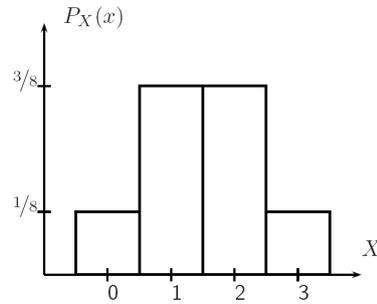


Abbildung 12:

Bemerkung: Da wir hier meistens diskrete Zufallsvariablen betrachten, sind die Verteilungen ebenfalls diskret.

Interessiert man sich für den Durchschnittsgewinn je Versuchswiederholung, gelangt man zum Begriff des Erwartungswertes:

67.6 Definition: (Erwartungswert)

Unter dem Erwartungswert $E(X)$ einer (diskreten) Zufallsvariablen X versteht man das gewichtete Mittel der Funktion X über Ω , wobei jeder Wert mit seiner Wahrscheinlichkeit gewichtet wird:

$$E(X) = \sum_{\omega \in \Omega} X(\omega)P(\omega)$$

67.7 Beispiel

Für die Zufallsvariable X aus Beispiel 67.3 erhält man als Erwartungswert

$$\begin{aligned} E(X) &= 0 \cdot \frac{1}{8} + 1 \cdot \frac{1}{8} + 1 \cdot \frac{1}{8} + 2 \cdot \frac{1}{8} + 1 \cdot \frac{1}{8} + 2 \cdot \frac{1}{8} + 2 \cdot \frac{1}{8} + 3 \cdot \frac{1}{8} \\ &= \frac{12}{8} = \frac{3}{2}. \end{aligned}$$

Bequemer hätte man den Erwartungswert mit Hilfe der Verteilung P_X berechnet (vgl. Tabelle in 67.5):

$$E(X) = 0 \cdot \frac{1}{8} + 1 \cdot \frac{3}{8} + 2 \cdot \frac{3}{8} + 3 \cdot \frac{1}{8} = \frac{3}{2}.$$

Es gilt also auch:

$$E(X) = \sum_{x \in X(\Omega)} x P_X(x)$$

Bemerkung: Bei kontinuierlichen Zufallsvariablen verwendet man Integrale statt Summen. Mit dem Erwartungswert kann man gut arbeiten, denn es gilt:

67.8 Satz: (Linearität des Erwartungswerts)

Seien X, Y Zufallsvariablen und $\alpha, \beta \in \mathbb{R}$. Dann gilt:

$$E(\alpha X + \beta Y) = \alpha E(X) + \beta E(Y).$$

Beweis:

$$\begin{aligned} E(\alpha X + \beta Y) &= \sum_{\omega \in \Omega} (\alpha X(\omega) + \beta Y(\omega)) P(\omega) \\ &= \alpha \sum_{\omega \in \Omega} X(\omega) P(\omega) + \beta \sum_{\omega \in \Omega} Y(\omega) P(\omega) \\ &= \alpha E(X) + \beta E(Y) \end{aligned}$$

□

67.9 Unabhängigkeit zweier Zufallsvariablen

Mit 67.8 wissen wir, dass gilt: $E(X + Y) = E(X) + E(Y)$.

Gilt jedoch auch $E(XY) = E(X)E(Y)$?

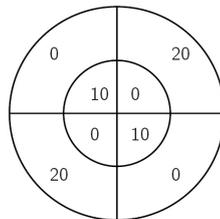
Man kann zeigen, dass dies dann gilt, wenn X und Y unabhängig sind, d.h. (vgl. 66.2):

$$P((X = a) \cap (Y = b)) = P(X = a) \cdot P(Y = b) \quad \forall a, b.$$

67.10 Beispiele

Glücksrad mit 4 Ergebnissen, auf denen die Zufallsvariable X (äußerer Ring) und Y (innerer Ring) definiert sind.

a) Beispiel:



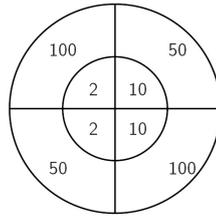
$$\left. \begin{aligned} E(X) &= \frac{1}{4} \cdot 20 + \frac{1}{4} \cdot 0 + \frac{1}{4} \cdot 20 + \frac{1}{4} \cdot 0 = 10 \\ E(Y) &= \frac{1}{4} \cdot 0 + \frac{1}{4} \cdot 10 + \frac{1}{4} \cdot 0 + \frac{1}{4} \cdot 10 = 5 \end{aligned} \right\} E(X)E(Y) = 50$$

aber: $E(XY) = \frac{1}{4} \cdot 20 \cdot 0 + \frac{1}{4} \cdot 0 \cdot 10 + \frac{1}{4} \cdot 20 \cdot 0 + \frac{1}{4} \cdot 0 \cdot 10 = 0 \neq E(X)E(Y)$.

X und Y sind nicht unabhängig:

Das Ereignis $Y = 0$ hat die Wahrscheinlichkeit $\frac{1}{2}$. Weiß man jedoch, dass $X = 20$ eingetreten ist, dann hat $Y = 0$ die Wahrscheinlichkeit 1.

b) Beispiel:



$$\begin{aligned}
 E(X) &= \frac{1}{4} \cdot 50 + \frac{1}{4} \cdot 100 + \frac{1}{4} \cdot 50 + \frac{1}{4} \cdot 100 = 75 \\
 E(Y) &= \frac{1}{4} \cdot 10 + \frac{1}{4} \cdot 10 + \frac{1}{4} \cdot 2 + \frac{1}{4} \cdot 2 = 6 \\
 E(XY) &= \frac{1}{4} \cdot 50 \cdot 10 + \frac{1}{4} \cdot 100 \cdot 10 + \frac{1}{4} \cdot 50 \cdot 2 + \frac{1}{4} \cdot 100 \cdot 2 = 450 = E(X)E(Y).
 \end{aligned}
 \left. \begin{array}{l} \\ \\ \end{array} \right\} \Rightarrow E(X)E(Y) = 450$$

X und Y sind unabhängig:

$Y = 2$ und $Y = 10$ sind gleich wahrscheinlich. Weiß man, z.B., dass $X = 50$ eingetreten ist, so sind $Y = 2$ und $Y = 10$ noch stets gleich wahrscheinlich.

Oft ist man nicht nur am Erwartungswert interessiert. Man möchte auch wissen, wie stark die Verteilung um den Erwartungswert streut. Hierzu dienen die Begriffe Varianz und Standardabweichung:

67.11 Definition: (Varianz)

Sei X eine Zufallsvariable mit Erwartungswert $\mu := E(X)$. Dann versteht man unter der Varianz $V(X) = \sigma^2$ den Erwartungswert von $(X - \mu)^2$:

$$\sigma^2 = V(X) := E((X - \mu)^2)$$

$\sigma := \sqrt{V(X)}$ nennt man die Standardabweichung (Streuung) von X .

67.12 Berechnung der Varianz

Wegen der Linearität des Erwartungswerts und wegen $E(\text{const.}) = \text{const.}$ gilt:

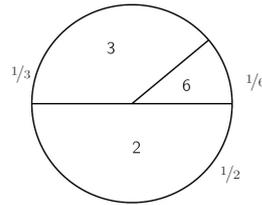
$$\begin{aligned}
 E((X - \mu)^2) &= E(X^2 - 2\mu X + \mu^2) \\
 &= E(X^2) - 2\mu \underbrace{E(X)}_{\mu} + \mu^2 \\
 &= E(X^2) - \mu^2.
 \end{aligned}$$

Wir erhalten somit eine wichtige Formel zur Berechnung der Varianz:

$$\boxed{\sigma^2 = E(x^2) - \mu^2} \quad (\text{Verschiebungssatz})$$

67.13 Beispiel

Sei X der Gewinn auf dem Glücksrad



$$\begin{aligned} \Rightarrow \mu = E(X) &= \frac{1}{2} \cdot 2 + \frac{1}{3} \cdot 3 + \frac{1}{6} \cdot 6 = 3 && \text{mittlerer Gewinn} \\ E(X^2) &= \frac{1}{2} \cdot 4 + \frac{1}{3} \cdot 9 + \frac{1}{6} \cdot 36 = 11 \\ \sigma^2 &= E(X^2) - \mu^2 = 11 - 3^2 = 2 && \text{Varianz} \\ \sigma &= \sqrt{2} && \text{Standardabweichung} \end{aligned}$$

67.14 Satz: (Eigenschaften der Varianz)

Sei X eine Zufallsvariable, und seien $\alpha, \beta \in \mathbb{R}$. Dann gilt:

i) $V(\alpha X) = \alpha^2 V(X)$

ii) $V(X + \beta) = V(X)$

Beweis:

i) $V(\alpha X) \stackrel{67.8}{=} E((\alpha X - \alpha\mu)^2) = E(\alpha^2(X - \mu)^2) \stackrel{67.8}{=} \alpha^2 V(X)$

ii) $V(X + \beta) = E((X + \beta - \mu - \beta)^2) = V(X)$

□

67.15 Standardisierte Zufallsvariable

Ist X eine Zufallsvariable mit Erwartungswert μ und Varianz σ^2 , so nennt man

$$X^* := \frac{X - \mu}{\sigma}$$

die Standardisierte von X . Es gilt:

$$E(X^*) = \frac{1}{\sigma} \underbrace{E(X)}_{\mu} - \frac{\mu}{\sigma} = \frac{\mu}{\sigma} - \frac{\mu}{\sigma} = 0$$

$$V(X^*) \stackrel{67.14}{=} \frac{1}{\sigma^2} \underbrace{V(X)}_{\sigma^2} = \frac{\sigma^2}{\sigma^2} = 1.$$

Eine solche Standardisierung ist nützlich, wenn man die Verteilung einer Zufallsvariablen mit einer tabellierten Verteilung vergleichen möchte, da letzterer oft nur in standardisierter Form vorliegt.

Wir wollen nun weitere wichtige Eigenschaften des Erwartungswerts studieren. Aus dem Verschiebungssatz 67.12 folgt wegen $\sigma^2 \geq 0$, dass

$$E(X^2) - \underbrace{(E(X))^2}_{\mu} \geq 0$$

und somit $E(X^2) \geq (E(X))^2$. Dies ist der Spezialfall eines allgemeineren Resultats:

67.16 **Satz:** (Ungleichung von Jensen)

Sei $r : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ eine konvexe (!) Funktion und X eine Zufallsvariable. Dann gilt:

$$\boxed{E(r(X)) \geq r(E(X))}$$

Beweis:

Sei X zunächst eine diskrete Zufallsvariable.

Dann fassen wir $E(X) = \sum_{\omega \in \Omega} X(\omega)P(\omega)$ als Konvexkombination der $X(\omega)$, $\omega \in \Omega$ mit

Gewichten $P(\omega)$ auf (d.h. $P(\omega) \geq 0 \forall \omega \in \Omega$ und $\sum_{\omega \in \Omega} P(\omega) = 1$). Aus der Konvexität von

r folgt mit 25.5

$$\begin{aligned} E(r(X)) &= \sum_{\omega \in \Omega} r(X(\omega))P(\omega) \\ &\geq r\left(\sum_{\omega \in \Omega} X(\omega)P(\omega)\right) = r(E(X)). \end{aligned}$$

Ist X eine kontinuierliche Zufallsvariable, ersetzt man Summen durch Integrale. □

67.17 Beispiele

a) Die Funktion $r(t) = t^2$ ist konvex, da $r''(t) = 2 > 0$. Daher gilt:

$$E(X^2) \geq (E(X))^2.$$

b) Sei $\Theta > 0$. Dann ist $r(t) = e^{\Theta t}$ konvex, und es gilt:

$$E(e^{\Theta X}) \geq e^{\Theta E(X)}.$$

Die Funktion $E(e^{\Theta X})$ wird später eine wichtige Rolle spielen.

67.18 Gleichung von Wald

Seien X_1, X_2, \dots unabhängige Zufallsvariablen. Manchmal interessiert man sich für die erste Zeit (Stoppzeit) $N = n$, in der die Summe $X_1 + \dots + X_N$ einen vorgegebenen Wert y übersteigt, d.h.

$\sum_{i=1}^{n-1} X_i < y$ und $\sum_{i=1}^n X_i \geq y$. Dann ist N selbst wieder eine Zufallsvariable. Für ihren Erwartungswert kann man zeigen:

Satz: (Gleichung von Wald)

Seien X_1, X_2, \dots unabhängige, identisch verteilte Zufallsvariablen (d.h. alle Verteilungen P_{X_i} ist identisch) mit endlichem Erwartungswert, und sei N eine Stoppzeit für X_1, X_2, \dots

Ferner sei $S_N = \sum_{i=1}^N X_i$. Dann gilt:

$$E(S_N) = E(X_1)E(N).$$

67.19 Beispiel

Sei $X_i = 1$, falls beim i -ten Münzwurf Kopf eintritt, ansonsten 0. Was ist der Erwartungswert $E(N)$ für die Stoppzeit $N := \min\{n \mid X_1 + \dots + X_n \geq 10\}$?

$$\begin{aligned} \text{Es gilt: } E(X) &= \frac{1}{2} \quad \text{und} \quad E(S_N) = 10. \\ \Rightarrow E(N) &= 20. \end{aligned}$$

Eng verwandt mit dem Begriff der Varianz ist die Kovarianz. Sie ist ein Maß für die Unabhängigkeit zweier Zufallsvariablen.

67.20 Definition: (Kovarianz, Korrelationskoeffizient)

Seien X, Y Zufallsvariablen mit Erwartungswert μ_X, μ_Y und Varianz $\sigma_X^2, \sigma_Y^2 > 0$. Dann heißt

$$\text{Cov}(X, Y) := \sigma_{XY}^2 := E((X - \mu_X)(Y - \mu_Y))$$

die Kovarianz von X und Y , und

$$\rho_{XY} := \frac{\text{Cov}(X, Y)}{\sigma_X \sigma_Y}$$

der Korrelationskoeffizient von X und Y .

Ist $\text{Cov}(X, Y) = 0$, so heißen X und Y unkorreliert.

67.21 Bemerkungen:

- a) $V(X) = \text{Cov}(X, X)$
- b) Sind $X - \mu_X$ und $Y - \mu_Y$ Funktionen auf einem endlichen Stichprobenraum $\Omega = \{\omega_1, \dots, \omega_n\}$, so kann man sie auch als Vektoren im \mathbb{R}^n mit der i -ten Komponente $X(\omega_i) - \mu_X$, bzw. $Y(\omega_i) - \mu_Y$ ansehen. Dann bezeichnen (vgl. §40, §42)
- die Standardabweichungen die induzierten euklidischen Normen
 - die Varianzen die quadrierten euklidischen Normen
 - die Kovarianz das euklidische Skalarprodukt
 - der Korrelationskoeffizient den Arcuscossinus des Winkels zwischen beiden Vektoren.
Insbesondere ist $-1 \leq \rho_{XY} \leq 1$.
 - die Unkorreliertheit die Orthogonalität

wenn wir das gewichtete euklidische Skalarprodukt $\langle u, v \rangle := \sum_{i=1}^n p_i u_i v_i$ zu Grunde legen. Dabei ist $p_i := P(\omega_i)$.

Man kann Folgendes zeigen:

67.22 Satz: (Rechenregeln für die Korrelation)

Seien X, Y Zufallsvariablen mit Erwartungswert μ_X, μ_Y . Dann gilt:

- a) $\text{Cov}(X, Y) = E(X \cdot Y) - \mu_X \mu_Y$ (vgl. 67.12).
- b) $\text{Cov}(\alpha X + \beta, \gamma Y + \delta) = \alpha \gamma \text{Cov}(X, Y)$ (vgl. 67.14).
- c) $\text{Cov}(X, Y) = \text{Cov}(Y, X)$
- d) Für m Zufallsvariablen X_1, \dots, X_m gilt:

$$V(X_1 + \dots + X_m) = \sum_{i=1}^m V(X_i) + \sum_{i \neq j} \text{Cov}(X_i, X_j).$$

- e) Sind X, Y unabhängig, so sind sie auch unkorreliert.
- f) Für paarweise unkorrelierte X_1, \dots, X_n gilt:

$$V(X_1 + \dots + X_n) = \sum_{i=1}^m V(X_i).$$

67.23 Bemerkungen

a) Die Umkehrung von 67.22.(e) gilt nicht! Beispiel:

Ergebnis ω	1	2	3	4
Zufallsvar. X	1	-1	2	-2
Zufallsvar. Y	-1	1	2	-2
Wahrscheinlichkeit $P(\omega)$	$\frac{2}{5}$	$\frac{2}{5}$	$\frac{1}{10}$	$\frac{1}{10}$

Dann ist $E(X) = 0 = E(Y)$ und

$$\text{Cov}(X, Y) = -1 \cdot \frac{2}{5} - 1 \cdot \frac{2}{5} + 4 \cdot \frac{1}{10} + 4 \cdot \frac{1}{10} = 0, \text{ aber}$$

X und Y sind nicht unabhängig, denn $X(\omega)$ bestimmt ω und $Y(\omega)$ eindeutig.

b) In der Informatik tauchen Erwartungswerte und Varianzen z.B. bei der Zuverlässigkeitsanalyse von Systemen auf oder bei der Abschätzung von Wartezeiten bei Internetanfragen. Kovarianzen sind u.A. wichtig im Bereich des maschinellen Lernens.

67.24 Zuverlässigkeitsanalyse von Systemen

Ein System bestehe aus n Komponenten. Der Zustand der k -ten Komponente wird durch die Zufallsvariable (Indikator)

$$I_k := \begin{cases} 1 & (k\text{-te Komponente funktioniert}) \\ 0 & (k\text{-te Komponente funktioniert nicht}) \end{cases}$$

beschrieben. Ihr Erwartungswert beschreibt die Zuverlässigkeit der Komponente k . Wir setzen:

$$p_k := E(I_k), \quad q_k := 1 - p_k \quad (\text{Ausfallwahrscheinlichkeit})$$

Interessiert man sich für die Zuverlässigkeit p des Gesamtsystems, muss man verschiedene Fälle unterscheiden:

a) Reihensysteme

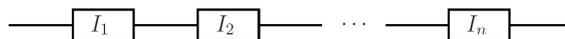


Abbildung 13:

Ein Reihensystem arbeitet, wenn alle Komponenten arbeiten: $p = p_1 \cdot \dots \cdot p_n$.

b) Parallelsysteme

Ein Parallelsystem fällt aus, wenn alle Komponenten ausfallen:

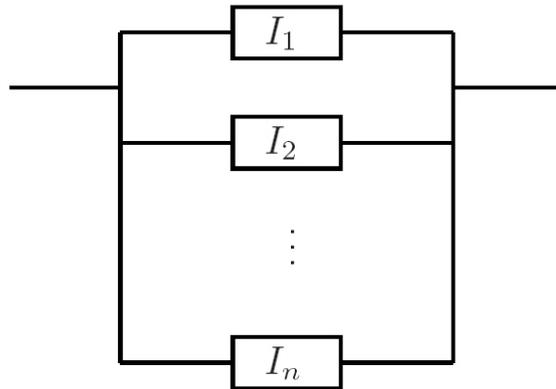


Abbildung 14:

$$q = q_1 \cdot \dots \cdot q_n$$
$$\Rightarrow p = 1 - q = 1 - (1 - p_1) \cdot \dots \cdot (1 - p_n).$$

a) Gemischte Systeme

werden hierarchisch in Reihensysteme und Parallelsystem zerlegt:

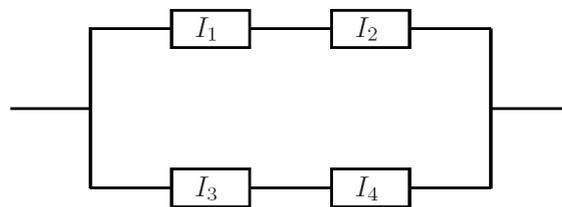


Abbildung 15:

oberes Reihensystem: $p_1 \cdot p_2$

unteres Reihensystem: $p_3 \cdot p_4$

äußeres Parallelsystem: $p = 1 - (1 - p_1 p_2)(1 - p_3 p_4)$.

68 Abschätzungen für Abweichungen vom Erwartungswert

68.1 Motivation

Mit der Varianz bzw. Standardabweichungen kennen wir bereits ein Maß für die Fluktuation einer Zufallsvariablen um ihren Erwartungswert.

Gibt es weitere nützliche Maßzahlen hierfür?

Ist es möglich, Abschätzungen zu finden, die wahrscheinlichkeitstheoretische Aussagen darüber liefern, wie häufig eine Zufallsvariable außerhalb eines Intervalls um den Erwartungswert liegt?

68.2 Definition: (k -tes (zentrales) Moment)

Sei X eine Zufallsvariable mit Erwartungswert $\mu = E(X)$. Dann bezeichnen wir mit $E(X^k)$, $k \in \mathbb{N}$ das k -te Moment von X .

Ferner definiert $E((X - \mu)^k)$ das k -te zentrale Moment von X .

68.3 Bemerkungen

- Der Erwartungswert $\mu = E(X)$ ist das erste Moment.
- Die Varianz $\sigma^2 = E((X - \mu)^2)$ ist das zweite zentrale Moment.
- Mit den 3. und 4. zentralen Momenten lassen sich Aussagen über die Schiefe bzw. Flachheit der Verteilung einer Zufallsvariablen gewinnen.
- Höhere Momente sind anschaulich schwieriger zu interpretieren, liefern jedoch ebenfalls wichtige Aussagen.
- Momente haben eine große Bedeutung in der Mustererkennung bei der Analyse von Texturen und der Erkennung von Objekten unter Rotationen und Skalierungen.

Ähnlich wie wir die Menge aller k -Permutationen und k -Kombinationen einer n -elementigen Menge durch den Begriff der erzeugenden Funktion kompakt beschreiben konnten, gibt es eine Funktion, die sämtliche Momente einer Zufallsvariablen beinhaltet:

68.4 Definition: (Momenten erzeugende Funktion)

Sei X eine Zufallsvariable. Falls $M_X(\Theta) := E(e^{\Theta X})$ existiert, nennen wir $M_X(\Theta)$ die Momenten erzeugende Funktion von X .

68.5 Satz: (Eigenschaften Momenten erzeugender Funktionen)

Die Momenten erzeugende Funktion $M_X(\Theta) = E(e^{\Theta X})$ einer Zufallsvariablen X hat folgende Eigenschaften:

- Die n -te Ableitung in $\Theta = 0$ liefert das n -te Moment:

$$M_X^{(n)}(0) = E(X^n).$$

b) *Skalierungsverhalten:*

Sei $Y = aX + b$. Dann ist $M_Y(\Theta) = e^{b\Theta} M_X(a\Theta)$.

c) $M_{X+Y}(\Theta) = M_X(\Theta)M_Y(\Theta)$, falls X und Y unabhängige Zufallsvariablen sind.

Beweis: Wir zeigen nur (a):

Mit der Potenzreihenentwicklung von \exp und der Linearität des Erwartungswerts gilt:

$$\begin{aligned} M_X(\Theta) &= E(e^{\Theta X}) \\ &= E\left(\sum_{k=0}^{\infty} \frac{\Theta^k x^k}{k!}\right) \\ &= \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\Theta^k}{k!} E(X^k) \end{aligned}$$

Gliedweise Differentiation liefert:

$$\begin{aligned} M'_X(\Theta) &= \sum_{k=1}^{\infty} \frac{\Theta^{k-1}}{(k-1)!} E(X^k) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\Theta^k}{k!} E(X^{k+1}) \\ &\vdots \\ M_X^{(n)}(\Theta) &= \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\Theta^k}{k!} E(X^{k+n}) \end{aligned}$$

und somit

$$M_X^{(n)}(0) = E(X^n).$$

□

Wir kommen nun zu den Abschätzungen für Fluktuationen jenseits eines vorgegebenen Abstands um den Erwartungswert einer Zufallsvariablen. Grundlegend ist der folgende Satz:

68.6 Satz: (Markow'sche Ungleichung)

Sei X eine Zufallsvariable und $h : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ eine nichtnegative und nichtfallende Funktion mit $h(t) > 0$. Dann gilt:

$$\boxed{P(X \geq t) \leq \frac{E(h(X))}{h(t)}}$$

Beweis (für eine diskrete Zufallsvariable):
 Nach 67.7 gilt:

$$E(h(X)) = \sum_{z \in X(\Omega)} h(z)P_X(z)$$

und wegen

$$\sum_{z \in X(\Omega)} \underbrace{h(z)}_{>0} \underbrace{P_X(z)}_{\geq 0} \geq \sum_{\substack{z \in X(\Omega) \\ z \geq t}} h(z)P_X(z) \stackrel{\text{Nicht-fallend}}{\geq} h(t) \underbrace{\sum_{\substack{z \in X(\Omega) \\ z \geq t}} P_X(z)}_{P(X \geq t)}$$

folgt

$$P(X \geq t) \leq \frac{1}{h(t)} E(h(X)).$$

□

68.7 Folgerungen

- a) Setzt man $h(x) = x^+ := \max(0, x) = \begin{cases} x & (x > 0) \\ 0 & (\text{sonst}) \end{cases}$, folgt die einfache Markow-Ungleichung

$$\boxed{P(X \geq t) \leq \frac{E(X^+)}{t}} \quad (t > 0)$$

(X^+ ist der positive Teil von X .)

- b) Mit $Y := (X - E(X))^2$ und $h(x) = x$ für $x > 0$ kann man die Tschebyschew-Ungleichung für den Erwartungswert μ und die Standardabweichung σ von X beweisen:

$$\boxed{P(|X - \mu| \geq t) \leq \frac{\sigma^2}{t^2}}$$

Alternativschreibweise:

$$P(|X - \mu| \geq c \cdot \sigma) \leq \frac{1}{c^2}$$

- c) Mit $h(x) = e^{\Theta x}$ für $\Theta \geq 0$ ergibt sich:

$$P(X \geq t) \leq e^{-\Theta t} M_X(\Theta).$$

Dies führt zur Chernoff-Schranke

$$P(X \geq t) \leq \inf_{\Theta \geq 0} e^{-\Theta t} M_X(\Theta)$$

Bemerkung: Für die einfache Markow-Ungleichung benötigt man das erste Moment (Erwartungswert μ), für die Tschebyschew-Ungleichung die ersten beiden Momente μ, σ^2 , und für die Chernoff-Ungleichung alle Momente (Momenten erzeugende Funktion). Je mehr Momente man kennt, desto mehr weiß man über die Verteilung von X und desto schärfere Abschätzungen kann man erwarten.

68.8 Beispiel

Eine faire Münze werde n Mal geworfen. Tritt beim k -ten Wurf Kopf auf, setzt man $Y_k := 1$, sonst $Y_k := 0$. Wir interessieren uns für die „Kopfhäufigkeit“ nach n Würfen:

$$X_n := Y_1 + \dots + Y_n$$

Y_1, \dots, Y_n sind unabhängige Zufallsvariablen. Für X_n gilt:

$$\mu = E(X_n) = \frac{n}{2}$$

$$\sigma^2 = E((X_n - \mu)^2) = \sum_{k=1}^n \left[\left(0 - \frac{1}{2}\right)^2 \cdot \frac{1}{2} + \left(1 - \frac{1}{2}\right)^2 \cdot \frac{1}{2} \right] = \frac{n}{4}$$

und wegen

$$M_{Y_k}(\Theta) = E(e^{\Theta Y_k}) = e^{\Theta \cdot 0} \cdot \frac{1}{2} + e^{\Theta \cdot 1} \cdot \frac{1}{2} = \frac{1 + e^{\Theta}}{2}$$

folgt mit 68.5 c):

$$M_{X_n}(\Theta) = M_{Y_1 + \dots + Y_n} = \left(\frac{1 + e^{\Theta}}{2} \right)^n$$

Sei $\alpha = 0.8$. Wie groß ist die Wahrscheinlichkeit, nach $n = 100$ Würfungen $X_n \geq \alpha \cdot n = 80$ zu erhalten?

Wir vergleichen die 3 Ungleichungen aus 68.7:

- Einfache Markow-Ungleichung

Mit $\mu = 50$ und $t = 80$ ergibt sich

$$P(X_{100} \geq 80) \leq \frac{\mu}{t} = \frac{50}{80} = 0,625.$$

- Tschebyschew-Ungleichung

Mit $\mu = 50, t = 30$ und $\sigma^2 = 25$ ergibt sich

$$\begin{aligned} P(X_{100} \geq 80) &\leq P(|X_{100} - 50| \geq 30) \\ &\leq \frac{25}{30^2} \approx 0,028. \end{aligned}$$

Obwohl Tschebyschew Abweichungen nach beiden Seiten berücksichtigt, ist die Abschätzung schärfer als bei der einfachen Markow-Ungleichung.

- Chernoff-Schranke

$$P(X_{100} \geq 80) \leq \inf_{\Theta \geq 0} \underbrace{e^{-80 \cdot \Theta} \left(\frac{1 + e^{\Theta}}{2} \right)^{100}}_{=: f(\Theta)}$$

Durch Ableiten zeigt man, dass $f(\Theta)$ minimiert wird für $\Theta = \ln 4$. Damit folgt

$$\begin{aligned} P(X_{100} \geq 80) &\leq 4^{-80} \cdot \left(\frac{1 + 4}{2} \right)^{100} \\ &\approx 4,26 \cdot 10^{-9}. \end{aligned}$$

Erwartungsgemäß ist dies eine wesentlich schärfere Schranke als (a) und (b).

68.9 Schwaches Gesetz der großen Zahlen

Mit Hilfe der Tschebyschew-Ungleichung kann man das schwache Gesetz der großen Zahlen beweisen:

Es werde ein Versuch n Mal wiederholt, bei dem das Ereignis A mit Wahrscheinlichkeit p eintritt. Dann strebt die Wahrscheinlichkeit, dass sich die relative Häufigkeit $h_n(A)$ um weniger als ε von p unterscheidet, gegen 1 für $n \rightarrow \infty$:

$$\lim_{n \rightarrow \infty} P(|h_n(A) - p| < \varepsilon) = 1.$$

Dabei ist ε eine beliebig kleine positive Zahl.

69 Wichtige diskrete Verteilungen

69.1 Motivation

Einige diskrete Verteilungen treten sehr häufig auf und tragen einen eigenen Namen. Wir wollen vier dieser Verteilungen genauer betrachten: Gleichverteilung, Binomialverteilung, Poisson-Verteilung und geometrische Verteilung.

69.2 Die Gleichverteilung

Sei $\Omega = \{\omega_1, \dots, \omega_n\}$ ein Stichprobenraum mit $P(\omega_k) = \frac{1}{n} \forall k$ (Laplace-Experiment). Ferner sei U_n eine Zufallsvariable mit $U_n(\omega_k) = k$. Dann ist $P_{U_n}(k) = \frac{1}{n}$ für $k = 1, \dots, n$. Eine solche Verteilung heißt (diskrete) Gleichverteilung auf der Menge $\{1, \dots, n\}$.

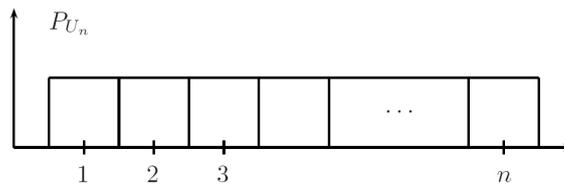


Abbildung 16:

Es gilt:

$$\mu = E(U_n) = \sum_{k=1}^n k P_{U_n}(k) = \sum_{k=1}^n k \cdot \frac{1}{n} = \frac{1}{n} \sum_{k=1}^n k \quad \text{arithm. Mittel}$$

$$\sigma^2 = V(U_n) = \sum_{k=1}^n k^2 P_{U_n}(k) - \mu^2 = \frac{1}{n} \sum_{k=1}^n k^2 - \frac{1}{n^2} \left(\sum_{k=1}^n k \right)^2.$$

69.3 Beispiel

Beim Würfeln liegt eine diskrete Gleichverteilung auf der Menge $\{1, \dots, 6\}$ vor mit:

$$\mu = \frac{1}{6} \sum_{k=1}^6 k = \frac{21}{6} = 3,5$$

$$\sigma^2 = \frac{1}{6} (1^2 + 2^2 + \dots + 6^2) - 3,5^2 \approx 2,917 \quad \Rightarrow \sigma \approx 1,708.$$

69.4 Die Binomialverteilung

Wir betrachten ein Experiment, das aus einer n -fachen Wiederholung eines Einzelexperiments besteht, bei dem ein Ereignis A jeweils mit Wahrscheinlichkeit p auftritt. Ein solches Experiment heißt Bernoulli-Experiment.

Wir setzen $X_i(\omega) = \begin{cases} 1 & \text{falls } A \text{ beim } i\text{-ten Versuch eintritt} \\ 0 & \text{sonst.} \end{cases}$

A_k bezeichnet das Ereignis, dass im Gesamtexperiment gilt:

$$X(\omega) := \sum_{i=1}^n X_i(\omega) = k$$

Nach 64.4.(c) (ungeordnete Stichprobe ohne Wiederholung) hat A_k insgesamt $\binom{n}{k}$ Elemente. Jedes solche Element tritt mit Wahrscheinlichkeit $p^k(1-p)^{n-k}$ auf. Die entsprechende Verteilung von X , bestimmt durch

$$b_{n,p}(k) := \binom{n}{k} p^k (1-p)^{n-k},$$

heißt Binomialverteilung mit den Paramtern n und p .

Für den Erwartungswert von X_i gilt:

$$E(X_i) = 1 \cdot p + 0 \cdot (1-p) = p \quad \Rightarrow \quad E(X) = \sum_{i=1}^n E(X_i) = np.$$

Da die Einzelereignisse unabhängig sind, gilt:

$$V(X) = \sum_{i=1}^n V(X_i)$$

Mit $V(X_i) = E(X_i^2) - (E(X_i))^2 = 1^2 \cdot p + 0^2 \cdot (1-p) - p^2 = p(1-p)$ folgt $V(X) = np(1-p)$.

69.5 Beispiel: Zufallsabhängigkeit sportlicher Resultate

Andreas und Bernd tragen ein Tischtennisturnier mit $n = 1, 3, 5, \dots, 2m + 1$ Spielen aus. Wer die meisten Einzelspiele gewinnt, ist Sieger. Andreas gewinnt ein Einzelspiel mit Wahrscheinlichkeit $p = 0,6$. Wie groß sind die Siegeschancen für den schlechteren Spieler Bernd? Die Zufallsvariable S_n registriert die Anzahl der Siege von Andreas in $n = 2m + 1$ Spielen. Bernd scheidet, wenn Andreas $S_n \leq m$ Erfolge erzielt. Die Wahrscheinlichkeit hierfür beträgt:

$$\begin{aligned} P(S_n \leq m) &= b_{n,p}(0) + b_{n,p}(1) + \dots + b_{n,p}(m) \\ &= \sum_{k=0}^m \binom{n}{k} p^k (1-p)^{n-k} \end{aligned}$$

$$n = 1: \quad P(S_1 \leq 0) = \binom{1}{0} 0,6^0 \cdot 0,4^1 = 1 \cdot 0,4 = 0,4$$

$$n = 3: \quad P(S_3 \leq 1) = \binom{3}{0} 0,6^0 \cdot 0,4^3 + \binom{3}{1} 0,6^1 \cdot 0,4^2 \approx 0,352$$

$$n = 5: \quad P(S_5 \leq 2) = \binom{5}{0} 0,6^0 \cdot 0,4^5 + \binom{5}{1} 0,6^1 \cdot 0,4^4 + \binom{5}{2} 0,6^2 \cdot 0,4^3 \approx 0,317$$

$$n = 7: \quad P(S_7 \leq 3) = \dots \approx 0,290$$

$$n = 9: \quad P(S_9 \leq 4) = \dots \approx 0,267$$

Es ist also gar nicht so unwahrscheinlich, dass der schlechtere Spieler das Turnier gewinnt.

69.6 Die Poissonverteilung

Für große n wird das Arbeiten mit der Binomialverteilung unhandlich. Ist p klein ($0 \leq p \leq 1$), gibt es eine gute Approximation, die Poisson-Verteilung zum Parameter λ :

$$p(k) := \frac{\lambda^k}{k!} e^{-\lambda}, \quad \lambda > 0, \quad k = 0, 1, 2, \dots$$

Man kann zeigen, dass $p(k)$ für $\lambda = np$ die Binomialverteilung $b_{n,p}(k)$ approximiert. Eine Poisson-verteilte Zufallsvariable kann die Werte $k = 0, 1, 2, 3, \dots$ mit den Wahrscheinlichkeiten $p(k)$ annehmen. Diese Zufallsvariable hat dann den Erwartungswert λ und die Varianz λ . Durch Umbenennung von „Erfolg“ und „Fehlschlag“ ist die Poissonverteilung auch für $0,9 \leq p \leq 1$ eine gute Approximation an die Binomialverteilung. Generell beschreibt die Poisson-Verteilung Ereignisse, die im zeitlichen Verlauf zufällig und unabhängig von einander auftreten, z.B.:

- atomarer Zerfall
- das Eintreffen von Bedienwünschen an einem Server
- Anrufe in einem Call-Center
- das Auftreten von Softwarefehlern in einem Programmsystem.

69.7 Reales Beispiel: Der große Jubiläumstag

Genau in einem Jahr feiert ein großer Betrieb seinen 100. Geburtstag. Die Direktion beschließt, allen Kindern von Betriebsangehörigen, die an diesem Tag geboren werden, ein Sparkonto von 3000 € anzulegen. Da rund 730 Kinder pro Jahr geboren werden, erwartet man Auslagen von 6000 €. Um Zufallsschwankungen vorzubeugen, plant man 15.000 € ein. Wie groß ist die Wahrscheinlichkeit, dass das Geld nicht reicht?

$n = 730$ Kinder/Jahr

$p = \frac{1}{365}$ Wahrscheinlichkeit, dass Geburtstag auf Jubiläumstag fällt

$\Rightarrow \lambda = p \cdot n = 2.$

Das Geld reicht nicht, falls $k \geq 6$ Kinder geboren werden.

$$\begin{aligned} p(k \geq 6) &= 1 - p(k \leq 5) = 1 - p(0) - p(1) - \dots - p(5) \\ &= 1 - \frac{2^0}{0!} e^{-2} - \frac{2^1}{1!} e^{-2} - \dots - \frac{2^5}{5!} e^{-2} \\ &\approx 0,0168 \end{aligned}$$

Die Wahrscheinlichkeit einer unangenehmen Zufallsüberraschung ist also gering. Man rechnet nicht damit.

Anmerkung: Am Jubiläumstag wurden 36 Kinder geboren! Die Direktion hat es also verstanden, ihre Angestellten auch für außerbetriebliche Aktivitäten zu begeistern.

69.8 Die geometrische Verteilung

Eine diskrete Zufallsvariable X , die in einem Bernoulli-Experiment angibt, bei welchem Versuch ein Ereignis A mit Wahrscheinlichkeit $p(A) = p$ zum ersten Mal eintritt, heißt geometrisch verteilt mit Parameter p . Die entsprechende Verteilung lautet:

$$P_X(k) = p(1 - p)^{k-1}$$

Mann kann zeigen:

$$E(X) = \frac{1}{p}$$
$$V(X) = \frac{1-p}{p^2}.$$

Sie spielt in der Informatik eine große Rolle bei der Modellierung von Wartezeiten.

69.9 Beispiel

Wie lange muss man beim Würfeln im Mittel warten, bis die Augenzahl 4 erstmalig auftritt?

Mit $p = \frac{1}{6}$ beträgt der Erwartungswert

$$E(X) = \frac{1}{p} = 6$$

und die Varianz

$$V(X) = \frac{1-p}{p^2} = \frac{5/6}{1/36} = 30.$$

70 Wichtige kontinuierliche Verteilungen

70.1 Motivation

Zufallsvariablen sind nicht immer diskret, sie können oft auch jede beliebige reelle Zahl in einem Intervall $[c, d]$ einnehmen. Beispiele für solche „kontinuierlichen“ Zufallsvariablen sind Größe, Gewicht oder Zeit.

In diesen Fällen macht es wenig Sinn, die Wahrscheinlichkeit anzugeben, dass die Zufallsvariable einen bestimmten Wert annimmt (diese Wahrscheinlichkeit ist 0). Wir müssen Wahrscheinlichkeiten für Intervalle betrachten. Hierzu sind Begriffe wie Dichten notwendig.

70.2 Definition: (Dichte)

Sei X eine kontinuierliche Zufallsvariable. Existiert eine Funktion $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ mit

$$a) \quad f(x) \geq 0 \quad \forall x \in \mathbb{R}$$

$$b) \quad \int_{-\infty}^{\infty} f(x) \, dx = 1$$

und

$$P(a \leq X \leq b) = \int_a^b f(x) \, dx,$$

so nennt man f die Dichte von X .

Erwartungswert und Varianz von X sind definiert durch

$$\mu = E(X) = \int_{-\infty}^{\infty} x \cdot f(x) \, dx,$$

$$\sigma^2 = V(X) = \int_{-\infty}^{\infty} (x - \mu)^2 f(x) \, dx.$$

70.3 Veranschaulichung

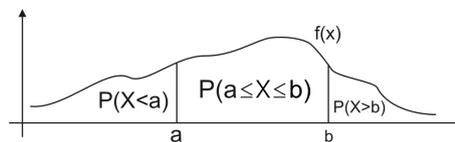


Abbildung 17:

70.4 Definition: (Verteilungsfunktion)

Sei X eine kontinuierliche Zufallsvariable mit Dichte f . Dann nennt man ihre Stammfunktion

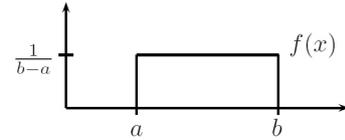
$$F(x) = P(X \leq x) = \int_{-\infty}^x f(u) \, du$$

die Verteilungsfunktion von X .

70.5 Beispiel: Kontinuierliche Gleichverteilung

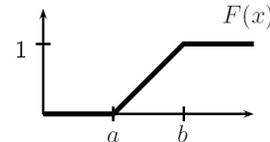
Eine kontinuierliche Zufallsvariable, die auf $[a, b]$ gleich verteilt ist, hat die Dichte

$$f(x) = \begin{cases} \frac{1}{b-a} & (a \leq x \leq b) \\ 0 & (\text{sonst}) \end{cases}$$



und die Verteilungsfunktion

$$F(x) = \begin{cases} 0 & (x < a) \\ \frac{x-a}{b-a} & (a \leq x \leq b) \\ 1 & (x > b) \end{cases}$$



Wir kommen nun zur wichtigsten kontinuierlichen Verteilung:

70.6 Die Standardnormalverteilung

Ist X eine kontinuierliche Zufallsvariable mit der Dichte

$$\varphi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{x^2}{2}}$$

so kann man $P(a < X \leq b)$ mit der Stammfunktion

$$F(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^x e^{-\frac{u^2}{2}} du$$

berechnen:

$$P(a < X \leq b) = \Phi(b) - \Phi(a).$$

φ nennt man normale Dichte, und Φ ist die Standardnormalverteilung ($N(0, 1)$ -Verteilung).

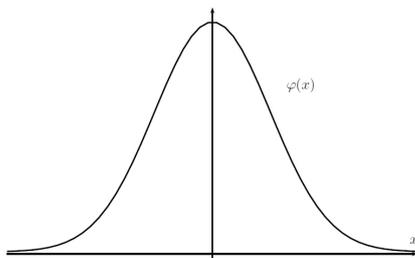


Abbildung 18: normale Dichte

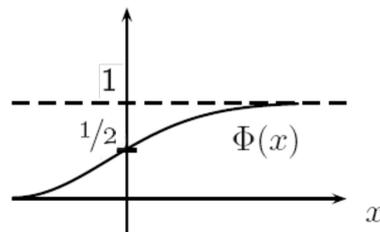


Abbildung 19: Standardnormalverteilung

$\Phi(x)$ ist nicht analytisch auswertbar, liegt aber tabelliert vor. Eine standardnormalverteilte Zufallsvariable hat Erwartungswert 0 und Varianz 1. Daher heißt sie $N(0, 1)$ -verteilt.

70.7 Die allgemeine Normalverteilung

Eine kontinuierliche Zufallsvariable X genügt einer allgemeinen Normalverteilung ($N(\mu, \sigma^2)$ -Verteilung, Gauß-Verteilung) mit Erwartungswert μ und Varianz σ^2 , wenn ihre Dichte gegeben ist durch

$$\varphi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi} \sigma} e^{-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}}$$

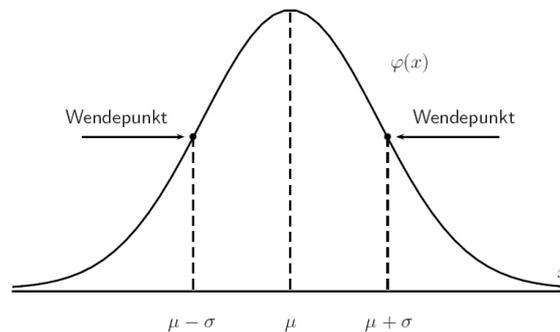


Abbildung 20:

Es gilt:

$$\begin{aligned} P(\mu - \sigma \leq X \leq \mu + \sigma) &\approx 68\% \\ P(\mu - 2\sigma \leq X \leq \mu + 2\sigma) &\approx 95,5\% \\ P(\mu - 3\sigma \leq X \leq \mu + 3\sigma) &\approx 99,7\% \end{aligned}$$

Ist X $N(\mu, \sigma^2)$ -verteilt, so ist $Z := \frac{X - \mu}{\sigma}$ $N(0, 1)$ -verteilt. Somit ist die Tabelle der Standardnormalverteilung ausreichend.

70.8 Beispiel

Das mittlere Gewicht der 5000 männlichen Studenten einer Uni beträgt 70 kg bei einer Standardabweichung von 60 kg. Angenommen das Gewicht X ist eine normalverteilte Zufallsvariable,

- wieviele Studenten wiegen zwischen 80 kg und 96 kg,
- wieviele Studenten wiegen genau 80 kg ?

Zu a):

$$\begin{aligned} P(80 \leq X \leq 96) &= P\left(\frac{80 - 70}{60} \leq \frac{X - 70}{60} \leq \frac{96 - 70}{60}\right) = P\left(\frac{1}{6} \leq \frac{X - 70}{60} \leq \frac{13}{30}\right) \\ &= \Phi(0,43333) - \Phi(0,16667) = 0,6676 - 0,5662 = 0,1014. \end{aligned}$$

Unter den gemachten Annahmen beträgt damit die gesuchte Anzahl an Studenten $5000 \cdot 0,1014 = 507$.

Zu b): Man hat

$$P(X = 80) = P(80 \leq X \leq 80) = P\left(\frac{1}{6} \leq \frac{X - 70}{60} \leq \frac{1}{6}\right)$$

$$= \Phi(0,16667) - \Phi(0,16667) = 0.$$

Unter der Annahme der Normalverteilung des Gewichts gibt es keinen Studenten der genau 80 kg wiegt!

Diskrete Verteilungen haben keine Dichte im oben genannten Sinne. Als Modellannahmen unentscheiden sich diskrete und kontinuierliche Verteilungen prinzipiell.

70.9 Approximation der Binomialverteilung durch die Gaußverteilung

Eine Binomialverteilung mit n Einzelexperimenten mit Wahrscheinlichkeit p kann man durch eine allgemeine Normalverteilung mit Erwartungswert np und Standardabweichung $\sigma = \sqrt{np(1-p)}$ approximieren. Mit Blick auf eine Histogrammdarstellung der Binomialverteilung gilt:

$$b_{n,p}(k) = \binom{n}{k} p^k (1-p)^{n-k} \approx \underbrace{\Phi\left(\frac{k + \frac{1}{2} - np}{\sqrt{np(1-p)}}\right) - \Phi\left(\frac{k - \frac{1}{2} - np}{\sqrt{np(1-p)}}\right)}_{\text{Fläche über dem Intervall } [k - \frac{1}{2}, k + \frac{1}{2}]}$$

Diese Approximation ist gut für $np > 5$ und $n(1-p) > 5$, d.h. insbesondere für große n oder $p \approx 0,5$.

70.10 Beispiel

Wie groß ist die Wahrscheinlichkeit, dass in 6000 Würfeln eines fairen Würfels die Sechs mindestens 1100 Mal auftritt?

$$n = 6000, p = \frac{1}{6}$$

Wegen $np = 1000 > 5$ und $n(1-p) = 5000 > 5$ ist die Approximation durch die Gaußverteilung sinnvoll:

$$\begin{aligned} \mu &= n \cdot p = 1000 \\ \sigma &= \sqrt{np(1-p)} = \sqrt{6000 \cdot \frac{1}{6} \cdot \frac{5}{6}} \approx 28,87 \\ 1100 - \frac{1}{2} &= \underbrace{1000}_{\mu} + 3,45 \cdot \underbrace{28,87}_{\sigma} \end{aligned}$$

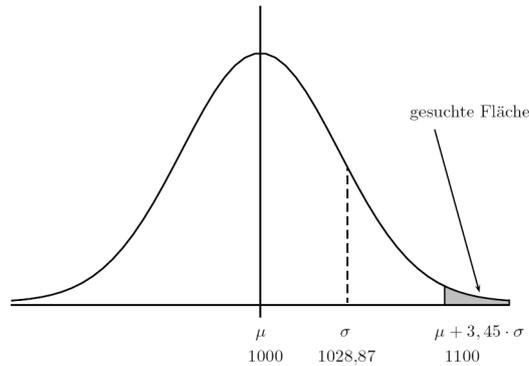


Abbildung 21:

Die Wahrscheinlichkeit, mindestens 1100 Sechsen zu würfeln, beträgt

$$1 - \underbrace{\Phi(3,45)}_{\substack{\text{in Tabelle} \\ \text{nachschlagen}}} \approx 0,00028.$$

Der wichtigste Grund für die Bedeutung der Gaußverteilung ist der folgende Satz:

70.11 Satz: (Zentraler Grenzwertsatz)

Seien X_1, X_2, \dots unabhängige Zufallsvariablen, die alle die gleiche Verteilung und somit auch den selben Erwartungswert μ und die selbe Varianz σ^2 besitzen. Ferner sei $Y_n := X_1 + \dots + X_n$ und

$$Z_n := \frac{Y_n - n\mu}{\sigma\sqrt{n}}$$

bezeichne die Standardisierte von Y_n (vgl. 67.15). Dann konvergiert die Verteilungsfunktion $F_n(x)$ von Z_n für $n \rightarrow \infty$ gegen die Standardnormalverteilung $\Phi(x)$.

70.12 Bemerkungen

- Der Beweis von Satz 70.11 ist aufwändig. Siehe z.B. R. Nelson: Probability, Stochastic Processes and Queueing Theory, Springer, New York, 1995, Abschnitt 5.5.6.
- Beachte, dass die einzelnen Zufallsvariablen nicht normalverteilt sein müssen. Ihre Verteilung kann beliebig sein!
- Die Normalverteilung ist also eine sinnvolle Approximation in allen Fällen, in denen sich eine Zufallsvariable aus vielen gleichartigen Einzeleinflüssen zusammensetzt. Beispiel: Eine Messung wird oft wiederholt. Dann approximieren die Ergebnisse eine Gaußverteilung.

71 Multivariate Verteilungen und Summen von Zufallsvariablen

71.1 Motivation

Manchmal möchte man das Zusammenwirken mehrerer Zufallsvariablen X_1, \dots, X_n studieren. Gibt es in diesem „multivariaten“ Fall Aussagen über die gemeinsame Verteilung? Lassen sich Aussagen über die Verteilung der Summe von Zufallsvariablen treffen?

71.2 Wichtige Definitionen

Mehrere Zufallsvariablen X_1, \dots, X_n fasst man zu einem Vektor $X = (X_1, \dots, X_n)^\top$ zusammen. Im kontinuierlichen Fall ist die resultierende Dichte eine Funktion mehrerer Variabler. Für diese gemeinsame Dichte gilt:

$$\begin{aligned} f(x_1, \dots, x_n) &\geq 0 \quad \forall x_1, \dots, x_n \in \mathbb{R} \\ \int_{\mathbb{R}^n} f(x_1, \dots, x_n) dx_1 \dots dx_n &= 1 \\ P(a_1 \leq X_1 \leq b_1, \dots, a_n \leq X_n \leq b_n) &= \int_{a_n}^{b_n} \dots \int_{a_1}^{b_1} f(x_1, \dots, x_n) dx_1 \dots dx_n. \end{aligned}$$

Ferner betrachtet man die multivariate Verteilungsfunktion

$$F(x_1, \dots, x_n) = \int_{-\infty}^{x_n} \dots \int_{-\infty}^{x_1} f(x_1, \dots, x_n) dx_1 \dots dx_n.$$

Statt eines einzelnen Erwartungswerts hat man einen Erwartungswertvektor

$$\mu = (E(X_1), \dots, E(X_n))^\top.$$

Varianzen und Kovarianzen fasst man zu einer symmetrischen und positiv definiten Kovarianzmatrix zusammen

$$\Sigma = \begin{pmatrix} V(X_1) & \text{Cov}(X_1, X_2) & \dots & \text{Cov}(X_1, X_n) \\ \text{Cov}(X_2, X_1) & V(X_2) & & \text{Cov}(X_2, X_n) \\ \vdots & & \ddots & \\ \text{Cov}(X_n, X_1) & & & V(X_n) \end{pmatrix}$$

Die wichtigste multivariate Verteilung ist die multivariate Normalverteilung ($N_n(\mu, \Sigma)$ -Verteilung): Sei $X = (X_1, \dots, X_n)^\top$ ein Vektor von normalverteilten Zufallsvariablen mit Erwartungswert $\mu = (E(X_1), \dots, E(X_n))^\top$ und Kovarianzmatrix Σ , dann besitzt die multivariate Normalverteilung die Dichte

$$f(x) = \frac{1}{(2\pi)^{n/2} \sqrt{\det \Sigma}} e^{-\frac{1}{2}(x-\mu)^\top \Sigma^{-1}(x-\mu)} \quad (x \in \mathbb{R}^n).$$

71.3 Beispiel

Eine Apfelbaumplantage mit gleich alten Bäumen werde durch 3 normalverteilte Zufallsvariablen beschrieben:

- X_1 : Höhe eines Baumes [m] $N(4, 1)$ -verteilt
 X_2 : Ertrag [kg] $N(20, 100)$ -verteilt
 X_3 : Zahl der Blätter [1000 Stück] $N(20, 225)$ -verteilt.

Diese Zufallsvariablen seien korreliert mit

$$\begin{aligned}\text{Cov}(X_1, X_2) &= 9 \\ \text{Cov}(X_1, X_3) &= 12,75 \\ \text{Cov}(X_2, X_3) &= 120.\end{aligned}$$

Dann liegt eine $N_3(\mu, \Sigma)$ -Verteilung vor mit

$$\mu = \begin{pmatrix} 4 \\ 20 \\ 20 \end{pmatrix}, \quad \Sigma = \begin{pmatrix} 1 & 9 & 12,75 \\ 9 & 100 & 120 \\ 12,75 & 120 & 225 \end{pmatrix}.$$

Kann man unter geeigneten Voraussetzungen die gemeinsame Dichte $f(x_1, \dots, x_n)$ aus den einzelnen Dichten $f_1(x_1), \dots, f_n(x_n)$ berechnen?

Man kann zeigen:

71.4 Satz: (Gemeinsame Dichte unabhängiger Zufallsvariablen)

Seien X_1, \dots, X_n unabhängige(!) Zufallsvariablen mit Dichten $f_1(x_1), \dots, f_n(x_n)$, so hat $X = (X_1, \dots, X_n)^\top$ die gemeinsame Dichte

$$f(x_1, \dots, x_n) = f_1(x_1) \cdot \dots \cdot f_n(x_n) \quad (*).$$

Hat umgekehrt $X = (X_1, \dots, X_n)^\top$ eine gemeinsame Dichte in der Produktdarstellung (*), so sind X_1, \dots, X_n unabhängig.

71.5 Beispiel

Zwei unabhängige Zufallsvariablen X_1, X_2 seien $N(\mu_1, \sigma_1^2)$ - bzw. $N(\mu_2, \sigma_2^2)$ -verteilt. Da Unabhängigkeit Unkorreliertheit impliziert (vgl. 67.22.(c)), hat die Kovarianzmatrix Diagonalgestalt:

$$\Sigma = \begin{pmatrix} \sigma_1^2 & 0 \\ 0 & \sigma_2^2 \end{pmatrix}$$

Mit $\det \Sigma = \sigma_1^2 \sigma_2^2$ und $\Sigma^{-1} = \begin{pmatrix} 1/\sigma_1^2 & 0 \\ 0 & 1/\sigma_2^2 \end{pmatrix}$ hat $X = (X_1, X_2)^\top$ nach 71.2 eine multivariate Normalverteilung mit Dichte

$$\begin{aligned}f(x_1, x_2) &= \frac{1}{2\pi \sqrt{\sigma_1^2 \sigma_2^2}} e^{-\frac{1}{2}[(x_1 - \mu_1)^2/\sigma_1^2 + (x_2 - \mu_2)^2/\sigma_2^2]} \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi} \sigma_1} e^{-\frac{(x_1 - \mu_1)^2}{2\sigma_1^2}} \cdot \frac{1}{\sqrt{2\pi} \sigma_2} e^{-\frac{(x_2 - \mu_2)^2}{2\sigma_2^2}}.\end{aligned}$$

Dies ist gerade das Produkt der zwei einzelnen Dichten $f_1(x_1)$ und $f_2(x_2)$.

Gibt es Aussagen über die Dichte, wenn man die Summe zweier Zufallsvariablen betrachtet? Hierzu benötigen wir

71.6 Definition: (Faltung)

Falls für die Funktionen $f, g : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ das Integral

$$(f * g)(x) := \int_{-\infty}^{\infty} f(x-y)g(y)dy$$

existiert, so nennen wir $f * g$ die Faltung von f und g (engl.: convolution).

71.7 Satz: (Summe unabhängiger kontinuierlicher Zufallsvariabler)

Seien X_1, X_2 unabhängige kontinuierliche Zufallsvariable mit den Dichten f_1, f_2 , so hat $X_1 + X_2$ die Dichte $f_1 * f_2$.

Beweis:

Mit $B := \{(x_1, x_2) \mid x_1 + x_2 \leq s\}$ ergibt sich für die Verteilung von $X_1 + X_2$:

$$P(X_1 + X_2 \leq s) = \iint_B \underbrace{f_1(x_1)f_2(x_2)}_{\text{Unabh.}} dx_1 dx_2$$

Mit der Substitution $u := x_1 + x_2$ folgt:

$$P(X_1 + X_2 \leq s) = \int_{-\infty}^s \underbrace{\left(\int_{-\infty}^{\infty} f_1(u-x_2)f_2(x_2) dx_2 \right)}_{(f_1 * f_2)(u)} du$$

□

Hiermit läßt sich beweisen:

71.8 Satz: (Summe unabhängiger normalverteilter Zufallsvariabler)

Seien X_1, X_2 unabhängige kontinuierliche Zufallsvariablen mit $N(\mu_1, \sigma_1^2)$ - bzw. $N(\mu_2, \sigma_2^2)$ -Verteilung. Dann ist $X = X_1 + X_2$ ebenfalls $N(\mu, \sigma^2)$ -verteilt, und es gilt:

$$\begin{aligned} \mu &= \mu_1 + \mu_2 \\ \sigma^2 &= \sigma_1^2 + \sigma_2^2. \end{aligned}$$

Auch im Fall diskreter Zufallsvariablen gibt es vergleichbare Aussagen zu 71.6-71.8:

71.9 Definition: (Diskrete Faltung)

Für $f = (f_i)_{i \in \mathbb{Z}}, g = (g_i)_{i \in \mathbb{Z}}$ definiert man die diskrete Faltung von f und g durch

$$(f * g)_i := \sum_{j \in \mathbb{Z}} f_{i-j}g_j.$$

71.10 Satz: (Summe unabhängiger diskreter Zufallsvariabler)

Seien X_1, X_2 unabhängige diskrete, \mathbb{Z} -wertige Zufallsvariablen mit Verteilungen P_{X_1}, P_{X_2} . Dann hat $X_1 + X_2$ die Verteilung $P_{X_1} * P_{X_2}$ (kurz: $P_{X_1+X_2} = P_{X_1} * P_{X_2}$), wobei $*$ die diskrete Faltung bezeichnet.

71.11 Satz: (Summe unabhängiger Poisson-verteilter Zufallsvariabler)

Seien X_1, X_2 unabhängige diskrete Zufallsvariablen, die einer Poisson-Verteilung mit Parameter λ_1 bzw. λ_2 genügen (kurz: $P(\lambda_1)$ - bzw. $P(\lambda_2)$ -verteilt). Dann ist $X_1 + X_2$ $P(\lambda_1 + \lambda_2)$ -verteilt.

71.12 Beispiel

Beim radioaktiven Zerfall einer Substanz werden ionisierende Teilchen frei. Mit einem Geiger-Müller-Zählrohr zählt man die innerhalb einer Minute eintreffenden Teilchen. Deren Anzahl ist Poisson-verteilt. Hat man zwei radioaktive Substanzen mit Poisson-Verteilung $P(\lambda_1)$ bzw. $P(\lambda_2)$, so genügt die Gesamtheit der pro Zeitintervall produzierten Teilchen einer $P(\lambda_1 + \lambda_2)$ -Verteilung.

72 Parameterschätzung und Konfidenzintervalle

72.1 Motivation

Bisher sind wir stets von theoretischen Modellen (z.B. „fairer Würfel“) ausgegangen, die erlauben, Parameter wie Erwartungswert oder Varianz einer Verteilung exakt zu berechnen. In vielen realen Situationen kennt man jedoch nur den Verteilungstyp und muss auf Grund von Stichproben die Parameter schätzen.

Wie geht man dabei vor? Die geschätzten Parameter sind i.A. fehlerhaft. Lässt sich ein Vertrauensintervall angeben, innerhalb dessen ein Parameter mit einer vorgegebenen Sicherheit liegt?

72.2 Definition: (Stichprobenwerte)

Gegeben seien n Beobachtungswerte x_1, \dots, x_n eines Zufallsexperiments. Dann nennen wir $(x_1, \dots, x_n)^\top$ Stichprobe vom Umfang n . Die einzelnen x_i heißen Stichprobenwerte.

72.3 Beispiel

In einer Kiste befinden sich 10.000 Schrauben. Ein Teil davon ist fehlerhaft. Für eine Stichprobe werden 100 Schrauben entnommen. Die Zufallsvariable X_i beschreibt den Zustand der i -ten entnommenen Schraube:

$$X_i = \begin{cases} 0 & \text{falls } i\text{-te Schraube in Ordnung} \\ 1 & \text{falls } i\text{-te Schraube defekt.} \end{cases}$$

Eine konkrete Realisierung des Zufallsvektors $(X_1, \dots, X_{100})^\top$ liefere die Stichprobe $(x_1, \dots, x_{100})^\top = (0, 1, 0, 0, 1, 0, \dots, 0, 1)^\top$.

So wie wir bei den Zufallsvariablen Parameter wie Erwartungswert oder Varianz zugeordnet haben, können wir auch für Stichproben Kenngrößen definieren:

72.4 Definition: (Mittelwert, Varianz, Standardabweichung)

Für eine Stichprobe $(x_1, \dots, x_n)^\top$ definiert man:

- den Mittelwert durch: $\bar{x} := \frac{1}{n}(x_1 + \dots + x_n)$
- die Varianz durch: $s^2 := \frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2$
- die Standardabweichung durch: $s := \sqrt{s^2}$.

72.5 Bemerkungen

- a) Man kann zeigen, dass der Mittelwert \bar{x} und die Varianz s^2 geeignete Approximationen an den Erwartungswert μ und die Varianz σ^2 einer Zufallsvariablen sind.
- b) Die Tatsache, dass im Nenner von s^2 die Größe $n - 1$ statt n steht, hat tiefere theoretische Hintergründe, auf die wir hier nicht eingehen (siehe z.B. Hartmann, Satz 21.9)

c) Ähnlich zum Verschiebungssatz 67.12 gibt eine häufig benutzte Formel zum Berechnen der Varianz einer Stichprobe:

$$s^2 = \frac{1}{n-1} \left(\sum_{i=1}^n x_i^2 - n\bar{x}^2 \right)$$

Beweis:

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2 &= \sum_{i=1}^n (x_i^2 - 2x_i\bar{x} + \bar{x}^2) = \sum_{i=1}^n x_i^2 - 2\bar{x} \underbrace{\sum_{i=1}^n x_i}_{n\bar{x}} + n\bar{x}^2 \\ &= \sum_{i=1}^n x_i^2 - n\bar{x}^2. \end{aligned}$$

□

72.6 Beispiel

Bei einer Wahlumfrage geben 400 von 1000 Personen an, die Partei A wählen zu wollen. Das Umfrageinstitut prognostiziert auf Grund dieser Stichprobe einen Wahlausgang mit 40% aller Stimmen für Partei A .

72.7 Konfidenzintervalle

In Beispiel 72.6 werden verschiedene Stichproben zu leicht unterschiedlichen Resultaten führen, die wiederum i.A. alle vom tatsächlichen Wahlausgang abweichen.

Können wir statt eines einzelnen Werts $p = 0,4$ ein Vertrauensintervall (Konfidenzintervall) $[p_u, p_o]$ angeben, innerhalb dessen das Endresultat mit einer vorgegebenen Wahrscheinlichkeit (Konfidenzniveau) von z.B. 95% liegt?

72.8 Beispiel: Wahlumfrage aus 70.6

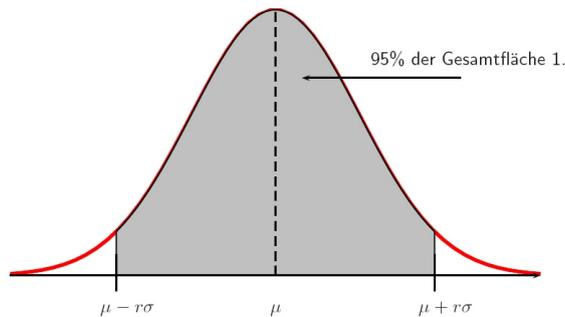
Wir gehen von einer Binomialverteilung aus und schätzen p durch $p = \frac{400}{1000} = 0,4$ ab. Sei

$$X_i = \begin{cases} 1 & \text{Befragte/r } i \text{ wählt } A \\ 0 & \text{Befragte/r } i \text{ wählt } A \text{ nicht} \end{cases}$$

und $X := \sum_{i=1}^{1000} X_i$. Dann gilt nach 69.4 mit $p = 0,4$ und $n = 1000$:

$$\begin{aligned} \mu &= E(X) = np = 400 \\ \sigma^2 &= V(X) = np(1-p) = 240 \Rightarrow \sigma \approx 15,49. \end{aligned}$$

Wegen $np = 400 > 5$ und $n(1-p) = 600 > 5$ können wir approximativ für X auch eine Normalverteilung mit $\mu = 400$ und $\sigma = 15,49$ annehmen. Wir suchen ein Intervall $[\mu - r\sigma, \mu + r\sigma]$, innerhalb dessen das Integral über die Dichtefunktion den Wert 0,95 annimmt:



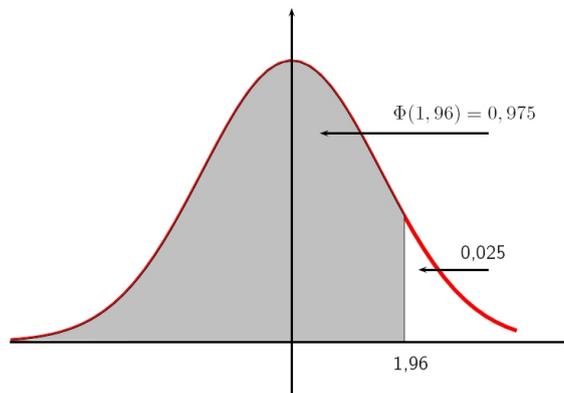
Tabelliert ist die Standardnormalverteilung ($\mu = 0, \sigma = 1$)

$$\Phi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^x e^{-\frac{t^2}{2}} dt$$

Man findet: $\Phi(1,96) \approx 0,975$. Somit ist aus Symmetriegründen

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-1,96}^{1,96} e^{-\frac{t^2}{2}} dt \approx 0,95$$

und $r = 1,96$.



Damit ergibt sich das Konfidenzintervall

$$\begin{aligned} [\mu - r\sigma, \mu + r\sigma] &= [400 - 1,96 \cdot 15,49 ; 400 + 1,96 \cdot 15,49] \\ &\approx [369,6 ; 430,4]. \end{aligned}$$

Bei einem Konfidenzniveau von 95% erzielt Partei A also zwischen 36,96% und 43,04% der Stimmen. Möchte man ein kleineres Konfidenzintervall, muss man mehr Personen befragen.

72.9 Beispiel: Überbuchung eines Flugzeugs

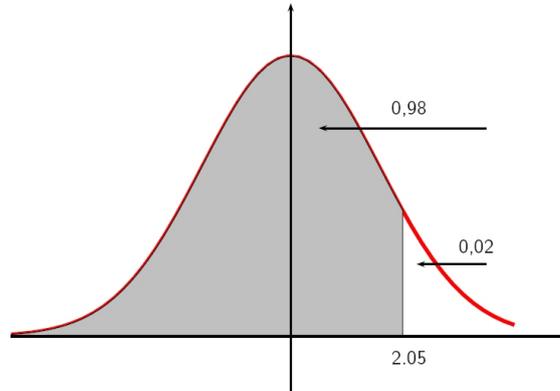
Ein Flugzeug hat 200 Sitze. Wie viele Reservierungen dürfen angenommen werden, wenn erfahrungsgemäß 5% aller Passagiere nicht erscheinen? Die Fluggesellschaft ist bereit, in 1 von 50 Fällen in Verlegenheit zu geraten.

Sei n die Anzahl der Reservierungen und X die Anzahl der tatsächlich erscheinenden Passagiere. Legt man eine Binomialverteilung zu Grunde mit $p = 0,95$, so gilt:

$$\begin{aligned} \mu &= E(X) = n \cdot p = 0,95 \cdot n \\ \sigma^2 &= np(1-p) \approx 0,0475n \Rightarrow \sigma = 0,2179\sqrt{n} \end{aligned}$$

Der Tabelle der Standardnormalverteilung entnimmt man:

$$\Phi(2,05) \approx 0,98 = 1 - \frac{1}{50}$$



Fordert man

$$\mu + 2,05\sigma \stackrel{!}{\leq} 200,5$$

ergibt sich:

$$0,95n + 2,05 \cdot 0,2179\sqrt{n} \leq 200,5$$

Man prüft leicht nach, dass dies für $n \leq 204$ erfüllt ist. (ausprobieren oder $y := \sqrt{n}$ setzen und quadratische Gleichung lösen).

Bemerkung: Die Approximation durch die Normalverteilung war gerechtfertigt wegen $np > 5$ und $n(1-p) > 5$.

73 Hypothesentests

73.1 Motivation

Bei Hypothesentests will man eine gewisse Annahme über eine Zufallsvariable darauf hin überprüfen, ob sie korrekt ist. Beispiele:

- Ist eine Münze fair $\left(p = \frac{1}{2}\right)$?
- Sind die Rechner von Hersteller A zuverlässiger als von Hersteller B ?

Ein statistisches Experiment soll uns dabei eine Entscheidung mit einer vorgegebenen Irrtumswahrscheinlichkeit ermöglichen. Gegenüber den Verfahren aus §72 kann man in den Rechnungen die Hypothese mit verwenden, hat also mehr in der Hand.

73.2 Parametertest am Beispiel eines Münzexperimentes

Wir beobachten das Ereignis $A = \text{„Münze zeigt Kopf“}$ und wollen die Hypothese $p_0 = p(A) = \frac{1}{2}$ überprüfen, indem wir 200 Münzwürfe durchführen:

$$X_i = \begin{cases} 1 & \text{(Münze zeigt Kopf beim } i\text{-ten Wurf)} \\ 0 & \text{(Münze zeigt Zahl beim } i\text{-ten Wurf)}. \end{cases}$$

Wie weit darf $S_{200} := \sum_{i=1}^{200} X_i$ sich vom Erwartungswert 100 unterscheiden, damit wir mit einer Irrtumswahrscheinlichkeit $\alpha = 0,05$ (Signifikanzniveau von $1 - \alpha = 0,95$) die Hypothese $p_0 = \frac{1}{2}$ nicht ablehnen?

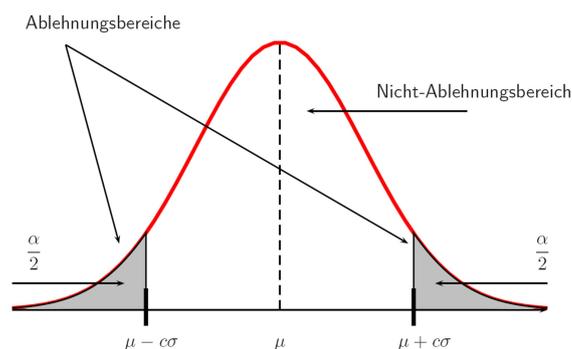


Abbildung 22:

Wir legen eine Binomialverteilung mit $n = 200$, $p = 0,5$ zu Grunde, die wir durch eine Normalverteilung mit $\mu = np = 100$, $\sigma = \sqrt{np(1-p)} = \sqrt{50} \approx 7,07$ approximieren. Wegen $\Phi(1,96) \approx 0,975$ ist $c = 1,96$ für $\alpha = 0,05$. Tritt bei 200 Würfeln eine Kopffzahl S_n außerhalb $[\mu - c\sigma; \mu + c\sigma] \approx [86,1; 113,9]$ auf, wird man die Hypothese $p_0 = \frac{1}{2}$ auf einem Signifikanzniveau 0,95 ablehnen. Andernfalls wird man sie nicht ablehnen.

73.3 Bemerkungen

- a) Eine Hypothese an einen Parameter (etwa $p_0 = \frac{1}{2}$) nennt man auch Nullhypothese H_0 , die Gegenannahme (z.B. $p \neq \frac{1}{2}$) ist die Gegenhypothese H_1 .
- b) Bei Hypothesentests können 2 Arten von Fehlern auftreten:

Fehler 1. Art:

Hypothese wird abgelehnt, obwohl sie richtig ist (wird durch Irrtumswahrscheinlichkeit α beschrieben).

Fehler 2. Art:

Hypothese wird angenommen, obwohl sie falsch ist. Dieser Fehler kann insbesondere für kleines α sehr groß sein.

73.4 Der χ^2 -Test („Chi-Quadrat-Test“)

Der χ^2 -Test ist einer der wichtigsten Tests. Er wird bei folgenden Problem angewandt: Ein Versuch habe m mögliche Ausgänge. Wir testen die Hypothese H_0 , dass die Resultate mit vorgegebenen Wahrscheinlichkeiten p_1, \dots, p_m auftreten.

Trifft H_0 zu, erwarten wir bei n Versuchen als Häufigkeit für die einzelnen Ausgänge: np_1, \dots, np_m .

In Wirklichkeit werden die Häufigkeiten X_1, \dots, X_m beobachtet.

Als Maß für die Abweichung zwischen X_i und np_i verwendet man die neue Zufallsvariable

$$\chi^2 := \sum_{i=1}^m \frac{(X_i - np_i)^2}{np_i}$$

Ist χ^2 „zu groß“, wird man H_0 ablehnen.

Um zu beurteilen, was „zu groß“ bedeutet, ist es sinnvoll den Erwartungswert von χ^2 zu kennen. Ist jedes X_i $b_{n,p}$ -verteilt, gilt auch

$$V(X_i) = E((X_i - np_i)^2) = np_i(1 - p_i)$$

und aus der Linearität des Erwartungswerts folgt:

$$\begin{aligned} E(\chi^2) &= \sum_{i=1}^m \frac{1}{np_i} E((X_i - np_i)^2) = \sum_{i=1}^m \frac{1}{np_i} np_i(1 - p_i) \\ &= \sum_{i=1}^m 1 - \sum_{i=1}^m p_i = m - 1. \end{aligned}$$

$f := m - 1$ bezeichnet die Freiheitsgrade der Verteilung von χ^2 , d.h. $m - 1$ der p_i , $i = 1, \dots, m$ sind frei wählbar. Es gilt also:

$$\boxed{\mu = E(\chi^2) = f}$$

In voller Allgemeinheit hat jede χ^2 -Verteilung einen Parameter, den Freiheitsgrad $f \in \mathbb{N}$, und ist eine kontinuierliche Verteilung. Die Dichte einer χ_f^2 -Verteilung ist gegeben durch

$$g_f(x) = \frac{x^{\frac{f}{2}-1} e^{-\frac{x}{2}}}{\Gamma\left(\frac{f}{2}\right) 2^{\frac{f}{2}}} \quad \text{für } x > 0 \text{ (und } = 0 \text{ sonst).}$$

Der typische Verlauf einer χ_f^2 -Verteilung sieht folgendermaßen aus:

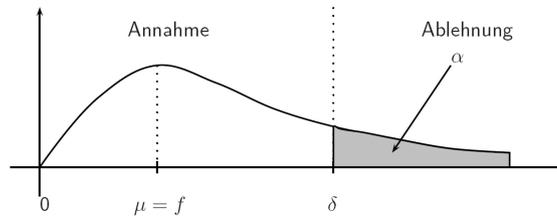


Abbildung 23:

Für einen gegebenen Freiheitsgrad f und eine Irrtumswahrscheinlichkeit α ist die χ_f^2 -Verteilung tabelliert.

Man nimmt H_0 an, falls der berechnete χ^2 -Wert $\leq \delta$ ist.

Man lehnt H_0 ab, falls der berechnete χ^2 -Wert $> \delta$ ist.

73.5 Beispiel

Wir wollen mit 120 Würfeln nachprüfen, ob ein Würfel „fair“ ist, d.h. alle Augenzahlen sind gleich wahrscheinlich:

$$p_1 = \dots = p_6 = \frac{1}{6}.$$

Als Ergebnis erhalten wir:

Augenzahl i	1	2	3	4	5	6
beobachtete Häufigkeit X_i	15	21	25	19	14	26
erwartete Häufigkeit np_i	20	20	20	20	20	20

Wir erhalten:

$$\chi^2 = \frac{(15 - 20)^2}{20} + \frac{(21 - 20)^2}{20} + \dots + \frac{(26 - 20)^2}{20} \approx 6,2.$$

Wir haben $f = 6 - 1 = 5$ Freiheitsgrade. Geben wir eine Irrtumswahrscheinlichkeit von $\alpha = 0,1$ vor, so findet man in einer Tabelle

$$p(\chi^2 \leq \underbrace{9,24}_{\delta}) = \underbrace{0,9}_{1-\alpha}$$

Wegen $\chi^2 = 6,2 \leq 9,24 = \delta$ akzeptieren wir die Hypothese H_0 , dass alle Augenzahlen gleich wahrscheinlich sind.

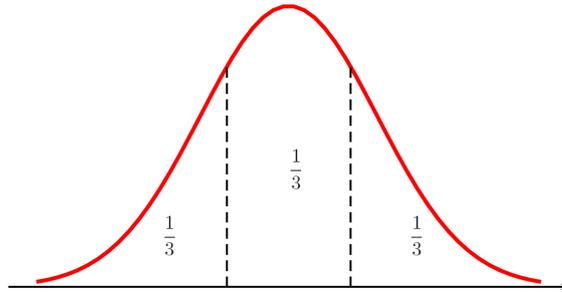


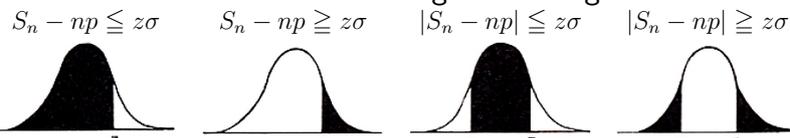
Abbildung 24: Bsp.: $m = 3$ Klassen

73.6 Bemerkung

Möchte man eine $N(\mu, \sigma^2)$ -Verteilung mit dem χ^2 -Test für ein gegebenes μ, σ^2 verifizieren, teilt man \mathbb{R} in m (z.B. gleich wahrscheinliche) Klassen ein:

Dann überprüft man, ob die experimentell ermittelten Häufigkeiten in jeder Klasse das χ^2 -Kriterium zu einer vorgegebenen Irrtumswahrscheinlichkeit α bei $f = m - 1$ Freiheitsgraden erfüllen.

Wahrscheinlichkeiten der folgenden Ereignisse:



z	$\Phi(z)$	$1 - \phi(z)$	$2\Phi(z) - 1$	$2 - 2\Phi(z)$
0.0	.500	.500	.0000	1.0000
0.1	.540	.460	.0797	.9203
0.2	.579	.421	.159	.841
0.3	.618	.382	.236	.764
0.4	.655	.345	.311	.689
0.5	.691	.309	.383	.617
0.6	.726	.274	.451	.549
0.7	.758	.242	.516	.484
0.8	.788	.212	.576	.424
0.9	.816	.184	.632	.368
1.0	.841	.159	.683	.317
1.1	.864	.136	.729	.271
1.2	.885	.115	.770	.230
1.3	.9032	.0968	.806	.194
1.4	.9192	.0808	.838	.162
1.5	.9332	.0668	.866	.134
1.6	.9452	.0548	.890	.110
1.7	.9554	.0446	.9109	.0891
1.8	.9641	.0359	.9281	.0719
1.9	.9713	.0287	.9425	.0575
2.0	.9772	.0228	.9545	.0455
2.1	.9821	.0179	.9643	.0357
2.2	.9861	.0139	.9722	.0278
2.3	.9893	.0107	.9786	.0217
2.4	.99180	.00820	.9836	.0164
2.5	.99379	.00621	.9876	.0124
2.6	.99534	.00466	.99068	.00932
2.7	.99653	.00347	.99307	.00693
2.8	.99744	.00256	.99489	.00511
2.9	.99813	.00187	.99627	.00373
3.0	.99865	.00135	.99730	.00270
3.1	.999032	.000968	.99806	.00194
3.2	.999313	.000687	.99863	.00137
3.3	.999517	.000483	.999033	.000967
3.4	.999663	.000337	.999326	.000674
3.5	.999767	.000233	.999535	.000465
3.6	.999841	.000159	.999682	.000318
3.7	.999892	.000108	.999784	.000216
3.8	.9999277	.0000723	.999855	.000145
3.9	.9999519	.0000481	.9999038	.0000962
4.0	.9999683	.0000317	.9999367	.0000633

Die Stetigkeitskorrektur kann man berücksichtigen, indem man die Grenzen des schwarzen Gebiets um $\frac{1}{2\sigma}$ ins weiße Gebiet verlegt. Wahrscheinlichkeiten für $z < 0$ erhält man durch Symmetrie.

Schranken für χ^2 bei f Freiheitsgraden

$f \setminus P$	0,99	0,975	0,95	0,90	0,10	0,05	0,025	0,01
1	0,00016	0,00098	0,00393	0,01579	2,70554	3,84146	5,02389	6,63490
2	0,00201	0,00506	0,10259	0,21072	4,60517	5,99147	7,37776	9,21034
3	0,11483	0,21580	0,35185	0,58438	6,25139	7,81473	9,34840	11,3449
4	0,29711	0,48442	0,71072	1,06362	7,77944	9,48773	11,1433	13,2767
5	0,55430	0,83121	1,14548	1,61031	9,23635	11,0705	12,8325	15,0863
6	0,87209	1,23735	1,63539	2,20413	10,6446	12,5916	14,4494	16,8119
7	1,23904	1,68987	2,16735	2,83311	12,0170	14,0671	16,0128	18,4753
8	1,64648	2,17973	2,73264	3,48954	13,3616	15,5073	17,5346	20,0902
9	2,08781	2,70039	3,32511	4,16816	14,6837	16,9190	19,0228	21,6660
10	2,55821	3,24697	3,94030	4,86518	15,9871	18,3070	20,4831	23,2093
11	3,0535	3,8158	4,5748	5,5778	17,275	19,675	21,920	24,725
12	3,5706	4,4038	5,2260	6,3038	18,549	21,026	23,337	26,217
13	4,1069	5,0087	5,8919	7,0415	19,812	22,362	24,736	27,688
14	4,6604	5,6287	6,5706	7,7895	21,064	23,685	26,119	29,143
15	5,2294	6,2621	7,2604	8,5468	22,307	24,996	27,488	30,578
16	5,812	6,908	7,962	9,312	23,54	26,30	28,85	32,00
17	6,408	7,564	8,672	10,09	24,77	27,59	30,19	33,41
18	7,015	8,231	9,390	10,86	25,99	28,87	31,53	34,81
19	7,633	8,907	10,12	11,65	27,20	30,14	32,85	36,19
20	8,260	9,591	10,85	12,44	28,41	31,41	34,17	37,57
21	8,897	10,28	11,59	13,24	29,62	32,67	35,48	38,93
22	9,542	10,98	12,34	14,04	30,81	33,92	36,78	40,29
23	10,20	11,69	13,09	14,85	32,00	35,17	38,08	41,64
24	10,86	12,40	13,85	15,66	33,20	36,42	39,36	42,98
25	11,52	13,12	14,61	16,47	34,38	37,65	40,65	44,31
26	12,20	13,84	15,38	17,29	35,56	38,89	41,92	45,64
27	12,88	14,57	16,15	18,11	36,74	40,11	43,19	46,96
28	13,56	15,31	16,93	18,94	37,92	41,34	44,46	48,28
29	14,26	16,05	17,71	19,77	39,09	42,56	45,72	49,59
30	14,95	16,79	18,49	20,60	40,26	43,77	46,98	50,89

Erläuterungen der Tafel. Z.B. die 5. Zeile der Tafel bedeutet: Bei 5 Freiheitsgraden ist

$$\begin{aligned}
 P(\chi^2 \geq 0,5543) &= 0,99, \\
 P(\chi^2 \geq 0,83121) &= 0,975, \\
 &\vdots \\
 P(\chi^2 \geq 15,0863) &= 0,01.
 \end{aligned}$$

74 Methode der kleinsten Quadrate

74.1 Problemstellung

In einem Experiment interessiert man sich für die Beziehung zwischen zwei Variablen x und y . Hierzu hat man viele Wertepaare

$$(x_1, y_1), \dots, (x_n, y_n)$$

gemessen. Die Messungen können Fehler in Form von statistischen Fluktuationen enthalten. Man möchte nun die Beziehung zwischen x und y durch ein einfaches Polynom

$$y = f(x) = \sum_{k=1}^m a_k x^{k-1}$$

approximieren (z.B. $m = 2$: Gerade, $m = 3$: Parabel) und sucht die „optimalen“ Koeffizienten a_1, \dots, a_m .

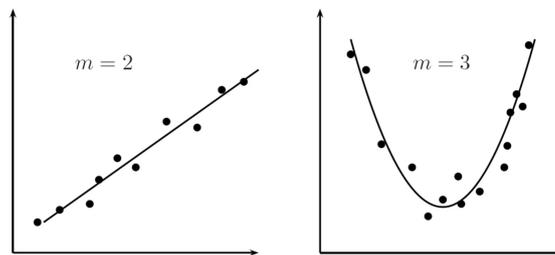


Abbildung 25:

74.2 Methode der kleinsten Quadrate

Jede der n Messungen (x_i, y_i) beschreibt eine lineare Gleichung für die Unbekannten a_1, \dots, a_m :

$$\begin{aligned} a_1 + a_2 x_1 + \dots + a_m x_1^{m-1} &= y_1 \\ &\vdots \\ a_1 + a_2 x_n + \dots + a_m x_n^{m-1} &= y_n \end{aligned}$$

Im Allgemeinen hat man sehr viel mehr Gleichungen als Unbekannte ($n \gg m$), und das lineare Gleichungssystem

$$\underbrace{\begin{pmatrix} 1 & x_1 & \dots & x_1^{m-1} \\ \vdots & & & \vdots \\ 1 & x_n & \dots & x_n^{m-1} \end{pmatrix}}_{M \in \mathbb{R}^{n \times m}} \underbrace{\begin{pmatrix} a_1 \\ \vdots \\ a_m \end{pmatrix}}_{a \in \mathbb{R}^m} = \underbrace{\begin{pmatrix} y_1 \\ \vdots \\ y_n \end{pmatrix}}_{y \in \mathbb{R}^n}$$

ist inkonsistent. Beispielsweise kann man nicht erwarten, dass 50 Messwerte exakt auf einer Geraden liegen ($n = 50, m = 2$).

Da $Ma = y$ nicht exakt lösbar ist, sucht man statt dessen eine „Lösung“ a^* , die den quadratischen Fehler

$$|Ma - y|^2 = \left(\sum_{k=1}^m a_k x_1^{k-1} - y_1 \right)^2 + \dots + \left(\sum_{k=1}^m a_k x_n^{k-1} - y_n \right)^2$$

minimiert (Ausgleichskurve, Regressionskurve).

74.3 Minimierung des quadratischen Fehlers

Wir suchen das Minimum der Funktion

$$\begin{aligned} f(a_1, \dots, a_m) &= (Ma - y)^\top (Ma - y) \\ &= a^\top M^\top Ma - a^\top M^\top y - \underbrace{y^\top Ma + y^\top y}_{a^\top M^\top y} \\ &= a^\top M^\top Ma - 2a^\top M^\top y + y^\top y. \end{aligned}$$

Notwendige Bedingung:

$$\begin{aligned} 0 \stackrel{!}{=} \nabla_a f &:= \begin{pmatrix} \frac{\partial f}{\partial a_1} \\ \vdots \\ \frac{\partial f}{\partial a_m} \end{pmatrix} = M^\top Ma + \underbrace{a^\top M^\top M}_{\substack{(M^\top M)a, \\ \text{da } M^\top M \\ \text{symmetrisch}}} - 2M^\top y \\ &= 2M^\top Ma - 2M^\top y. \end{aligned}$$

Die Lösung a^* löst also die so genannte Normalengleichung

$$\boxed{M^\top Ma = M^\top y}$$

Dies ist ein System aus m Gleichungen mit m Unbekannten a_1, \dots, a_m . Ist $M^\top M$ invertierbar, gilt:

$$\boxed{a^* = (M^\top M)^{-1} M^\top y}$$

Man nennt

$$\boxed{M^+ := (M^\top M)^{-1} M^\top}$$

die Pseudoinverse (Moore-Penrose-Inverse) der (nicht invertierbaren!) $n \times m$ -Matrix M .

74.4 Bemerkungen

a) a^* ist tatsächlich ein Minimum:

Die Hesse-Matrix $H_a f = 2M^\top M$ ist positiv semidefinit:

$$x^\top \cdot 2M^\top Mx = 2(Mx)^\top Mx \geq 0 \quad \forall x \in \mathbb{R}^n.$$

Da $M^\top M$ invertierbar sein soll, ist $H_a f$ sogar positiv definit. Nach 58.5 folgt also: a^* ist ein Minimum.

- b) Man kann zeigen, dass $M^T M$ invertierbar ist, falls $\text{rang}(M) = m$, d.h. es gibt m der n Gleichungen des Systems $Ma = y$, die linear unabhängig sind.
- c) Wir haben also am Beispiel der Ausgleichsrechnung ein allgemeines Verfahren hergeleitet, um ein überbestimmtes (und i.A. inkonsistentes) Gleichungssystem zu „lösen“:

74.5 Satz: (Pseudolösung überbestimmter Gleichungssysteme)

Sei $n > m$, $A \in \mathbb{R}^{n \times m}$, $\text{rang}(A) = m$ und $b \in \mathbb{R}^n$. Falls das überbestimmte lineare Gleichungssystem

$$Ax = b$$

inkonsistent ist, ist es nicht exakt lösbar. Es gibt jedoch eine eindeutige Pseudolösung x^* , die den quadratischen Fehler $|Ax - b|^2$ minimiert: $x^* = A^+ b$ mit der Pseudoinversen $A^+ = (A^T A)^{-1} A^T$.

74.6 Bemerkung

Pseudolösungen spielen auch in der Informatik eine wichtige Rolle. Überbestimmte Gleichungssysteme treten z.B. bei der Suche in Internetdatenbanken auf (\rightarrow Prof. Weikum, Informationssysteme)

74.7 Beispiel

Bestimme mit der Methode der kleinsten Quadrate die Regressionsgerade durch die 4 Punkte $(0, 1)$, $(1, 3)$, $(2, 4)$, $(3, 4)$.

Lösung: Wir suchen die Koeffizienten a_1, a_2 der Geradengleichung $y = a_1 + a_2 x$. Hierzu haben wir 4 Bestimmungsgleichungen:

$$a_1 + 0 \cdot a_2 = 1$$

$$a_1 + 1 \cdot a_2 = 3$$

$$a_1 + 2 \cdot a_2 = 4$$

$$a_1 + 3 \cdot a_2 = 4$$

Das überbestimmte Gleichungssystem lautet $Ma = y$ mit

$$M = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 1 & 1 \\ 1 & 2 \\ 1 & 3 \end{pmatrix}, \quad a = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix}, \quad y = \begin{pmatrix} 1 \\ 3 \\ 4 \\ 4 \end{pmatrix}$$

$$\Rightarrow M^T M = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 2 & 3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 1 & 1 \\ 1 & 2 \\ 1 & 3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 4 & 6 \\ 6 & 14 \end{pmatrix}.$$

$(M^T M)^{-1}$ existiert, da $\det(M^T M) = 4 \cdot 14 - 6 \cdot 6 = 20 \neq 0$.

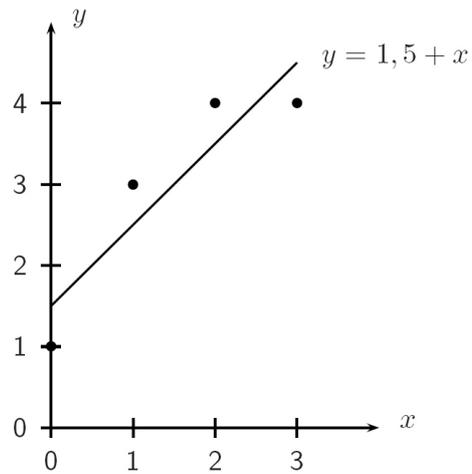
Nach kurzer Rechnung erhält man:

$$(M^T M)^{-1} = \frac{1}{10} \begin{pmatrix} 7 & -3 \\ -3 & 2 \end{pmatrix}$$

Damit lautet die Pseudolösung von $Ma = y$:

$$\begin{aligned} a^* &= \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix} = (M^\top M)^{-1} M^\top y \\ &= \frac{1}{10} \begin{pmatrix} 7 & -3 \\ -3 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 2 & 3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 3 \\ 4 \\ 4 \end{pmatrix} \\ &= \frac{1}{10} \begin{pmatrix} 7 & -3 \\ -3 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 12 \\ 23 \end{pmatrix} = \frac{1}{10} \begin{pmatrix} 15 \\ 10 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1,5 \\ 1 \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

Die Ausgleichgerade lautet somit $y = 1,5 + x$.



75 Robuste Statistik

75.1 Motivation

Will man aus realen Daten statistische Parameter schätzen (z.B. arithmetisches Mittel als Schätzer für den Erwartungswert; Parameter einer Regressionskurve), kann es sein, dass das Ergebnis auf Grund von Ausreißern stark verfälscht wird.

Beispiel: 9 Studierende benötigen 10 Semester für ihr Studium, 1 benötigt 40 Semester. Das arithmetische Mittel ergibt eine mittlere Studiendauer von 13 Semestern. Sie ist jedoch nicht repräsentativ für die Mehrzahl der Studierenden. Gibt es statistische Verfahren, die robuster gegenüber Ausreißern sind?

75.2 Median

Sei X eine Zufallsvariable. Dann nennt man jede Zahl μ_m mit $P(X \geq \mu_m) \geq \frac{1}{2}$ und $P(X \leq \mu_m) \geq \frac{1}{2}$ einen Median von X .
Veranschaulichung für kontinuierliche Zufallsvariable mit Dichte f :

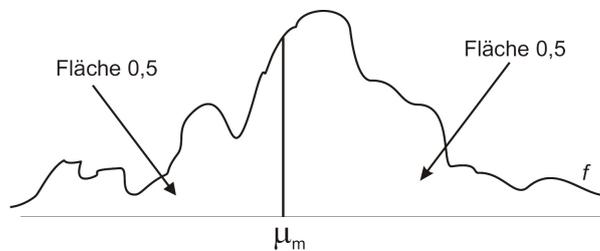


Abbildung 26:

Für die Verteilungsfunktion F gilt: $F(\mu_m) = \frac{1}{2}$.

75.3 Bemerkung

- a) Nicht immer gibt es einen eindeutigen Median. Gibt es ein Intervall $[a, b]$ mit $P(X \leq a) = \frac{1}{2}$ und $P(X \geq b) = \frac{1}{2}$, so ist jede Zahl aus $[a, b]$ ein Median.

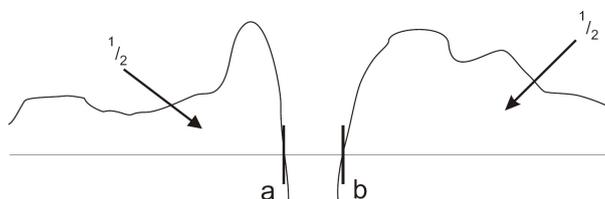


Abbildung 27:

- b) I.A. stimmen Erwartungswert und Median nicht überein.

75.4 Empirischer Median

Hat man $2k + 1$, der Größe nach geordnete Messwerte

$$x_1 \leq x_2 \leq \dots \leq x_{2k+1},$$

dann nennt man $\hat{\mu}_m := x_{k+1}$ den (empirischen) Median dieser Daten. Es sind 50% der Daten $\geq \hat{\mu}_m$, und 50% sind $\leq \hat{\mu}_m$. Bei einer geraden Anzahl von Messungen

$$x_1 \leq x_2 \leq \dots \leq x_{2k}$$

gilt für jedes $\hat{\mu} \in [x_k, x_{k+1}]$: $\geq 50\%$ der Daten sind $\geq \hat{\mu}$, $\geq 50\%$ sind $\leq \hat{\mu}$. Man definiert in diesem Fall:

$$\hat{\mu}_m := \frac{1}{2}(x_{k+1} + x_k)$$

als „den“ (empirischen) Median.

75.5 Beispiele

- a) Der Median der Studiendauer in 75.1 beträgt 10 Semester. Der Ausreißer mit 40 Semestern hat somit keinen Einfluss auf den Median.
- b) In der Bildverarbeitung ersetzt der Medianfilter einen Grauwert durch seinen Median innerhalb eines $(2k + 1) \times (2k + 1)$ -Fensters:

32	17	24
35	251	21
12	24	25

Ordnen der Grauwerte:

$$12 \leq 17 \leq 21 \leq 24 \leq 24 \leq 25 \leq 32 \leq 35 \leq 251$$

↑
Median

Der Grauwert 251 (Ausreißer) wird durch den Median 24 ersetzt. Medianfilter sind robust gegenüber Impulsrauschen (Ausreißer nach oben oder unten) und erhalten Kanten.

75.6 M-Schätzer

Seien x_1, \dots, x_n Messwerte und $\Psi : [0, \infty) \rightarrow \mathbb{R}$ eine monoton wachsende Strafffunktion (engl.: penaliser). Dann nennt man dasjenige μ , das

$$E(x) = \sum_{i=1}^n \Psi(|x - x_i|)$$

minimiert, den M-Schätzer von x_1, \dots, x_n .

75.7 Beispiele

a) Beliebige ist die Familie $\Psi(s) = s^p$ mit $p \geq 0$. Man kann zeigen:

i) $p = 2$ liefert das arithmetische Mittel \bar{x} . Es minimiert den quadratischen Abstand

$$E(x) = \sum_{i=1}^n (x_i - x)^2$$

ii) $p = 1$ liefert den Median $\hat{\mu}$. Er minimiert die Abstandssumme

$$E(x) = \sum_{i=1}^n |x_i - x|$$

iii) $p \rightarrow 0$ liefert als Minimierer die Modalwerte (Maxima des Histogramms)

iv) $p \rightarrow \infty$ ergibt den Midrange

$$\frac{\max\{x_i\} + \min\{x_i\}}{2}.$$

Kleinere Werte für p liefern robustere M-Schätzer, da sie Ausreißer x_i , für die $\Psi(|x_i - x|) = |x_i - x|^p$ groß wird, weniger stark bestrafen.

b) Eine andere Straffunktion, die robuster als die übliche quadratische Straffunktion $\Psi(s) = s^2$ ist, ist z.B. die Lorentz-Strafffunktion

$$\Psi(s) = \ln\left(1 + \frac{1}{2}s^2\right).$$

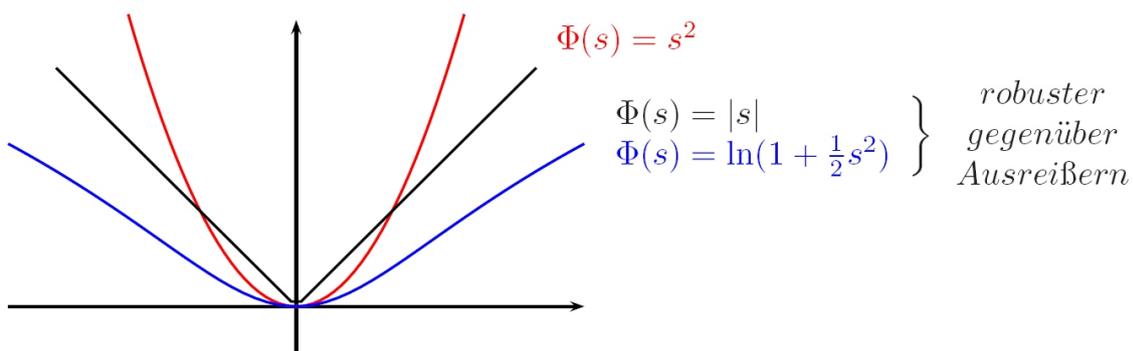


Abbildung 28:

76 Fehlerfortpflanzung

76.1 Motivation

Es werden 2 physikalische Größen x und y mehrmals gemessen. Man erhält als Mittelwert \bar{x}, \bar{y} und als (empirische) Standardabweichung s_x, s_y (vgl. 72.4). Nun will man hieraus eine neue Größe $z = f(x, y)$ berechnen. Als Schätzer für den Erwartungswert verwendet man $\bar{z} := f(\bar{x}, \bar{y})$. Wie gehen jedoch die Meßfehler s_x, s_y in die Standardabweichung s_z ein? Man kann zeigen:

76.2 Satz: (Fehlerfortpflanzungsgesetz von Gauß)

Schätzt man aus zwei Fehler behafteten Größen x, y mit Mittelwert \bar{x}, \bar{y} und Standardabweichung s_x, s_y eine neue Größe $z = f(x, y)$, so ist der Schätzer für ihren Erwartungswert gegeben durch

$$\bar{z} := f(\bar{x}, \bar{y}),$$

und für die Varianz von z gilt:

$$s_z^2 = \left(\frac{\partial f}{\partial x} \right) \Big|_{\bar{x}, \bar{y}}^2 s_x^2 + \left(\frac{\partial f}{\partial y} \right) \Big|_{\bar{x}, \bar{y}}^2 s_y^2$$

Beweisidee: Taylorentwicklung.

76.3 Beispiel

Zwei Widerstände R_1, R_2 werden mehrmals gemessen. Man erhält (in Ohm)

$$\begin{array}{l} \bar{R}_1 = 100 \quad s_{R_1} = 0,8 \quad (\text{Schreibweise: } R_1 = 100 \pm 0,8) \\ \bar{R}_2 = 200 \quad s_{R_2} = 1 \quad (R_2 = 200 \pm 1) \end{array}$$

Wie groß sind Gesamt Widerstand R und sein Fehler bei Parallelschaltung?

$$\begin{aligned} \frac{1}{\bar{R}} &= \frac{1}{\bar{R}_1} + \frac{1}{\bar{R}_2} = \frac{R_2 + R_1}{R_1 R_2} \Rightarrow R = \frac{R_1 R_2}{R_1 + R_2} \\ \bar{R} &= \frac{\bar{R}_1 \bar{R}_2}{\bar{R}_1 + \bar{R}_2} = \frac{100 \cdot 200}{100 + 200} \approx 66,67 \\ \frac{\partial R}{\partial R_1} &= \frac{(R_1 + R_2)R_2 - R_1 R_2}{(R_1 + R_2)^2} = \frac{R_2^2}{(R_1 + R_2)^2}, & \frac{\partial R}{\partial R_1} \Big|_{\bar{R}_1, \bar{R}_2} &\approx 0,44 \\ \frac{\partial R}{\partial R_2} &= \frac{R_1^2}{(R_1 + R_2)^2}, & \frac{\partial R}{\partial R_2} \Big|_{\bar{R}_1, \bar{R}_2} &\approx 0,11 \\ s_R &= \sqrt{\left(\frac{\partial R}{\partial R_1} \right) \Big|_{\bar{R}_1, \bar{R}_2}^2 s_{R_1}^2 + \left(\frac{\partial R}{\partial R_2} \right) \Big|_{\bar{R}_1, \bar{R}_2}^2 s_{R_2}^2} \\ &= \sqrt{0,44^2 \cdot 0,8^2 + 0,11^2 \cdot 1^2} \approx 0,37. \\ R &= \bar{R} \pm s_R \approx 66,67 \pm 0,37. \end{aligned}$$

77 Markowketten

77.1 Motivation

Der Zustand eines Systems zur Zeit $n \in \mathbb{N}$ werde durch eine Zufallsvariable X_n beschrieben und soll nur von X_{n-1} abhängen (nicht jedoch von früheren Zuständen X_{n-2}, X_{n-3}, \dots). Wir möchten das zeitliche Verhalten dieses Systems studieren, insbesondere das Langzeitverhalten für $n \rightarrow \infty$.

Prozesse dieser Art sind in der Informatik z.B. bei der Untersuchung der Auslastung von Servern wichtig (Warteschlangenmodelle).

77.2 Definition: (Markowkette, Stochastischer Prozess)

Ein *stochastischer Prozess* ist eine Familie (X_t) von Zufallsvariablen mit $t \in \mathbb{R}$ oder $t \in \mathbb{N}$. Wir interpretieren t als Zeitparameter, der kontinuierlich oder diskret ist. Ein diskreter stochastischer Prozess (X_n) , $n \in \mathbb{N}$ heißt *Markowkette*, wenn die Verteilung von X_n bei gegebenen X_{n-1} nicht von der früheren Verteilungen X_k , $k < n - 1$ abhängt:

$$\begin{aligned} P(X_n = i_n \mid X_{n-1} = i_{n-1}, X_{n-2} = i_{n-2}, \dots) \\ = P(X_n = i_n \mid X_{n-1} = i_{n-1}). \end{aligned}$$

Bemerkung: Wichtig sind insbesondere Markowketten, die nur endlich viele Zustände annehmen:

$$P(X_n \in \{1, \dots, k\}) = 1.$$

77.3 Beispiel mit Definitionen

Jedes Jahr ziehen 10 % der Bevölkerung außerhalb Kaliforniens nach Kalifornien, und 20 % der Bevölkerung Kaliforniens zieht aus. Eine Person befindet sich im Jahr $n - 1$ in einem von 2 Zuständen:

$$X_{n-1} := \begin{cases} 1 & \text{(Person wohnt in Kalifornien)} \\ 2 & \text{(Person wohnt nicht in Kalifornien)}. \end{cases}$$

Der Zustand im Jahr n läßt sich dann durch ein graphisches Modell mit Übergangswahrscheinlichkeiten beschreiben:

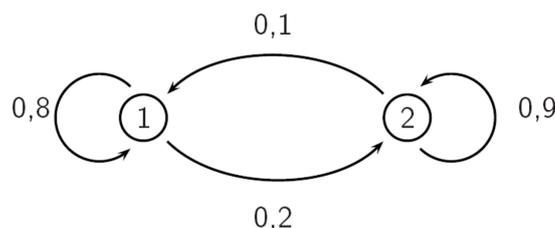


Abbildung 29:

Sei p_{ij}^n die Wahrscheinlichkeit, dass ein Zustand j zur Zeit $n - 1$ in den Zustand i zur Zeit n übergeht (z.B. $p_{12}^n = 0,1$):

$$p_{ij}^n = P(X_n = i \mid X_{n-1} = j).$$

Wir definieren die Matrix der Übergangswahrscheinlichkeiten (Übergangsmatrix) durch

$$M_n := (p_{ij}^n) \in \mathbb{R}^{k \times k} \quad (\text{bei } k \text{ Zuständen})$$

Im Beispiel:

$$M_n = \begin{pmatrix} 0,8 & 0,1 \\ 0,2 & 0,9 \end{pmatrix}$$

Die Verteilung von X_n auf die Zustände $i = 1, \dots, k$ werde durch einen Vektor $u_n \in \mathbb{R}^k$ beschrieben.

$$u_n = \begin{pmatrix} u_{n1} \\ \vdots \\ u_{nk} \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^k.$$

Dann berechnet sich u_n aus u_{n-1} durch:

$$u_n = M_n u_{n-1}$$

Sind im Beispiel zur Zeit $n - 1$ 60 % der Bevölkerung außerhalb Kaliforniens, gilt:

$$\begin{aligned} u_{n-1} &= \begin{pmatrix} 0,4 \\ 0,6 \end{pmatrix} \\ u_n &= \begin{pmatrix} 0,8 & 0,1 \\ 0,2 & 0,9 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0,4 \\ 0,6 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0,38 \\ 0,62 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

Im Jahr n sind somit 62 % außerhalb Kaliforniens.

77.4 Definition: (Kette mit stationären Übergangswahrscheinlichkeiten)

Eine Markowkette (X_n) heißt homogen, oder Kette mit stationären Übergangswahrscheinlichkeiten, wenn die Übergangsmatrix M_n unabhängig von der Zeit n ist:

$$M_n = M \quad \forall n \in \mathbb{N}.$$

77.5 Bemerkungen

- Beispiel 77.3 beschreibt eine homogene Markowkette.
- Wir nennen eine Matrix $A = (a_{ij}) \in \mathbb{R}^{k \times k}$ eine stochastische Matrix, wenn alle Einträge nichtnegativ sind und die Spaltensummen 1 sind:

$$\begin{aligned} a_{ij} &\geq 0 \quad \forall i, j \in \{1, \dots, n\} \\ \sum_{i=1}^k a_{ij} &= 1 \quad \forall j \in \{1, \dots, n\}. \end{aligned}$$

Übergangsmatrizen sind Beispiele für stochastische Matrizen.

- c) In der Stochastikliteratur werden oft Zeilenvektoren u_n betrachtet, und man definiert p_{ij}^n als die Übergangswahrscheinlichkeit von Zustand \underline{i} nach Zustand \underline{j} . Dann ist

$$u_n = u_{n-1}M_n$$

und stochastische Matrizen haben Zeilensumme 1.

77.6 Zustandsbeschreibung endlicher homogener Markowketten

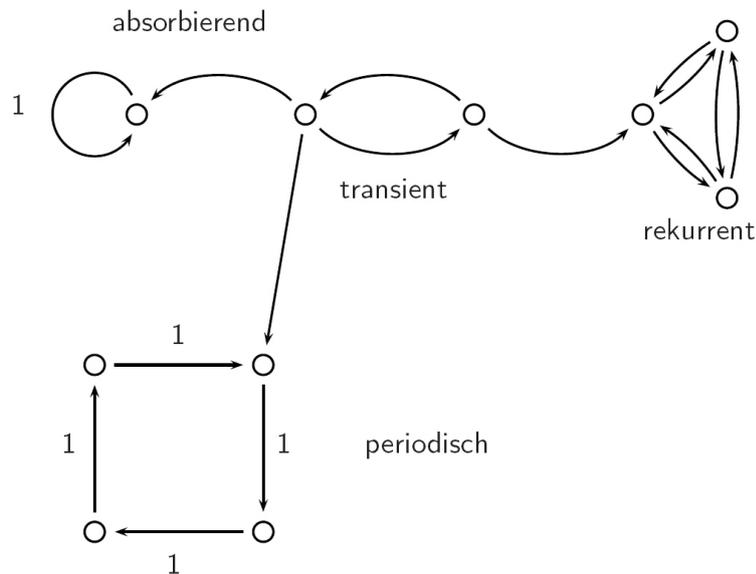


Abbildung 30:

Definition: (*transient, rekurrent, periodisch*)

Sei (X_n) eine endliche homogene Markowkette. Ein Zustand i heißt

- transient, wenn $P(X_m \neq i \forall m > n \mid X_n = i) > 0$
(kann verlassen werden).
- rekurrent, wenn $P(X_m \neq i \forall m > n \mid X_n = i) = 0$
(mit Wahrscheinlichkeit 1 kehren wir zurück).
- periodisch mit Periode l , wenn $P(X_{n+l} = i \mid X_n = i) = 1$.

Eine Menge I heißt absorbierend, wenn $P(X_{n+1} \in I \mid X_n \in I) = 1$.

Um das Zeitverhalten von Markowketten zu verstehen, müssen wir stochastische Matrizen näher untersuchen.

77.7 Satz: (Eigenwerte stochastischer Matrizen)

Sei $M = (p_{ij}) \in \mathbb{R}^{k \times k}$ eine stochastische Matrix. Dann gilt:

- $\lambda = 1$ ist Eigenwert von M^T

- b) $|\lambda| \leq 1$ für alle Eigenwerte λ von M und M^\top .
- c) $\lambda = 1$ ist einziger Eigenwert von M^\top mit $|\lambda| = 1$, falls $\min_j p_{jj} > 0$.

Beweis:

- a) Ist M stochastisch, so hat $A = M^\top$ Zeilensumme 1.

$$\Rightarrow A \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ \vdots \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sum_j a_{1j} \\ \sum_j a_{2j} \\ \vdots \\ \sum_j a_{kj} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ \vdots \\ 1 \end{pmatrix}.$$

Somit ist $\begin{pmatrix} 1 \\ \vdots \\ 1 \end{pmatrix}$ Eigenvektor von A zum Eigenwert $\lambda = 1$.

- b) Betrachte die Spaltensummennorm

$$\|M\|_s := \max_j \left(\sum_{i=1}^k |p_{ik}| \right) = 1.$$

Dann gilt nach Satz 50.8 für jeden Eigenwert λ von M :

$$|\lambda| \leq \|M\|_s = 1.$$

Für M^\top betrachtet man die Zeilensummennorm.

- c) Nach dem Satz von Gerschgorin (50.10) gibt es zu jedem Eigenwert λ von $M^\top = (a_{ij})$ ein $p_{ii} = a_{ii}$ mit

$$|\lambda - p_{ii}| \leq \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^k |a_{ij}| = 1 - p_{ii}.$$

Also liegt λ in dem Kreis mit Mittelpunkt p_{ii} und Radius $1 - p_{ii}$. Er berührt den Einheitskreis von innen in $(1, 0)$:

Aus $|\lambda| = 1$ folgt somit: $\lambda = 1$.

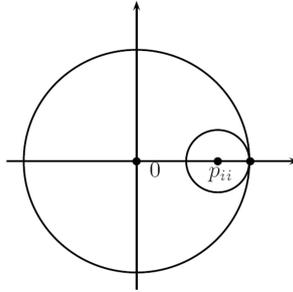


Abbildung 31:

Bemerkung: Aussage 77.7.(c) gilt auch für M statt M^T .

77.8 Bedeutung des Eigenwerts $\lambda = 1$

Wir interessieren uns für das Verhalten einer endlichen homogenen Markowkette (X_n) für $n \rightarrow \infty$. Für einen Anfangszustand u_0 und eine Übergangsmatrix $M = (p_{ij})$ gilt:

$$\begin{aligned} u_1 &= Mu_0 \\ u_2 &= Mu_1 = M^2u_0 \\ &\vdots \\ u_n &= M^n u_0. \end{aligned}$$

Ist u Eigenvektor von M zum Eigenwert $\lambda = 1$, gilt:

$$u_n = M^n u = \lambda u = u \quad \forall n \in \mathbb{N},$$

d.h. der Zustand u ist stabil.

Darüberhinaus kann man Folgendes zeigen:

77.9 Satz: (Potenzen stochastischer Matrizen)

Sei M eine stochastische Matrix. Genau dann existiert $\lim_{n \rightarrow \infty} M^n$, wenn 1 der einzige Eigenwert von M mit Betrag 1 ist.

Beweis eines Teilresultats:

Wir zeigen: Sei λ ein Eigenwert von M mit $|\lambda| = 1$. Falls $\lim_{n \rightarrow \infty} M^n$ existiert, ist 1 einziger Eigenwert von M vom Betrag 1.

Sei $v \neq 0$ ein Eigenvektor von M zum Eigenwert λ mit $|\lambda| = 1$:

$$Mv = \lambda v \quad \Rightarrow \quad M^n v = \lambda^n v \quad \forall n \in \mathbb{N}.$$

Würde $\lim_{n \rightarrow \infty} M^n$ existieren, hätten wir

$$\left(\lim_{n \rightarrow \infty} M^n \right) v = \lim_{n \rightarrow \infty} (M^n v) = \lim_{n \rightarrow \infty} (\lambda^n v) = \left(\lim_{n \rightarrow \infty} \lambda^n \right) v.$$

Also würde auch $\lim_{n \rightarrow \infty} \lambda^n = \mu$ existieren.

Dann wäre auch

$$\mu = \lim_{n \rightarrow \infty} \lambda^{n+1} = \lambda \lim_{n \rightarrow \infty} \lambda^n = \lambda \mu.$$

Wegen $|\lambda| = 1$ ist auch $|\lambda^n| = 1 \forall n \in \mathbb{N}$ und somit $|\mu| = 1 \neq 0$. Aus $\mu = \lambda \mu$ folgt dann (nach Division durch μ): $\lambda = 1$. \square

77.10 Gegenbeispiel

Wir betrachten eine stochastische Matrix, die Eigenwert λ mit $|\lambda| = 1$, aber $\lambda \neq 1$ besitzt:

$$M = \begin{pmatrix} 0 & 1 & & \\ & \ddots & \ddots & \\ & & \ddots & 1 \\ 1 & & & 0 \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{k \times k}.$$

Sie beschreibt eine zyklische Vertauschung von Vektorelementen.

Sei $\alpha := e^{2\pi i/k} = \cos \frac{2\pi}{k} + i \sin \frac{2\pi}{k}$ ($\Rightarrow \alpha^k = e^{2\pi i} = 1$)

Setzen wir

$$v_j := \begin{pmatrix} 1 \\ \alpha^j \\ \alpha^{2j} \\ \vdots \\ \alpha^{(k-1)j} \end{pmatrix}, \quad 0 \leq j \leq k-1,$$

so folgt wegen $\alpha^k = 1$:

$$Mv_j = \begin{pmatrix} \alpha^j \\ \alpha^{2j} \\ \vdots \\ \alpha^{kj} \end{pmatrix} = \alpha^j v_j.$$

Also sind $1, \alpha^1, \alpha^2, \dots, \alpha^{k-1} \in \mathbb{C}$ sämtliche Eigenwerte von M . Alle haben Betrag 1.

77.11 Markowketten im Gleichgewicht

Eine endliche homogene Markowkette (X_n) ist im Gleichgewicht, falls zu ihrer Übergangsmatrix $M = (p_{ij})$ ein Zustand u existiert mit

$$Mu = u,$$

d.h. u ist Eigenvektor von M zum Eigenwert 1, und es gilt:

$$\sum_{i=1}^k u_i = 1, \quad u_i \geq 0 \text{ für } i = 1, \dots, k.$$

77.12 Beispiel

Im Beispiel 77.3 war die Übergangsmatrix gegeben durch

$$M = \begin{pmatrix} 0,8 & 0,1 \\ 0,2 & 0,9 \end{pmatrix}$$

Berechnung der Eigenwerte:

$$\begin{aligned} 0 &\stackrel{!}{=} \begin{vmatrix} 0,8 - \lambda & 0,1 \\ 0,2 & 0,9 - \lambda \end{vmatrix} = (0,8 - \lambda)(0,9 - \lambda) - 0,02 \\ &= 0,72 - 0,8\lambda - 0,9\lambda + \lambda^2 - 0,02 \\ &= \lambda^2 - 1,7\lambda + 0,7 \\ \lambda_{1/2} &= \frac{1,7 \pm \sqrt{1,7^2 - 4 \cdot 0,7}}{2} = \frac{1,7 \pm \sqrt{2,89 - 2,8}}{2} \\ &= \frac{1,7 \pm 0,3}{2} \\ \lambda_1 &= 1, \\ \lambda_2 &= 0,7 \end{aligned}$$

Eigenvektor zu $\lambda_1 = 1$:

$$\begin{pmatrix} -0,2 & 0,1 \\ 0,2 & -0,1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \Rightarrow \quad \begin{aligned} -0,2x + 0,1y &= 0 \\ x &= \frac{y}{2} \end{aligned}$$
$$v = \begin{pmatrix} \alpha \\ 2\alpha \end{pmatrix}, \alpha \neq 0.$$

Da v eine Verteilung auf die Zustände beschreiben soll, muss gelten:

$$\begin{aligned} v_i &\geq 0, \quad \sum_{i=1}^n v_i = 1 \\ \Rightarrow v &= \begin{pmatrix} 1/3 \\ 2/3 \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

Dies beschreibt den Gleichgewichtszustand.

$\frac{1}{3}$ der Personen wohnt in Kalifornien, $\frac{2}{3}$ außerhalb.

Wann ist es möglich, bei einer Markowkette von einem Zustand in einen beliebigen anderen zu gelangen?

77.13 Definition: (irreduzibel)

Eine stochastische Matrix $M = (p_{ij}) \in \mathbb{R}^{k \times k}$ heißt transitiv (irreduzibel), wenn man von jedem Zustand n zu jedem anderen Zustand m mit positiver Wahrscheinlichkeit in endlich vielen Schritten gelangen kann:

Es gibt ein r , so dass für $M^r = B = (b_{ij})$ gilt:

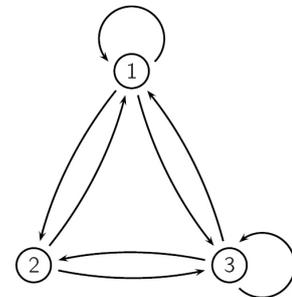
$$b_{mn} \geq 0.$$

77.14 Praktisches Kriterium für Irreduzibilität

Man zeichnet zur Übergangsmatrix $M = (p_{ij})$ einen gewichteten Graphen: Ist $p_{ij} > 0$, zeichnet man einen Pfeil von j nach i . Falls man von jedem Zustand längs solcher Pfeile zu jedem anderen Zustand gelangt, ist M transitiv, andernfalls nicht.

77.15 Beispiele

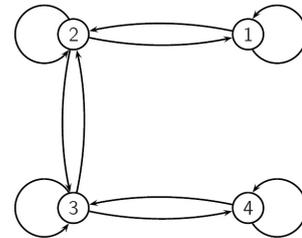
$$\text{a) } M = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \frac{1}{4} \\ \frac{1}{4} & 0 & \frac{1}{4} \\ \frac{1}{4} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{pmatrix}$$



irreduzibel: Es gibt von jedem Punkt einen Weg zu jedem anderen Punkt.

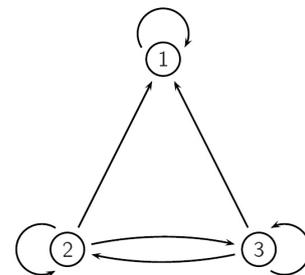
Beachte: Der Weg darf mehrere Pfeile umfassen. Daher führt auch ein Weg von ② nach ②.

$$\text{b) } M = \begin{pmatrix} \frac{3}{4} & \frac{1}{4} & 0 & 0 \\ \frac{1}{4} & \frac{1}{2} & \frac{1}{4} & 0 \\ 0 & \frac{1}{4} & \frac{1}{2} & \frac{1}{4} \\ 0 & 0 & \frac{1}{4} & \frac{3}{4} \end{pmatrix}$$



irreduzibel.

$$\text{c) } M = \begin{pmatrix} 1 & \frac{2}{5} & \frac{1}{4} \\ 0 & \frac{1}{5} & \frac{1}{4} \\ 0 & \frac{2}{5} & \frac{1}{2} \end{pmatrix}$$



reduzibel: Es führt z.B. kein Weg von ① nach ②.

78 Verborgene Markowmodelle

78.1 Motivation

Verborgene Markowmodelle (hidden Markov models, HMMs) spielen eine große Rolle in der Bioinformatik, der Sprach- und der Mustererkennung. Mit Hilfe der aus dem Bereich der Markowketten bekannten Übergangsmatrizen (§77) sucht man nach der wahrscheinlichsten Zustandsfolge, die eine gegebene Beobachtung erzeugt haben könnte.

78.2 Beispiel: Spieler mit fairer und unfairer Münze

Ein Spieler besitzt eine faire Münze, bei der Kopf und Zahl gleichwahrscheinlich sind ($p^+(0) = p^+(1) = \frac{1}{2}$) und eine gezinkte Münze, bei der Zahl wahrscheinlicher ist ($p^-(0) = \frac{1}{4}$, $p^-(1) = \frac{3}{4}$). Wir beobachten n Münzwürfe und wollen entscheiden, ob er die faire oder die unfaire Münze genommen hat.

Sei k die Zahl der Ergebnisse, bei denen Zahl beobachtet wurde. Die einzelnen Ergebnisse seien x_1, \dots, x_n .

Fall 1: Münze war fair.

Wahrscheinlichkeit, dass die Beobachtung $x = (x_1, \dots, x_n)$ eintritt, ist

$$P(x \mid \text{faire Münze}) = \prod_{i=1}^n p^+(x_i) = \frac{1}{2^n}.$$

Fall 2: Münze war unfair.

$$\underbrace{P(x \mid \text{unfaire Münze})}_{\prod_{i=1}^n p^-(x_i)} = \underbrace{\left(\frac{1}{4}\right)^{n-k}}_{n-k \text{ mal Kopf}} \underbrace{\left(\frac{3}{4}\right)^k}_{k \text{-mal Zahl}} = \frac{3^k}{4^n}.$$

Wir vermuten, dass die Münze fair war, falls

$$\begin{aligned} P(x \mid \text{faire Münze}) &> P(x \mid \text{unfaire Münze}) \\ \frac{1}{2^n} &> \frac{3^k}{4^n} && | \cdot 4^n \\ 2^n &> 3^k && | \log_2 \\ n &> k \log_2 3 \\ \frac{k}{n} &< \frac{1}{\log_2 3}. && (*) \end{aligned}$$

78.3 Schwierigeres Beispiel

Wir nehmen an, dass der Spieler mit einer geringen Wahrscheinlichkeit von 0,1 die Münze innerhalb des Spiels austauscht. Wir wollen wissen, wann er welche Münze genommen hat.

Naiver Ansatz: Wir betrachten die Beobachtungen innerhalb eines Fensters und überprüfen ob (*) zutrifft oder nicht.

Problem: Lösung hängt von Fenstergröße ab und wir wissen nicht, wann der Spieler die Münze wechselt.

Verborgene Markowmodelle bieten einen alternativen stochastischen Zugang, um dieses Problem zu lösen.

78.4 Definition: (Verborgenes Markowmodell)

Ein verborgenes Markowmodell (*hidden Markov model, HMM*) ist ein Tupel $\mathcal{M} = (\Sigma, Q, M, E)$. Dabei bezeichnen:

- Σ : Alphabet von Symbolen (Ann.: $|\Sigma| = r$)
- Q : Menge von Zuständen (Ann.: $|Q| = k$)
- $M = (p_{ij})$: stochastische Matrix mit Übergangswskten, $M \in \mathbb{R}^{k \times k}$
- $E = (e, (b))$: Matrix der Emissionswahrscheinlichkeiten, $E \in \mathbb{R}^{k \times r}$.

78.5 Beispiel

In Beispiel 78.3 bezeichnen:

- $\Sigma = \{0, 1\}$ Kopf (0) oder Zahl (1)
- $Q = \{f, b\}$ faire (f) oder unfaire (b) Münze
- $M = \begin{pmatrix} 0,9 & 0,1 \\ 0,1 & 0,9 \end{pmatrix}$ Übergangswahrscheinlichkeiten für Münzwechsel
- $e_f(0) = \frac{1}{2}$ $e_f(1) = \frac{1}{2}$ Emissionsws. für faire Münze
- $e_b(0) = \frac{1}{4}$ $e_b(1) = \frac{3}{4}$ Emissionsws. für unfaire Münze

Die vom Spieler tatsächlich verwendete Zustandsfolge ist $\pi = (\pi_1, \dots, \pi_n)$ mit $\pi_i \in Q$. Sie bleibt uns „verborgen“. Wir beobachten nur den Ergebnisvektor $x = (x_1, \dots, x_n)$ mit $x_i \in \Sigma$.

Die Wahrscheinlichkeit, dass die beobachtete Sequenz x durch einen Pfad π erzeugt wurde, ist

$$P(x | \pi) = \prod_{i=1}^n P(x_i | \pi_i) \cdot \underbrace{P(\pi_i | \pi_{i+1})}_{\text{Übergangsws.}} \quad \text{mit } P(\pi_n | \pi_{n+1}) := 1.$$

78.6 Problemstellung

Gelöst werden soll nun das Dekodierungsproblem:

Finde zu einem gegebenen HMM $\mathcal{M} = (\Sigma, Q, M, E)$ und einer Beobachtung $x = (x_1, \dots, x_n)$ einen optimalen Pfad $\pi^* = (\pi_1^*, \dots, \pi_n^*)$, der $P(x | \pi)$ maximiert:

$$\pi^* = \arg \max_{\pi} P(x | \pi)$$

78.7 Der Viterbi-Algorithmus (findet lokales Minimum)

Grundidee: optimaler Pfad $(\pi_1^*, \dots, \pi_{i+1}^*)$ zur Beobachtung (x_1, \dots, x_{i+1}) ist optimal unter allen Pfaden, die in dem unbekanntem Zustand $\pi_i^* = m \in Q$ enden.

$s_m(i)$: Wahrscheinlichkeit, dass optimaler Pfad $(\pi_1^*, \dots, \pi_i^*)$ zur Beobachtung (x_1, \dots, x_i) in m endet ($1 \leq i \leq n$).

$$\Rightarrow s_l(i+1) = \underbrace{e_l(x_{i+1})}_{\substack{\text{Emissionsws.} \\ \text{für } l}} \cdot \underbrace{\max_{m \in Q} \{s_m(i) \cdot p_{lm}\}}_{\text{Übergang } m \rightarrow l} \quad (**)$$

Initialisierung:

$$\begin{aligned} s_0(0) &= 1 \\ s_m(0) &= 0 \quad m \in \{1, \dots, n\}. \end{aligned}$$

Im optimalen π^* gilt $P(x | \pi^*) = \max_{m \in Q} \{s_m(i) \cdot p_{nm}\}$.

Das Viterbi-Verfahren benötigt $\mathcal{O}(nk)$ Rechenoperationen.

79 Pseudozufallszahlen und Monte-Carlo-Simulation

79.1 Motivation

Es gibt Anwendungsgebiete (z.B. Ray Tracing in der Computergrafik, Strömungssimulation im Bereich Computational Fluid Dynamics, Berechnung hochdimensionaler Integrale), bei denen stochastische Simulationen einfache oder effiziente Alternativen zu deterministischen Algorithmen sind. Solche Simulationen nennt man auch Monte-Carlo-Verfahren. Sie benötigen die Erzeugung von Zufallszahlen auf dem Rechner. Da funktionierende Computer jedoch deterministisch arbeiten, verwendet man statt dessen Algorithmen, die Zahlen liefern, die echten Zufallszahlen ähneln. Solche Zahlen heißen Pseudozufallszahlen.

79.2 Erzeugung von gleichverteilten Pseudozufallszahlen

Ziel: Erzeugung einer Sequenz Z_n von gleichverteilten Pseudozufallszahlen aus $[0, 1]$.

Beliebte Vorgehensweise:

Lineare Kongruenzmethoden (in vielen Compilern verwendet)

Gegeben:

$m \in \mathbb{N}$	Modus
$a \in \{1, \dots, m-1\}$	Multiplikator
$b \in \{0, \dots, m-1\}$	Inkrement
$x_0 \in \{0, \dots, m-1\}$	Startwert

Verfahren:

$$x_n := a \cdot x_{n-1} + b \quad (\text{modulo } m)$$
$$Z_n := \frac{x_n}{m}.$$

Dann approximiert die Sequenz (Z_n) eine Folge von stochastisch unabhängigen Zufallsvariablen, die auf $[0, 1]$ gleichverteilt sind. Die Approximationsgüte hängt von der Parameterwahl ab.

Konsequenz: Nach spätestens m Schritten wiederholt sich die Folge.
Häufig verwendet, aber schlecht:

$$\begin{aligned}m &= 2^{16} = 65536, \\a &= 25173, \\b &= 13849\end{aligned}$$

Besser (Minimalstandard):

$$\begin{aligned}m &= 2^{31} - 1 = 2147483647, \\a &= 7^5 = 16807, \\b &= 0.\end{aligned}$$

79.3 Erzeugung von $N(0, 1)$ -verteilten Pseudozufallszahlen

Die Standardnormalverteilung im \mathbb{R}^2 hat die Dichte

$$\varphi(x, y) = \frac{1}{2\pi} e^{-\frac{x^2+y^2}{2}}$$

Für eine Kreisscheibe $K_t(0)$ um 0 mit Radius t und zwei stochastisch unabhängig $N(0, 1)$ -verteilte Variablen X, Y gilt:

$$P(X^2 + Y^2 \leq t^2) = \int_{K_t(0)} \frac{1}{2\pi} e^{-\frac{x^2+y^2}{2}} dx dy.$$

Geht man zu Polarkoordinaten (r, φ) über, ergibt sich mit

$$\begin{aligned} x &= r \cos \varphi =: f_1(r, \varphi) \\ y &= r \sin \varphi =: f_2(r, \varphi) \\ Jf(r, \varphi) &= \begin{pmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial r} & \frac{\partial f_1}{\partial \varphi} \\ \frac{\partial f_2}{\partial r} & \frac{\partial f_2}{\partial \varphi} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \varphi & -r \sin \varphi \\ \sin \varphi & r \cos \varphi \end{pmatrix} \\ \det(Jf(r, \varphi)) &= r \cos^2 \varphi + r \sin^2 \varphi = r. \end{aligned}$$

Mit der Transformationsregel (§62):

$$\begin{aligned} P(X^2 + Y^2 \leq t^2) &= \int_{\varphi=0}^{2\pi} \int_{r=0}^t \frac{1}{2\pi} e^{-\frac{r^2}{2}} r dr d\varphi \\ &= 2\pi \int_{r=0}^t \frac{1}{2\pi} e^{-\frac{r^2}{2}} r dr \\ &= \left[-e^{-\frac{r^2}{2}} \right]_0^t = 1 - e^{-t^2/2} \end{aligned}$$

Der Radius R des Zufallszahlenvektors (X, Y) erfüllt also:

$$P(R \leq t) = 1 - e^{-t^2/2} =: g(t)$$

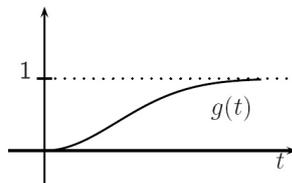


Abbildung 32:

Wertebereich von g : $[0, 1)$. Umkehrfunktion zu $g(t)$:

$$g^{-1}(z) = \sqrt{-2 \ln(1 - z)}.$$

Hat man eine in $[0, 1]$ gleichverteilte Zufallsvariable Z_1 , ergibt sich als Zufallsvariable R für den Radius der 2D-Standardnormalverteilung:

$$R = \sqrt{-2 \ln(1 - Z_1)}.$$

Aus einer zweiten, auf $[0, 1]$ gleichverteilten Zufallsvariablen Z_2 erhält man als Zufallsvariable für einen auf $[0, 2\pi]$ gleichverteilten Winkel T :

$$T = 2\pi Z_2.$$

Dies motiviert folgenden Algorithmus (Box-Muller-Verfahren) zur Erzeugung zweier $N(0, 1)$ -verteilter Zufallszahlen X, Y aus zwei auf $[0, 1]$ gleichverteilten Zufallszahlen Z_1, Z_2 :

$\begin{aligned} R &:= \sqrt{-2 \ln(1 - Z_1)} \\ T &:= 2\pi Z_2 \\ X &:= R \cos T \\ Y &:= R \sin T \end{aligned}$
--

Bem.: Benötigt man $N(\mu, \sigma^2)$ -verteilte Zufallszahlen \tilde{X}, \tilde{Y} , setzt man (vgl. 67.15):

$$\begin{aligned} \tilde{X} &= \mu + \sigma X \\ \tilde{Y} &= \mu + \sigma Y \end{aligned}$$

(Pseudo-)Zufallszahlen benötigt man z.B. bei probalistischen Algorithmen:

79.4 Anwendungsbeispiel: Quicksort

Sortieren einer Liste mit Quicksort:

- Suche ein zufälliges Element z der Liste
(mit gleichverteilten Pseudozufallszahlen aus 79.2)
- Sortiere Teilliste mit Elementen $\leq z_1$ mit Quicksort
- Sortiere Teilliste mit Elementen $> z_1$ mit Quicksort

usw.

Quicksort hat eine mittlere Laufzeit von $\mathcal{O}(n \log n)$, ist also nicht schlecht.

79.5 Beispiel: Buffon'sches Nadelexperiment

Ein probalistischer Algorithmus zur Bestimmung von π :

- Zeichne auf einem Blatt Papier parallele Linien im Abstand einer Stecknadellänge
- Lasse die Stecknadel auf das Papier fallen und überprüfe, ob sie eine der Linien trifft.
- Zähle die Zahl N der Versuche und die Zahl T der Treffer. Dann gilt:

$$\frac{N}{T} \rightarrow \frac{\pi}{2} \quad \text{für } N \rightarrow \infty.$$

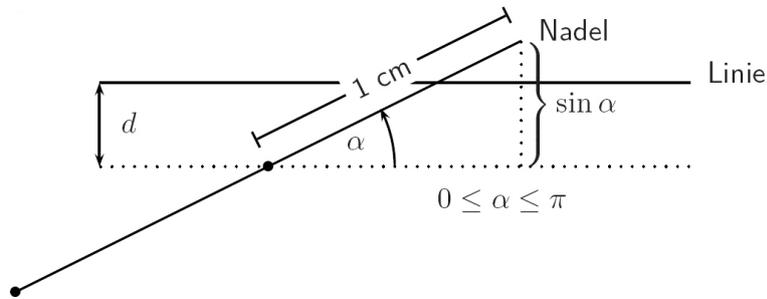


Abbildung 33:

Warum funktioniert das?

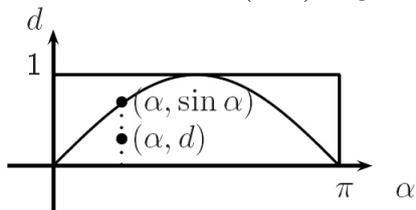
Annahme: Nadellänge und Linienabstand seien 2 [cm].

Die Nadel kann nur die nächstgelegene Linie schneiden und nur dann, wenn ihr Abstand d zwischen Nadelmittle und Linie $d < 1$ erfüllt:

$$\text{Nadel schneidet Linie} \Leftrightarrow d < \sin \alpha.$$

Zu jedem Wurf gehört ein Wertepaar $(\alpha, d) \in [0, \pi] \times [0, 1]$.

$d < \sin \alpha \Leftrightarrow (\alpha, d)$ liegt unter Graphen von $\sin x$



Im Zufallsexperiment sind die Punkte (α, d) gleich verteilt auf $[0, \pi] \times [0, 1]$:

$$\Rightarrow \frac{T}{N} \rightarrow \frac{\int_0^{\pi} \sin x \, dx}{\pi \cdot 1} = \frac{[-\cos x]_0^{\pi}}{\pi} = \frac{2}{\pi}$$

Unser Experiment war also ein stochastisches Integrationsverfahren für $\int_0^{\pi} \sin x \, dx$.

Im 1D-Fall sind solche Verfahren ineffizient, aber bei hochdimensionalen Integrationsproblemen haben sie eine bessere Komplexität als deterministische numerische Ansätze.