

Siegmund Brandt

**Datenanalyse  
für Naturwissenschaftler  
und Ingenieure**

Anhang

(Aus dem Internet herunterzuladen über die Seite  
des Buches **Datenanalyse** unter [www.springer.com](http://www.springer.com))



# A Matrizenrechnung

Die Lösung des überbestimmten linearen Gleichungssystems  $A\mathbf{x} \approx \mathbf{b}$  ist von zentraler Bedeutung für die Datenanalyse. Das geschieht in optimaler Form mit der erst gegen Ende der sechziger Jahre entwickelten Singulärwertzerlegung. In diesem Anhang werden zunächst in den Abschnitten A.1 und A.2 die elementaren Definitionen und Rechenregeln für Vektoren und Matrizen zusammengestellt. In Abschnitt A.3 werden die orthogonalen Transformationen eingeführt, insbesondere die Givens- und Householder-Transformationen, die den Schlüssel zur Singulärwertzerlegung bedeuten.

Nach einigen Bemerkungen über Determinanten (Abschnitt A.4) folgt in Abschnitt A.5 die Diskussion der verschiedenen Fälle von Matrixgleichungen und ein in diesem Zusammenhang zentraler Satz über die orthogonale Zerlegung einer beliebigen Matrix. Auch das klassische, aber der Singulärwertzerlegung unterlegene Verfahren der Normalgleichungen wird hier beschrieben.

Die Abschnitte A.6 bis A.8 betreffen den besonders einfachen Fall exakt bestimmter, nicht singulärer Matrixgleichungen. In diesem Fall existiert die inverse Matrix  $A^{-1}$ , die Lösung des Problems  $A\mathbf{x} = \mathbf{b}$  ist  $\mathbf{x} = A^{-1}\mathbf{b}$ . Methoden und Programme zu ihrer Auffindung werden angegeben. Der wichtige Spezialfall einer positiv definiten symmetrischen Matrix wird in Abschnitt A.9 behandelt.

Im Abschnitt A.10 definieren wir die pseudoinverse Matrix  $A^+$  zu einer beliebigen Matrix  $A$ . Nach der Einführung von Eigenvektoren und Eigenwerten im Abschnitt A.11 werden Singulärwertzerlegung und -analyse in den Abschnitten A.12 und A.13 dargestellt. Ein Algorithmus zu deren Durchführung wird im Abschnitt A.14 angegeben. Modifikation des Verfahrens und die Berücksichtigung von Nebenbedingungen sind Gegenstand der Abschnitte A.15 bis A.18.

Die Darstellung ist um Anschaulichkeit bemüht und erhebt keinen Anspruch auf mathematische Strenge. Beweise sind im Text nur angedeutet oder ganz weggelassen. Wie erwähnt, ist die Singulärwertzerlegung noch wenig verbreitet. Ihre Handhabung zu ermöglichen ist eine wichtige Zielsetzung dieses Anhangs. Für Leser mit Grundkenntnissen der Matrizenrechnung wird dazu die Lektüre der Abschnitte A.3, A.12, A.13, A.14.1 und A.18 ausreichen. Die Abschnitte A.14.2 bis A.14.5 enthalten Einzelheiten über die technische Durchführung der Singulärwertzerlegung und können vom eiligen Benutzer überschlagen werden.

Alle in diesem Anhang beschriebenen Verfahren sind in den Klassen `DatanVector` bzw. `DatanMatrix` als Methoden implementiert. Nur in einigen Fällen nennen wir diese Methoden explizit, um den Zusammenhang mit komplizierteren Algorithmen im Text herzustellen.

## A.1 Definitionen. Einfache Operationen.

Unter einem *Vektor* in  $m$  Dimensionen (kurz  $m$ -Vektor)  $\mathbf{a}$  verstehen wir ein  $m$ -Tupel reeller Zahlen, der *Komponenten* von  $\mathbf{a}$ . Die Anordnung der Komponenten in der Form

$$\mathbf{a} = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_m \end{pmatrix} \quad (\text{A.1.1})$$

bezeichnen wir als *Spaltenvektor*.

Eine  $(m \times n)$ -Matrix ist eine rechteckige Anordnung aus  $m \times n$  Zahlen in  $m$  Zeilen und  $n$  Spalten:

$$A = \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & \cdots & A_{1n} \\ A_{21} & A_{22} & \cdots & A_{2n} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ A_{m1} & A_{m2} & \cdots & A_{mn} \end{pmatrix}. \quad (\text{A.1.2})$$

Sie kann als aus  $n$  Spaltenvektoren zusammengesetzt aufgefaßt werden. Durch *Transposition* gewinnt man aus der  $(m \times n)$ -Matrix  $A$  eine  $(n \times m)$ -Matrix  $A^T$  mit den Elementen

$$A_{ik}^T = A_{ki}. \quad (\text{A.1.3})$$

Durch Transposition wird aus einem Spaltenvektor ein *Zeilenvektor*

$$\mathbf{a}^T = (a_1, a_2, \dots, a_m). \quad (\text{A.1.4})$$

Ein Spaltenvektor ist eine  $(m \times 1)$ -Matrix, ein Zeilenvektor eine  $(1 \times m)$ -Matrix.

Für Matrizen gelten die elementaren Rechenregeln für *Addition*, *Subtraktion* und *Multiplikation mit einer Zahl*,

$$A \pm B = C, \quad C_{ik} = A_{ik} \pm B_{ik}, \quad (\text{A.1.5})$$

$$\alpha A = B, \quad B_{ik} = \alpha A_{ik}. \quad (\text{A.1.6})$$

Das *Produkt*  $AB$  zweier Matrizen ist nur definiert, wenn die Anzahl der Spalten des ersten Faktors gleich der Anzahl der Zeilen des zweiten Faktors ist, also etwa  $A = A_{m \times \ell}$  und  $B = B_{\ell \times n}$ . Dann gilt

$$AB = C, \quad C_{ik} = \sum_{j=1}^{\ell} A_{ij} B_{jk}. \quad (\text{A.1.7})$$

Wegen

$$C_{ik}^T = C_{ki} = \sum_{j=1}^{\ell} A_{kj} B_{ji} = \sum_{j=1}^{\ell} A_{jk}^T B_{ij}^T = \sum_{j=1}^{\ell} B_{ij}^T A_{jk}^T$$

gilt

$$C^T = (AB)^T = B^T A^T. \quad (\text{A.1.8})$$

Mit (A.1.7) ist auch das Produkt eines Zeilenvektors  $\mathbf{a}^T$  mit einem Spaltenvektor  $\mathbf{b}$  definiert, wenn beide die gleiche Anzahl  $m$  von Elementen haben,

$$\mathbf{a} \cdot \mathbf{b} = \mathbf{a}^T \mathbf{b} = c, \quad c = \sum_{j=1}^m a_j b_j. \quad (\text{A.1.9})$$

Das Ergebnis ist eine Zahl: ein *Skalar*. Das Produkt (A.1.9) heißt *Skalarprodukt*. Es wird gewöhnlich ohne Kennzeichnung der Transposition als  $\mathbf{a} \cdot \mathbf{b} = c$  geschrieben. Die Vektoren  $\mathbf{a}$  und  $\mathbf{b}$  sind *orthogonal* zueinander, wenn ihr Skalarprodukt verschwindet. Ausgehend von (A.1.9) ergibt sich für das Matrixprodukt (A.1.7) folgende Merkregel: Das Element  $C_{ik}$ , das am Kreuzungspunkt der  $i$ -ten Zeile und der  $k$ -ten Spalte der Produktmatrix  $C$  steht, ergibt sich als Skalarprodukt der  $i$ -ten Zeile des ersten Faktors  $A$  mit der  $k$ -ten Spalte des zweiten Faktors  $B$ .

Die *Diagonalelemente* einer Matrix (A.1.2) sind die Elemente  $A_{ii}$ . Sie bilden die *Hauptdiagonale* der Matrix  $A$ . Verschwinden alle Nichtdiagonalelemente,  $A_{ij} = 0$ ,  $i \neq j$ , so ist  $A$  eine *Diagonalmatrix*. Eine  $(n \times n)$ -Diagonalmatrix, deren sämtliche Diagonalelemente Eins sind, ist die  $n$ -dimensionale *Einheitsmatrix*  $I_n = I$ ,

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 1 & \dots & 0 \\ \vdots & & & \\ 0 & 0 & \dots & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & & & 0 \\ & 1 & & \\ & & \ddots & \\ 0 & & & 1 \end{pmatrix} = I. \quad (\text{A.1.10})$$

Die *Nullmatrix* hat ausschließlich verschwindende Elemente,

$$0 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & & & \\ 0 & 0 & \dots & 0 \end{pmatrix}. \quad (\text{A.1.11})$$

Eine Nullmatrix mit nur einer Spalte ist der *Nullvektor*  $\mathbf{0}$ .

Wir erwähnen jetzt noch einige spezielle Arten von quadratischen Matrizen.

Eine quadratische Matrix  $A$  ist *symmetrisch*, wenn

$$A_{ik} = A_{ki} \quad (\text{A.1.12})$$

gilt. Ist

$$A_{ik} = -A_{ki}, \quad (\text{A.1.13})$$

so ist die Matrix  $A$  *antisymmetrisch*.

Eine *Bidiagonalmatrix*  $B$  besitzt nichtverschwindende Elemente nur auf der Hauptdiagonalen ( $b_{ii}$ ) und auf der direkt darüber liegenden Parallelen ( $b_{i,i+1}$ ).

Eine *Tridiagonalmatrix* besitzt zusätzlich nichtverschwindende Elemente direkt unterhalb der Hauptdiagonalen. Eine *untere Dreiecksmatrix* besitzt nichtverschwindende Elemente nur auf und unterhalb der Hauptdiagonalen, eine *obere Dreiecksmatrix* nur auf und oberhalb der Hauptdiagonalen.

Die *Euklidische Norm* oder der *Betrag* eines Vektors ist

$$|\mathbf{a}| = \|\mathbf{a}\|_2 = a = \sqrt{\mathbf{a}^T \mathbf{a}} = \sqrt{\sum_j a_j^2}. \quad (\text{A.1.14})$$

Ein Vektor vom Betrag Eins heißt *Einheitsvektor*. Wir schreiben ihn in der Form

$$\hat{\mathbf{a}} = \mathbf{a}/a.$$

Allgemeinere *Vektornormen* sind

$$\begin{aligned} \|\mathbf{a}\|_p &= \left( \sum_j |a_j|^p \right)^{1/p}, \quad 1 \leq p < \infty, \\ \|\mathbf{a}\|_\infty &= \max_j |a_j|. \end{aligned} \quad (\text{A.1.15})$$

Zu jeder Vektornorm  $\|\mathbf{x}\|$  ist eine *Matrixnorm*  $\|A\|$  definiert:

$$\|A\| = \max_{\mathbf{x} \neq 0} \|\mathbf{A}\mathbf{x}\| / \|\mathbf{x}\|. \quad (\text{A.1.16})$$

Für Normen gelten die Rechenregeln

$$\|A\| > 0, \quad A \neq 0; \quad \|A\| = 0, \quad A = 0, \quad (\text{A.1.17})$$

$$\|\alpha A\| = |\alpha| \|A\|, \quad \alpha \text{ reell}, \quad (\text{A.1.18})$$

$$\|A + B\| \leq \|A\| + \|B\|, \quad (\text{A.1.19})$$

$$\|A B\| \leq \|A\| \|B\|. \quad (\text{A.1.20})$$

## A.2 Vektorraum, Unterraum, Rang einer Matrix

Ein *n-dimensionaler Vektorraum* ist die Menge aller *n*-dimensionalen Vektoren. Sind  $\mathbf{u}$  und  $\mathbf{v}$  Vektoren in diesem Raum, dann gilt das auch für  $\alpha \mathbf{u}$  und  $\mathbf{u} + \mathbf{v}$ , d. h. der Vektorraum ist *abgeschlossen* unter der Vektoraddition und unter der Multiplikation mit einem Skalar  $\alpha$ . Die Vektoren  $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \dots, \mathbf{a}_k$  sind *linear unabhängig*, wenn

$$\sum_{j=1}^k \alpha_j \mathbf{a}_j \neq 0 \quad (\text{A.2.1})$$

für jede Wahl der  $\alpha_j$ , außer für  $\alpha_1 = \alpha_2 = \dots = \alpha_k = 0$ . Anderenfalls sind sie *linear abhängig*. Die maximale Anzahl  $k_{\max}$  von Vektoren, die linear unabhängig sein

können, ist gleich der *Dimension* des Vektorraumes  $n$ . Ein beliebiger Satz aus  $n$  linear unabhängigen Vektoren  $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \dots, \mathbf{a}_n$  bildet eine *Basis* des Vektorraumes. Jeder Vektor  $\mathbf{a}$  läßt sich als *Linearkombination* aus den Basisvektoren darstellen,

$$\mathbf{a} = \sum_{j=1}^n \alpha_j \mathbf{a}_j . \quad (\text{A.2.2})$$

Eine spezielle Basis ist

$$\mathbf{e}_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{e}_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \dots, \quad \mathbf{e}_n = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 1 \end{pmatrix} . \quad (\text{A.2.3})$$

Diese Basisvektoren sind *orthonormiert*, d. h.

$$\mathbf{e}_i \cdot \mathbf{e}_j = \delta_{ij} = \begin{cases} 1, & i = j \\ 0, & i \neq j \end{cases} . \quad (\text{A.2.4})$$

Die Komponente  $a_j$  des Vektors  $\mathbf{a}$  ist das Skalarprodukt von  $\mathbf{a}$  mit dem Basisvektor  $\mathbf{e}_j$ ,

$$\mathbf{a} \cdot \mathbf{e}_j = a_j , \quad (\text{A.2.5})$$

vgl. (A.1.1), (A.1.9).

Für  $n \leq 3$  lassen sich Vektoren geometrisch veranschaulichen. Ein Vektor  $\mathbf{a}$  wird als Pfeil der Länge  $a$  dargestellt. Die Basisvektoren (A.2.3) stehen senkrecht aufeinander und haben die Länge Eins. Die senkrechten Projektionen von  $\mathbf{a}$  auf die Richtungen der Basisvektoren sind die Komponenten (A.2.5), Bild A.1.

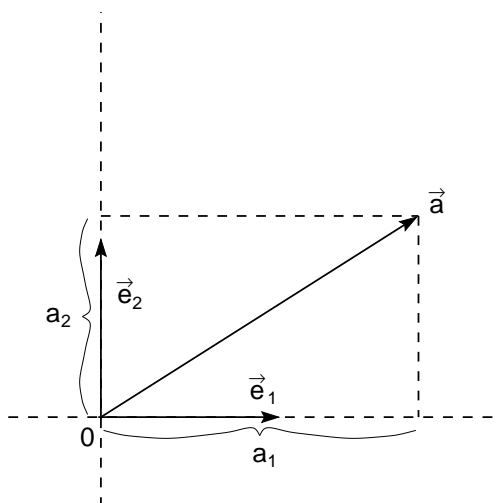
Eine Untermenge  $T$  eines Vektorraums  $S$  heißt *Unterraum*, wenn sie ihrerseits unter Vektoraddition und Multiplikation mit einem Skalar abgeschlossen ist. Die größtmögliche Zahl linear unabhängiger Vektoren in  $T$  ist die Dimension von  $T$ . Das Produkt einer  $(m \times n)$ -Matrix  $A$  mit einem  $n$ -Vektor  $\mathbf{a}$  ist ein  $m$ -Vektor  $\mathbf{b}$ ,

$$\mathbf{b} = A\mathbf{a} . \quad (\text{A.2.6})$$

Die Beziehung (A.2.6) kann als *Abbildung* oder *Transformation* des Vektors  $\mathbf{a}$  auf den Vektor  $\mathbf{b}$  aufgefaßt werden.

Der *Spann* einer Menge von Vektoren  $\mathbf{a}_1, \dots, \mathbf{a}_k$  ist der Vektorraum, der die Menge aller Linearkombinationen  $\mathbf{u}$  dieser Vektoren ist,

$$\mathbf{u} = \sum_{j=1}^k \alpha_j \mathbf{a}_j . \quad (\text{A.2.7})$$



**Bild A.1:** Vektor  $\mathbf{a}$  im System der orthonormierten Basisvektoren  $\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2$ .

Er hat eine Dimension  $m \leq k$ . Der *Spaltenraum* einer  $(m \times n)$ -Matrix  $A$  ist der Spann der  $n$  Spaltenvektoren von  $A$ ; in diesem Fall haben die  $m$ -Vektoren  $\mathbf{u}$  die Form  $\mathbf{u} = A\mathbf{x}$  mit beliebigen  $n$ -Vektoren  $\mathbf{x}$ . Offenbar ist die Dimension des Spaltenraums  $\leq \min(m, n)$ . Entsprechend ist der *Zeilenraum* von  $A$  der Spann der  $m$  Zeilenvektoren.

Der *Nullraum* oder *Kern* von  $A$  besteht aus der Menge der Vektoren  $\mathbf{x}$ , für die

$$A\mathbf{x} = 0. \quad (\text{A.2.8})$$

Spalten- und Zeilenraum einer  $(m \times n)$ -Matrix haben die gleiche Dimension. Sie heißt *Rang* der Matrix. Eine  $(m \times n)$ -Matrix hat *vollen Rang*, falls

$$\text{Rang}(A) = \min(m, n), \quad (\text{A.2.9})$$

anderenfalls hat sie *verminderten Rang*. Eine  $(n \times n)$ -Matrix  $A$  mit  $\text{Rang}(A) < n$  heißt *singulär*.

Ein Vektor  $\mathbf{a}$  ist orthogonal zu einem Unterraum  $T$ , wenn er orthogonal zu jedem Vektor  $\mathbf{t} \in T$  ist. (Triviales Beispiel  $\mathbf{t} = t_1\mathbf{e}_1 + t_2\mathbf{e}_2$ ,  $\mathbf{a} = a\mathbf{e}_3$ ,  $\mathbf{a} \cdot \mathbf{t} = 0$ .) Ein Unterraum  $U$  ist orthogonal auf dem Unterraum  $T$ , wenn für jedes Paar von Vektoren  $\mathbf{u} \in U$ ,  $\mathbf{t} \in T$  gilt  $\mathbf{u} \cdot \mathbf{t} = 0$ . Die Menge aller Vektoren  $\mathbf{u} + \mathbf{t}$  bildet einen Vektorraum  $V$ . Er heißt *direkte Summe* von  $T$  und  $U$ :

$$V = T \oplus U. \quad (\text{A.2.10})$$

Für seine Dimension gilt

$$\dim(V) = \dim(T) + \dim(U). \quad (\text{A.2.11})$$

Gilt (A.2.10), so sind  $T$  und  $U$  Unterräume von  $V$ . Sie heißen *orthogonale Komplemente*,  $T = U^\perp$ ,  $U = T^\perp$ . Ist  $T$  ein Unterraum von  $S$ , so existiert stets das orthogonale Komplement  $T^\perp$ , derart daß  $S = T \oplus T^\perp$ . Jeder Vektor  $\mathbf{a} \in S$  kann dann

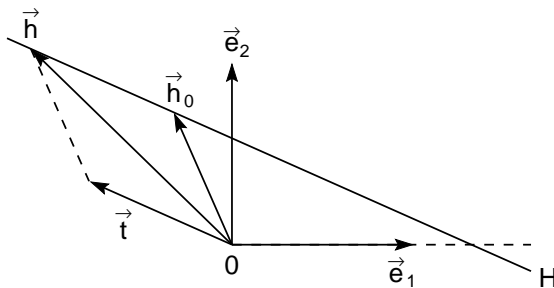


eindeutig in die Form  $\mathbf{a} = \mathbf{t} + \mathbf{u}$  zerlegt werden mit  $\mathbf{t} \in T$  und  $\mathbf{u} \in T^\perp$ . Für die Beträge der Vektoren gilt  $a^2 = t^2 + u^2$ .

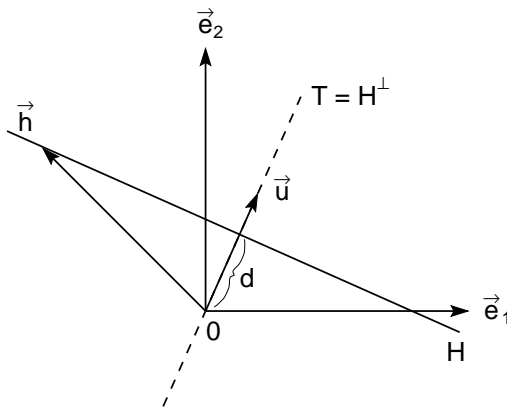
Ist  $T$  ein  $(n-1)$ -dimensionaler Unterraum eines  $n$ -dimensionalen Vektorraumes  $S$  und ist  $\mathbf{s}$  ein fester Vektor in  $S$ , so bildet die Menge aller Vektoren  $\mathbf{h} = \mathbf{s} + \mathbf{t}$  mit  $\mathbf{t} \in T$  eine  $(n-1)$ -dimensionale *Hyperebene*  $H$  in  $S$ . Ist  $H$  gegeben und  $\mathbf{h}_0$  ein beliebiger fester Vektor in  $H$ , so ist  $T$  die Menge aller Vektoren  $\mathbf{t} = \mathbf{h} - \mathbf{h}_0$ ,  $\mathbf{h} \in H$ , Bild A.2. Ist  $\hat{\mathbf{u}}$  ein Einheitsvektor in dem zu  $H$  orthogonalen eindimensionalen Unterraum  $T = H^\perp$ , so hat das Skalarprodukt

$$\hat{\mathbf{u}} \cdot \mathbf{h} = d \quad (\text{A.2.12})$$

den gleichen Wert für alle  $\mathbf{h} \in H$ . Dabei ist  $d$  der Abstand der Hyperebene vom Ursprung 0, Bild A.3.



**Bild A.2:** Hyperebene  $H$  in einem zweidimensionalen Vektorraum.



**Bild A.3:** Hyperebene  $H$  und komplementärer eindimensionaler Vektorraum  $T$ .

Zu gegebenen  $\hat{\mathbf{u}}$  und  $d$  definiert (A.2.12) eine Hyperebene  $H$ . Sie teilt den  $n$ -dimensionalen Vektorraum in zwei *Halbräume*, die aus der Menge der Vektoren  $\mathbf{x}$  bestehen, für die  $\hat{\mathbf{u}} \cdot \mathbf{x} < 0$  bzw.  $\hat{\mathbf{u}} \cdot \mathbf{x} > 0$  gilt.

## A.3 Orthogonale Transformationen

Nach (A.2.6) wird die Abbildung eines  $n$ -Vektors  $\mathbf{a}$  auf einen  $n$ -Vektor  $\mathbf{b}$  durch eine quadratische  $(n \times n)$ -Matrix bewirkt,  $\mathbf{b} = Q\mathbf{a}$ . Bleibt die Länge (A.1.14) des Vektors dabei unverändert, spricht man von einer *orthogonalen Transformation*. Für sie gilt  $b = a$  bzw.  $b^2 = a^2$ , d. h.

$$\mathbf{b}^T \mathbf{b} = \mathbf{a}^T Q^T Q \mathbf{a} = \mathbf{a}^T \mathbf{a},$$

also

$$Q^T Q = I. \quad (\text{A.3.1})$$

Eine quadratische Matrix  $Q$ , die (A.3.1) erfüllt, heißt *orthogonal*.

Es ist anschaulich klar, daß solche Transformationen orthogonal sind, bei denen der transformierte Vektor  $\mathbf{b}$  durch eine räumlich Rotation und/oder Raumspiegelung aus  $\mathbf{a}$  hervorgeht. Wir betrachten einige für die Anwendungen in diesem Anhang wichtige orthogonale Transformationen.

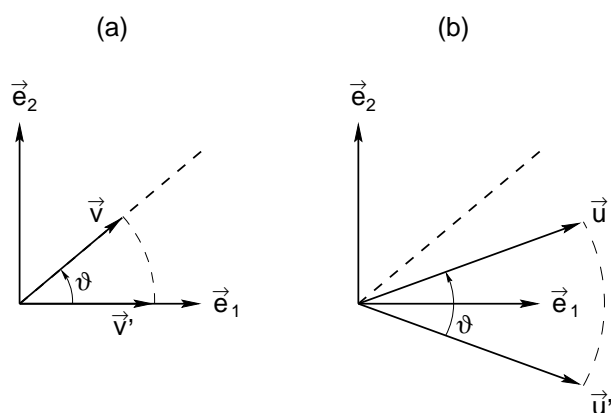
### A.3.1 Givens-Transformation

Die *Givens-Rotation* ist eine Transformation, die nur die Komponenten in einer von zwei orthogonalen Basisvektoren aufgespannten Ebene betrifft. Der Einfachheit halber betrachten wir zunächst nur 2-dimensionale Vektoren.

Ein Vektor  $\mathbf{v}$  läßt sich als

$$\mathbf{v} = \begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \end{pmatrix} = v \begin{pmatrix} c \\ s \end{pmatrix}, \quad c = \cos \vartheta = v_1/v, \quad s = \sin \vartheta = v_2/v, \quad (\text{A.3.2})$$

darstellen. Eine Rotation um den Winkel  $-\vartheta$  führt den Vektor  $\mathbf{v}$  in einen Vektor  $\mathbf{v}' = G\mathbf{v}$  über, dessen 2-Komponente verschwindet, Bild A.4a. Offenbar ist



**Bild A.4:** Anwendung der Givens-Transformation auf den Vektor  $\mathbf{v}$ , durch den sie definiert wird (a) und auf einen beliebigen Vektor  $\mathbf{u}$  (b).

$$G = \begin{pmatrix} c & s \\ -s & c \end{pmatrix}, \quad \mathbf{v}' = G\mathbf{v} = \begin{pmatrix} v \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (\text{A.3.3})$$

Natürlich läßt sich die durch den Vektor  $\mathbf{v}$  definierte Transformation auch auf einen beliebigen anderen Vektor  $\mathbf{u}$  anwenden, Bild A.4b. In  $n$  Dimensionen bewirkt die Givens-Rotation eine Transformation

$$\mathbf{v} \rightarrow \mathbf{v}' = G\mathbf{v},$$

so daß  $v'_k = 0$ . Die Komponenten  $v'_\ell = v_\ell$ ,  $\ell \neq k$ ,  $\ell \neq i$ , bleiben unverändert, und  $v'_i$  wird so berechnet, daß die Länge des Vektors gleich bleibt,  $v' = v$ . Offenbar ist

$$G = \begin{pmatrix} 1 & & & & & & & \\ & \ddots & & & & & & \\ & & 1 & & & & & \\ & & & c & & s & & \\ & & & & 1 & & & \\ & & & & & \ddots & & \\ & & & & & & 1 & \\ & & & -s & & c & & \\ & & & & & & 1 & \\ & & & & & & & \ddots & \\ & & & & & & & & 1 \end{pmatrix} \begin{matrix} \leftarrow 1 \\ \\ \\ \leftarrow i \\ \\ \\ \leftarrow k \\ \\ \leftarrow n \end{matrix}. \quad (\text{A.3.4})$$

In praktischen Anwendungen wird allerdings die volle Matrix nicht benötigt. Die Methode `DatanMatrix.defineGivensTransformation` definiert eine Givens-Transformation über die Eingabe der beiden Komponenten  $v_1, v_2$ , `DatanMatrix.applyGivensTransformation` wendet die so definierte Transformation auf zwei Komponenten eines anderen Vektors an. Die Methode `DatanMatrix.defineAndApplyGivensTransformation` definiert eine Transformation und wendet sie auch unmittelbar auf den definierenden Vektor an.

### A.3.2 Householder-Transformation

Die Givens-Rotation wird dazu benutzt, einen Vektor so zu transformieren, daß eine bestimmte Vektorkomponente verschwindet. Eine allgemeinere Transformation ist die *Householder-Transformation*. Ist

$$\mathbf{v} = \begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \\ \vdots \\ v_n \end{pmatrix} \quad (\text{A.3.5})$$

der ursprüngliche Vektor, so soll für den transformierten Vektor gelten

$$\mathbf{v}' = H\mathbf{v} = \begin{pmatrix} v_1 \\ \vdots \\ v_{p-1} \\ v'_p \\ v_{p+1} \\ \vdots \\ v_{\ell-1} \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (\text{A.3.6})$$

Es sollen also die Komponenten  $v'_\ell, v'_{\ell+1}, \dots, v'_n$  verschwinden. Die übrigen Komponenten sollen (mit Ausnahme von  $v'_p$ ) unverändert bleiben. Die Komponente  $v'_p$  muß so verändert werden, daß  $v = v'$  gilt. Wegen des Satzes von Pythagoras in  $n - \ell + 1$  Dimensionen gilt

$$v_p'^2 = v_H^2 = v_p^2 + \sum_{i=\ell}^n v_i^2$$

oder

$$v'_p = -\sigma v_H = -\sigma \sqrt{v_p^2 + \sum_{i=\ell}^n v_i^2} \quad (\text{A.3.7})$$

mit  $\sigma = \pm 1$ . Wir wählen

$$\sigma = \text{sign}(v_p). \quad (\text{A.3.8})$$

Wir konstruieren jetzt die Matrix  $H$  aus (A.3.6). Dazu zerlegen wir den Vektor  $\mathbf{v}$  in eine Summe

$$\mathbf{v} = \mathbf{v}_H + \mathbf{v}_{H^\perp}, \quad \mathbf{v}_H = \begin{pmatrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \\ v_p \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ v_\ell \\ \vdots \\ v_n \end{pmatrix}, \quad \mathbf{v}_{H^\perp} = \begin{pmatrix} v_1 \\ \vdots \\ v_{p-1} \\ 0 \\ v_{p+1} \\ \vdots \\ v_{\ell-1} \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (\text{A.3.9})$$

Dabei liegt  $\mathbf{v}_H$  in dem Unterraum, der von den Basisvektoren  $\mathbf{e}_p, \mathbf{e}_\ell, \mathbf{e}_{\ell+1}, \dots, \mathbf{e}_n$  aufgespannt wird, und  $\mathbf{v}_{H^\perp}$  in dem zu diesem orthogonalen Unterraum. Wir bilden jetzt

$$\mathbf{u} = \mathbf{v}_H + \sigma v_H \mathbf{e}_p \quad (\text{A.3.10})$$

und

$$H = I_n - \frac{2\mathbf{u}\mathbf{u}^T}{u^2}. \quad (\text{A.3.11})$$

Zerlegen wir nun einen beliebigen Vektor  $\mathbf{a}$  in eine Summe aus Vektoren parallel bzw. senkrecht zu  $\mathbf{u}$ ,

$$\mathbf{a} = \mathbf{a}_{\parallel} + \mathbf{a}_{\perp}$$

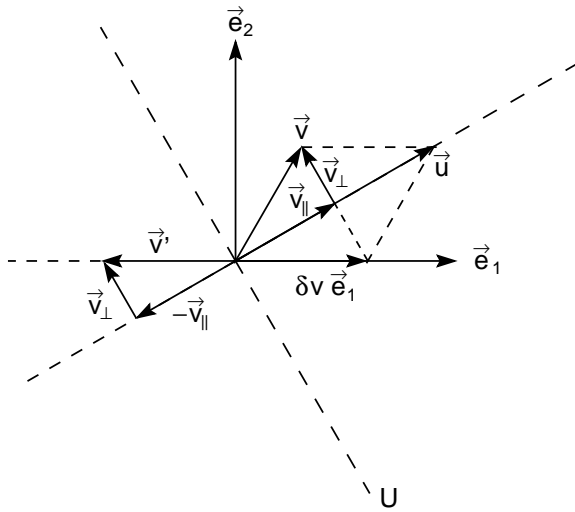
mit

$$\mathbf{a}_{\parallel} = \frac{\mathbf{u}\mathbf{u}^T}{u^2} \mathbf{a} = \frac{\mathbf{u}}{u^2} (\mathbf{u} \cdot \mathbf{a}) = \hat{\mathbf{u}} (\hat{\mathbf{u}} \cdot \mathbf{a}), \quad \mathbf{a}_{\perp} = \mathbf{a} - \mathbf{a}_{\parallel},$$

so gilt

$$\mathbf{a}'_{\parallel} = H\mathbf{a}_{\parallel} = -\mathbf{a}_{\parallel}, \quad \mathbf{a}'_{\perp} = H\mathbf{a}_{\perp} = \mathbf{a}_{\perp}.$$

Damit ist die Transformation als eine Spiegelung an dem Unterraum erkannt, der senkrecht auf dem Vektor  $\mathbf{u}$  steht, Bild A.5. Man kann leicht nachrechnen, daß  $H$  tatsächlich die Transformation (A.3.6) bewirkt.



**Bild A.5:** Der Vektor  $\mathbf{v}$  wird mit einer Householder-Transformation so auf  $\mathbf{v}'$  abgebildet, daß  $v'_2 = 0$ . Die Abbildung entspricht einer Spiegelung an dem Unterraum  $U$ , der senkrecht auf dem Hilfsvektor  $\mathbf{u}$  steht.

Die Transformation ist durch Angabe des Vektors  $\mathbf{u}$  vollständig gekennzeichnet. Nach (A.3.10) gilt für die Komponenten dieses Vektors  $u_p = v_p + \sigma v_H$ ,  $u_\ell = v_\ell$ ,  $u_{\ell+1} = v_{\ell+1}$ , ...,  $u_n = v_n$  und  $u_i = 0$  für alle anderen  $i$ . Sind der Vektor  $\mathbf{v}$  und die Indizes  $p$  und  $\ell$  gegeben, so muß nur  $u_p$  berechnet werden. Die in (A.3.11) auftretende Größe  $u^2$  berechnet sich dann zu

$$\begin{aligned} u^2 &= u_p^2 + \sum_{i=\ell}^n u_i^2 = (v_p + \sigma v_H)^2 + \sum_{i=\ell}^n v_i^2 = v_p^2 + \sum_{i=\ell}^n v_i^2 + v_H^2 + 2\sigma v_H v_p \\ &= 2v_H^2 + 2\sigma v_H v_p = 2v_H(v_H + \sigma v_p) = 2v_H u_p. \end{aligned}$$

Wir können daher (A.3.11) in der Form schreiben

$$H = I_n - b\mathbf{u}\mathbf{u}^T, \quad b = (v_H u_p)^{-1}. \quad (\text{A.3.12})$$

Zur Berechnung eines transformierten Vektors

$$\mathbf{c}' = H\mathbf{c}$$

wird allerdings die Matrix  $H$  nicht explizit benötigt. Es genügt die Kenntnis des Vektors  $\mathbf{u}$  und der Konstanten  $b$ . Da sich aber  $\mathbf{u}$  von  $\mathbf{v}$  nur im Element  $u_p$  (und in den verschwindenden Elementen) unterscheidet, genügt es zunächst, ausgehend von  $\mathbf{v}$ , die Größen  $u_p$  und  $b$  zu berechnen und bei der Anwendung der Transformation zusätzlich die Elemente  $v_\ell, v_{\ell+1}, \dots, v_n$  zu benutzen, die zugleich die entsprechenden Elemente von  $\mathbf{u}$  sind.

Mit der Methode `DatanMatrix.defineHouseholderTransformation` wird eine Transformation definiert; mit `DatanMatrix.applyHouseholderTransformation` wird sie auf einen Vektor angewandt.

### A.3.3 Vorzeicheninversion

Wird in der Einheitsmatrix das Diagonalelement  $I_{ii}$  durch  $-1$  ersetzt, so erhält man eine symmetrische orthogonale Matrix

$$R^{(i)} = \begin{pmatrix} 1 & & & & \\ & \ddots & & & \\ & & -1 & & \\ & & & \ddots & \\ & & & & 1 \end{pmatrix}.$$

Anwendung auf den Vektor  $\mathbf{a}$ ,

$$\mathbf{a}' = R^{(i)}\mathbf{a},$$

kehrt das Vorzeichen des Elements  $a_i$  um und läßt alle anderen Elemente ungeändert. Offenbar ist  $R^{(i)}$  eine Householdermatrix, die die Spiegelung an dem Unterraum bewirkt, der orthogonal auf dem Basisvektor  $\mathbf{e}_i$  steht. Das sieht man sofort durch Einsetzen von  $\mathbf{u} = \mathbf{e}_i$  in (A.3.11).

### A.3.4 Permutations-Transformation

Die  $(n \times n)$ -Einheitsmatrix (A.1.10) läßt sich einfach als Anordnung der Basisvektoren (A.2.3) in einer quadratischen Matrix schreiben,

$$I_n = (\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \dots, \mathbf{e}_n) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 1 & \dots & 0 \\ \vdots & & & \\ 0 & 0 & \dots & 1 \end{pmatrix}.$$

Sie ist offenbar orthogonal. Die orthogonale Transformation  $I\mathbf{a} = \mathbf{a}$  läßt den Vektor  $\mathbf{a}$  unverändert. Vertauschen wir jetzt zwei der Basisvektoren  $\mathbf{e}_i$  und  $\mathbf{e}_k$ , so erhalten wir die symmetrische orthogonale Matrix  $P^{ik}$ . Als Beispiel geben wir sie für  $n = 4$ ,  $i = 2, k = 4$  an:

$$P^{(ik)} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Die Transformation  $\mathbf{a}' = P^{(ik)}\mathbf{a}$  bewirkt eine Vertauschung der Elemente  $a_i$  und  $a_k$ . Alle anderen Elemente bleiben unverändert,

$$\mathbf{a} = \begin{pmatrix} a_1 \\ \vdots \\ a_i \\ \vdots \\ a_k \\ \vdots \\ a_n \end{pmatrix}, \quad \mathbf{a}' = P^{(ik)}\mathbf{a} = \begin{pmatrix} a_1 \\ \vdots \\ a_k \\ \vdots \\ a_i \\ \vdots \\ a_n \end{pmatrix}.$$

Multiplikation einer  $(n \times m)$ -Matrix  $A$  von links mit  $P^{(ik)}$  vertauscht die Zeilen  $i$  und  $k$  von  $A$ . Multiplikation einer  $(m \times n)$ -Matrix  $A$  von rechts vertauscht die Spalten  $i$  und  $k$ . Ist  $D$  eine  $(n \times n)$ -Diagonalmatrix, so werden durch die Operation

$$D' = P^{(ik)} D P^{(ik)}$$

die Elemente  $D_{ii}$  und  $D_{kk}$  vertauscht.

## A.4 Determinanten

Jeder  $(n \times n)$ -Matrix  $A$  kann eine Zahl zugeordnet werden, ihre *Determinante*  $\det A$ . Eine Determinante wird wie die zugehörige Matrix als quadratische Anordnung der Matricelemente geschrieben, die allerdings von senkrechten Strichen eingefaßt ist. Determinanten der Ordnung 2 und 3 sind durch

$$\det A = \begin{vmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{vmatrix} = A_{11}A_{22} - A_{12}A_{21} \quad (\text{A.4.1})$$

und

$$\det A = \begin{vmatrix} A_{11} & A_{12} & A_{13} \\ A_{21} & A_{22} & A_{23} \\ A_{31} & A_{32} & A_{33} \end{vmatrix} = \begin{matrix} A_{11}A_{22}A_{33} & - & A_{11}A_{23}A_{32} \\ + & A_{12}A_{23}A_{31} & - & A_{12}A_{21}A_{33} \\ + & A_{13}A_{21}A_{32} & - & A_{13}A_{22}A_{31} \end{matrix} \quad (\text{A.4.2})$$

oder, anders zusammengefaßt,

$$\det A = \begin{matrix} A_{11}(A_{22}A_{33} - A_{23}A_{32}) \\ - A_{12}(A_{21}A_{33} - A_{23}A_{31}) \\ + A_{13}(A_{21}A_{32} - A_{22}A_{31}) \end{matrix} \quad (\text{A.4.3})$$

definiert. Eine allgemeine Determinante der Ordnung  $n$  wird in der Form

$$\det A = \begin{vmatrix} A_{11} & A_{12} & \dots & A_{1n} \\ A_{21} & A_{22} & \dots & A_{2n} \\ \vdots & & & \\ A_{n1} & A_{n2} & \dots & A_{nn} \end{vmatrix} \quad (\text{A.4.4})$$

geschrieben.

Der *Kofaktor*  $A_{ij}^\dagger$  des Elementes  $A_{ij}$  einer Matrix ist eine Determinante der Ordnung  $(n-1)$ , die zu einer Matrix gehört, welche man durch Löschen der  $i$ -ten Zeile und  $j$ -ten Spalte der ursprünglichen Matrix erhält, und die noch mit dem Vorzeichen  $(-1)^{i+j}$  multipliziert wird,

$$A_{ij}^\dagger = (-1)^{i+j} \begin{vmatrix} A_{11} & A_{12} & \dots & A_{1,j-1} & A_{1,j+1} & \dots & A_{1n} \\ A_{21} & A_{22} & \dots & A_{2,j-1} & A_{2,j+1} & \dots & A_{2n} \\ \vdots & & & & & & \\ A_{i-1,1} & A_{i-1,2} & \dots & A_{i-1,j-1} & A_{i-1,j+1} & \dots & A_{i-1,n} \\ A_{i+1,1} & A_{i+1,2} & \dots & A_{i+1,j-1} & A_{i+1,j+1} & \dots & A_{i+1,n} \\ \vdots & & & & & & \\ A_{n1} & A_{n2} & \dots & A_{n,j-1} & A_{n,j+1} & \dots & A_{nn} \end{vmatrix}. \quad (\text{A.4.5})$$

Determinanten höherer Ordnung können als Summe aller Elemente irgendeiner Zeile oder Spalte, die mit ihren Kofaktoren multipliziert sind, geschrieben werden,

$$\det A = \sum_{k=1}^n A_{ik} A_{ik}^\dagger = \sum_{k=1}^n A_{kj} A_{kj}^\dagger. \quad (\text{A.4.6})$$

Man kann leicht zeigen, daß das Ergebnis unabhängig von der Wahl einer bestimmten Zeile  $i$  oder Spalte  $j$  ist. Die Gl. (A.4.3) zeigt schon die Richtigkeit von (A.4.6)



für  $n = 3$ . Determinanten beliebiger Ordnung können berechnet werden, indem man sie nach Kofaktoren zerlegt und so zum Beispiel bis auf die zweite Ordnung zurückführt. Eine singuläre Matrix, d. h. eine quadratische Matrix, deren Zeilen- bzw. Spaltenvektoren nicht linear unabhängig sind, hat die *Determinante Null*.

Aus  $A$  können wir eine weitere Matrix konstruieren, indem wir jedes Element  $ij$  durch den Kofaktor des Elements  $ji$  ersetzen. Auf diese Weise erhalten wir die *adjungierte Matrix* von  $A$ ,

$$A^\dagger = \begin{pmatrix} A_{11}^\dagger & A_{21}^\dagger & \cdots & A_{n1}^\dagger \\ A_{12}^\dagger & A_{22}^\dagger & \cdots & A_{n2}^\dagger \\ \vdots & & & \\ A_{1n}^\dagger & A_{2n}^\dagger & \cdots & A_{nn}^\dagger \end{pmatrix}. \quad (\text{A.4.7})$$

Für Determinanten gelten die Rechenregeln

$$\det A = \det A^T, \quad (\text{A.4.8})$$

$$\det AB = \det A \det B. \quad (\text{A.4.9})$$

Für eine orthogonale Matrix  $Q$  gilt  $Q Q^T = I$ , also

$$\det I = 1 = \det Q \det Q$$

und damit

$$\det Q = \pm 1. \quad (\text{A.4.10})$$

## A.5 Matrixgleichungen. Kleinste Quadrate

Ein System aus  $m$  linearen Gleichungen mit  $n$  Unbekannten  $x_1, x_2, \dots, x_n$  hat die allgemeine Form

$$\begin{aligned} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \cdots + a_{1n}x_n - b_1 &= 0, \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \cdots + a_{2n}x_n - b_2 &= 0, \\ \vdots & \\ a_{m1}x_1 + a_{m2}x_2 + \cdots + a_{mn}x_n - b_m &= 0 \end{aligned} \quad (\text{A.5.1})$$

oder in Matrixschreibweise

$$\mathbf{Ax} - \mathbf{b} = 0. \quad (\text{A.5.2})$$

Bei der Suche nach Lösungen  $\mathbf{x}$  dieser Gleichung müssen wir verschiedene Fälle unterscheiden, die sich durch Angabe von  $m, n$  und

$$k = \text{Rang}(A)$$

kennzeichnen lassen.

Der Vektor  $A\mathbf{x}$  liegt im Spaltenraum von  $A$ , der  $k$  Dimensionen besitzt. Da  $\mathbf{b}$  ein  $m$ -Vektor ist, kann die Gleichung im allgemeinen nur erfüllt sein, wenn  $k = m$  ist, also für  $k = n = m$  und für  $k = m < n$ , da ja  $k \leq \min(m, n)$ . Für  $k = n = m$  liegen  $n$  unabhängige Gleichungen (A.5.1) mit  $n$  Unbekannten vor, die eine *eindeutige Lösung* haben. Ist  $k = m < n$ , so gibt es beliebig viele  $n$ -Vektoren  $\mathbf{x}$ , die auf den  $m$ -Vektor  $A\mathbf{x} = \mathbf{b}$  abgebildet werden können, so daß (A.5.2) erfüllt ist. Das Gleichungssystem ist *unterbestimmt*. Die Lösung ist nicht eindeutig.

Für  $k = \text{Rang}(A) \neq m$  gibt es im allgemeinen keine Lösung von (A.5.2). Wir suchen dann einen solchen Vektor  $\tilde{\mathbf{x}}$ , für den die linke Seite von (A.5.2) ein Vektor minimaler Euklidischer Länge ist, ersetzen also (A.5.2) durch

$$r^2 = (A\mathbf{x} - \mathbf{b})^2 = \min, \quad (\text{A.5.3})$$

d. h. wir suchen einen Vektor  $\tilde{\mathbf{x}}$ , dessen Abbildung  $A\tilde{\mathbf{x}}$  sich möglichst wenig von  $\mathbf{b}$  unterscheidet.

Nur für  $k = \text{Rang}(A) = n$  gibt es zu gegebenem  $m$ -Vektor  $\mathbf{c}$  nur einen  $n$ -Vektor  $\mathbf{x}$ , so daß  $A\mathbf{x} = \mathbf{c}$ . Also gibt es nur für  $k = n$  eine eindeutige Lösung  $\tilde{\mathbf{x}}$ . Damit existiert für  $\text{Rang}(A) = n$  und  $m \geq n$  eine *eindeutige Lösung*  $\tilde{\mathbf{x}}$  von (A.5.3). Für  $n = m$  ist  $r = 0$ .

Die Beziehung (A.5.3) wird oft auch einfach in der Form

$$A\mathbf{x} - \mathbf{b} \approx 0 \quad (\text{A.5.4})$$

oder gar, nicht ganz korrekt, in der Form (A.5.2) geschrieben. Man bezeichnet den Lösungsvektor  $\tilde{\mathbf{x}}$  als *Lösung von (A.5.4) nach kleinsten Quadraten*. In der Tafel A.1 sind noch einmal die verschiedenen Fälle aufgelistet, die sich aus unterschiedlichen Relationen von  $m$ ,  $n$  und  $k$  ergeben.

**Tafel A.1:** Lösungsverhalten von (A.5.3) für verschiedene Fälle. Es sind  $m$  die Zeilenzahl,  $n$  die Spaltenzahl und  $k$  der Rang der Matrix  $A$ .

Fall		$\text{Rang}(A)$	Residuum	Lösung eindeutig
1a	$m = n$	$k = n$	$r = 0$	ja
1b		$k < n$	$r \geq 0$	nein
2a	$m > n$	$k = n$	$r \geq 0$	ja
2b		$k < n$	$r \geq 0$	nein
3a	$m < n$	$k = m$	$r = 0$	nein
3b		$k < m$	$r \geq 0$	nein

Wir wollen jetzt die Feststellungen dieses Abschnitts im Hinblick auf die Lösung von (A.5.4) stärker formalisieren.

**Satz über die orthogonale Zerlegung einer Matrix:** Jede  $(m \times n)$ -Matrix  $A$  vom Rang  $k$  kann mit Hilfe einer orthogonalen  $(m \times m)$ -Matrix  $H$  und einer orthogonalen  $(n \times n)$ -Matrix  $K$  in der Form

$$A = H R K^T \quad (\text{A.5.5})$$

geschrieben werden. Dabei ist  $R$  eine  $(m \times n)$ -Matrix der Form

$$R = \begin{pmatrix} R_{11} & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (\text{A.5.6})$$

und  $R_{11}$  eine  $(k \times k)$ -Matrix vom Rang  $k$ .

Einsetzen von (A.5.5) in (A.5.4) und Multiplikation von links mit  $H^T$  führt auf

$$R K^T \mathbf{x} \approx H^T \mathbf{b}. \quad (\text{A.5.7})$$

Wir definieren

$$H^T \mathbf{b} = \mathbf{g} = \begin{pmatrix} \mathbf{g}_1 \\ \mathbf{g}_2 \end{pmatrix} \begin{matrix} \} k \\ \} m - k \end{matrix} \quad (\text{A.5.8})$$

und

$$K^T \mathbf{x} = \mathbf{p} = \begin{pmatrix} \mathbf{p}_1 \\ \mathbf{p}_2 \end{pmatrix} \begin{matrix} \} k \\ \} n - k \end{matrix}, \quad (\text{A.5.9})$$

so daß (A.5.7) die Form

$$R \mathbf{p} \approx \mathbf{g} \quad (\text{A.5.10})$$

annimmt. Sie zerfällt wegen (A.5.6) in die beiden unabhängigen Beziehungen

$$R_{11} \mathbf{p}_1 = \mathbf{g}_1 \quad (\text{A.5.11})$$

und

$$0 \cdot \mathbf{p}_2 \approx \mathbf{g}_2. \quad (\text{A.5.12})$$

Falls  $m = k$  und/oder  $n = k$ , so fehlen die entsprechenden unteren Teilvektoren in (A.5.8) und/oder (A.5.9) und die entsprechenden Untermatrizen in (A.5.6). Da in (A.5.11)  $R_{11}$  eine  $(k \times k)$ -Matrix vom Rang  $k$  und  $\mathbf{p}_1$  und  $\mathbf{g}_1$   $k$ -Vektoren sind, gibt es einen Lösungsvektor  $\tilde{\mathbf{p}}_1$ , der das Gleichheitszeichen erfüllt. Wegen der Nullmatrix auf der linken Seite von (A.5.12) läßt sich aus dieser Beziehung keine Aussage über  $\mathbf{p}_2$  gewinnen.

**Satz über die Lösungen von  $A \mathbf{x} \approx \mathbf{b}$ :** Ist  $\tilde{\mathbf{p}}_1$  der eindeutige Lösungsvektor von (A.5.11), so gilt

(i) Alle Lösungen von (A.5.3) haben die Form

$$\hat{\mathbf{x}} = K \begin{pmatrix} \tilde{\mathbf{p}}_1 \\ \tilde{\mathbf{p}}_2 \end{pmatrix}. \quad (\text{A.5.13})$$

Dabei ist  $\tilde{\mathbf{p}}_2$  ein beliebiger  $(n - k)$ -Vektor, d. h. die Lösung ist eindeutig für  $k = n$ . Allerdings gibt es immer eine *eindeutige Lösung minimalen Betrages*

$$\tilde{\mathbf{x}} = K \begin{pmatrix} \tilde{\mathbf{p}}_1 \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (\text{A.5.14})$$

(ii) Alle Lösungen  $\hat{\mathbf{x}}$  haben den gleichen Residuen-Vektor

$$\mathbf{r} = \mathbf{b} - A\hat{\mathbf{x}} = H \begin{pmatrix} 0 \\ \mathbf{g}_2 \end{pmatrix} \quad (\text{A.5.15})$$

vom Betrag  $r = g_2 = |\mathbf{g}_2|$ . Das Residuum verschwindet für  $k = m$ .

Die Aufgabe  $A\mathbf{x} \approx \mathbf{b}$  sollte immer mit Hilfe orthogonaler Zerlegungen, am besten mit der Singulärwertzerlegung und Singulärwertanalyse, bearbeitet werden, vgl. Abschnitte A.12 und A.13. Die Ergebnisse sind numerisch mindestens so genau wie die mit anderen Methoden gewonnenen, oft aber genauer, vgl. Abschnitt A.13, Beispiel A.4.

Wir geben trotzdem auch noch kurz die Methode der *Normalgleichungen* an. Sie ist im Vergleich zur orthogonalen Zerlegung sehr durchsichtig und fehlt daher in keinem Lehrbuch.

Wir betrachten das Quadrat (A.5.3) des Residuenvektors,

$$\begin{aligned} r^2 &= (A\mathbf{x} - \mathbf{b})^T (A\mathbf{x} - \mathbf{b}) = \mathbf{x}^T A^T A \mathbf{x} - 2\mathbf{b}^T A \mathbf{x} + \mathbf{b}^T \mathbf{b} \\ &= \sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^n \sum_{l=1}^n A_{ij} A_{il} x_j x_l - 2 \sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^n b_i A_{ij} x_j + \sum_{i=1}^m b_i^2. \end{aligned}$$

Die Forderung  $r^2 = \min$  führt auf

$$\frac{\partial r^2}{\partial x_k} = 2 \sum_{i=1}^m \sum_{l=1}^n A_{ik} A_{il} x_l - 2 \sum_{i=1}^m b_i A_{ik} = 0, \quad k = 1, \dots, n.$$

Diese  $n$  linearen Gleichungen heißen Normalgleichungen. Sie können zu einer Matrixgleichung zusammengefaßt werden,

$$A^T A \mathbf{x} = A^T \mathbf{b}. \quad (\text{A.5.16})$$

Es handelt sich um ein System von  $n$  Gleichungen mit  $n$  Unbekannten. Sind die Gleichungen linear unabhängig, so hat die  $(n \times n)$ -Matrix  $(A^T A)$  den vollen Rang  $n$ ,

sie ist nicht singulär. Nach Abschnitt A.6 existiert dann die Inverse  $(A^T A)^{-1}$ , so daß  $(A^T A)^{-1}(A^T A) = I$ . Damit ist

$$\tilde{\mathbf{x}} = (A^T A)^{-1} A^T \mathbf{b} \quad (\text{A.5.17})$$

die gesuchte Lösung von (A.5.3). Diese einfache Vorschrift wird jedoch nutzlos, wenn  $A^T A$  singulär oder nahezu singulär wird, vgl. Beispiel A.4 im Abschnitt A.13.

## A.6 Inverse Matrix

Zu jeder nichtsingulären  $(n \times n)$ -Matrix  $A$  ist die *inverse Matrix*  $A^{-1}$  durch

$$A A^{-1} = I_n = A^{-1} A \quad (\text{A.6.1})$$

definiert. Sie ist ebenfalls eine  $(n \times n)$ -Matrix.

Ist  $A^{-1}$  bekannt, so ist die Lösung der Matrixgleichung

$$A\mathbf{x} = \mathbf{b} \quad (\text{A.6.2})$$

einfach durch

$$\mathbf{x} = A^{-1}\mathbf{b} \quad (\text{A.6.3})$$

gegeben. Wie wir zeigen werden, existiert allerdings  $A^{-1}$  nur für nichtsinguläre quadratische Matrizen, so daß (A.6.3) nur den Fall 1a der Tafel A.1 löst.

Um  $A^{-1}$  zu bestimmen, setzen wir  $A^{-1} = X$  und bezeichnen die Spaltenvektoren von  $X$  mit  $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_n$ . Damit zerfällt (A.6.1) in  $n$  Gleichungen,

$$A\mathbf{x}_i = \mathbf{e}_i, \quad i = 1, 2, \dots, n. \quad (\text{A.6.4})$$

Die rechten Seiten sind die Basisvektoren (A.2.3). Für den Fall  $n = 2$  schreiben wir das System (A.6.4) auf verschiedene äquivalente Weisen, nämlich

$$\begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} X_{11} \\ X_{21} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} X_{12} \\ X_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (\text{A.6.5})$$

bzw.

$$\begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} X_{11} & X_{12} \\ X_{21} & X_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

oder als System von 4 Gleichungen mit 4 Unbekannten,

$$\begin{aligned} A_{11}X_{11} + A_{12}X_{21} &= 1, \\ A_{21}X_{11} + A_{22}X_{21} &= 0, \\ A_{11}X_{12} + A_{12}X_{22} &= 0, \\ A_{21}X_{12} + A_{22}X_{22} &= 1. \end{aligned} \quad (\text{A.6.6})$$

Durch Elimination und Substitution finden wir leicht

$$\begin{aligned} X_{11} &= \frac{A_{22}}{A_{11}A_{22} - A_{12}A_{21}}, \\ X_{12} &= \frac{-A_{12}}{A_{11}A_{22} - A_{12}A_{21}}, \\ X_{21} &= \frac{-A_{21}}{A_{11}A_{22} - A_{12}A_{21}}, \\ X_{22} &= \frac{A_{11}}{A_{11}A_{22} - A_{12}A_{21}} \end{aligned} \quad (\text{A.6.7})$$

oder — in Matrixschreibweise —

$$X = A^{-1} = \frac{1}{\det A} \begin{pmatrix} A_{22} & -A_{12} \\ -A_{21} & A_{11} \end{pmatrix}. \quad (\text{A.6.8})$$

Die Matrix auf der rechten Seite ist die Adjungierte der ursprünglichen Matrix, d. h.

$$A^{-1} = \frac{A^\dagger}{\det A}. \quad (\text{A.6.9})$$

Man kann zeigen, daß diese Beziehung für quadratische Matrizen beliebiger Ordnung gilt. Aus (A.6.9) ist offensichtlich, daß die Inverse einer singulären Matrix, d. h. einer Matrix mit verschwindender Determinante, unbestimmt ist.

Tatsächlich wird in der Praxis die inverse Matrix nicht aus (A.6.9) berechnet, sondern wie in unserem Beispiel der  $(2 \times 2)$ -Matrix durch Elimination und Substitution aus dem System (A.6.4). Es besteht aus  $n$  Sätzen der Form

$$A\mathbf{x} = \mathbf{b} \quad (\text{A.6.10})$$

von jeweils  $n$  Gleichungen mit  $n$  Unbekannten. Dabei ist  $A$  eine nichtsinguläre  $(n \times n)$ -Matrix. Wir geben daher zunächst Lösungsalgorithmen von (A.6.10) für quadratische nichtsinguläre  $A$  an, werden aber später diese Einschränkung an  $A$  fallen lassen.

## A.7 Gaußscher Algorithmus

Wir schreiben (A.6.10) für eine  $(n \times n)$ -Matrix  $A$  in Komponenten,

$$\begin{aligned} A_{11}x_1 + A_{12}x_2 + \cdots + A_{1n}x_n &= b_1, \\ A_{21}x_1 + A_{22}x_2 + \cdots + A_{2n}x_n &= b_2, \\ \vdots & \\ A_{n1}x_1 + A_{n2}x_2 + \cdots + A_{nn}x_n &= b_n, \end{aligned} \quad (\text{A.7.1})$$

und lösen das System nach dem *Gaußschen Algorithmus*. Dazu definieren wir  $n - 1$  Multiplikatoren

$$m_{i1} = \frac{A_{i1}}{A_{11}}, \quad i = 2, 3, \dots, n, \quad (\text{A.7.2})$$

multiplizieren die erste Gleichung mit  $m_{21}$  und subtrahieren sie von der zweiten, multiplizieren dann die erste Gleichung mit  $m_{31}$  und subtrahieren sie von der dritten usw. Wir erhalten das System

$$\begin{aligned} A_{11}^{(1)}x_1 + A_{12}^{(1)}x_2 + \dots + A_{1n}^{(1)}x_n &= b_1^{(1)}, \\ A_{22}^{(2)}x_2 + \dots + A_{2n}^{(2)}x_n &= b_2^{(2)}, \\ &\vdots \\ A_{nn}^{(n)}x_n &= b_n^{(n)}, \end{aligned} \quad (\text{A.7.3})$$

in welchem die Unbekannte  $x_1$  aus allen Gleichungen, außer der ersten, verschwunden ist. Die Koeffizienten  $A_{ij}^{(2)}, b_i^{(2)}$  sind durch

$$A_{ij}^{(2)} = A_{ij}^{(1)} - m_{i1}A_{1j}^{(1)}, \quad b_i^{(2)} = b_i^{(1)} - m_{i1}b_1^{(1)}$$

gegeben. Das Verfahren wird nun mit den letzten  $n - 1$  Gleichungen wiederholt, indem man

$$m_{i2} = \frac{A_{i2}^{(2)}}{A_{22}^{(2)}}, \quad i = 3, 4, \dots, n,$$

definiert, die zweite Gleichung des Systems (A.7.3) mit dem entsprechenden  $m_{i2}$  multipliziert und sie dann von der dritten, vierten, ...,  $n$ -ten Gleichung subtrahiert. Im  $k$ -ten Schritt des Verfahrens werden die Multiplikatoren

$$m_{ik} = \frac{A_{ik}^{(k)}}{A_{kk}^{(k)}}, \quad i = k + 1, k + 2, \dots, n, \quad (\text{A.7.4})$$

benutzt und die neuen Koeffizienten

$$A_{ij}^{(k+1)} = A_{ij}^{(k)} - m_{ik}A_{kj}^{(k)}, \quad b_i^{(k+1)} = b_i^{(k)} - m_{ik}b_k^{(k)} \quad (\text{A.7.5})$$

berechnet. Nach  $n - 1$  Schritten hat man das folgende *gestaffelte Gleichungssystem* hergestellt:

$$\begin{aligned} A_{11}^{(1)}x_1 + A_{12}^{(1)}x_2 + \dots + A_{1n}^{(1)}x_n &= b_1^{(1)}, \\ A_{22}^{(2)}x_2 + \dots + A_{2n}^{(2)}x_n &= b_2^{(2)}, \\ &\vdots \\ A_{nn}^{(n)}x_n &= b_n^{(n)}. \end{aligned} \quad (\text{A.7.6})$$

Die letzte Gleichung enthält nur noch  $x_n$ . Durch Einsetzen in die nächsthöhere Gleichung erhält man  $x_{n-1}$ , im allgemeinen also

$$x_i = \frac{1}{A_{ii}^{(i)}} \left\{ b_i^{(i)} - \sum_{\ell=i+1}^n A_{i\ell}^{(i)} x_\ell \right\}, \quad i = n, n-1, \dots, 1. \quad (\text{A.7.7})$$

Man sollte beachten, daß die Veränderung der Elemente der Matrix  $A$  nicht von der rechten Seite  $\mathbf{b}$  abhängt. Man kann also mehrere Systeme mit verschiedenen rechten Seiten gleichzeitig reduzieren, d. h., anstelle von  $A\mathbf{x} = \mathbf{b}$  kann man sozusagen in einem Zuge das allgemeinere System

$$A X = B \quad (\text{A.7.8})$$

lösen.

**Beispiel A.1:** Inversion einer  $(3 \times 3)$ -Matrix

Als Zahlenbeispiel betrachten wir die Inversion einer  $(3 \times 3)$ -Matrix, d. h.  $B = I$ . Die einzelnen Rechnungen für das Beispiel

$$\begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 2 & 1 & -2 \\ 1 & 1 & 2 \end{pmatrix} X = I$$

sind in Tafel A.2 ausgeführt. Das Ergebnis ist

$$X = \frac{1}{5} \begin{pmatrix} -4 & 1 & 7 \\ 6 & 1 & -8 \\ -1 & -1 & 3 \end{pmatrix}. \blacksquare$$

Verfolgt man die einzelnen Schritte der Rechnung so sieht man, daß an zwei Stellen Divisionen durchgeführt werden, nämlich in den Gleichungen (A.7.4) und (A.7.7). Der Divisor ist in beiden Fällen ein Koeffizient

$$A_{ii}^{(i)}, \quad i = 1, 2, \dots, n-1,$$

d. h. der obere linke Koeffizient des Systems, der sogenannte *Pivot* (Angelpunkt) für den Schritt  $i-1$  des Reduktionsprozesses. Unser Verfahren versagt, wenn dieser Koeffizient gleich Null ist. In einem solchen Fall kann man einfach die  $i$ -te Zeile des Systems mit irgend einer unteren Zeile vertauschen, deren erster Koeffizient von Null verschieden ist. Das Gleichungssystem selbst wird natürlich durch den Austausch zweier Gleichungen nicht verändert. Das Verfahren versagt dann nur noch, wenn alle Koeffizienten einer Spalte gleichzeitig verschwinden. In diesem Fall ist jedoch die Matrix  $A$  singulär, und es existiert keine Lösung. In der Praxis (zumindest bei Benutzung von Rechenanlagen, wo die zusätzliche Arbeit vernachlässigbar ist) ist es vorteilhaft, einen solchen Austausch der Gleichungen immer dann durchzuführen, wenn der Pivot nicht der größte Koeffizient (dem Betrage nach) in der ersten Spalte des reduzierten Systems ist. Man hat es dann immer mit dem zahlenmäßig



**Tafel A.2:** Anwendung des Gaußschen Algorithmus auf Beispiel A.1.

Reduktion							
	Matrix $A$			Matrix $B$			Multiplikator
Schritt 0	1	2	3	1	0	0	—
	2	1	−2	0	1	0	2
	1	1	2	0	0	1	1
Schritt 1		−3	−8	−2	1	0	—
		−1	−1	−1	0	1	$\frac{1}{3}$
Schritt 2			$\frac{5}{3}$	$-\frac{1}{3}$	$-\frac{1}{3}$	1	—

## Wiedereinsetzen

$j = 1$	
$x_{3j}$	$-\frac{1}{5}$
$x_{2j}$	$-\frac{1}{3}(-2 - 8 \times \frac{1}{5}) = \frac{6}{5}$
$x_{1j}$	$1 - 2 \times \frac{6}{5} + 3 \times \frac{1}{5} = -\frac{4}{5}$
$j = 2$	
$x_{3j}$	$-\frac{1}{5}$
$x_{2j}$	$-\frac{1}{3}(1 - \frac{8}{5}) = \frac{1}{5}$
$x_{1j}$	$-2 \times \frac{1}{5} + 3 \times \frac{1}{5} = \frac{1}{5}$
$j = 3$	
$x_{3j}$	$\frac{3}{5}$
$x_{2j}$	$-\frac{1}{3}(0 + 8 \times \frac{3}{5}) = -\frac{8}{5}$
$x_{1j}$	$2 \times \frac{8}{5} - 3 \times \frac{3}{5} = \frac{7}{5}$

größtmöglichen Nenner zu tun. Auf diese Weise werden Rundungsfehler besonders klein gehalten. Das Verfahren heißt *Gaußscher Algorithmus mit Pivotisierung*.

Nach diesem Verfahren löst die Methode `DatanMatrix.matrixEquation` die Gleichung A.7.8. Auf die gleiche Weise bestimmt die Methode `DatanMatrix.inverse` die inverse einer quadratischen, nichtsingulären Matrix.

## A.8 LR-Zerlegung

Für die durch den Gaußschen Algorithmus transformierten Elemente  $A_{ij}^{(k)}$ , vgl. (A.7.6), gilt oberhalb und auf der Hauptdiagonalen

$$A_{ij}^{(n)} = A_{ij}^{(n-1)} = \dots = A_{ij}^{(i)}, \quad i \leq j, \quad (\text{A.8.1})$$

und unterhalb

$$A_{ij}^{(n)} = A_{ij}^{(n-1)} = \dots = A_{ij}^{(j+1)} = 0, \quad i > j. \quad (\text{A.8.2})$$

Die Transformation (A.7.5) wird also nur für  $k = 1, 2, \dots, r$  durchgeführt mit  $r = \min(i-1, j)$ ,

$$A_{ij}^{(k+1)} = A_{ij}^{(k)} - m_{ik} A_{kj}^{(k)}. \quad (\text{A.8.3})$$

Summation über  $k$  ergibt

$$\sum_{k=1}^r A_{ij}^{(k+1)} - \sum_{k=1}^r A_{ij}^{(k)} = A_{ij}^{(r+1)} - A_{ij} = - \sum_{k=1}^r m_{ik} A_{kj}^{(k)}.$$

Damit lassen sich die Elemente  $A_{ij}^{(1)} = A_{ij}$  der ursprünglichen Matrix  $A$  in der Form

$$\begin{aligned} A_{ij} &= A_{ij}^{(i)} + \sum_{k=1}^{i-1} m_{ik} A_{kj}^{(k)}, \quad i \leq j, \\ A_{ij} &= 0 + \sum_{k=1}^j m_{ik} A_{kj}^{(k)}, \quad i > j, \end{aligned} \quad (\text{A.8.4})$$

schreiben. Beachten wir, daß die Multiplikatoren  $m_{ik}$  bisher nur für  $i > k$  definiert wurden, so können wir noch

$$m_{ii} = 1, \quad i = 1, 2, \dots, n,$$

setzen und die beiden Beziehungen (A.8.4) zu einer zusammenfassen,

$$A_{ij} = \sum_{k=1}^p m_{ik} A_{kj}^{(k)}, \quad 1 \leq i, j \leq n, \quad p = \min(i, j).$$

Die Gleichung zeigt direkt, daß die Matrix  $A$  sich als Produkt zweier Matrizen  $L$  und  $R$  darstellen läßt. Dabei ist  $L$  eine untere und  $R$  eine obere Dreiecksmatrix:

$$A = L R, \quad (\text{A.8.5})$$

$$L = \begin{pmatrix} m_{11} & & & \\ m_{21} & m_{22} & & \\ \vdots & & \ddots & \\ m_{n1} & m_{n2} & \dots & m_{nn} \end{pmatrix}, \quad m_{ii} = 1,$$

$$R = \begin{pmatrix} r_{11} & r_{12} & \dots & r_{1n} \\ & r_{22} & \dots & r_{2n} \\ & & \ddots & \\ & & & r_{nn} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A_{11}^{(1)} & A_{12}^{(1)} & \dots & A_{1n}^{(1)} \\ & A_{22}^{(2)} & \dots & A_{2n}^{(2)} \\ & & \ddots & \\ & & & A_{nn}^{(n)} \end{pmatrix}.$$

Das ursprüngliche Gleichungssystem (A.6.10)

$$A \mathbf{x} = L R \mathbf{x} = \mathbf{b}$$

ist damit äquivalent zu zwei gestaffelten Gleichungssystemen

$$L \mathbf{y} = \mathbf{b}, \quad R \mathbf{x} = \mathbf{y}.$$

Statt auf die Formeln des Abschnitts A.7 zurückzugreifen, können wir die Elemente von  $L$  und  $R$  direkt aus (A.8.5) berechnen. Wir erhalten die Vorschrift

$$\left. \begin{aligned} r_{kj} &= A_{kj} - \sum_{\ell=1}^{k-1} m_{k\ell} r_{\ell j}, \quad j = k, k+1, \dots, n \\ m_{ik} &= \left( A_{ik} - \sum_{\ell=1}^{k-1} m_{i\ell} r_{\ell k} \right) / r_{kk}, \quad i = k+1, \dots, n \end{aligned} \right\} k = 1, \dots, n, \quad (\text{A.8.6})$$

d. h. für  $k = 1$  berechnet man die erste Zeile von  $R$  (die gleich der ersten Zeile von  $A$ ) ist und die erste Spalte von  $L$ , für  $k = 2$  die zweite Zeile von  $R$  und die zweite Spalte von  $L$ . In einem Computerprogramm können die Elemente von  $R$  und  $L$  die Speicherplätze der ursprünglichen Matrix  $A$  mit den gleichen Indizes überschreiben, weil bei der Berechnung von  $r_{kj}$  nur das Element  $A_{kj}$  benötigt wird, sowie solche Elemente von  $R$  und  $L$ , die nach der Vorschrift (A.8.6) schon vorliegen. Entsprechendes gilt für die Berechnung von  $m_{ik}$ .

Der Algorithmus (A.8.6) heißt *LR-Zerlegung nach Doolittle*. Durch Pivotisierung ergänzt ist dieser offenbar völlig äquivalent zum Gaußschen Algorithmus.

## A.9 Cholesky-Zerlegung

Ist  $A$  eine reelle symmetrische positiv definite Matrix, vgl. Abschnitt A.11, so kann sie eindeutig in

$$A = U^T U \quad (\text{A.9.1})$$

zerlegt werden. Dabei ist  $U$  eine obere reelle Dreiecksmatrix mit positiven Diagonalelementen. Die  $(n \times n)$ -Matrix  $A$  hat die für die Gültigkeit von (A.9.1) geforderte Eigenschaft insbesondere dann, wenn sie gleich dem Produkt einer beliebigen reellen  $(n \times m)$ -Matrix  $B$  (mit  $m \geq n$  und vollem Rang) mit ihrer Transponierten  $B^T$  ist,  $A = B B^T$ .

Zur Bestimmung von  $U$  führen wir zunächst die LR-Zerlegung nach Doolittle aus, definieren eine Diagonalmatrix  $D$ , deren Diagonalelemente gleich denen von  $R$  sind,

$$D = \text{diag}(r_{11}, r_{22}, \dots, r_{nn}), \quad (\text{A.9.2})$$

und führen die Matrizen

$$D^{-1} = \text{diag}(r_{11}^{-1}, r_{22}^{-1}, \dots, r_{nn}^{-1}) \quad (\text{A.9.3})$$

und

$$D^{-1/2} = \text{diag}(r_{11}^{-1/2}, r_{22}^{-1/2}, \dots, r_{nn}^{-1/2}) \quad (\text{A.9.4})$$

ein. Wir können dann schreiben

$$A = L R = L D D^{-1} R = L D R', \quad R' = D^{-1} R. \quad (\text{A.9.5})$$

Wegen der vorausgesetzten Symmetrie ist

$$A = A^T = (R')^T D L^T. \quad (\text{A.9.6})$$

Vergleich mit (A.9.5) ergibt  $L^T = R'$ , also

$$L = R^T D^{-1}.$$

Mit

$$U = D^{-1/2} R = D^{1/2} L^T \quad (\text{A.9.7})$$

wird in der Tat (A.9.1) erfüllt. Die Beziehung (A.9.7) bedeutet für die Elemente  $u_{ij}$  von  $U$

$$u_{ij} = r_{ii}^{-1/2} r_{ij} = r_{ii}^{1/2} m_{ji}.$$

Damit können die  $r$  und  $m$  zugunsten der  $u$  aus (A.8.6) eliminiert werden, und wir erhalten mit

$$\left. \begin{aligned} u_{kk} &= \left( A_{kk} - \sum_{\ell=1}^{k-1} u_{\ell k}^2 \right)^{1/2} \\ u_{kj} &= \left( A_{kj} - \sum_{\ell=1}^{k-1} u_{\ell k} u_{\ell j} \right) / u_{kk}, \quad j = k+1, \dots, n \end{aligned} \right\} k = 1, \dots, n$$

den Algorithmus für die *Cholesky-Zerlegung* einer reellen positiv definiten symmetrischen Matrix  $A$ . Da für solche Matrizen alle Diagonalelemente von Null verschieden sind, ist grundsätzlich keine Pivotisierung erforderlich. Man kann zeigen, daß sie auch keinen Gewinn an numerischer Genauigkeit brächte. Die Methode `DatanMatrix.choleskyDecomposition` führt die Cholesky-Zerlegung einer symmetrischen positiv definiten quadratischen Matrix aus.

Positiv definit symmetrische Matrizen spielen als Gewichts- und Kovarianzmatrizen in Aufgaben der kleinsten Quadrate eine große Rolle. Dabei wird oft sowohl die Cholesky-Zerlegung  $A = U^T U$  als auch die Multiplikation von  $U$  mit einer Matrix benötigt. Es erspart Rechenaufwand, wenn man für diese Multiplikation die Methode `DatanMatrix.choleskyMultiply` verwendet, die die Dreiecksform von  $U$  berücksichtigt.

Von besonderem Interesse ist die Inversion einer symmetrischen positiv definiten  $(n \times n)$ -Matrix  $A$ . Dazu lösen wir die  $n$  Matrixgleichungen (A.6.4) nach vorheriger Cholesky-Zerlegung von  $A$ ,

$$A\mathbf{x}_i = U^T U \mathbf{x}_i = U^T \mathbf{y}_i = \mathbf{e}_i, \quad i = 1, \dots, n. \quad (\text{A.9.8})$$

Wir bezeichnen die  $\ell$ -te Komponente der drei Vektoren  $\mathbf{x}_i$ ,  $\mathbf{y}_i$  und  $\mathbf{e}_i$  mit  $x_{i\ell}$ ,  $y_{i\ell}$  und  $e_{i\ell}$ . Offenbar gilt  $x_{i\ell} = (A^{-1})_{i\ell}$  und  $e_{i\ell} = \delta_{i\ell}$ , denn  $e_{i\ell}$  ist das Element  $(i, \ell)$  der Einheitsmatrix.

Wir bestimmen nun zunächst die  $y_{i\ell}$  durch *Vorwärts-Einsetzen*. Aus (A.9.8) folgt direkt

$$\sum_{k=1}^{\ell} U_{k\ell} y_{ik} = e_{i\ell} = \delta_{i\ell},$$

d. h.

$$\begin{aligned} U_{11} y_{i1} &= \delta_{i1}, \\ U_{12} y_{i1} + U_{22} y_{i2} &= \delta_{i2}, \\ &\vdots \end{aligned}$$

und damit

$$\begin{aligned} y_{i1} &= \delta_{i1} / U_{11}, \\ &\vdots \\ y_{i\ell} &= \frac{1}{U_{\ell\ell}} \left( \delta_{i\ell} - \sum_{k=1}^{\ell-1} U_{k\ell} y_{ik} \right). \end{aligned}$$

Da aber  $\delta_{i\ell} = 0$  für  $i \neq \ell$  gilt, vereinfachen sich diese Ausdrücke zu

$$\begin{aligned} y_{i\ell} &= 0, \quad \ell < i, \\ y_{i\ell} &= \frac{1}{U_{\ell\ell}} \left( \delta_{i\ell} - \sum_{k=i}^{\ell-1} U_{k\ell} y_{ik} \right), \quad \ell \geq i. \end{aligned}$$

Wir können jetzt die  $x_{i\ell}$  durch *Rückwärts-Einsetzen* der  $y_{i\ell}$  in

$$U \mathbf{x}_i = \mathbf{y}_i$$

bzw.

$$\sum_{k=\ell}^n U_{\ell k} x_{ik} = y_{i\ell}$$

oder

$$\begin{aligned} U_{11} x_{i1} + U_{12} x_{i2} + \dots + U_{1n} x_{in} &= y_{i1}, \\ U_{22} x_{i2} + \dots + U_{2n} x_{in} &= y_{i2}, \\ &\vdots \\ U_{nn} x_{in} &= y_{in} \end{aligned}$$

gewinnen und erhalten

$$\begin{aligned} x_{in} &= y_{in}/U_{nn}, \\ &\vdots \\ x_{i\ell} &= \frac{1}{U_{\ell\ell}} \left( y_{i\ell} - \sum_{k=\ell+1}^n U_{\ell k} x_{ik} \right). \end{aligned}$$

Berechnen wir nur die  $x_{i\ell}$  für  $\ell \geq i$ , so treten beim Rückwärtseinsetzen nur Elemente  $y_{i\ell}$  für  $\ell \geq i$  auf, also nur nichtverschwindende  $y_{i\ell}$ . Die verschwindenden Elemente  $y_{i\ell}$  brauchen daher gar nicht gespeichert zu werden. Die Elemente  $x_{i\ell}$  für  $\ell < i$  folgen einfach aus der Symmetrie der ursprünglichen Matrix,  $x_{i\ell} = x_{\ell i}$ .

In der Methode `DatanMatrix.choleskyInversion` wird zunächst die Cholesky-Zerlegung von  $A$  vorgenommen. Anschließend werden in einer Schleife die verschiedenen rechten Seiten  $e_i$ ,  $i = 1, \dots, n$ , von (A.9.8) behandelt. Als Ergebnis eines Schleifendurchlaufs erhält man die Elemente  $x_{in}$ ,  $x_{i,n-1}$ ,  $\dots$ ,  $x_{ii}$  der Zeile  $i$ . Sie werden in den gleichstelligen Elementen der Ausgangsmatrix  $A$  abgelegt. Die Elemente des Vektors  $\mathbf{y}$ , die nur als Zwischenergebnisse benötigt werden, können in der letzten Zeile von  $A$  gespeichert werden. Zum Abschluß werden die Elemente unterhalb der Hauptdiagonalen durch Kopien ihrer Spiegelbilder aufgefüllt.

## A.10 Pseudoinverse Matrix

Wir kehren jetzt zurück zur Aufgabe des Abschnitts A.5, der Lösung der Gleichung (A.5.4)

$$\mathbf{A}\mathbf{x} \approx \mathbf{b} \quad (\text{A.10.1})$$

für eine beliebige  $(m \times n)$ -Matrix  $A$  vom Rang  $k$ . Nach (A.5.14) ist die eindeutige Lösung minimaler Länge

$$\tilde{\mathbf{x}} = K \begin{pmatrix} \mathbf{p}_1 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Der Vektor  $\mathbf{p}_1$  ist die Lösung der Gleichung (A.5.11) und damit

$$\tilde{\mathbf{p}}_1 = R_{11}^{-1} \mathbf{g}_1,$$

weil  $R_{11}$  nichtsingulär ist. Wegen (A.5.8) ist schließlich

$$\tilde{\mathbf{x}} = K \begin{pmatrix} R_{11}^{-1} & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} H^T \mathbf{b}. \quad (\text{A.10.2})$$

In Analogie zu (A.6.3) schreiben wir

$$\tilde{\mathbf{x}} = A^+ \mathbf{b} \quad (\text{A.10.3})$$

und nennen die  $(n \times m)$ -Matrix

$$A^+ = K \begin{pmatrix} R_{11}^{-1} & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} H^T \quad (\text{A.10.4})$$

die *Pseudoinverse* der  $(m \times n)$ -Matrix  $A$ .

Die Matrix  $A^+$  ist eindeutig durch  $A$  gegeben und hängt nicht von der speziellen orthogonalen Zerlegung (A.5.5) ab. Das sieht man sofort ein, wenn man mit  $\mathbf{a}_j^+ = A^+ \mathbf{e}_j$  den  $j$ -ten Spaltenvektor von  $A^+$  bezeichnet,  $\mathbf{e}_j$  ist der  $j$ -te Spaltenvektor der  $m$ -dimensionalen Einheitsmatrix. Nach (A.10.3) ist aber der  $\mathbf{a}_j^+$  die Lösung minimaler Länge der Gleichung  $A\mathbf{a}_j^+ = \mathbf{e}_j$  und damit eindeutig.

## A.11 Eigenwerte und Eigenvektoren

Ist die *Eigenwertgleichung*

$$G\mathbf{x} = \lambda\mathbf{x} \quad (\text{A.11.1})$$

für die  $(n \times n)$ -Matrix  $G$  erfüllt, so heißen der Skalar  $\lambda$  *Eigenwert* und der  $n$ -Vektor  $\mathbf{x}$  *Eigenvektor* von  $G$ . Offenbar ist der Eigenvektor  $\mathbf{x}$  nur bis auf einen willkürlichen Faktor bestimmt. Man kann diesen Faktor so wählen, daß  $|\mathbf{x}| = 1$ .

Wir betrachten zunächst den besonders einfachen Fall, daß  $G$  eine Diagonalmatrix mit nichtnegativen Diagonalelementen ist,

$$G = S^T S = S^2 = \begin{pmatrix} s_1^2 & & & \\ & s_2^2 & & \\ & & \ddots & \\ & & & s_n^2 \end{pmatrix}, \quad (\text{A.11.2})$$

die als Produkt einer beliebigen Diagonalmatrix  $S$  mit sich selbst aufgefaßt werden kann,

$$S = \begin{pmatrix} s_1 & & & \\ & s_2 & & \\ & & \ddots & \\ & & & s_n \end{pmatrix}. \quad (\text{A.11.3})$$

Zur Eigenwertgleichung  $S^2\mathbf{x} = \lambda\mathbf{x}$  gehören dann offenbar die  $s_i^2 = \lambda_i$  als Eigenwerte und die Basisvektoren  $\mathbf{x}_i = \mathbf{e}_i$  als normierte Eigenvektoren.

An die Stelle von  $S$  setzen wir jetzt

$$A = U S V^T \quad (\text{A.11.4})$$

mit orthogonalen Matrizen  $U$  und  $V$  und

$$G = A^T A = V S^T S V^T. \quad (\text{A.11.5})$$

Die Eigenwertgleichung von  $G$  schreiben wir in der Form

$$G\mathbf{x} = \lambda\mathbf{x} \quad (\text{A.11.6})$$

bzw.

$$V S^T S V^T \mathbf{x} = \lambda \mathbf{x}.$$

Multiplikation von links mit  $V^T$ ,

$$S^T S V^T \mathbf{x} = \lambda V^T \mathbf{x},$$

und Vergleich mit (A.11.1), (A.11.2) zeigt, daß  $G$  die gleichen Eigenwerte  $\lambda_i = s_i^2$  besitzt wie  $S^2$ , jedoch die orthogonal transformierten Eigenvektoren

$$\mathbf{x}_i = \mathbf{e}'_i = V \mathbf{e}_i. \quad (\text{A.11.7})$$

Die Auffindung der Eigenwerte und Eigenvektoren von  $G$  ist offenbar gelungen, wenn die orthogonale Matrix  $V$  bekannt ist, die  $G$  in eine Diagonalmatrix transformiert,

$$V^T G V = S^T S = S^2. \quad (\text{A.11.8})$$

Die Transformation (A.11.8) wird als *Hauptachsentransformation* bezeichnet. Die Bezeichnung wird durch die Betrachtung der Gleichung

$$\mathbf{r}^T G \mathbf{r} = 1 \quad (\text{A.11.9})$$

deutlich. Wir interessieren uns für den geometrischen Ort aller Punkte  $\mathbf{r}$ , die (A.11.9) erfüllen.

Für den Vektor  $\mathbf{r}$  gelten die beiden völlig äquivalenten Darstellungen

$$\mathbf{r} = \sum_i r_i \mathbf{e}_i \quad (\text{A.11.10})$$

und

$$\mathbf{r} = \sum_i r'_i \mathbf{e}'_i \quad (\text{A.11.11})$$

mit den Komponenten  $r_i$  bzw.  $r'_i$  bezüglich der Basisvektoren  $\mathbf{e}_i$  bzw.  $\mathbf{e}'_i$ . Mit der Darstellung (A.11.11) und unter Benutzung von (A.11.5) und (A.11.7) erhalten wir

$$\begin{aligned} 1 &= \mathbf{r}^T G \mathbf{r} = \mathbf{r}^T V S^2 V^T \mathbf{r} = \sum_i (r'_i \mathbf{e}'_i)^T V S^2 V^T \sum_j (r'_j \mathbf{e}'_j) \\ &= \sum_i (r'_i \mathbf{e}_i^T V^T) V S^2 V^T \sum_j (r'_j V \mathbf{e}_j) = \sum_i (r'_i \mathbf{e}_i^T) S^2 \sum_j (r'_j \mathbf{e}_j) \end{aligned}$$



und schließlich

$$\sum_{i=1}^n r_i'^2 s_i^2 = \sum_{i=1}^n r_i'^2 / a_i^2 = 1. \quad (\text{A.11.12})$$

Das ist offenbar die Gleichung eines Ellipsoids in  $n$  Dimensionen, dessen Halbachsen die Richtungen  $\mathbf{e}_i'$  und die Beträge

$$a_i = \frac{1}{s_i} \quad (\text{A.11.13})$$

haben. Diese Vektoren

$$\mathbf{a}_i = \mathbf{e}_i' / s_i = V \mathbf{e}_i / s_i \quad (\text{A.11.14})$$

sind die *Hauptachsen* des Ellipsoids. Sie haben die Richtung der Eigenvektoren von  $G$ . Ihre Längen  $a_i = 1/\sqrt{s_i^2}$  sind durch die Eigenwerte  $s_i^2$  bestimmt.

Die Matrix

$$C = G^{-1} = (A^T A)^{-1} = V(S^2)^{-1} V^T$$

hat offenbar die gleichen Eigenvektoren wie  $G$ , jedoch die Eigenwerte  $1/s_i^2$ . Die Längen der Halbachsen des oben beschriebenen Ellipsoids sind dann direkt gleich den Wurzeln der Eigenwerte von  $C$ .

Die Matrix  $C$  heißt die zu  $A$  gehörende *ungewichtete Kovarianzmatrix*, das Ellipsoid ist das *ungewichtete Kovarianzellipsoid*.

Es ist zu beachten, daß wir alle Betrachtungen nur für Matrizen vom Typ (A.11.5) durchgeführt haben, die durch ihre Konstruktion symmetrisch und *nichtnegativ definit* sind, d. h. reelle, nichtnegative Eigenwerte besitzen. Ellipsoide mit endlichen Halbachsen erhält man nur für *positiv definite* Matrizen. Tritt derselbe Eigenwert mehrfach auf, so hat das Ellipsoid mehrere Hauptachsen gleicher Länge. Es besteht dann eine gewisse Willkür bei der Bestimmung der Hauptachsen. Man kann sie jedoch immer so wählen, daß alle Hauptachsen orthogonal aufeinander stehen.

Bisher haben wir keinen konstruktiven Weg zu Auffindung der Eigenwerte angegeben. Die Eigenwertgleichung lautet  $G\mathbf{x} = \lambda\mathbf{x}$  oder

$$(G - \lambda I)\mathbf{x} = 0. \quad (\text{A.11.15})$$

Diese Bezeichnung kann als lineares Gleichungssystem zur Bestimmung von  $\mathbf{x}$  aufgefaßt werden, dessen rechte Seite der Nullvektor ist. Entsprechend (A.6.5) und (A.6.9) gibt es eine nichttriviale Lösung nur für

$$\det(G - \lambda I) = 0. \quad (\text{A.11.16})$$

Das ist die *charakteristische Gleichung* zur Bestimmung der Eigenwerte von  $A$ . Für  $n = 2$  lautet sie

$$\begin{vmatrix} g_{11} - \lambda & g_{12} \\ g_{21} & g_{22} - \lambda \end{vmatrix} = (g_{11} - \lambda)(g_{22} - \lambda) - g_{12}g_{21} = 0$$

und hat die Lösungen

$$\lambda_{1,2} = \frac{g_{11} + g_{22}}{2} \pm \sqrt{g_{12}g_{21} + \frac{(g_{11} - g_{22})^2}{4}}.$$

Ist, wie bisher vorausgesetzt,  $G$  symmetrisch, d. h.  $g_{12} = g_{21}$ , so sind die Eigenwerte reell. Ist  $G$  positiv definit, so sind sie positiv.

Die charakteristische Gleichung einer  $(n \times n)$ -Matrix hat  $n$  Lösungen. Allerdings werden für  $n > 2$  die Eigenwerte in der Praxis tatsächlich nicht über die charakteristische Gleichung gefunden, sondern mit iterativen Verfahren, etwa der Singulärwertzerlegung, Abschnitt A.12.

## A.12 Singulärwertzerlegung

Wir betrachten jetzt eine spezielle orthogonale Zerlegung der  $(m \times n)$ -Matrix  $A$ ,

$$A = U S V^T. \quad (\text{A.12.1})$$

Wir setzen hier und in den Abschnitten A.13 und A.14 voraus, daß  $m \geq n$ . Ist diese Voraussetzung nicht erfüllt, so kann man die Matrix  $A$  einfach um weitere Zeilen ergänzen, deren sämtliche Elemente Null sind, bis sie  $n$  Zeilen hat, so daß  $m = n$ . Die Zerlegung (A.12.1) ist ein besonderer Fall der Zerlegung (A.5.5). Die  $(m \times n)$ -Matrix  $S$ , die an die Stelle von  $R$  tritt, hat die spezielle Gestalt

$$S = \begin{pmatrix} D & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (\text{A.12.2})$$

und  $D$  ist eine  $(k \times k)$ -Diagonalmatrix mit  $k = \text{Rang}(A)$ . Die Diagonalelemente von  $S$  heißen *Singulärwerte* von  $A$ . Hat  $A$  vollen Rang, so ist  $k = n$  und alle  $s_i \neq 0$ . Für verminderten Rang  $k < n$  ist  $s_i = 0$  für  $i > k$ . Weiter unten werden wir sehen, daß  $U$  und  $V$  so bestimmt werden können, daß alle  $s_i$  positiv und in nichtansteigender Folge geordnet sind,

$$s_1 \geq s_2 \geq \dots \geq s_k. \quad (\text{A.12.3})$$

Die Singulärwerte von  $A$  haben eine sehr einfache Bedeutung. Aus Abschnitt A.11 ergibt sich nämlich unmittelbar, daß die  $s_i$  die Quadratwurzeln der Eigenwerte von  $G = A^T A$  sind. Damit sind die Halbachsen des Kovarianzellipsoids von  $G$  gerade  $a_i = 1/s_i$ . Ist  $G$  singulär, so hat  $A$  den verminderten Rang  $k < n$ , und die  $n - k$  Singulärwerte  $s_{k+1}, \dots, s_n$  verschwinden. In diesem Fall verschwindet auch die Determinante

$$\det G = \det U \det S^2 \det V = \det S^2 = s_1^2 s_2^2 \cdots s_n^2. \quad (\text{A.12.4})$$

Mit den Ersetzungen  $H \rightarrow U$ ,  $K \rightarrow V$ ,  $R \rightarrow S$ ,  $R_{11} \rightarrow D$  erhalten wir aus Abschnitt A.5

$$A\mathbf{x} = U S V^T \mathbf{x} \approx \mathbf{b}, \quad (\text{A.12.5})$$

$$S V^T \mathbf{x} \approx U^T \mathbf{b}. \quad (\text{A.12.6})$$

Mit

$$V^T \mathbf{x} = \mathbf{p} = \begin{pmatrix} \mathbf{p}_1 \\ \mathbf{p}_2 \end{pmatrix} \begin{matrix} \} \\ \} \end{matrix} \begin{matrix} k \\ n-k \end{matrix}, \quad U^T \mathbf{b} = \mathbf{g} = \begin{pmatrix} \mathbf{g}_1 \\ \mathbf{g}_2 \end{pmatrix} \begin{matrix} \} \\ \} \end{matrix} \begin{matrix} k \\ m-k \end{matrix} \quad (\text{A.12.7})$$

ergibt sich

$$S\mathbf{p} = \mathbf{g}, \quad (\text{A.12.8})$$

also

$$D\mathbf{p}_1 = \mathbf{g}_1 \quad (\text{A.12.9})$$

und

$$0 \cdot \mathbf{p}_2 = \mathbf{g}_2 \quad (\text{A.12.10})$$

mit den Lösungen

$$\tilde{\mathbf{p}}_1 = D^{-1} \mathbf{g}_1, \quad (\text{A.12.11})$$

also

$$p_\ell = g_\ell / s_\ell, \quad \ell = 1, 2, \dots, k,$$

und  $\mathbf{p}_2$  beliebig. Die Lösung minimalen Betrages ist

$$\tilde{\mathbf{x}} = V \begin{pmatrix} \tilde{\mathbf{p}}_1 \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (\text{A.12.12})$$

Der Residuenvektor hat die Form

$$\mathbf{r} = \mathbf{b} - A\tilde{\mathbf{x}} = U \begin{pmatrix} 0 \\ \mathbf{g}_2 \end{pmatrix} \quad (\text{A.12.13})$$

und den Betrag

$$r = |\mathbf{g}_2| = \left( \sum_{i=k+1}^m g_i^2 \right)^{1/2}. \quad (\text{A.12.14})$$

## A.13 Singulärwertanalyse

Der Rang  $k$  der Matrix  $A$  spielt eine entscheidende Rolle für die Lösungen der Beziehung  $A\mathbf{x} \approx \mathbf{b}$ . Dabei ist  $k$  durch den Übergang von endlichen zu verschwindenden Singulärwerten gekennzeichnet,  $s_k > 0$ ,  $s_{k+1} = 0$ . Wie ist nun der Fall eines sehr kleinen Wertes von  $s_k$  zu beurteilen, also  $s_k < \varepsilon$  zu vorgegebener kleiner Zahl  $\varepsilon$ ?

**Beispiel A.2:** Nahezu verschwindender Singulärwert

Als einfachstes Beispiel betrachten wir den Fall  $m = n = 2$ ,  $U = V = I$ . Dann ist

$$A\mathbf{x} = U S V^T \mathbf{x} = S\mathbf{x} = \begin{pmatrix} s_1 & 0 \\ 0 & s_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \end{pmatrix} = \mathbf{b}, \quad (\text{A.13.1})$$

also

$$x_1 = b_1/s_1, \quad x_2 = b_2/s_2. \quad (\text{A.13.2})$$

Lassen wir nun in (A.13.2)  $s_2 \rightarrow 0$  gehen, so geht  $|x_2| \rightarrow \infty$ . Ein auf den ersten Blick völlig anderes Bild ergibt sich, wenn man direkt in (A.13.1)  $s_2 = 0$  setzt. Man erhält

$$s_1 x_1 = b_1, \quad 0 \cdot x_2 = b_2. \quad (\text{A.13.3})$$

Damit ist  $x_1 = b_1/s_1$  wie in (A.13.2), jedoch  $x_2$  ist völlig unbestimmt. Die Lösung  $\tilde{\mathbf{x}}$  minimalen Betrages erhalten wir, indem wir  $x_2 = 0$  setzen. Was ist nun „richtig“,  $x_2 = \infty$  oder  $x_2 = 0$ ? Die Antwort auf diese Frage lautet: Man setzt

$$x_2 = \begin{cases} b_2/s_2, & s_2 \geq \varepsilon \\ 0, & s_2 < \varepsilon \end{cases}$$

und wählt den Parameter  $\varepsilon$  so, daß der Ausdruck  $b_2/\varepsilon$  noch numerische Signifikanz besitzt. Das bedeutet, daß  $\varepsilon/|b_2| \gg 2^{-m}$  gelten muß, wenn  $m$  Binärstellen zur Darstellung von Gleitkommazahlen zur Verfügung stehen, vgl. Abschnitt 4.2. Damit wird ein endlicher Wert von  $b_2$  berechnet, solange dieser Wert numerisch sinnvoll bestimmt werden kann. Ist das nicht mehr der Fall, so nähert man sich der Situation  $s_2 = 0$ , in der  $b_2$  völlig unbestimmt ist, und setzt  $b_2 = 0$ . ■

**Beispiel A.3:** Schnittpunkt zweier nahezu paralleler Geraden

Wir betrachten die beiden Geraden, Bild A.6, mit den Gleichungen

$$\begin{aligned} -\alpha x_1 + x_2 &= 1 - \alpha, \\ \alpha x_1 + x_2 &= 1 + \alpha. \end{aligned}$$

Für den Vektor  $\mathbf{x}$  des Schnittpunkts gilt  $A\mathbf{x} = \mathbf{b}$  mit

$$A = \begin{pmatrix} -\alpha & 1 \\ \alpha & 1 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{b} = \begin{pmatrix} 1 - \alpha \\ 1 + \alpha \end{pmatrix}.$$

Man bestätigt leicht, daß  $A = U S V^T$  gilt mit

$$U = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} -1 & -1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix}, \quad S = \sqrt{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \alpha \end{pmatrix}, \quad V = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix},$$

also  $s_1 = \sqrt{2}$ ,  $s_2 = \alpha\sqrt{2}$ . Über

$$\mathbf{g} = U^T \mathbf{b} = \sqrt{2} \begin{pmatrix} -1 \\ \alpha \end{pmatrix} = S \mathbf{p} = \sqrt{2} \begin{pmatrix} p_1 \\ \alpha p_2 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{p} = \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \end{pmatrix},$$

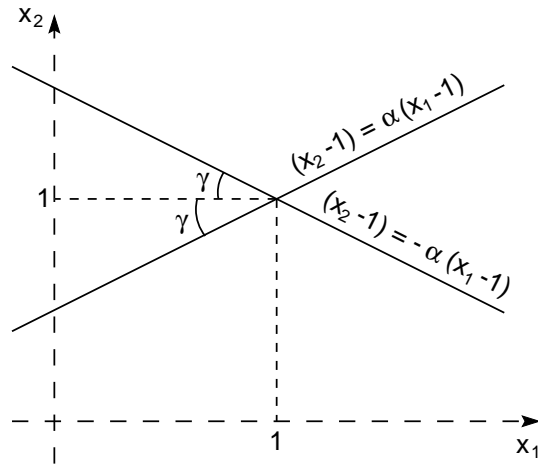
erhält man

$$\mathbf{x} = V \mathbf{p} = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

unabhängig von  $\alpha$ .

Ist allerdings  $s_2 = \alpha\sqrt{2} < \varepsilon$  und setzt man dann  $s_2 = 0$ , so erhält man

$$\mathbf{p} = \begin{pmatrix} -1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{x} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}.$$



**Bild A.6:** Zwei Geraden schneiden sich im Punkt (1, 1) unter dem Winkel  $2\gamma = 2 \arctan \alpha$ .

Aus Bild A.6 liest man ab, daß für  $\alpha \rightarrow 0$  die beiden Geraden zu einer zusammenfallen, die durch  $x_2 = 1$  beschrieben wird. Die  $x_1$ -Koordinate des „Schnittpunkts“ ist völlig unbestimmt. Sie wird zu Null gesetzt, weil der Lösungsvektor  $\mathbf{x}$  minimale Länge hat, vgl. (A.5.14).

Wir nehmen jetzt entsprechend dem Fall „indirekte Messungen“ in Kapitel 9 an, daß der Vektor  $\mathbf{b}$  gleich dem Vektor  $\mathbf{y}$  von Meßgrößen sei, die die beiden Geraden charakterisieren und deren Meßfehler durch die Kovarianzmatrix  $C_y = G_y^{-1}$  gegeben seien. Im einfachsten Fall gleicher nichtkorrelierter Fehler ist

$$C_y = G_y^{-1} = \sigma^2 I.$$

Die Kovarianzmatrix der Unbekannten  $\tilde{\mathbf{x}}$  ist nach (9.2.27)

$$C_x = (A^T G_y A)^{-1},$$

im Fall gleicher unkorrelierter Meßfehler also

$$C_x = \sigma^2 (A^T A)^{-1} = \sigma^2 C$$

und damit bis auf den Faktor  $\sigma^2$  gleich der zu  $A$  gehörenden ungewichteten Kovarianzmatrix  $C = (A^T A)^{-1}$ . Für unsere Matrix  $A$  ist

$$C = (A^T A)^{-1} = \begin{pmatrix} 1/2\alpha^2 & 0 \\ 0 & 1/2 \end{pmatrix}.$$

Die zugehörige Ellipse hat die Halbachsen  $\mathbf{e}_1/\alpha\sqrt{2}$  und  $\mathbf{e}_2/\sqrt{2}$ . Die Kovarianzellipse von  $\tilde{\mathbf{x}}$  hat dann für den Fall gleicher unkorrelierter Messungen die gleichen Halbachsen, jedoch multipliziert mit dem Faktor  $\sigma$ . Sie haben die Längen  $\sigma_{x_1} = \sigma/\alpha\sqrt{2}$ ,  $\sigma_{x_2} = \sigma/\sqrt{2}$ . Offenbar wird man dann  $x_1 = 0$  setzen, wenn sich bei endlich gehaltenem  $x_1$  die Ungleichung  $x_1 \ll \sigma_{x_1}$  ergeben würde, also  $\alpha\sqrt{2} \ll \sigma$ . ■

Die Entscheidung, ob ein kleiner Singulärwert zu Null gesetzt werden soll, hängt also von numerischen Überlegungen und von einer Betrachtung der Meßfehler ab. In der Praxis hat sich das folgende etwas globale Verfahren der *Singulärwertanalyse* bewährt.

1. Mit einem Programm führt man die Singulärwertzerlegung durch, die unter anderem die geordneten Singulärwerte

$$s_1 \geq s_2 \geq \dots \geq s_k$$

liefert.

2. Abhängig vom vorliegenden Problem legt man einen positiven Faktor  $f \ll 1$  fest.
3. Alle Singulärwerte, für die  $s_i < f s_1$  gilt, werden zu Null gesetzt. An die Stelle von  $k$  tritt damit  $\ell \leq k$  derart, daß  $s_i = 0$  für  $i > \ell$ .
4. Mit dem obigen Ersetzungen ( $k \rightarrow \ell$ ,  $s_{\ell+1} = \dots = s_k = 0$ ) behalten die Formeln des Abschnitts A.12 ihre Gültigkeit.

An die Stelle des Residuums (A.12.14) tritt dabei allerdings ein etwas größerer Wert, da in der Summe des Ausdrucks

$$r = \left( \sum_{i=\ell+1}^m g_i^2 \right)^{1/2} \quad (\text{A.13.4})$$

mehr Glieder auftreten als in (A.12.14).

Das Verfahren bedeutet gegebenenfalls eine effektive Verminderung des Ranges  $k$  der Matrix  $A$  auf einen Wert  $\ell < k$ . Hat  $A$  vollen Rang, so wird er gegebenenfalls vermindert. Es hat den großen Vorteil, daß numerische Schwierigkeiten mit kleinen Singulärwerten vermieden werden. Im Gegensatz etwa zum Gauß- oder zum

Cholesky-Verfahren braucht der Benutzer nicht darauf zu achten, ob  $G = A^T A$  vielleicht singulär oder nahezu singulär ist.

Obwohl die Singulärwertanalyse immer eine Lösung  $\tilde{\mathbf{x}}$  minimalen Betrages zur Aufgabe  $A\mathbf{x} \approx \mathbf{b}$  liefert, ist doch im Fall  $\ell < n$  (gleichgültig ob  $k < n$  oder  $\ell < k = n$ ) Vorsicht geboten. Es besteht in jedem Fall eine (nahezu) lineare Abhängigkeit der Unbekannten  $x_1, \dots, x_n$ . Die Lösung  $\tilde{\mathbf{x}}$  ist nicht die einzige Lösung des Problems, sondern ist von der Mannigfaltigkeit gleichwertiger Lösungen nur diejenige kleinsten Betrages.

Wir haben schon in Abschnitt A.5 bemerkt, daß die Singulärwertzerlegung auch im Bezug auf numerische Genauigkeit nur Vorteile vor anderen Methoden, insbesondere der der Normalgleichungen, hat. Eine detaillierte Diskussion (siehe z. B. [18]) würde den Rahmen dieser Darstellung sprengen. Wir begnügen uns mit der Angabe eines Beispiels.

**Beispiel A.4:** Numerische Überlegenheit der Singulärwertzerlegung gegenüber der Lösung der Normalgleichungen

Wir betrachten die Aufgabe  $A\mathbf{x} \approx \mathbf{b}$  für

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ \beta & 0 \\ 0 & \beta \end{pmatrix}.$$

Die Singulärwerte von  $A$  sind die Wurzeln der Eigenwerte von

$$G = A^T A = \begin{pmatrix} 1 + \beta^2 & 1 \\ 1 & 1 + \beta^2 \end{pmatrix}$$

und werden aus (A.11.16) zu

$$s_1 = \sqrt{2 + \beta^2}, \quad s_2 = |\beta|$$

bestimmt und zwar bei Singulärwertzerlegung ohne den Umweg über die Matrix  $G$ . Ist  $\varepsilon$  die Maschinengenauigkeit, und  $\beta^2 < \varepsilon$  aber  $\beta > \varepsilon$ , so erhält man

$$s_1 = \sqrt{2}, \quad s_2 = |\beta|,$$

beide Singulärwerte bleiben endlich. Benutzt man statt der Singulärwertzerlegung die Normalgleichungen

$$A^T A \mathbf{x} = G \mathbf{x} = A^T \mathbf{b},$$

so tritt die Matrix  $G$  explizit auf. Mit  $\beta^2 < \varepsilon$  wird sie numerisch als

$$G = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}$$

dargestellt. Diese Matrix ist singulär,  $\det G = 0$  und kann nicht, wie in (A.5.17) vorgesehen, invertiert werden. Das spiegelt sich auch in ihren Singulärwerten,

$$s_1 = \sqrt{2}, \quad s_2 = 0,$$

wider. ■

## A.14 Algorithmus zur Singulärwertzerlegung

### A.14.1 Strategie

Wir geben jetzt einem Algorithmus für die Singulärwertzerlegung an und folgen dabei im wesentlichen der Darstellung von LAWSON und HANSON [18], die sich auf Arbeiten von GOLUB und KAHN [19], BUSINGER und GOLUB [20] und GOLUB und REINSCH [21] stützt. Die Strategie des Algorithmus basiert auf der konsequenten Anwendung orthogonaler Transformationen.

In einem *ersten Schritt* wird die Matrix  $A$  in eine Bidiagonalmatrix  $C$  transformiert,

$$A = Q C H^T. \quad (\text{A.14.1})$$

Die orthogonalen Matrizen  $Q$  und  $H$  sind jeweils Produkte aus Householder-Transformationsmatrizen.

In *Schritt 2* wird in einem Iterationsverfahren die Matrix  $C$  auf Diagonalform gebracht,

$$C = U' S' V'^T. \quad (\text{A.14.2})$$

Dabei ergeben sich die Matrizen  $U'$  und  $V'$  als Produkte von Givens-Transformationsmatrizen und ggf. Spiegelungsmatrizen. Letztere stellen sicher, daß alle Diagonalelemente nichtnegativ sind.

In *Schritt 3* werden weitere orthogonale Matrizen  $U''$  und  $V''$  bestimmt. Sie sind Produkte von Permutationsmatrizen und stellen sicher, daß die Diagonalelemente von

$$S = U'^T S' V'' \quad (\text{A.14.3})$$

in nichtansteigender Folge (A.12.3) geordnet sind. Als Ergebnis der ersten 3 Schritte erhält man die Matrizen

$$U = Q U' U'', \quad V = H V' V'', \quad (\text{A.14.4})$$

die die Singulärwertzerlegung (A.12.1) bewirken, sowie die Diagonalelemente  $s_1, s_2, \dots, s_k$ .

In *Schritt 4* wird schließlich die Singulärwertanalyse vorgenommen. Vereinfacht ausgedrückt, werden alle Singulärwerte zu Null gesetzt, für die

$$s_i < s_{\min} \quad (\text{A.14.5})$$

gilt. Damit kann schließlich der Lösungsvektor  $\mathbf{x}$  der Gleichung

$$A\mathbf{x} \approx \mathbf{b} \quad (\text{A.14.6})$$

angegeben werden.



In der Praxis wird (A.14.6) oft gleichzeitig für mehrere rechte Seiten gelöst, die wir dann zu einer  $(m \times \ell)$ -Matrix

$$B = (\mathbf{b}_1, \mathbf{b}_2, \dots, \mathbf{b}_\ell)$$

zusammenfassen. Statt des Lösungsvektors  $\tilde{\mathbf{x}}$  erhalten wir dann die  $(n \times \ell)$ -Lösungsmatrix

$$\tilde{X} = (\tilde{\mathbf{x}}_1, \tilde{\mathbf{x}}_2, \dots, \tilde{\mathbf{x}}_\ell)$$

der Gleichung

$$A X \approx B. \quad (\text{A.14.7})$$

Die Methode `DatanMatrix.singularValueDecomposition` berechnet diese Lösung. Sie besteht lediglich aus 4 Aufrufen von weiteren Methoden, die die 4 oben angedeuteten Schritte ausführen. Diese sind in den nachfolgenden Abschnitten ausführlicher erläutert.

Gewöhnlich ist man nur interessiert an der Lösungsmatrix  $\tilde{X}$  des Problems  $A X \approx B$  und eventuell an der Anzahl der nicht zu Null gesetzten Singulärwerte. Gelegentlich möchte man jedoch auch explizit Zugriff auf die orthogonalen Matrizen  $U$  und  $V$  und auf die Singulärwerte haben. Das wird mit der Methode `DatanMatrix.pseudoInverse` ermöglicht.

### A.14.2 Bidiagonalisierung

In der Methode `DatanMatrix.svl` ist das folgende Verfahren implementiert. (Sie ist – wie auch die weiteren in Abschnitt A.14 noch genannten Methoden – innerhalb der Klasse `DatanMatrix` als `private` erklärt; alle können aber natürlich im Quelltext studiert werden.) Ziel ist die Auffindung der  $(m \times n)$ -Matrix  $C$  in (A.14.1). Dabei ist  $C$  von der Form

$$C = \begin{pmatrix} C' \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (\text{A.14.8})$$

und  $C'$  ist eine  $(n \times n)$ -Bidiagonalmatrix

$$C' = \begin{pmatrix} d_1 & e_2 & & & \\ & d_2 & e_3 & & \\ & & \cdot & \ddots & \\ & & & \ddots & \cdot \\ & & & & \cdot & \cdot & e_n \\ & & & & & & d_n \end{pmatrix}. \quad (\text{A.14.9})$$

Das Ziel wird durch Multiplikation der Matrix  $A$  mit geeigneten Householder-Matrizen (abwechselnd, von links und rechts) erreicht,

$$C = Q_n(\cdots((Q_1 A) H_2) \cdots H_n) = Q^T A H. \quad (\text{A.14.10})$$

Die Matrix  $Q_1$  wird aus den Elementen der ersten Spalte von  $A$  berechnet und auf alle Spalten von  $A$  (und von  $B$ ) angewandt. Sie bewirkt, daß nur das Element  $(1, 1)$  von  $A$  von Null verschieden bleibt. Die Matrix  $H_2$  wird aus der ersten Zeile der Matrix  $Q_1 A$  berechnet. Sie bewirkt, daß das Element  $(1, 1)$  unverändert bleibt, das Element  $(1, 2)$  umgerechnet wird und die Elemente  $(1, 3), \dots, (1, n)$  Null werden. Sie wird auf alle Zeilen der Matrix  $(Q_1 A)$  angewandt. Dadurch erhält man

$$Q_1 A = \begin{pmatrix} \bullet & \cdot & \cdot & \cdot \\ 0 & \cdot & \cdot & \cdot \\ 0 & \cdot & \cdot & \cdot \\ 0 & \cdot & \cdot & \cdot \\ 0 & \cdot & \cdot & \cdot \end{pmatrix}, \quad Q_1 A H_2 = \begin{pmatrix} \bullet & \bullet & 0 & 0 \\ 0 & \cdot & \cdot & \cdot \\ 0 & \cdot & \cdot & \cdot \\ 0 & \cdot & \cdot & \cdot \\ 0 & \cdot & \cdot & \cdot \end{pmatrix}.$$

Dabei bedeutet „ $\bullet$ “ ein Element der endgültigen Bidiagonalmatrix  $C'$  und „ $\cdot$ “ ein Element, das noch weiter verändert wird. Nun wird  $Q_2$  aus der zweiten Spalte von  $Q_1 A H_2$  derart bestimmt, daß bei Anwendung auf diese Spalte das Element 1 unverändert bleibt und das Element 2 und alle anderen so verändert werden, daß nur das Element 2 endlich bleibt und die Elemente 3 bis  $m$  zu Null werden.

Das Verfahren läßt sich so zusammenfassen: Die Matrix  $Q_i$  wirkt auf die Spaltenvektoren, sie läßt die Elemente 1 bis  $i - 1$  unverändert und verändert die Elemente  $i$  bis  $m$ , sie bewirkt eine orthogonale Transformation im Unterraum der Komponenten  $i$  bis  $m$ . Zum Zeitpunkt der Anwendung von  $Q_i$  sind allerdings diese Elemente in den Spalten 1 bis  $i - 1$  bereits Null, so daß  $Q_i$  explizit noch auf die Spalten  $i$  bis  $n$  angewandt werden muß. Entsprechendes gilt für die Matrix  $H_i$ . Sie wirkt auf die Zeilenvektoren, läßt die Elemente 1 bis  $i - 1$  unverändert und bewirkt eine orthogonale Transformation im Unterraum der Komponenten  $i$  bis  $n$ . Zum Zeitpunkt ihrer Anwendung sind diese Komponenten in den Zeilen 1 bis  $i - 2$  sämtlich Null. Die Matrix  $H_i$  muß explizit nur auf die Zeilen  $i - 1, \dots, m - 1$  angewandt werden. Da nur  $n - 1$  Zeilen von  $A$  bearbeitet werden müssen, ist die Matrix  $H_n$  in (A.14.10) die Einheitsmatrix,  $Q_n$  ist nur dann die Einheitsmatrix, wenn  $m = n$ .

Zusätzlich zur transformierten Matrix  $Q^T A H$  soll die Matrix  $H = H_2 H_3 \cdots H_{n-1}$  gespeichert werden. Dazu wird die Information über jede Matrix  $H_i$  gespeichert. Wie wir am Ende von Abschnitt A.3 festgestellt haben, genügt es, die dort definierten Größen  $u_p, b$  und die Elemente  $i + 1$  bis  $n$  des die Matrix  $H_i$  definierenden  $(i - 1)$ -ten Zeilenvektors zu speichern. Das kann aber gerade in den Speicherplätzen dieser Zeilenvektoren selbst geschehen, da ja gerade diese Elemente zu Null transformiert werden und in die weitere Rechnung nicht eingehen. Es wird lediglich Speicherplatz für die Größen  $u_p$  und  $b$  jeder der Matrizen  $H_i$  benötigt. Sind alle Transformationen ausgeführt, so werden die Diagonalelemente  $d_i$  und die Nebendiagonalelemente  $e_i$  in Speicherbereiche  $\mathbf{e}$  bzw.  $\mathbf{d}$  umgespeichert. Anschließend wird in den ersten  $n$  Zeilen des Speicherplatzes der ursprünglichen Matrix  $A$  die Produktmatrix  $H = H_2 H_3 \cdots H_{n-1} I$  aufgebaut, und zwar in der Reihenfolge  $H_{n-1} I, H_{n-2}(H_{n-1} I), \dots$ . Auch dabei wird möglichst ökonomisch verfahren, d. h. die Householdermatrix

wird nur auf diejenigen Spalten der rechts stehenden Matrix angewandt, an denen sie tatsächlich eine Veränderung bewirken würde. Die Einheitsmatrix  $I$  wird von unten beginnend zeilenweise im Speicherbereich der ursprünglichen Matrix  $A$  in dem Maße aufgebaut, wie sie benötigt wird. Dazu steht gerade der Platz zur Verfügung, der bis dahin für die Speicherung von Information über die gerade angewandte Householder-Matrix benötigt wurde.

### A.14.3 Diagonalisierung

Dieser Schritt ist in `DatanMatrix.sv2` implementiert. Die Bidiagonalmatrix  $C$ , deren nichtverschwindende Elemente in den Speicherbereichen `d` und `e` gespeichert sind, wird jetzt durch geeignet gewählte Givens-Transformationen auf Diagonalform gebracht. Die Strategie ist so angelegt, daß das unterste Nichtdiagonalelement zuerst verschwindet und sich die Nichtdiagonalelemente immer mehr nach oben links zurückziehen, bis  $C$  schließlich diagonal ist. Alle von links auf  $C$  angewendeten Transformationen werden auch auf die im Speicherbereich `b` befindliche Matrix angewandt, alle von rechts wirkenden Transformationen auch auf die in `a` befindliche Matrix. (Wir bezeichnen die zu diagonalisierende Matrix während jeden Schrittes mit  $C$ ).

Es braucht immer nur die obere linke Untermatrix  $C_k$  aus  $k$  Spalten und Zeilen betrachtet zu werden, die noch nicht diagonal ist. Der Index  $k$  ist so bestimmt, daß  $e_k \neq 0$  und  $e_j = 0$ ,  $j > k$ . Das bedeutet, daß das Programm eine Schleife  $k = n, n-1, \dots, 2$  durchläuft. Bevor mit einem iterativen Verfahren systematisch das untere Nichtdiagonalelement  $e_k$  zum Verschwinden gebracht wird, wird nach dem Vorliegen zweier Spezialfälle gesucht, durch deren besondere Behandlung sich die Rechnung verkürzt.

*Spezialfall 1*,  $d_k = 0$  (bearbeitet in `DatanMatrix.s21`): Es wird eine Givens-Matrix  $W$  von rechts angewandt, die bewirkt, daß auch  $e_k$  verschwindet. Die Matrix  $W$  ist das Produkt  $W_{k-1}W_{k-2}\cdots W_1$ . Dabei wirkt  $W_i$  auf die Spalten  $i$  und  $k$  von  $C_k$ , aber natürlich nur auf die Zeilen, in denen wenigstens eine dieser Spalten ein nichtverschwindendes Element hat.  $W_{k-1}$  wirkt auf die Zeile  $k-1$ , vernichtet das Element  $e_k = C_{k-1,k}$  und verändert  $C_{k-1,k-1}$ ; außerdem wirkt  $W_{k-1}$  auf die Zeile  $k-2$ , verändert das Element  $C_{k-2,k-1}$  und erzeugt ein nichtverschwindendes Element  $H = C_{k-2,k}$  in Spalte  $k$ . Nun wird die Matrix  $W_{k-2}$  angewandt, die gerade dieses Element wieder vernichtet, dafür aber in der Zeile  $k-3$  und in der Spalte  $k$  ein neues Element erzeugt. Ist das zusätzliche Element schließlich in der Zeile 1 angelangt, kann es durch die Transformation  $W_1$  vernichtet werden. Als Ergebnis dieser Behandlung des Spezialfalls 1 zerfällt  $C_k$  in eine  $(k-1) \times (k-1)$ -Untermatrix  $C_{k-1}$  und eine  $(1 \times 1)$ -Nullmatrix.

*Spezialfall 2*,  $C_k$  zerfällt in Teilmatrizen (bearbeitet in `DatanMatrix.s22`): Gilt  $e_\ell = 0$  für irgendeinen Wert  $\ell$ ,  $2 \leq \ell \leq k$ , so zerfällt die Matrix

$$C_k = \begin{pmatrix} d_1 & e_2 & & & \\ & \ddots & & & \\ & & d_{\ell-1} & 0 & \\ & & d_\ell & e_{\ell+1} & \\ & & & \ddots & \\ & & & & d_{k-1} & e_k \\ & & & & & d_k \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} C_{\ell-1} & 0 \\ 0 & \bar{C} \end{pmatrix}$$

in zwei Matrizen  $C_{\ell-1}$  und  $\bar{C}$ . Man kann dann zunächst  $\bar{C}$  diagonalisieren und anschließend  $C_{\ell-1}$ . Ist insbesondere  $\ell = k$ , so erhält man

$$C_k = \begin{pmatrix} C_{k-1} & 0 \\ 0 & d_k \end{pmatrix}.$$

Damit ist  $d_k$  ein Singulärwert, und der Schleifenindex kann um 1 vermindert werden,  $k \rightarrow k-1$ . Zuvor muß jedoch noch der Fall behandelt werden, daß  $d_k < 0$ , siehe „Vorzeichenwechsel“ weiter unten. Gilt  $d_{\ell-1} = 0$ , aber  $e_\ell \neq 0$ , so kann trotzdem erreicht werden, daß  $C$  zerfällt. Dazu wendet man eine Transformationsmatrix  $T = T_k T_{k-1}, \dots, T_{\ell+1}$  von links an. Dabei wirkt  $T_i$  auf die Zeilen  $\ell$  und  $i$ . Im Einzelnen vernichtet  $T_{\ell+1}$  das Element  $e_\ell = C_{\ell, \ell+1}$  und erzeugt ein Element  $H = C_{\ell, \ell+2}$ .  $T_{\ell+2}$  vernichtet dieses Element und erzeugt dafür  $H = C_{\ell, \ell+3}$ .  $T_k$  schließlich vernichtet das zuletzt erzeugte Element  $H = C_{\ell k}$  durch Transformation auf  $C_{kk} = d_k$ .

Nachdem untersucht wurde, ob einer oder beide Spezialfälle vorlagen und diese gegebenenfalls behandelt werden, liegt nun die Aufgabe vor, die Matrix  $\bar{C}$  zu diagonalisieren. Sie besteht aus den Zeilen und Spalten  $\ell$  bis  $k$  von  $C$ . Liegt Spezialfall 2 nicht vor, ist  $\ell = 1$ . Die Aufgabe wird iterativ mit dem QR-Algorithmus gelöst.

**QR-Algorithmus** (bearbeitet in `DatanMatrix.s23`): Zunächst bezeichnen wir die quadratische Ausgangsmatrix  $\bar{C}$  mit  $C_1$ . Wir bestimmen dann orthogonale Matrizen  $U_i, V_i$  und führen Transformationen

$$C_{i+1} = U_i^T C_i V_i, \quad i = 1, 2, \dots,$$

aus, die auf eine Diagonalmatrix  $S$  hinführen,

$$\lim_{i \rightarrow \infty} C_i = S.$$

Für die Bestimmung von  $U_i$  und  $V_i$  gelten folgende Vorschriften:

- (A) Man bestimmt die Eigenwerte  $\lambda_1, \lambda_2$  der rechten unteren  $(2 \times 2)$ -Untermatrix von  $C_i^T C_i$ . Dabei ist  $\sigma_i$  derjenige Eigenwert, der dem rechten unteren Element von  $C_i^T C_i$  am nächsten kommt.
- (B) Die Matrix  $V_i$  wird so bestimmt, daß  $V_i^T (C_i^T C_i - \sigma_i I)$  obere Dreiecksform hat.
- (C) Die Matrix  $U_i$  wird so bestimmt, daß  $C_{i+1} = U_i^T C_i V_i$  wieder bidiagonal ist.

Die Matrix  $V_i$  aus Schritt (B) existiert nach einem Satz von FRANCIS [22], wenn

- (a)  $C_i^T C_i$  tridiagonal ist mit nichtverschwindenden Subdiagonalelementen,
- (b)  $V_i$  orthogonal ist,
- (c)  $\sigma_i$  ein beliebiger Skalar ist,
- (d)  $V_i^T (C_i^T C_i) V_i$  tridiagonal ist,
- (e) die erste Spalte von  $V_i^T (C_i^T C_i - \sigma_i I)$  mit Ausnahme des ersten Elements verschwindet.

Die Bedingung (a) ist erfüllt, weil  $C_i$  bidiagonal ist und der Spezialfall 2 ggf. behandelt wurde; (b) wird dadurch erfüllt, daß  $V_i$  als Produkt von Givens-Matrizen konstruiert wird, und zwar so, daß gleichzeitig (d) und (e) erfüllt werden. Im einzelnen ist

$$V_i = R_1 R_2 \cdots R_{n-1}, \quad U_i^T = L_{n-1} L_n \cdots L_1$$

und

$R_j$  wirkt auf die Spalten  $j$  und  $j+1$  von  $C$ ,  
 $L_j$  wirkt auf die Zeilen  $j$  und  $j+1$  von  $C$ ,  
 $R_1$  wird so bestimmt, daß die Bedingung (e) erfüllt ist,  
 $L_1, R_2, L_2, \dots$  werden so bestimmt, daß (e) erfüllt wird, ohne daß (d) verletzt wird.

Für  $\sigma_i$  erhält man

$$\sigma_i = d_n^2 + e_n \left( e_n - \frac{d_{n-1}}{t} \right)$$

mit den Abkürzungen

$$\begin{aligned} t &= f + \sqrt{1 + f^2}, \quad f \geq 0, \\ t &= f - \sqrt{1 + f^2}, \quad f < 0, \end{aligned}$$

und

$$f = \frac{d_n^2 - d_{n-1}^2 + e_n^2 - e_{n-1}^2}{2e_n d_{n-1}}.$$

Die erste Spalte der Matrix  $(C_i^T C_i - \sigma_i I)$  ist

$$\begin{pmatrix} d_1^2 - \sigma_i \\ d_1 e_2 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Man bestimmt die Matrix  $R_1$ , die eine Givens-Transformation definiert, derart, daß alle Elemente der ersten Spalte von  $R_1^T(C_i^T C_i - \sigma_i I)$  außer dem ersten verschwinden. Anwendung von  $R_1$  auf  $C_i$  erzeugt allerdings ein zusätzliches Element  $H = C_{21}$ , so daß  $C_i$  nicht mehr bidiagonal ist,

$$C_i = \begin{pmatrix} \cdot & \cdot & & \\ & \cdot & \cdot & \\ & & \cdot & \cdot \\ & & & \cdot \end{pmatrix}, \quad C_i R_1 = \begin{pmatrix} \cdot & \cdot & & \\ H & \cdot & \cdot & \\ & \cdot & \cdot & \cdot \\ & & \cdot & \cdot \end{pmatrix}.$$

Durch Anwendung von  $L_1$  wird dieses Element auf die Diagonale projiziert. Dafür entsteht ein neues Element  $H = C_{13}$ ,

$$L_1 C_i R_1 = \begin{pmatrix} \cdot & \cdot & H & \\ & \cdot & \cdot & \\ & & \cdot & \cdot \\ & & & \cdot \end{pmatrix}.$$

Durch Fortsetzung des Verfahrens wird das Zusatzelement immer mehr nach unten rechts gedrückt und kann im letzten Schritt ganz eliminiert werden,

$$T_{n-1} \begin{pmatrix} \cdot & \cdot & & \\ & \cdot & \cdot & \\ & & \cdot & \cdot \\ & & & \cdot \\ & & & H & \cdot \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cdot & \cdot & & \\ & \cdot & \cdot & \\ & & \cdot & \cdot \\ & & & \cdot & \cdot \\ & & & & \cdot \end{pmatrix} = C_{i+1}.$$

Verschwindet jetzt bereits das untere Nichtdiagonalelement von  $C_{i+1}$ , so ist das untere Diagonalelement bereits ein Singulärwert. Anderenfalls wird die Prozedur wiederholt, wobei zunächst geprüft wird, ob nun einer der beiden Spezialfälle vorliegt. Das Verfahren konvergiert typischerweise in ca.  $2k$  Schritten ( $k$  ist der Rang der ursprünglichen Matrix  $A$ ). Liegt Konvergenz nach  $10k$  Schritten noch nicht vor, so wird der Algorithmus erfolglos abgebrochen.

*Vorzeichenwechsel.* Ist ein Singulärwert  $d_k$  gefunden worden, d. h. ist  $e_k = 0$ , so wird geprüft, ob er negativ ist. Ist das der Fall, so wird eine einfache orthogonale Transformation angewandt, die das Element  $d_k = C_{kk}$  von  $C$  und alle Elemente in der  $k$ -ten Spalte der im Speicherbereich **a** befindlichen Matrix mit  $-1$  multipliziert. Anschließend kann der Index  $k$  um Eins reduziert werden. Entsprechend (A.12.6) wird die Matrix  $B$  von links mit  $U^T$  multipliziert und zwar nacheinander mit den einzelnen Faktoren, aus denen sich  $U^T$  aufbaut.

#### A.14.4 Ordnung der Singulärwerte und Permutation

Mit der Methode `DatanMatrix.sv3` werden die Singulärwerte in nichtansteigender Reihenfolge geordnet. Das geschieht durch eine Folge von Permutationen benachbarter Singulärwerte, sofern der nachfolgende Singulärwert größer als der vorangehende ist. Die in `a` und `a` gespeicherten Matrizen werden mit einer entsprechenden Folge von Permutationsmatrizen multipliziert, vgl. (A.14.4).

#### A.14.5 Singulärwertanalyse

Im letzten Schritt wird mit der Methode `DatanMatrix.sv4` die Singulärwertanalyse entsprechend Abschnitt A.13 durchgeführt. Zu gegebenem Faktor  $f \ll 1$  wird zunächst eine Zahl  $\ell \leq k$  festgelegt, so daß  $s_i < f s_1$  für  $i > \ell$ . Die Spalten des Speicherbereichs `b`, die jetzt die Vektoren `g` enthalten, werden in ihren ersten  $\ell$  Elementen entsprechend (A.12.11) zu  $\tilde{\mathbf{p}}_1$  umgeformt, die Elemente  $\ell + 1, \dots, n$  werden zu Null gesetzt. Anschließend werden die Lösungsvektoren  $\tilde{\mathbf{x}}$ , die die Spalten der Lösungsmatrix  $\tilde{X}$  bilden, entsprechend (A.12.12) berechnet.

### A.15 Kleinste Quadrate mit Gewichten

An die Stelle der Aufgabe (A.5.3)

$$r^2 = (\mathbf{Ax} - \mathbf{b})^T (\mathbf{Ax} - \mathbf{b}) = \min \quad (\text{A.15.1})$$

tritt oft eine ähnliche Aufgabe, die zusätzlich eine positiv definite symmetrische Gewichtsmatrix  $G_{m \times m}$  enthält,

$$r^2 = (\mathbf{Ax} - \mathbf{b})^T G (\mathbf{Ax} - \mathbf{b}) = \min . \quad (\text{A.15.2})$$

Offenbar ist in (A.15.1) einfach  $G = I$ . Benutzen wir die Cholesky-Zerlegung (A.9.1) von  $G$ , also  $G = U^T U$ , so gilt

$$r^2 = (\mathbf{Ax} - \mathbf{b})^T U^T U (\mathbf{Ax} - \mathbf{b}) = \min . \quad (\text{A.15.3})$$

Mit den Definitionen

$$\mathbf{A}' = U \mathbf{A} , \quad \mathbf{b}' = U \mathbf{b} \quad (\text{A.15.4})$$

nimmt (A.15.3) die Form

$$r^2 = (\mathbf{A}'\mathbf{x} - \mathbf{b}')^T (\mathbf{A}'\mathbf{x} - \mathbf{b}') = \min \quad (\text{A.15.5})$$

an. Nach der Ersetzung (A.15.4) ist also die Aufgabe (A.15.2) äquivalent zu der ursprünglichen Aufgabe (A.15.1).

Die  $(n \times n)$ -Matrix

$$C = (A^T A)^{-1} \quad (\text{A.15.6})$$

hatten wir in Abschnitt A.11 als die ungewichtete Kovarianzmatrix der Unbekannten  $\mathbf{x}$  in der Aufgabe (A.15.1) bezeichnet. In Aufgabe (A.15.2) tritt offenbar die *gewichtete Kovarianzmatrix*

$$C_x = (A^T A')^{-1} = (A^T G A)^{-1} \quad (\text{A.15.7})$$

an ihre Stelle.

## A.16 Kleinste Quadrate mit Skalenwechsel

Ziel der Lösung jeder Aufgabe vom Typ

$$(\mathbf{Ax} - \mathbf{b})^T (\mathbf{Ax} - \mathbf{b}) = \min \quad (\text{A.16.1})$$

ist die numerisch möglichst genaue Bestimmung des Lösungsvektors  $\tilde{\mathbf{x}}$  und der Kovarianzmatrix  $C$ . Ein Skalenwechsel in den Elementen von  $A$ ,  $\mathbf{b}$  und  $\mathbf{x}$  kann die numerische Genauigkeit günstig beeinflussen.

Nehmen wir an, daß der Bearbeiter der Aufgabe bereits eine ungefähre Vorstellung von  $\tilde{\mathbf{x}}$  und  $C$  hat; bezeichnen wir sie mit  $\mathbf{z}$  und  $K$ . Die Matrix  $K$  habe die Cholesky-Zerlegung  $K = L^T L$ . Definieren wir jetzt

$$A' = A L, \quad \mathbf{b}' = \mathbf{b} - A \mathbf{z}, \quad \mathbf{x}' = L^{-1}(\mathbf{x} - \mathbf{z}), \quad (\text{A.16.2})$$

so geht (A.16.1) in

$$(A' \mathbf{x}' - \mathbf{b}')^T (A' \mathbf{x}' - \mathbf{b}') = \min$$

über.

Die Bedeutung des neuen Vektors  $\mathbf{x}'$  der Unbekannten erkennen wir sofort für den Fall, daß  $K$  eine Diagonalmatrix ist. Wir schreiben

$$K = \begin{pmatrix} \sigma_1^2 & & & \\ & \sigma_2^2 & & \\ & & \ddots & \\ & & & \sigma_n^2 \end{pmatrix}, \quad L = \begin{pmatrix} \sigma_1 & & & \\ & \sigma_2 & & \\ & & \ddots & \\ & & & \sigma_n \end{pmatrix}.$$

Dabei sind die  $\sigma_i^2$  die geschätzten Werte der Varianzen der Unbekannten  $x_i$ . Damit wird die  $i$ -te Komponente des Vektors  $\mathbf{x}'$



$$x'_i = \frac{x_i - z_i}{\sigma_i}.$$

Ist tatsächlich  $\tilde{x}_i = z_i$  und die zugehörige Varianz  $\sigma_i^2$ , so ist  $x'_i = 0$  und hat die Varianz Eins. Treffen die Schätzungen wenigstens der Größenordnung nach zu, so sind die  $x'_i$  von der Größenordnung Null und die ihre Varianzen von der Größenordnung Eins. Darüber hinaus sind, falls tatsächlich die volle Matrix annähernd richtig geschätzt wurde, die Komponenten von  $\mathbf{x}'$  nicht stark korreliert zueinander.

In der Praxis wird man förmlich die Transformation (A.16.2) nur in Ausnahmefällen durchführen. Man wird jedoch darauf achten, daß „vernünftige“ Variablen gewählt werden, die (A.16.2) sinngemäß erfüllen. Diese Technik wird z. B. seit jeher bei der graphischen Darstellung von Meßdaten angewandt. Ist etwa bekannt, daß ein Spannungssignal  $U$  um die Spannung  $U_0 = 1$  Volt im Bereich von  $\sigma = 10$  Millivolt schwankt, so trägt man statt  $U$  die Größe  $U' = (U - U_0)/\sigma$  auf, jedenfalls aber eine Größe, die  $U'$  in etwa entspricht.

## A.17 Modifikation der kleinsten Quadrate nach Marquardt

Anstelle der Aufgabe

$$(\mathbf{Ax} - \mathbf{b})^T(\mathbf{Ax} - \mathbf{b}) = \min, \quad (\text{A.17.1})$$

die wir auch kurz in der Form

$$\mathbf{Ax} - \mathbf{b} \approx 0 \quad (\text{A.17.2})$$

geschrieben haben, betrachten wir jetzt die modifizierte Aufgabe

$$\begin{matrix} m \\ n \end{matrix} \left\{ \underbrace{\begin{pmatrix} A \\ \lambda I \end{pmatrix}}_n \mathbf{x} \approx \begin{pmatrix} \mathbf{b} \\ 0 \end{pmatrix} \right\} \begin{matrix} m \\ n \end{matrix}. \quad (\text{A.17.3})$$

Dabei ist  $I$  die  $(n \times n)$ -Einheitsmatrix und  $\lambda$  eine nichtnegative Zahl. Die modifizierte Aufgabe hat erhebliche Bedeutung für die Anpassung nichtlinearer Funktionen nach kleinsten Quadraten (Abschnitt 9.5) bzw. für die Minimierung (Abschnitt 10.15). Für  $\lambda = 0$  geht offenbar (A.17.3) in (A.17.2) über. Ist dagegen  $\lambda$  sehr groß, genauer gesagt groß gegen die Beträge der Elemente von  $A$  und  $\mathbf{b}$ , so bestimmt die untere „Zeile“ von (A.17.3) die Lösung  $\tilde{\mathbf{x}}$ , die für  $\lambda \rightarrow \infty$  der Nullvektor ist.

Wir fragen zunächst, welche Richtung der Vektor  $\tilde{\mathbf{x}}$  für große Werte von  $\lambda$  hat. Die zu (A.17.3) gehörenden Normalgleichungen, vgl. (A.5.16), lauten

$$(\mathbf{A}^T, \lambda I) \begin{pmatrix} A \\ \lambda I \end{pmatrix} \mathbf{x} = (\mathbf{A}^T A + \lambda^2 I) \mathbf{x} = (\mathbf{A}^T, \lambda I) \begin{pmatrix} \mathbf{b} \\ 0 \end{pmatrix} = \mathbf{A}^T \mathbf{b}$$

mit der Lösung

$$\tilde{\mathbf{x}} = (A^T A + \lambda^2 I)^{-1} A^T \mathbf{b}.$$

Für große  $\lambda$  überwiegt der zweite Term in der Klammer, und man erhält einfach

$$\tilde{\mathbf{x}} = \lambda^{-2} A^T \mathbf{b},$$

d. h., der Lösungsvektor strebt für große Werte von  $\lambda$  gegen die Richtung des Vektors  $A^T \mathbf{b}$ .

Wir zeigen jetzt, daß sich zu gegebenem  $\lambda$  die Lösung  $\mathbf{x}^{(\lambda)}$  von (A.17.3) leicht während der Bestimmung der Lösung  $\tilde{\mathbf{x}}$  von (A.17.2) mit der Singulärwertzerlegung finden läßt. Die Singulärwertzerlegung (A.12.1) von  $A$  ist

$$A = U \begin{pmatrix} S \\ 0 \end{pmatrix} V^T.$$

Durch Einsetzen in (A.17.3) und Multiplikation von links erhalten wir

$$\begin{pmatrix} U^T & 0 \\ 0 & V^T \end{pmatrix} \begin{pmatrix} U \begin{pmatrix} S \\ 0 \end{pmatrix} V^T \\ \lambda I \end{pmatrix} \mathbf{x} = \begin{pmatrix} U^T & 0 \\ 0 & V^T \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{b} \\ 0 \end{pmatrix}$$

oder

$$\begin{pmatrix} S \\ 0 \\ \lambda I \end{pmatrix} \mathbf{p} = \begin{pmatrix} \mathbf{g} \\ 0 \end{pmatrix} \quad (\text{A.17.4})$$

mit — die Bezeichnungen sind wie im Abschnitt A.12 —

$$\mathbf{p} = V^T \mathbf{x}, \quad \mathbf{g} = U^T \mathbf{b}.$$

Durch Givens-Transformationen läßt sich die Matrix auf der linken Seite von (A.17.4) auf Diagonalform bringen. Man erhält

$$\begin{pmatrix} S^{(\lambda)} \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \mathbf{p} = \begin{pmatrix} \mathbf{g}^{(\lambda)} \\ \mathbf{h}^{(\lambda)} \end{pmatrix}$$

mit

$$\begin{aligned} g_i^{(\lambda)} &= \frac{g_i s_i}{s_i^{(\lambda)}}, \quad i = 1, \dots, n, \\ g_i^{(\lambda)} &= g_i, \quad i = n+1, \dots, m, \\ h_i^{(\lambda)} &= -\frac{g_i^\lambda}{s_i^{(\lambda)}}, \quad i = 1, \dots, n, \\ s_i^{(\lambda)} &= \sqrt{s_i^2 + \lambda^2} \end{aligned}$$

und damit

$$\begin{aligned} p_i^{(\lambda)} &= \frac{g_i s_i}{s_i^2 + \lambda^2} = p_i^{(0)} \frac{s_i^2}{s_i^2 + \lambda^2}, \quad i = 1, \dots, k, \\ p_i^{(\lambda)} &= 0, \quad i = k+1, \dots, n. \end{aligned}$$

Die Lösung  $\tilde{\mathbf{x}}^{(\lambda)}$  von (A.17.3) ist dann

$$\tilde{\mathbf{x}}^{(\lambda)} = V \mathbf{p}^{(\lambda)}.$$

Die Methode `DatanMatrix.marquardt` liefert diese Lösungsvektoren für zwei Werte von  $\lambda$ . Sie arbeitet weitgehend wie `DatanMatrix.singularValueDecomposition`; nur in Schritt 4 wird statt `DatanMatrix.sv4` die an die Marquardt-Aufgabe angepasste Methode `DatanMatrix.svm` verwandt.

## A.18 Kleinste Quadrate mit Nebenbedingungen

Oft tritt die Aufgabe auf, das Problem (A.5.3)

$$r^2 = (\mathbf{A}\mathbf{x} - \mathbf{b})^2 = \min \quad (\text{A.18.1})$$

mit der *Nebenbedingung*

$$E\mathbf{x} = \mathbf{d} \quad (\text{A.18.2})$$

zu lösen. Dabei ist  $A$  wie bisher eine  $(m \times n)$ -Matrix und  $E$  eine  $(\ell \times n)$ -Matrix. Wie beschränken uns auf den in der Praxis ausschließlich auftretenden Fall

$$\text{Rang } E = \ell < n. \quad (\text{A.18.3})$$

Die Bestimmung eines Extremwertes mit Nebenbedingungen wird in den Lehrbüchern der Analysis gewöhnlich mit der Methode der Lagrange-Multiplikatoren durchgeführt. Wir stützen uns auch hier auf orthogonale Transformationen. Die folgende Methode geht auf LAWSON und HANSON [18] zurück. Sie benutzt eine Basis des Nullraumes von  $E$ . Zunächst führen wir eine orthogonale Zerlegung von  $E$  wie in (A.5.5) durch,

$$E = H R K^T. \quad (\text{A.18.4})$$

Dabei denken wir uns die orthogonale  $(n \times n)$ -Matrix  $K$  aufgebaut aus einer  $(n \times \ell)$ -Matrix  $K_1$  und einer  $(n \times (n - \ell))$ -Matrix  $K_2$ :

$$K = (K_1, K_2). \quad (\text{A.18.5})$$

Nach (A.5.6) und (A.5.7) haben alle Lösungen von (A.18.2) die Form

$$\hat{\mathbf{x}} = K_1 \tilde{\mathbf{p}}_1 + K_2 \mathbf{p}_2 = \tilde{\mathbf{x}} + K_2 \mathbf{p}_2 . \quad (\text{A.18.6})$$

Dabei ist  $\tilde{\mathbf{x}}$  die eindeutige Lösung minimalen Betrages von (A.18.2), die wir der Kürze halber in der Form  $\tilde{\mathbf{x}} = E^+ \mathbf{d}$  schreiben, vgl. (A.10.3), und  $\mathbf{p}_2$  ist ein beliebiger  $(n - \ell)$ -Vektor, denn die Vektoren  $K_2 \mathbf{p}_2$  bilden den Nullraum von  $E$ ,

$$E K_2 \mathbf{p}_2 = 0 . \quad (\text{A.18.7})$$

Die Nebenbedingung (A.18.2) besagt also, daß der Vektor  $\mathbf{x}$ , für den (A.18.1) minimal ist, aus der Menge aller Vektoren  $\hat{\mathbf{x}}$  stammen muß, d. h.

$$(A \hat{\mathbf{x}} - \mathbf{b})^2 = (A(\tilde{\mathbf{x}} + K_2 \mathbf{p}_2) - \mathbf{b})^2 = (A K_2 \mathbf{p}_2 - (\mathbf{b} - A \tilde{\mathbf{x}}))^2 = \min . \quad (\text{A.18.8})$$

Diese Beziehung ist eine Aufgabe der kleinsten Quadrate ohne Nebenbedingungen, aus der der  $(n - \ell)$ -Vektor  $\mathbf{p}_2$  bestimmt werden kann. Ihre Lösung schreiben wir mit (A.10.3) in der Form

$$\tilde{\mathbf{p}}_2 = (A K_2)^+ (\mathbf{b} - A \tilde{\mathbf{x}}) . \quad (\text{A.18.9})$$

Durch Einsetzen in (A.18.6) erhalten wir schließlich

$$\mathbf{x} = \tilde{\mathbf{x}} + A^+ (\mathbf{b} - A \tilde{\mathbf{x}}) = E^+ \mathbf{d} + K_2 (A K_2)^+ (\mathbf{b} - A E^+ \mathbf{d}) \quad (\text{A.18.10})$$

als Lösung von (A.18.1) mit der Nebenbedingung (A.18.2).

Die folgende Vorschrift liefert die Lösung (A.18.10). Sie geht davon aus, daß wegen (A.18.3)  $H = I$  gesetzt werden kann.

*Schritt 1:* Man bestimmt eine orthogonale Matrix  $K = (K_1, K_2)$  wie in (A.18.5) derart, daß

$$E K = (E K_1, E K_2) = (\tilde{E}_1, 0)$$

und  $\tilde{E}_1$  eine untere Dreiecksmatrix ist. Außerdem berechnet man

$$A K = (A K_1, A K_2) = (\tilde{A}_1, \tilde{A}_2) .$$

*Schritt 2:* Man bestimmt die Lösung  $\tilde{\mathbf{p}}_1$  von

$$\tilde{E}_1 \tilde{\mathbf{p}}_1 = \mathbf{d} .$$

Das ist einfach, da  $\tilde{E}_1$  eine untere Dreiecksmatrix vom Rang  $\ell$  ist. Offenbar ist  $\tilde{\mathbf{x}} = K_1 \tilde{\mathbf{p}}_1$ .

*Schritt 3:* Man bestimmt den Vektor

$$\bar{\mathbf{b}} = \mathbf{b} - \tilde{A}_1 \tilde{\mathbf{p}}_1 = \mathbf{b} - A K_1 K_1^T \tilde{\mathbf{x}} = \mathbf{b} - A \tilde{\mathbf{x}} .$$

*Schritt 4:* Man bestimmt die Lösung  $\tilde{\mathbf{p}}_2$  der Aufgabe (A.18.8) der kleinsten Quadrate (ohne Nebenbedingungen),

$$(\tilde{A}_2 \mathbf{p}_2 - \bar{\mathbf{b}})^2 = \min .$$

*Schritt 5:* Aus den Ergebnissen der Schritte 2 und 4 findet man die Lösung von (A.18.1) mit der Nebenbedingung (A.18.2),

$$\mathbf{x} = K \begin{pmatrix} \tilde{\mathbf{p}}_1 \\ \tilde{\mathbf{p}}_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} K_1 \tilde{\mathbf{p}}_1 \\ K_2 \tilde{\mathbf{p}}_2 \end{pmatrix}.$$

Wir betrachten jetzt noch ein einfaches Beispiel, das sowohl die Aufgabe der kleinsten Quadrate mit Nebenbedingungen als auch die angegebene Lösungsmethode illustriert.

**Beispiel A.5:** Kleinste Quadrate mit Nebenbedingungen

Die Beziehung (A.18.1) möge die einfache Form

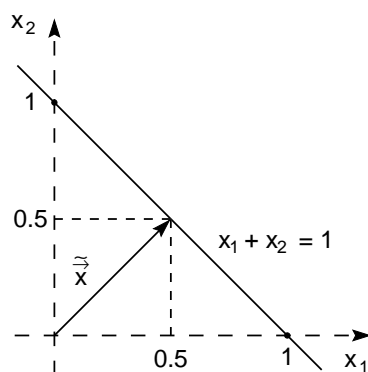
$$r^2 = \mathbf{x}^2 = \min$$

für  $n = 2$  annehmen. Dann ist  $m = n = 2$ ,  $A = I$  und  $\mathbf{b} = 0$ . Die Nebenbedingung sei

$$x_1 + x_2 = 1,$$

also  $\ell = 1$ ,  $E = (1, 1)$ ,  $\mathbf{d} = 1$ .

Die Aufgabe wurde so gewählt, daß sie sich ohne jeden mathematischen Aufwand aus der Anschauung heraus lösen läßt. Die Funktion  $z = \mathbf{x}^2 = x_1^2 + x_2^2$  entspricht dem Normalparaboloid im  $(x_1, x_2, z)$ -Raum, dessen Minimum bei  $x_1 = x_2 = 0$  liegt. Nun soll aber das Minimum nicht in der ganzen  $(x_1, x_2)$ -Ebene, sondern nur auf der Geraden  $x_1 + x_2 = 1$  gesucht werden, Bild A.7. Es liegt dann offenbar an der Stelle, an der die Gerade ihren geringsten Abstand vom Ursprung hat, also bei  $x_1 = x_2 = 1/2$ .



**Bild A.7:** Die Lösung  $\tilde{\mathbf{x}}$  zu Beispiel A.5 liegt auf der durch die Nebenbedingung gegebenen Geraden  $x_1 + x_2 = 1$ .

Das gleiche Ergebnis liefert natürlich unser Algorithmus. Mit

$$K = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}$$

erhalten wir  $\tilde{E}_1 = \sqrt{2}$ ,  $\tilde{\mathbf{p}}_1 = 1/\sqrt{2}$ ,

$$\tilde{A}_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad (\tilde{A}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad \tilde{\mathbf{b}} = -\frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

Die Aufgabe  $(\tilde{A}_2 \mathbf{p}_2 - \tilde{\mathbf{b}})^2 = \min$  lösen wir mit den Normalgleichungen

$$\tilde{\mathbf{p}}_2 = (\tilde{A}_2^T \tilde{A}_2)^{-1} \tilde{A}_2^T \tilde{\mathbf{b}} = (\sqrt{2})^{-1} \cdot 0 = 0.$$

Die Gesamtlösung ist dann

$$\mathbf{x} = K \begin{pmatrix} \tilde{\mathbf{p}}_1 \\ \tilde{\mathbf{p}}_2 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1/2 \\ 1/2 \end{pmatrix}. \blacksquare$$

Die Methode `DatanMatrix.leastSquaresWithConstraints` löst die Aufgabe der kleinsten Quadrate  $(\mathbf{A}\mathbf{x} - \mathbf{b})^2 = \min$  mit der linearen Nebenbedingung  $\mathbf{E}\mathbf{x} = \mathbf{d}$ .

## A.19 Java-Klassen und Programmbeispiele

### Java-Klassen zu Vektor- und Matrixrechnung

`DatanVector` enthält Methoden zur Vektorrechnung.

`DatanMatrix` enthält Methoden zur Matrixrechnung.

**Programmbeispiel A.1:** Die Klasse `E1Mtx` demonstriert einfache Operationen der Matrix- und Vektoralgebra

Zunächst werden die Matrizen

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 2 & 1 & 3 \end{pmatrix}, \quad B = \begin{pmatrix} 2 & 3 & 1 \\ 1 & 5 & 4 \end{pmatrix}, \quad C = \begin{pmatrix} 1 & 5 \\ 3 & 4 \\ 2 & 3 \end{pmatrix}$$

und die Vektoren

$$\mathbf{u} = \begin{pmatrix} 0 \\ 3 \\ 4 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{v} = \begin{pmatrix} 3 \\ 1 \\ 2 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{w} = \begin{pmatrix} 5 \\ 2 \end{pmatrix}$$

bereitgestellt. Anschließend werden mit den jeweils geeigneten Methoden einfache Operationen mit diesen Größen ausgeführt. Die Ergebnis-Matrizen und -Vektoren werden numerisch ausgegeben. Die Operationen sind

$$R = A, R = A + B, R = A - B, R = AC, S = AB^T, T = A^T B, R = I, R = 0.5 A,$$

$$R = A^T, \mathbf{z} = \mathbf{w}, \mathbf{x} = \mathbf{u} + \mathbf{v}, \mathbf{x} = \mathbf{u} - \mathbf{v}, d = \mathbf{u} \cdot \mathbf{v}, s = |\mathbf{u}|, \mathbf{x} = 0.5 \mathbf{u}, \mathbf{x} = \mathbf{0}.$$

**Programmbeispiel A.2:** Die Klasse `E2Mtx` demonstriert die Handhabung von Untermatrizen und -vektoren mit den Unterprogrammen

Es werden die Matrizen

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 2 & 1 & 3 \end{pmatrix}, \quad D = \begin{pmatrix} 0 & 2 \\ 1 & 3 \end{pmatrix}$$

und die Vektoren

$$\mathbf{u} = \begin{pmatrix} 0 \\ 3 \\ 4 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{w} = \begin{pmatrix} 5 \\ 2 \end{pmatrix}$$

bereitgestellt.

Anschließend wird eine Untermatrix  $S$  aus  $A$  entnommen. Es wird eine Untermatrix von  $A$  mit  $D$  überschrieben. Es wird ein Spaltenvektor und ein Zeilenvektor aus  $A$  entnommen bzw. in  $A$  eingefügt. Schließlich werden entsprechend einer Liste Elemente aus dem Vektor  $\mathbf{u}$  entnommen und zu einem Vektor  $\mathbf{z}$  zusammengefaßt, und es werden die Elemente von  $\mathbf{w}$  an die durch eine Liste festgelegten Positionen des Vektors  $\mathbf{u}$  gesetzt.

**Programmbeispiel A.3:** Die Klasse `E3Mtx` demonstriert die Ausführung von Givens-Transformationen

Zunächst die beiden Vektoren

$$\mathbf{u} = \begin{pmatrix} 3 \\ 4 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{w} = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

definiert. Anschließend werden mit Hilfe von `DatanMatrix.defineGivensTransformation` die Transformationsparameter  $c$  und  $s$  für den Vektor  $\mathbf{u}$  berechnet und ausgegeben. Die Givens-Transformation von  $\mathbf{u}$  mit diesen Parametern mit Hilfe von `DatanMatrix.applyGivensTransformation` liefert

$$\mathbf{u}' = \begin{pmatrix} 5 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Anschließend werden durch einen Anruf von `DatanMatrix.defineAndApplyGivensTransformation` sowohl die Parameter  $c$  und  $s$  für den Vektor  $\mathbf{w}$  berechnet als auch die Transformation auf diesen Vektor angewendet.

**Programmbeispiel A.4:** Die Klasse `E4Mtx` demonstriert die Ausführung von Householder-Transformationen

Zunächst werden die beiden Vektoren

$$\mathbf{v} = \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ 0 \\ 4 \\ 3 \\ 4 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{c} = \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ 0 \\ 4 \\ 3 \\ 4 \end{pmatrix}$$

definiert. Außerdem werden die Indizes  $n$ ,  $p$  und  $\ell$  zu  $n = 6$ ,  $p = 3$ ,  $\ell = 5$  gesetzt. Mit einem Aufruf von `DatanMatrix.defineHouseholderTransformation` wird die Householder-Transformation, die durch diese Indizes und den Vektor  $\mathbf{v}$  definiert ist, festgelegt. Die Anwendung der Transformation auf die Vektoren  $\mathbf{v}$  und  $\mathbf{c}$  geschieht in zwei Aufrufen von `DatanMatrix.applyHouseholderTransformation`. Die Ergebnisse werden alphanumerisch ausgegeben.

**Programmbeispiel A.5:** Die Klasse `E5Mtx` demonstriert den Gaußschen Algorithmus zur Lösung von Matrixgleichungen

Es werden die Matrix

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 2 & 1 & -2 \\ 1 & 1 & 2 \end{pmatrix}$$

und die  $(3 \times 3)$ -Einheitsmatrix  $B$  definiert. Ein Aufruf der Methode `DatanMatrix.matrixEquation` löst die Matrixgleichung  $AX = B$ . Damit ist  $X$  die Inverse von  $A$ . Die Matrix  $A$  ist identisch zu der in Beispiel A.1 gewählten. In diesem Beispiel wird der Algorithmus mit allen Zwischenschritten vorgerechnet.

**Programmbeispiel A.6:** Die Klasse `E6Mtx` demonstriert Cholesky-Zerlegung und Cholesky-Inversion

Es werden die Matrizen

$$T = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 0 & 4 & 5 \\ 0 & 0 & 6 \end{pmatrix}, \quad C = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}$$

definiert und es wird die symmetrische, positiv definite Matrix  $S = T^T T$  konstruiert. Durch einen Aufruf von `DatanMatrix.choleskyDecomposition` wird die Cholesky-Zerlegung  $S = U^T U$  ausgeführt. Die Dreiecksmatrix  $U$  (die in unserem Beispiel natürlich gleich  $T$  ist) wird ausgegeben. Die Multiplikation von  $U^T$  mit  $U$  liefert in der Tat  $U^T U = S$ . Die Methode `DatanMatrix.choleskyMultiply` wird anschließend zur Berechnung von  $R = UC$  benutzt. Schließlich wird durch Cholesky-Inversion mit `DatanMatrix.choleskyInversion` die Inverse  $S^{-1}$  von  $S$  berechnet. Multiplikation mit der ursprünglichen Matrix  $A$  liefert wie erwartet.  $SS^{-1} = I$ .

**Programmbeispiel A.7:** Die Klasse `E7Mtx` demonstriert die Singulärwertzerlegung

Das Programm arbeitet zunächst mit der gleichen Matrix wie `E5Mtx`. Allerdings wird die Matrixinversion jetzt mit Hilfe von `DatanMatrix.pseudoInverse` vorgenommen.

Anschließend wird sie durch

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 2 \\ 2 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \end{pmatrix}$$

ersetzt. Diese Matrix ist wegen zweier gleicher Spalten singulär. Mit einem anderen Aufruf von `DatanMatrix.pseudoInverse` werden dann nicht nur die pseudoinverse Matrix, sondern auch der Vektor der Residuen, die Diagonalmatrix  $D$  und die beiden orthogonalen Matrizen  $U$  und  $V$  gewonnen.



**Programmbeispiel A.8:** Die Klasse `E8Mtx` demonstriert die Bearbeitung von 9 verschiedenen Fällen von Matrixgleichungen durch Singulärwertzerlegung

Im Rahmen unserer Programme, insbesondere zur Bearbeitung von Aufgaben zu kleinsten Quadraten oder zur Minimierung, werden Matrixgleichungen praktisch ausschließlich mit der Singulärwertzerlegung gelöst. In Abschnitt A.5 werden die verschiedenen Fälle der Matrixgleichung  $A\mathbf{x} \approx \mathbf{b}$  unterschieden. Ist  $A$  eine  $(m \times n)$ -Matrix, so werden zunächst die Fälle  $m = n$  (Fall 1),  $m > n$  (Fall 2) und  $m < n$  (Fall 3) unterschieden. Eine weitere Unterteilung der Fälle bewirkt der Rang, d. h. ist der Rang  $k$  von  $A$  gerade  $k = \min(m, n)$ , so liegt der Fall 1a (bzw. 2a oder 3a) vor. Ist  $k < \min(m, n)$ , handelt es sich um Fall 1b (bzw. 2b oder 3b). Der Rang einer Matrix ist gleich der Anzahl ihrer nichtverschwindenden Singulärwerte. Bei numerischen Rechnungen, die ja immer mit endlicher Genauigkeit durchgeführt werden, muß offenbar festgelegt werden, was man unter „nichtverschwindend“ verstehen will. Wir benutzen dazu das Verfahren der Singulärwertanalyse (Abschnitt A.13) und setzen einen Singulärwert gleich Null, wenn er kleiner als der Bruchteil  $f$  des größten Singulärwerts ist. Die Anzahl der nach dieser Analyse verbleibenden endlichen Singulärwerte heißt *Pseudorang*. Zusätzlich zu den oben genannten Fällen betrachten wir jetzt noch die Fälle 1c, 2c bzw. 3c, in denen die Matrix  $A$  zwar den vollen Rang, nicht aber den vollen Pseudorang hat.

Das Programm durchläuft zwei ineinander geschachtelte Schleifen. Die äußere Schleife stellt die Fälle 1, 2, 3, die innere Schleife stellt die Unterfälle a, b, c ein. Für jeden Fall wird die Matrix  $A$  aus einzelnen Vektoren aufgebaut. Im Unterfall b werden zwei dieser Vektoren identisch gewählt. Im Unterfall c sind sie identisch bis auf ein Element, welches in einem Vektor (im Vergleich zum anderen) um  $\varepsilon = 10^{-12}$  verschieden ist. Im Fall 3 hat das lineare Gleichungssystem, das durch die Matrixgleichung  $A\mathbf{x} = \mathbf{b}$  symbolisiert wird, weniger Gleichungen ( $m$ ) als Unbekannte ( $n$ ). Dieser Fall tritt in der Praxis nicht auf und ist daher in den Programmen nicht vorgesehen. Er wird hier dadurch simuliert, daß im Fall 3 mit  $m = 2$  und  $n = 3$  die Matrix  $A$  durch Hinzufügen einer weiteren Zeile, deren sämtliche Elemente Null sind, zu einer  $(3 \times 3)$ -Matrix ergänzt und  $m = 3$  gesetzt wird.

Ergibt die Singulärwertanalyse, daß ein oder mehrere Singulärwerte kleiner sind als der Bruchteil  $f$  des größten Singulärwerts, so werden sie zu Null gesetzt. In unserem Beispiel wird für jeden der 9 Fälle die Singulärwertzerlegung zweimal durchgeführt, zuerst mit  $f = 10^{-15}$  und anschließend mit  $f = 10^{-10}$ . Für  $f = 10^{-15}$  gilt in unseren Beispielen der Fälle 1c, 2c, 3c die Matrix  $A$  als Matrix mit vollen Rang, trotz des kleinen Wertes von  $\varepsilon = 10^{-12}$ . Die Singulärwertanalyse mit  $f = 10^{-10}$  reduziert die Zahl der Singulärwerte. Man beachte die stark verschiedenen Elemente der Lösungsmatrix je nach Wahl von  $f$  für die Fälle 1c, 2c, 3c. Die unhandlichen Zahlenwerte für  $f = 10^{-15}$  lassen erkennen, dass wir uns der Grenze der numerischen Stabilität nähern.

**Programmbeispiel A.9:** Die Klasse `E9Mtx` demonstriert die Benutzung der Methode `DatanMatrix.marquardt`

Die Methode `DatanMatrix.marquardt` wird kaum direkt benutzt werden. Sie wurde zum Einsatz in `LsqMar` und `MinMar` geschrieben. Der Vollständigkeit halber wird hier noch eine kurze Klasse angegeben. Sie löst die nach (A.17.3) modifizierte Aufgabe  $A\mathbf{x} \approx \mathbf{b}$  für  $\lambda_1 = \lambda$  und  $\lambda_2 = \lambda/10$  zu vorgegebenen  $A$ ,  $\mathbf{b}$  und  $\lambda$  und gibt die Ergebnisse  $\mathbf{x}_1$  und  $\mathbf{x}_2$  aus.

**Programmbeispiel A.10:** Die Klasse `E10Mtx` demonstriert die Bearbeitung  
kleinster Quadrate mit Nebenbedingungen mit der Methode  
`DatanGraphics.leastSquaresWithConstraints`

Es wird die Aufgabe aus Beispiel 9.9 und 9.10, bearbeitet, nämlich die Messung der drei Winkel eines Dreiecks zu  $x_1 = 89$ ,  $x_2 = 31$ ,  $x_3 = 62$  und der Auswertung dieser Messungen unter Berücksichtigung der Nebenbedingung  $x_1 + x_2 + x_3 = 180$ . Die Auswertung erfordert die Lösung von  $(A\mathbf{x} - \mathbf{b})^2 = \min$  mit der Nebenbedingung  $E\mathbf{x} = \mathbf{d}$  mit

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{b} = \begin{pmatrix} 89 \\ 31 \\ 62 \end{pmatrix}, \quad E = (1, 1, 1), \quad \mathbf{d} = 180.$$

Im Programm werden die Matrizen bzw. Vektoren  $A$ ,  $\mathbf{b}$ ,  $E$ ,  $\mathbf{d}$  bereitgestellt. Die Lösung wird mit einem Aufruf von `DatanGraphics.leastSquaresWithConstraints` berechnet. Sie ist natürlich identisch mit der in den oben genannten Beispielen gefundenen.

## B Elemente der Kombinatorik

Wir betrachten  $n$  unterscheidbare Objekte  $a_1, a_2, \dots, a_n$  und fragen nach der Anzahl der Möglichkeiten  $P_n^k$ , in denen man  $k$  davon in einer geordneten Reihe anordnen kann. Solche Anordnungen heißen *Permutationen*. Für das Beispiel  $n = 4, k = 2$  sind diese Permutationen

$$\begin{aligned} & a_1 a_2, \quad a_1 a_3, \quad a_1 a_4, \\ & a_2 a_1, \quad a_2 a_3, \quad a_2 a_4, \\ & a_3 a_1, \quad a_3 a_2, \quad a_3 a_4, \\ & a_4 a_1, \quad a_4 a_2, \quad a_4 a_3, \end{aligned}$$

d. h.  $P_k^n = 12$ . Die Antwort für das allgemeine Problem kann aus diesem Schema abgeleitet werden. Es gibt  $n$  verschiedene Möglichkeiten, den ersten Platz in einer Reihe zu besetzen. Wenn aber einmal eine dieser Möglichkeiten gewählt wurde, bleiben nur noch  $n - 1$  Objekte über, d. h., es gibt noch  $n - 1$  Möglichkeiten, den zweiten Platz zu besetzen usw. Deshalb ist

$$P_k^n = n(n-1)(n-2) \cdots (n-k+1). \quad (\text{B.1})$$

Das Ergebnis kann auch in der Form

$$P_k^n = \frac{n!}{(n-k)!} \quad (\text{B.2})$$

geschrieben werden. Dabei ist

$$n! = 1 \cdot 2 \cdots n; \quad 0! = 1, \quad 1! = 1. \quad (\text{B.3})$$

Häufig interessiert man sich nicht für die Reihenfolge der  $k$  Objekte innerhalb einer Permutation (die gleichen  $k$  Objekte können auf  $k!$  verschiedene Weisen innerhalb der Reihe angeordnet sein), sondern betrachtet nur die Anzahl der verschiedenen Auswahlen von  $k$  Objekten aus insgesamt  $n$ . Eine solche Auswahl heißt *Kombination*; die Anzahl der möglichen Kombinationen von  $k$  Elementen aus  $n$  ist dann

$$C_k^n = \frac{P_k^n}{k!} = \frac{n!}{k!(n-k)!} = \binom{n}{k}. \quad (\text{B.4})$$

Für die *Binomialkoeffizienten*  $\binom{n}{k}$  gilt die einfache Rekursionsformel

$$\binom{n-1}{k} + \binom{n-1}{k-1} = \binom{n}{k}, \quad (\text{B.5})$$

$n$	$\binom{n}{k}$																				
0	1																				
1					1		1														
2					1		2		1												
3					1		3		3		1										
4					1		4		6		4		1								
5					1		5		10		10		5		1						
6					1		6		15		20		15		6		1				
7					1		7		21		35		35		21		7		1		
8					1		8		28		56		70		56		28		8		1
$\vdots$	$\vdots$																				
$\nearrow$	$\nearrow$	$\nearrow$	$\nearrow$	$\nearrow$	$\nearrow$	$\nearrow$	$\nearrow$	$\nearrow$	$\nearrow$	$\nearrow$											
0	1	2	3	4	5	6	7	8	$k$												

**Bild B.1:** Pascalsches Dreieck.

die man leicht durch Ausrechnen beweist:

$$\frac{(n-1)!}{k!(n-k-1)!} + \frac{(n-1)!}{(k-1)!(n-k)!} = \frac{(n-k)(n-1)! + k(n-1)!}{k!(n-k)!} = \frac{n!}{k!(n-k)!}.$$

Die Rekursionsformel ist die Grundlage des berühmten *Pascalschen Dreiecks*, das in Bild B.1 wegen seiner Schönheit wiedergegeben ist. Der Name Binomialkoeffizient rührt von dem berühmten *binomischen Lehrsatz* her,

$$(a+b)^n = \sum_{k=0}^n \binom{n}{k} a^k b^{n-k}, \quad (\text{B.6})$$

dessen Beweis (durch vollständige Induktion) wir dem Leser überlassen. Wir benutzen den Satz, um eine wichtige Eigenschaft der Koeffizienten  $\binom{n}{k}$  herzuleiten, schreiben ihn dazu in der einfachen Form für  $b = 1$ , d. h.

$$(a+1)^n = \sum_{k=0}^n \binom{n}{k} a^k,$$

und wenden ihn jetzt ein zweites Mal an:

$$(a+1)^{n+m} = (a+1)^n (a+1)^m, \quad \sum_{\ell=0}^{n+m} \binom{n+m}{\ell} a^\ell = \sum_{j=0}^n \binom{n}{j} a^j \sum_{k=0}^m \binom{m}{k} a^k.$$

Betrachten wir nur den Term mit  $a^\ell$ , so finden wir durch Koeffizientenvergleich

$$\binom{n+m}{\ell} = \sum_{j=0}^{\ell} \binom{n}{j} \binom{m}{\ell-j}. \quad (\text{B.7})$$

## C Formeln und Methoden zur Berechnung statistischer Funktionen

### C.1 Binomialverteilung

Die Binomialverteilung (5.1.3)

$$W_k^n = \binom{n}{k} p^k (1-p)^{n-k} \quad (\text{C.1.1})$$

und ihre Verteilungsfunktion

$$P(k < K) = \sum_{k=0}^{K-1} W_k^n \quad (\text{C.1.2})$$

werden mit den Methoden `StatFunct.binomial` bzw. `StatFunct.cumulativeBinomial` berechnet. Aus Gründen der numerischen Stabilität wird der Logarithmus der Eulerschen Gamma-Funktion in der Berechnung benutzt.

### C.2 Hypergeometrische Verteilung

Die hypergeometrische Verteilung (5.3.1)

$$W_k = \frac{\binom{K}{k} \binom{N-K}{n-k}}{\binom{N}{n}}, \quad n \leq N, k \leq K, \quad (\text{C.2.1})$$

und die zugehörige Verteilungsfunktion

$$P(k < k') = \sum_{k=0}^{k'-1} W_k \quad (\text{C.2.2})$$

werden mit den Methoden `StatFunct.hypergeometric` bzw. `StatFunct.cumulativeHypergeometric` berechnet.

## C.3 Poisson-Verteilung

Die Poisson-Verteilung (5.4.1)

$$f(k; \lambda) = \frac{\lambda^k}{k!} e^{-\lambda} \quad (\text{C.3.1})$$

und die zugehörige Verteilungsfunktion

$$P(k < K) = \sum_{k=0}^{K-1} f(k; \lambda) \quad (\text{C.3.2})$$

werden durch die Methoden `StatFunct.poisson` bzw.

`StatFunct.cumulativePoisson` berechnet.

Die Größen  $f(k; \lambda)$  und  $F(K; \lambda)$  hängen nicht nur von den Werten der diskreten Variablen  $k$  bzw.  $K$ , sondern auch von dem kontinuierlichen Parameter  $\lambda$  ab. Zu vorgegebenem  $P$  erfüllt ein bestimmter Parameterwert  $\lambda_P$  die Gleichung (C.3.2). Wir können ihn als Quantil

$$\lambda = \lambda_P(K) \quad (\text{C.3.3})$$

der Poisson-Verteilung bezeichnen. Seine Berechnung erfolgt mit der Methode `StatFunct.quantilePoisson`.

## C.4 Normalverteilung

Die Wahrscheinlichkeitsdichte der *standardisierten Normalverteilung* ist

$$\phi_0(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp(-x^2/2). \quad (\text{C.4.1})$$

Sie wird mit der Methode `StatFunct.standardNormal` berechnet.

Die *Normalverteilung* mit Mittelwert  $x_0$  und Varianz  $\sigma^2$ ,

$$\phi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \exp\left(-\frac{(x-x_0)^2}{2\sigma^2}\right), \quad (\text{C.4.2})$$

läßt sich nach Einführung der standardisierten Variablen

$$u = \frac{x - x_0}{\sigma} \quad (\text{C.4.3})$$

leicht durch (C.4.1) ausdrücken,

$$\phi(x) = \frac{1}{\sigma} \phi_0(u) . \quad (\text{C.4.4})$$

Sie wird mit der Methode `StatFunct.normal` berechnet.

Die Verteilungsfunktion der standardisierten Normalverteilung

$$\psi_0(x) = \int_{-\infty}^x \phi_0(x) dx = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^x \exp\left(-\frac{x^2}{2}\right) dx \quad (\text{C.4.5})$$

ist ein Integral, das sich nicht in geschlossener Form berechnen läßt. Wir können es aber auf die Berechnung der unvollständigen Gamma-Funktion, Abschnitt D.5, zurückführen.

Die Verteilungsfunktion einer Normalverteilung mit Mittelwert  $x_0$  und Varianz  $\sigma^2$  ergibt sich aus (C.4.5) zu

$$\psi(x) = \psi_0(u) , \quad u = \frac{x - x_0}{\sigma} . \quad (\text{C.4.6})$$

Wir führen jetzt die *Fehlerfunktion* (englisch: *error function*)

$$\text{erf}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x e^{-t^2} dt , \quad x \geq 0 , \quad (\text{C.4.7})$$

ein. Vergleich mit der Definition (D.5.1) der unvollständigen Gamma-Funktion liefert

$$\begin{aligned} \text{erf}(x) &= \frac{2}{\Gamma(\frac{1}{2})} \int_{t=0}^{t=x} e^{-t^2} dt = \frac{1}{\Gamma(\frac{1}{2})} \int_{u=0}^{u=x^2} e^{-u} u^{-1/2} du , \\ \text{erf}(x) &= P\left(\frac{1}{2}, x^2\right) . \end{aligned} \quad (\text{C.4.8})$$

Andererseits besteht ein enger Zusammenhang zwischen (C.4.6) und (C.4.7),

$$\psi_{x_0=0, \sigma=1/\sqrt{2}}(x) = \psi_0(u = \sqrt{2}x) = \frac{1}{2} [1 + \text{sign}(x) \text{erf}(|x|)]$$

oder

$$\psi_0(u) = \frac{1}{2} \left[ 1 + \text{sign}(u) \text{erf}\left(\frac{|u|}{\sqrt{2}}\right) \right]$$

bzw.

$$\psi_0(u) = \frac{1}{2} \left[ 1 + \text{sign}(u) P\left(\frac{1}{2}, \frac{u^2}{2}\right) \right] . \quad (\text{C.4.9})$$

Die Methoden `StatFunct.cumulativeStandardNormal` bzw.

`StatFunct.cumulativeNormal` liefern die Verteilungsfunktionen (C.4.4) bzw. (C.4.5).

Wir berechnen schließlich noch die Quantile der standardisierten Normalverteilung (mit der Methode `StatFunct.quantileStandardNormal`). Zu vorgegebener Wahrscheinlichkeit  $P$  ist das Quantil  $x_p$  durch die Beziehung

$$P = \psi_0(x_p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{x_p} e^{-x^2/2} dx \quad (\text{C.4.10})$$

definiert. Wir bestimmen es durch Aufsuchen der Nullstelle der Funktion

$$k(x, P) = P - \psi_0(x) \quad (\text{C.4.11})$$

nach dem Verfahren aus Abschnitt E.2.

Für das Quantil  $x_P$  zur Wahrscheinlichkeit  $P$  für eine Normalverteilung mit Mittelwert  $x_0$  und Standardabweichung  $\sigma$  (berechnet mit `StatFunct.quantileNormal`) gilt

$$P = \psi_0(u_P), \quad x_P = x_0 + \sigma u_P. \quad (\text{C.4.12})$$

## C.5 $\chi^2$ -Verteilung

Die Wahrscheinlichkeitsdichte (6.6.10) der  $\chi^2$ -Verteilung mit  $n$  Freiheitsgraden

$$f(\chi^2) = \frac{1}{2^\lambda \Gamma(\lambda)} (\chi^2)^{\lambda-1} e^{-\frac{1}{2}\chi^2}, \quad \lambda = \frac{n}{2}, \quad (\text{C.5.1})$$

berechnen wir mit `StatFunct.chiSquared`.

Die Verteilungsfunktion

$$F(\chi^2) = \frac{1}{\Gamma(\lambda)} \int_{u=0}^{u=\chi^2} \frac{1}{2} \left(\frac{u}{2}\right)^{\lambda-1} e^{-\frac{1}{2}u} du = \frac{1}{\Gamma(\lambda)} \int_{t=0}^{t=\chi^2/2} e^{-t} t^{\lambda-1} dt \quad (\text{C.5.2})$$

erkennen wir mit (D.5.1) als unvollständige Gamma-Funktion

$$F(\chi^2) = P\left(\lambda, \frac{\chi^2}{2}\right) = P\left(\frac{n}{2}, \frac{\chi^2}{2}\right) \quad (\text{C.5.3})$$

und berechnen sie mit `StatFunct.cumulativeChiSquared`.

Das Quantil  $\chi_P^2$  der  $\chi^2$ -Verteilung zu vorgegebener Wahrscheinlichkeit  $P$ , das durch

$$h(\chi_P^2) = P - F(\chi_P^2) = 0 \quad (\text{C.5.4})$$

gegeben ist, berechnen wir als Nullstelle der Funktion  $h(\chi^2)$  in `StatFunct.quantileChiSquared`.



## C.6 $F$ -Verteilung

Die Wahrscheinlichkeitsdichte (8.2.3) der  $F$ -Verteilung mit  $f_1$  und  $f_2$  Freiheitsgraden

$$f(F) = \left(\frac{f_1}{f_2}\right)^{\frac{1}{2}f_1} \frac{\Gamma(\frac{1}{2}(f_1 + f_2))}{\Gamma(\frac{1}{2}f_1)\Gamma(\frac{1}{2}f_2)} F^{\frac{1}{2}f_1-1} \left(1 + \frac{f_1}{f_2}F\right)^{-\frac{1}{2}(f_1+f_2)} \quad (\text{C.6.1})$$

berechnen wir mit `StatFunct.fDistribution`.

Die Verteilungsfunktion

$$F(F) = \frac{\Gamma(\frac{1}{2}(f_1 + f_2))}{\Gamma(\frac{1}{2}f_1)\Gamma(\frac{1}{2}f_2)} \left(\frac{f_1}{f_2}\right)^{\frac{1}{2}f_1} \int_0^F F^{\frac{1}{2}f_1-1} \left(1 + \frac{f_1}{f_2}F\right)^{-\frac{1}{2}(f_1+f_2)} dF \quad (\text{C.6.2})$$

läßt sich mit

$$t = \frac{f_2}{f_2 + f_1 F}, \quad |dt| = \frac{f_1 f_2}{(f_2 + f_1 F)^2} |dF|$$

umformen zu

$$\begin{aligned} F(F) &= \frac{1}{B(\frac{1}{2}f_1, \frac{1}{2}f_2)} \int_{t=\frac{f_2}{f_2+f_1F}}^{t=1} (1-t)^{\frac{1}{2}f_1-1} t^{\frac{1}{2}f_2-1} dt \\ &= 1 - I_{f_2/(f_2+f_1F)}\left(\frac{1}{2}f_2, \frac{1}{2}f_1\right), \end{aligned} \quad (\text{C.6.3})$$

d. h. auf die unvollständige Beta-Funktion zurückführen, vgl. (D.6.1). Wir berechnen sie mit `StatFunct.cumulativeFDistribution`.

Das Quantil  $F_P$  der  $F$ -Verteilung zu vorgegebener Wahrscheinlichkeit  $P$  ist durch die Nullstelle der Funktion

$$h(F) = P - F(F) \quad (\text{C.6.4})$$

gegeben. Es wird mit `StatFunct.quantileFDistribution` berechnet

## C.7 $t$ -Verteilung

Die Wahrscheinlichkeitsdichte (8.3.7) der Student'schen  $t$ -Verteilung mit  $f$  Freiheitsgraden

$$f(t) = \frac{\Gamma(\frac{1}{2}(f+1))}{\Gamma(\frac{1}{2}f)\Gamma(\frac{1}{2})\sqrt{f}} \left(1 + \frac{t^2}{f}\right)^{-\frac{1}{2}(f+1)} = \frac{1}{B(\frac{1}{2}, \frac{f}{2})\sqrt{f}} \left(1 + \frac{t^2}{f}\right)^{-\frac{1}{2}(f+1)} \quad (\text{C.7.1})$$

berechnen wir mit `StatFunct.student`.

Die Verteilungsfunktion der  $t$ -Verteilung lässt sich mit der Substitution

$$u = \frac{f}{f + t^2}$$

durch die unvollständige Betafunktion (D.6.1) ausdrücken,

$$F(t) = \frac{1}{B(\frac{1}{2}, \frac{f}{2})\sqrt{f}} \int_{-\infty}^t \left(1 + \frac{t^2}{f}\right)^{-\frac{1}{2}(f+1)} dt \quad (\text{C.7.2})$$

$$\begin{aligned} &= \frac{1}{2} + \frac{\text{sign}(t)}{B(\frac{1}{2}, \frac{f}{2})\sqrt{f}} \int_0^{|t|} \left(1 + \frac{t^2}{f}\right)^{-\frac{1}{2}(f+1)} dt \\ &= \frac{1}{2} + \frac{\text{sign}(t)}{B(\frac{1}{2}, \frac{f}{2})\sqrt{f}} \frac{1}{2} \int_{u=f/(f+t^2)}^{u=1} u^{\frac{f}{2}-1} (1-u)^{\frac{1}{2}} du, \\ F(t) &= \frac{1}{2} \left\{ 1 + \text{sign}(t) \left[ 1 - I_{f/(f+t^2)} \left( \frac{f}{2}, \frac{1}{2} \right) \right] \right\}. \end{aligned} \quad (\text{C.7.3})$$

Sie wird mit `StatFunct.cumulativeStudent` berechnet.

Das Quantil  $t_P$  der  $t$ -Verteilung zu vorgegebener Wahrscheinlichkeit  $P$  berechnen wir durch Aufsuchen der Nullstelle der Funktion

$$h(t) = P - F(t). \quad (\text{C.7.4})$$

mit der Methode `StatFunct.quantileStudent`.

## C.8 Java-Klasse und Programmbeispiel

### Java-Klasse zur Berechnung statistischer Funktionen

`StatFunct` enthält alle in diesem Anhang aufgeführten Methoden.

**Programmbeispiel C.1:** Die Klasse `FunctionsDemo` demonstriert alle in diesem Anhang aufgeführten Methoden

Vom Benutzer wird zunächst eine Funktionenfamilie und dann eine Funktion aus dieser Familie ausgewählt. Anschliessend gibt er die für den gewählten Fall benötigten Parameter ein. Nach dem Anklicken des Go-Knopfes wird der Funktionswert berechnet und angezeigt.

## D Die Gamma-Funktion und verwandte Funktionen. Methoden zu ihrer Berechnung

### D.1 Die Eulersche Gamma-Funktion

Es sei  $x$  eine reelle Zahl mit  $x + 1 > 0$ . Wir definieren die Eulersche *Gamma-Funktion* durch

$$\Gamma(x + 1) = \int_0^\infty t^x e^{-t} dt . \quad (\text{D.1.1})$$

Wenden wir die partielle Integration auf dieses Integral an, so ergibt sich

$$\int_0^\infty t^x e^{-t} dt = [-t^x e^{-t}]_0^\infty + x \int_0^\infty t^{x-1} e^{-t} dt = x \int_0^\infty t^{x-1} e^{-t} dt .$$

Also ist

$$\Gamma(x + 1) = x \Gamma(x) . \quad (\text{D.1.2})$$

Dies ist die sogenannte *Funktionalgleichung* der Gamma-Funktion. Aus (D.1.1) folgt sofort

$$\Gamma(1) = 1 .$$

Mit (D.1.2) ist dann allgemein

$$\Gamma(n + 1) = n! , \quad n = 1, 2, \dots . \quad (\text{D.1.3})$$

Wir ersetzen nun in (D.1.1)  $t$  durch  $\frac{1}{2}u^2$  (d. h. auch  $dt$  durch  $u du$ ). Dann ist

$$\Gamma(x + 1) = \left(\frac{1}{2}\right)^x \int_0^\infty u^{2x+1} e^{-\frac{1}{2}u^2} du .$$

Wählen wir jetzt speziell  $x = -\frac{1}{2}$ , so ist

$$\Gamma\left(\frac{1}{2}\right) = \sqrt{2} \int_0^\infty e^{-\frac{1}{2}u^2} du = \frac{1}{\sqrt{2}} \int_{-\infty}^\infty e^{-\frac{1}{2}u^2} du . \quad (\text{D.1.4})$$

Das Integral läßt sich wie folgt auswerten. Wir betrachten

$$A = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{1}{2}(x^2+y^2)} dx dy = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{1}{2}x^2} dx \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{1}{2}y^2} dy = 2\{\Gamma(\frac{1}{2})\}^2.$$

Das Integral  $A$  kann aber auch in Polarkoordinaten transformiert werden:

$$A = \int_0^{2\pi} \int_0^{\infty} e^{-\frac{1}{2}r^2} r dr d\phi = \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^{\infty} e^{-\frac{1}{2}r^2} r dr = 2\pi \Gamma(1) = 2\pi.$$

Durch Gleichsetzen finden wir also

$$\Gamma(\frac{1}{2}) = \sqrt{\pi}. \quad (\text{D.1.5})$$

Mit Hilfe von (D.1.2) können wir deshalb auch die Werte der Gamma-Funktion für halbzahlige Argumente bestimmen.

Für Argumente, die nicht positiv ganz- oder halbzahlig sind, läßt sich das Integral (D.1.1) nicht in geschlossener Form auswerten. In solchen Fällen ist man auf Näherungen angewiesen. Wir diskutieren hier die Näherung von LANCZOS (1964), die auf den analytischen Eigenschaften der Gamma-Funktion aufgebaut ist. Wir definieren zunächst die Gamma-Funktion auch für negative Argumente durch die Spiegelungsformel

$$\Gamma(1-x) = \frac{\pi}{\Gamma(x) \sin(\pi x)} = \frac{\pi x}{\Gamma(1+x) \sin(\pi x)}. \quad (\text{D.1.6})$$

(Durch die Beziehungen (D.1.1) und (D.1.6) ist die Gamma-Funktion auch für beliebig komplexe Argumente definiert, wenn  $x$  komplex ist.) Man sieht sofort, daß die Gamma-Funktion bei Null und allen negativen ganzen Zahlen Pole besitzt. Die Näherung von LANCZOS [17]

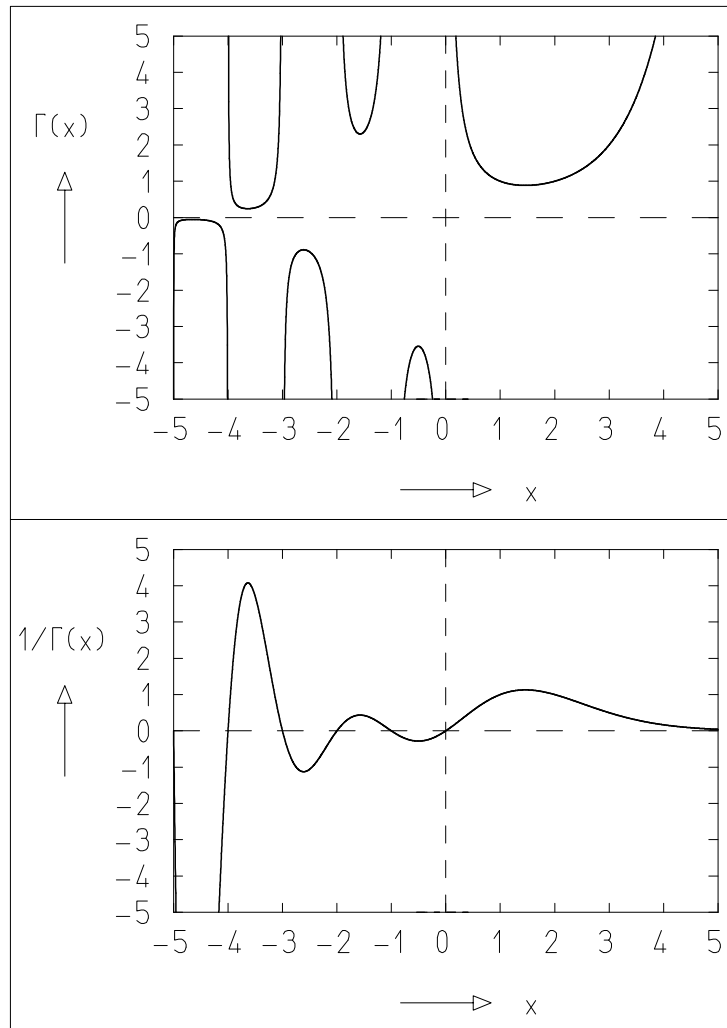
$$\Gamma(x+1) = \sqrt{2\pi} (x+\gamma+\frac{1}{2})^{x+\frac{1}{2}} \exp(-x-\gamma-\frac{1}{2})(A_\gamma(x)+\varepsilon) \quad (\text{D.1.7})$$

berücksichtigt die ersten dieser Pole durch die Form der Funktion  $A_\gamma$ ,

$$A_\gamma(x) = c_0 + \frac{c_1}{x+1} + \frac{c_2}{x+2} + \cdots + \frac{c_{\gamma+1}}{x+\gamma+1}. \quad (\text{D.1.8})$$

Für  $\gamma = 5$  gilt für den Fehler  $\varepsilon$  der Näherung  $|\varepsilon| < 2 \cdot 10^{-10}$  für jeden Punkt  $x$  in der rechten komplexen Halbebene. Die Methode **Gamma.gamma** liefert die Eulersche Gamma-Funktion.

Bild D.1 ist eine graphische Darstellung der Gamma-Funktion. Für große positive Argumente wächst die Gamma-Funktion so rasch, daß es Schwierigkeiten gibt, ihren Zahlwert im Rechner darzustellen. In vielen Ausdrücken treten jedoch Quotienten aus Gamma-Funktionen auf, die Zahlwerte in einem unproblematischen Bereich haben. Man benutzt dann besser den Logarithmus der Gamma-Funktion, die von der Methode **Gamma.logGamma** berechnet wird.

**Bild D.1:** Die Funktionen  $\Gamma(x)$  und  $1/\Gamma(x)$ .

## D.2 Fakultät und Binomialkoeffizient

Der Ausdruck

$$n! = 1 \cdot 2 \cdot \dots \cdot n \quad (\text{D.2.1})$$

läßt sich entweder direkt als dieses Produkt oder mit (D.1.3) als Gamma-Funktion berechnen.

Bei der Berechnung des Binomialkoeffizienten

$$\binom{n}{k} = \frac{n!}{k!(n-k)!} = \frac{n}{k} \cdot \frac{n-1}{k-1} \cdot \dots \cdot \frac{n-k+1}{1} \quad (\text{D.2.2})$$

ist der Ausdruck auf der rechten Seite dem Ausdruck in der Mitte aus numerischen Gründen unbedingt vorzuziehen. Sie erfolgt mit der Methode `Gamma.binomial`.

### D.3 Beta-Funktion

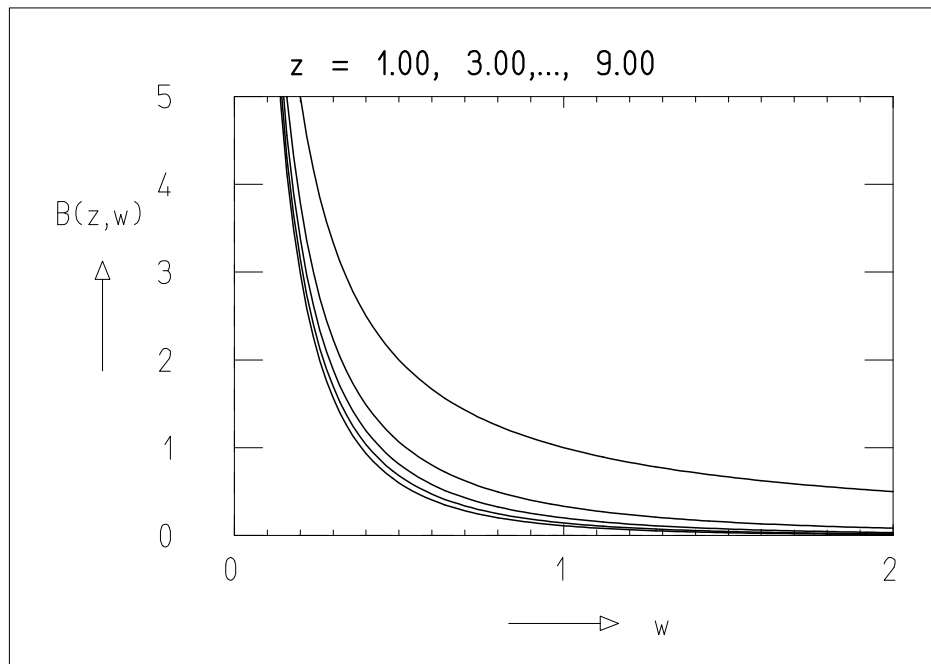
Die *Beta-Funktion* hat zwei Argumente und ist durch

$$B(z, w) = \int_0^1 t^{z-1} (1-t)^{w-1} dt \quad (\text{D.3.1})$$

definiert. Das Integral kann als ein einfacher Ausdruck von Gamma-Funktionen geschrieben werden,

$$B(z, w) = B(w, z) = \frac{\Gamma(z)\Gamma(w)}{\Gamma(z+w)}. \quad (\text{D.3.2})$$

So berechnet die Methode `Gamma.beta` die Beta-Funktion. Bild D.2 zeigt sie als Funktion von  $w$  für einige feste Werte von  $z$ .



**Bild D.2:** Die Beta-Funktion. Mit steigendem  $z$  verschieben sich die Graphen  $B(z, w)$  immer weiter nach links.

### D.4 Berechnung von Kettenbrüchen

In den beiden folgenden Abschnitten werden *Kettenbrüche*, d. h. Ausdrücke der Art

$$f = b_0 + \frac{a_1}{b_1 + \frac{a_2}{b_2 + \frac{a_3}{b_3 + \dots}}} \quad (\text{D.4.1})$$

auftreten, die auch in der typographisch einfacheren Form

$$f = b_0 + \frac{a_1}{b_1 +} \frac{a_2}{b_2 +} \frac{a_3}{b_3 +} \dots \quad (\text{D.4.2})$$

geschrieben werden. Bezeichnen wir mit  $f_n$  den Wert des Kettenbruchs, der sich ergibt, wenn man (D.4.1) als Bruch mit endlich vielen Termen bis zu den Koeffizienten  $a_n$  und  $b_n$  hinschreibt, so gilt

$$f_n = \frac{A_n}{B_n}. \quad (\text{D.4.3})$$

Dabei können die  $A_n$  und  $B_n$  aus der folgenden Rekursionsvorschrift gewonnen werden:

$$A_{-1} = 1, \quad B_{-1} = 0, \quad A_0 = b_0, \quad B_0 = 1, \quad (\text{D.4.4})$$

$$A_j = b_j A_{j-1} + a_j A_{j-2}, \quad (\text{D.4.5})$$

$$B_j = b_j B_{j-1} + a_j B_{j-2}. \quad (\text{D.4.6})$$

Da die Beziehungen (D.4.5) bzw. (D.4.6) linear in  $A_{j-1}, A_{j-2}$  bzw.  $B_{j-1}, B_{j-2}$  sind und in (D.4.3) nur der Quotient  $A_n/B_n$  auftritt, kann man die Koeffizienten  $A_j, A_{j-1}, A_{j-2}$  und  $B_j, B_{j-1}, B_{j-2}$  stets mit einem beliebigen Faktor multiplizieren und so „normieren“. Man wählt gewöhnlich  $1/B_j$  als Normierungsfaktor und vermeidet dadurch numerische Schwierigkeiten durch sehr große oder sehr kleine Zahlen, die sonst im Laufe der Rekursion auftreten können. Für Schritte, in denen  $B_j = 0$  ist, entfällt die Normierung.

Kettenbrüche treten ähnlich wie Reihenentwicklungen als Näherungen bestimmter Funktionen auf. In einem Bereich, in dem die Kettenbruchnäherung konvergiert, unterscheiden sich für hinreichend hohes  $n$  die Werte  $f_{n-1}$  und  $f_n$  nur noch unwesentlich. Man kann daher folgendes *Abbruchkriterium* benutzen. Gilt zu vorgegebenem  $\varepsilon \ll 1$  die Ungleichung

$$\left| \frac{f_n - f_{n-1}}{f_n} \right| < \varepsilon,$$

so ist  $f_n$  eine hinreichend gute Näherung von  $f$ .

## D.5 Unvollständige Gamma-Funktion

Die *unvollständige Gamma-Funktion* ist für  $a > 0$  durch den Ausdruck

$$P(a, x) = \frac{1}{\Gamma(a)} \int_0^x e^{-t} t^{a-1} dt \quad (\text{D.5.1})$$

definiert. Er kann durch eine Reihenentwicklung dargestellt werden,

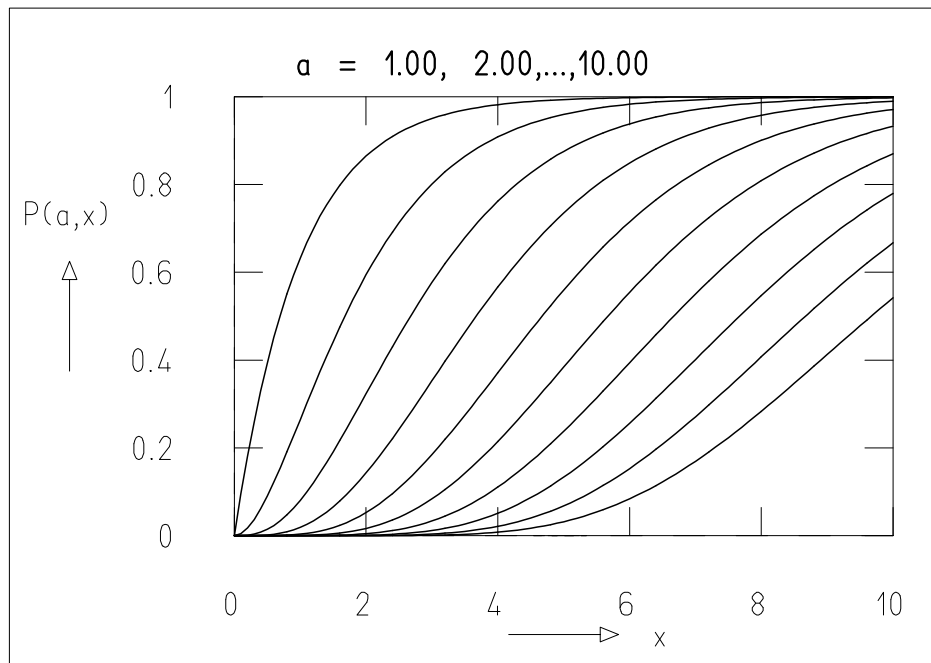
$$P(a, x) = x^a e^{-x} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{x^n}{\Gamma(a+n+1)} = \frac{1}{\Gamma(a)} x^a e^{-x} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\Gamma(a)}{\Gamma(a+n+1)} x^n. \quad (\text{D.5.2})$$

Die Summe konvergiert rasch im Bereich  $x < a + 1$ . Es wird die rechte und nicht die mittlere Form von (D.5.2) benutzt, weil sich der Quotient der beiden Gamma-Funktionen einfach zu

$$\frac{\Gamma(a)}{\Gamma(a+n+1)} = \frac{1}{a} \frac{1}{a+1} \cdots \frac{1}{a+n+1}$$

ergibt. Im Bereich  $x > a + 1$  benutzen wir den Kettenbruchausdruck

$$1 - P(a, x) = \frac{1}{\Gamma(a)} e^{-x} x^a \left( \frac{1}{x+} \frac{1-a}{1+} \frac{1}{x+} \frac{2-a}{1+} \frac{2}{x+} \cdots \right). \quad (\text{D.5.3})$$



**Bild D.3:** Die unvollständige Gamma-Funktion. Mit steigendem  $a$  verschieben sich die Graphen  $P(a, x)$  immer weiter nach rechts.

Die Methode `Gamma.incompleteGamma` liefert die unvollständige Gamma-Funktion. Sie ist in Bild D.3 für einige Werte von  $a$  dargestellt. Aus dem Bild liest man sofort ab:

$$P(a, 0) = 0, \quad (\text{D.5.4})$$

$$\lim_{x \rightarrow \infty} P(a, x) = 1. \quad (\text{D.5.5})$$



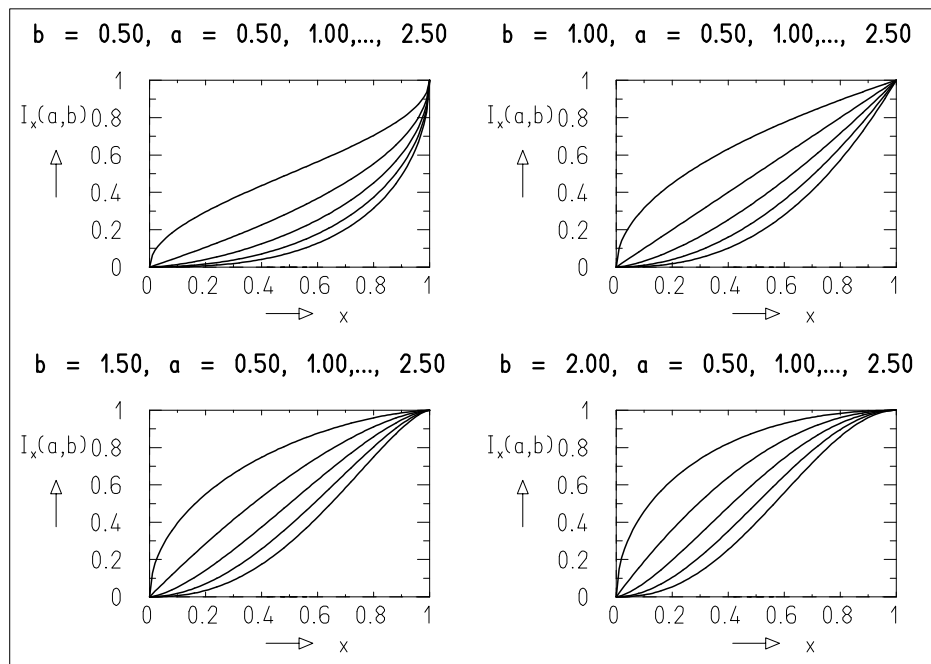
## D.6 Unvollständige Beta-Funktion

Die *unvollständige Beta-Funktion* ist für  $a > 0, b > 0$  durch die Beziehung

$$I_x(a, b) = \frac{1}{B(a, b)} \int_0^x t^{a-1} (1-t)^{b-1} dt, \quad x \leq 0 \leq 1, \quad (\text{D.6.1})$$

definiert. Es gilt die Symmetrie-Beziehung

$$I_x(a, b) = 1 - I_{1-x}(b, a). \quad (\text{D.6.2})$$



**Bild D.4:** Die unvollständige Beta-Funktion. Mit steigendem  $a$  verschieben sich die Graphen  $I_x(a, b)$  immer weiter nach rechts.

Der Ausdruck (D.6.1) wird durch folgenden Kettenbruch angenähert:

$$I_x(a, b) = \frac{x^a (1-x)^b}{a B(a, b)} \left\{ \frac{1}{1+} \frac{d_1}{1+} \frac{d_2}{1+} \dots \right\} \quad (\text{D.6.3})$$

mit

$$d_{2m+1} = - \frac{(a+m)(a+b+m)}{(a+2m)(a+2m-1)} x,$$

$$d_{2m} = \frac{m(b-m)}{(a+2m-1)(a+2m)} x.$$

Die Näherung konvergiert rasch für

$$x > \frac{a+1}{a+b+1} . \quad (\text{D.6.4})$$

Ist diese Bedingung nicht erfüllt, so ist gerade  $1-x$  größer als die rechte Seite von (D.6.4). Man berechnet dann  $I_{1-x}$  als Kettenbruch und benutzt anschließend (D.6.2).

Die Methode `Gamma.incompleteBeta` liefert die unvollständige Beta-Funktion. Sie ist in Bild D.4 für verschiedene Wertepaare der Parameter  $a$  und  $b$  dargestellt. Unabhängig von diesen Parametern gilt

$$I_0(a,b) = 0 , \quad I_1(a,b) = 1 . \quad (\text{D.6.5})$$

## D.7 Java-Klasse und Programmbeispiel

### Java-Klasse zur Berechnung der Gamma-Funktion und verwandter Funktionen

Gamma enthält alle in diesem Anhang aufgeführten Methoden.

**Programmbeispiel D.1:** Die Klasse `FunctionsDemo` demonstriert nicht nur die Methoden des Anhangs C, sondern auch alle in diesem Anhang aufgeführten Methoden

Vom Benutzer wird zunächst eine Funktionenfamilie und dann eine Funktion aus dieser Familie ausgewählt. Anschliessend gibt er die für den gewählten Fall benötigten Parameter ein. Nach dem Anklicken des Go-Knopfes wird der Funktionswert berechnet und angezeigt.

# E Hilfsprogramme

## E.1 Numerische Differentiation

Die Ableitung  $df(x)/dx$  einer Funktion  $f(x)$  an der Stelle  $x$  ist der Grenzwert

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

Es liegt nahe, den Differenzenquotienten

$$\frac{f(x+h) - f(x)}{h}$$

für einen kleinen, endlichen Wert von  $h$  als Näherung von  $f'(x)$  zu verwenden. Besser geeignet ist der symmetrische Differenzenquotient

$$\delta(h) = \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h}. \quad (\text{E.1.1})$$

Schreiben wir nämlich für  $f(x+h)$  und  $f(x-h)$  die Taylor-Entwicklung an der Stelle  $x$ , so erhalten wir den Ausdruck

$$\delta(h) = f'(x) + \frac{h^2}{3!} f'''(x) + \frac{h^4}{5!} f^{(5)}(x) + \dots,$$

bei dem der führende Zusatzterm bereits quadratisch in  $h$  abfällt. Trotzdem ist natürlich die Wahl von  $h$  kritisch, weil für sehr kleine Werte von  $h$  große Rundungsfehler auftreten, für große Werte aber die Näherung sehr fehlerhaft sein kann.

Man berechnet nun  $\delta(h)$  für eine Folge von Werten  $h = h_0, h_1, h_2, \dots$ . Ist die Folge  $\delta(h_0), \delta(h_1), \dots$  monoton (steigend oder fallend), so wird dies als Zeichen für die Konvergenz der Folge gegen  $f'(x)$  gewertet. Nach RUTISHAUSER [27] kann man aus der Folge  $\delta(h_0), \delta(h_1)$  andere Folgen gewinnen, die schneller konvergieren. Die Methode wurde in Anlehnung an das ROMBERG-Verfahren [28] zur numerischen Integration entwickelt. Ausgehend von  $h_0 = a$  wählt er zunächst die Folge

$$h_0, h_1, \dots = a, 3a/4, a/2, 3a/8, a/4, \dots,$$

setzt

$$T_0^{(k)} = \delta(h_k)$$

und berechnet weitere Größen  $T_m^{(k)}$ ,

$$\begin{aligned} T_m^{(k)} &= \frac{2^m T_{m-1}^{(k+1)} - 1.125 T_{m-1}^{(k)}}{2^m - 1.125}; & m \text{ ungerade, } k \text{ gerade}, \\ T_m^{(k)} &= \frac{2^m \cdot 1.125 T_{m-1}^{(k+1)} - T_{m-1}^{(k)}}{2^m \cdot 1.125 - 1}; & m \text{ ungerade, } k \text{ ungerade}, \\ T_m^{(k)} &= \frac{2^m T_{m-1}^{(k+1)} - T_{m-1}^{(k)}}{2^m - 1}; & m \text{ gerade}. \end{aligned}$$

Ordnet man die Größen  $T_m^{(k)}$  in Dreiecksform

$$\begin{array}{ccccccc} & & & & & & T_0^{(0)} \\ & & & & & & \\ & & & & & & T_1^{(0)} \\ & & & & & & T_2^{(0)} \\ & & & & & & T_3^{(0)} \\ & & & & & & \\ & & & & & & T_1^{(1)} \\ & & & & & & T_2^{(1)} \\ & & & & & & T_1^{(2)} \\ & & & & & & T_0^{(3)} \\ & & & & & & \vdots \end{array}$$

an, so enthält die erste Spalte die Folge unserer ursprünglichen Differenzenquotienten. Es konvergiert nun nicht nur  $T_0^{(k)}$  gegen  $f'(x)$ , sondern es gilt im allgemeinen

$$\lim_{k \rightarrow \infty} T_m^{(k)} = f'(x), \quad \lim_{m \rightarrow \infty} T_m^{(k)} = f'(x).$$

Die praktische Bedeutung des Verfahrens beruht darauf, daß die rechts stehenden Spalten besonders rasch konvergieren.

In der Klasse **AuxDer** wird, ausgehend von  $a = 1$ , die Folge  $T_0^{(0)}, \dots, T_0^{(9)}$  berechnet. Ist sie nicht monoton, so wird  $a$  durch  $a/10$  ersetzt und eine neue Folge berechnet. Nach 10 erfolglosen Versuchen wird abgebrochen. Wird aber eine monotone Folge gefunden, so wird das Dreiecksschema berechnet und  $T_9^{(0)}$  als beste Näherung von  $f'(x)$  ausgegeben. Das Programm **AuxDer** entspricht bis auf geringfügige Änderungen in den Abbruchkriterien einem Programm von KOELBIG [29].

Dieses Programme arbeitet relativ zeitaufwendig. Für gutartige Funktionen genügt es oft, den Differentialquotienten durch den Differenzenquotienten (E.1.1) zu ersetzen, insbesondere bei der hohen numerischen Genauigkeit, mit der Java arbeitet. Zur Berechnung zweiter Ableitungen wird das Verfahren der Differenzenquotienten entsprechend erweitert. Die Klassen **AuxDri**, **AuxGrad** und **AuxHesse** arbeiten deshalb mit Differenzenquotienten.

## E.2 Numerische Bestimmung von Nullstellen

Die Berechnung des *Quantils*  $x_P$  einer Verteilungsfunktion  $F(x)$  zu vorgegebener Wahrscheinlichkeit  $P$  ist gleichbedeutend mit der Bestimmung der Nullstelle der Funktion

$$k(x) = P - F(x). \quad (\text{E.2.1})$$

Wir bearbeiten das Problem in zwei Schritten. Im ersten Schritt geben wir ein Intervall  $(x_0, x_1)$  an, das die Nullstelle enthält. Im zweiten Schritt verkleinern wir das Intervall systematisch, so daß sein Betrag kleiner wird als ein vorgegebener Wert  $\varepsilon$ .

Im ersten Schritt machen wir Gebrauch von der Tatsache, daß  $k(x)$  monoton ist, weil  $F(x)$  monoton ist. Wir beginnen mit Anfangswerten für  $x_0$  und  $x_1$ . Ist  $f(x_0) \cdot f(x_1) < 0$ , d. h. haben die beiden Funktionswerte verschiedene Vorzeichen, so ist die Nullstelle von ihnen eingeschlossen. Ist das nicht der Fall, so vergrößern wir das Intervall zu der Seite hin, an der die Funktion dem Betrage nach den kleinsten Wert hat, und wiederholen das Verfahren mit den neuen Werten von  $(x_0, x_1)$ . Das Programm arbeitet zuverlässig für Funktionen  $f(x)$ , die eine Nullstelle besitzen und monoton in  $x$  sind. Es sollte nur für solche Funktionen benutzt werden.

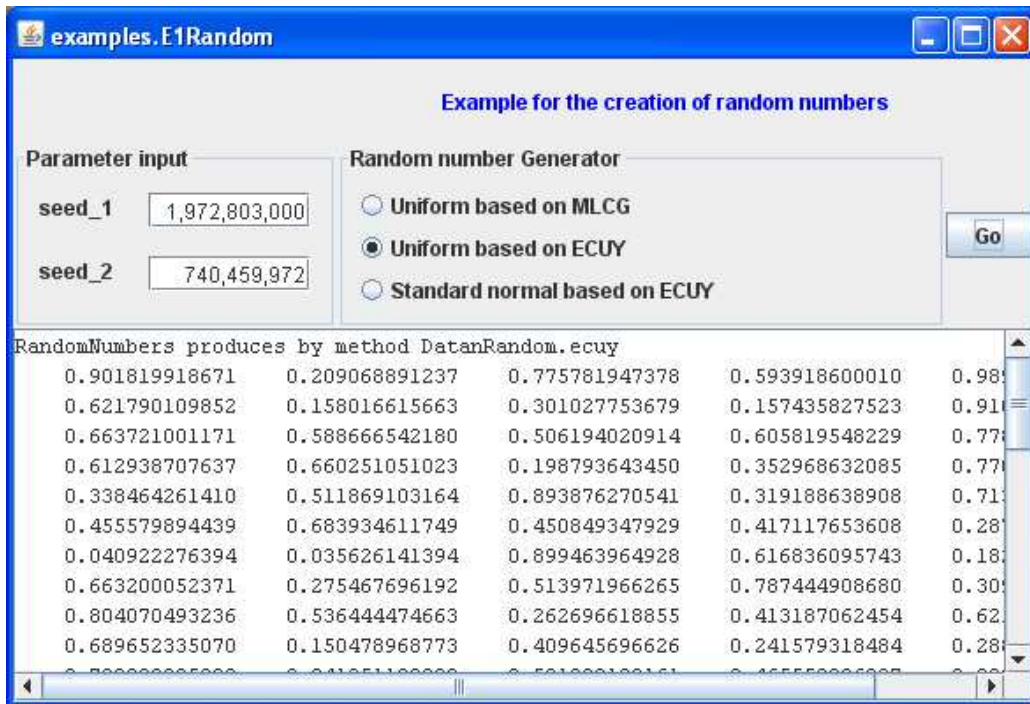
Für die Lokalisierung der Nullstelle innerhalb des Anfangsintervalls  $(x_0, x_1)$  benutzen wir ein vergleichsweise langsames, aber absolut zuverlässiges Verfahren. Das ursprüngliche Intervall wird halbiert und durch dasjenige Teilintervall ersetzt, für dessen Endpunkte die Funktion verschiedene Vorzeichen hat. Das Verfahren wird solange wiederholt, bis die Intervallbreite unter eine vorgegebene Schranke sinkt.

Die beschriebene Art der Nullstellensuche ist in der Klasse **AuxZero** implementiert. Es wird auch in den verschiedenen Methoden der Quantil-Berechnung in **StatFunc** direkt (d. h. ohne Aufruf von **AuxZero**) benutzt. Eine direkte Anwendung bietet die Klasse **E1MaxLike**, Programmbeispiel 7.1.

## E.3 Interaktive Ein- und Ausgabe unter Java

Java-Programme laufen gewöhnlich nicht rein konsekutiv ab, sondern sie sind *Ereignis-gesteuert*, d. h. sie reagieren während ihres Ablaufs auf Aktionen des Benutzers. Dadurch wird ein interaktives Arbeiten mit einem Java-Programm erreicht. Dessen Ausgestaltung hängt wesentlich von der jeweiligen Aufgabe ab und auch vom Geschmack des Benutzers. Für unsere Programmbeispiele reichen vier Hilfsprogramme aus. Wir erklären sie kurz anhand von Bild E.1.

Es stellt ein Bildschirmfenster dar, das mit der Klasse **DatanFrame** erzeugt wurde. In der einfachsten Form besteht es nur aus einem Rahmen, einer Titelzeile (hier "Example for the creation of random numbers") und einem Ausgabebereich, in den



**Bild E.1:** Ein Fenster vom Typ `DatanFrame` mit Elementen zur interaktiven Eingabe und zum Programmstart sowie zur alphanumerischen Ausgabe von Ergebnissen

der Benutzer die Ergebnisse seines Programms schreiben lassen kann. Mit der Methode `DatanFrame.add` können zusätzlich unterhalb der Titelzeile horizontal von links nach rechts weitere Elemente hinzugefügt werden. In Bild E.1 sind das eine *Eingabegruppe*, eine *Auswahlgruppe* und ein *Startknopf*. Die Eingabegruppe wird mit der Klasse `AuxJInputGroup` erzeugt und die Auswahlgruppe mit der Klasse `AuxJRButtonGroup`; beide greifen – wie `DatanFrame` – auf Java-Swing-Klassen zurück. Der Startknopf wird direkt mit einer solchen Standard-Klasse realisiert. Die Eingabegruppe ist ihrerseits zusammengesetzt aus beliebig vielen untereinander angeordneten *Zahleingabebereichen* die mit der Klasse `AuxJNumberInput` erzeugt werden. Mit der Arbeitsweise dieser Klassen macht man sich am besten anhand der online-Dokumentation und durch das Studium der Quelldateien einiger unserer Programmbeispiele vertraut.

## E.4 Java-Klassen

`AuxDer` berechnet die Ableitung einer Funktion nach der Rutishauser-Methode.

**AuxDri** berechnet die von **LsqNon** und **LsqMar** benötigte Matrix **A** von Ableitungen.

**AuxGrad** berechnet den Gradienten einer Funktion an einem Punkt.

**AuxHesse** berechnet die Hessesche Matrix einer Funktion an einem Punkt.

**AuxZero** findet die Nullstelle einer monotonen Funktion.

**DatanFrame** erzeugt ein Bildschirmfenster mit der Möglichkeit interaktiver Ein- und Ausgabe.

**AuxJInputGroup** erzeugt eine Eingabegruppe innerhalb eines Bildschirmfensters.

**AuxJNumberInput** erzeugt einen Zahleingabebereich innerhalb einer Eingabegruppe.

**AuxJRButtonGroup** erzeugt eine Auswahlgruppe innerhalb eines Bildschirmfensters.

## F Die Graphik-Klasse `DatanGraphics`

### F.1 Vorbemerkung

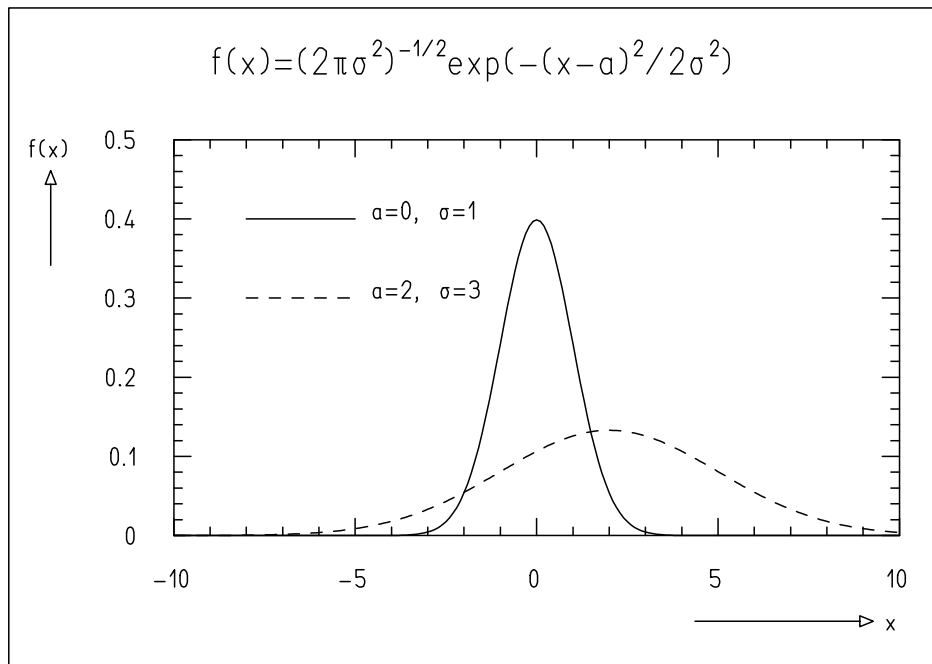
Die graphische Darstellung von Daten und von Kurven angepaßter Funktionen ist seit jeher ein wichtiges Hilfsmittel der Datenanalyse. Wir stellen im folgenden die Klasse `DatanGraphics` vor, mit deren Methoden Graphiken erzeugt, in Bildschirmfenstern angezeigt und/oder als Postscript-Dateien ausgegeben werden können. Wir unterteilen die Methoden in Steuer-, Transformations-, Zeichen- und Hilfs-Methoden. Sie werden in diesem Anhang ausführlich beschrieben, und ihre Handhabung wird an einer Reihe von Programmbeispielen erläutert. Für viele Anwendungen reicht es aber schon aus, wenn man sich mit der Benutzung von nur 5 Klassen vertraut macht, die ihrerseits auf die Methoden von `DatanGraphics` zurückgreifen. Jede dieser Klassen erzeugt mit einem Aufruf eine vollständige Graphik. Sie sind zu Beginn von Abschnitt F.8 aufgelistet.

### F.2 Graphische Arbeitsstationen. Steuermethoden

Wie schon erwähnt, können wir eine Graphik in Form eines Fensters auf dem Bildschirm und als Datei im Postscript-Format ausgeben. Letztere lässt sich leicht in Dokumente einbinden oder direkt – ggf. auch erst nach Umwandlung mit einem frei verfügbaren Programm in ein anderes Format wie etwa pdf – auf Papier ausdrucken. Aus historischen Gründen nennen wir Bildschirmfenster und Postscript-Datei *graphische Arbeitsstationen*.

Mit der Methode `DatanGraphics.openWorkstation` wird ein Bildschirmfenster oder eine Datei oder beides “geöffnet”, d. h. es werden Puffer angelegt, in die mit den weiter unten beschriebenen Methoden graphische Information geschrieben werden kann. Erst nach dem Aufruf der Methode `DatanGraphics.closeWorkstation` wird das Fenster auf dem Bildschirm angezeigt bzw. steht die abgeschlossene Graphik-Datei zur Verfügung. So können nacheinander verschiedene Graphiken erzeugt werden, deren Fenster gleichzeitig auf dem Bildschirm angezeigt werden. Sie können vergrößert oder verkleinert werden, sind aber inhaltlich nicht mehr veränderbar.





**Bild F.1:** Einfaches Beispiel einer mit `DatanGraphics` erstellten Graphik.

## F.3 Koordinatensysteme, Transformationen und Transformationsmethoden

### F.3.1 Koordinatensysteme

#### **Weltkoordinaten (WC)**

Bild F.1 zeigt eine mit `DatanGraphics` angefertigte Graphik. Stellen wir uns für den Augenblick alle graphischen Strukturen einschließlich des Textes als physisch existent — etwa aus Draht gebogen — vor. Das Koordinatensystem, in dem diese Drahtstruktur beschrieben wird, nennen wir das Weltkoordinatensystem (WC). Die Koordinaten eines Punktes in WC bezeichnen wir mit  $(X, Y)$ .

#### **Rechenkoordinaten (CC)**

Betrachten wir die Skalen in Bild F.1, so bemerken wir, daß die Skalen, die mit  $x$  bzw.  $y$  bezeichnet sind, zwar etwa die gleiche Länge in Weltkoordinaten haben, aber ganz verschiedene Längen, wenn sie in den Zahlen ausgedrückt werden, die an den Skalen stehen. Das Bild stellt den Graphen einer Funktion

$$y = f(x)$$

dar. Dabei erscheint jeder Punkt  $(x, y)$  an der Stelle  $(X, Y)$ . Wir bezeichnen das Koordinatensystem der  $(x, y)$  als Rechenkoordinatensystem (CC). Die Transformation zwischen WC und CC ist in (F.3.1) weiter unten angegeben.

### Gerätekoordinaten (DC)

Aus dem (fiktiven) Weltkoordinatensystem muß das Bild auf die Arbeitsfläche eines graphischen Geräts (Bildschirmfläche oder Papier) projiziert werden. Die Koordinaten  $(u, v)$  auf dieser Fläche bezeichnen wir als Gerätekoordinaten (DC).

### F.3.2 Lineare Transformationen. Fenster-Darstellungsfeld.

Die in diesem Abschnitt definierten Begriffe und die einzelnen Transformationen sind im Bild F.2 veranschaulicht.

Nehmen wir an, daß sich die Rechenkoordinaten in  $x$  über den Bereich

$$x_a \leq x \leq x_b$$

erstrecken sollen. Der entsprechende Bereich in Weltkoordinaten sei

$$X_a \leq X \leq X_b .$$

Damit ist eine lineare Transformation  $x \rightarrow X$  definiert durch

$$X = X_a + (x - x_a) \frac{X_b - X_a}{x_b - x_a} . \quad (\text{F.3.1})$$

Ganz entsprechend ist die Transformation  $y \rightarrow Y$  definiert. Man spricht von Abbildung des *Fensters* (*window*) in Rechenkoordinaten CC,

$$x_a \leq x \leq x_b , \quad y_a \leq y \leq y_b , \quad (\text{F.3.2})$$

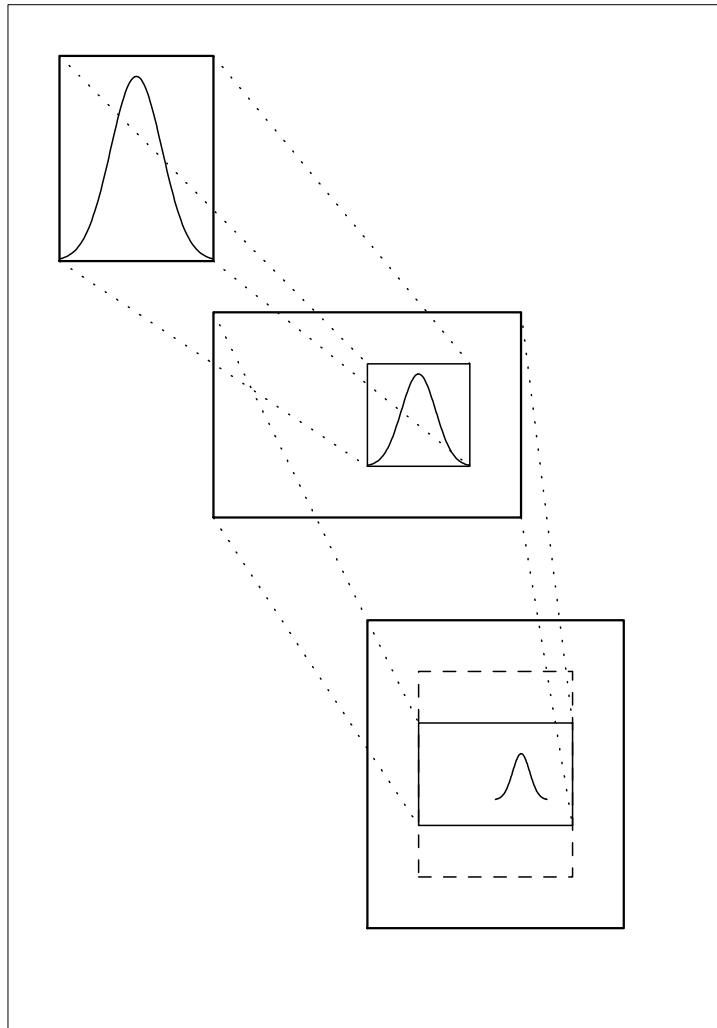
auf das *Darstellungsfeld* (*viewport*) in Weltkoordinaten WC,

$$X_a \leq X \leq X_b , \quad Y_a \leq Y \leq Y_b . \quad (\text{F.3.3})$$

Die Abbildung ist im allgemeinen *verzerrt*, d. h. ein Quadrat in CC wird zu einem Rechteck in WC. Sie ist nur dann *unverzerrt*, wenn die Seitenverhältnisse von Fenster und Darstellungsfeld gleich sind,

$$\frac{x_b - x_a}{y_b - y_a} = \frac{X_b - X_a}{Y_b - Y_a} . \quad (\text{F.3.4})$$

Der Benutzer der Klasse `DatanGraphics` berechnet Größen, die graphisch dargestellt werden sollen, zunächst in CC. Durch Angabe von Fenster und Darstellungsfeld definiert er die Abbildung in WC. Die Möglichkeit zur Verzerrung dieser



**Bild F.2:** Die verschiedenen Koordinatensysteme. Oben: Fenster in Rechenkoordinaten. Mitte: Darstellungsfeld (kleines Rechteck) und Fenster (großes Rechteck) in Weltkoordinaten. Unten: Vorläufiges Darstellungsfeld (gestricheltes Rechteck), eingepaßtes endgültiges Darstellungsfeld (kleines Rechteck) und Begrenzung der Darstellungsfläche (großes Rechteck) in Gerätekoordinaten. Die Abbildungstransformationen von Rechenkoordinaten in Weltkoordinaten und von Weltkoordinaten in Gerätekoordinaten sind durch punktierte Linien angedeutet.

Abbildung ist dabei willkommen, weil sie auf einfache Weise Maßstabsänderungen erlaubt.

Anschließend muß eine Abbildung auf das physisch realisierte Gerätekoordinatensystem DC vorgenommen werden. Sie kann natürlich wieder über die Angabe eines Fensters (in WC) und eines Darstellungsfeldes (in DC) definiert werden. Allerdings ist eine erneute Verzerrung unerwünscht. Wir definieren daher ein Darstellungsfeld

$$u_a \leq u \leq u_b, \quad v_a \leq v \leq v_b \quad (\text{F.3.5})$$

und ein Fenster

$$X'_a \leq X \leq X'_b, \quad Y'_a \leq Y \leq Y'_b. \quad (\text{F.3.6})$$

Die Abbildung vom Fenster (F.3.6) auf das Darstellungsfeld (F.3.5) wird aber nur vorgenommen, wenn beide das gleiche Seitenverhältnis haben. Anderenfalls wird das Darstellungsfeld (F.3.6) verkleinert, und zwar in der Breite symmetrisch nach links und rechts oder in der Höhe symmetrisch nach oben und unten, bis das verkleinerte Darstellungsfeld

$$u'_a \leq u \leq u'_b, \quad v'_a \leq v \leq v'_b \quad (\text{F.3.7})$$

das gleiche Seitenverhältnis hat wie das Fenster (F.3.6). Zwischen beiden ist dann eine verzerrungsfreie Abbildung definiert.

## F.4 Transformationsmethoden

Der Benutzer von `DatanGraphics` muß die Transformationen zwischen den verschiedenen Koordinatensystemen durch Programmaufruf definieren. Die Anwendung der Transformationen erfolgt dann beim Zeichnen graphischer Strukturen ohne sein weiteres Zutun.

### Transformation `CC` $\rightarrow$ `WC`

Diese Transformation wird durch Aufruf der beiden folgenden Methoden definiert. `DatanGraphics.setWindowInComputingCoordinates` setzt das Fenster in Rechenkoordinaten und `DatanGraphics.setViewportInWorldCoordinates` setzt die Darstellungsfläche in Weltkoordinaten.

### Transformation `WC` $\rightarrow$ `DC`

Diese Transformation wird durch den Aufruf der folgenden beiden Methoden definiert.

`DatanGraphics.setWindowInWorldCoordinates` setzt das Fenster in Weltkoordinaten. `DatanGraphics.setFormat` definiert das vorläufige Darstellungsfeld in Gerätekoordinaten.

Das endgültige Darstellungsfeld wird in dieses so eingepaßt, daß es das gleiche Seitenverhältnis hat wie das Fenster in Weltkoordinaten. Falls `DatanGraphics.setFormat` nicht aufgerufen wird, gilt das Format DIN A5 quer. Ist die Arbeitsstation ein Bildschirmgerät, so wird nur das Verhältnis von Breite und Höhe beachtet. Ist die Arbeitsstation eine Postscript-Datei, so gelten die Abmessungen in cm nur, sofern das Bild in diesen Abmessungen auf das Papier im Drucker paßt.

Ist es größer als angegeben, so wird es soweit verkleinert, bis es gerade paßt. In beiden Fällen wird das Bild auf dem Papier zentriert. Mit der Methode `DatanGraphics.setStandardPaperSizeAndBorders` wird die Papierformat im Drucker dem Programm mitgeteilt. Wird sie nicht aufgerufen, so gilt DIN A4 mit einem freizulassenden Rand von 5 mm an allen 4 Seiten.

Gewöhnlich interessiert sich der Benutzer nur für das System der Rechenkoordinaten, nachdem er durch Aufrufe der Programme dieses Abschnitts deren Transformation auf Welt- und schließlich auf Gerätekoordinaten definiert hat.

### Klippen

Die graphischen Strukturen werden unter Umständen nicht vollständig gezeichnet, sondern abgeschnitten, wenn sie den Rand eines Bereichs, des *Klipp-Bereichs*, nach außen überschreiten. Man sagt, die Strukturen werden *geklippt*. Für Polylinien, Marken, Datenpunkte und Höhenlinien (Abschnitt F.5) ist der Klippbereich des Fensters in Rechenkoordinaten, für Texte und graphische Hilfsstrukturen ist der Klipp-Bereich das Fenster in Weltkoordinaten. Sie können explizit gesetzt werden mit `DatanGraphics.setSmallClippingWindow` bzw. `DatanGraphics.setBigClippingWindow`.

## F.5 Zeichenmethoden

### Farben und Linienbreiten

Die bisher angegebenen Methoden bewirken organisatorische Funktionen, bringen jedoch noch keine graphischen Strukturen auf der Arbeitsstation hervor. Jede mit erzeugte graphische Struktur besteht aus Linien, die eine bestimmte Farbe und Linienbreite besitzen. Die Auswahl dieser beiden Eigenschaften erfolgt wie folgt. Programmintern ist insgesamt 8 *Farbindizes* je ein Paar von Eigenschaften (Farbe, Linienbreite) für das Bildschirmfenster zugeordnet und ein weiteres Paar für die Postscript-Datei. Mit der Methode `DatanGraphics.chooseColor` wird ein Farbindex und damit ein solches Eigenschaftspaar ausgewählt. Es gilt solange, bis ein anderer Farbindex ausgewählt wird. Der Benutzer kann einen Farbindex mit einem selbstgewählten Eigenschaftspaar besetzen. Dazu dienen die Methoden `DatanGraphics.setScreenColor` und `DatanGraphics.setPSColor`. Die Hintergrundfarbe des Bildschirmfensters – standardmäßig blau – kann mit `DatanGraphics.setScreenBackground` auf einen anderen Farbwert gesetzt werden. (Der Hintergrund im Postscript-Format ist stets transparent.)

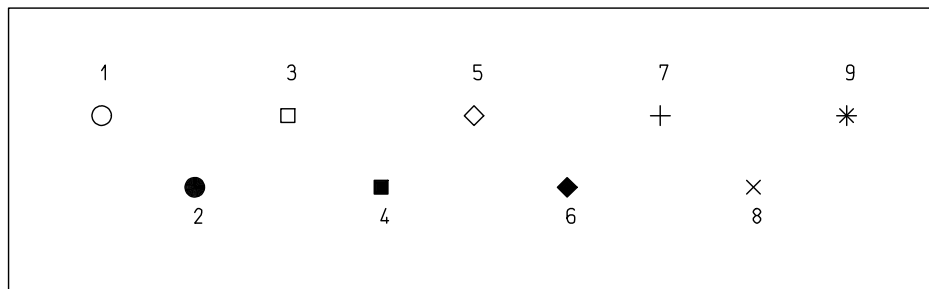
## Polylinien

Für besonders einfache graphische Strukturen sind die Begriffe Polylinie und Marke eingeführt worden. Eine *Polylinie* definiert einen Streckenzug, der vom Punkt  $(x_1, y_1)$  über die Punkte  $(x_2, y_2)$ ,  $(x_3, y_3)$ , ... bis zum Punkte  $(x_n, y_n)$  führt. Er wird mit der Methode `DatanGraphics.drawPolyline` gezeichnet; die Koordinaenpaare werden in Rechenkoordinaten angegeben. Offenbar kann man jede aus Linien bestehende graphische Struktur beliebig genau durch Polylinien annähern. Damit können z. B. die *Graphen von Funktionen* durch Polylinien dargestellt werden, wenn nur die einzelnen Punkte einer Polylinie genügend eng benachbart sind.

Gelegentlich möchte man eine Polylinie nicht *durchgezogen*, sondern *gestrichelt*, *punktiert* oder *strichpunktiert* zeichnen. Das geschieht mit der Methode `DatanGraphics.drawBrokenPolyline`.

## Marken und Datenpunkte

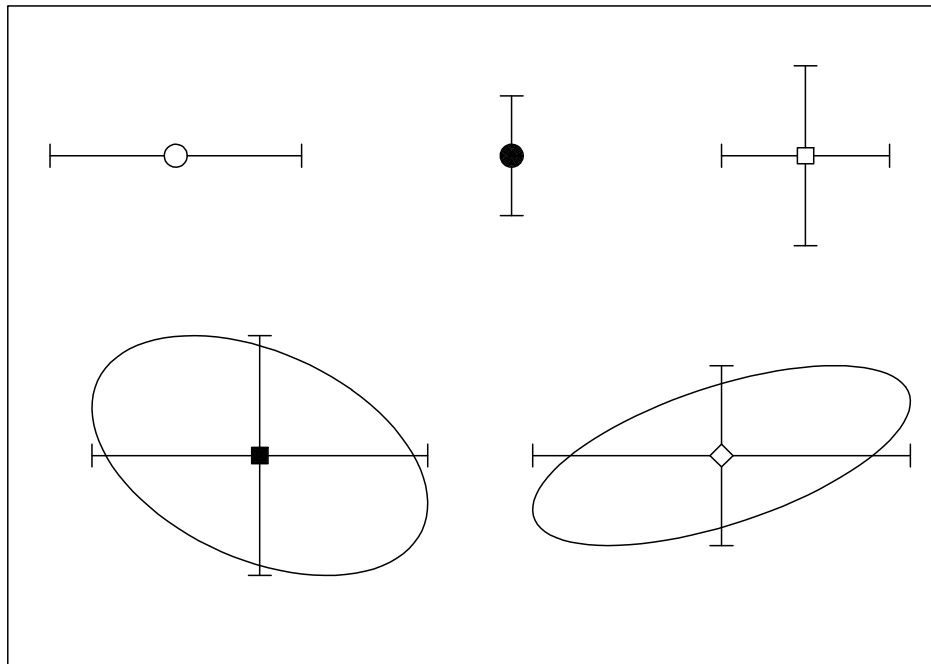
Eine *Marke* markiert einen Bildpunkt durch ein graphisches Symbol. Die in `DatanGraphics` zur Verfügung stehenden Marken sind in Bild F.3 dargestellt. Sie werden mit der Methode `DatanGraphics.drawMark` gezeichnet.



**Bild F.3:** Marken.

Marken sind insbesondere zur Markierung von Datenpunkten geeignet. Ist ein Datenpunkt fehlerbehaftet, so möchte man die Fehler in einer oder beiden Koordinaten durch *Fehlerbalken* kennzeichnen. Gelegentlich möchte man sogar die vollständige Kovarianzellipse zeichnen. Diese Aufgaben übernimmt die Methode `DatanGraphics.drawDatapoint`. Beispiele sind in Bild F.4 dargestellt.

Ein Fehlerbalken in  $x$ -Richtung wird nur für  $\sigma_x > 0$  gezeichnet, ein Fehlerbalken in  $y$ -Richtung nur für  $\sigma_y > 0$ . Die Kovarianzellipse wird nur für  $\sigma_x > 0$ ,  $\sigma_y > 0$  und  $\text{cov}(x, y) \neq 0$  gezeichnet. Fehlerbalken werden nicht gezeichnet, falls sie völlig innerhalb der Marke selbst liegen würden. Die ganze Struktur wird nur so weit gezeichnet, wie sie in das Fenster in Rechenkoordinaten (F.3.2) fällt.



**Bild F.4:** Beispiel für die Darstellung von Datenpunkten.

## Histogramm

Die Darstellung von Daten in Form eines Histogramms übernimmt die Methode `DatanGraphics.drawHistogram`.

## Höhen- oder Konturlinien

Eine Funktion  $f = f(x, y)$  definiert eine Fläche im dreidimensionalen  $(x, y, f)$ -Raum. Aber auch in der  $(x, y)$ -Ebene selbst läßt sich ein Eindruck von der Funktion gewinnen, wenn zu gegebenen  $c = \text{const}$  Punkte markiert werden, für die  $f(x, y) = c$ . Die Menge aller solchen Punkte bilden die *Höhenlinie* oder *Konturlinie*  $f(x, y) = c$ . Durch Zeichnen einer Schar von Höhenlinien  $f(x, y) = c_1, c_2, \dots$  läßt sich (wie bei einer guten Landkarte) ein recht guter Eindruck von der Funktion gewinnen.

Natürlich ist es unmöglich, für alle Punkte der  $(x, y)$ -Ebene die Funktion zu berechnen. Wir beschränken uns auf einen rechteckigen Bereich in der  $(x, y)$ -Ebene, gewöhnlich das Fenster in Rechenkoordinaten und zerlegen ihn in insgesamt  $N = n_x n_y$  kleinere Rechtecke. Die Eckpunkte dieser kleinen Rechtecke haben  $x$ -Koordinaten die benachbarte Werte aus der Folge

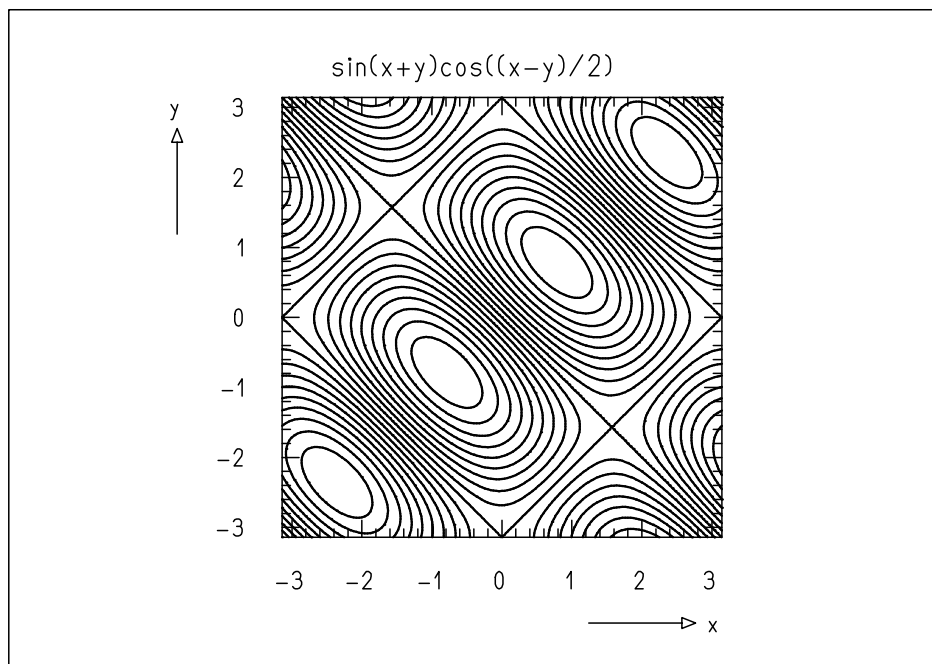
$$x_0, x_0 + \Delta x, x_0 + 2\Delta x, \dots, x_0 + n_x \Delta x$$

sind. Die  $y$ -Koordinate der Eckpunkte sind benachbarte Werte der Folge

$$y_0, y_0 + \Delta y, y_0 + 2\Delta y, \dots, y_0 + n_y \Delta y.$$

In jedem Rechteck wird die Höhenlinie linear genähert. Dazu wird die Funktion  $f(x, y) - c$  an den 4 Eckpunkten des Rechtecks betrachtet. Hat die Funktion an zwei Eckpunkten, die Endpunkte einer Kante des Rechtecks sind, verschiedene Vorzeichen, so wird angenommen, daß die Höhenlinie die Kante schneidet. Der Schnittpunkt wird durch lineare Interpolation berechnet. Liegen Schnittpunkte auf zwei Kanten des Rechtecks, so werden sie durch eine Strecke verbunden. Liegen Schnittpunkte auf mehr als zwei Kanten, werden alle Paare von Schnittpunkten durch Strecken verbunden.

Offenbar ist die Annäherung der Höhenlinie durch den Streckenzug um so besser, je feiner die Aufteilung in kleine Rechtecke ist. Mit feinerer Aufteilung wird natürlich auch die benötigte Rechenzeit größer. Die Methode `DatanGraphics.drawContour` berechnet und zeichnet eine Höhenlinie. Ein Beispiel für die Darstellung einer Funktion durch Höhenlinien ist Bild F.5.



**Bild F.5:** Höhenlinien  $f(x, y) = -0.9, -0.8, \dots, 0.8, 0.9$  der Funktion  $f(x, y) = \sin(x+y)\cos([x-y]/2)$  in der  $(x, y)$ -Ebene.



## F.6 Graphische Hilfsstrukturen

Allein mit den wenigen bisher beschriebenen Methoden lassen sich umfangreiche und schwierige Graphiken herstellen. Durch zusätzliche Benutzung der Methoden dieses und des nächsten Abschnitts wird die Arbeit des Benutzers erleichtert, weil sie ihm helfen, graphische Strukturen zu erzeugen, die üblicherweise zu Graphiken der Datenanalyse gehören, wie Skalen, Achsenkreuze und erläuternde Texte.

### Rahmen

Die Methode `DatanGraphics.drawFrame` zeichnet einen Rahmen um den abgebildeten Ausschnitt aus dem Weltkoordinatensystem, d. h. den äußeren Rahmen der hier wiedergegebenen Bilder. Dagegen zeichnet die Methode `DatanGraphics.drawBoundary` einen Rahmen um das Rechenkoordinatenfenster.

### Skalen

Die Methode `DatanGraphics.drawScaleX` zeichnet eine Skala in  $x$ -Richtung. Es werden Teilstriche vom oberen und unteren Rand des CC-Fensters in Richtung des Fensterinneren gezogen. Unterhalb des unteren Randes erscheinen Zahlen, die einige dieser Teilstriche kennzeichnen. Es wird empfohlen, zunächst die Methode `DatanGraphics.drawBoundary` aufzurufen, um das Fenster selbst durch Linien zu kennzeichnen. Außerdem kann ein Pfeil mit Text gezeichnet werden, der in Richtung steigender  $x$ -Werte zeigt. Ganz entsprechend zeichnet `DatanGraphics.drawScaleY` eine Skala in  $y$ -Richtung.

Die Einteilung und Beschriftung der Skalen geschieht in diesen Methoden gewöhnlich automatisch ohne Steuerung durch den Benutzer. Mitunter möchte der Benutzer jedoch diese Operationen beeinflussen. Das kann mit `DatanGraphics.setParametersForScale` bewirkt. Ein Aufruf dieser Methode hat nur Auswirkungen auf die Skala, die mit dem nächstfolgenden Aufruf von `DatanGraphics.drawScaleX` oder `DatanGraphics.drawScaleY` erzeugt wird.

### Koordinatenkreuz

Die Methode `DatanGraphics.drawCoordinateCross` zeichnet ein Koordinatenkreuz im Rechenkoordinatensystem. Die Achsen des Rechenkoordinatensystems erscheinen als gestrichelte Linien soweit sie innerhalb des CC-Fensters verlaufen.

## F.7 Text innerhalb der Graphik

Erläuternder Text macht Graphiken leichter verständlich. Die in diesem Abschnitt angegebenen Programmaufrufe bewirken eine Überschrift der gesamten Graphik und die Platzierung von Text an jeder beliebigen Stelle der Graphik.

Der Text muß vom Benutzer als Zeichenkette bereitgestellt werden. Bevor dieser Text in graphische Zeichen umgesetzt wird, wird er jedoch zunächst entschlüsselt. Die einfache Verschlüsselung gestattet es dem Benutzer, einfache mathematische Formeln zeichnen zu lassen. Dazu stehen ihm *drei Alphabete* zu Verfügung: Latein, Griechisch und Mathematik, siehe Tafel F.1. Sie werden durch *Auswahlsymbole* festgelegt. Das sind die speziellen Zeichen

@ für Latein,  
& für Griechisch,  
% für Mathematik

Ein Auswahlsymbol in der Textzeichenkette legt fest, daß alle nach ihm erscheinenden Zeichen aus dem dem Symbol entsprechenden Alphabet entnommen werden, bis ein anderes Auswahlsymbol erscheint. Solange kein Auswahlsymbol aufgetreten ist, gilt das Lateinische Alphabet.

Außerdem gibt es die *Positionssymbole*

^ für Hochstellung (Exponent),  
\_ für Niedrigstellung (Index),  
# für Normalhöhe,  
" für Rückstellung.

Alle Zeichen erscheinen in Normalhöhe, solange kein Positionssymbol auftritt. Es können bis zu zwei Schritte von Normalniveau wegführen, z. B.  $A_{\alpha\beta}$ ,  $A_{\alpha\beta}$ . Die Positionssymbole ^ und \_ gelten bis zum Auftreten eines #. Das Symbol " wirkt nur auf das ihm unmittelbar folgende Zeichen, das dann über dem vorhergehenden und nicht nach ihm erscheint. Dadurch erhält man z. B.  $A_{\alpha}^{\beta}$  statt  $A_{\alpha}^{\beta}$ .

Die Methode `DatanGraphics.drawCaption` zeichnet eine Überschrift, die zentriert knapp unterhalb des oberen Randes des abgebildeten Ausschnitts des Weltkoordinatensystems erscheint.

Manchmal möchte der Benutzer Text an von ihm bestimmte Stellen der Graphik schreiben, z. B. an einzelne Kurven oder Datenpunkte, und auch die Textgröße wählen können. Das ermöglicht die Methode `DatanGraphics.drawText`.

**Tafel F.1:** Die verschiedenen Alphabete zum Zeichnen von Text.

Control Characters				Control Characters			
Input	Roman @	Greek &	Math %	Input	Roman @	Greek &	Math %
A	A	A(ALPHA)	Å	a	a	α(alpha)	ä
B	B	B(BETA)	B	b	b	β(beta)	b
C	C	X(CHI)	⌈	c	c	χ(chi)	c
D	D	Δ(DELTA)	Δ	d	d	δ(delta)	d
E	E	E(EPSILON)	E	e	e	ε(epsilon)	e
F	F	Φ(PHI)	F	f	f	φ(phi)	f
G	G	Γ(GAMMA)	≠	g	g	γ(gamma)	g
H	H	H(ETA)	H	h	h	η(eta)	h
I	I	I(IOTA)	∫	i	i	ι(iota)	i
J	J	I(IOTA)	J	j	j	ι(iota)	j
K	K	K(KAPPA)	K	k	k	κ(kappa)	k
L	L	Λ(LAMBDA)		l	l	λ(lambda)	l
M	M	M(MU)	±	m	m	μ(mu)	m
N	N	N(NU)	N	n	n	ν(nu)	n
O	O	Ω(OMEGA)	Ö	o	o	ω(omega)	ö
P	P	Π(PI)	Ö	p	p	π(pi)	p
Q	Q	Θ(THETA)	Q	q	q	θ(theta)	q
R	R	R(RHO)	◦	r	r	ρ(rho)	r
S	S	Σ(SIGMA)	ß	s	s	σ(sigma)	s
T	T	T(TAU)	¡	t	t	τ(tau)	t
U	U	O(OMICRON)	Ü	u	u	ο(omicron)	ü
V	V		Ü	v	v		v
W	W	Ψ(PSI)	√	w	w	ψ(psi)	w
X	X	Ξ(XI)	X	x	x	ξ(xi)	x
Y	Y	Υ(UPSILON)	Å	y	y	υ(upsilon)	y
Z	Z	Z(ZETA)	Z	z	z	ζ(zeta)	z
~	~	~	~	—	—	—	—
!	!	!	!	=	=	=	≡
\$	\$	\$	\$	{	{	{	{
*	*	#	×	}	}	}	}
(	(	↑	←				
)	)	↓	→	[	[	&	[
+	+	+	+	]	]	@	]
,	,	,	,	\			
1	1	1	1	:	:	:	:
2	2	2	2	;	;	;	;
3	3	3	3	,	,	,	,
4	4	4	4	<	<	⊂	≤
5	5	5	5	>	>	⊃	≥
6	6	6	6	?	?	§	~
7	7	7	7	,	,	,	,
8	8	8	8	.	.	.	.
9	9	9	9	/	/	\	%
0	0	0	0				

## F.8 Java-Klassen und Programmbeispiele

### Java-Klassen zur Graphik

`DatanGraphics` enthält alle in diesem Anhang aufgeführten Methoden.

`GraphicsWithHistogram` erzeugt mit einem Aufruf eine vollständige Graphik mit einem Histogramm (ein Programmbeispiel ist `E2Sample`, Abschnitt 6.2).

`GraphicsWith2DScatterDiagram` erzeugt eine Graphik mit einem zweidimensionalen Streudiagramm (ein Programmbeispiel ist `E3Sample`, Abschnitt 6.3),

`GraphicsWithHistogramAndPolyline` erzeugt eine Graphik mit einem Histogramm und einer beliebigen Polylinie (ein Programmbeispiel ist `E6Gr`, Abschnitt F.6).

`GraphicsWithDataPointsAndPolyline` erzeugt eine Graphik mit Datenpunkten und einer beliebigen Polylinie (ein Programmbeispiel ist `E7Gr`, Abschnitt F.7).

`GraphicsWithDataPointsAndMultiplePolylines` erzeugt eine Graphik mit Datenpunkten und mehreren beliebigen Polylinien (ein Programmbeispiel ist `E8Gr`, Abschnitt F.8).

**Programmbeispiel F.1:** Die Klasse `E1Gr` demonstriert die Benutzung folgender Methoden der Klasse `DatanGraphics`: `openWorkstation`, `closeWorkstation`, `setWindowInComputingCoordinates`, `setViewportInWorldCoordinates`, `setWindowInWorldCoordinates`, `setFormat`, `drawFrame`, `drawBoundary`, `chooseColor`, `drawPolyline`, `drawBrokenPolyline`, `drawScaleX`, `drawScaleY`, `drawCaption`, `drawText`

Das Programm erstellt die einfache Graphik in Bild F.1. Die Arbeitsstation wird geöffnet und die verschiedenen Koordinatensysteme werden definiert. Es folgen die Darstellung des äußeren Rahmens (der den dargestellten Ausschnitt des Weltkoordinatensystems umschließt) bzw. des inneren Rahmens (die Begrenzung des Rechenkoordinatenfensters). An-

schließlich werden beschriftete Skalen für die Abszisse und die Ordinate gezeichnet und es wird die Überschrift der Graphik erzeugt. Nun wird der Farbindex geändert. In einer kurzen Schleife werden insgesamt 201 Wertepaare berechnet, die Punkten  $(x_i, y_i)$  entsprechen. Dabei gilt  $x_i = -10, -9.9, -9.8, \dots, 10$  und  $y_i = f(x_i)$ . Die Funktion  $f(x)$  ist die Wahrscheinlichkeitsdichte der standardisierten Normalverteilung. Die durch diese Wertepaare definierte Polylinie wird gezeichnet. Danach werden in einer zweiten Schleife die Punkte einer Polylinie berechnet, die einer Normalverteilung mit Mittelwert  $a = 2$  und Standardabweichung  $\sigma = 3$  entspricht. Diese Polylinie wird gestrichelt gezeichnet. Schließlich werden in der oberen linken Ecke des Bildes zwei kurze gerade Polylinien gezeichnet (je eine durchgezogen bzw. gestrichelt); jeweils rechts daneben wird ein kurzer Text angebracht, der die Parameter der durchgezogen bzw. gestrichelt gezeichneten Gauß-Kurve angibt. Vor Beendigung des Programms wird die Arbeitsstation geschlossen.

**Programmbeispiel F.2:** Die Klasse `E2Gr` demonstriert die Benutzung der Methode `DatanGraphics.drawMark`

Das kurze Programm erzeugt die Graphik in Bild F.3, in dem die verschiedenen Marken dargestellt sind, die mit `DatanGraphics.drawMark` gezeichnet werden können.

**Programmbeispiel F.3:** Die Klasse `E3Gr` demonstriert die Benutzung der Methode `DatanGraphics.drawDatapoint`

Das Programm erzeugt die Graphik in Bild F.4. Sie enthält Beispiele für die verschiedenen Möglichkeiten zur Darstellung von Datenpunkten mit Fehlern.

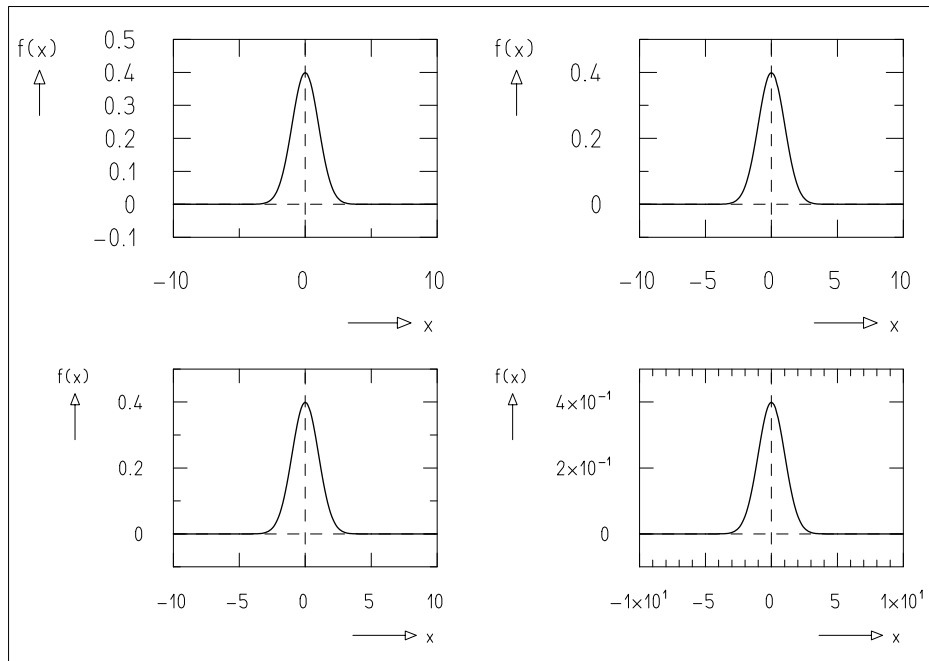
**Programmbeispiel F.4:** Die Klasse `E4Gr` demonstriert die Benutzung der Methode `DatanGraphics.drawContour`

Es wird ein Rechenkoordinatenfenster  $-\pi \leq x \leq \pi$ ,  $-\pi \leq y \leq \pi$  und eine quadratische Darstellungsfläche in Weltkoordinaten gewählt. Nach der Erzeugung von Skalen und der Überschrift werden die Eingabeargumente für `DatanGraphics.drawContour` vorbereitet. Anschließend werden in einer Schleife durch wiederholte Aufrufe der Methode insgesamt 19 Höhenlinien der Funktion  $f(x, y) = \sin(x + y) \cos((x - y)/2)$  gezeichnet. Das Ergebnis ist eine Graphik entsprechend Bild F.5.

**Anregungen:** Ergänzen Sie das Programm so, daß die Parameter `ncont` und `nstep`, die die Zahl der Höhenlinien und die Zahl der Intervalle in  $x$  und  $y$  festlegen, interaktiv vom Benutzer gesetzt werden können. Beobachten Sie die Veränderung der Graphik bei starker Verkleinerung von `nstep`.

**Programmbeispiel F.5:** Die Klasse `E5Gr` demonstriert die Methoden `DatanGraphics.setParametersForScale` und `DatanGraphics.drawCoordinateCross`

Das Programm erzeugt die im Bild F.6 dargestellte Graphik. Sie enthält 4 Teilbilder, die sich nur in ihrer Skalenbeschriftung unterscheiden. Die Teilbilder werden in einer Schleife erzeugt, in der in jedem Schritt das Abbildungsfeld in Weltkoordinaten so verändert wird, daß es dem oberen linken bzw. oberen rechten bzw. unteren linken bzw. unteren rechten Quadranten des Fensters in Weltkoordinaten entspricht. Für das obere linke Teilbild werden



**Bild F.6:** Vier Versionen der gleichen Graphik mit verschiedenen Gestaltungen der Skalen.

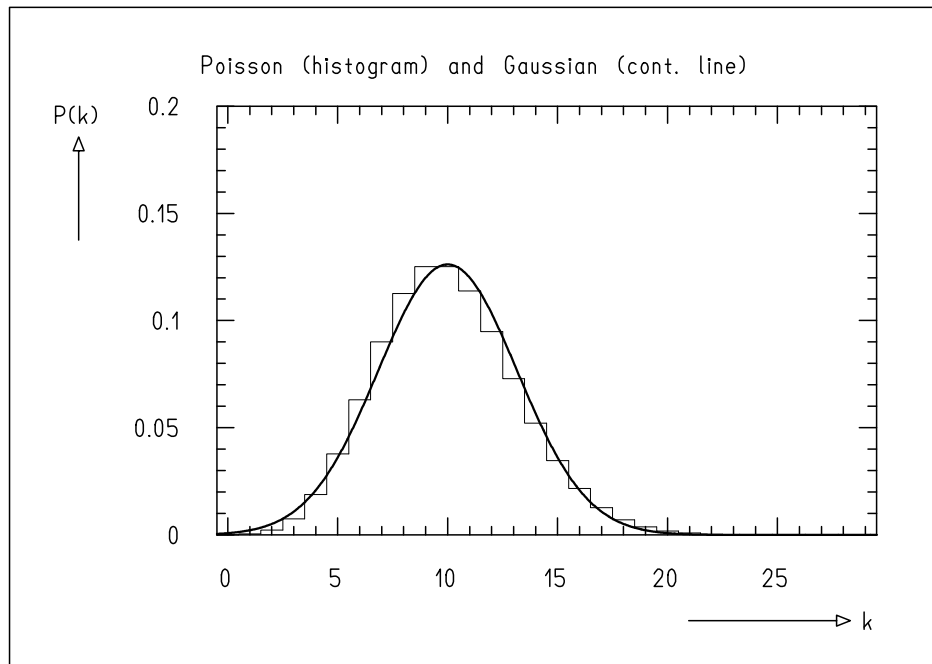
die Voreinstellungen für die Skalengestaltung benutzt. Im oberen rechten Teilbild wird die Anzahl der Markierungen und ihre Beschriftung neu festgelegt. Im unteren linken Teilbild wird die Größe der zur Beschriftung verwendeten Symbole verändert. Im unteren rechten Teilbild werden Zahlen in Exponentialschreibweise benutzt. Alle Teilbilder enthalten ein Koordinatenkreuz und einen einfachen Funktionsgraphen.

#### **Programmbeispiel F.6:** Die Klasse `E6Gr` demonstriert die Benutzung der Klasse `GraphicsWithHistogramAndPolyline`

Das Programm baut zunächst ein Histogramm auf, das zu jedem Wert  $k$  die Poisson-Wahrscheinlichkeit  $f(k; \lambda)$  enthält, und zwar für den Wert  $\lambda = 10$ . Anschließend werden Punkte auf einer Polylinie berechnet, die der Wahrscheinlichkeitsdichte einer Normalverteilung mit dem Mittelwert  $\lambda$  und der Varianz  $\lambda$  entsprechen. Schließlich werden noch die Beschriftungen der Graphik definiert, und die vollständige Graphik wird durch einen Aufruf von `GraphicsWithHistogramAndPolyline` ausgegeben, Bild F.7.

#### **Programmbeispiel F.7:** Die Klasse `E7Gr` demonstriert die Benutzung der Klasse `GraphicsWithDataPointsAndPolyline`

Zunächst werden mit Hilfe von `DatanRandom.line` Datenpunkte erzeugt, die im Rahmen ihrer simulierten Fehler auf der durch  $y = at + b$  gegebenen Geraden liegen. Anschließend werden die zu diesen Punkten darzustellenden Meßfehler in Ordinateenrichtung und in Abszissenrichtung sowie ihre Kovarianz angegeben. Die beiden zuletzt genannten Größen sind in unserem Beispiel Null. Die die Gerade definierende Polylinie besteht nur aus zwei

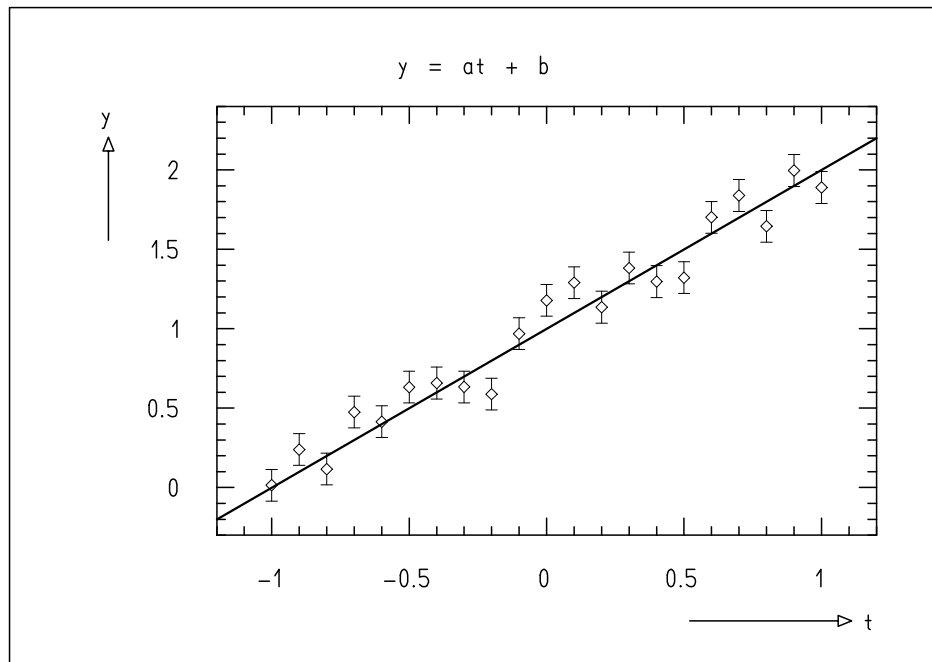


**Bild F.7:** Eine mit Hilfe von `GraphicsWithHistogramAndPolyline` erzeugte Graphik.

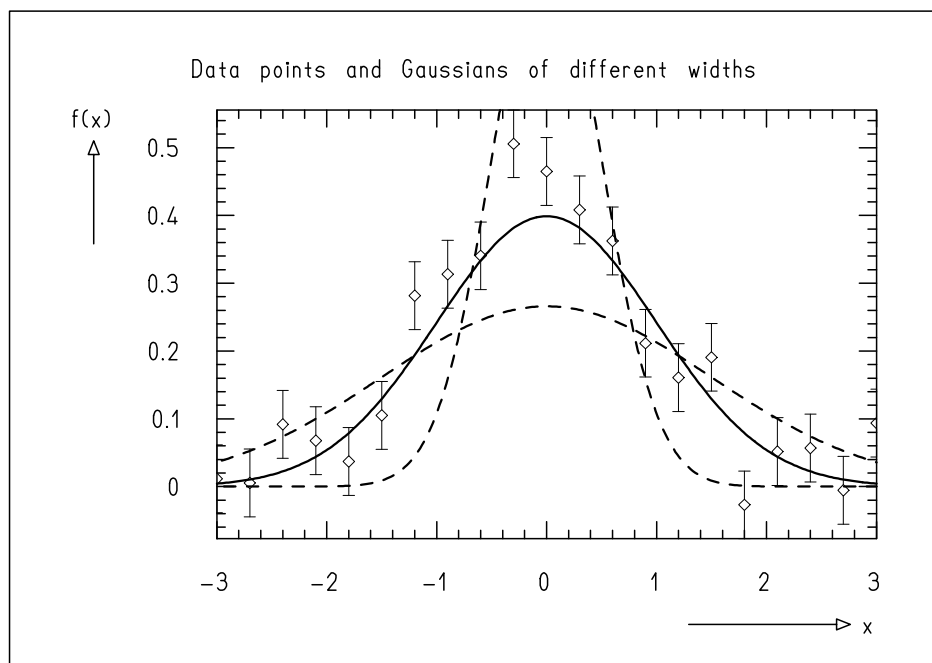
Punkten, deren Berechnung trivial ist. Nach der Definition der Texte an den Achsen und der Überschrift wird die Graphik durch den Aufruf von `GraphicsWithDataPointsAndPolyline` ausgegeben, Bild F.8.

**Programmbeispiel F.8:** Die Klasse `E8Gr` demonstriert die Benutzung der Klasse `GraphicsWithDataPointsAndMultiplePolylines`

Das Programm erzeugt 21 Datenpunkte, die im Rahmen der simulierten Meßfehler auf einer Gauß-Kurve mit der Standardabweichung  $\sigma = 1$  liegen und den Abszissenbereich  $-3 \leq x \leq 3$  überdecken. Zusätzlich werden Punkte auf 3 Polylinien berechnet, die drei Gauß-Kurven mit  $\sigma = 0.5$ ,  $\sigma = 1$  und  $\sigma = 1.5$  entsprechen. Die Polylinien überstreichen den Abszissenbereich  $-10 \leq x \leq 10$ . Sie werden in verschiedenen Farben dargestellt. Eine wird durchgezogen, die anderen werden gestrichelt gezeichnet. Es werden 3 Graphiken erzeugt. Eine enthält nur die Datenpunkte, die zweite nur die Polylinien und die dritte Datenpunkte und Polylinien (Bild F.9). So wird Wirkung der automatischen Skalenwahl in den verschiedenen Fällen demonstriert.



**Bild F.8:** Eine mit Hilfe von `GraphicsWithDataPointsAndPolyline` erzeugte Graphik.



**Bild F.9:** Eine mit Hilfe von `GraphicsWithDataPointsAndMultiplePolylines` erzeugte Graphik mit Datenpunkten und mehreren Polylinien.



# G Aufgaben, Hinweise und Lösungen sowie Programmieraufgaben zu den einzelnen Kapiteln

## G.1 Aufgaben

### **Aufgabe 2.1:** Bestimmung von Wahrscheinlichkeiten aus Symmetriebetrachtungen

In einem Seminarraum befinden sich  $n$  Studenten. Wie groß ist die Wahrscheinlichkeit dafür, daß wenigstens zwei von ihnen am gleichen Tag Geburtstag haben?

Lösen Sie die Aufgabe durch Beantwortung der folgenden Fragen:

- (a) Wie groß ist die Zahl  $N$  der Möglichkeiten,  $n$  Geburtstage auf das Jahr (365 Tage) zu verteilen?
- (b) Wie groß ist die Zahl  $N'$ , so daß alle  $n$  Geburtstage verschieden sind?
- (c) Wie groß ist dann die Wahrscheinlichkeit  $P_{\text{diff}}$ , daß sie verschieden sind?
- (d) Wie groß ist schließlich die Wahrscheinlichkeit  $P$ , daß wenigstens zwei Geburtstage nicht verschieden sind?

### **Aufgabe 2.2:** Wahrscheinlichkeit für sich nicht ausschließende Ereignisse

Die Wahrscheinlichkeiten  $P(A)$ ,  $P(B)$  und  $P(AB) \neq 0$  für sich nicht ausschließende Ereignisse  $A$  und  $B$  seien gegeben. Wie groß ist die Wahrscheinlichkeit  $P(A + B)$  für die Beobachtung von  $A$  oder  $B$ ? Berechnen Sie als Beispiel die Wahrscheinlichkeit, daß eine Spielkarte, die zufällig aus einem Kartenspiel von 52 Karten gezogen wurde, ein As oder ein Karo ist.

### **Aufgabe 2.3:** Abhängige und unabhängige Ereignisse

Sind die Ereignisse  $A$  und  $B$ , daß eine Karte aus einem Spiel ein As oder ein Karo ist, unabhängig voneinander,

- (a) wenn ein gewöhnliches Spiel von 52 Karten benutzt wird,
- (b) wenn dem Spiel ein Joker zugefügt wird?

**Aufgabe 2.4:** Komplementäre Ereignisse

Zeigen Sie, daß  $\bar{A}$  und  $\bar{B}$  unabhängig sind, wenn  $A$  und  $B$  unabhängig sind. Benutzen Sie das Ergebnis der Aufgabe 2.2, um  $P(\bar{A}\bar{B})$  durch  $P(A)$ ,  $P(B)$  und  $P(AB)$  auszudrücken.

**Aufgabe 2.5:** Wahrscheinlichkeiten für große und kleine Grundgesamtheiten

Ein Gefäß enthalte eine große Zahl ( $> 1000$ ) Münzen. Insgesamt seien 3 Arten von Münzen  $A$ ,  $B$  und  $C$  vertreten, die 20 %, 30 % bzw. 50 % der Gesamtzahl ausmachen.

- (a) Wie groß sind die Wahrscheinlichkeiten  $P(A)$ ,  $P(B)$ ,  $P(C)$ , eine Münze der Sorte  $A$ ,  $B$  bzw.  $C$  zu greifen, wenn eine Münze zufällig aus dem Gefäß genommen wird? Wie groß sind die Wahrscheinlichkeiten  $P(AB)$ ,  $P(AC)$ ,  $P(BC)$ ,  $P(AA)$ ,  $P(BB)$ ,  $P(CC)$ ,  $P(2 \text{ gleiche Münzen})$ ,  $P(2 \text{ verschiedene Münzen})$  für zwei Münzen?
- (b) Wie groß sind diese Wahrscheinlichkeiten, wenn das Gefäß nur 10 Münzen enthält, und zwar 2 der Sorte  $A$ , 3 der Sorte  $B$  und 5 der Sorte  $C$ ?

**Aufgabe 3.1:** Mittelwert, Varianz und Schiefe einer diskreten Verteilung

Der Wurf eines Würfels liefert als mögliche Ergebnisse  $x_i = 1, 2, \dots, 6$ . Für einen völlig symmetrischen Würfel hat man  $p_i = P(x_i) = 1/6$ ,  $i = 1, 2, \dots, 6$ . Bestimmen Sie den Erwartungswert  $\hat{x}$ , die Varianz  $\sigma^2(x) = \mu_2$  und Schiefe  $\gamma$  für die Verteilung

- (a) für einen völlig symmetrischen Würfel,
- (b) für einen Würfel mit

$$p_1 = \frac{1}{6}, \quad p_2 = \frac{1}{12}, \quad p_3 = \frac{1}{12}, \quad p_4 = \frac{1}{6}, \quad p_5 = \frac{3}{12}, \quad p_6 = \frac{3}{12}.$$

**Aufgabe 3.2:** Mittelwert, wahrscheinlichster Wert, Median und Varianz einer kontinuierlichen Verteilung

Betrachten Sie eine Wahrscheinlichkeitsverteilung  $f(x)$  einer *Dreiecksverteilung* der Form wie in Bild G.1, die durch

$$\begin{aligned} f(x) &= 0, \quad x < a, \quad x \geq b; \\ f(x) &= \frac{2}{(b-a)(c-a)}(x-a), \quad a \leq x < c; \\ f(x) &= \frac{2}{(b-a)(b-c)}(b-x), \quad c \leq x < b \end{aligned}$$

gegeben ist.

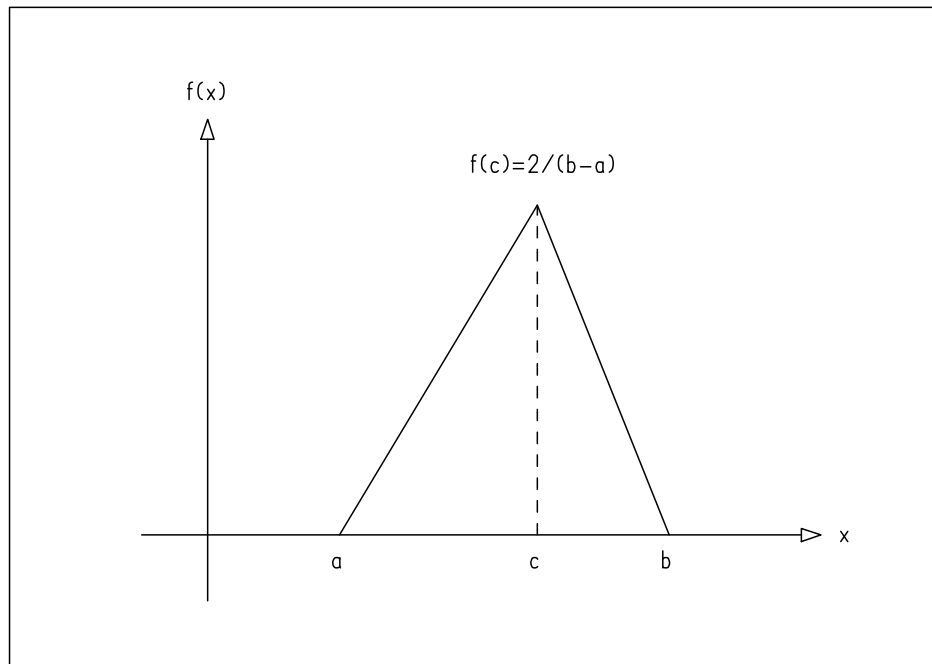


Bild G.1: Dreieckförmige Wahrscheinlichkeitsdichte.

Bestimmen Sie den Mittelwert  $\hat{x}$ , den wahrscheinlichsten Wert  $x_m$ , den Median  $x_{0.5}$  und die Varianz  $\sigma^2$  der Verteilung. Wählen Sie der Einfachheit halber  $c = 0$  (das entspricht einer Ersetzung von  $x$  durch  $x' = x - c$ ). Geben Sie die Ergebnisse für den symmetrischen Fall  $a = -b$  und den Fall  $a = -2b$  an.

### Aufgabe 3.3: Transformation einer Variablen

In Anhang D wird gezeigt, daß

$$\int_{-\infty}^{\infty} \exp(-x^2/2) dx = \sqrt{2\pi}.$$

Benutzen Sie die Transformation  $y = x/\sigma$ , um zu zeigen, daß

$$\int_{-\infty}^{\infty} \exp(-x^2/2\sigma^2) dx = \sigma\sqrt{2\pi}.$$

### Aufgabe 3.4: Transformation mehrerer Variablen

Eine „Normalverteilung zweier Variabler“ (vgl. Abschnitt 5.10) kann die Form

$$f(x, y) = \frac{1}{2\pi\sigma_x\sigma_y} \exp\left(-\frac{1}{2}\frac{x^2}{\sigma_x^2} - \frac{1}{2}\frac{y^2}{\sigma_y^2}\right)$$

haben.

- (a) Bestimmen Sie unter Benutzung des Ergebnisses der Aufgabe 3.3 die Randverteilungen  $f(x)$ ,  $f(y)$ .
- (b) Sind  $x$  und  $y$  unabhängige Variable?
- (c) Transformieren Sie die Verteilung  $f(x, y)$  auf die Variablen

$$u = x \cos \phi + y \sin \phi, \quad v = y \cos \phi - x \sin \phi$$

(das Koordinatensystem  $u, v$  hat den gleichen Ursprung wie das System  $x, y$ , ist aber gegen dieses um den Winkel  $\phi$  gedreht).

Hinweis: Zeigen Sie, daß die Transformation orthogonal ist und benutzen Sie (3.8.12).

- (d) Zeigen Sie, daß  $u$  und  $v$  nur dann unabhängige Variable sind, wenn  $\phi = 0^\circ, 90^\circ, 180^\circ, 270^\circ$  oder wenn  $\sigma_x = \sigma_y = \sigma$ .
- (e) Betrachten Sie den Fall  $\sigma_x = \sigma_y = \sigma$ , d. h.

$$f(x) = \frac{1}{2\pi\sigma^2} \exp \left[ -\frac{1}{2\sigma^2}(x^2 + y^2) \right].$$

Transformieren Sie die Verteilung in ebene Polarkoordinaten  $r, \phi$ , bestimmen Sie die Randverteilungen  $g(r)$  und  $g(\phi)$  und zeigen Sie, daß  $r$  und  $\phi$  unabhängig sind.

### Aufgabe 3.5: Fehlerfortpflanzung

Die Zeit  $T$  für die Periode der Bewegung eines mathematischen Pendels ist durch  $T = 2\pi\sqrt{\ell/g}$  gegeben. Dabei ist  $\ell$  die Länge des Pendels und  $g$  die Erdbeschleunigung. Berechnen Sie  $g$  und  $\Delta g$  unter Benutzung der Meßwerte  $\ell = 99.8 \text{ cm}$ ,  $\Delta \ell = 0.3 \text{ cm}$ ,  $T = 2.03 \text{ s}$ ,  $\Delta T = 0.05 \text{ s}$  und unter der Annahme, daß die Messungen von  $\ell$  und  $T$  unkorreliert sind.

### Aufgabe 3.6: Kovarianz und Korrelation

Masse und Geschwindigkeit eines Objekts seien durch  $m$  und  $v$  bezeichnet, ihre Meßfehler durch  $\Delta m = \sqrt{\sigma^2(m)}$  und  $\Delta v = \sqrt{\sigma^2(v)}$ . Die Messungen werden als unabhängig angenommen, d. h.  $\text{cov}(m, v) = 0$ . Weiter seien ihre relativen Meßfehler bekannt, d. h.

$$\Delta m/m = a, \quad \Delta v/v = b.$$

- (a) Betrachten Sie den Impuls  $p = mv$  und die kinetische Energie  $E = \frac{1}{2}mv^2$  des Objekts und berechnen Sie  $\sigma^2(p)$ ,  $\sigma^2(E)$ ,  $\text{cov}(p, E)$  und die Korrelation  $\rho(p, E)$ . Diskutieren Sie  $\rho(p, E)$  für die Spezialfälle  $a = 0$  bzw.  $b = 0$ . Hinweis: Bilden Sie Vektoren  $\mathbf{x} = (m, v)$  und  $\mathbf{y} = (p, E)$ . Nähern Sie dann  $\mathbf{y} = \mathbf{y}(\mathbf{x})$  durch eine lineare Transformation an und berechnen Sie schließlich die Kovarianzmatrix.
- (b) Die Meßwerte für  $E, p$  und die Kovarianzmatrix seien bekannt. Berechnen Sie die Masse  $m$  und deren Fehler nach der Fehlerfortpflanzung. Benutzen Sie die Ergebnisse aus (a), um den Zusammenhang zu verifizieren. Beachten Sie, daß Sie das richtige Ergebnis nur dann erhalten, wenn sie  $\text{cov}(p, E)$  bei der Fehlerfortpflanzung berücksichtigen.

**Aufgabe 5.1:** Binomialverteilung

- (a) Beweisen Sie die Gültigkeit der Rekursionsformel

$$W_{k+1}^n = \frac{n-k}{k+1} \frac{p}{q} W_k^n.$$

- (b) Von einem Herstellungsverfahren sei bekannt, daß der Bruchteil  $q = 0.2$  aller produzierten Stücke defekt ist. Das bedeutet, daß bei 5 produzierten Stücken die erwartete Zahl von fehlerfreien Stücken gerade  $np = n(1-q) = 5 \cdot 0.8 = 4$  ist. Was sind die Wahrscheinlichkeiten  $P_2$  und  $P_3$ , daß höchstens 2 bzw. 3 Stücke fehlerfrei sind? Benutzen Sie die Beziehung (a) zur Vereinfachung ihrer Rechnung.
- (c) Bestimmen Sie den Wert  $k_m$ , für den die Binomialverteilung ihr Maximum annimmt, d. h.  $k_m$  ist der wahrscheinlichste Wert der Verteilung. Hinweis: Da  $W_k^n$  keine Funktion einer kontinuierlichen Variablen  $k$  ist, kann das Maximum nicht durch Nullsetzen einer Ableitung gefunden werden. Deswegen müssen die endlichen Differenzen  $W_k^n - W_{k-1}^n$  betrachtet werden.
- (d) In Abschnitt 5.1, wurde die Binomialverteilung gewonnen, indem man die Zufallsvariable  $x = \sum_{i=1}^n x_i$  betrachtete. Dabei war  $x_i$  eine Zufallsvariable, die nur Werte 0 und 1 annehmen konnte, und zwar mit den Wahrscheinlichkeiten  $P(x_i = 1) = p$  und  $P(x_i = 0) = q$ .

Die Binomialverteilung

$$f(x) = f(k) = W_k^n = \binom{n}{k} p^k q^{n-k}$$

wurde dann dadurch hergeleitet, daß man im einzelnen die Wahrscheinlichkeit betrachtete, bei insgesamt  $n$  Beobachtungen der Variablen  $x_i$  in  $k$  Fällen  $x_i = 1$  festzustellen. Gewinnen Sie die Binomialverteilung auf mehr formale Weise, indem Sie die charakteristische Funktion  $\varphi_{x_i}$  der Variablen  $x_i$  aufstellen. Durch Erhebung in die  $n$ -te Potenz finden Sie die charakteristische Funktion von  $x$ . Hinweis: Benutzen Sie den binomischen Satz (B.6).

**Aufgabe 5.2:** Poisson-Verteilung

In einem bestimmten Krankenhaus wird der diensthabende Arzt pro Nacht im Mittel drei Mal zu einem Patienten gerufen. Die Anzahl der Arzttrufe werde als Poisson-verteilt angesehen. Mit welcher Wahrscheinlichkeit hat der Arzt eine störungsfreie Nachtruhe?

**Aufgabe 5.3:** Normalverteilung

Der Widerstandswert  $R$  elektrischer Widerstände, die von einer bestimmten Maschine hergestellt wurden, werde durch eine Normalverteilung mit dem Mittelwert  $R_m$  und der Standardabweichung  $\sigma$  beschrieben.

Die Produktionskosten für den Widerstand seien  $C$ , der Verkaufspreis sei  $5C$ , falls  $R = R_0 \pm \Delta_1$ , und  $2C$ , falls  $R_0 - \Delta_2 < R < R_0 - \Delta_1$  bzw.  $R_0 + \Delta_1 < R < R_0 + \Delta_2$ . Widerstände außerhalb des letztgenannten Bereichs seien unverkäuflich.

- (a) Bestimmen Sie den Gewinn  $P$  pro hergestelltem Widerstand für  $R_m = R_0$ ,  $\Delta_1 = a_1 R_0$ ,  $\Delta_2 = a_2 R_0$ ,  $\sigma = b R_0$ . Benutzen Sie dabei die Verteilungsfunktion  $\psi_0$ .
- (b) Benutzen Sie die Tafel I.2 zur Berechnung von Zahlenwerten von  $P$  für  $a_1 = 0.01$ ,  $a_2 = 0.05$ ,  $b = 0.05$ .
- (c) Zeigen Sie, daß die Wahrscheinlichkeitsdichte (5.7.1) Wendepunkte bei  $x = a \pm b$  hat.

**Aufgabe 5.4:** Normalverteilung mehrerer Variabler

Ein ebenes  $xy$ -Koordinatensystem diene als Zielscheibe. Die Wahrscheinlichkeit, für die Beobachtung von Einschüssen in der Ebene sei durch die Normalverteilung aus Aufgabe 3.4 (e) gegeben. Benutzen Sie die Ergebnisse dieser Aufgabe zur Bestimmung

- (a) der Wahrscheinlichkeit  $P(R)$ , einen Einschuß innerhalb eines vorgegebenen Radius  $R$  um den Ursprung zu beobachten,
- (b) des Radius  $R$ , innerhalb dessen ein Einschuß mit vorgegebener Wahrscheinlichkeit beobachtet wird. Berechnen Sie als Zahlenbeispiel den Wert von  $R$  für  $P = 90\%$  und  $\sigma = 1$ .

**Aufgabe 5.5:** Faltung

- (a) Beweisen Sie (5.11.11). Beginnen Sie mit (5.11.9) und benutzen Sie die Ausdrücke (5.11.10) für  $f_y(y)$ . In den Intervallen  $0 \leq u < 1$  bzw.  $2 \leq u < 3$  gelten die Beziehungen (5.11.10a) bzw. (5.11.10b), da dort immer  $y < 1$  bzw.  $y > 1$ . Im Intervall  $1 \leq u < 2$  muß aber die resultierende Verteilung  $f(u)$  aus einer Summe zweier Integrale vom Typ (5.11.9) aufgebaut werden, von denen jedes einen der beiden möglichen Ausdrücke für  $f_y(y)$  enthält. In diesem Fall muß man bei der Bestimmung der Integrationsgrenzen besonders vorsichtig verfahren. Sie werden durch die Definitionsintervalle von  $u$  und  $f_y(y)$  gegeben.
- (b) Beweisen Sie (5.11.15) durch Ausführung des Integrals (5.11.5) für den Fall, daß  $f_x$  und  $f_y$  Normalverteilungen mit den Mittelwerten 0 und den Standardabweichungen  $\sigma_x$  und  $\sigma_y$  sind.

**Aufgabe 6.1:** Effizienz von Schätzungen

$x_1, x_2, x_3$  seien Elemente einer Stichprobe aus einer kontinuierlichen Grundgesamtheit mit unbekanntem Mittelwert  $\hat{x}$ , aber bekannter Varianz  $\sigma^2$ .

- (a) Zeigen Sie, daß die folgenden Größen unverzerzte Schätzungen von  $\hat{x}$  sind

$$S_1 = \frac{1}{4}x_1 + \frac{1}{4}x_2 + \frac{1}{2}x_3, \quad S_2 = \frac{1}{5}x_1 + \frac{2}{5}x_2 + \frac{2}{5}x_3, \quad S_3 = \frac{1}{6}x_1 + \frac{1}{3}x_2 + \frac{1}{2}x_3.$$

*Hinweis:* Es ist einfach, allgemein zu zeigen, daß  $S = \sum_{i=1}^n a_i x_i$  unverzerzt ist, wenn  $\sum_{i=1}^n a_i = 1$  gilt.

- (b) Bestimmen Sie Varianzen  $\sigma^2(S_1)$ ,  $\sigma^2(S_2)$ ,  $\sigma^2(S_3)$  unter Benutzung von (3.8.7) und der Annahme, daß die Elemente  $x_1, x_2, x_3$  unabhängig sind.
- (c) Zeigen Sie, daß das arithmetische Mittel  $\bar{x} = \frac{1}{3}x_1 + \frac{1}{3}x_2 + \frac{1}{3}x_3$  die kleinste Varianz aller Schätzungen vom Typ  $S = \sum_{i=1}^3 a_i x_i$  hat, die der Zusatzbedingung  $\sum_{i=1}^3 a_i = 1$  genügen.

*Hinweis:* Minimieren Sie die Varianz von  $S = a_1 x_1 + a_2 x_2 + (1 - a_1 - a_2)x_3$  bezüglich  $a_1$  und  $a_2$ . Berechnen Sie diese Varianz und vergleichen Sie sie mit den Varianzen, die Sie unter (b) erhalten haben.

**Aufgabe 6.2:** Stichproben-Mittel und -Varianz

Berechnen Sie das Stichprobenmittel  $\bar{x}$ , die Stichprobenvarianz  $s^2$  und einen Schätzwert für die Varianz des Stichprobenmittels  $s_{\bar{x}}^2 = (1/n)s^2$  für folgende Stichprobe

$$18, 21, 23, 19, 20, 21, 20, 19, 20, 17.$$

Benutzen Sie die Methode aus Beispiel 6.1.

**Aufgabe 6.3:** Stichproben aus einer zerlegten Grundgesamtheit

Über das Ergebnis einer bevorstehenden Wahl wird eine Meinungsumfrage durchgeführt. In unserem (stark konstruierten) Beispiel wird die Grundgesamtheit in drei Teilgesamtheiten  $i = 1, 2, 3$  zerlegt und aus jeder Teilgesamtheit wird eine vorläufige Stichprobe der Größe 10 entnommen. Jedes Element der Stichprobe kann die Werte 0 (Stimme für Partei A) oder 1 (Stimme für Partei B) annehmen. Die Stichproben sind

$$\begin{aligned} i = 1 \quad (p_i = 0.1) : & x_{ij} = 0, 0, 0, 0, 1, 0, 1, 0, 0, 0, \\ i = 2 \quad (p_i = 0.7) : & x_{ij} = 0, 0, 1, 1, 0, 1, 0, 1, 1, 0, \\ i = 3 \quad (p_i = 0.2) : & x_{ij} = 0, 1, 1, 1, 1, 0, 1, 1, 1, 0. \end{aligned}$$

- (a) Benutzen Sie diese Stichproben, um eine Schätzung für das Ergebnis der Wahl und seine Varianz  $s_{\bar{x}}^2$  zu gewinnen. Gibt dieses Ergebnis einer Partei einen eindeutigen Vorsprung?
- (b) Benutzen Sie die Stichproben, um für eine wesentlich größere Stichprobe der Größe  $n$  die Größen  $n_i$  der Teilstichproben so festzulegen, daß  $\tilde{x}$  kleinste Varianz hat (vgl. Beispiel 6.6).

**Aufgabe 6.4:**  $\chi^2$ -Verteilung

- (a) Bestimmen Sie die Schiefe  $\gamma = \mu_3/\sigma^3$  der  $\chi^2$ -Verteilung unter Benutzung von (5.5.7). Beginnen Sie damit, daß Sie  $\mu_3$  durch  $\lambda_3$ ,  $\hat{x}$  und  $E(x^2)$  ausdrücken.
- (b) Zeigen Sie, daß  $\gamma \rightarrow 0$  für  $n \rightarrow \infty$ .

**Aufgabe 6.5:** Histogramm

Zeichnen Sie ein Histogramm für die folgenden 30 Meßwerte:

26.02, 27.13, 24.78, 26.19, 22.57, 25.16, 24.39, 22.73, 25.35, 26.13,  
 23.15, 26.29, 24.89, 23.76, 26.04, 22.03, 27.48, 25.42, 24.27, 26.58,  
 27.17, 24.22, 21.86, 26.53, 27.09, 24.73, 26.12, 28.04, 22.78, 25.36.

Wählen Sie eine Intervallbreite von  $\Delta x = 1$ .

*Hinweis:* Zeichnen Sie jeden Meßwert als ein Kreuz der Breite  $\Delta x$  und der Höhe 1. Auf diese Weise brauchen Sie die Meßwerte nicht zu ordnen, da jedes Kreuz im gleichen Intervall oberhalb des vorhergehenden Kreuzes eingetragen wird. So wachsen die Balken des Histogramms während des Zeichenvorgangs.

**Aufgabe 7.1:** Maximum-Likelihood-Schätzungen

- (a) Von einer Zufallsvariablen  $x$  sei bekannt, daß sie der Gleichverteilung  $f(x) = 1/b$  für  $0 < x < b$  folgt. Der Parameter  $b$  soll durch eine Stichprobe geschätzt werden. Zeigen Sie, daß  $S = \tilde{b} = x_{\max}$  die Maximum-Likelihood-Schätzung von  $b$  ist. (Hinweis: Dieses Ergebnis kann nicht durch Differentiation, wohl aber durch einfache Betrachtung der Likelihood-Funktion gefunden werden).
- (b) Stellen Sie die Likelihood-Gleichungen für die beiden Parameter  $a$  und  $\Gamma$  der Lorentz-Verteilung auf (vgl. Beispiel 3.5). Zeigen Sie, daß diese keine notwendig eindeutigen Lösungen besitzen. Man kann jedoch leicht einsehen, daß für  $|x^{(j)} - a| \ll \Gamma$  das arithmetische Mittel  $\bar{x}$  eine Schätzung von  $a$  ist.

**Aufgabe 7.2:** Information

- (a) Geben Sie die Information  $I(\lambda)$  einer Stichprobe der Größe  $N$  an, die aus einer Normalverteilung bekannter Varianz  $\sigma^2$ , aber unbekannten Mittelwertes  $\lambda = a$  entnommen ist.
- (b) Geben Sie die Information  $I(\lambda)$  einer Stichprobe der Größe  $N$  an, die aus einer Normalverteilung bekannten Mittelwertes  $a$ , aber unbekannter Varianz  $\lambda = \sigma^2$  entnommen ist. Zeigen Sie, daß die Maximum-Likelihood-Schätzung von  $\sigma^2$  durch

$$S = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N (x^{(j)} - a)^2$$

gegeben ist und daß diese Schätzung unverzerrt ist, d. h.  $B(S) = E(S) - \lambda = 0$ .



**Aufgabe 7.3:** Varianz einer Schätzung

- (a) Benutzen Sie die Informations-Ungleichung zur Gewinnung einer unteren Grenze für die Varianz einer Schätzung des Mittelwertes in Aufgabe 7.2 (a). Zeigen Sie, daß diese Grenze gleich der minimalen Varianz ist, die in Aufgabe 6.1 (c) bestimmt wurde.
- (b) Benutzen Sie die Informations-Ungleichung zur Gewinnung einer unteren Grenze der Varianz von  $\mathbf{S}$  in Aufgabe 7.2 (b).
- (c) Zeigen Sie mit Hilfe von (7.3.12), daß  $\mathbf{S}$  eine Schätzung minimaler Varianz ist, deren Varianz gleich der in (b) gefundenen unteren Grenze ist.

**Aufgabe 8.1:**  $F$ -Test

Gegeben seien zwei Stichproben

- (1) 21, 19, 14, 27, 25, 23, 22, 18, 21, ( $N_1 = 9$ ),
- (2) 16, 24, 22, 21, 25, 21, 18, ( $N_2 = 7$ ).

Hat die Stichprobe (2) eine kleinere Varianz als die Stichprobe (1) bei einem Signifikanzniveau von  $\alpha = 5\%$ ?

**Aufgabe 8.2:** Student's Test

Testen Sie die Hypothese, daß die 30 Messungen aus Aufgabe 6.5 einer Grundgesamtheit mit dem Mittelwert 25.5 entnommen sind. Benutzen Sie ein Signifikanzniveau von  $\alpha = 10\%$ . Nehmen Sie an, daß die Grundgesamtheit normalverteilt ist.

**Aufgabe 8.3:**  $\chi^2$ -Test bezüglich der Varianz

Benutzen Sie die Methode des Likelihood-Quotienten zur Konstruktion eines Tests der Hypothese  $H_0(\sigma^2 = \sigma_0^2)$ , daß eine Stichprobe einer Normalverteilung entstammt, deren Mittelwert  $a$  und Varianz  $\sigma_0^2$  allerdings unbekannt sind. Die Parameter sind  $\lambda = (a, \sigma)$ . In  $\omega$  hat man  $\tilde{\lambda}^{(\omega)} = (\bar{x}, \sigma_0)$ , in  $\Omega$ :  $\bar{\lambda}^{(\Omega)} = (\bar{x}, s)$ .

- (a) Bilden Sie den Likelihood-Quotienten  $T$ .
- (b) Zeigen Sie, daß anstelle von  $T$  auch die Test-Funktion  $T' = Ns^2/\sigma_0^2$  benutzt werden kann.
- (c) Zeigen Sie, daß  $T'$  einer  $\chi^2$ -Verteilung mit  $N - 1$  Freiheitsgraden folgt, so daß der Test nach den Angaben aus Tabelle I.7 ausgeführt werden kann.

**Aufgabe 8.4:**  $\chi^2$ -Test über die Güte einer Anpassung

- (a) Bestimmen Sie Mittelwert
- $\tilde{a}$
- und Varianz
- $\tilde{\sigma}^2$
- für das Histogramm aus Bild 6.1b, d. h.

$x_k$	193	195	197	199	201	203	205	207	209	211
$n_k$	1	2	9	12	23	25	11	9	6	2

Benutzen Sie das Ergebnis aus Beispiel 7.8 zur Konstruktion der Schätzungen. Geben Sie die Schätzungen explizit als Funktionen von  $n_k$  und  $x_k$  an.

- (b) Führen Sie (zu einem Signifikanzniveau von  $\alpha = 10\%$ ) einen  $\chi^2$ -Test über die Güte der Anpassung einer Normalverteilung mit dem Mittelwert  $\tilde{a}$  und der Varianz  $\tilde{\sigma}^2$  an das Histogramm aus. Benutzen Sie nur die Intervalle des Histogramms, für die  $np_k \geq 4$ . Bestimmen Sie  $p_k$  aus der Differenz zweier Einträge in die Tafel I.2. Geben Sie eine Formel für  $p_k$  als Funktion von  $x_k$ ,  $\Delta x$ ,  $\tilde{a}$ ,  $\tilde{\sigma}^2$  und  $\psi_0$  an. Legen Sie zur Berechnung von  $\chi^2$  eine Tabelle an, die Spalten für  $x_k$ ,  $n_k$ ,  $np_k$  und  $(n_k - np_k)^2 / np_k$  enthält.

**Aufgabe 8.5:** Kontingenztafel

- (a) In einem Experiment der Immunologie (entnommen aus SOKAL und ROHLF, Biometry (Freeman, San Francisco, 1969)) wird die Auswirkung eines Antiserums auf eine bestimmte Bakterienart untersucht. 57 Mäuse erhielten eine bestimmte Dosis Bakterien und Antiserum, weitere 54 Mäuse erhielten nur Bakterien. Nach einiger Zeit wurden die toten bzw. überlebenden Mäuse beider Gruppen gezählt und in der folgenden Kontingenztafel aufgeführt.

	Tot	Lebendig	Summe
Bakterien und Antiserum	13	44	57
nur Bakterien	25	29	54
Summe	38	73	Gesamt 111

Testen Sie (zu einem Signifikanzniveau von  $\alpha = 10\%$ ) die Hypothese, daß das Antiserum keinen Einfluß auf die Überlebenswahrscheinlichkeit hat.

- (b) Bei der Berechnung von  $\chi^2$  in (a) werden Sie festgestellt haben, daß die Zähler in (8.8.1) sämtlich den gleichen Wert haben. Zeigen Sie, daß allgemein für  $2 \times 2$  Kontingenztafeln gilt

$$n_{ij} - n\tilde{p}_i\tilde{q}_j = (-1)^{i+j} \frac{1}{n} (n_{11}n_{22} - n_{12}n_{21}).$$

## G.2 Hinweise und Lösungen

### Aufgabe 2.1

(a)  $N = 365^n$ .

(b)  $N' = 365 \cdot 364 \cdot \dots \cdot (365 - n + 1)$ .

(c) 
$$P_{\text{diff}} = N'/N = \frac{364}{365} \cdot \dots \cdot \frac{365 - n + 1}{365}$$

$$= \left(1 - \frac{1}{365}\right) \left(1 - \frac{2}{365}\right) \dots \left(1 - \frac{n-1}{365}\right).$$

(d)  $P = 1 - P_{\text{diff}}$ .

Nach Einsetzen der Zahlen enthält man  $P \approx 0.5$  für  $n = 23$  und  $P \approx 0.99$  für  $n = 57$ .

### Aufgabe 2.2

$$P(A + B) = P(A) + P(B) - P(AB),$$

$$\begin{aligned} P(\text{As oder Karo}) &= P(\text{As}) + P(\text{Karo}) - P(\text{As + Karo}) \\ &= \frac{4}{52} + \frac{13}{52} - \frac{1}{52} = \frac{4}{13}. \end{aligned}$$

### Aufgabe 2.3

(a)  $P(A) = \frac{4}{52}$ ,  $P(B) = \frac{13}{52}$ ,  $P(AB) = \frac{1}{52}$ , d. h.  $P(AB) = P(A)P(B)$ .

(b)  $P(A) = \frac{4}{53}$ ,  $P(B) = \frac{13}{53}$ ,  $P(AB) = \frac{1}{53}$ , d. h.  $P(AB) \neq P(A)P(B)$ .

### Aufgabe 2.4

$$P(\overline{AB}) = 1 - P(A + B) = 1 - P(A) - P(B) + P(AB).$$

Falls  $A$  und  $B$  unabhängig, gilt  $P(AB) = P(A)P(B)$ , deshalb

$$\begin{aligned} P(\overline{AB}) &= 1 - P(A) - P(B) + P(A)P(B) = (1 - P(A))(1 - P(B)) \\ &= P(\bar{A})P(\bar{B}). \end{aligned}$$

**Aufgabe 2.5**

- (a)  $P(A) = 0.2, P(B) = 0.3, P(C) = 0.5,$   
 $P(AB) = 2 \cdot 0.2 \cdot 0.3, P(AC) = 2 \cdot 0.2 \cdot 0.5,$   
 $P(BC) = 2 \cdot 0.3 \cdot 0.5, P(AA) = 0.2^2, P(BB) = 0.3^2,$   
 $P(CC) = 0.5^2.$
- (b)  $P(A) = 2/10 = 0.2, P(B) = 3/10 = 0.3, P(C) = 5/10 = 0.5,$   
 $P(AB) = \frac{2}{10} \cdot \frac{3}{9} + \frac{3}{10} \cdot \frac{2}{9}, P(AC) = \frac{2}{10} \cdot \frac{5}{9} + \frac{5}{10} \cdot \frac{2}{9},$   
 $P(BC) = \frac{3}{10} \cdot \frac{5}{9} + \frac{5}{10} \cdot \frac{3}{9},$   
 $P(AA) = \frac{2}{10} \cdot \frac{1}{9}, P(BB) = \frac{3}{10} \cdot \frac{2}{9}, P(CC) = \frac{5}{10} \cdot \frac{4}{9}.$

Es gilt für (a) und (b):

$$\begin{aligned} P(2 \text{ gleiche Münzen}) &= P(AA) + P(BB) + P(CC), \\ P(2 \text{ verschiedene Münzen}) &= P(AB) + P(AC) + P(BC) \\ &= 1 - P(2 \text{ gleiche Münzen}). \end{aligned}$$

**Aufgabe 3.1**

- (a)
- $$\begin{aligned} \hat{x} &= \sum_{i=1}^6 x_i p_i = \frac{1}{6} \sum_{i=1}^6 i = \frac{21}{6} = 3.5, \\ \sigma^2(x) &= \sum_{i=1}^6 (x_i - \hat{x})^2 p_i \\ &= \frac{1}{6} (2.5^2 + 1.5^2 + 0.5^2 + 0.5^2 + 1.5^2 + 2.5^2) \\ &= \frac{2}{6} (6.25 + 2.25 + 0.25) = 2.92, \\ \mu_3 &= \sum_{i=1}^6 (x_i - \hat{x})^3 p_i = \frac{1}{6} \sum_{i=1}^6 (i - 3.5)^3 = 0, \\ \gamma &= \mu_3 / \sigma^3 = 0. \end{aligned}$$
- (b)
- $$\begin{aligned} \hat{x} &= \frac{1}{12} (2 + 2 + 3 + 8 + 15 + 18) = 4, \\ \sigma^2(x) &= \frac{1}{12} (2 \cdot 3^2 + 1 \cdot 2^2 + 1 \cdot 1^2 + 3 \cdot 1^2 + 3 \cdot 2^2) = \frac{38}{12} = 3.167, \\ \mu_3 &= \frac{1}{12} (-2 \cdot 3^3 - 1 \cdot 2^3 - 1 \cdot 1^3 + 3 \cdot 1^3 + 3 \cdot 2^3) = -3 \\ \gamma &= \mu_3 / \sigma^3 = -3 / 3.167^{3/2} = -0.533. \end{aligned}$$

**Aufgabe 3.2**

Für  $a = -b$ :  $\hat{x} = 0$ ,  $x_{0.5} = 0$ ,  $\sigma^2(x) = \frac{b^2}{6}$ .

Für  $a = -2b$ :  $\hat{x} = -\frac{b}{3} = -0.33b$ ,  $x_{0.5} = b(\sqrt{3} - 2) = -0.27b$ ,  $\sigma^2(x) = \frac{7}{18}b^2$ .

**Aufgabe 3.3**

$$g(y) = \exp\left(-\frac{y^2}{2}\right), \quad y(x) = \frac{x}{\sigma}; \quad f(x) = \frac{dy(x)}{dx} g(y(x)) = \frac{1}{\sigma} \exp\left(-\frac{x^2}{2\sigma^2}\right).$$

**Aufgabe 3.4**

$$(a) \quad f_x(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_x} \exp\left(-\frac{1}{2} \frac{x^2}{\sigma_x^2}\right), \quad f_y(y) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_y} \exp\left(-\frac{1}{2} \frac{y^2}{\sigma_y^2}\right).$$

(b) Ja, da (3.4.6) erfüllt ist.

(c) Die Transformation kann in der Form

$$\begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} = R \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}, \quad R = \begin{pmatrix} \cos\phi & \sin\phi \\ -\sin\phi & \cos\phi \end{pmatrix}$$

geschrieben werden. Sie ist orthogonal, da  $R^T R = I$ . Deshalb

$$\begin{aligned} g(u, v) &= f(x, y) = \frac{1}{2\pi\sigma_x\sigma_y} \exp\left(-\frac{x^2}{2\sigma_x^2} - \frac{y^2}{2\sigma_y^2}\right) \\ &= \frac{1}{2\pi\sigma_x\sigma_y} \exp\left(-\frac{(u\cos\phi - v\sin\phi)^2}{2\sigma_x^2} - \frac{(u\sin\phi + v\cos\phi)^2}{2\sigma_y^2}\right) \\ &= \frac{1}{2\pi\sigma_x\sigma_y} \exp\left(-\frac{u^2\cos^2\phi + v^2\sin^2\phi - 2uv\cos\phi\sin\phi}{2\sigma_x^2} \right. \\ &\quad \left. - \frac{u^2\sin^2\phi + v^2\cos^2\phi + 2uv\cos\phi\sin\phi}{2\sigma_y^2}\right). \end{aligned}$$

(d) Für  $\phi = 90^\circ$ :  $\cos\phi = 0$ ,  $\sin\phi = 1$  usw. Der Ausdruck  $g(u, v)$  faktorisiert, d. h.  $g(u, v) = g_u(u)g_v(v)$ .

Für  $\sigma_x = \sigma_y = \sigma$ :

$$g(u, v) = \frac{1}{2\pi\sigma^2} \exp\left(-\frac{u^2 + v^2}{2\sigma^2}\right) = g(u)g(v).$$

(e)

$$J = \begin{vmatrix} \frac{\partial x}{\partial r} & \frac{\partial y}{\partial r} \\ \frac{\partial x}{\partial \phi} & \frac{\partial y}{\partial \phi} \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} \cos \phi & \sin \phi \\ -r \sin \phi & r \cos \phi \end{vmatrix} = r,$$

$$g(r, \phi) = rf(x, y) = \frac{r}{2\pi\sigma^2} \exp\left(-\frac{x^2 + y^2}{2\sigma^2}\right) = \frac{r}{2\pi\sigma^2} \exp\left(-\frac{r^2}{2\sigma^2}\right);$$

$$g_r(r) = \int_0^{2\pi} g(r, \phi) d\phi = \frac{r}{\sigma^2} \exp\left(-\frac{r^2}{2\sigma^2}\right),$$

$$\begin{aligned} g_\phi(\phi) &= \frac{1}{2\pi\sigma^2} \int_0^\infty r \exp\left(-\frac{r^2}{2\sigma^2}\right) dr = \frac{1}{4\pi\sigma^2} \int_0^\infty \exp\left(-\frac{u}{2\sigma^2}\right) du \\ &= -\frac{1}{2\pi} \left[ \exp\left(-\frac{u}{2\sigma^2}\right) \right]_0^\infty = \frac{1}{2\pi}; \end{aligned}$$

$$g(r, \phi) = g_r(r)g_\phi(\phi), \text{ deshalb sind } r \text{ und } \phi \text{ unabhängig.}$$

**Aufgabe 3.5**

$$\begin{aligned} g &= 4\pi^2 \frac{\ell}{T^2} = 4\pi^2 \frac{99.8}{2.03^2} \text{ cm s}^{-2} = 956.09 \text{ cm s}^{-2}, \\ \frac{\partial g}{\partial \ell} &= \frac{4\pi^2}{T^2} = 9.58 \text{ s}^{-2}, \quad \frac{\partial g}{\partial T} = -\frac{8\pi^2 \ell}{T^3} = -942 \text{ cm s}^{-3}, \\ (\Delta g)^2 &= \left(\frac{\partial g}{\partial \ell}\right)^2 (\Delta \ell)^2 + \left(\frac{\partial g}{\partial T}\right)^2 \Delta T^2 = 2226 \text{ cm}^2 \text{ s}^{-4}, \\ \Delta g &= 47.19 \text{ cm s}^{-2}. \end{aligned}$$

**Aufgabe 3.6**(a)  $y = Tx$ ,

$$\begin{aligned} T &= \begin{pmatrix} \frac{\partial y_1}{\partial x_1} & \frac{\partial y_1}{\partial x_2} \\ \frac{\partial y_2}{\partial x_1} & \frac{\partial y_2}{\partial x_2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\partial p}{\partial m} & \frac{\partial p}{\partial v} \\ \frac{\partial E}{\partial m} & \frac{\partial E}{\partial v} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} v & m \\ \frac{1}{2}v^2 & mv \end{pmatrix}, \\ C_y &= TC_x T^T = \\ &= \begin{pmatrix} v & m \\ \frac{1}{2}v^2 & mv \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a^2 m^2 & 0 \\ 0 & b^2 v^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} v & \frac{1}{2}v^2 \\ m & mv \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} (a^2 + b^2)m^2 v^2 & (\frac{1}{2}a^2 + b^2)m^2 v^3 \\ (\frac{1}{2}a^2 + b^2)m^2 v^3 & (\frac{1}{4}a^2 + b^2)m^2 v^4 \end{pmatrix}, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\rho(p, E) &= \frac{\text{cov}(p, E)}{\sigma(p)\sigma(E)} = \frac{(\frac{1}{2}a^2 + b^2)m^2v^3}{\sqrt{(a^2 + b^2)m^2v^2}\sqrt{(\frac{1}{4}a^2 + b^2)m^2v^4}} \\ &= \frac{\frac{1}{2}a^2 + b^2}{\sqrt{(a^2 + b^2)(\frac{1}{4}a^2 + b^2)}}.\end{aligned}$$

Für  $a = 0$  oder  $b = 0$ :  $\rho = 1$ . (In diesem Fall ist entweder  $m$  oder  $v$  vollständig bestimmt; damit gibt es eine strenge Beziehung zwischen  $E$  und  $p$ ). Falls jedoch  $a, b \neq 0$ , hat man  $\rho \neq 1$ , z. B. für  $a = b$  erhält man  $\rho = 3/\sqrt{10}$

(b)  $m = \frac{1}{2}p^2/E$ ,  $v = E/2p$ ,

$$\begin{aligned}C_y &= \begin{pmatrix} (a^2 + b^2)p^2 & (a^2 + 2b^2)Ep \\ (a^2 + 2b^2)Ep & (a^2 + 4b^2)E^2 \end{pmatrix}, \\ m &= Ty, \\ T &= \left( \frac{\partial m}{\partial y_1}, \frac{\partial m}{\partial y_2} \right) = \left( \frac{\partial m}{\partial p}, \frac{\partial m}{\partial E} \right) = \left( \frac{p}{E}, -\frac{p^2}{2E^2} \right), \\ C_m &= \sigma^2(m) = T C_y T^T \\ &= \left( \frac{p}{E}, -\frac{p^2}{2E^2} \right) \begin{pmatrix} (a^2 + b^2)p^2 & (a^2 + 2b^2)Ep \\ (a^2 + 2b^2)Ep & (a^2 + 4b^2)E^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{p}{E} \\ -\frac{p^2}{2E^2} \end{pmatrix} \\ &= a^2 \frac{p^4}{4E^2} = a^2 m^2.\end{aligned}$$

### Aufgabe 5.1

$$\begin{aligned}\text{(a)} \quad W_{k+1}^n &= \binom{n}{k+1} p^{k+1} q^{n-k-1} = \frac{n!}{(k+1)!(n-k-1)!} p^k q^{n-k} \frac{p}{q} \\ &= \frac{n!}{k!(n-k)!} \frac{n-k}{k+1} p^k q^{n-k} \frac{p}{q} = W_k^n \frac{n-k}{k+1} \frac{p}{q}.\end{aligned}$$

$$\text{(b)} \quad W_3^5 = \binom{5}{3} 0.8^3 \cdot 0.2^2 = 10 \cdot 0.512 \cdot 0.04 = 0.2048,$$

$$W_4^5 = W_3^5 \cdot \frac{2}{4} \cdot \frac{0.8}{0.2} = 0.2048 \cdot 2 = 0.4096,$$

$$W_5^5 = W_4^5 \cdot \frac{1}{5} \cdot \frac{0.8}{0.2} = 0.4096 \cdot 0.8 = 0.32768,$$

$$P_3 = 1 - W_4^5 - W_5^5 = 0.26272,$$

$$P_2 = P_3 - W_3^5 = 0.05792.$$

(c) Unter Benutzung des Ergebnisses (a) erhalten wir

$$W_k^n - W_{k-1}^n = W_{k-1}^n \left( \frac{n-k+1}{k} \frac{p}{q} - 1 \right),$$

d. h. die Wahrscheinlichkeit  $W_k^n$  steigt, so lange der Klammerausdruck positiv ist,  
d. h.

$$\frac{(n-k+1)p}{kq} - 1 > 0.$$

Da  $k$  und  $q$  positiv sind, haben wir

$$(n-k+1)p > kq = k(1-p), \quad k < (n+1)p.$$

Der wahrscheinlichste Wert  $k_m$  ist der größte Wert von  $k$ , für den diese Ungleichung gilt.

$$(d) \quad \varphi_{x_i}(t) = E\{e^{itx_i}\} = qe^{it \cdot 0} + pe^{it} = q + pe^{it};$$

$$\begin{aligned} \varphi_x &= (q + pe^{it})^n = \sum_{k=0}^n \binom{n}{k} q^{n-k} p^k e^{itk} = \sum_{k=0}^n f(k) e^{itk} = E\{e^{itk}\}, \\ f(k) &= W_k^n. \end{aligned}$$

### Aufgabe 5.2

Für  $\lambda = 3$  ist  $f(0) = \frac{\lambda^0}{0!} e^{-\lambda} = e^{-\lambda} = 0.0498 \approx 0.05 = 5\%$ .

### Aufgabe 5.3

(a) Es wird der Bruchteil

$$f_r = 2\psi_0\left(\frac{(R_0 - a_2 R_0) - R_0}{b R_0}\right) = 2\psi_0\left(-\frac{a_2}{b}\right)$$

verworfen, da  $R < R_0 - \Delta_2$  oder  $R > R_0 + \Delta_2$ . Entsprechend erzielen die Bruchteile

$$f_2 = 2\psi_0\left(-\frac{a_1}{b}\right) - f_r \quad \text{und} \quad f_5 = 1 - f_2 - f_r$$

die Preise  $2C$  bzw.  $5C$ . Deshalb

$$\begin{aligned} P &= 2f_2C + 5f_5C - C = C\{2f_2 + 5 - 5f_2 - 5f_r - 1\} = C\{4 - 3f_2 - 5f_r\} \\ &= C\left\{4 - 6\psi_0\left(-\frac{a_1}{b}\right) + 3f_r - 5f_r\right\} \\ &= C\left\{4 - 6\psi_0\left(-\frac{a_1}{b}\right) - 4\psi_0\left(-\frac{a_2}{b}\right)\right\}. \end{aligned}$$

$$(b) \quad \psi_0(-0.2) = 0.421; \quad \psi_0(-1) = 0.159,$$

$$d. h. \quad P = C\{4 - 2.526 - 0.636\} = 0.838C.$$

$$(c) \quad \frac{d^2 f}{dx^2} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}b^3} \exp(-(x-a)^2/2b^2) \{(x-a)^2/b^2 - 1\} = 0$$

ist erfüllt, falls der letzte Klammerausdruck verschwindet.



**Aufgabe 5.4**

$$\begin{aligned} \text{(a)} \quad P(R) &= \int_0^R g(r) dr = \frac{1}{\sigma^2} \int_0^R r e^{-r^2/2\sigma^2} dr = \frac{1}{2\sigma^2} \int_0^{R^2} e^{-u/2\sigma^2} du \\ &= \left[ e^{-u/2\sigma^2} \right]_{R^2}^0 = 1 - e^{-R^2/2\sigma^2}. \end{aligned}$$

$$\text{(b)} \quad 1 - P = \exp(-R^2/2\sigma^2), \quad R^2/2\sigma^2 = -\ln(1 - P).$$

Für  $\sigma = 1$ ,  $P = 0.9$  erhält man

$$R = \sqrt{-2 \ln 0.1} = \sqrt{4.61} = 2.15.$$

**Aufgabe 5.5**

$$\text{(a)} \quad 0 \leq u < 1:$$

$$f(u) = \int_{u-1}^u f_1(y) dy = \int_0^u y dy = \frac{1}{2} u^2.$$

$$1 \leq u < 2:$$

$$\begin{aligned} f(u) &= \int_{u-1}^u f_1(y) dy + \int_{u-1}^u f_2(y) dy = \int_{u-1}^1 y dy + \int_1^u (2-y) dy \\ &= \frac{1}{2}(1-(u-1)^2) + \frac{1}{2}(1-(2-u)^2) = \frac{1}{2}(-3+6u-2u^2). \end{aligned}$$

$$2 \leq u < 3:$$

$$f(u) = \int_{u-1}^u f_2(y) dy = \int_{u-1}^2 (2-y) dy = - \int_{3-u}^0 z dz = \frac{1}{2}(3-u)^2.$$

$$\text{(b)} \quad f(u) = \frac{1}{2\pi\sigma_x\sigma_y} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-\frac{x^2}{2\sigma_x^2} - \frac{(u-x)^2}{2\sigma_y^2}\right) dx.$$

Quadratische Ergänzung liefert für den Exponenten

$$-\frac{\sigma^2}{2\sigma_x^2\sigma_y^2} \left\{ \left( x - \frac{\sigma_x^2}{\sigma^2} u \right)^2 - \frac{\sigma_x^4}{\sigma^4} u^2 + \frac{\sigma_x^2}{\sigma^2} u^2 \right\}.$$

Mit  $v = (\sigma/\sigma_x\sigma_y)(x - \sigma_x^2 u/\sigma^2)$  als Integrationsvariable erhalten wir

$$\begin{aligned} f(u) &= \frac{1}{2\pi\sigma_x\sigma_y} \exp\left(\frac{\sigma_x^4 - \sigma^2\sigma_x^2}{2\sigma^2\sigma_x^2\sigma_y^2} u^2\right) \frac{\sigma_x\sigma_y}{\sigma} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-\frac{1}{2}v^2\right) dv \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \exp\left(-\frac{u^2}{2\sigma^2}\right), \end{aligned}$$

weil  $\sigma_x^4 = \sigma_x^2(\sigma^2 - \sigma_y^2)$ .

**Aufgabe 6.1**

(a)  $E(\mathbf{S}) = E\{\sum a_i \mathbf{x}_i\} = \sum a_i E(\mathbf{x}_i) = \hat{x} \sum a_i = \hat{x}$   
dann und nur dann, wenn  
 $\sum a_i = 1$ .

(b)  $\sigma^2 = \sum \left( \frac{\partial \mathbf{S}}{\partial x_i} \right)^2 \sigma^2 = \sigma^2 \sum a_i^2$ ,  
 $\sigma^2(\mathbf{S}_1) = \sigma^2 \left( \frac{1}{16} + \frac{1}{16} + \frac{1}{4} \right) = \sigma^2 \cdot \frac{3}{8} = 0.375\sigma^2$ ,  
 $\sigma^2(\mathbf{S}_2) = \sigma^2 \left( \frac{1}{25} + \frac{4}{25} + \frac{4}{25} \right) = \sigma^2 \cdot \frac{9}{25} = 0.360\sigma^2$ ,  
 $\sigma^2(\mathbf{S}_3) = \sigma^2 \left( \frac{1}{36} + \frac{1}{9} + \frac{1}{4} \right) = \sigma^2 \cdot \frac{7}{18} = 0.389\sigma^2$ .

(c)  $\sigma^2(\mathbf{S}) = [a_1^2 + a_2^2 + (1 - (a_1 + a_2))^2] \sigma^2$ ,  
 $\frac{\partial \sigma^2(\mathbf{S})}{\partial a_1} = [2a_1 - 2(1 - (a_1 + a_2))] \sigma^2 = 0$ ,  
 $\frac{\partial \sigma^2(\mathbf{S})}{\partial a_2} = [2a_2 - 2(1 - (a_1 + a_2))] \sigma^2 = 0$ .  
 $a_1 = 1 - (a_1 + a_2)$ ,  
 $a_2 = 1 - (a_1 + a_2)$ ,  $a_1 = a_2 = \frac{1}{3}$ ;  
 $\sigma^2(\mathbf{S}) = \frac{1}{3}\sigma^2 = 0.333\sigma^2$ .

**Aufgabe 6.2**

$a = 20$ ,  
 $\Delta = \frac{1}{n} \sum \delta_i$   
 $= \frac{1}{10}(-2 + 1 + 3 - 1 + 0 + 1 + 0 - 1 + 0 - 3) = -0.2$ .  
 $\bar{x} = 19.8$ .  
 $s = \frac{1}{9}(1.8^2 + 1.2^2 + 3.2^2 + 0.8^2 + 0.2^2 + 1.2^2 + 0.2^2 + 0.8^2 + 0.2^2 + 2.8^2)$   
 $= \frac{1}{9} \cdot 25.60 = 2.84$ .  
 $s_x^2 = 0.284$ . Deshalb  $\bar{x} = 19.8 \pm 0.53$ .

**Aufgabe 6.3**

$$(a) \quad \bar{x}_1 = 0.2, \bar{x}_2 = 0.5, \bar{x}_3 = 0.7,$$

$$\tilde{x} = 0.02 + 0.35 + 0.14 = 0.51,$$

$$s_1^2 = \frac{1}{9}(2 - 10 \cdot 0.2^2) = 0.178,$$

$$s_2^2 = \frac{1}{9}(5 - 10 \cdot 0.5^2) = 0.278,$$

$$s_3^2 = \frac{1}{9}(7 - 10 \cdot 0.7^2) = 0.233,$$

$$s_{\tilde{x}}^2 = \frac{0.1^2}{10} \cdot 0.178 + \frac{0.7^2}{10} \cdot 0.278 + \frac{0.2^2}{10} \cdot 0.233$$

$$= 0.001 \cdot 0.178 + 0.049 \cdot 0.278 + 0.004 \cdot 0.233 = 0.0147,$$

$$s_{\tilde{x}} = \sqrt{s_{\tilde{x}}^2} = 0.12.$$

Das Ergebnis  $\tilde{x} = 0.51 \pm 0.12$  spricht daher nicht signifikant zugunsten einer Partei.

$$(b) \quad s_1 = 0.422, s_2 = 0.527, s_3 = 0.483,$$

$$p_1 s_1 = 0.0422, p_2 s_2 = 0.369, p_3 s_3 = 0.0966.$$

$$\sum p_i s_i = 0.508,$$

$$\frac{n_1}{n} = 0.083, \frac{n_2}{n} = 0.726, \frac{n_3}{n} = 0.190.$$

**Aufgabe 6.4**

(a) Aus Bequemlichkeitsgründen schreiben wir  $\chi^2 = u$

$$\mu_3 = E\{(u - \hat{u})^3\} = E\{u^3 - 3u^2\hat{u} + 3u\hat{u}^2 - \hat{u}^3\}$$

$$= E(u^3) - 3\hat{u}E(u^2) + 3\hat{u}^2E(u) - \hat{u}^3$$

$$= \lambda_3 - 3\hat{u}E(u^2) + 2\hat{u}^3,$$

$$E(u^3) = \lambda_3 = \frac{1}{i^3} \varphi'''(0)$$

$$= i\varphi'''(0) = i(-\lambda)(-\lambda-1)(-\lambda-2)(-2i)^3$$

$$= 8\lambda(\lambda+1)(\lambda+2) = 8\lambda^3 + 24\lambda^2 + 16\lambda,$$

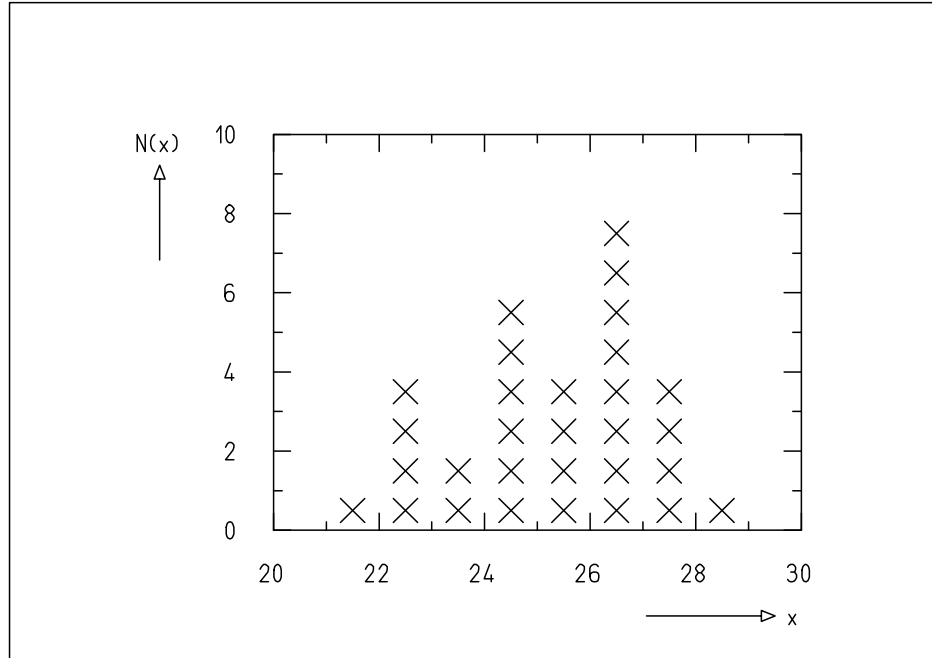
$$3\hat{u}E(u^2) = 6\lambda(4\lambda^2 + 4\lambda) = 24\lambda^3 + 24\lambda^2,$$

$$2\hat{u}^3 = 2 \cdot (2\lambda)^3 = 16\lambda^3,$$

$$\mu_3 = 16\lambda,$$

$$\gamma = \mu_3/\sigma^3 = 16\lambda/8\lambda^{\frac{3}{2}} = 2\lambda^{-\frac{1}{2}}.$$

(b) Offenbar gilt  $\gamma = 2/\sqrt{\lambda} \rightarrow 0$  für  $\lambda = \frac{1}{2}n \rightarrow \infty$ .

**Aufgabe 6.5****Bild G.2:** Histogramm der Daten aus Aufgabe 6.5.**Aufgabe 7.1**

(a)  $L = \prod_{j=1}^N \frac{1}{b} = \frac{1}{b^N}$ ; offenbar ist  $L = \max$  für  $b = x_{\max}$ .

(b)  $\lambda_1 = a, \lambda_2 = \Gamma,$

$$L = \prod_{j=1}^N \frac{2}{\pi \lambda_2} \frac{\lambda_2^2}{4(\mathbf{x}^{(j)} - \lambda_1)^2 + \lambda_2^2}$$

$$= \left( \frac{2\lambda_2}{\pi} \right)^N \prod_{j=1}^N \frac{1}{4(\mathbf{x}^{(j)} - \lambda_1)^2 + \lambda_2^2},$$

$$\ell = N(\ln 2 - \ln \pi + \ln \lambda_2) - \sum_{j=1}^N \ln[4(\mathbf{x}^{(j)} - \lambda_1)^2 + \lambda_2^2],$$

$$\frac{\partial \ell}{\partial \lambda_1} = \sum_{j=1}^N \frac{8(\mathbf{x}^{(j)} - \lambda_1)}{4(\mathbf{x}^{(j)} - \lambda_1)^2 + \lambda_2^2} = 0,$$

$$\frac{\partial \ell}{\partial \lambda_2} = \frac{N}{\lambda_2} - 2\lambda_2 \sum_{j=1}^N \frac{1}{4(\mathbf{x}^{(j)} - \lambda_1)^2 + \lambda_2^2} = 0.$$

Es gibt nicht notwendig eine eindeutige Lösung, da die Gleichungen nichtlinear in  $\lambda_1$  und  $\lambda_2$  sind. Für  $|\mathbf{x}^{(j)} - \lambda_1| \ll \lambda_2$  können wir jedoch schreiben

$$\frac{8}{\lambda_2^2} \sum_{j=1}^N (\mathbf{x}^{(j)} - \lambda_1) = 0, \quad N\lambda_1 = \sum_{j=1}^N \mathbf{x}^{(j)}, \quad \lambda_1 = a = \bar{\mathbf{x}}.$$

### Aufgabe 7.2

(a)

$$\begin{aligned} L &= \prod_{j=1}^N \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \exp[-(\mathbf{x}^{(j)} - \lambda)^2 / 2\sigma^2] \\ &= (\sqrt{2\pi}\sigma)^{-N} \prod_{j=1}^N \exp[-(\mathbf{x}^{(j)} - \lambda)^2 / 2\sigma^2], \\ \ell &= -N \ln(\sqrt{2\pi}\sigma) - \frac{1}{2\sigma^2} \sum_{j=1}^N (\mathbf{x}^{(j)} - \lambda)^2, \\ \ell' &= \frac{1}{\sigma^2} \sum_{j=1}^N (\mathbf{x}^{(j)} - \lambda), \\ \ell'' &= -N/\sigma^2, \\ I(\lambda) &= -E(\ell'') = N/\sigma^2. \end{aligned}$$

(b)

$$\begin{aligned} L &= \prod_{j=1}^N \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sqrt{\lambda}} \exp\left(-\frac{(\mathbf{x}^{(j)} - a)^2}{2\lambda}\right) \\ &= (2\pi)^{-N/2} \lambda^{-N/2} \prod_{j=1}^N \exp\left(-\frac{(\mathbf{x}^{(j)} - a)^2}{2\lambda}\right), \\ \ell &= -\frac{N}{2} \ln(2\pi) - \frac{N}{2} \ln \lambda - \frac{1}{2\lambda} \sum_{j=1}^N (\mathbf{x}^{(j)} - a)^2, \\ \ell' &= -\frac{N}{2\lambda} + \frac{1}{2\lambda^2} \sum_{j=1}^N (\mathbf{x}^{(j)} - a)^2, \\ \ell'' &= \frac{N}{2\lambda^2} - \frac{1}{\lambda^3} \sum_{j=1}^N (\mathbf{x}^{(j)} - a)^2, \\ I(\lambda) &= -E(\ell'') = -\frac{N}{2\lambda^2} + \frac{1}{\lambda^3} E\left\{\sum_{j=1}^N (\mathbf{x}^{(j)} - a)^2\right\} \\ &= -\frac{N}{2\lambda^2} + \frac{1}{\lambda^3} N\lambda, \\ I(\lambda) &= \frac{1}{2\lambda^2} (-N + 2N) = \frac{N}{2\lambda^2}, \end{aligned}$$

$$E(\mathbf{S}) = \frac{1}{N} E \left\{ \sum_{j=1}^N (\mathbf{x}^{(j)} - a)^2 \right\} = \sigma^2 = \lambda .$$

**Aufgabe 7.3**

$$(a) \sigma^2(\mathbf{S}) \geq \frac{1}{I(\lambda)} = \frac{\sigma^2}{N} ,$$

In Aufgabe 6.1 (c) hatten wir  $\sigma^2(\bar{\mathbf{x}}) = 1/3\sigma^2$  für  $N = 3$ .

$$(b) \sigma^2(\mathbf{S}) \geq \frac{1}{I(\lambda)} = \frac{2\lambda^2}{N} .$$

(c) Aus Aufgabe 7.2 übernehmen wir

$$\ell' = -\frac{N}{2\lambda} + \frac{1}{2\lambda^2} N\mathbf{S} = \frac{N}{2\lambda^2} (\mathbf{S} - \lambda) = \frac{N}{2\lambda^2} (\mathbf{S} - E(\mathbf{S})) .$$

$$\text{Damit ist } \sigma^2(\mathbf{S}) = \frac{2\lambda^2}{N} .$$

**Aufgabe 8.1**

$$\begin{aligned} \bar{\mathbf{x}}_1 &= 21.11 , \quad \bar{\mathbf{x}}_2 = 21.00 , \\ \mathbf{s}_1^2 &= 14.86 , \quad \mathbf{s}_2^2 = 10.00 , \\ T &= \mathbf{s}_1^2/\mathbf{s}_2^2 = 1.486 , \quad F_{0.95}(8,6) = 4.15 . \end{aligned}$$

Die Varianz der Stichprobe (2) ist nicht signifikant kleiner.

**Aufgabe 8.2**

$$\begin{aligned} \bar{\mathbf{x}} &= 25.142 , \quad \mathbf{s}^2 = 82.69/29 = 2.85 , \quad \mathbf{s} = 1.69 , \\ T &= \frac{\bar{\mathbf{x}} - 25.5}{\mathbf{s}/\sqrt{30}} = \frac{25.142 - 25.5}{1.69/5.48} = -\frac{0.358}{0.309} = -1.16 , \\ |T| &< t_{0.95}(f = 29) = 1.70 . \end{aligned}$$

Daher kann die Hypothese nicht ausgeschlossen werden.

**Aufgabe 8.3**

$$\begin{aligned} (a) \quad f(\mathbf{x}^{(1)}, \mathbf{x}^{(2)}, \dots, \mathbf{x}^{(N)}, \tilde{\boldsymbol{\lambda}}^{(\Omega)}) &= \prod_{j=1}^N \frac{1}{\sqrt{2\pi} \mathbf{s}'} \exp \left( -\frac{(\mathbf{x}^{(j)} - \bar{\mathbf{x}})^2}{2\mathbf{s}^2} \right) \\ &= (\sqrt{2\pi} \mathbf{s}')^{-N} \exp \left( -\frac{1}{2\mathbf{s}^2} \sum_{j=1}^N (\mathbf{x}^{(j)} - \bar{\mathbf{x}})^2 \right) , \\ f(\mathbf{x}^{(1)}, \mathbf{x}^{(2)}, \dots, \mathbf{x}^{(N)}, \tilde{\boldsymbol{\lambda}}^{(\omega)}) &= (\sqrt{2\pi} \sigma_0)^{-N} \exp \left( -\frac{1}{2\sigma_0^2} \sum_{j=1}^N (\mathbf{x}^{(j)} - \bar{\mathbf{x}})^2 \right) , \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
T &= \left(\frac{\sigma_0}{\mathbf{s}'}\right)^N \exp\left[\frac{1}{2}N\mathbf{s}'^2\left(\frac{1}{\sigma_0^2} - \frac{1}{\mathbf{s}'^2}\right)\right], \\
\ln T &= N(\ln \sigma_0 - \ln \mathbf{s}') + \frac{1}{2}N\mathbf{s}'^2\left(\frac{1}{\sigma_0^2} - \frac{1}{\mathbf{s}'^2}\right) \\
&= N(\ln \sigma_0 - \ln \mathbf{s}') + \frac{1}{2}N\frac{\mathbf{s}'^2}{\sigma_0^2} - \frac{1}{2}N.
\end{aligned}$$

- (b)  $T' = N\mathbf{s}'^2/\sigma_0^2$  ist eine monoton steigende Funktion von  $\mathbf{s}'$ , falls  $\mathbf{s}' > \sigma_0$ , anderenfalls ist sie monoton fallend. Damit nimmt der Test folgende Form an

$$\begin{aligned}
T' &> T'_{1-\frac{1}{2}\alpha}, T' < T'_{\frac{1}{2}\alpha} && \text{falls } H_0(\mathbf{s}' = \sigma_0), \\
T' &> T'_{1-\alpha} && \text{falls } H_0(\mathbf{s}' < \sigma_0), \\
T' &< T'_{\alpha} && \text{falls } H_0(\mathbf{s}' > \sigma_0).
\end{aligned}$$

- (c) folgt aus (6.7.2) und  $\mathbf{s}'^2 = (N-1)\mathbf{s}^2/N$ .

#### Aufgabe 8.4

$$(a) \quad \tilde{a} = \frac{1}{n} \sum_k n_k \mathbf{x}_k = 202.36.$$

$$\tilde{\sigma}^2 = \frac{1}{n-1} \sum_k n_k (\mathbf{x}_k - \tilde{a})^2 = 13.40, \quad \tilde{\sigma} = 3.66.$$

$$(b) \quad p_k(\mathbf{x}_k) = \psi_0\left(\frac{\mathbf{x}_k + \frac{1}{2}\Delta x - \tilde{a}}{\tilde{\sigma}}\right) - \psi_0\left(\frac{\mathbf{x}_k - \frac{1}{2}\Delta x - \tilde{a}}{\tilde{\sigma}}\right) = \psi_{0+} - \psi_{0-}.$$

$\mathbf{x}_k$	$n_k$	$\psi_{0+}$	$\psi_{0-}$	$np_k$	$\frac{(n_k - np_k)^2}{np_k}$
193	1	0.011	0.002	(0.9)	—
195	2	0.041	0.011	(3.0)	—
197	9	0.117	0.041	7.6	0.271
199	12	0.260	0.117	14.3	0.362
201	23	0.461	0.260	20.1	0.411
203	25	0.673	0.463	21.2	0.679
205	11	0.840	0.673	16.7	1.948
207	9	0.938	0.840	9.8	0.071
209	6	0.982	0.938	4.3	0.647
211	2	0.996	0.982	(1.4)	—
					$X^2 = 4.389$

Die Anzahl der Freiheitsgrade ist  $7 - 2 = 5$ . Wegen  $\chi_{0.90}^2(5) = 9.24$  verläuft der Test nicht negativ.

**Aufgabe 8.5**

$$(a) \quad \tilde{p}_1 = \frac{1}{111}(13 + 44) = \frac{57}{111}, \quad \tilde{p}_2 = \frac{1}{111}(25 + 29) = \frac{54}{111},$$

$$\tilde{q}_1 = \frac{1}{111}(13 + 25) = \frac{38}{111}, \quad \tilde{q}_2 = \frac{1}{111}(44 + 29) = \frac{73}{111},$$

$$\begin{aligned} \chi^2 &= \frac{\left(13 - \frac{57 \cdot 38}{111}\right)^2}{\frac{57 \cdot 38}{111}} + \frac{\left(44 - \frac{57 \cdot 73}{111}\right)^2}{\frac{57 \cdot 73}{111}} \\ &\quad + \frac{\left(25 - \frac{54 \cdot 38}{111}\right)^2}{\frac{54 \cdot 38}{111}} + \frac{\left(29 - \frac{54 \cdot 73}{111}\right)^2}{\frac{54 \cdot 73}{111}} \\ &= \frac{42.43}{19.51} + \frac{42.43}{37.49} + \frac{42.43}{18.49} + \frac{42.43}{35.51} = 6.78. \end{aligned}$$

Weil  $\chi_{0.90}^2 = 2.71$  für  $f = 1$ , muß die Hypothese der Unabhängigkeit verworfen werden.

$$(b) \quad n_{ij} - \frac{1}{n}(n_{i1} + n_{i2})(n_{1j} + n_{2j})$$

$$= \frac{1}{n}[n_{ij}(n_{11} + n_{12} + n_{21} + n_{22}) - (n_{i1} + n_{i2})(n_{1j} + n_{2j})].$$

Man kann leicht zeigen, daß der Klammerausdruck für alle  $i, j$  die Form  $(-1)^{i+j}(n_{11}n_{22} - n_{12}n_{21})$  hat.

## G.3 Programmieraufgaben

**Programmiernaufgabe 4.1:** Programm zur Erzeugung

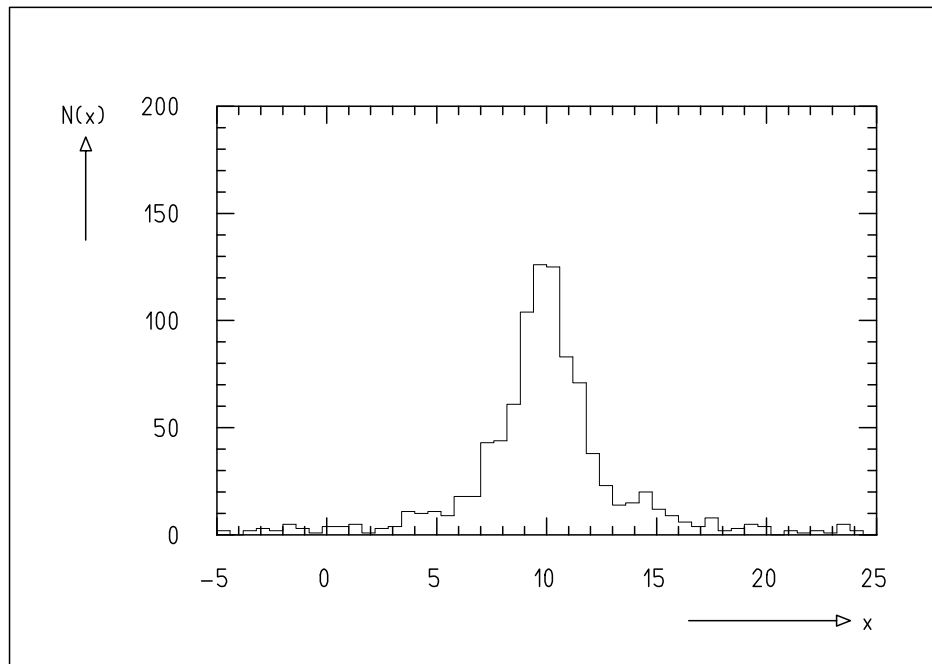
Breit–Wigner-verteilter Zufallszahlen

Schreiben Sie eine Methode mit der Deklaration

```
double[] breitWignerNumbers(double a, double gamma, int n).
```

Sie soll einen Bereich mit  $n$  Zufallszahlen liefern, die einer Breit–Wigner-Verteilung mit Mittelwert  $a$  und FWHM  $\Gamma$  entsprechen. Die Methode soll Teil einer Klasse sein, die die interaktive Eingabe der Größen  $n, a, \Gamma$  gestattet sowie die graphische Ausgabe der Zufallszahlen in Form eines Histogramms, Bild G.3. (Beispiellösung: S1Random)





**Bild G.3:** Histogramm von 1000 Zufallszahlen, die einer Breit-Wigner-Verteilung mit  $a = 10$  und  $\Gamma = 3$  folgen.

**Programmiernaufgabe 4.2:** Programm zur Erzeugung von Zufallszahlen mit Dreiecksverteilung

Schreiben Sie eine Methode mit der Deklaration

```
double[] triangularNumbersTrans(double a, double b, double c, int n).
```

Sie soll  $n$  Zufallszahlen liefern, die der Dreiecksverteilung mit den Kenngrößen  $a$ ,  $b$ ,  $c$  folgen und die nach dem Transformationsverfahren entsprechend Beispiel 4.3 generiert wurden.

Schreiben Sie eine zweite Methode mit der Deklaration

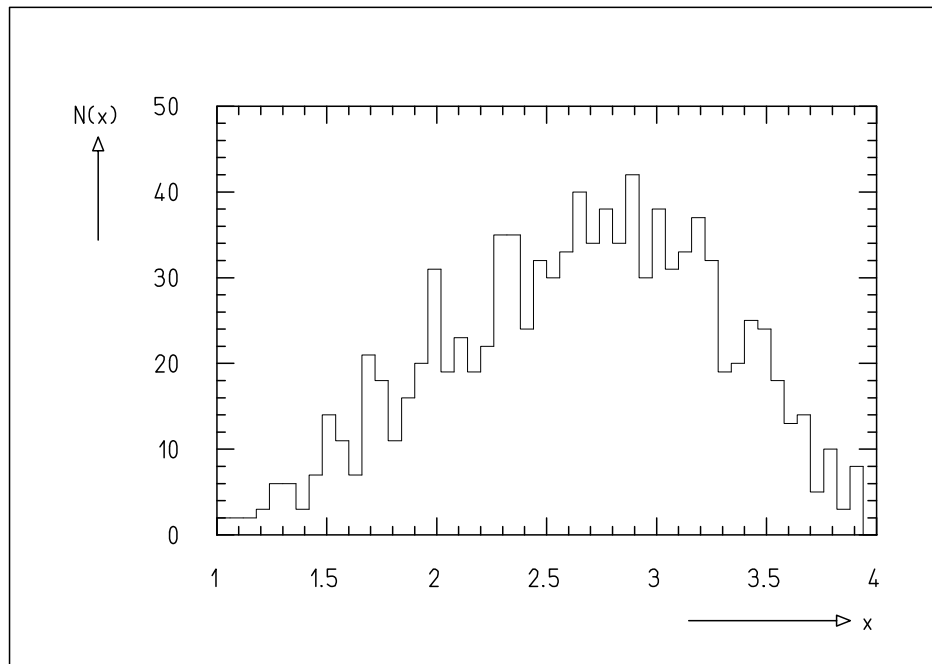
```
double[] triangularNumbersRej(double a, double b, double c, int n),
```

das die gleiche Aufgabe löst, aber das von Neumannsche Rückweisungsverfahren benutzt. Welches der beiden Programme arbeitet schneller?

Schreiben Sie eine Klasse, die wahlweise eine der beiden Methoden aufruft und die erzeugten Zufallszahlen je nach Wunsch numerisch und als Histogramm graphisch ausgibt, Bild G.4. (Beispiellösung: S2Random)

**Programmiernaufgabe 4.3:** Programm zur Erzeugung von Datenpunkten mit verschiedenen großen Fehlern

Schreiben Sie eine Methode ähnlich zu `DatanRandom.line`, das Datenpunkte  $y = at + b + \Delta y$  erzeugt. Allerdings sollen die Fehler  $\Delta y$  nicht für alle Datenpunkte  $y_i$  der



**Bild G.4:** Histogramm von 1000 Zufallszahlen, die einer Dreiecksverteilung mit  $a = 1$ ,  $b = 4$ ,  $c = 3$  folgen.

gleichen Normalverteilung mit der Breite  $\sigma$  entnommen werden, sondern  $\Delta y_i$  soll einer Normalverteilung der Breite  $\sigma_i$  entstammen. Die Breiten  $\sigma_i$  sollen aus einer Gleichverteilung über den Bereich  $\sigma_{\min} < \sigma_i < \sigma_{\max}$  entnommen werden.

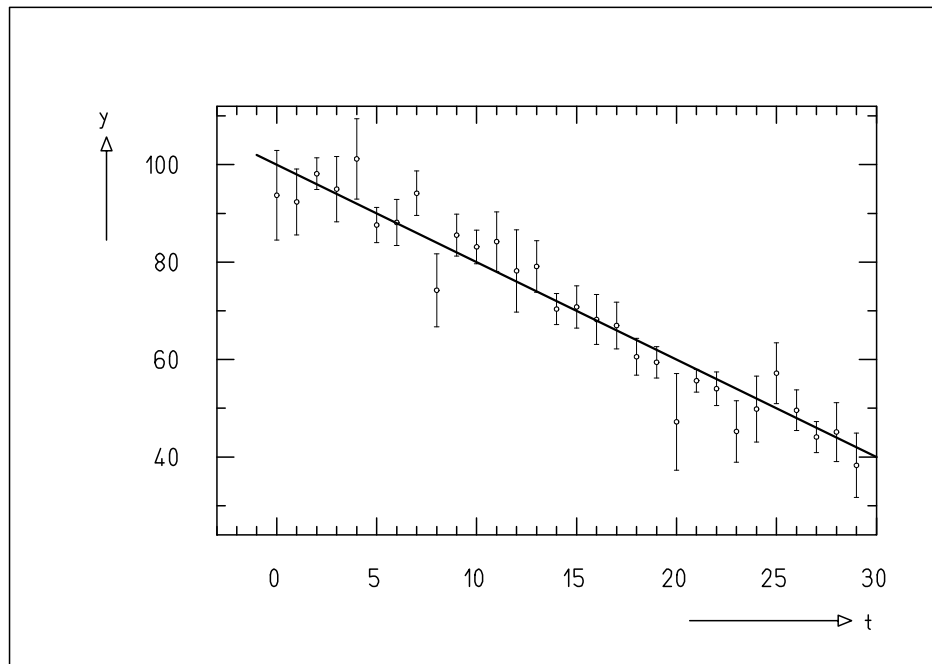
Schreiben Sie eine Klasse, die diese Methode aufruft und die Gerade  $y = at + b$  sowie die simulierten Meßpunkte mit Fehlerbalken  $y_i \pm \Delta y_i$  graphisch darstellt, Bild G.5. (Beispiellösung: S3Random)

### Programmiernaufgabe 5.1: Faltung von Gleichverteilungen

Nach dem zentralen Grenzwertsatz folgt die Größe  $x = \sum_{i=1}^N x_i$  im Limes  $N \rightarrow \infty$  der standardisierten Normalverteilung, falls die  $x_i$  einer beliebigen Verteilung mit Mittelwert Null und Standardabweichung  $1/\sqrt{N}$  entstammen. Wählen Sie für die  $x_i$  die Gleichverteilung mit den Begrenzungen

$$a = -\sqrt{3/N}, \quad b = -a.$$

Führen Sie eine große Zahl  $n_{\text{exp}}$  von Monte-Carlo-Experimenten aus, deren Ergebnis jeweils eine Zufallszahl  $x$  ist. Stellen Sie ein Histogramm der Größe  $x$  dar und tragen Sie zusätzlich als Kurve die Verteilung von  $x$  ein, die Sie aus der standardisierten Normalverteilung erwarten würden, Bild G.6. (Benutzen Sie zur gemeinsamen Darstellung von Histogrammen und Kurven die Klasse `GraphicsWithHistogramAndPolyline`.) Erlauben Sie die interaktive Eingabe der Größen  $n_{\text{exp}}$  und  $N$ . (Beispiellösung: S1Distrib)



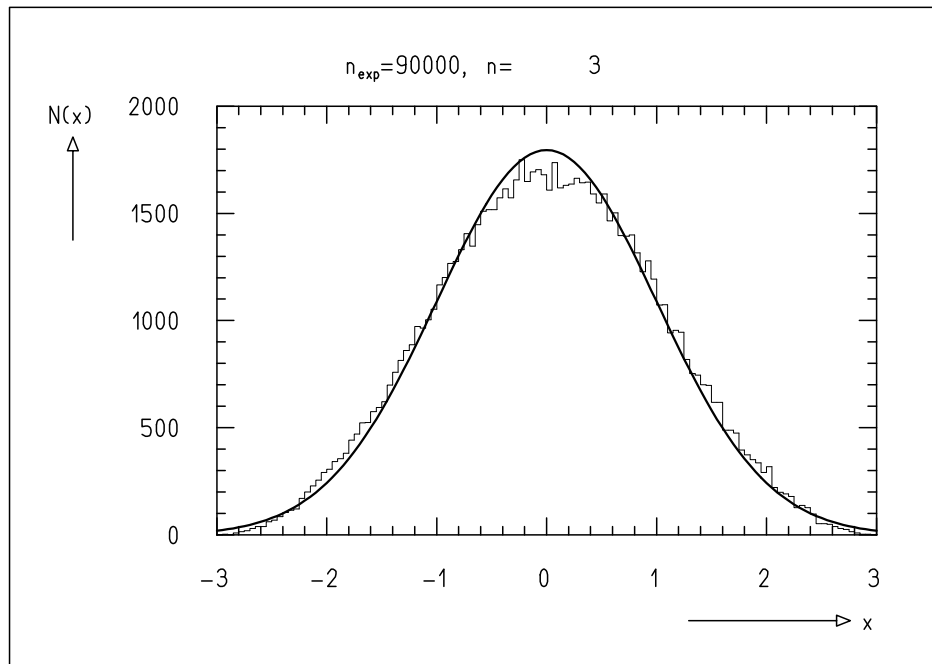
**Bild G.5:** Fehlerbehaftete Datenpunkte mit verschiedenen großen Meßfehlern.

### Programmiernaufgabe 5.2: Faltung von Gleichverteilung und Normalverteilung

Die Größe  $u = x + y$  folgt der Verteilung (5.11.14), wenn  $x$  einer Gleichverteilung zwischen  $a$  und  $b$  entstammt und  $y$  einer Normalverteilung mit Mittelwert Null und Breite  $\sigma$ . Führen Sie eine große Zahl  $n_{\text{exp}}$  von Monte-Carlo-Experimenten aus, deren Ergebnis jeweils eine Zufallszahl  $u$  ist. Stellen Sie ein Histogramm der Größe  $u$  dar und tragen Sie zusätzlich als Kurve die Verteilung von  $u$  ein, die Sie aus (5.11.14) erwarten, Bild G.7. Erlauben Sie die interaktive Eingabe der Größen  $n_{\text{exp}}$ ,  $a$ ,  $b$  und  $\sigma$ . (Beispiellösung: S2Distrib)

### Programmiernaufgabe 7.1: Verteilung der aus wenigen radioaktiven Zerfällen bestimmten Lebensdauer

Im Programmbeispiel 7.1 wurden aus einer einzigen kleinen Stichprobe eine Schätzung  $\bar{t}$  der mittleren Lebensdauer  $\tau$  und deren unsymmetrische Fehler  $\Delta_-$  und  $\Delta_+$  gefunden. Dabei ergab sich stets  $\Delta_- < \Delta_+$ . Schreiben Sie eine Klasse, die eine große Zahl  $n_{\text{exp}}$  von Experimenten simuliert, deren jedes  $N$  radioaktive Zerfälle der mittleren Lebensdauer  $\tau = 1$  mißt. Berechnen Sie für jedes Experiment die Schätzung  $\bar{t}$  und erstellen Sie ein Histogramm der Größe  $\bar{t}$  für alle Experimente. Erzeugen Sie eine Graphik dieses Histogramms  $N_i(t_i \leq t < t_i + \Delta t)$  und eine weitere Graphik der kumulativen Häufigkeitsverteilung  $h_i = (1/n_{\text{exp}}) \sum_{t < t_i} N_i$ . Erlauben Sie interaktive Eingabe von  $n_{\text{exp}}$  und  $N$ . Demonstrieren Sie, daß die Verteilungen für kleine  $N$  unsymmetrisch sind und für große  $N$  symmetrisch werden. Zeigen Sie, daß für kleine  $N$  der Wert  $\bar{t} = 1$  nicht der wahrscheinlichste Wert, wohl aber der Erwartungswert von  $\bar{t}$  ist. Gewinnen Sie für einen festen kleinen Wert von  $N$ , z. B.  $N = 4$ , Grenzen  $\Delta_-$  und  $\Delta_+$  derart, daß mit der Häufigkeit 0.683/2 gilt



**Bild G.6:** Histogramm von 90000 Zufallszahlen  $x$ , die jeweils Summen aus drei gleichverteilten Zufallszahlen sind. Die Kurve entspricht der standardisierten Normalverteilung. Signifikante Unterschiede zwischen Kurve und Histogramm sind nur wegen der sehr großen Anzahl der Zufallszahlen sichtbar.

$\bar{t} < 1 - \Delta_-$  und mit der gleichen Häufigkeit gilt  $\bar{t} > 1 + \Delta_+$ . Vergleichen Sie die gefundenen Resultate mit einer Serie von Simulationsexperimenten mit dem Programm E1M1, Programmbeispiel 7.1. (Beispiellösung: S1MaxLike)

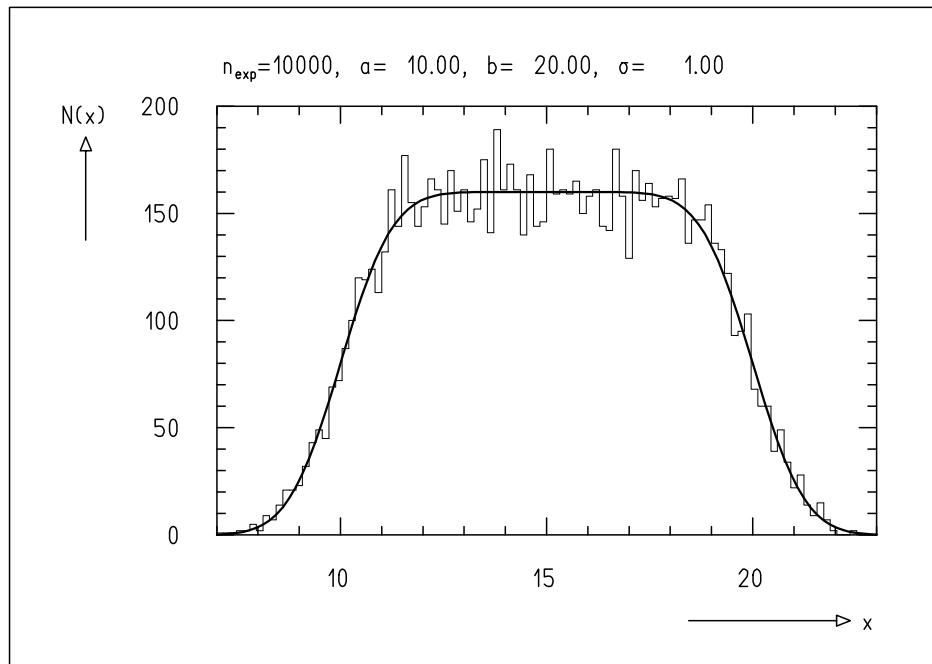
**Programmiernaufgabe 7.2:** Verteilung der Stichprobenkorrelationskoeffizienten

Ändern Sie die Klasse Programm E2MaxLike so ab, daß keine numerische Ausgabe mehr stattfindet. Stattdessen soll ein Histogramm des Stichprobenkorrelationskoeffizienten  $r$  graphisch dargestellt werden, Bild G.8. Erzeugen Sie Histogramme für  $\rho = 0$  und  $\rho = 0.95$  jeweils für  $n_{pt} = 5, 50, 500$ . Unter welchen Umständen ist die Verteilung unsymmetrisch und warum? Ist diese Unsymmetrie ein Widerspruch zum zentralen Grenzwertsatz? (Beispiellösung: S2MaxLike)

**Programmiernaufgabe 9.1:** Anpassung eines Polynoms ersten Grades an Daten, die einem Polynom zweiten Grades entsprechen

Oft hat man es in experimentellen Untersuchungen mit einer großen Zahl gleichartiger Messungen an verschiedenen Objekten (Versuchstieren, Elementarteilchenreaktionen, Werkstücken, ...) zu tun. Die Messungen an jedem Einzelobjekt werden durch eine bestimmte Gesetzmäßigkeit beschrieben. Über diese Gesetzmäßigkeit wird nun eine Annahme gemacht, die am Experiment überprüft werden soll.

Wir konstruieren dazu folgendes Beispiel. Eine Meßserie umfasse  $n_{exp}$  Experimente. Jedes Experiment liefert für die 10 Werte  $t_i = 1, 2, \dots, 10$  der kontrollierten Variablen  $t$  die



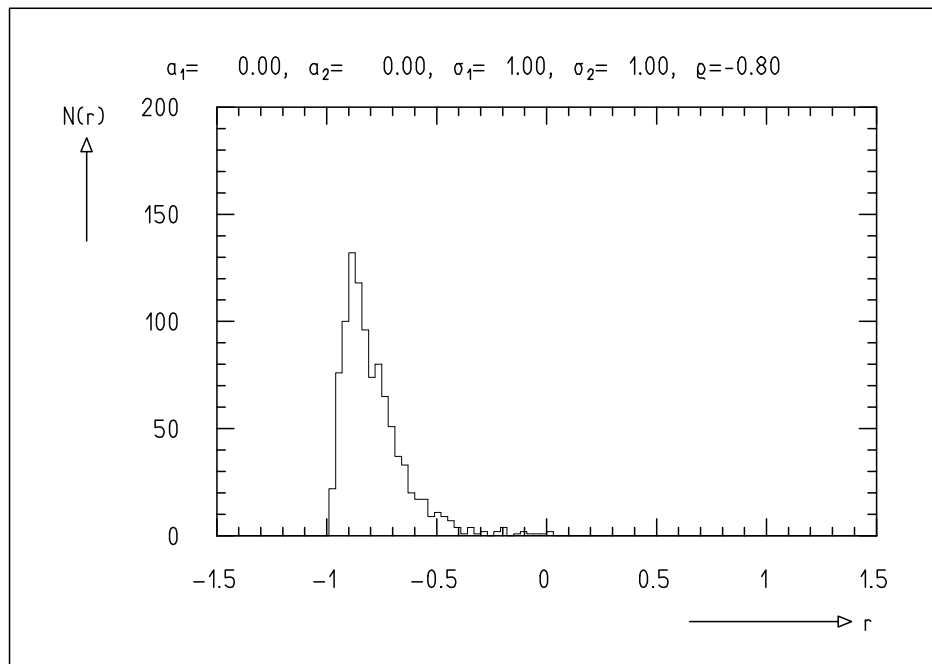
**Bild G.7:** Histogramm von 10000 Zufallszahlen, die die Summen aus je einer gleichverteilten und einer normalverteilten Zufallszahl sind. Die Kurve entspricht der Faltung von Gleich- und Normalverteilung.

Meßwerte  $y_i = x_1 + x_2 t_i + x_3 t_i^2 + \varepsilon_i$ . Die  $\varepsilon_i$  sind einer Normalverteilung mit Mittelwert Null und Breite  $\sigma$  entnommen. Bei der Analyse der Experimente wird allerdings angenommen, die den Messungen  $y_i$  zugrundeliegenden wahren Größen  $\eta_i$  könnten durch ein Polynom ersten Grades  $\eta_i = x_1 + x_2 t$  beschrieben werden. Als Ergebnis der Anpassung erhalten wir auch die Minimumfunktion  $M$ , aus der wir die „ $\chi^2$ -Wahrscheinlichkeit“  $P = 1 - F(M, n - r)$  berechnen können. Dabei ist  $F(M, f)$  die Verteilungsfunktion der  $\chi^2$ -Verteilung mit  $f$  Freiheitsgraden,  $n$  die Zahl der Meßpunkte und  $r$  die Zahl der in der Anpassung bestimmten Parameter. Für  $P < \alpha$  wird die Anpassung des Polynoms ersten Grades an die Daten mit dem Konfidenzniveau  $\beta = 1 - \alpha$  abgelehnt.

Schreiben Sie eine Klasse, die folgende Schritten ausführt:

- (i) Interaktive Eingabe von  $n_{\text{exp}}$ ,  $x_1$ ,  $x_2$ ,  $x_3$ ,  $\sigma$ ,  $\Delta y$ .
- (ii) Erzeugung von  $n_{\text{exp}}$  Datensätzen  $(t_i, y_i, \Delta y)$ , Anpassung eines Polynoms ersten Grades an jeden Datensatz und Berechnung von  $P$ . Eintragen von  $P$  in ein Histogramm.
- (iii) Graphische Darstellung des Histogramms.

**Anregungen:** (a) Wählen Sie  $n_{\text{exp}} = 1000$ ,  $x_1 = x_2 = 1$ ,  $x_3 = 0$ ,  $\sigma = \Delta y = 1$ . Wie erwartet erhalten Sie eine flache Verteilung für  $P$ . (b) Wählen Sie (unter Beibehaltung der übrigen Eingabegrößen) verschiedene Werte  $x_3 \neq 0$ . Dabei bemerken Sie eine Verschiebung der Verteilung zu kleinen  $P$ -Werten, vgl. Bild G.9. Stellen Sie fest, welches etwa der



**Bild G.8:** Histogramm des Stichprobenkorrelationskoeffizienten, der für 1000 Stichproben vom Umfang 10 berechnet wurde, die einer zweidimensionalen Normalverteilung mit dem Korrelationskoeffizienten  $\rho = -0.8$  entnommen wurden.

kleinste positive Wert von  $x_3$  ist, so daß die Hypothese eines Polynoms ersten Grades zum Konfidenzniveau 90 % in 95 % aller Experimente abgelehnt wird. (c) Wählen Sie  $x_3 = 0$ , aber  $\sigma \neq \Delta y$ . Sie werden ebenfalls eine Verschiebung der Verteilung beobachten, z. B. zu großen  $P$ -Werten für  $\Delta y > \sigma$ . (d) Aus den Erfahrungen aus (a), (b), (c) könnte geschlossen werden, daß — falls irrtümlich größere Meßfehler angenommen werden als tatsächlich auftreten ( $\Delta y > \sigma$ ) — sich auch für  $x_3 > 0$  eine flache  $P$ -Verteilung einstellen könnte, so daß der Eindruck entstände, ein Polynom ersten Grades beschreibe die Daten. Beginnen Sie mit  $n_{\text{exp}} = 1000$ ,  $x_1 = x_2 = 1$ ,  $x_3 = 0.2$ ,  $\sigma = 1$ ,  $\Delta y = 1$  und erhöhen Sie  $\Delta y$  in Schritten von 0.1 bis auf  $\Delta y = 2$ . (Beispiellösung: S1Lsq)

### Programmieraufgabe 9.2: Anpassung einer Potenzfunktion (linearer Fall)

Eine Potenzfunktion

$$\eta = xt^w$$

ist linear im Parameter  $x$ , falls  $w$  eine vorgegebene Konstante ist. Diese Funktion soll an Meßpunkte  $(t_i, y_i)$  angepaßt werden, die durch

$$\begin{aligned} t_i &= t_0 + (i-1)\Delta t, \quad i = 1, \dots, n, \\ y_i &= xt_i^w + \varepsilon_i \end{aligned}$$

gegeben sind. Dabei entstammt  $\varepsilon_i$  einer Normalverteilung um Null mit der Breite  $\sigma$ .

Schreiben Sie eine Klasse mit folgenden Funktionen:

- (i) Interaktive Eingabe von  $n, t_0, \Delta t, x, w, \sigma$ .
- (ii) Erzeugung der Meßpunkte.
- (iii) Anpassung der Potenzfunktion.
- (iv) Graphische Darstellung von Daten und angepaßter Funktion, vgl. Bild G.10.

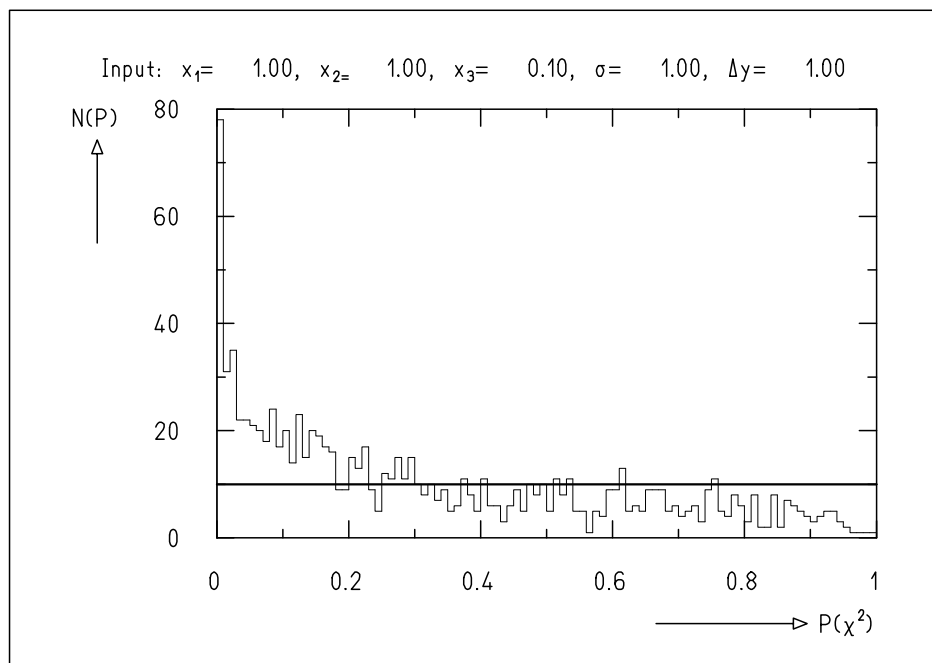
(Beispiellösung: S2Lsq)

### Programmieraufgabe 9.3: Anpassung einer Potenzfunktion (nichtlinearer Fall)

Hat die Potenzfunktion die Form

$$\eta = x_1 t^{x_2},$$

d. h. ist auch die Potenz selbst ein unbekannter Parameter, so wird das Problem nichtlinear. Bei der Anpassung einer nichtlinearen Funktion müssen wir von einer ersten Näherung für die Parameter ausgehen. Wir beschränken uns auf den Fall  $t_i > 0$  für alle  $i$ , der in der Praxis oft auftritt. Dann ist  $\ln \eta = \ln x_1 + x_2 \ln t$ . Falls wir anstelle der von  $(t_i, y_i)$  nun  $(\ln t_i, \ln y_i)$  verwenden, erhalten wir eine lineare Funktion in den Parametern  $\ln x_1$  und  $x_2$ . Allerdings werden bei dieser Transformation die Fehler nichtgaußisch verzerrt. Wir setzen daher alle Fehler gleich groß und benutzen das Ergebnis der linearen Anpassung nur als erste Näherung für eine nichtlineare Anpassung an die  $(t_i, y_i)$ . Wir müssen noch beachten,



**Bild G.9:** Histogramm der  $\chi^2$ -Wahrscheinlichkeit für die Anpassungen eines Polynoms ersten Grades an 1000 Datensätze, die einem Polynom zweiten Grades entsprechen.

daß (jedenfalls für  $x_1 > 0$ ) stets  $\eta > 0$  bei  $t > 0$  gilt. Wegen der Meßfehler können jedoch Meßwerte  $y_i < 0$  auftreten. Solche Punkte dürfen natürlich zur Berechnung der ersten Näherung nicht herangezogen werden.

Schreiben Sie eine Klasse, die die folgenden Teilaufgaben bearbeitet:

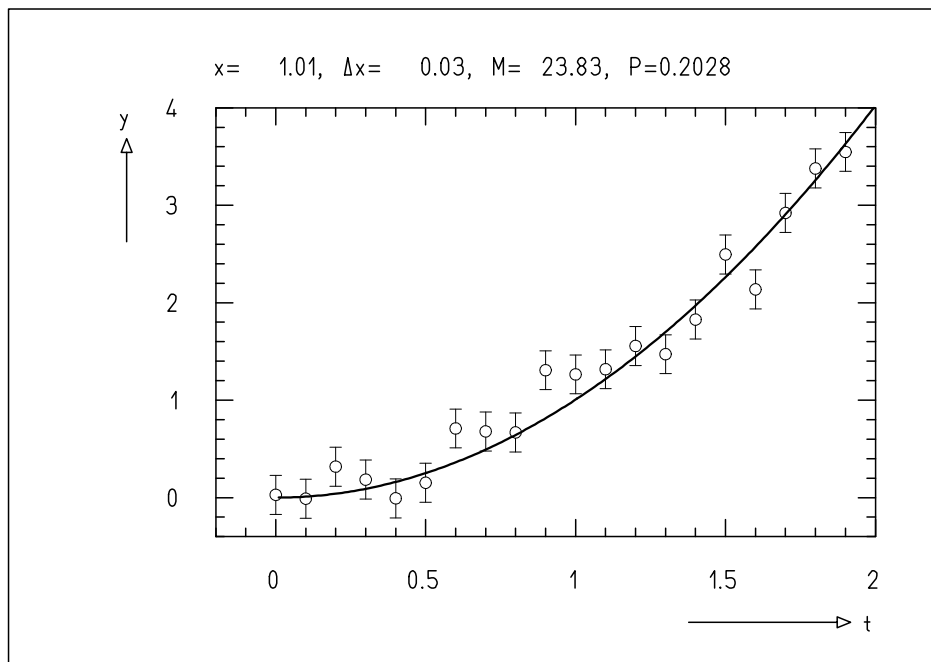
- (i) Interaktive Eingabe von  $n$ ,  $t_0$ ,  $\Delta t$ ,  $x_1$ ,  $x_2$ ,  $\sigma$ .
- (ii) Erzeugung von  $n$  Meßpunkten

$$\begin{aligned} t_i &= t_0 + (i-1)\Delta t, \quad i = 1, \dots, n, \\ y_i &= x_1 t_i^{x_2} + \varepsilon_i \end{aligned}$$

wobei  $\varepsilon_i$  aus einer Normalverteilung um Null mit der Breite  $\sigma$  entnommen wird.

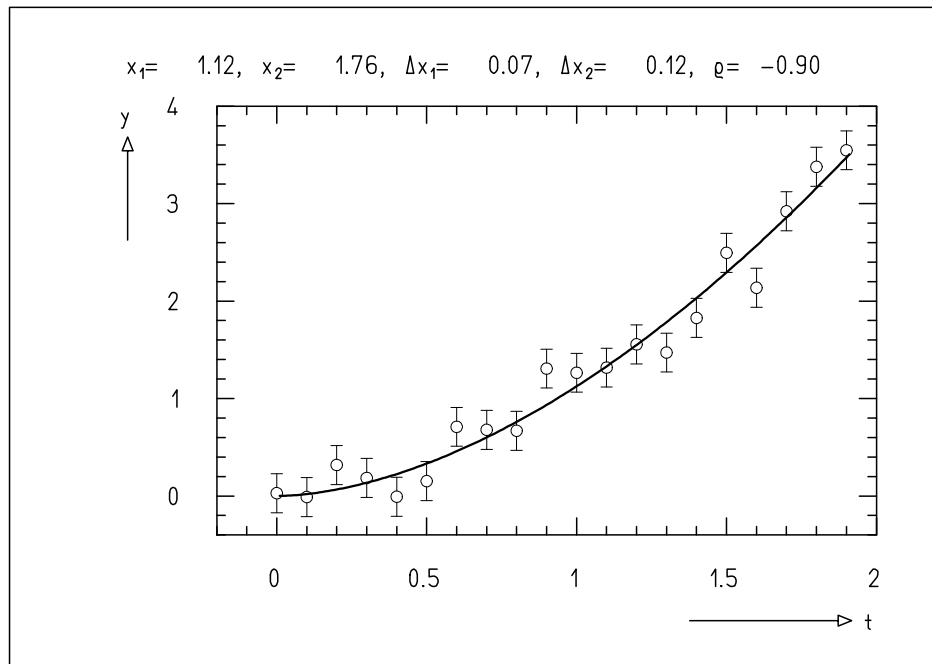
- (iii) Berechnung erster Näherungen für  $x_1$ ,  $x_2$  durch Anpassung einer linearen Funktion an  $(\ln t_i, \ln y_i)$  mit **LsqLin**.
- (iv) Anpassung der Potenzfunktion an  $(t_i, y_i)$  mit **LsqNon**.
- (v) Graphische Darstellung der Ergebnisse, vgl. Bild G.11.

(Beispiellösung: **S3Lsq**)



**Bild G.10:** Ergebnis der Anpassung einer Parabel  $y = xt^2$  an 20 Meßpunkte.





**Bild G.11:** Anpassung einer Funktion  $y = x_1 t^{x_2}$  an 20 Meßpunkte. Die Meßpunkte sind identisch mit denen in Bild G.10.

**Programmiernaufgabe 9.4:** Anpassung einer Breit-Wigner-Funktion an fehlerbehaftete Meßpunkte

Für die  $N = 21$  Werte  $t_i = -3, -2.7, \dots, 3$  der kontrollierten Variablen sollen Meßwerte

$$y_i = f(t_i) + \varepsilon_i \quad (\text{G.3.1})$$

simuliert werden. Dabei ist

$$f(t) = \frac{2}{\pi x_2} \frac{x_2^2}{4(t - x_1)^2 + x_2^2} \quad (\text{G.3.2})$$

die Breit-Wigner-Funktion (3.3.32) mit  $a = x_1$  und  $\Gamma = x_2$ . Die Meßfehler  $\varepsilon_i$  sollen einer Normalverteilung um Null mit der Breite  $\sigma$  entnommen werden. Wählen Sie  $a = 0$  und  $\Gamma = 1$ . Die Wertepaare  $(t_i, y_i)$  liegen innerhalb ihrer Meßfehler also auf einer Glockenkurve mit dem Maximum bei  $t = a$ . Einer solchen Glockenkurve entspricht aber auch die Gauß-Funktion

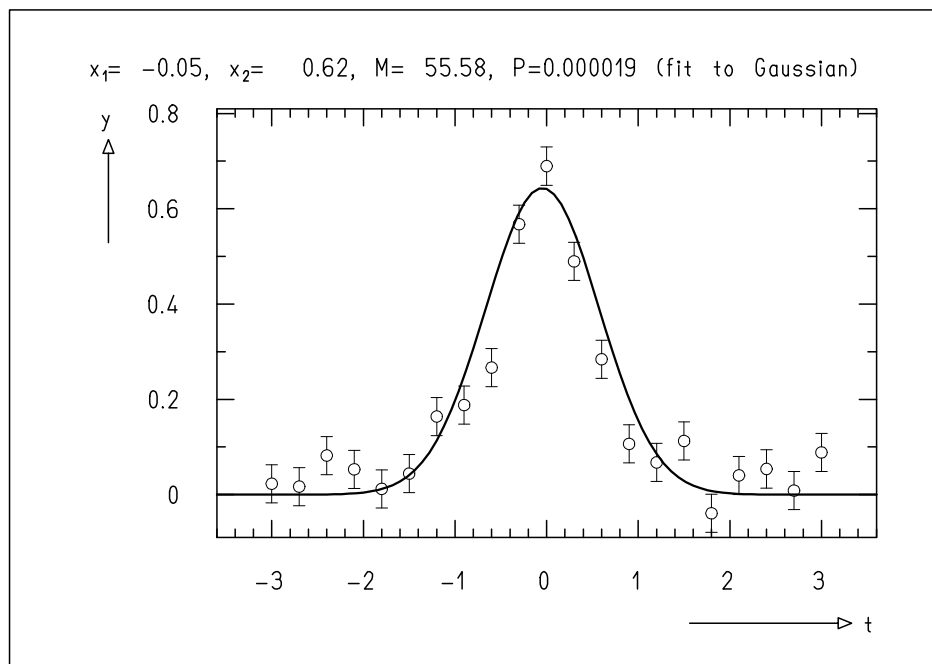
$$f(t) = \frac{1}{x_2 \sqrt{2\pi}} \exp \left\{ -\frac{(t - x_1)^2}{2x_2^2} \right\}. \quad (\text{G.3.3})$$

Schreiben Sie eine Klasse mit den Aufgaben:

- (i) Interaktive Eingabe von  $\sigma$  Ermöglichung der Wahl, ob eine Breit-Wigner-Funktion oder eine Gauß-Funktion angepaßt wird.
- (ii) Erzeugung der Daten, d. h. der Zahlentripel  $(t_i, y_i, \Delta y_i = \varepsilon_i)$ .

- (iii) Anpassung der Breit–Wigner-Funktion (G.3.2) bzw. der Gauß-Funktion (G.3.3) an die Daten und Berechnung der Minimum-Funktion  $M$ .
- (iv) Graphische Darstellung der Meßpunkte mit Meßfehlern und der angepaßten Funktion, vgl. Bild G.12.

Betreiben Sie das Programm für verschiedene Werte von  $\sigma$  und stellen Sie fest, für welchen Wertebereich von  $\sigma$  die Daten eine klare Unterscheidung zwischen Breit–Wigner-Funktion und Gauß-Funktion zulassen. (Beispiellösung: S4Lsq)

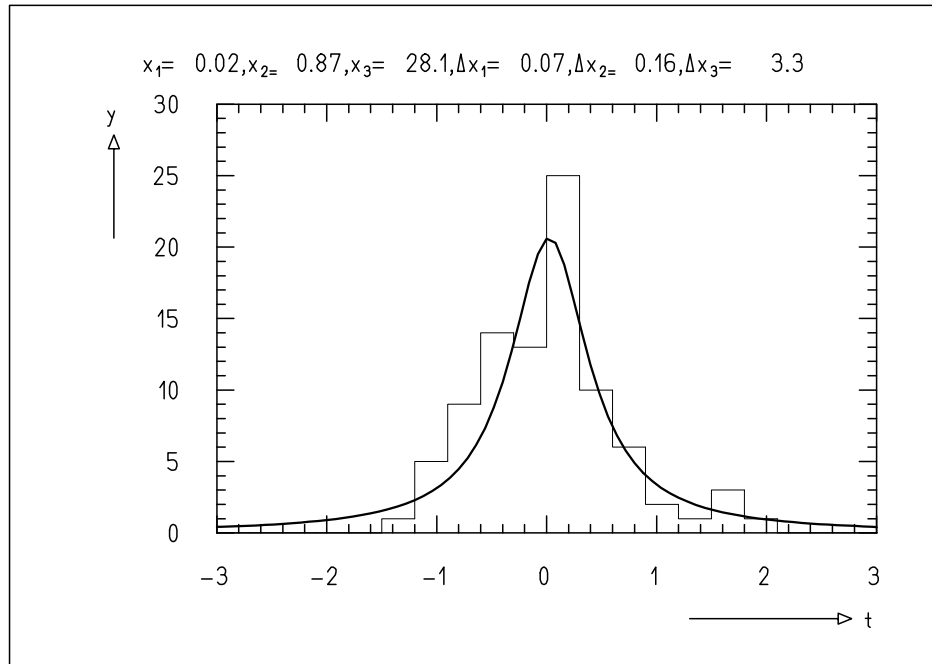


**Bild G.12:** Anpassung einer Gauß-Funktion an Meßpunkte, die einer Breit–Wigner-Funktion entsprechen. Die Anpassung ist schlecht.

### Programmiernaufgabe 9.5: Unsymmetrische Fehler und Konfidenzbereich bei Anpassung einer Breit–Wigner-Funktion

Ergänzen Sie die Lösung der Programmieraufgabe 9.4 derart, daß sie eine graphische Darstellung der Lösungswerte der Parameter, ihrer Fehler, der Kovarianzellipse, der unsymmetrischen Fehler und des Konfidenzbereichs liefert in Anlehnung an die Darstellung aus Bild 9.11.

Diskutieren Sie die Unterschiede in den Ergebnissen, die Sie bei Anpassung einer Breit–Wigner-Funktion bzw. einer Gauß-Funktion erhalten, und zwar jeweils für  $\sigma = 0.1$  und  $\sigma = 1$ . (Beispiellösung: S5Lsq)



**Bild G.13:** Anpassung einer Breit-Wigner-Funktion an ein Histogramm.

#### Programmiernaufgabe 9.6: Anpassung einer Breit-Wigner-Funktion an ein Histogramm

In der Programmiernaufgabe 9.4 waren wir von Messungen  $y_i = f(t_i) + \varepsilon_i$  ausgegangen. Dabei war  $f(t)$  eine Breit-Wigner-Funktion (3.3.32), und die Meßfehler  $\varepsilon_i$  entstammten einer Gauß-Verteilung um Null der Breite  $\sigma$ .

Wir entnehmen jetzt eine Stichprobe vom Umfang  $n_{\text{ev}}$  aus einer Breit-Wigner-Verteilung mit Mittelwert  $a = 0$  und voller Breite  $\Gamma = 1$ . Die Stichprobe stellen wir in Form eines Histogramms dar, das wieder durch Angabe von Zahlentripeln  $(t_i, y_i, \Delta y_i)$  charakterisiert wird. Jetzt ist  $t_i$  der Mittelpunkt des  $i$ -ten Histogrammintervalls  $t_i - \Delta t/2 \leq t < t_i + \Delta t/2$ , und  $y_i$  ist die Anzahl der Stichprobenelemente, die in dieses Intervall fallen. Für nicht zu kleine  $y_i$  ist der zugehörige statistische Fehler  $\Delta y_i = \sqrt{y_i}$ . Für kleine Werte  $y_i$  ist diese einfache Angabe problematisch. Völlig falsch ist sie für  $y_i = 0$ . Bei der Anpassung einer Funktion an ein Histogramm ist daher darauf zu achten, daß Histogrammintervalle ohne Inhalt (vielleicht auch solche mit geringem Inhalt) nicht als Meßpunkte betrachtet werden.

Die anzupassende Funktion sei nun durch

$$f(t) = x_3 g \frac{2}{\pi x_2} \frac{x_2^2}{4(t - x_1)^2 + x_2^2} \quad (\text{G.3.4})$$

gegeben. Im Vergleich zu (G.3.2) tritt als weiterer Parameter der Faktor  $x_3$  auf. Der Faktor  $g$  ist das Produkt aus Gesamtbreite des Histogramms und der Zahl der Intervalle, dividiert durch Gesamtzahl der Ereignisse im Histogramm. So kann der Faktor  $x_3$  die Tatsache berücksichtigen, daß nicht alle Ereignisse in den Bereich des Histogramms fallen.

Schreiben Sie eine Klasse, in der folgende Teilschritte ausgeführt werden:

- (i) Interaktive Eingabe von  $n_{\text{ev}}$  (Stichprobenumfang) und  $n_t$  (Zahl der Histogrammintervalle). Der untere Rand des Histogramms sei bei  $t = -3$  fixiert, der obere Rand bei  $t = 3$ .
- (ii) Erzeugung der Stichprobe, vgl. Programmieraufgabe 4.1.
- (iii) Aufbau des Histogramms.
- (iv) Aufstellung der für die Anpassung geeigneten Tripel  $(t_i, y_i, \Delta y_i)$ .
- (v) Anpassung der Funktion (G.3.4).
- (vi) Ausgabe der Ergebnisse in numerischer und graphischer Form, vgl. Bild G.13.

**Anregungen:** Führen Sie die Anpassung nacheinander für den gleichen Stichprobenumfang, aber verschiedene Intervallzahlen durch. Versuchen Sie, eine optimale Intervallzahl zu finden. (Beispiellösung: **S6Lsq**)

**Programmiernaufgabe 9.7:** Anpassung eines Kreises an Punkte mit Meßfehlern  
in Abszisse und Ordinate

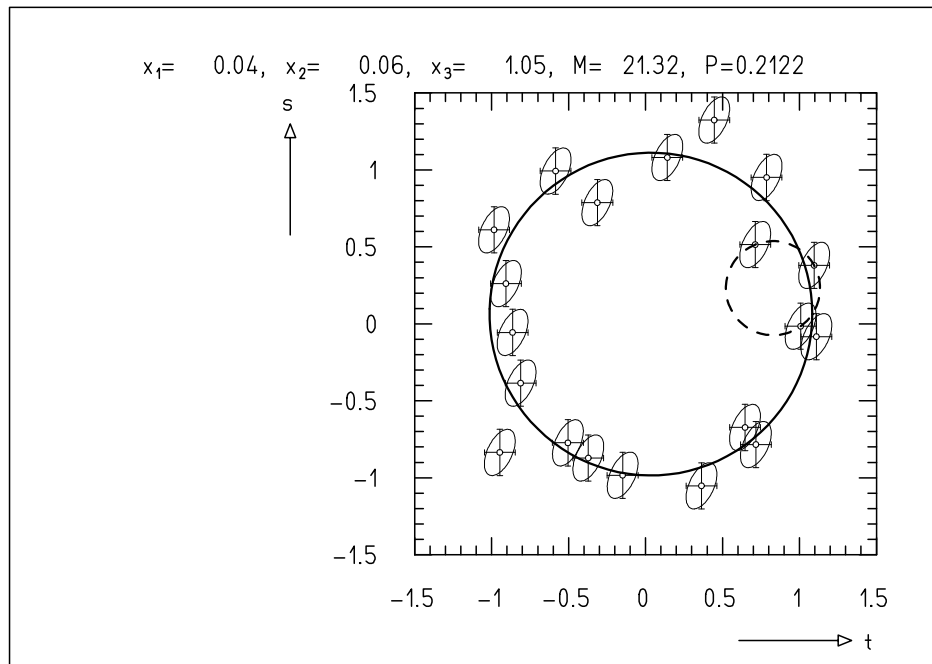
Es seien  $m$  Datenpunkte  $(s_i, t_i)$  in der  $(s, t)$ -Ebene gegeben. Die Meßfehler seien durch  $(2 \times 2)$ -Kovarianzmatrizen der Form

$$\begin{pmatrix} \Delta s_i^2 & c_i^2 \\ c_i^2 & \Delta t_i^2 \end{pmatrix} \quad (\text{G.3.5})$$

beschrieben wie in Beispiel 9.11. Dabei ist  $c_i = \Delta s_i \Delta t_i \rho_i$  und  $\rho_i$  die Korrelation zwischen den Meßfehlern  $\Delta s_i, \Delta t_i$ . Bauen Sie wie in Beispiel 9.11 den Vektor  $\mathbf{y}$  der Messungen aus den  $s_i$  und  $t_i$  auf und konstruieren Sie die Kovarianzmatrix  $C_y$ . Stellen Sie die Gleichungen  $f_k(x, \boldsymbol{\eta}) = 0$  auf unter der Annahme, daß die den Meßwerten zugrundeliegenden wahren Werte auf einem Kreis mit dem Mittelpunkt  $(x_1, x_2)$  und dem Radius  $x_3$  liegen.

Schreiben Sie eine Klasse mit den Teilaufgaben:

- (i) Eingabe von  $m, \Delta t, \Delta s, \rho$ .
- (ii) Erzeugung von  $m$  Meßpunkten  $(s_i, t_i)$  aus Normalverteilungen von 2 Variablen, deren Mittelwerte in regelmäßigen Abständen auf dem Einheitskreis ( $x_1 = x_2 = 0, x_3 = 1$ ) liegen und deren Kovarianzmatrix durch (G.3.5) mit  $\Delta s_i = \Delta s, \Delta t_i = \Delta t, c = \Delta s \Delta t \rho$  gegeben ist.
- (iii) Aufstellung einer ersten Näherung für  $x_1, x_2, x_3$  durch Berechnung der Parameter eines Kreises durch die ersten 3 Meßpunkte.
- (iv) Anpassung an alle Meßpunkte mit **LsqGen** unter Benutzung einer speziell zu schreibenden Benutzerfunktion.
- (v) Graphische Darstellung von Meßpunkten und angepaßtem Kreis entsprechend Bild G.14. (Beispiellösung: **S7Lsq**)



**Bild G.14:** Meßpunkte mit Fehlerellipsen, Kreis der ersten Näherung durch 3 Meßpunkte (gestrichelt) und an alle Meßpunkte angepaßter Kreis.

### Programmieraufgabe 10.1: Monte-Carlo-Minimierung zur Wahl einer guten ersten Näherung

Für einige der Funktionen im Programmbeispiel 10.1 war die Auswahl des Punktes  $\mathbf{x}_0$  der ersten Näherung ausschlaggebend für Erfolg oder Mißerfolg der Minimierung. Hat eine Funktion verschiedene Minima und ist der Funktionswert an einem dieser Minima kleiner als an allen anderen, existiert also ein „absolutes Minimum“, so führt folgendes Verfahren zum Ziel. Man benutzt die Monte-Carlo-Methode zur Bestimmung einer ersten Näherung  $\mathbf{x}_0$  des absoluten Minimums in einem größeren Bereich des Parameterraumes, indem man Punkte  $\mathbf{x} = (x_1, x_2, \dots, x_n)$  erzeugt, die dort einer Gleichverteilung folgen, und unter allen diejenigen auswählt, an dem der Funktionswert am kleinsten ist.

Schreiben Sie auf der Grundlage von `E1Min` eine Klasse, die das absolute Minimum der im Abschnitt 10.1 beschriebenen Funktion  $f_7(\mathbf{x})$  bestimmt. Die erste Näherung  $\mathbf{x}_0$  soll im Bereich

$$-10 < x_{0i} < 10, \quad i = 1, 2, 3,$$

mit der Monte-Carlo-Methode gesucht werden. Führen Sie die Suche für  $N$  zufällig ausgewählte Punkte aus und erlauben Sie eine interaktive Eingabe von  $N$ . (Beispiellösung: `S1Min`)

### Programmieraufgabe 10.2: Bestimmung der Parameter einer Breit-Wigner-Verteilung aus den Elementen einer Stichprobe

Erzeugen Sie durch Veränderung einer Kopie von `E2Min` eine Klasse, die eine Stichprobe aus einer Breit–Wigner-Verteilung mit Mittelwert  $a$  und voller Breite bei halber Höhe  $\Gamma$  simuliert und das anschließend die Zahlwerte dieser Parameter durch Minimierung der negativen logarithmischen Likelihood-Funktion bestimmt. Erlauben Sie interaktiv die Eingabe des Stichprobenumfangs und der Parameter  $a$  und  $\Gamma$  für die Simulation. (Beispiellösung: `S2Min`)

**Programmieraufgabe 11.1:** Zweifache Varianzanalyse  
mit gekreuzter Klassifizierung

Das Modell (11.2.16) für die Daten bei einer Varianzanalyse mit gekreuzter Klassifizierung lautet

$$x_{ijk} = \mu + a_i + b_j + (ab)_{ij} + \varepsilon_{ijk}.$$

Die Varianzanalyse überprüft die Nullhypothese

$$a_i = b_j = (ab)_{ij} = 0.$$

Daten, die dieser Nullhypothese entsprechen, werden im Programm `E2Anova`, Abschnitt 11.2, simuliert und analysiert.

Schreiben Sie ein Programm in Anlehnung an `E2Anova`, das Daten  $x_{ijk}$  nach der obigen Formel erzeugt. Dabei soll gelten

$$\begin{aligned} a_i &= \left(i - \frac{I+1}{2}\right) a, \\ b_j &= \left(j - \frac{J+1}{2}\right) b, \\ (ab)_{ij} &= \text{signum}(a_i) \text{signum}(b_j) ab. \end{aligned}$$

Diese Ansätze erfüllen die Bedingungen (11.2.7). Die  $\varepsilon_{ijk}$  sollen wie in `E2Anova` einer Normalverteilung mit Mittelwert Null und Standardabweichung  $\sigma$  entnommen werden. Die Größen  $a, b, ab, \sigma, \mu$  sollen interaktiv erfragt werden. Führen Sie mit den so simulierten Daten eine Varianzanalyse durch. Untersuchen Sie verschiedene Fälle, z. B.  $a = 0, b \neq 0, ab = 0$ ;  $a \neq 0, b = 0, ab = 0$ ;  $a = 0, b = 0, ab \neq 0$ ; usw. (Beispiellösung: `S1Anova`)

**Programmieraufgabe 11.2:** Zweifache Varianzanalyse  
mit genisteter Klassifizierung

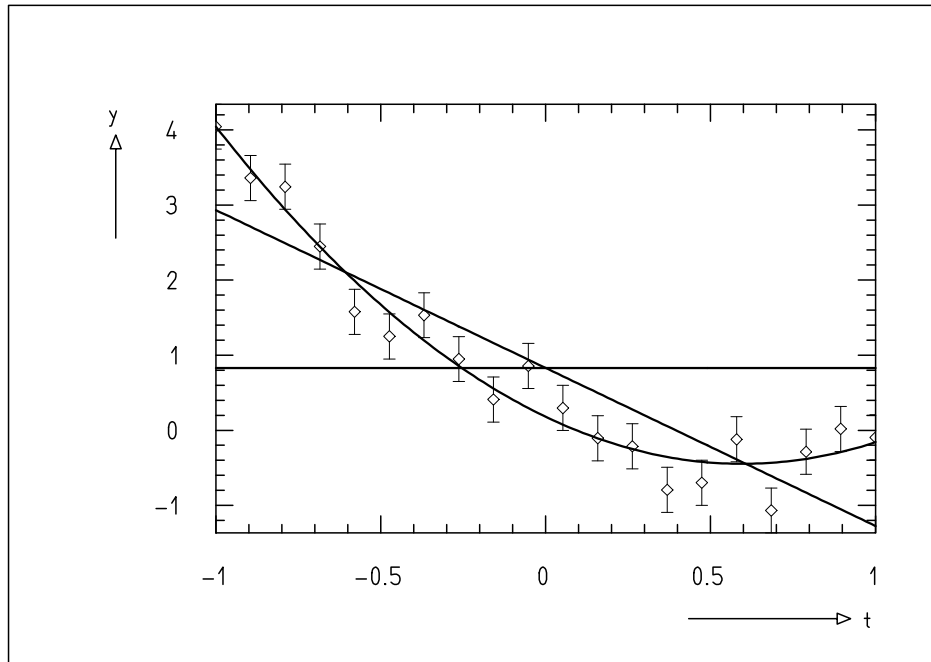
Übertragen Sie die Programmieraufgabe 11.1 auf das Problem der genisteten Klassifizierung mit Daten der Form (11.2.22), d. h.

$$x_{ijk} = \mu + a_i + b_{ij} + \varepsilon_{ijk},$$

und benutzen Sie die Abhängigkeiten

$$a_i = \left(i - \frac{I+1}{2}\right) a, \quad b_{ij} = \left(j - \frac{J+1}{2}\right) b.$$

(Beispiellösung: `S2Anova`)



**Bild G.15:** Datenpunkte mit Fehlern und Regressionspolynome verschiedenen Grades.

**Programmiernaufgabe 12.1:** Simulation von Daten und Darstellung  
von Regressionspolynomen verschiedenen Grades

Schreiben Sie eine Klasse, die  $n$  Datenpunkte  $(t_i, y_i)$  erzeugt. Die  $t_i$  sollen äquidistant über das Intervall  $-1 \leq t \leq 1$  verteilt sein; die  $y_i$  sollen einem Polynom mit  $r$  Termen entsprechen und mit normalverteilten Fehlern der Breite  $\sigma$  behaftet sein. Es soll eine Regressionsanalyse durchgeführt und anschließend eine graphische Darstellung wie in Bild G.15 der Daten und der Regressionspolynome erzeugt werden. Bei der Programmierung können Sie auf große Teile der Klassen `E4Reg` und `E2Reg` zurückgreifen. (Beispiellösung: `S1Reg`)

**Programmiernaufgabe 12.2:** Simulation von Daten und Darstellung  
der Regressionslinie mit Konfidenzgrenzen

Erweitern Sie die Lösung der Programmiernaufgabe 12.1 so, daß ein Regressionspolynom gewünschten Grades mit Konfidenzgrenzen entsprechend Abschnitt 12.3 dargestellt wird. (Beispiellösung: `S2Reg`)

**Programmiernaufgabe 13.1:** Zur Extrapolation in der Zeitreihenanalyse

In Abschnitt 13.3 wurde darauf hingewiesen, daß bei der Interpretation der Ergebnisse einer Zeitreihenanalyse am Rande der Zeitreihe und bei Extrapolation in Bereiche außerhalb der Zeitreihe Vorsicht geboten ist. Insbesondere wurde betont, daß die Extrapolation dann sinnlose Ergebnisse liefert, wenn die Daten nicht wenigstens ungefähr durch ein Polynom beschrieben werden. Der Grad dieses Polynoms muß kleiner oder gleich dem Grad  $k$  des Polynoms sein, das in der Zeitreihenanalyse benutzt wird.

Untersuchen Sie diese Aussagen durch Simulation entsprechender Zeitreihen und deren Analyse. Schreiben Sie ausgehend von E2TimSer ein Programm, das für  $n = 200$ ,  $i = 1, 2, \dots, n$ , Daten

$$y_i = t_i^m + \varepsilon_i, \quad t_i = \frac{i - 100}{50},$$

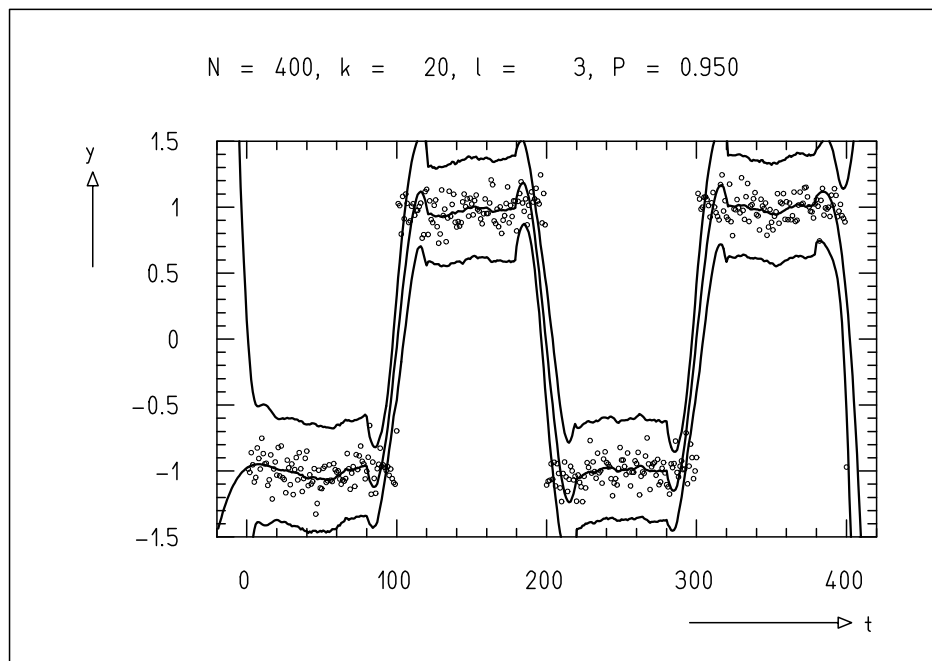
erzeugt. Dabei sollen die  $\varepsilon_i$  aus einer Normalverteilung mit Mittelwert Null und Standardabweichung  $\sigma$  entnommen werden. Erlauben Sie die interaktive Eingabe von  $m$ ,  $\sigma$ ,  $k$ ,  $\ell$  und  $P$ . Führen Sie im Anschluß an die Erzeugung der Daten eine Zeitreihenanalyse durch und erzeugen Sie eine graphische Ausgabe wie in E2TimSer. Untersuchen Sie verschiedene Kombinationen von  $m$ ,  $k$  und  $\ell$ , und zwar jeweils für kleine Werte von  $\sigma$  (z. B.  $\sigma = 0.001$ ) und großes  $\sigma$  (z. B.  $\sigma = 0.1$ ). (Beispiellösung: S1TimSer)

### Programmieraufgabe 13.2: Sprünge in Zeitreihen

Bei der Entwicklung der Zeitreihenanalyse wurde angenommen, daß die Meßwerte abgesehen von den statistischen Schwankungen kontinuierliche, also stetige Funktionen der Zeit sind. Wir erwarten daher unzuverlässige Ergebnisse in Bereichen, in denen die Messungen unstetig sind. Schreiben Sie ein Programm, das die folgenden drei Arten von Zeitreihen erzeugt, analysiert und graphisch darstellt. Davon ist eine stetig. Die beiden anderen enthalten Unstetigkeiten.

*Sinusfunktion:*

$$y_i = \sin(\pi t_i / 180) + \varepsilon_i, \quad t_i = i, \quad i = 1, 2, \dots, n.$$



**Bild G.16:** Zeitreihe entsprechend einer Stufenfunktion mit gleitenden Mittelwerten und Konfidenzgrenzen.



*Stufenfunktion:*

$$y_i = \begin{cases} -1 + \varepsilon_i, & t_i \leq 100 \\ 1 + \varepsilon_i, & t_i > 100 \end{cases}, \quad t_i = i \bmod 200, \quad i = 1, 2, \dots, n.$$

*Sägezahnfunktion:*

$$y_i = (t_i - 50)/100 + \varepsilon_i, \quad t_i = i \bmod 100, \quad i = 1, 2, \dots, n.$$

Die  $\varepsilon_i$  sollen wieder einer Normalverteilung mit Mittelwert Null und Standardabweichung  $\sigma$  entnommen werden.

Erlauben Sie dem Benutzer interaktiv die Wahl der Funktion und die Eingabe von  $n$ ,  $\sigma$ ,  $k$ ,  $\ell$  und  $P$ . Untersuchen Sie Zeitreihen mit verschiedenen Parametern und diskutieren Sie die Ergebnisse. Bild G.16 zeigt ein Beispiel. (Beispiellösung: S2TimSer)

# H Formelsammlung

## Wahrscheinlichkeiten

$A, B, \dots$  sind *Ereignisse*;  $\bar{A}$  ist das Ereignis „nicht  $A$ “.

$(A + B)$  und  $(AB)$  bedeuten Verknüpfung von Ereignissen durch *logisches* (gegenseitig ausschließendes) „oder“ bzw. *logisches* „und“.

$P(A)$  ist die *Wahrscheinlichkeit* für das Ereignis  $A$ .

$P(B|A) = P(AB)/P(A)$  ist die Wahrscheinlichkeit von  $B$  unter der Bedingung  $A$  (*bedingte Wahrscheinlichkeit*).

Es gilt  
für *jedes* Ereignis  $A$

$$P(\bar{A}) = 1 - P(A),$$

für *sich gegenseitig ausschließende* Ereignisse  $A, B, \dots, Z$

$$P(A + B + \dots + Z) = P(A) + P(B) + \dots + P(Z),$$

für *unabhängige* Ereignisse  $A, B, \dots, Z$

$$P(AB \dots Z) = P(A)P(B) \dots P(Z).$$

## Eine Zufallsvariable

*Verteilungsfunktion:*  $F(x) = P(\mathbf{x} < x)$

*Wahrscheinlichkeitsdichte* (für  $F(x)$  stetig differenzierbar):

$$f(x) = F'(x) = \mathrm{d}f(x)/\mathrm{d}x$$

*Momente der Ordnung  $\ell$ :*

(a) um den Punkte  $c$ :  $\alpha_\ell = E\{(\mathbf{x} - c)^\ell\}$

(b) um den Ursprung (zentrale Momente):  $\lambda_\ell = E\{\mathbf{x}^\ell\}$

(c) um den Mittelwert:  $\mu_\ell = E\{(\mathbf{x} - \widehat{\mathbf{x}})^\ell\}$

*Varianz:*  $\sigma^2(\mathbf{x}) = \mathrm{var}(\mathbf{x}) = \mu_2 = E\{(\mathbf{x} - \widehat{\mathbf{x}})^2\}$

*Standardabweichung* oder *Fehler* von  $\mathbf{x}$ :  $\Delta \mathbf{x} = \sigma(\mathbf{x}) = +\sqrt{\sigma^2(\mathbf{x})}$

**Tafel H.1:** Erwartungswerte für diskrete und kontinuierliche Verteilungen.

	<b>x diskret</b>	<b>x kontinuierlich; F(x) stetig differenzierbar</b>
Wahrscheinlichkeitsdichte	—	$f(x) = F'(x) = \frac{dF(x)}{dx},$ $\int_{-\infty}^{\infty} f(x) dx = 1$
Mittelwert von x (Erwartungswert)	$\hat{x} = E(x)$ $= \sum_i x_i P(x = x_i)$	$\hat{x} = E(x)$ $= \int_{-\infty}^{\infty} x f(x) dx$
Mittelwert der Funktion H(x)	$E\{H(x)\}$ $= \sum_i H(x_i) P(x = x_i)$	$E\{H(x)\}$ $= \int_{-\infty}^{\infty} H(x) f(x) dx$

Schiefe:  $\gamma = \mu_3/\sigma^3$

Reduzierte Variable:  $u = (x - \hat{x})/\sigma(x)$ ;  $E(u) = 0$   $\sigma^2(u) = 1$

Wahrscheinlichster Wert  $x_m$  definiert durch:  $P(x = x_m) = \max$

Median  $x_{0.5}$  definiert durch:  $F(x_{0.5}) = P(x < x_{0.5}) = 0.5$

Quantil  $x_q$  definiert durch:  $F(x_q) = P(x < x_q) = q$ ;  $0 \leq q \leq 1$

## Mehrere Zufallsvariable

Verteilungsfunktion:

$$F(\mathbf{x}) = F(x_1, x_2, \dots, x_n) = P(\mathbf{x}_1 < x_1, \mathbf{x}_2 < x_2, \dots, \mathbf{x}_n < x_n)$$

Gemeinsame Wahrscheinlichkeitsdichte (nur für  $F(\mathbf{x})$  stetig differenzierbar in allen Variablen):

$$f(\mathbf{x}) = f(x_1, x_2, \dots, x_n) = \partial^n F(x_1, x_2, \dots, x_n) / \partial x_1 \partial x_2 \cdots \partial x_n$$

Randverteilung der Variablen  $x_i$ :

$$g_i(x_i) = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \cdots \int_{-\infty}^{\infty} f(x_1, x_2, \dots, x_n) dx_1 dx_2 \cdots dx_{i-1} dx_{i+1} \cdots dx_n$$

Erwartungswert einer Funktion  $H(\mathbf{x})$ :

$$E\{H(\mathbf{x})\} = \int H(\mathbf{x}) f(\mathbf{x}) d\mathbf{x}$$

Erwartungswert der Variablen  $x_i$ :

$$\hat{x}_i = E(\mathbf{x}_i) = \int x_i f(\mathbf{x}) d\mathbf{x} = \int_{-\infty}^{\infty} x_i g_i(x_i) dx_i$$

Die Variablen  $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_n$  sind *unabhängig*, wenn

$$f(x_1, x_2, \dots, x_n) = g_1(x_1)g_2(x_2) \cdots g_n(x_n)$$

Momente der Ordnung  $\ell_1, \ell_2, \dots, \ell_n$ :

(a) um  $\mathbf{c} = (c_1, c_2, \dots, c_n)$ :

$$\alpha_{\ell_1 \ell_2 \dots \ell_n} = E\{(\mathbf{x}_1 - c_1)^{\ell_1} (\mathbf{x}_2 - c_2)^{\ell_2} \cdots (\mathbf{x}_n - c_n)^{\ell_n}\}$$

(b) um den Ursprung:  $\lambda_{\ell_1 \ell_2 \dots \ell_n} = E\{\mathbf{x}_1^{\ell_1} \mathbf{x}_2^{\ell_2} \cdots \mathbf{x}_n^{\ell_n}\}$

(c) um  $\hat{\mathbf{x}}$ :  $\mu_{\ell_1 \ell_2 \dots \ell_n} = E\{(\mathbf{x}_1 - \hat{x}_1)^{\ell_1} (\mathbf{x}_2 - \hat{x}_2)^{\ell_2} \cdots (\mathbf{x}_n - \hat{x}_n)^{\ell_n}\}$

Varianz von  $\mathbf{x}_i$ :  $\sigma^2(\mathbf{x}_i) = E\{(\mathbf{x}_i - \hat{x}_i)^2\} = c_{ii}$

Kovarianz zwischen  $\mathbf{x}_i$  und  $\mathbf{x}_j$ :  $\text{cov}(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) = E\{(\mathbf{x}_i - \hat{x}_i)(\mathbf{x}_j - \hat{x}_j)\} = c_{ij}$

Für  $\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j$  *unabhängig*:  $\text{cov}(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) = 0$

Kovarianzmatrix:  $C = E\{(\mathbf{x} - \hat{\mathbf{x}})(\mathbf{x} - \hat{\mathbf{x}})^T\}$

Korrelationskoeffizient:

$$\rho(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = \text{cov}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) / \sigma(\mathbf{x}_1)\sigma(\mathbf{x}_2); \quad -1 \leq \rho \leq 1$$

Rechenregeln:

$$\sigma^2(c\mathbf{x}_i) = c^2 \sigma^2(\mathbf{x}_i)$$

$$\sigma^2(a\mathbf{x}_i + b\mathbf{x}_j) = a^2 \sigma^2(\mathbf{x}_i) + b^2 \sigma^2(\mathbf{x}_j) + 2ab \text{cov}(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j)$$

$a, b, c$  sind Konstanten

## Transformation von Variablen

Ursprüngliche Variable:  $\mathbf{x} = (\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_n)$

Wahrscheinlichkeitsdichte:  $f(\mathbf{x})$

Transformierte Variable:  $\mathbf{y} = (\mathbf{y}_1, \mathbf{y}_2, \dots, \mathbf{y}_n)$

Verknüpfung:  $\mathbf{y}_1 = \mathbf{y}_1(\mathbf{x}), \mathbf{y}_2 = \mathbf{y}_2(\mathbf{x}), \dots, \mathbf{y}_n = \mathbf{y}_n(\mathbf{x})$

Wahrscheinlichkeitsdichte:  $g(\mathbf{y}) = |J|f(\mathbf{x})$

mit der *Jacobi-Determinante*

$$J = J\left(\frac{x_1, x_2, \dots, x_n}{y_1, y_2, \dots, y_n}\right) = \begin{vmatrix} \frac{\partial x_1}{\partial y_1} & \frac{\partial x_2}{\partial y_1} & \cdots & \frac{\partial x_n}{\partial y_1} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \frac{\partial x_1}{\partial y_n} & \frac{\partial x_2}{\partial y_n} & \cdots & \frac{\partial x_n}{\partial y_n} \end{vmatrix}$$

## Fehlerfortpflanzung

Die ursprünglichen Variablen  $\mathbf{x}$  haben die Kovarianzmatrix  $C_x$ . Die *Kovarianzmatrix der transformierten Variablen*  $\mathbf{y}$  ist

$$C_y = T C_x T^T \text{ mit } T = \begin{pmatrix} \frac{\partial y_1}{\partial x_1} & \frac{\partial y_1}{\partial x_2} & \cdots & \frac{\partial y_1}{\partial x_n} \\ \frac{\partial y_2}{\partial x_1} & \frac{\partial y_2}{\partial x_2} & \cdots & \frac{\partial y_2}{\partial x_n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial y_m}{\partial x_1} & \frac{\partial y_m}{\partial x_2} & \cdots & \frac{\partial y_m}{\partial x_n} \end{pmatrix}.$$

Die Formel ist nur für eine lineare Beziehung zwischen  $\mathbf{y}$  und  $\mathbf{x}$  exakt, aber eine gute Näherung für kleine Abweichungen von der Linearität in einer Umgebung von der Größe der Standardabweichung um  $\hat{\mathbf{x}}$ . *Nur für verschwindende Kovarianzen in  $C_x$  gilt*

$$\sigma(y_i) = \Delta y_i = \sqrt{\sum_{j=1}^m \left( \frac{\partial y_i}{\partial x_j} \right)^2 (\Delta x_j)^2}.$$

**Tafel H.2:** Verteilungen diskreter Variabler.

Verteilung	Wahrscheinlichkeit für Beobachtung von $\mathbf{x} = k$ ( $\mathbf{x}_1 = k_1, \dots, \mathbf{x}_l = k_l$ )	Mittel- wert	Varianz (Elemente der Kovarianzmatrix)
Binomial	$W_k^n = \binom{n}{k} p^k (1-p)^{n-k}$	$\hat{x} = np$	$\sigma^2(\mathbf{x}) = np(1-p)$
Multinomial $\sum_{j=1}^l p_j = 1$	$W_{k_1, k_2, \dots, k_l}^n = \frac{n!}{\prod_{j=1}^l k_j!} \prod_{j=1}^l p_j^{k_j}$	$\hat{x}_j = np_j$	$c_{ij} = np_i(\delta_{ij} - p_j)$
Hypergeo- metrisch $L = N - K,$ $l = n - k$	$W_k = \binom{K}{k} \binom{L}{\ell} : \binom{N}{n}$	$\hat{x} = n \frac{K}{N}$	$\sigma^2(\mathbf{x}) = \frac{nKL(N-n)}{N^2(N-1)}$
Poisson	$f(k) = \frac{\lambda^k}{k!} e^{-\lambda}$	$\hat{x} = \lambda$	$\sigma^2(\mathbf{x}) = \lambda$

**Tafel H.3:** Verteilungen kontinuierlicher Variabler.

Verteilung	Wahrscheinlichkeitsdichte	Mittelwert	Varianz (Kov.matrix)
Gleichvert.	$\begin{cases} 0; & x > a, x \geq b \\ \frac{1}{b-a}; & a \leq x < b \end{cases}$	$\frac{1}{2}(b+a)$	$(b-a)^2/12$
Gauß-Vert.	$\frac{1}{b\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{(x-a)^2}{2b^2}\right)$	$a$	$b^2$
Stand. Gauß-Vert.	$\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp(-\frac{1}{2}x^2)$	$0$	$1$
Gauß-Vert. mehrerer Variabler	$k \exp\left\{-\frac{(\mathbf{x}-\mathbf{a})^T B(\mathbf{x}-\mathbf{a})}{2}\right\}$	$\mathbf{a}$	$C = B^{-1}$
$\chi^2$	$\frac{1}{\Gamma(\frac{1}{2}f)2^{\frac{1}{2}f}} (\chi^2)^{\frac{1}{2}f-1} \exp(-\frac{1}{2}\chi^2)$	$f$	$2f$
Fishers $F$	$\left(\frac{f_1}{f_2}\right)^{\frac{1}{2}f_1} \frac{\Gamma(\frac{1}{2}(f_1+f_2))}{\Gamma(\frac{1}{2}f_1)\Gamma(\frac{1}{2}f_2)} \cdot F^{\frac{1}{2}f_1-1} \left(1 + \frac{f_1}{f_2}F\right)^{-\frac{1}{2}(f_1+f_2)}$	$\frac{f_2}{f_2-2},$ $f_2 > 2$	$\frac{2f_2^2(f_1+f_2-2)}{f_1(f_2-2)^2(f_2-4)},$ $f_2 > 4$
Students $t$	$\frac{\Gamma(\frac{1}{2}(f+1))}{\Gamma(\frac{1}{2}f)\sqrt{\pi}\sqrt{f}} \left(1 + \frac{t^2}{f}\right)^{-\frac{1}{2}(f+1)}$	$0$	$\frac{f}{f-2},$ $f > 2$

### Gesetz der großen Zahl

Es werden insgesamt  $n$  Beobachtungen ausgeführt, die durch die Zufallsvariable  $x_i$  ( $= 1$ , wenn die  $i$ -te Beobachtung das Ergebnis  $A$  liefert, sonst  $= 0$ ) beschrieben werden. Die *Häufigkeit* von  $A$  ist

$$h = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x_i.$$

Für  $n \rightarrow \infty$  ist diese Häufigkeit gleich der Wahrscheinlichkeit  $p$  für das Eintreten von  $A$

$$E(h) = h = p, \quad \sigma^2(h) = \frac{1}{n} p(1-p).$$

## Zentraler Grenzwertsatz

Sind die  $x_i$  unabhängige Variable mit Mittelwert  $a$  und Varianz  $\sigma^2$ , dann folgt  $(1/n) \sum_{i=1}^n x_i$  für  $n \rightarrow \infty$  einer Normalverteilung mit Mittelwert  $a$  und Varianz  $\sigma^2/n$ .

## Faltung von Verteilungen

Die Wahrscheinlichkeitsdichte der Summe  $u = x + y$  zweier unabhängig verteilter Zufallsvariabler  $x$  und  $y$  ist

$$f_u(u) = \int_{-\infty}^{\infty} f_x(x) f_y(u-x) dx = \int_{-\infty}^{\infty} f_y(y) f_x(u-y) dy .$$

- Die Faltung zweier Poisson-Verteilungen mit den Parametern  $\lambda_1$  und  $\lambda_2$  ist eine Poisson-Verteilung mit dem Parameter  $\lambda_1 + \lambda_2$
- Die Faltung zweier Gauß-Verteilungen mit Mittelwerten  $a_1, a_2$  und Varianzen  $\sigma_1^2, \sigma_2^2$  ist eine Gauß-Verteilung mit Mittelwert  $a = a_1 + a_2$  und Varianz  $\sigma^2 = \sigma_1^2 + \sigma_2^2$
- Die Faltung zweier  $\chi^2$ -Verteilungen mit  $f_1$  und  $f_2$  Freiheitsgraden ist eine  $\chi^2$ -Verteilung mit  $f = f_1 + f_2$  Freiheitsgraden.

## Stichproben

*Grundgesamtheit:* unendliche (in Einzelfällen endliche) Menge von Elementen, die durch eine diskret oder kontinuierlich verteilte Zufallsvariable  $x$  beschrieben werden.

*(Zufällige) Stichprobe vom Umfang  $N$ :* Auswahl von  $N$  Elementen  $(x^{(1)}, x^{(2)}, \dots, x^{(N)})$  aus der Grundgesamtheit (Bedingungen für Zufälligkeit einer Stichprobe siehe Abschnitt 6.1).

*Verteilungsfunktion der Stichprobe:*  $W_n(x) = n_x/N$

Dabei ist  $n_x$  die Anzahl der Elemente in der Stichprobe mit  $x < x$ .

*Stichprobenfunktion:* Beliebige Funktion der Elemente der Stichprobe

$$S = S(x^{(1)}, x^{(2)}, \dots, x^{(N)}) .$$

*Schätzfunktion, Schätzung:* Stichprobenfunktion, die zur Schätzung eines Parameters  $\lambda$  der Grundgesamtheit benutzt wird. Eine Schätzung ist *unverzerrt*, wenn  $E(S) = \lambda$  und *konsistent*, wenn

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \sigma(S) = 0 .$$

**Tafel H.4:** Stichproben aus verschiedenen Grundgesamtheiten.

	Stichprobe vom Umfang $n$ aus kontinuierlich verteilter Grundgesamtheit	Stichprobe von Umfang $n$ aus diskreter Grundgesamtheit vom Umfang $N$ . Variable der Grundgesamtheit ist $y$ , Variable der Stichprobe ist $x$
Mittelwert der Grundgesamtheit	$E(\mathbf{x}) = \hat{x}$	$\bar{y} = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N y_j$
Varianz der Grundgesamtheit	$\sigma^2(\mathbf{x})$	$\sigma^2(y) = \frac{1}{N-1} \sum_{j=1}^N (y_j - \bar{y})^2$
Stichprobenmittel	$\bar{\mathbf{x}} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \mathbf{x}_i$	$\bar{\mathbf{x}} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \mathbf{x}_i$
Varianz des Stichprobenmittels	$\sigma^2(\bar{\mathbf{x}}) = \frac{1}{n} \sigma^2(\mathbf{x})$	$\sigma^2(\bar{\mathbf{x}}) = \frac{\sigma^2(y)}{n} \left(1 - \frac{n}{N}\right)$
Varianz der Stichprobe	$\mathbf{s}^2 = \frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^n (\mathbf{x}_i - \bar{\mathbf{x}})^2$	$\mathbf{s}^2 = \frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^n (\mathbf{x}_i - \bar{\mathbf{x}})^2$

### Maximum-Likelihood-Methode

Eine Grundgesamtheit werde durch die Wahrscheinlichkeitsdichte  $f(\mathbf{x}, \lambda)$  beschrieben, wobei  $\lambda = (\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_p)$  ein Satz von Parametern ist. Wird eine Stichprobe  $\mathbf{x}^{(1)}, \mathbf{x}^{(2)}, \dots, \mathbf{x}^{(N)}$  entnommen, so hat sie die *Likelihood-Funktion*  $L = \prod_{j=1}^N f(\mathbf{x}^{(j)}, \lambda)$  und die *logarithmische Likelihood-Funktion*  $\ell = \ln L$ . Um die unbekannten Parameter  $\lambda$  aus der Stichprobe zu bestimmen, schreibt die Maximum-Likelihood-Methode vor, denjenigen Wert für  $\lambda$  zu wählen, für den  $L$  (oder  $\ell$ ) zum Maximum wird. Man muß also die *Likelihood-Gleichungen*  $\partial \ell / \partial \lambda_i = 0$ ;  $i = 1, 2, \dots, p$  oder (für nur einen Parameter)  $d\ell/d\lambda = \ell' = 0$  lösen.

*Information einer Stichprobe:*  $I(\lambda) = E(\ell'^2) = -E(\ell'')$

*Informationsungleichung:*  $\sigma^2(\mathbf{S}) \geq \{1 - B'(\lambda)\}^2 / I(\lambda)$

Dabei ist  $\mathbf{S}$  eine Schätzung für  $\lambda$ ,  $B(\lambda) = E(\mathbf{S}) - \lambda$  ihre Verzerrung.

Eine Schätzung hat *minimale Varianz*, wenn  $\ell' = A(\lambda)(\mathbf{S} - E(\mathbf{S}))$ , wobei  $A(\lambda)$  nicht von der Stichprobe abhängt.

Die Maximum-Likelihood-Schätzung  $\tilde{\lambda}$ , d. h., die Lösung der Likelihood-Gleichung ist *eindeutig* und *asymptotisch* (d. h. für  $N \rightarrow \infty$ ) *unverzerrt* und von *minimaler Va-*



rianz.

Die *asymptotische Form* der Likelihood-Funktion ist

$$L = \text{const} \cdot \exp\left(-\frac{(\lambda - \tilde{\lambda})^2}{2b^2}\right),$$

$$b^2 = \sigma^2(\tilde{\lambda}) = \frac{1}{E(\ell'^2(\tilde{\lambda}))} = -\frac{1}{E(\ell''(\tilde{\lambda}))}$$

für einen Parameter  $\lambda$  und

$$L = \text{const} \cdot \left\{ -\frac{1}{2}(\lambda - \tilde{\lambda})^T B(\lambda - \tilde{\lambda}) \right\}$$

mit der Kovarianzmatrix  $C = B^{-1}$  und

$$B_{ij} = -E\left(\frac{\partial^2 \ell}{\partial \lambda_i \partial \lambda_j}\right)_{\lambda=\tilde{\lambda}}$$

für mehrere Parameter.

## Prüfung von Hypothesen (Tests)

*Nullhypothese*  $H_0(\lambda = \lambda_0)$ : Annahme von bestimmten Werten für die Parameter  $\lambda$ , die eine Grundgesamtheit mit der Wahrscheinlichkeitsdichte  $f(\mathbf{x}, \lambda)$  bestimmen.

*Alternativhypothesen*  $H_1(\lambda = \lambda_1)$ ,  $H_2(\lambda = \lambda_2)$ , ...: Andere Möglichkeiten für  $\lambda$ , gegen die die Nullhypothese durch Betrachtung einer Stichprobe  $X = (\mathbf{x}^{(1)}, \mathbf{x}^{(2)}, \dots, \mathbf{x}^{(N)})$  aus der Grundgesamtheit zu prüfen ist.

Eine Hypothese ist *einfach*, wenn die Parameter vollständig bestimmt sind, z. B.  $H_0(\lambda_1 = 1, \lambda_2 = 5)$ , anderenfalls ist die *zusammengesetzt*, z. B.  $H_1(\lambda_1 = 2, \lambda_2 < 7)$ .

*Test* einer Hypothese  $H_0$  mit *Signifikanzniveau*  $\alpha$  bzw. *Konfidenzniveau*  $1 - \alpha$ :  $H_0$  wird verworfen, wenn  $X \in S_c$ . Dabei ist  $S_c$  eine *kritische Region* im Stichprobenraum und

$$P(X \in S_c | H_0) = \alpha.$$

*Fehler erster Art*: Rückweisung von  $H_0$ , obwohl  $H_0$  wahr ist. Die Wahrscheinlichkeit für diesen Fehler ist  $\alpha$ .

*Fehler zweiter Art*:  $H_0$  wird nicht verworfen, obwohl  $H_1$  wahr ist. Die Wahrscheinlichkeit für diesen Fehler ist  $P(X \notin S_c | H_1) = \beta$ .

*Mächtigkeit*sfunktion oder *Gütefunktion*:

$$M(S_c, \lambda) = P(X \in S_c | H) = P(X \in S_c | \lambda).$$

*Operationscharakteristik*:

$$L(S_c, \lambda) = 1 - M(S_c, \lambda).$$

*Bester Test* von  $H_0$  bezüglich  $H_1$  hat  $M(S_c, \lambda_1) = 1 - \beta = \max$ . Ein *gleichmäßig bester Test* ist ein bester Test bezüglich aller möglicher  $H_1$ .

**Tafel H.5:** Häufig benutzte statistische Tests über eine Stichprobe aus einer Normalverteilung mit Mittelwert  $\lambda$  und Varianz  $\sigma^2$ . (Fall 1:  $\sigma$  bekannt, Fall 2:  $\sigma$  unbekannt (Students Test), Fall 3:  $\chi^2$ -Test über die Varianz, Fall 4: Students Differenztest über zwei Stichproben von  $N_1$  bzw.  $N_2$ , zur Bedeutung von  $s_\Delta^2$  vgl. (8.3.19), Fall 5:  $F$ -Test über zwei Stichproben.)

Fall	Testfunktion	Nullhypothese	kritische Region der Testfunktion	Zahl der Freiheitsgrade
1	$T = \frac{\bar{x} - \lambda_0}{\sigma/\sqrt{N}},$ $\bar{x} = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N \mathbf{x}^{(j)}$	$\lambda = \lambda_0$ $\lambda \leq \lambda_0$ $\lambda \geq \lambda_0$	$ T  > \Omega(1 - \alpha/2)$ $T > \Omega(1 - \alpha)$ $T < \Omega(\alpha)$	—
2	$T = \frac{\bar{x} - \lambda_0}{s/\sqrt{N}},$ $S^2 = \frac{1}{N-1} \times \sum_{j=1}^N (\mathbf{x}^{(j)} - \bar{x})^2$	$\lambda = \lambda_0$ $\lambda \leq \lambda_0$ $\lambda \geq \lambda_0$	$ T  > t_{1-\alpha/2}$ $T > t_{1-\alpha}$ $T < -t_{1-\alpha} = t_\alpha$	$N - 1$
3	$T = (N - 1) \frac{s^2}{\sigma_0^2}$	$\sigma^2 = \sigma_0^2$ $\sigma^2 \leq \sigma_0^2$ $\sigma^2 \geq \sigma_0^2$	$\chi_{1-\alpha/2}^2 < T < \chi_{\alpha/2}^2$ $T > \chi_{1-\alpha}^2$ $T < \chi_\alpha^2$	$N - 1$
4	$T = \frac{\bar{x}_1 - \bar{x}_2}{s_\Delta}$	$\lambda_1 = \lambda_2$	$ T  > t_{1-\frac{1}{2}\alpha}$	$N_1 + N_2 - 2$
5	$T = s_1^2 / s_2^2,$ $s_i^2 = \frac{1}{N_i - 1} \times \sum_{j=1}^{N_i} (\mathbf{x}_i^{(j)} - \bar{x}_i)^2$	$\sigma_1^2 = \sigma_2^2$ $\sigma_1^2 \leq \sigma_2^2$ $\sigma_1^2 \geq \sigma_2^2$	$F_{1-\alpha/2} < T < F_{\alpha/2}$ $T > F_{1-\alpha}$ $T < F_\alpha$	$f_1 = N_1 - 1$ $f_2 = N_2 - 1$

Ein *unverzerrter Test* hat  $M(S_c, \lambda_1) \geq \alpha$  für alle möglichen  $H_1$ .

**Satz von NEYMAN und PEARSON:** Ein Test von  $H_0$  bezüglich  $H_1$  (beide Hypothesen einfach) unter Benutzung der kritischen Region  $S_c$  ist ein bester Test, wenn  $f(X|H_0)/f(X|H_1) \leq c$  für  $X \in S_c$  und  $\geq c$  für  $X \notin S_c$ , dabei ist  $c$  eine Konstante, die nur von  $\alpha$  abhängt.

*Testfunktion*  $T(X)$ : Skalare Funktion der Stichprobe  $X$ . Nach einer Abbildung  $X \rightarrow T(X)$ ,  $S_c(X) \rightarrow U$  kann die Frage  $X \in S_c$  auf  $T \in U$  umformuliert werden.

*Likelihood-Quotienten-Test*: Bezeichnet  $\omega$  die Region im Parameterraum, die der Nullhypothese  $H_0$  entspricht und  $\Omega$  den gesamten möglichen Parameterbereich, so wird die Testfunktion

$$T = f(x; \tilde{\lambda}^{(\Omega)}) / f(x; \tilde{\lambda}^{(\omega)})$$

benutzt. Dabei sind  $\tilde{\lambda}^{(\Omega)}$  und  $\tilde{\lambda}^{(\omega)}$  die Maximum-Likelihood-Schätzungen in den Bereichen  $\Omega$  bzw.  $H_0$  wird verworfen, wenn  $T > T_{1-\alpha}$  mit  $P(T > T_{1-\alpha} | H_0) = \int_{T_{1-\alpha}}^{\infty} g(T) dT = \alpha$ ;  $g(T)$  ist die bedingte Wahrscheinlichkeitsdichte von  $T$  zu gegebenem  $H_0$ .

*Satz von WILKS* (gilt bei schwachen Anforderungen an die Wahrscheinlichkeitsdichte der Grundgesamtheit): Legt  $H_0$   $p - r$  der insgesamt  $p$  Parameter fest, so folgt  $-2 \ln T$  ( $T$  ist die Likelihood-Quotienten-Test-Funktion) einer  $\chi^2$ -Verteilung mit  $f = p - r$  Freiheitsgraden im Grenzfall  $n \rightarrow \infty$ .

## $\chi^2$ -Test über die Güte einer Anpassung

*Hypothese*: Die  $N$  Meßwerte  $y_i$  mit den normalverteilten Meßfehlern  $\sigma_i$  werden durch vorgegebene Größen  $f_i$  beschrieben:

*Testfunktion*:  $T = \sum_{i=1}^N (y_i - f_i)^2 / \sigma_i^2$ .

*kritische Region*:  $T > \chi_{1-\alpha}^2$ .

*Zahl der Freiheitsgrade*:  $N$  (bzw.  $N - p$ ), falls noch  $p$  Parameter aus den Messungen gewonnen werden.

## Die Methode der kleinsten Quadrate

Gegeben ist ein Satz von  $m$  Gleichungen  $f_k(\mathbf{x}, \boldsymbol{\eta}) = 0$ ;  $k = 1, \dots, m$  die den  $r$ -Vektor der *Unbekannten*  $\mathbf{x} = (x_1, x_2, \dots, x_r)$  mit dem  $n$ -Vektor der *meßbaren Größen*  $\boldsymbol{\eta} = (\eta_1, \eta_2, \dots, \eta_n)$  verknüpfen. Anstelle der  $\boldsymbol{\eta}$  werden andere Größen  $\mathbf{y}$  gemessen, die von diesen durch die *Meßfehler*  $\boldsymbol{\varepsilon}$  abweichen, d. h.  $\mathbf{y} = \boldsymbol{\eta} + \boldsymbol{\varepsilon}$ . Die  $\boldsymbol{\varepsilon}$  werden als normal um Null verteilt angenommen. Dies wird durch die Kovarianzmatrix  $C_y = G_y^{-1}$  ausgedrückt. Um Lösungen  $\tilde{\mathbf{x}}, \tilde{\boldsymbol{\eta}}$  zu erhalten, werden die  $f_k$  für die *ersten Näherungen*  $\mathbf{x}_0, \boldsymbol{\eta}_0 = \mathbf{y}$  entwickelt. Nur die linearen Terme der Entwicklung werden berücksichtigt und zweite Näherungen  $\mathbf{x}_1 = \mathbf{x}_0 + \boldsymbol{\xi}$ ,  $\boldsymbol{\eta}_1 = \boldsymbol{\eta}_0 + \boldsymbol{\delta}$  berechnet. Das Verfahren wird iterativ wiederholt, bis bestimmte Konvergenzkriterien erfüllt sind, z. B., bis eine skalare Funktion  $M$  nicht weiter abnimmt. Sind die  $f_k$  in  $\mathbf{x}$  und  $\boldsymbol{\eta}$  linear, so ist nur ein Schritt nötig. Die Methode kann als ein Verfahren zur Minimierung von  $M$  verstanden werden. Die Funktion  $M$ , die zum Lösungswert gehört, hängt von den Meßfehlern ab. Sie ist eine Zufallsvariable und folgt einer  $\chi^2$ -Verteilung mit

$f = m - r$  Freiheitsgraden. Es kann daher ein  $\chi^2$ -Test zur Überprüfung der Güte der Lösung oder der Annahmen, besonders über  $C_y = G_y^{-1}$ , ausgeführt werden. Sind die  $\boldsymbol{\varepsilon}$  nicht normal, aber noch um Null symmetrisch verteilt, so hat die Lösung  $\tilde{\mathbf{x}}$  nach kleinsten Quadraten noch immer die kleinste Varianz, und es ist  $E(M) = m - r$  (Gauß–Markov-Theorem).

**Tafel H.6:** Kleinste Quadrate im allgemeinen Fall und im Fall bedingter Messungen.

	Allgemeiner Fall	Bedingte Messungen
Gleichungen	$f_k(\mathbf{x}, \boldsymbol{\eta}) = 0, k = 1, \dots, m$	$f_k(\boldsymbol{\eta}) = 0$
Erste Näherungen	$\mathbf{x}_0, \boldsymbol{\eta}_0 = \mathbf{y}$ $\mathbf{f} = A\boldsymbol{\xi} + B\boldsymbol{\delta} + \mathbf{c} + \dots$	$\boldsymbol{\eta}_0 = \mathbf{y}$ $\mathbf{f} = B\boldsymbol{\delta} + \mathbf{c} + \dots$
Gleichungen entwickelt	$\{A\}_{kl} = (\partial f_k / \partial x_l)_{\mathbf{x}_0, \boldsymbol{\eta}_0}$ $\{B\}_{kl} = (\partial f_k / \partial \eta_l)_{\mathbf{x}_0, \boldsymbol{\eta}_0}$ $\mathbf{c} = \mathbf{f}(\mathbf{x}_0, \boldsymbol{\eta}_0)$	$\{B\}_{kl} = (\partial f_k / \partial \eta_l)_{\boldsymbol{\eta}_0}$ $\mathbf{c} = \mathbf{f}(\boldsymbol{\eta}_0)$
Kovarianzmatrix der Messungen	$C_y = G_y^{-1}$	$C_y = G_y^{-1}$
Korrekturen	$\tilde{\boldsymbol{\xi}} = -(A^T G_B A)^{-1} A^T G_B \mathbf{c}$ $\tilde{\boldsymbol{\delta}} = -G_y^{-1} B^T G_B (A\tilde{\boldsymbol{\xi}} + \mathbf{c})$ $G_B = (B G_y^{-1} B^T)^{-1}$	$\tilde{\boldsymbol{\delta}} = -G_y^{-1} B^T G_B \mathbf{c}$ $G_B = (B G_y^{-1} B^T)^{-1}$
Nächster Schritt	$\mathbf{x}_1 = \mathbf{x}_0 + \tilde{\boldsymbol{\xi}}, \boldsymbol{\eta}_1 = \boldsymbol{\eta}_0 + \tilde{\boldsymbol{\delta}},$ neue Werte für $A, B, \mathbf{c}, \tilde{\boldsymbol{\xi}}, \tilde{\boldsymbol{\delta}}$	$\boldsymbol{\eta}_1 = \boldsymbol{\eta}_0 + \tilde{\boldsymbol{\delta}},$ neue Werte für $B, \mathbf{c}, \tilde{\boldsymbol{\delta}}$
Lösung (nach $s$ Schritten)	$\tilde{\mathbf{x}} = \mathbf{x}_{s-1} + \tilde{\boldsymbol{\xi}},$ $\tilde{\boldsymbol{\eta}} = \boldsymbol{\eta}_{s-1} + \tilde{\boldsymbol{\delta}},$ $\tilde{\boldsymbol{\varepsilon}} = \mathbf{y} - \tilde{\boldsymbol{\eta}}$	$\tilde{\boldsymbol{\eta}} = \boldsymbol{\eta}_{s-1} + \tilde{\boldsymbol{\delta}},$ $\tilde{\boldsymbol{\varepsilon}} = \mathbf{y} - \tilde{\boldsymbol{\eta}}$
Minimum-Funktion	$M = (B\tilde{\boldsymbol{\varepsilon}})^T G_B (B\tilde{\boldsymbol{\varepsilon}})$	$M = (B\tilde{\boldsymbol{\varepsilon}})^T G_B (B\tilde{\boldsymbol{\varepsilon}})$
Kovarianzmatrizen	$G_{\tilde{\mathbf{x}}}^{-1} = (A^T G_B A)^{-1}$ $G_{\tilde{\boldsymbol{\eta}}}^{-1} = G_y^{-1}$ $-G_y^{-1} B^T G_B B G_y^{-1}$ $+G_y^{-1} B^T G_B A (A^T G_B A)^{-1}$ $\times A^T G_B B G_y^{-1}$	$G_{\tilde{\boldsymbol{\eta}}}^{-1} = G_y^{-1}$ $-G_y^{-1} B^T G_B B G_y^{-1}$

**Tafel H.7:** Kleinste Quadrate für indirekte und direkte Messungen.

	Indirekte Messungen	Direkte Messungen verschiedener Genauigkeit
Gleichungen	$f_k = \eta_k - g_k(x) = 0$	$f_k = \eta_k - x$
Erste Näherungen	$\mathbf{x}_0, \boldsymbol{\eta}_0 = \mathbf{y}$	$x_0 = 0, \boldsymbol{\eta}_0 = \mathbf{y}$
Gleichungen entwickelt	$\mathbf{f} = A\tilde{\boldsymbol{\xi}} - \boldsymbol{\varepsilon} + \mathbf{c} + \dots$ $\{A\}_{kl} = \left(\frac{\partial f_k}{\partial x_l}\right)_{\mathbf{x}_0}$ $\mathbf{c} = \mathbf{y} - \mathbf{g}(\mathbf{x}_0)$	$\mathbf{f} = A\tilde{\boldsymbol{\xi}} + \boldsymbol{\varepsilon} + \mathbf{c}$ $A = - \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ \vdots \\ 1 \end{pmatrix}$ $\mathbf{c} = \mathbf{y}$ $C_y = G_y^{-1}$ $= \begin{pmatrix} \sigma_1^2 & & 0 \\ & \ddots & \\ 0 & & \sigma_n^2 \end{pmatrix}$
Kovarianzmatrix der Messungen	$C_y = G_y^{-1}$	
Korrekturen	$\tilde{\boldsymbol{\xi}} = -(A^T G_y A)^{-1} A^T G_y \mathbf{c}$	—
Nächster Schritt	$\mathbf{x}_1 = \mathbf{x}_0 + \tilde{\boldsymbol{\xi}},$ neue Werte für $A, \mathbf{c}, \tilde{\boldsymbol{\xi}}$	—
Lösung (nach $s$ Schritten)	$\tilde{\mathbf{x}} = \mathbf{x}_{s-1} + \tilde{\boldsymbol{\xi}},$ $\tilde{\boldsymbol{\varepsilon}} = A\tilde{\boldsymbol{\xi}} + \mathbf{c}$	$\tilde{\boldsymbol{\xi}} = \tilde{\mathbf{x}} = \frac{\sum_k y_k / \sigma_k^2}{\sum_k 1 / \sigma_k^2},$ $\tilde{\varepsilon}_k = y_k - \tilde{x}$
Minimum-Funktion	$M = \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}^T G_y \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}$	$M = \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}^T G_y \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}$
Kovarianzmatrizen	$G_{\tilde{\mathbf{x}}}^{-1} = (A^T G_y A)^{-1}$  $G_{\tilde{\boldsymbol{\eta}}}^{-1} = A(A^T G_y A)^T$	$G_{\tilde{\mathbf{x}}}^{-1} = \sigma^2(\tilde{\mathbf{x}})$ $= \left(\sum_k \frac{1}{\sigma_k^2}\right)^{-1}$ —

## Varianzanalyse

Eine Zufallsvariable (Messung)  $x$  wird unter dem Einfluß von externen Variablen untersucht. Man versucht durch geeignet konstruierte  $F$ -Tests zu entscheiden, ob  $x$  von den *externen Variablen* unabhängig ist. In Abhängigkeit von der Anzahl der externen Variablen und den Annahmen über ihren Einfluß werden verschiedene *Modelle* konstruiert.

Ein einfaches Modell ist die *gekreuzte zweifache Klassifizierung* mit mehrfachen Beobachtungen. Zwei externe Variable veranlassen die Klassifizierung der Beobachtungen in Klassen  $A_i, B_j$  ( $i = 1, 2, \dots, I; j = 1, 2, \dots, J$ ). Jede Klasse  $A_i, B_j$  enthält  $K$  Beobachtungen  $x_{ijk}$  ( $k = 1, 2, \dots, K$ ). Man nimmt das Modell

$$x_{ijk} = \mu + a_i + b_j + (ab)_{ij} + \varepsilon_{ijk}$$

an, wobei  $\varepsilon_{ijk}$ , der Fehler der Beobachtung, als normalverteilt um Null angenommen wird und  $a_i, b_j$  und  $(ab)_{ij}$  die Einflüsse der *Klassifizierungen* in  $A, B$  und ihrer *Wechselwirkungen* sind. Drei *Nullhypothesen*

$$H_0^{(A)}(a_i = 0, i = 1, \dots, I), \quad H_0^{(B)}(b_j = 0, j = 1, \dots, J),$$

$$H_0^{(AB)}((ab)_{ij} = 0, i = 1, \dots, I, j = 1, \dots, J)$$

können mit Hilfe der Quotienten  $F^{(A)}, F^{(B)}, F^{(AB)}$  getestet werden. Sie sind in einer Varianztafel zusammengefaßt. Andere Modelle siehe Kapitel 11.

## Polynomiale Regression

*Aufgabe:* Die wahren Werte  $\eta(t)$ , von denen  $N$  Messungen  $y_i(t_i)$  mit normalverteilten Meßfehlern  $\sigma_i$  vorliegen, sollen durch ein *Polynom* in der *kontrollierten Variablen*  $t$  vom Grad  $r - 1$  beschrieben werden. Anstelle von  $\eta(t) = x_1 + x_2 t + \dots + x_r t^{r-1}$  schreibt man

$$\eta(t) = x_1 f_1(t) + x_2 f_2(t) + \dots + x_r f_r(t).$$

Dabei sind die  $f_j$  *orthogonale Polynome* vom Grad  $j - 1$ ,

$$f_j(t) = \sum_{k=1}^j b_{jk} t^{k-1},$$

deren Koeffizienten  $b_{jk}$  aus den *Orthogonalitätsbedingungen*

$$\sum_{i=1}^N g_i f_j(t_i) f_k(t_i) = \delta_{jk}, \quad g_i = 1/\sigma_i^2,$$

bestimmt werden. Die *Unbekannten*  $x_j$  werden nach kleinsten Quadraten aus

$$\sum_{i=1}^N g_i \left\{ y_i(t_i) - \sum_{j=1}^r x_j f_j(t_i) \right\}^2 = \min$$

gewonnen. Die Kovarianzmatrix der  $x_j$  ist die  $r$ -dimensionale Einheitsmatrix.

## Zeitreihenanalyse

Es ist eine Reihe von *Meßwerten*  $y_i(t_i)$ ,  $i = 1, \dots, n$  gegeben, die (auf unbekannte Weise) von einer *kontrollierten Variablen*  $t$  (gewöhnlich der Zeit) abhängt. Man faßt die  $y_i$  als Summe eines *Trends*  $\eta_i$  und eines *Fehlers*  $\varepsilon_i$  auf,  $y_i = \eta_i + \varepsilon_i$ . Die Messungen werden in gleichbleibenden Zeitabständen durchgeführt, d. h.  $t_i - t_{i-1} = \text{const.}$  Um die Fehler  $\varepsilon_i$  zu vermindern, wird für jedes  $t_i$  ( $i > k, i \leq n - k$ ) ein *gleitender Mittelwert* gebildet, indem man an die symmetrisch um  $i$  liegenden  $2k + 1$  Messungen ein Polynom vom Grade  $\ell$  anpaßt. Das Ergebnis der Anpassung am Punkt  $t_i$  ist der gleitende Mittelwert

$$\tilde{\eta}_0(i) = a_{-k}y_{i-k} + a_{-k+1}y_{i-k+1} + \dots + a_k y_{i+k} .$$

Die Koeffizienten  $a_{-k}, \dots, a_k$  sind für niedrige Werte von  $k$  und  $\ell$  in Tafel 13.1 angegeben. Für die Anfangs- und Endpunkte  $t_i$  ( $i < k, i > n - k$ ) werden die Ergebnisse der Anpassung auch außerhalb des Mittelpunkts der  $2k + 1$  Messungen benutzt.

# I Statistische Tafeln

**Tafel I.1:** Quantile  $\lambda_P(k)$  der Poisson-Verteilung.

$P = \sum_{n=0}^{k-1} e^{-\lambda_P} \lambda_P^n / n!$							
$k$	$P$						
	0.0005	0.0010	0.0050	0.0100	0.0250	0.0500	0.1000
1	7.601	6.908	5.298	4.605	3.689	2.996	2.303
2	9.999	9.233	7.430	6.638	5.572	4.744	3.890
3	12.051	11.229	9.274	8.406	7.225	6.296	5.322
4	13.934	13.062	10.977	10.045	8.767	7.754	6.681
5	15.710	14.794	12.594	11.605	10.242	9.154	7.994
6	17.411	16.455	14.150	13.108	11.668	10.513	9.275
7	19.055	18.062	15.660	14.571	13.059	11.842	10.532
8	20.654	19.626	17.134	16.000	14.423	13.148	11.771
9	22.217	21.156	18.578	17.403	15.763	14.435	12.995
10	23.749	22.657	19.998	18.783	17.085	15.705	14.206
11	25.256	24.134	21.398	20.145	18.390	16.962	15.407
12	26.739	25.589	22.779	21.490	19.682	18.208	16.598
13	28.203	27.026	24.145	22.821	20.962	19.443	17.782
14	29.650	28.446	25.497	24.139	22.230	20.669	18.958
15	31.081	29.852	26.836	25.446	23.490	21.886	20.128
16	32.498	31.244	28.164	26.743	24.740	23.097	21.292
17	33.902	32.624	29.482	28.030	25.983	24.301	22.452
18	35.294	33.993	30.791	29.310	27.219	25.499	23.606
19	36.676	35.351	32.091	30.581	28.448	26.692	24.756
20	38.047	36.701	33.383	31.845	29.671	27.879	25.903
21	39.410	38.042	34.668	33.103	30.888	29.062	27.045
22	40.764	39.375	35.946	34.355	32.101	30.240	28.184
23	42.110	40.700	37.218	35.601	33.308	31.415	29.320
24	43.449	42.019	38.484	36.841	34.511	32.585	30.453
25	44.780	43.330	39.745	38.077	35.710	33.752	31.584



**Tafel I.1:** (Fortsetzung)

$P = \sum_{n=0}^{k-1} e^{-\lambda_P} \lambda_P^n / n!$							
$k$	$P$						
	0.9000	0.9500	0.9750	0.9900	0.9950	0.9990	0.9995
1	0.105	0.051	0.025	0.010	0.005	0.001	0.001
2	0.532	0.355	0.242	0.149	0.103	0.045	0.032
3	1.102	0.818	0.619	0.436	0.338	0.191	0.150
4	1.745	1.366	1.090	0.823	0.672	0.429	0.355
5	2.433	1.970	1.623	1.279	1.078	0.739	0.632
6	3.152	2.613	2.202	1.785	1.537	1.107	0.967
7	3.895	3.285	2.814	2.330	2.037	1.520	1.348
8	4.656	3.981	3.454	2.906	2.571	1.971	1.768
9	5.432	4.695	4.115	3.507	3.132	2.452	2.220
10	6.221	5.425	4.795	4.130	3.717	2.961	2.699
11	7.021	6.169	5.491	4.771	4.321	3.491	3.202
12	7.829	6.924	6.201	5.428	4.943	4.042	3.726
13	8.646	7.690	6.922	6.099	5.580	4.611	4.269
14	9.470	8.464	7.654	6.782	6.231	5.195	4.828
15	10.300	9.246	8.395	7.477	6.893	5.794	5.402
16	11.135	10.036	9.145	8.181	7.567	6.405	5.990
17	11.976	10.832	9.903	8.895	8.251	7.028	6.590
18	12.822	11.634	10.668	9.616	8.943	7.662	7.201
19	13.671	12.442	11.439	10.346	9.644	8.306	7.822
20	14.525	13.255	12.217	11.082	10.353	8.958	8.453
21	15.383	14.072	12.999	11.825	11.069	9.619	9.093
22	16.244	14.894	13.787	12.574	11.792	10.288	9.741
23	17.108	15.719	14.580	13.329	12.521	10.964	10.397
24	17.975	16.549	15.377	14.089	13.255	11.647	11.060
25	18.844	17.382	16.179	14.853	13.995	12.337	11.730

**Tafel I.2:** Normalverteilung  $\psi_0(x)$ .

$P(x < x) = \psi_0(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^x \exp(-x^2/2) dx$										
$x$	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
-3.0	.001	.001	.001	.001	.001	.001	.001	.001	.001	.001
-2.9	.002	.002	.002	.002	.002	.002	.002	.001	.001	.001
-2.8	.003	.002	.002	.002	.002	.002	.002	.002	.002	.002
-2.7	.003	.003	.003	.003	.003	.003	.003	.003	.003	.003
-2.6	.005	.005	.004	.004	.004	.004	.004	.004	.004	.004
-2.5	.006	.006	.006	.006	.006	.005	.005	.005	.005	.005
-2.4	.008	.008	.008	.008	.007	.007	.007	.007	.007	.006
-2.3	.011	.010	.010	.010	.010	.009	.009	.009	.009	.008
-2.2	.014	.014	.013	.013	.013	.012	.012	.012	.011	.011
-2.1	.018	.017	.017	.017	.016	.016	.015	.015	.015	.014
-2.0	.023	.022	.022	.021	.021	.020	.020	.019	.019	.018
-1.9	.029	.028	.027	.027	.026	.026	.025	.024	.024	.023
-1.8	.036	.035	.034	.034	.033	.032	.031	.031	.030	.029
-1.7	.045	.044	.043	.042	.041	.040	.039	.038	.038	.037
-1.6	.055	.054	.053	.052	.051	.049	.048	.047	.046	.046
-1.5	.067	.066	.064	.063	.062	.061	.059	.058	.057	.056
-1.4	.081	.079	.078	.076	.075	.074	.072	.071	.069	.068
-1.3	.097	.095	.093	.092	.090	.089	.087	.085	.084	.082
-1.2	.115	.113	.111	.109	.107	.106	.104	.102	.100	.099
-1.1	.136	.133	.131	.129	.127	.125	.123	.121	.119	.117
-1.0	.159	.156	.154	.152	.149	.147	.145	.142	.140	.138
-0.9	.184	.181	.179	.176	.174	.171	.169	.166	.164	.161
-0.8	.212	.209	.206	.203	.200	.198	.195	.192	.189	.187
-0.7	.242	.239	.236	.233	.230	.227	.224	.221	.218	.215
-0.6	.274	.271	.268	.264	.261	.258	.255	.251	.248	.245
-0.5	.309	.305	.302	.298	.295	.291	.288	.284	.281	.278
-0.4	.345	.341	.337	.334	.330	.326	.323	.319	.316	.312
-0.3	.382	.378	.374	.371	.367	.363	.359	.356	.352	.348
-0.2	.421	.417	.413	.409	.405	.401	.397	.394	.390	.386
-0.1	.460	.456	.452	.448	.444	.440	.436	.433	.429	.425
0.0	.500	.496	.492	.488	.484	.480	.476	.472	.468	.464

**Tafel I.2:** (*Fortsetzung*)

[illegible]



**Tafel I.4:** Quantile  $x_P = \Omega(P)$  der Normalverteilung.

$P = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{x_P} \exp(-x^2/2) dx$										
$P$	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
0.0	$-\infty$	-2.33	-2.05	-1.88	-1.75	-1.64	-1.55	-1.48	-1.41	-1.34
0.1	-1.28	-1.23	-1.17	-1.13	-1.08	-1.04	-0.99	-0.95	-0.92	-0.88
0.2	-0.84	-0.81	-0.77	-0.74	-0.71	-0.67	-0.64	-0.61	-0.58	-0.55
0.3	-0.52	-0.50	-0.47	-0.44	-0.41	-0.39	-0.36	-0.33	-0.31	-0.28
0.4	-0.25	-0.23	-0.20	-0.18	-0.15	-0.13	-0.10	-0.08	-0.05	-0.03
0.5	0.00	0.03	0.05	0.08	0.10	0.13	0.15	0.18	0.20	0.23
0.6	0.25	0.28	0.31	0.33	0.36	0.39	0.41	0.44	0.47	0.50
0.7	0.52	0.55	0.58	0.61	0.64	0.67	0.71	0.74	0.77	0.81
0.8	0.84	0.88	0.92	0.95	0.99	1.04	1.08	1.13	1.17	1.23
0.9	1.28	1.34	1.41	1.48	1.55	1.64	1.75	1.88	2.05	2.33

**Tafel I.5:** Quantile  $x'_p = \Omega'(P)$  der Normalverteilung.

$P = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-x'_p}^{x'_p} \exp(-x^2/2) dx$										
$P$	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
0.0	0.000	0.013	0.025	0.038	0.050	0.063	0.075	0.088	0.100	0.113
0.1	0.126	0.138	0.151	0.164	0.176	0.189	0.202	0.215	0.228	0.240
0.2	0.253	0.266	0.279	0.292	0.305	0.319	0.332	0.345	0.358	0.372
0.3	0.385	0.399	0.412	0.426	0.440	0.454	0.468	0.482	0.496	0.510
0.4	0.524	0.539	0.553	0.568	0.583	0.598	0.613	0.628	0.643	0.659
0.5	0.674	0.690	0.706	0.722	0.739	0.755	0.772	0.789	0.806	0.824
0.6	0.842	0.860	0.878	0.896	0.915	0.935	0.954	0.974	0.994	1.015
0.7	1.036	1.058	1.080	1.103	1.126	1.150	1.175	1.200	1.227	1.254
0.8	1.282	1.311	1.341	1.372	1.405	1.440	1.476	1.514	1.555	1.598
0.9	1.645	1.695	1.751	1.812	1.881	1.960	2.054	2.170	2.326	2.576
$P$	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
0.90	1.645	1.650	1.655	1.660	1.665	1.670	1.675	1.680	1.685	1.690
0.91	1.695	1.701	1.706	1.711	1.717	1.722	1.728	1.734	1.739	1.745
0.92	1.751	1.757	1.762	1.768	1.774	1.780	1.787	1.793	1.799	1.805
0.93	1.812	1.818	1.825	1.832	1.838	1.845	1.852	1.859	1.866	1.873
0.94	1.881	1.888	1.896	1.903	1.911	1.919	1.927	1.935	1.943	1.951
0.95	1.960	1.969	1.977	1.986	1.995	2.005	2.014	2.024	2.034	2.044
0.96	2.054	2.064	2.075	2.086	2.097	2.108	2.120	2.132	2.144	2.157
0.97	2.170	2.183	2.197	2.212	2.226	2.241	2.257	2.273	2.290	2.308
0.98	2.326	2.346	2.366	2.387	2.409	2.432	2.457	2.484	2.512	2.543
0.99	2.576	2.612	2.652	2.697	2.748	2.807	2.878	2.968	3.090	3.291
$P$	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
0.990	2.576	2.579	2.583	2.586	2.590	2.594	2.597	2.601	2.605	2.608
0.991	2.612	2.616	2.620	2.624	2.628	2.632	2.636	2.640	2.644	2.648
0.992	2.652	2.656	2.661	2.665	2.669	2.674	2.678	2.683	2.687	2.692
0.993	2.697	2.702	2.706	2.711	2.716	2.721	2.727	2.732	2.737	2.742
0.994	2.748	2.753	2.759	2.765	2.770	2.776	2.782	2.788	2.794	2.801
0.995	2.807	2.814	2.820	2.827	2.834	2.841	2.848	2.855	2.863	2.870
0.996	2.878	2.886	2.894	2.903	2.911	2.920	2.929	2.938	2.948	2.958
0.997	2.968	2.978	2.989	3.000	3.011	3.023	3.036	3.048	3.062	3.076
0.998	3.090	3.105	3.121	3.138	3.156	3.175	3.195	3.216	3.239	3.264
0.999	3.291	3.320	3.353	3.390	3.432	3.481	3.540	3.615	3.719	3.891

**Tafel I.6:**  $\chi^2$ -Verteilung  $F(\chi^2)$ .

$F(\chi^2) = \int_0^{\chi^2} f(\chi^2; f) d\chi^2$										
$\chi^2$	$f$									
	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
0.1	0.248	0.049	0.008	0.001	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
0.2	0.345	0.095	0.022	0.005	0.001	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
0.3	0.416	0.139	0.040	0.010	0.002	0.001	0.000	0.000	0.000	0.000
0.4	0.473	0.181	0.060	0.018	0.005	0.001	0.000	0.000	0.000	0.000
0.5	0.520	0.221	0.081	0.026	0.008	0.002	0.001	0.000	0.000	0.000
0.6	0.561	0.259	0.104	0.037	0.012	0.004	0.001	0.000	0.000	0.000
0.7	0.597	0.295	0.127	0.049	0.017	0.006	0.002	0.000	0.000	0.000
0.8	0.629	0.330	0.151	0.062	0.023	0.008	0.003	0.001	0.000	0.000
0.9	0.657	0.362	0.175	0.075	0.030	0.011	0.004	0.001	0.000	0.000
1.0	0.683	0.393	0.199	0.090	0.037	0.014	0.005	0.002	0.001	0.000
2.0	0.843	0.632	0.428	0.264	0.151	0.080	0.040	0.019	0.009	0.004
3.0	0.917	0.777	0.608	0.442	0.300	0.191	0.115	0.066	0.036	0.019
4.0	0.954	0.865	0.739	0.594	0.451	0.323	0.220	0.143	0.089	0.053
5.0	0.975	0.918	0.828	0.713	0.584	0.456	0.340	0.242	0.166	0.109
6.0	0.986	0.950	0.888	0.801	0.694	0.577	0.460	0.353	0.260	0.185
7.0	0.992	0.970	0.928	0.864	0.779	0.679	0.571	0.463	0.363	0.275
8.0	0.995	0.982	0.954	0.908	0.844	0.762	0.667	0.567	0.466	0.371
9.0	0.997	0.989	0.971	0.939	0.891	0.826	0.747	0.658	0.563	0.468
10.0	0.998	0.993	0.981	0.960	0.925	0.875	0.811	0.735	0.650	0.560
11.0	0.999	0.996	0.988	0.973	0.949	0.912	0.861	0.798	0.724	0.642
12.0	0.999	0.998	0.993	0.983	0.965	0.938	0.899	0.849	0.787	0.715
13.0	1.000	0.998	0.995	0.989	0.977	0.957	0.928	0.888	0.837	0.776
14.0	1.000	0.999	0.997	0.993	0.984	0.970	0.949	0.918	0.878	0.827
15.0	1.000	0.999	0.998	0.995	0.990	0.980	0.964	0.941	0.909	0.868
16.0	1.000	1.000	0.999	0.997	0.993	0.986	0.975	0.958	0.933	0.900
17.0	1.000	1.000	0.999	0.998	0.996	0.991	0.983	0.970	0.951	0.926
18.0	1.000	1.000	1.000	0.999	0.997	0.994	0.988	0.979	0.965	0.945
19.0	1.000	1.000	1.000	0.999	0.998	0.996	0.992	0.985	0.975	0.960
20.0	1.000	1.000	1.000	1.000	0.999	0.997	0.994	0.990	0.982	0.971

**Tafel I.7:** Quantile  $\chi_P^2$  der  $\chi^2$ -Verteilung.

$P = \int_0^{\chi_P^2} f(\chi^2; f) d\chi^2$					
$f$	0.900	0.950	0.990	0.995	0.999
1	2.706	3.841	6.635	7.879	10.828
2	4.605	5.991	9.210	10.597	13.816
3	6.251	7.815	11.345	12.838	16.266
4	7.779	9.488	13.277	14.860	18.467
5	9.236	11.070	15.086	16.750	20.515
6	10.645	12.592	16.812	18.548	22.458
7	12.017	14.067	18.475	20.278	24.322
8	13.362	15.507	20.090	21.955	26.124
9	14.684	16.919	21.666	23.589	27.877
10	15.987	18.307	23.209	25.188	29.588
11	17.275	19.675	24.725	26.757	31.264
12	18.549	21.026	26.217	28.300	32.909
13	19.812	22.362	27.688	29.819	34.528
14	21.064	23.685	29.141	31.319	36.123
15	22.307	24.996	30.578	32.801	37.697
16	23.542	26.296	32.000	34.267	39.252
17	24.769	27.587	33.409	35.718	40.790
18	25.989	28.869	34.805	37.156	42.312
19	27.204	30.144	36.191	38.582	43.820
20	28.412	31.410	37.566	39.997	45.315
30	40.256	43.773	50.892	53.672	59.703
40	51.805	55.758	63.691	66.766	73.402
50	63.167	67.505	76.154	79.490	86.661
60	74.397	79.082	88.379	91.952	99.607
70	85.527	90.531	100.425	104.215	112.317
80	80.000	101.879	112.329	116.321	124.839
90	107.565	113.145	124.116	128.299	137.208
100	118.498	124.342	135.807	140.169	149.449



**Tafel I.8:** Quantile  $F_p$  der  $F$ -Verteilung.

$0.900 = P = \int_0^{F_p} f(F; f_1, f_2) dF$										
$f_2$	$f_1$									
	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
1	39.86	49.50	53.59	55.83	57.24	58.20	58.91	59.44	59.86	60.19
2	8.526	9.000	9.162	9.243	9.293	9.326	9.349	9.367	9.381	9.392
3	5.538	5.462	5.391	5.343	5.309	5.285	5.266	5.252	5.240	5.230
4	4.545	4.325	4.191	4.107	4.051	4.010	3.979	3.955	3.936	3.920
5	4.060	3.780	3.619	3.520	3.453	3.405	3.368	3.339	3.316	3.297
6	3.776	3.463	3.289	3.181	3.108	3.055	3.014	2.983	2.958	2.937
7	3.589	3.257	3.074	2.961	2.883	2.827	2.785	2.752	2.725	2.703
8	3.458	3.113	2.924	2.806	2.726	2.668	2.624	2.589	2.561	2.538
9	3.360	3.006	2.813	2.693	2.611	2.551	2.505	2.469	2.440	2.416
10	3.285	2.924	2.728	2.605	2.522	2.461	2.414	2.377	2.347	2.323

$0.950 = P = \int_0^{F_p} f(F; f_1, f_2) dF$										
$f_2$	$f_1$									
	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
1	161.4	199.5	215.7	224.6	230.2	234.0	236.8	238.9	240.5	241.9
2	18.51	19.00	19.16	19.25	19.30	19.33	19.35	19.37	19.38	19.40
3	10.13	9.552	9.277	9.117	9.013	8.941	8.887	8.845	8.812	8.786
4	7.709	6.944	6.591	6.388	6.256	6.163	6.094	6.041	5.999	5.964
5	6.608	5.786	5.409	5.192	5.050	4.950	4.876	4.818	4.772	4.735
6	5.987	5.143	4.757	4.534	4.387	4.284	4.207	4.147	4.099	4.060
7	5.591	4.737	4.347	4.120	3.972	3.866	3.787	3.726	3.677	3.637
8	5.318	4.459	4.066	3.838	3.687	3.581	3.500	3.438	3.388	3.347
9	5.117	4.256	3.863	3.633	3.482	3.374	3.293	3.230	3.179	3.137
10	4.965	4.103	3.708	3.478	3.326	3.217	3.135	3.072	3.020	2.978

**Tafel I.8:** (Fortsetzung)

$0.975 = P = \int_0^{F_p} f(F; f_1, f_2) dF$										
$f_2$	$f_1$									
	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
1	647.8	799.5	864.2	899.6	921.8	937.1	948.2	956.7	963.3	968.6
2	38.51	39.00	39.17	39.25	39.30	39.33	39.36	39.37	39.39	39.40
3	17.44	16.04	15.44	15.10	14.88	14.73	14.62	14.54	14.47	14.42
4	12.22	10.65	9.979	9.605	9.364	9.197	9.074	8.980	8.905	8.844
5	10.01	8.434	7.764	7.388	7.146	6.978	6.853	6.757	6.681	6.619
6	8.813	7.260	6.599	6.227	5.988	5.820	5.695	5.600	5.523	5.461
7	8.073	6.542	5.890	5.523	5.285	5.119	4.995	4.899	4.823	4.761
8	7.571	6.059	5.416	5.053	4.817	4.652	4.529	4.433	4.357	4.295
9	7.209	5.715	5.078	4.718	4.484	4.320	4.197	4.102	4.026	3.964
10	6.937	5.456	4.826	4.468	4.236	4.072	3.950	3.855	3.779	3.717

$0.990 = P = \int_0^{F_p} f(F; f_1, f_2) dF$										
$f_2$	$f_1$									
	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
1	4052.	5000.	5403.	5625.	5764.	5859.	5928.	5981.	6022.	6056.
2	98.50	99.00	99.17	99.25	99.30	99.33	99.36	99.37	99.39	99.40
3	34.12	30.82	29.46	28.71	28.24	27.91	27.67	27.49	27.35	27.23
4	21.20	18.00	16.69	15.98	15.52	15.21	14.98	14.80	14.66	14.55
5	16.26	13.27	12.06	11.39	10.97	10.67	10.46	10.29	10.16	10.05
6	13.75	10.92	9.780	9.148	8.746	8.466	8.260	8.102	7.976	7.874
7	12.25	9.547	8.451	7.847	7.460	7.191	6.993	6.840	6.719	6.620
8	11.26	8.649	7.591	7.006	6.632	6.371	6.178	6.029	5.911	5.814
9	10.56	8.022	6.992	6.422	6.057	5.802	5.613	5.467	5.351	5.257
10	10.04	7.559	6.552	5.994	5.636	5.386	5.200	5.057	4.942	4.849

**Tafel I.9:** Quantile  $t_P$  der Student-Verteilung.

$P = \int_{-\infty}^{t_P} f(t; f) dt$							
$f$	$P$						
	0.9000	0.9500	0.9750	0.9900	0.9950	0.9990	0.9995
1	3.078	6.314	12.706	31.821	63.657	318.309	636.619
2	1.886	2.920	4.303	6.965	9.925	22.327	31.599
3	1.638	2.353	3.182	4.541	5.841	10.215	12.924
4	1.533	2.132	2.776	3.747	4.604	7.173	8.610
5	1.476	2.015	2.571	3.365	4.032	5.893	6.869
6	1.440	1.943	2.447	3.143	3.707	5.208	5.959
7	1.415	1.895	2.365	2.998	3.499	4.785	5.408
8	1.397	1.860	2.306	2.896	3.355	4.501	5.041
9	1.383	1.833	2.262	2.821	3.250	4.297	4.781
10	1.372	1.812	2.228	2.764	3.169	4.144	4.587
11	1.363	1.796	2.201	2.718	3.106	4.025	4.437
12	1.356	1.782	2.179	2.681	3.055	3.930	4.318
13	1.350	1.771	2.160	2.650	3.012	3.852	4.221
14	1.345	1.761	2.145	2.624	2.977	3.787	4.140
15	1.341	1.753	2.131	2.602	2.947	3.733	4.073
16	1.337	1.746	2.120	2.583	2.921	3.686	4.015
17	1.333	1.740	2.110	2.567	2.898	3.646	3.965
18	1.330	1.734	2.101	2.552	2.878	3.610	3.922
19	1.328	1.729	2.093	2.539	2.861	3.579	3.883
20	1.325	1.725	2.086	2.528	2.845	3.552	3.850
30	1.310	1.697	2.042	2.457	2.750	3.385	3.646
40	1.303	1.684	2.021	2.423	2.704	3.307	3.551
50	1.299	1.676	2.009	2.403	2.678	3.261	3.496
60	1.296	1.671	2.000	2.390	2.660	3.232	3.460
70	1.294	1.667	1.994	2.381	2.648	3.211	3.435
80	1.292	1.664	1.990	2.374	2.639	3.195	3.416
90	1.291	1.662	1.987	2.368	2.632	3.183	3.402
100	1.290	1.660	1.984	2.364	2.626	3.174	3.390
200	1.286	1.653	1.972	2.345	2.601	3.131	3.340
500	1.283	1.648	1.965	2.334	2.586	3.107	3.310
1000	1.282	1.646	1.962	2.330	2.581	3.098	3.300

# Register der Programme\*

AnalysisOfVariance, 308, 309  
AuxDer, 420  
AuxDri, 222, 227, 421  
AuxGrad, 421  
AuxHesse, 421  
AuxJInputGroup, 420, 421  
AuxJNumberInput, 420, 421  
AuxJRButtonGroup, 420, 421  
AuxZero, 419, 421  
DatanFrame, 421  
DatanGraphics, 114, 232, 422, 423  
DatanMatrix, 345, 396  
DatanRandom, 65  
DatanUserFunction, 222, 228, 248, 265  
DatanVector, 345, 396  
E10Mtx, 400  
E1Anova, 309  
E1Distrib, 103  
E1Gr, 434  
E1Lsq, 254  
E1MaxLike, 167, 419  
E1Min, 296  
E1Mtx, 396  
E1Random, 66  
E1Reg, 318  
E1Sample, 145  
E1TimSer, 329  
E1est, 198  
E2Anova, 309  
E2Distrib, 103  
E2Gr, 435  
E2Lsq, 254  
E2MaxLike, 167  
E2Min, 296  
E2Mtx, 397  
E2Random, 66  
E2Reg, 319  
E2Sample, 145, 434  
E2Test, 199  
E2TimSer, 329  
E3Distrib, 103  
E3Gr, 435  
E3Lsq, 255  
E3Min, 297  
E3Mtx, 397  
E3Random, 66  
E3Reg, 319  
E3Sample, 146, 434  
E3Test, 199  
E4Gr, 435  
E4Lsq, 255  
E4Min, 297  
E4Mtx, 397  
E4Random, 66  
E4Reg, 319  
E4Sample, 146  
E5Gr, 435  
E5Lsq, 256  
E5Mtx, 398  
E5Sample, 147  
E6Gr, 434, 436  
E6Lsq, 256  
E6Mtx, 398  
E6Sample, 147  
E7Gr, 434, 436  
E7Lsq, 256  
E7Mtx, 398  
E7Sample, 147  
E8Gr, 434, 437

---

\*Die kursiv gesetzten Zahlen beziehen sich auf den separaten Anhang.

- E8Lsq, 256
- E8Mtx, 399
- E9Lsq, 256
- E9Mtx, 399
- FunctionOnLine, 265, 295
- FunctionsDemo, 408, 416
- Gamma, 416, 434
- GraphicsWith2DScatterDiagram, 117, 146, 434
- GraphicsWithDataPointsAndPolyline, 434
- GraphicsWithDataPointsAndMultiplePolylines, 434
- GraphicsWithHistogramAndPolyline, 434
- GraphicsWithHistogram, 115, 145, 434
- Histogram, 114, 144, 145
- LsqAsg, 251, 254, 256
- LsqAsm, 234, 254
- LsqAsn, 234, 254, 256
- LsqGen, 246, 248, 254, 256
- LsqLin, 216, 221, 253, 254
- LsqMar, 226, 234, 254, 255
- LsqNon, 226, 234, 253, 255
- LsqPol, 214, 253, 254
- MinAsy, 288, 295, 297
- MinCjg, 281, 295, 296
- MinCombined, 270, 271, 295
- MinCov, 288, 295, 296
- MinDir, 271, 295
- MinEnclose, 266, 271, 295
- MinMar, 285, 295, 296
- MinParab, 263, 266, 295
- MinPow, 279, 295, 296
- MinQdr, 283, 295, 296
- MinSim, 274, 295, 296
- Regression, 318, 319
- S1Anova, 476
- S1Distrib, 464
- S1Lsq, 468
- S1MaxLike, 466
- S1Min, 475
- S1Random, 462
- S1Reg, 477
- S1TimSer, 478
- S2Anova, 476
- S2Distrib, 465
- S2Lsq, 469
- S2MaxLike, 466
- S2Min, 476
- S2Random, 463
- S2Reg, 477
- S2TimSer, 479
- S3Lsq, 470
- S3Random, 464
- S4Lsq, 472
- S5Lsq, 472
- S6Lsq, 474
- S7Lsq, 474
- Sample, 111, 144, 145
- SmallSample, 140, 142, 144
- Smallsample, 146, 147
- StatFunct, 408, 419
- TimeSeries, 329

# Register\*

- Abbildung, 349
- Ableitung, logarithmische, 151
- Abzählung, 133
- Alternativhypothese, 180, 487
- Annahmewahrscheinlichkeit, 181
- Anpassung
  - einer beliebigen linearen Funktion, 216
  - einer Breit–Wigner-Funktion, 471, 473
  - einer Exponentialfunktion, 223
  - einer Gauß-Funktion, 222, 255
  - einer Geraden, 210
    - an Punkte mit Meßfehlern in Abszisse und Ordinate, 256
  - einer nichtlinearen Funktion, 220
  - einer Potenzfunktion, 468
  - einer Proportionalität, 216, 254
  - einer Summe aus zwei Gauß-Funktionen und einem Polynom, 226, 255
  - einer Summe von Exponentialfunktionen, 224
  - eines Kreises an Punkte mit Meßfehlern in Abszisse und Ordinate, 474
  - eines Polynoms, 214, 254, 466
- a-posteriori-Wahrscheinlichkeit, 148
- Arbeitsstation, 422
- asymptotisch unverzerrte Schätzung, 160
- Auswahlgruppe, 420
- Balkendiagramm, 112
- Basis, 349
- bedingte Messungen, 235, 250
- Bedingungsgleichungen, 235
- Beta-Funktion, 412
  - unvollständige, 415
- bias, 152
- Bidiagonalmatrix, 348
- Binomialkoeffizient, 401, 411
- Binomialverteilung, 69, 403, 443
  - Schätzung des Parameters, 157
- binomischer Lehrsatz, 402
- Bit, 40
- Breit–Wigner-Verteilung, 23, 55, 462
- Breite, volle bei halber Höhe, 115
- Byte, 41
- Cauchy-Verteilung, 22
  - charakteristische Funktion, 79
  - charakteristische Gleichung, 375
  - $\chi^2$ -Test, 192, 200, 447, 448
  - $\chi^2$ -Verteilung, 126, 406, 446, 501
    - Quantile, 502
- Cholesky-Inversion, 398
- Cholesky-Zerlegung, 369, 398
- Darstellungsfeld, 424
- Determinante, 357
- Dezil, 20
- Diagonalelement, 347
- Diagonalmatrix, 347
- Dimension, 349
- direkte Messungen
  - gleicher Genauigkeiten, 201
  - verschiedener Genauigkeit, 202
- direkte Summe, 350
- Dreiecksmatrix, 348
- Dreiecksverteilung, 56, 440, 463
- Drei-Türen-Spiel, 13
- effektive Schätzung, 107
- Eigenvektor, 373
- Eigenwert, 373
- Eigenwertgleichung, 373
- Eingabegruppe, 420
- Einheitsmatrix, 347
- Einheitsvektor, 348
- Einschließung eines Minimums, 266
- einseitiger Test, 170
- Elemente, 235
- $E$ -Raum, 180
- Ereignis, 8, 480
  - komplementäres, 8
- erwartungstreue Schätzung, 107

---

\*Die kursiv gesetzten Zahlen beziehen sich auf den separaten Anhang.

- Erwartungswert, 16, 26, 29, 481
- Experiment, 7
- Exponent, 41
- Fakultät, 411
- Faltung, 97, 444, 485
  - mit der Normalverteilung, 100
  - von Gleichverteilung und Normalverteilung, 465
  - von Gleichverteilungen, 99, 464
- Farbindex, 427
- Fehler
  - der Varianz einer Stichprobe, 109
  - des Mittelwertes, 109
  - einer Messung, 18
  - einfacher, 85
  - erster Art, 181, 487
  - statistischer, 71, 103, 133
  - symmetrische, 287, 297
  - unsymmetrische, 161, 167, 233, 251, 288, 297, 472
  - zweiter Art, 181, 487
- Fehleraddition, quadratische, 101
- Fehlerbalken, 113
- Fehlerfortpflanzung, 35, 442, 483
- Fehlerfunktion, 405
- Fehlerkombination, 158
- Fehlermodell von Laplace, 89
- Fenster, 424
- Freiheitsgrade, 124, 229
- $F$ -Test, 171, 198, 447
- Funktionalgleichung, 409
- $F$ -Verteilung, 407
  - Quantile, 503
- FWHM, 115
- Galton-Brett, 103
- Gamma-Funktion, 409
  - unvollständige, 413
- Gauß–Markov-Theorem, 229
- Gaußscher Algorithmus, 364
  - mit Pivotisierung, 367
- Gauß-Verteilung, 83
  - mehrerer Variabler, 91
  - standardisierte, 81
- Genauigkeit
  - absolute, 42
  - relative, 42
- Gerätekoordinaten, 424
- Gesetz der großen Zahl, 71, 484
- gestaffeltes Gleichungssystem, 365
- gewichtete Kovarianzmatrix, 390
- Gewichtsmatrix, 207
- Givens-Transformation, 352
- Gleichungssystem
  - gestaffeltes, 365
  - lineares, 359
- Gleichverteilung, 21
- gleitender Mittelwert, 321, 493
- goldener Schnitt, 268
- Graphik-Klasse, 422
- Grundgesamtheit, 105, 485
- Gütefunktion, 181, 487
- Halbraum, 351
- Häufigkeit, 103, 484
- Häufigkeitsverteilung, 105
- Hauptachsen, 375
- Hauptachsentransformation, 374
- Hauptdiagonale, 347
- Hessesche Matrix, 260
- Histogramm, 112, 145, 446
  - Bestimmung von Parametern aus, 297
  - Intervallbreite, 113
- Höhenlinie, 429
- Householder-Transformation, 353, 397
- Hyperebene, 351
- hypergeometrische Verteilung, 72, 403
- Hypothese, 169, 180
  - Alternativ-, 180
  - einfach, 180, 487
  - Null-, 180
  - Prüfung von, 487
  - zusammengesetzt, 180, 487
- Implementation, 48
- indirekte Messungen
  - linearer Fall, 206
  - nichtlinearer Fall, 218
- Information, 155, 446, 486
- Informationsungleichung, 152, 156, 486
- inverse Matrix, 363
- Jacobi-Determinante, 34, 482
  - einer orthogonalen Transformation, 38
- Kern, 350
- Kettenbruch, 412
- Klassifizierung, 298, 492
  - einfache, 302
  - gekreuzte, 304
  - genistete, 304, 307
  - zweifache, 304
- kleine Ereigniszahlen mit Untergrund,  
Quotient, 142
- kleine Ereigniszahlen, Quotient, 141

- kleine Stichprobe, 132
- kleinste Quadrate, 201, 359, 489
  - allgemeiner Fall, 242, 490
  - bedingte Messungen, 235, 490
  - direkte Messungen, 201, 491
  - Eigenschaften der Lösung, 228
  - indirekte Messungen, 206, 218, 491
  - mit Gewichten, 389
  - mit Nebenbedingungen, 393, 400
  - mit Skalenwechsel, 390
  - nach Marquardt, 391
- Klipp-Bereich, 427
- klippen, 427
- Kofaktor, 358
- Kombination, 401
- Kombinatorik, 401
- Konfidenzbereich, 165, 232, 251, 288, 472
- Konfidenzellipse, 231, 288
- Konfidenzgrenzen, 288
- Konfidenzintervall, 316, 325
- Konfidenzniveau, 487
- konjugierte Richtungen, 275
- konsistente Schätzung, 107
- Kontingenztafel, 196, 448
- kontrollierte Variable, 210
- Konturlinie, 429
- Koordinatenkreuz in Graphik, 431
- Korrelationskoeffizient, 27, 482
  - einer Stichprobe, 466
- Kovarianz, 27, 30, 482
- Kovarianzellipse, 93, 297
- Kovarianzellipse, 95, 96, 231
  - ungewichtetes, 375
- Kovarianzmatrix, 31, 287, 482
  - gewichtete, 390
  - ungewichtete, 375
- kritische Region, 170, 180, 487
- Kronecker-Symbol, 124
  
- Lagrange-Funktion, 238
- Lagrange-Multiplikatoren, 122, 238
- Laplacesches Fehlermodell, 89
- LCG, 43
- Likelihood-Funktion, 149, 486
  - logarithmische, 150, 486
- Likelihood-Gleichung, 150, 486
- Likelihood-Quotient, 149
- Likelihood-Quotienten-Test, 188, 489
- lineares Gleichungssystem, 359
- Linearkombination, 349
- Lorentz-Verteilung, 23
- Lotto, 12
  
- LR-Zerlegung, 368
  
- Mächtigkeit, 181
- Mächtigkeitsfunktion, 487
- Mantisse, 41
- Marke, 428
- Marquardt-Minimierung, 283
- Matrix, 346
  - Addition, 346
  - adjungierte, 359, 364
  - antisymmetrische, 347
  - Bidiagonal-, 348
  - Diagonal-, 347
  - Diagonalelement, 347
  - Dreiecks-, 348
  - Einheits-, 347
  - Hauptdiagonale, 347
  - inverse, 363
  - Multiplikation mit einer Matrix, 346
  - Multiplikation mit einer Zahl, 346
  - Norm, 348
  - Null-, 347
  - orthogonale, 352
  - positiv definite, 375
  - Produkt, 346
  - pseudoinverse, 372
  - singuläre, 350, 359
  - Subtraktion, 346
  - symmetrische, 347
  - transponierte, 346
  - Tridiagonal-, 348
- Matrixgleichungen, 359
- Maximum-Likelihood, 486
- Maximum-Likelihood-Schätzungen, 446
- Median, 19, 481
- Minimalschätzung, 156
- Minimierung, 257
  - Auswahl einer Methode, 285
  - Beispiele, 289
  - BRENT-Methode, 270
  - Einschließung des Minimums, 266
  - entlang ausgewählter Richtungen, 277
  - entlang der Koordinatenrichtungen, 274
  - entlang einer Richtung, 271
  - Fehlerbetrachtungen, 287
  - goldener Schnitt, 267
  - in Richtung des steilsten Abfalls, 261, 279
  - Marquardt-Verfahren, 283
  - mit quadratischer Form, 282
  - nach POWELL, 277



- quadratische Interpolation, 270
- Simplex-Methode, 272
- Mittelwert
  - einer Stichprobe, 107, 108, 145, 445
  - einer Zufallsvariablen, 16
  - Fehler, 109
  - gleitender, 321, 493
- mittlere quadratische Abweichung, 124
- mittleres Quadrat, 124
- MLCG, 43
- mode, 19
- Momente, 17, 26, 30, 480, 482
  - um den Mittelwert, 17
- Monte-Carlo-Methode, 39
  - zur Integration, 62
  - zur Simulation, 64
- Monte-Carlo-Minimierung, 475
- Nebenbedingung, 393, 400
- Neyman und Pearson, Satz von, 184, 488
- Norm, Euklidische, 348
- Normalgleichungen, 362
- Normalverteilung, 83, 404, 444, 496, 498
  - mehrdimensionale, 62, 91, 444
  - Quantile, 499, 500
  - standardisierte, 81, 404
- Nullhypothese, 180, 487
- Nullmatrix, 347
- Nullraum, 350
- Nullvektor, 347
- oder, 9
- Operationscharakteristik, 181, 487
- orthogonale Komplemente, 350
- orthogonale Matrix, 352
- orthogonale Polynome, 492
- orthogonale Transformation, 352
- orthogonale Vektoren, 347
- Parabel durch drei Punkte, 263
- Pascalsches Dreieck, 89, 402
- Permutation, 401
- Permutations-Transformation, 356
- Pivot, 366
- Pivotisierung, 367
- Poisson-Verteilung, 76, 404, 443
  - Quantile, 494
  - Schätzung des Parameters, 157
- Polyasche Verteilung, 75
- Polylinie, 428
- Polynome, orthogonale, 492
- polynomiale Regression, 492
- Portabilität, 48
- primitives Element, 43
- Prüfung von Hypothesen, 487
- pseudoinverse Matrix, 372
- quadratische Mittelung der Einzelfehler, 158
- Quadratsumme, 123, 299
- Quantil, 20, 481
- Quartil, 20
- Quotient kleiner Ereigniszahlen, 141
  - mit Untergrund, 142
- Randverteilung, 25, 29, 481
- Rang, 350
- Rechenkoordinaten, 423
- reduzierte Variable, 19, 481
- Regression, 311
  - polynomiale, 492
- Regressionslinie, 315
- Regressionspolynom, 315
- Rückwärts-Einsetzen, 371
- Saatzahl, 49
- Schätzfunktion, 107
- Schätzung, 107, 485, 486
  - asymptotisch unverzerrte, 160, 486
  - effektive, 107
  - Effizienz, 445
  - eindeutige, 486
  - erwartungstreue, 107
  - konsistente, 107, 485
  - Minimal-, 156
  - unverzerrte, 107, 485
- Schiefe, 18, 481
- Schranke minimaler Varianz, 156
- Schwankungen, statistische, 103
- Signal, 138
- Signifikanzniveau, 129, 169, 487
- Simplex, 272
- singuläre Matrix, 350, 359
- Singulärwert, 376
- Singulärwertanalyse, 377, 380
- Singulärwertzerlegung, 376, 382, 398, 399
- Skala in Graphik, 431
- Skalar, 347
- Skalarprodukt, 347
- Skalenfaktor, 204
- Spaltenraum, 350
- Spaltenvektor, 346
- Spann, 349
- Standardabweichung, 18, 85, 480
- standardisierte Normalverteilung, 404
- Startknopf, 420

- Statistik, 107
  - Test-, 181
- statistischer Fehler, 71, 133
- statistischer Test, 169
- steilster Abfall, 279
- Stichprobe, 72, 105, 485
  - aus endlicher Grundgesamtheit, 123
  - aus Gauß-Verteilung, 126
  - aus kontinuierlicher Grundgesamtheit, 108
  - aus zerlegter Grundgesamtheit, 119, 445
  - aus zweidimensionaler Gauß-Verteilung, 167
- Bestimmung von Parametern aus, 296
- Fehler der Varianz, 109
- graphische Darstellung, 111
- Information, 155
- kleine, 132
  - mit Untergrund, 138
- Mittelwert, 107, 108, 145, 445
- Varianz, 108, 145, 445
- Verteilungsfunktion, 106
- zufällige, 106
- Stichprobenfunktion, 107, 485
- Stichprobenkorrelationskoeffizient, 466
- Stichprobenraum, 7
- Streudiagramm, 146
  - eindimensionales, 111
  - zweidimensionales, 117
- Streuung, 18
- Student-Differenztest, 178
- Student-Test, 175, 199, 447
- Student-Verteilung, 176
  - Quantile, 505
- Stufendiagramm, 112
- Summensatz, 9
- symmetrische Fehler, 287
- Teilgesamtheit, 119
- Test, 169, 487, 488
  - bester, 182, 487
  - $\chi^2$ -, 489
  - einseitiger, 170
  - gleichmäßig bester, 182
  - Likelihood-Quotienten-, 188
  - unverzerrter, 182, 488
  - zweiseitiger, 170
- Testfunktion, 489
- Testgröße, 170
- Teststatistik, 181
- Text in Graphik, 432
- Transformation
  - der Variablen, 32
  - eines Vektors, 349
  - Givens-, 352, 397
  - Hauptachsen-, 374
  - Householder-, 353, 397
  - lineare, 34
  - orthogonale, 38, 352
  - Permutations-, 356
  - von Variablen, 441, 482
  - Vorzeicheninversion, 356
- Transposition, 346
- Trend, 320, 493
- Tridiagonalmatrix, 348
- $t$ -Verteilung, 176, 407
- Umfang einer Stichprobe, 105
- Unabhängigkeit
  - von Ereignissen, 11
  - von Zufallsvariablen, 25, 30
- und, 9
- unsymmetrische Fehler, 161, 233, 251, 288
- unterbestimmtes Gleichungssystem, 360
- Untergrund, 138
- Unterraum, 349
- unverzerrte Schätzung, 107
- unvollständige Beta-Funktion, 415
- unvollständige Gamma-Funktion, 413
- Varianz, 26, 30, 480, 482
  - einer Schätzung, 447
  - einer Stichprobe, 108, 145, 445
  - einer Zufallsvariablen, 17
- Varianzanalyse, 298, 491
  - doppelte, 302
  - einfache, 298
  - Modell, 303
  - zweifache
    - mit gekreuzter Klassifizierung, 476
    - mit genisteter Klassifizierung, 476
- Varianztafel, 300
- Vektor, 346
  - Betrag, 348
  - Einheits-, 348
  - Komponenten, 346
  - Norm, 348
  - Null-, 347
  - Transformation, 349
- Vektoren
  - linear abhängige, 348
  - linear unabhängige, 348
  - orthonormierte, 349
- Vektornorm, 348

- Vektorraum, 348
  - abgeschlossener, 348
  - Basis, 349
  - Dimension, 349
- Verteilung
  - multimodale, 19
  - unimodale, 19
- Verteilungen
  - diskreter Variabler, 483
  - kontinuierlicher Variabler, 484
- Verteilungsfunktion, 14, 480, 481
  - einer Stichprobe, 106
  - mehrerer Variabler, 29
  - zweier Variabler, 24
- Verzerrung, 152, 486
- Vierfeldertafel, 198
- Vierfeldertest, 198
- volle Breite bei halber Höhe, 115
- Vorwärts-Einsetzen, 371
- Vorzeicheninversion, 356
- Wahrscheinlichkeit, 480
  - a posteriori, 148
  - bedingte, 10
  - Häufigkeitsdefinition, 8
  - totale, 11
- Wahrscheinlichkeitsdichte, 15, 480
  - bedingte, 25
  - gemeinsame, 481
  - mehrerer Variabler, 29
  - zweier Variabler, 24
- wahrscheinlichster Wert, 19, 481
- Wechselwirkung, 305
- Weltkoordinaten, 423
- Wilks, Satz von, 188, 489
- Würfel, 11
- Zahleingabebereich, 420
- Zahlendarstellung im Rechner, 40
- Zeilenraum, 350
- Zeilenvektor, 346
- Zeitreihenanalyse, 320, 493
  - Extrapolation, 477
  - Sprünge in Zeitreihen, 478
- Zentraler Grenzwertsatz, 87, 485
- Zufallskomponente, 320
- Zufallsvariable, 14, 480
  - diskrete, 14
  - kontinuierliche, 14
  - reduzierte, 19
- Zufallszahlen, 39
  - beliebig verteilte, 53
    - Rückweisungsverfahren, 56
    - Transformationsverfahren, 54
  - normalverteilte, 60
- Zufallszahlgenerator, 42
  - linear kongruenter (LCG), 43
  - multiplikativ linear kongruenter (MLCG), 43
- Zwangsgleichungen, 229
- zweiseitiger Test, 170