

Werner Timischl

# Mathematische Methoden in den Biowissenschaften

Eine Einführung mit R

3., überarbeitete und erweiterte Auflage



**Springer** Spektrum

# Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Elementarmathematik</b>	<b>1</b>
1.1	Nominale, ordinale und metrische Skalen	1
1.1.1	Nominale Merkmale	2
1.1.2	Ordinale Merkmale	3
1.1.3	Metrische Merkmale	4
1.1.4	Aufgaben	7
1.2	Grundlegende Begriffe und Rechenoperationen	8
1.2.1	Betrag, Vorzeichen, Intervall	8
1.2.2	Prozentsatz, Prozentwert, Grundwert	8
1.2.3	Potenzen	9
1.2.4	Binomialkoeffizient	11
1.2.5	Logarithmus	14
1.2.6	Aufgaben	15
1.3	Berechnungen im rechtwinkligen und allgemeinen Dreieck	16
1.3.1	Rechtwinkeliges Dreieck	16
1.3.2	Kosinussatz	18
1.3.3	Aufgaben	19
1.4	Rechnen mit fehlerbehafteten Zahlen	20
1.4.1	Absoluter und relativer Fehler	20
1.4.2	Fehlerfortpflanzung	21
1.4.3	Aufgaben	23
1.5	Gleichungen mit einer Variablen	24
1.5.1	Gleichungen als Instrumente der Modellbildung	24
1.5.2	Algebraische Gleichungen	26
1.5.3	Exponentialgleichungen	27
1.5.4	Aufgaben	28
1.6	Komplexe Zahlen	29
1.6.1	Komponentenform	29
1.6.2	Trigonometrische Form	31
1.6.3	Aufgaben	33

1.7	Permutationen und Kombinationen	33
1.7.1	Multiplikationsformel	33
1.7.2	Permutationen	34
1.7.3	Kombinationen	35
1.7.4	Aufgaben	36
1.8	Wahrscheinlichkeitsrechnung	36
1.8.1	Begriff der Wahrscheinlichkeit	36
1.8.2	Bedingte Wahrscheinlichkeit und Formel von Bayes	40
1.8.3	Aufgaben	44
1.9	Ergänzungen	44
1.9.1	Gleitende Durchschnitte	44
1.9.2	Mittlere Lebenserwartung	46
1.9.3	Pascalsches Dreieck	49
1.9.4	Binomischer Lehrsatz	49
1.9.5	Summensätze für den Sinus und Kosinus	50
<b>2</b>	<b>Funktionen</b>	<b>53</b>
2.1	Lineare Funktionen	53
2.1.1	Von der Beobachtung zur Funktion	53
2.1.2	Geradengleichungen	55
2.1.3	Regressionsgeraden	58
2.1.4	Aufgaben	63
2.2	Potenzfunktionen	63
2.2.1	Allometrie	63
2.2.2	Linearisierung durch doppelt-logarithmische Transformation	65
2.2.3	Gebrochen lineare Funktionen	68
2.2.4	Quadratische Polynome	71
2.2.5	Aufgaben	73
2.3	Exponential- und Logarithmusfunktionen	74
2.3.1	Exponentialfunktionen	74
2.3.2	Linearisierung durch einfach-logarithmische Transformation	76
2.3.3	Logistisches Wachstum	79
2.3.4	Logarithmusfunktionen	84
2.3.5	Aufgaben	86
2.4	Sinusförmige Veränderungen	87
2.4.1	Die allgemeine Sinusfunktion	87
2.4.2	Überlagerung von Sinusschwingungen	91
2.4.3	Kurvenanpassung bei periodischen Daten	92
2.4.4	Aufgaben	94
2.5	Wahrscheinlichkeitsfunktionen	95
2.5.1	Diskrete Zufallsvariable	95
2.5.2	Binomialverteilung	96
2.5.3	Hypergeometrische Verteilung	99

2.5.4	Kennzahlen der Wahrscheinlichkeitsfunktion . . . . .	101
2.5.5	Aufgaben . . . . .	102
2.6	Dichtefunktionen . . . . .	103
2.6.1	Stetige Zufallsvariable . . . . .	103
2.6.2	Normalverteilung . . . . .	105
2.6.3	Aufgaben . . . . .	109
2.7	Ergänzungen . . . . .	110
2.7.1	Berechnung der Parameter der Regressionsgeraden . . . . .	110
2.7.2	Regressionsgerade durch den Nullpunkt . . . . .	111
2.7.3	Exponentielle Annäherung an einen Gleichgewichtswert . . . . .	112
2.7.4	Mittelwert und Varianz einer $B_{n,p}$ -verteilten Zufallsvariablen . . . . .	114
<b>3</b>	<b>Matrizen . . . . .</b>	<b>115</b>
3.1	Begriff der Matrix . . . . .	115
3.1.1	Bezeichnungen . . . . .	115
3.1.2	Merkmalsraum . . . . .	116
3.1.3	Objektraum . . . . .	119
3.1.4	Aufgaben . . . . .	121
3.2	Rechenoperationen mit Vektoren und Matrizen . . . . .	121
3.2.1	Addition . . . . .	121
3.2.2	Skalarprodukt von Vektoren . . . . .	124
3.2.3	Matrizenprodukt . . . . .	128
3.2.4	Aufgaben . . . . .	132
3.3	Lineare Gleichungssysteme . . . . .	134
3.3.1	Substitutionsmethode . . . . .	134
3.3.2	Determinanten . . . . .	136
3.3.3	Inverse Matrix . . . . .	138
3.3.4	Aufgaben . . . . .	142
3.4	Lineare Optimierung . . . . .	142
3.4.1	Das Maximum-Problem der linearen Optimierung . . . . .	142
3.4.2	Der Simplexalgorithmus . . . . .	146
3.4.3	Duale Optimierungsprobleme . . . . .	150
3.4.4	Aufgaben . . . . .	153
3.5	Diagonalisierung von symmetrischen Matrizen . . . . .	153
3.5.1	Orthogonale Matrizen . . . . .	153
3.5.2	Eigenwerte und Eigenvektoren einer symmetrischen Matrix . . . . .	156
3.5.3	Spektralzerlegung einer symmetrischen Matrix . . . . .	161
3.5.4	Quadratische Formen . . . . .	166
3.5.5	Hauptkomponentenanalyse . . . . .	170
3.5.6	Aufgaben . . . . .	176
3.6	Markov-Ketten . . . . .	177
3.6.1	Übergangsmatrix und Zustandsverteilung . . . . .	177
3.6.2	Stationäre Zustandsverteilungen . . . . .	184

3.6.3	Hidden Markov-Modelle	188
3.6.4	Aufgaben	192
3.7	Ergänzungen	193
3.7.1	Numerische Klassifikation	193
3.7.2	Quadratische Interpolation	195
3.7.3	Eigenschaften der Eigenwerte von symmetrischen Matrizen	196
3.7.4	Approximation einer $n \times p$ - Datenmatrix mit $m < p$ Hauptkomponenten	198
3.7.5	Interpretation der Hauptkomponenten	200
3.7.6	Der Vorwärts-Algorithmus	202
<b>4</b>	<b>Differenzieren und Integrieren</b>	<b>207</b>
4.1	Zahlenfolgen	207
4.1.1	Diskrete Prozesse	207
4.1.2	Lineare Differenzgleichungen erster Ordnung	211
4.1.3	Konvergente und divergente Folgen	213
4.1.4	Grenzwert von Funktionen	217
4.1.5	Aufgaben	219
4.2	Der Differentialquotient	220
4.2.1	Begriff der Ableitung	220
4.2.2	Ableitungsregeln	227
4.2.3	Aufgaben	234
4.3	Beschreibung von Funktionen mit Hilfe der Ableitung	235
4.3.1	Lokale Approximation durch Polynome	235
4.3.2	Lineare Approximation	236
4.3.3	Näherungsparabeln	242
4.3.4	Lokale Extremwerte	246
4.3.5	Aufgaben	248
4.4	Bestimmtes und unbestimmtes Integral	249
4.4.1	Das Flächeninhaltsproblem	249
4.4.2	Stammfunktionen	253
4.4.3	Integrationsregeln	255
4.4.4	Aufgaben	260
4.5	Differentialgleichungen	261
4.5.1	Modellbildung mit Differentialgleichungen	261
4.5.2	Lösung von Differentialgleichungen durch Trennung der Variablen	265
4.5.3	Linear-inhomogene Differentialgleichungen erster Ordnung	269
4.5.4	Die Schwingungsgleichung	272
4.5.5	Numerische Lösung von Differentialgleichungen	279
4.5.6	Aufgaben	284
4.6	Ergänzungen	286
4.6.1	Geometrische Iteration	286
4.6.2	Interpolation mit natürlichen kubischen Splines	289

4.6.3	Bernoullis Plädoyer für die Pockenimpfung: Eine historische Anwendung der logistischen Differentialgleichung . . . . .	292
4.6.4	Qualitative Diskussion von nichtlinearen Differentialgleichungssystemen . . . . .	294
<b>5</b>	<b>Schätzen und Testen</b> . . . . .	<b>303</b>
5.1	Datenbeschreibung . . . . .	303
5.1.1	Grundgesamtheit und Stichprobe . . . . .	303
5.1.2	Lage- und Streuungsmaße . . . . .	304
5.1.3	Histogrammschätzer . . . . .	307
5.1.4	Aufgaben . . . . .	309
5.2	Parameterschätzung bei normalverteilter Grundgesamtheit . . . . .	310
5.2.1	Stichprobenmittel und Stichprobenvarianz . . . . .	310
5.2.2	Konfidenzintervalle für den Mittelwert und die Varianz . . . . .	313
5.2.3	Konfidenzintervall für den Anstieg einer Regressionsgeraden . . . . .	319
5.2.4	Aufgaben . . . . .	322
5.3	Vergleich eines Mittelwerts mit einem Sollwert . . . . .	323
5.3.1	Der 1-Stichproben $t$ -Test für 2-seitige Hypothesen . . . . .	323
5.3.2	Gütefunktion des 2-seitigen $t$ -Tests . . . . .	326
5.3.3	Der 1-Stichproben $t$ -Test für 1-seitige Hypothesen . . . . .	330
5.3.4	Aufgaben . . . . .	332
5.4	Überprüfung der Normalverteilungsannahme . . . . .	333
5.4.1	Normal- $Q$ -Plots . . . . .	333
5.4.2	Schiefe und Kurtosis . . . . .	337
5.4.3	Der Shapiro-Wilk-Test . . . . .	339
5.4.4	Aufgaben . . . . .	341
5.5	Unterschiedshypothesen mit zwei Mittelwerten . . . . .	342
5.5.1	Mittelwertvergleiche mit unabhängigen Stichproben . . . . .	342
5.5.2	Der Welch-Test . . . . .	343
5.5.3	Der 2-Stichproben $t$ -Test . . . . .	350
5.5.4	Der $t$ -Test für abhängige Stichproben . . . . .	354
5.5.5	Aufgaben . . . . .	357
5.6	Vergleiche mit Wahrscheinlichkeiten . . . . .	358
5.6.1	Der $P$ -Wert des exakten Binomialtests . . . . .	358
5.6.2	Näherungsweise Bestimmung der Gütefunktion des Binomialtests . . . . .	361
5.6.3	Konfidenzintervall für eine Wahrscheinlichkeit . . . . .	363
5.6.4	Vergleich von zwei Wahrscheinlichkeiten . . . . .	365
5.6.5	Aufgaben . . . . .	374
5.7	Ergänzungen . . . . .	374
5.7.1	Ergänzungen zum 1-Stichproben $t$ -Test . . . . .	374
5.7.2	Ein Algorithmus zur Berechnung der Testgröße und des $P$ -Werts des Shapiro-Wilk-Tests . . . . .	375

5.7.3	Überprüfung der Varianzhomogenität	377
5.7.4	Ergänzungen zum Binomialtest	382
<b>6</b>	<b>Anhang A: R-Kompendium</b>	<b>385</b>
6.1	Installation und Arbeitsumgebung	385
6.2	Konstante, Variable und Ausdrücke	389
6.3	Funktionen	392
6.4	Vektoren, Matrizen und Datensätze	394
6.5	Diagramme	401
6.6	Beispiele zur Programmierung	405
6.7	Glossar der verwendeten R-Befehle und R-Funktionen	408
<b>7</b>	<b>Anhang B: Lösungen der Aufgaben</b>	<b>417</b>
7.1	Elementarmathematik	417
7.2	Funktionen	421
7.3	Matrizen	424
7.4	Differenzieren und Integrieren	430
7.5	Schätzen und Testen	435
	<b>Literatur</b>	<b>447</b>
	<b>Sachverzeichnis</b>	<b>449</b>