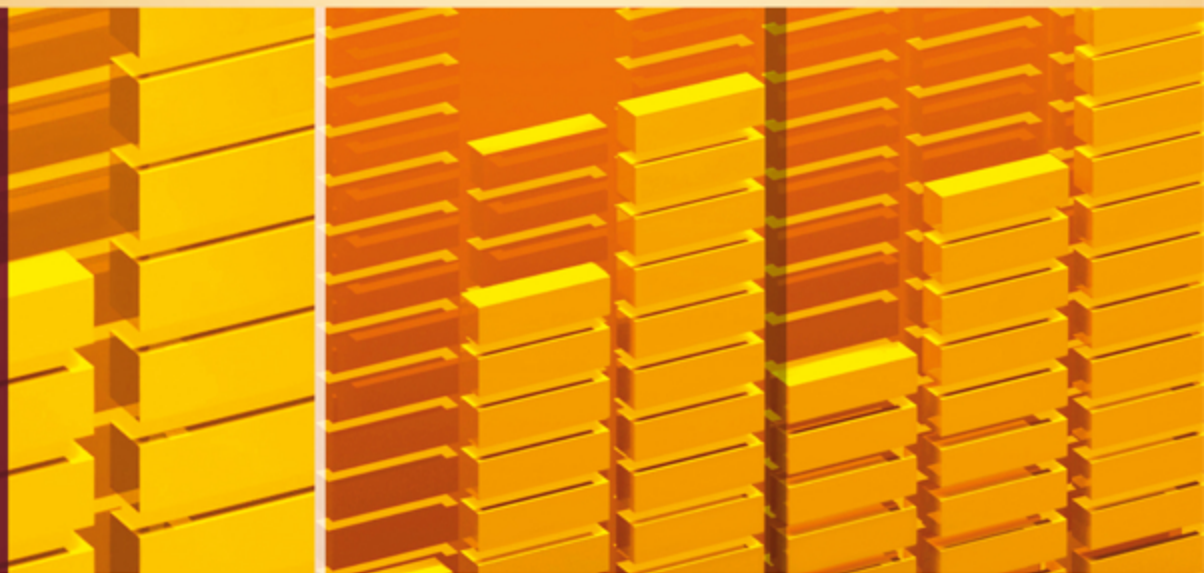




Wätzig · Mehnert · Bühler

Mathematik und Statistik kompakt

Grundlagen und Anwendungen
in Pharmazie und Medizin



Wissenschaftliche Verlagsgesellschaft mbH Stuttgart

Wätzig · Mehnert · Bühler
Mathematik und Statistik
kompakt

Reihe Kompakt-Lehrbuch

Leistner · Breckle

Pharmazeutische Biologie kompakt

7. Aufl., 2008

Wätzig · Mehnert · Bühler

Mathematik und Statistik kompakt

1. Aufl., 2009

Weidenauer · Beyer

Arzneiformenlehre kompakt

1. Aufl., 2008

Wätzig · Mehnert · Bühler

Mathematik und Statistik kompakt

**Grundlagen und Anwendungen
in Pharmazie und Medizin**

Hermann Wätzig, Braunschweig

Wolfgang Mehnert, Berlin

Wolfgang Bühler, Bonn

Mit 83 Abbildungen, 55 Tabellen



Wissenschaftliche Verlagsgesellschaft mbH Stuttgart

Anschriften der Autoren

Prof. Dr. Hermann Wätzig

Institut für Pharmazeutische Chemie
Technische Universität Carolo-Wilhelmina
Beethovenstr. 55
38106 Braunschweig

Dr. Wolfgang Mehnert

Institut für Pharmazie
Freie Universität
Kelchstr. 31
12169 Berlin

Dr. Wolfgang Bühler

Bundesinstitut für Arzneimittel
und Medizinprodukte (BfArM)
Kurt-Georg-Kiesinger-Allee 3
53175 Bonn

Hinweise

Die in diesem Buch aufgeführten Angaben wurden sorgfältig geprüft. Dennoch können die Autoren und der Verlag keine Gewähr für deren Richtigkeit übernehmen.

Ein Markenzeichen kann warenzeichenrechtlich geschützt sein, auch wenn ein Hinweis auf etwa bestehende Schutzrechte fehlt.

Bibliografische Information der Deutschen Nationalbibliothek

Die Deutsche Nationalbibliothek verzeichnet diese Publikation in der Deutschen Nationalbibliografie; detaillierte bibliografische Daten sind im Internet unter <http://dnb.d-nb.de> abrufbar.

Jede Verwertung des Werkes außerhalb der Grenzen des Urheberrechtsgesetzes ist unzulässig und strafbar. Das gilt insbesondere für Übersetzungen, Nachdrucke, Mikroverfilmungen oder vergleichbare Verfahren sowie für die Speicherung in Datenverarbeitungsanlagen.

ISBN 978-3-8047-2439-6

© 2009 Wissenschaftliche Verlagsgesellschaft mbH
Birkenwaldstr. 44, 70191 Stuttgart
www.wissenschaftliche-verlagsgesellschaft.de

Printed in Germany

Typografie und Umschlaggestaltung: deblik, Berlin

Satz: primustype, Robert Hurler GmbH, Notzingen

Druck und Bindung: Kösel, Krugzell

Umschlagabbildung: Andreas Herpens, istockphoto

Vorwort

Mathematische und statistische Methoden sind für die Entwicklung, Optimierung und Qualitätskontrolle von Arzneimitteln unentbehrlich. Dabei sind häufig keine tiefgehenden Kenntnisse der Mathematik und Statistik erforderlich, um die meist anwendungsorientierten Fragestellungen lösen zu können. Allerdings müssen einige Grundlagen beherrscht werden. Es gibt zahlreiche Mathematik- und Statistiklehrbücher, hier wird aber oft bereits umfassendes Wissen der Grundlagen vorausgesetzt. In dem vorliegenden Buch wurde deshalb versucht, die „richtige Dosis“ an mathematischem Wissen für Pharmazeutinnen und Pharmazeuten zu finden. Das erforderliche Basiswissen ist schnell zugänglich, aber auch weiterführendes Wissen zum Nachschlagen ist vorhanden. Das relevante Wissen wird anschaulich an Beispielen aus dem Alltag oder aus der pharmazeutischen Praxis dargestellt.

Mit dem vorliegenden Buch haben wir auch versucht, die mathematischen und statistischen Anforderungen zur Ausbildung der Studierenden der Pharmazie zu berücksichtigen und das Verständnis für Grundbegriffe und Methoden der Mathematik und Statistik zu fördern. Allerdings sollte dieses Buch nicht nur Studierende der Pharmazie ansprechen, sondern auch Pharmazeuten, die sich bereits im Berufsalltag befinden. Zur Vertiefung der jeweiligen Problematik sind am Ende der einzelnen Kapitel Hinweise auf weiterführende Literatur angefügt.

Übungsaufgaben sollen helfen den theoretischen Stoff auf Beispiele aus der Praxis zu übertragen. So wird auch die Notwendigkeit der Anwendung mathematischer und statistischer Verfahren zur Lösung von pharmazeutischen Fragestellungen aufgezeigt.

Wir hoffen, dass unser Vorhaben gelungen ist. Anregungen und Hinweise, die uns helfen, das Lehrbuch zu überarbeiten, zu verbessern oder auch die angebotenen Gebiete zu erweitern, nehmen wir sehr gern entgegen.

Für wertvolle Anregungen zur inhaltlichen Gestaltung danken wir Herrn Prof. Dr. K. Baumann.

Des Weiteren bedanken wir uns bei Heidi Köppel und Simone Schröder für die Unterstützung bei der Anfertigung einiger Abbildungen, die zusätzlich wie Isabel Astner, Katja Penzel und Melanie Hindrichsen, das Manuskript Korrektur gelesen haben. Außerdem danken wir Dr. Johann Grünefeld für die Unterstützung bei der Anfertigung einiger Übungsaufgaben.

Unser besonderer Dank gilt der Wissenschaftlichen Verlagsgesellschaft, insbesondere Frau Luise Keller und Herrn Dr. Eberhard Scholz, ohne deren Unterstützung das Buch in der vorliegenden Form nicht möglich gewesen wäre.

Braunschweig, Berlin, Bonn, im Herbst 2008

Hermann Wätzig
Wolfgang Mehnert
Wolfgang Bühler

Inhaltsverzeichnis

Vorwort	V
Abkürzungen und Symbole	X
1 Einleitung	1
1.1 Anwendung mathematischer und statistischer Methoden in der Pharmazie	1
2 Mathematische Grundlagen	4
2.1 Allgemeine Grundlagen und elementare Funktionen	4
2.2 Vektoren	22
2.3 Lineare Gleichungssysteme und Matrizenrechnung	36
2.4 Die Differentialrechnung	47
2.5 Die Integralrechnung	60
2.6 Zufall und Wahrscheinlichkeit	68
2.7 Rechnen mit Wahrscheinlichkeiten	71
2.8 Übungsaufgaben	81
3 Begriffserklärungen	85
3.1 Das Grundmodell der Statistik	85
3.2 Merkmal und Qualität	87
3.3 Klassifizierung von Merkmalen	88
3.4 Toleranzen und Grenzwerte	90
3.5 Die Qualitätssicherung	93
3.6 Die Grundgesamtheit und das Los	93
3.7 Die Stichprobe	94
3.8 Der Fehler und die Fehlerrechnung	95
3.9 Übungsaufgaben	100
4 Deskriptive Statistik	102
4.1 Die Mittelwerte (Lagemaße)	102
4.2 Die Streuungsmaße	107
4.3 Graphische Darstellungen von Häufigkeitsverteilungen	111
4.4 Übungsaufgaben	124
5 Attributive Verteilungen	125
5.1 Hypergeometrische Verteilung	125
5.2 Die Binomialverteilung	129
5.3 Die Poisson-Verteilung	137
5.4 Übungsaufgaben	144

6	Die Normalverteilung	147
6.1	Die Wahrscheinlichkeitsdichte- und Verteilungsfunktion	147
6.2	Die Standardisierung der Normalverteilung	151
6.3	Verteilungen von Stichprobenkenngrößen	155
6.4	Der zentrale Grenzwertsatz	159
6.5	Zufallsstrebereiche für Messwerte und Stichprobenkenngrößen	159
6.6	Der Vertrauensbereich der Normalverteilung	168
6.7	Übungsaufgaben	175
7	Statistische Prüfverfahren	179
7.1	Null- und Alternativhypothese	179
7.2	Durchführung eines statistischen Tests	181
7.3	Der Fehler erster- und zweiter Art	182
7.4	Arten von Hypothesentests	185
7.5	Die einseitige und zweiseitige Fragestellung	185
7.6	Der Signifikanztest	187
7.7	Das Signifikanzniveau	187
7.8	Der Freiheitsgrad	188
7.9	Übungsaufgaben	190
8	Testverfahren auf Ausreißer und Normalverteilung	194
8.1	Ausreißer	194
8.2	Statistische Testverfahren auf Normalverteilung	197
8.3	Übungsaufgaben	201
9	Auswertung mittels statistischer Vergleiche	202
9.1	Grundlegendes zur t-Verteilung	202
9.2	Der Einstichproben-t-Test	203
9.3	Vergleich von zwei Stichproben	205
9.4	Verteilungsunabhängige Verfahren (Rangsummentests)	214
9.5	Übungsaufgaben	220
10	Lineare Regression	223
10.1	Definition und Anwendung	223
10.2	Die Regressionsrechnung – Ein Optimierungsproblem	224
10.3	Darstellung der Regressionsrechnung in Vektor- und Matrix- schreibweise	237
10.4	Validierung und Versuchsplanung	240
10.5	Übungsaufgaben	243
	Lösungen der Übungsaufgaben	244
	Mathematische und statistische Tabellen	273

Glossar	317
Sachverzeichnis	333
Die Autoren	339

Abkürzungen und Symbole

$\hat{}$	ein mit einem Dach gekennzeichnete Kennwert ist ein Schätzwert des jeweiligen Kennwerts
α	Irrtumswahrscheinlichkeit, Wahrscheinlichkeit des Fehlers 1. Art bei Signifikanztests
a	Aktivität
AMG	Gesetz über den Verkehr mit Arzneimitteln = Arzneimittelgesetz (law on the trade in drugs = drug law)
AUC	Fläche unter der Kurve (area under curve)
β	Irrtumswahrscheinlichkeit, Wahrscheinlichkeit des Fehlers 2. Art bei Signifikanztests; $1-\beta$ heißt Schärfe des Tests
$\hat{\beta}$	Steigung einer Geraden
b	Ordinatenabschnitt, Schätzgenauigkeit, systematischer Fehler, Länge, Skalenfaktor im Wahrscheinlichkeitsnetz
c	Konzentration
CV	relative Standardabweichung
c_n	Konstante, die durch das Verhältnis $\sigma_{\bar{x}}$ zu $\sigma_{\bar{x}}$ bestimmt ist
cnf	Konfidenzintervall
chi ² (χ^2)	Kennzahl oder Schwellenwert der Chi ² -Verteilung
d	Anzahl fehlerhafter Einheiten in der Grundgesamtheit oder Klassenbreite
DGQ	Deutsche Gesellschaft für Qualität
δ	Differential, wird „d“ oder zur Unterscheidung auch „del“ ausgesprochen
Δ	Differenz
e	Basiswert der natürlichen Exponentialfunktion, $e = 2,71828$ (Euler'sche Zahl)
ε_i	zufälliger Fehler
E	Ereignis, Extinktion
$E(x), \mu$	Erwartungswert
\bar{E}	komplementäres Ereignis zu E (Gegenereignis)
f	Freiheitsgrad
F	Kennzahl oder Schwellenwert der F-Verteilung
$g(u)$	= $g(u 0, 1)$, Wahrscheinlichkeitsfunktion der Standardnormalverteilung
$g(x)$	für diskrete Verteilungen: Wahrscheinlichkeitsfunktion $g(x) = P(x)$, für stetige Verteilungen: Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion
$g(x N, d; n)^{1)}$	= $g(x)$, Wahrscheinlichkeitsfunktion der hypergeometrischen Verteilung mit den Parametern N , d und n
$g(x p; n)$	= $g(x)$, Wahrscheinlichkeitsfunktion der Binomialverteilung mit den Parametern p und n
$g(x \mu)$	= $g(x)$, Wahrscheinlichkeitsfunktion der Poisson-Verteilung mit dem Parameter μ
$g(x \mu, \sigma^2)$	= $g(x)$, Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion der Normalverteilung mit den Parametern μ und σ^2
$G(x)$	Verteilungsfunktion allgemein mit $G(x) = P(\leq x)$, kumulierte Wahrscheinlichkeit
$G(u)$	= $G(u 0, 1)$, Verteilungsfunktion der Standardnormalverteilung $N(0, 1)$
$G(x N, d; n)$	= $G(x)$, auch $H(N, d; n)$, Verteilungsfunktion der hypergeometrischen Verteilung mit den Parametern N , d und n
$G(x p; n)$	= $G(x)$, kurz $Bi(p; n)$, Verteilungsfunktion der Binomialverteilung mit den Parametern p und n
$G(x \mu)$	= $G(x)$, kurz $Po(\mu)$, Verteilungsfunktion der Poisson-Verteilung mit dem Parameter μ
$G(x \mu, \sigma^2)$	= $G(x)$, kurz $N(\mu, \sigma^2)$, Verteilungsfunktion der Normalverteilung mit den Parametern μ und σ^2
h_j	relative Häufigkeit

H_0	Nullhypothese
H_1	Alternativhypothese
i	imaginäre Zahl, komplexe Zahl mit reellem Anteil gleich Null, bzw. Nummerierungsvariable, der Index bezeichnet die Nummer der Beobachtungseinheit ($i = 1, 2, \dots, n$)
ICH	International Conference of Harmonization
k	Kennzahl, Klassenzahl, Zahl im Binomialkoeffizient, signifikante Ziffern
<i>krit</i>	kritischer Wert im statistischen Test
l	Liter
\ln	natürlicher Logarithmus zur Basis e
\lg	dekadischer Logarithmus zur Basis 10
m	Anteil der Werte einer Messreihe, Zahl der Stichproben, Faktor, Masse, Steigung einer Geraden
M_{min}	kleinster Wert einer Messreihe
m	Stichprobenumfang
mbar	Millibar (Druckangabe)
ml	Milliliter
μ	arithmetischer Mittelwert einer Grundgesamtheit, mittlere Anzahl der Fehler je Prüfeinheit in einer Grundgesamtheit (Poisson-Verteilung)
n	Stichprobenumfang, Brechungsindex, Zahl im Binomialkoeffizient
$n!$	Fakultät
n_j	absolute Häufigkeit
n^*	n-Stern, Ersatzparameter für sehr kleinen Fehleranteil
$\binom{n}{k}$	Binomialkoeffizient, sprich: n über k
N	Umfang der Grundgesamtheit
$N(0, 1)$	Normalverteilung der standardisierten Normalverteilung mit $\mu = 0$ und $\sigma_2 = 1$
$N(\mu, \sigma^2)$	Normalverteilung mit dem Mittelwert μ und der Varianz σ^2
OGW	oberer Grenzwert
ob	oben, oberer
OTC	Over the counter, Bezeichnung für frei verkäufliche Arzneimittel
π	Pi (klein), Kreiszahl, 3,1416
Σ	Summenzeichen
Π	Pi (groß), Produktzeichen
p	$= \frac{d}{N}$, Anteil fehlerhafter Einheiten in einer Grundgesamtheit
p^*	p-Stern, Ersatzparameter für sehr kleinen Fehleranteil
<i>prd</i>	Vorhersageintervall (engl. prediction interval)
\hat{p}	Überschreitungsanteil, Schätzwert für p (sprich: p Dach)
$p(x)$	Polynom
P	Wahrscheinlichkeit
$P(x)$	P (beobachteter Wert x), Wahrscheinlichkeit, in einer Stichprobe genau x fehlerhafte Einheiten/Fehler zu finden
$P(\leq x)$	P (beobachteter Wert $\leq x$)
$P(< x)$	P (beobachteter Wert $< x$)
$P(\geq x)$	P (beobachteter Wert $\geq x$)
$P(> x)$	P (beobachteter Wert $> x$)
$P(E)$	Wahrscheinlichkeit des Eintretens von E
$P(E_1 \text{ oder } E_2)$	Wahrscheinlichkeit des Eintretens von E_1 oder E_2 (Additionssatz)
$P(E_1 \text{ und } E_2)$	Wahrscheinlichkeit des Eintretens von E_1 und E_2 (Multiplikationssatz)
$P(E_1 E_2)$	bedingte Wahrscheinlichkeit des Eintretens von E_1 unter der Bedingung des Eintretens von E_2
<i>Prüf</i>	Prüfgröße im statistischen Test

q	1-p; Anteil fehlerfreier Einheiten in einer Grundgesamtheit
R	Spannweite, Raum
\mathbb{R}	reelle Zahlen
δ	Dichte
s	Standardabweichung der Stichprobe, Strecke
s^2	Varianz der Stichprobe
S	Stirlingzahl
S_{xx}	bezeichnet die Summe aller $(x_i - \bar{x})^2$
sdv	Standardabweichung
σ	Sigma, Standardabweichung der Grundgesamtheit
$\hat{\sigma}$	Standardabweichung der Stichprobe (sprich: Sigma Dach)
σ^2	Varianz der Grundgesamtheit
Σ	Sigma (groß), Symbol zur Kennzeichnung von Summen
τ	Integrationsvariable
t	Kennzahl oder Schwellenwert der t-Verteilung
T	Toleranz
Tab	Tabellenwert einer Prüfgröße im statistischen Test (Schwellenwert)
u	standardisierte Zufallsvariable der Normalverteilung (0, 1)
$u_{1-\alpha}$	(1- α)-Quantil der Standardnormalverteilung (0, 1)
un	unten, unterer
UGW	unterer Grenzwert
V	Volumen
var	Varianz
w	Kennzahl oder Schwellenwert der w-Verteilung oder Klassenweite
x	Anzahl fehlerhafter Einheiten mit hypergeometrischer- oder Binomialverteilung, Anzahl der Fehler je Einheiten mit Poisson-Verteilung oder Messwert, Realisierung der Zufallsvariablen X
\bar{x}_D	Modalwert
x_i	i-ter Einzelwert in chronologischer Reihenfolge
\bar{x}	arithmetischer Mittelwert der Stichprobe (sprich: x quer)
\bar{x}_G	geometrisches Mittel der Einzelwerte einer Messreihe
\bar{x}_H	harmonisches Mittel der Einzelwerte einer Messreihe
$\bar{\bar{x}}$	arithmetisches Mittel einer Reihe von Mittelwerten (sprich: x quer quer)
\tilde{x}	Median (sprich: x Tilde)
X	Zufallsvariable
Z_i	Zahl interessierender Ereignisse
ΣZ	Zahl aller möglichen Ereignisse
\Rightarrow	daraus folgt
\rightarrow	Verweis auf Abb., Beispiel, Formel, Kapitel oder Tabelle oder Aufzählung
\approx	nahezu gleich, etwa, rund

¹⁾ N und d beziehen sich auf die Grundgesamtheit und sind deshalb durch Semikolon von der Stichprobe getrennt (sinngemäß auch die folgenden Symbole)

Dieser Teil soll Ihnen kurz die geschichtlichen Entwicklungen statistischer Methoden aufzeigen. Es werden die Intension der Autoren zur Erstellung dieses Buches dargelegt, Hinweise zur Klausurvorbereitung gegeben, sowie einige wichtige Internet-Adressen genannt.

Anwendung mathematischer und statistischer Methoden in der Pharmazie

1.1

Im Zusammenhang mit Wahrscheinlichkeitstheorien wurden Probleme der Wahrscheinlichkeit erstmals systematisch im 17. und 18. Jahrhundert untersucht; sie tauchten vor allem im Zusammenhang mit Glücksspielen auf. Etlliche bedeutende europäische Mathematiker beschäftigten sich mit dem Problem der Wahrscheinlichkeit.

Mitte des 17. Jahrhunderts setzten sich bedeutende Forscher, wie Fermat (1601–1665), Pascal (1623–1662) und Bernoulli (1654–1705) mit Begriffen wie Zufallserscheinung, Wahrscheinlichkeit und Ereignis auseinander. Die hieraus gewonnenen Erkenntnisse wurden dann im Laufe der Zeit auch auf andere Bereiche, wie z. B. der Physik oder der Gesellschaft übertragen. An dieser Weiterentwicklung waren dann u. a. Wissenschaftler wie Moivre (1667–1754), Laplace (1749–1827), Gauß (1777–1855) und Poisson (1781–1840) beteiligt.

Theorien zur Wahrscheinlichkeitsrechnung

So findet denn auch in den verschiedensten Bereichen unserer heutigen Gesellschaft der Umgang mit der Statistik statt. Eine stets wachsende Komplexität der Zusammenhänge und Abläufe (z. B. pharmazeutische Fertigungsprozesse, chemische Synthesen, Geschäftsabläufe, Marktentwicklungen, Medizin, etc.) machen es notwendig, durch statistische Methoden Informationen zu gewinnen und zu verarbeiten.

Anwendung der Statistik in allen Wirtschaftsbereichen

Der Philosoph Elton Trueblood (1900 – 1994), sagte: *„Die Tatsache, dass wir keine absolute Gewissheit im Hinblick auf irgendwelche menschlichen Schlussfolgerungen haben, bedeutet nicht, dass alles Forschen letztlich doch eine fruchtlose Bemühung wäre. Es stimmt, wir müssen stets auf dem Boden der Wahrscheinlichkeit vorangehen, aber wo es Wahrscheinlichkeit gibt, da gibt es die Möglichkeit zum Fortschritt. Was wir in jedem Bereich menschlichen Denkens suchen, ist nicht die absolute Gewissheit, denn die bleibt uns als Menschen verborgen, sondern eher der bescheidenere Pfad jener, die verlässliche Möglichkeiten zur Unterscheidung verschiedener Grade der Wahrscheinlichkeit finden.“*

Dazu dürfte die folgende Weisheit Albert Einsteins (1879–1955, Deutscher Physiker), immer noch Gültigkeit besitzen: *„Was sich auf die Wirklichkeit bezieht, ist nicht sicher, und was sicher ist, ist nicht wirklich“*

Die folgende Begriffsbestimmung der Statistik von Abraham Wald (1902 – 1950, Rumänischer Mathematiker) dürfte daher die Zutreffendste sein: *„Statistik ist eine Zusammenfassung von Methoden, die uns erlauben, vernünftige Entscheidungen im Fall der Ungewissheit zu treffen“* Diese Begriffsbestimmung sollte nicht so verstanden werden, um damit die Statistik als Hilfsmittel verfeinerter Lügen und

damit zum Zweck der bewussten Manipulation zu benutzen. Die Statistik hilft bei allen zufälligen Ereignissen, komplexen Abläufen und auf allen erdenkbaren Gebieten, auf denen nicht erfassbare Einflüsse auftreten können.

Deshalb kann Statistik u. a. wie folgt definiert werden: „Statistik ist die Entwicklung und Anwendung von Methoden zur datenmäßigen Erhebung, Aufbereitung, Analyse und Interpretation von Massenerscheinungen.“ Statistik kann fachlichen Sachverstand unterstützen, nicht aber ersetzen.

Die Statistik ist somit ein mathematisches Instrument, welches weder Fachwissen ersetzen kann, noch Ansatzfehler beim unmethodischen oder fehlerhaften Vorgehen ausgleichen kann.

Wer sich mit Statistik beschäftigt, der sollte nie ohne fachlichen Hintergrund, d. h. nie ohne Zusammenarbeit mit wenigstens einem weiteren Fachmann seine statistischen Analysen aufbauen. Statistische Tests können fachlichen Sachverstand nur unterstützen, aber nicht ersetzen!

Wie bei allen Prozessen finden statistische Methoden auch in der pharmazeutischen Industrie, sowie deren Umfeld Anwendung. Über die pharmazeutische Entwicklung eines Arzneimittels, der klinischen Prüfung, der Produktion, der Prüfung in der Freigabe, der Zulassung eines Arzneimittels und vielen, vielen anderen Bereichen.

Das Arzneibuch ist Teil eines Qualitätssicherungssystems.

So ist z. B. auch das Arzneibuch als ein Teil eines Qualitätssicherungssystems (→ Kap. 3.2) zu verstehen. Es enthält allgemeine Angaben zu Prüfverfahren, sowie in den Monographien Qualitätsanforderungen für Arzneistoffe, Hilfsstoffe und Zubereitungen einschließlich verbindlicher Prüfmethode. Die Qualitätssicherung dient somit der Einhaltung einer festgelegten und definierten Qualität.

Klausurvorbereitung

Mit diesem Buch wollen wir Sie mit den mathematischen und statistischen Grundlagen vertraut machen und in die Methoden der Statistik einführen. Die Ausführungen sollen Ihnen helfen, einerseits Dokumente zur Statistik zu verstehen und zu beurteilen, ggf. selbst beim Aufbau eines betrieblichen Qualitätssicherungssystems die passenden statistischen Methoden sicher auszuwählen, aber auch eine Unterstützung zur Klausurvorbereitung (→ Kap. 7.1) bieten.

Internet-Adressen

Ein einführendes Lehrbuch kann einen guten Einstieg und einen Überblick über die Materie bieten, es kann aber nicht die gesamte Materie abbilden. Um Ihnen weiterführende Hinweise zur Literatur und zu Normen zu geben, haben wir nach jedem Hauptkapitel eine kleine Literatursammlung angegeben. Normen, Nomogramme und Auswertblätter können Sie sich beim Beuth Verlag (Deutsches Institut für Normung, DIN) in Berlin bzw. Köln (www.din.de) oder bei der Deutschen Gesellschaft für Qualität (DGQ) in Frankfurt/Main (www.dgq.de) käuflich erwerben. Viele Bibliotheken haben die Normen auch in ihrem Literaturangebot.

Für statistische Berechnungen können Sie ein kostenloses Statistikprogramm von der Internetseite der FU-Berlin herunterladen (www.statistiklabor.de).

Die Übungsaufgaben wurden von uns teilweise so gestaltet, dass sie sich den Aufgabentypen dem Institut für medizinische und pharmazeutische Prüfungsfragen, dem IMPP (www.impp.de) anlehnen. So sind einige der Übungsaufgaben Prüfungsabschnitten entnommen, einige wurde von uns entsprechend verändert, andere wiederum wurden neu gestaltet und passen im Aufbau auch nicht zum IMPP. Diese Aufgaben sollen Ihnen eine individuelle Hilfe zur Klausurvorbereitung bieten. Zu den jeweiligen Lösungen finden Sie dann meist auch eine kurze Erläuterung, sowie einen Verweis auf das entsprechende Kapitel.

Wir denken, Sie werden das nötige Rüstzeug bekommen, um Klausuren erfolgreich zu bearbeiten. Darüber hinaus verfügen Sie dann auch über Anwendungswissen, dass es Ihnen gestattet, durch gezielte Datenerhebung und Analyse eine Problematik sachgerecht anzugehen und zu lösen. So, und nun viel Spaß beim Lernen!

2 Mathematische Grundlagen

INHALTSVORSCHAU

In diesem Kapitel werden nach einer Übersicht zum Zahlensystem die Grundrechenarten, die Funktionen und deren graphische Darstellung kurz wiederholt. Anschließend lernen Sie die Grundlagen der Matrizen, Differential- und Integralrechnung, sowie das Rechnen mit Binomialkoeffizienten kennen.

2.1 Allgemeine Grundlagen und elementare Funktionen

Grundlage für alle mathematischen und naturwissenschaftlichen Arbeitsweisen bilden die Zahlen.

Reelle Zahlen sind Dezimalzahlen mit beliebiger Dezimaldarstellung. Die Menge aller reellen Zahlen wird mit \mathbb{R} bezeichnet. Auf der Menge der reellen Zahlen sind die mathematischen Operationen Addition und Multiplikation definiert. Aus denen ergeben sich Subtraktion und Division. Die Addition und Multiplikation sind durch das Distributivgesetz (Klammern auflösen) miteinander verbunden. Das Kommutativgesetz beschreibt die Vertauschbarkeit der Reihenfolge reeller Zahlen.

Darstellung reeller Zahlen auf der Zahlengeraden

Geometrisch können die reellen Zahlen als Punkte auf der Zahlengeraden angesehen werden. Eine immer wiederkehrende wichtige Eigenschaft von \mathbb{R} ist, dass das Quadrat jeder reellen Zahl einen nicht negativen Wert ergibt. Aus diesem Grund besitzen quadratische Gleichungen, wie auch Gleichungen höherer Ordnung, über \mathbb{R} nicht immer Lösungen.

Die rationalen Zahlen sind jene reellen Zahlen, deren Dezimaldarstellung von einer bestimmten Stelle an nur Nullen aufweist oder periodisch ist. Sie werden auch als Bruchzahlen bezeichnet. Eine rationale Zahl kann daher entweder als ein solcher Bruch oder in ihrer Dezimaldarstellung geschrieben werden. Die Menge aller rationalen Zahlen wird mit \mathbb{Q} angegeben.

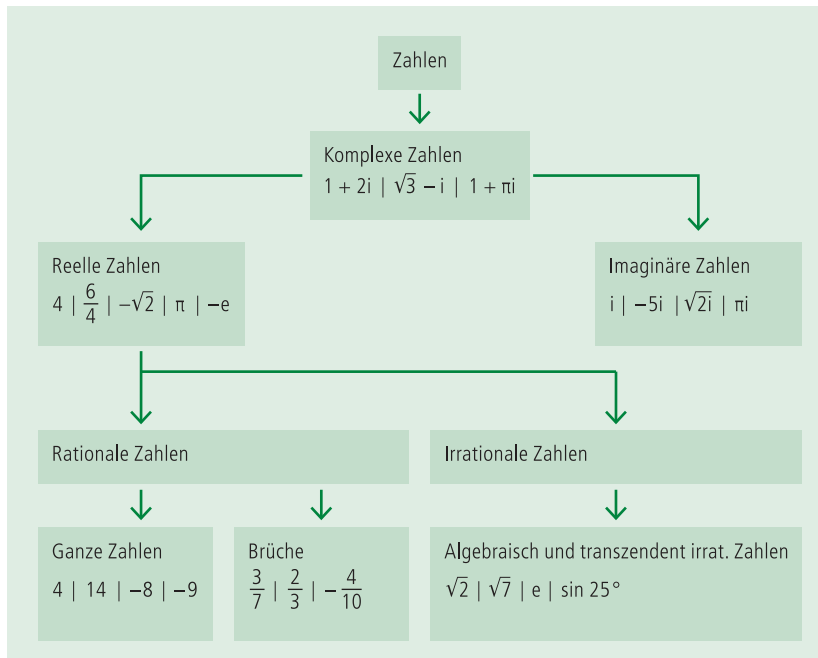
Wie man weiß, sind Wurzeln mit geradem Wurzelexponenten aus negativen Zahlen im Bereich der reellen Zahlen nicht erklärt. Um solche Größen dennoch anwenden zu können, hat man so genannte imaginäre Zahlen eingeführt. Die Quadratwurzel mit einem negativen Radikanden ist eine imaginäre Zahl. Eine wichtige Zahlenmenge, welche die reellen Zahlen verallgemeinert, sind die komplexen Zahlen. Sie erweitern den Zahlenbereich der reellen Zahlen so, dass auch Wurzeln negativer Zahlen berechnet werden können.

○ Abb. 2.1–1 zeigt eine schematische Übersicht über das gesamte Zahlensystem.

2.1.1 Grundrechenarten und Bruchrechnung

Die Addition

Zahlen (zwei oder mehrere), die zu addieren sind, heißen Summanden. Das Ergebnis wird als Summe bezeichnet. Die mathematische Verknüpfung hat die Eigenschaft, dass sie assoziativ und kommutativ ist.



○ **Abb. 2.1-1** Überblick über das gesamte Zahlensystem

Assoziativgesetz: $(a + b) + c = a + (b + c) = a + b + c$

Kommutativgesetz: $a + b = b + a$

Summen können auch mithilfe des Summensymbols dargestellt werden. Dazu wird der große griechische Buchstabe Σ (Sigma) verwendet. Unter dem Summen-symbol wird die Zählvariable mit dem Startwert angegeben. Über dem Summen-symbol ist der Endwert anzugeben. Die Rechenvorschrift folgt nach dem Summen-zeichen.

$$\sum_{i=2}^5 i^2 = 2^2 + 3^2 + 4^2 + 5^2$$

Die Subtraktion

Das Subtrahieren ist im Prinzip die entgegengesetzte Rechenoperation zur Addition. Jedoch ist hierbei zu beachten, dass, im Gegensatz zur Addition, der Grenzbereich des Zahlensystems der natürlichen Zahlen überschritten werden kann.

Zwei durch das Minuszeichen verbundene Zahlen bilden eine Differenz. Die Glieder heißen Minuend und Subtrahend. Ist der Subtrahend größer als der Minuend, so gelangt man in den Bereich der nicht natürlichen Zahlen, der negativen ganzen Zahlen.

$$1 - 4 = -3$$

Die natürlichen Zahlen sind diejenigen Zahlen, die man zum Zählen braucht. Alle positiven ganzen Zahlen sind natürliche Zahlen. Bruchzahlen (Dezimalbrüche) stellen keine natürlichen Zahlen dar.

Die Multiplikation

Die Multiplikation stellt ein wiederholtes Addieren der gleichen Summanden dar.

$$2 + 2 + 2 + 2 = 4 \cdot 2$$

Assoziativ- und Kommutativgesetz

Die miteinander zu multiplizierenden Zahlen nennt man Faktoren oder Multiplikatoren. Das Ergebnis der Rechenoperation wird als Produkt bezeichnet. Das Kommutativ- und Assoziativgesetz gilt auch hier:

$$\text{Assoziativgesetz: } (a \cdot b) \cdot c = a \cdot (b \cdot c) = a \cdot b \cdot c$$

$$\text{Kommutativgesetz: } a \cdot b = b \cdot a$$

Produkte können auch mithilfe des Produktsymbols dargestellt werden. Dazu wird der große griechische Buchstabe Π (Pi) als Produktzeichen verwendet. Unter dem Produktsymbol wird die Zählvariable mit dem Startwert angegeben. Über dem Produktsymbol wird die Anzahl der Faktoren dargestellt. Die Rechenregel folgt nach dem Produktzeichen.

$$\prod_{i=2}^5 2i+1 = 5 \cdot 7 \cdot 9 \cdot 11 \cdot 13$$

Das wiederholte Multiplizieren mit dem gleichen Faktor führt zum Potenzieren. Die Distributivgesetze (Verteilungsgesetze) sind mathematische Regeln und geben an, wie sich Verknüpfungen, zum Beispiel Multiplikation und Addition, bei der Auflösung von Klammern zueinander verhalten.

Die Division

Die Division ist die umgekehrte Rechenoperation zur Multiplikation. Das Ergebnis einer Division wird als Quotient bezeichnet. Die Zahl, durch welche geteilt wird, heißt Divisor. Die Zahl, die geteilt wird, nennt man Dividend. Eine Division ist auch als Bruch darstellbar.

$$4 : 5 = \frac{4}{5}$$

Zur Durchführung einer Division muss der Divisor unbedingt ungleich Null sein, da eine Division durch Null nicht definierbar ist.

Die Bruchrechnung

Ein Bruch ist der Teil eines Ganzen.

Jeder Bruch ist der größere oder kleinere Teil eines Ganzen und stellt ebenfalls eine Divisionsvorschrift dar. Die Zahl oberhalb des Bruchstrichs wird als Zähler (Dividend) bezeichnet, die Zahl unterhalb des Bruchstrichs als Nenner (Divisor) bezeichnet. Alle Brüche lassen sich in Dezimalzahlen umwandeln, ergeben aber nicht immer eine glatte Zahl. Solche Ergebnisse werden mit einem Strich über der immer wiederkehrenden Zahl gekennzeichnet.

$$\frac{4}{3} = 1,333\dots = 1,\bar{3}$$

Echte Brüche sind Brüche, deren Wert kleiner als 1 ist. Unechte Brüche sind solche, deren Wert größer als 1 ist.

Addition und Subtraktion von Brüchen

Unproblematisch können Brüche addiert bzw. subtrahiert werden, wenn die Nenner jeweils gleichnamig sind.

$$\frac{3}{7} + \frac{4}{7} = \frac{7}{7} = 1$$

Ungleichnamige Brüche müssen vor der eigentlichen Rechenoperation gleichnamig gemacht werden. Dazu werden die Nenner so erweitert, dass sie einen gemeinsamen Hauptnenner erhalten. Der Hauptnenner ist das kleinste gemeinsame Vielfache.

$$\frac{3}{8} + \frac{4}{7} = \frac{21}{56} + \frac{32}{56} = \frac{53}{56}$$

Multiplikation und Division von Brüchen und ganzen Zahlen

Wird ein Bruch mit einer ganzen Zahl multipliziert, so ist der Zähler mit der ganzen Zahl zu multiplizieren. Der Nenner bleibt dabei unverändert.

$$\frac{3}{8} \cdot 4 = \frac{12}{8} = \frac{3}{2} = 1,5$$

Ist ein Bruch durch eine ganze Zahl zu dividieren, so wird der Zähler durch die ganze Zahl dividiert, oder der Nenner mit dieser Zahl multipliziert.

$$\frac{10}{13} : 5 = \frac{2}{13}$$

Bei einer Multiplikation von Brüchen werden jeweils Zähler mit Zähler und Nenner mit Nenner miteinander multipliziert.

$$\frac{3}{7} \cdot \frac{5}{3} = \frac{15}{21}$$

Eine Division erfolgt dadurch, dass man den Dividenten mit dem Kehrwert des Divisors multipliziert.

$$\frac{4}{9} : \frac{5}{3} = \frac{4}{9} \cdot \frac{3}{5} = \frac{12}{45} = \frac{4}{15}$$

Gemischte Rechenzeichen innerhalb eines Bruchs

Es lassen sich nur Faktoren gegeneinander kürzen. Sind Strichoperanden im Zähler und/oder Nenner vorhanden, so sind diese zunächst auszurechnen (Punktrechnung vor Strichrechnung).

$$\frac{3+3 \cdot 7}{4+4 \cdot 3} = \frac{3+21}{4+12} = \frac{24}{16} = \frac{3}{2}$$

Um die Anwendung der vier Grundrechenarten korrekt durchführen zu können, sind zwei grundsätzliche Regeln zu beachten:

- Punktrechnung (Multiplikation, Division) geht vor Strichrechnung (Addition, Subtraktion),
- Klammerterme werden zuerst berechnet. Sind mehrere Klammern ineinander verschachtelt, so ist mit dem innersten Klammerterm zu beginnen.

Die Potenzierung

Eine Potenzierung a^n ist eine abgekürzte Schreibweise für die Multiplikation gleicher Faktoren. Die Zahl a wird als Basis bezeichnet, die Zahl n nennt man Exponent und a^n kennzeichnet den Potenzwert.

$$3 \cdot 3 \cdot 3 \cdot 3 \cdot 3 = 3^5$$

Die Radizierung

Die Radizierung (Wurzelziehen) stellt eine umgekehrte Rechenoperation zur Potenzierung dar, bzw. ist eine andere Schreibweise für $a^{\frac{1}{n}}$. Für diese Rechenoperation wird ein stilisiertes r , vom lateinischen radix ($\sqrt{\quad}$), verwendet.

$$\sqrt[5]{243} = \sqrt[5]{3 \cdot 3 \cdot 3 \cdot 3 \cdot 3} = 3$$

2.1.2 Funktionen und deren graphische Darstellung

Besteht zwischen zwei oder mehreren Größen eine gesetzmäßige Abhängigkeit und wird diese in einer Gleichung zusammengefasst, so wird sie als Funktionsgleichung bezeichnet.

Die Funktion ist eine Zuordnung von Variablen.

In der Funktionsgleichung ist immer die Größe y von der Größe x abhängig (und umgekehrt); y ist eine Funktion von x . Eine Funktion ist eine Vorschrift, die auf vollkommen eindeutige Weise jedem Wert x genau ein Wert y zuordnet. Eine Funktion stellt also die Zuordnung zwischen veränderlichen Größen (Veränderlichen, Variablen) dar. Die Zuordnung kann durch eine Tabelle, eine Gleichung oder durch eine graphische Darstellung (\rightarrow Kap. 4.3) erfolgen.

Transformation in einen linearen Zusammenhang kann Vorteile bieten.

Bevor einige Funktionen und deren Darstellung näher besprochen werden, sei jedoch betont, dass alle Trendfunktionen, werden sie zur Interpretation bestimmter Vorgänge verwendet, nur mathematische Hilfsmittel sind, um die Grundrichtung der Entwicklung näher bestimmen zu können. Sie sollten nie losgelöst von der untersuchten Erscheinung und deren Ursachen betrachtet werden. Die Bestimmung der am besten an die Beobachtungen angepassten Kurve gestaltet sich entsprechend kompliziert.

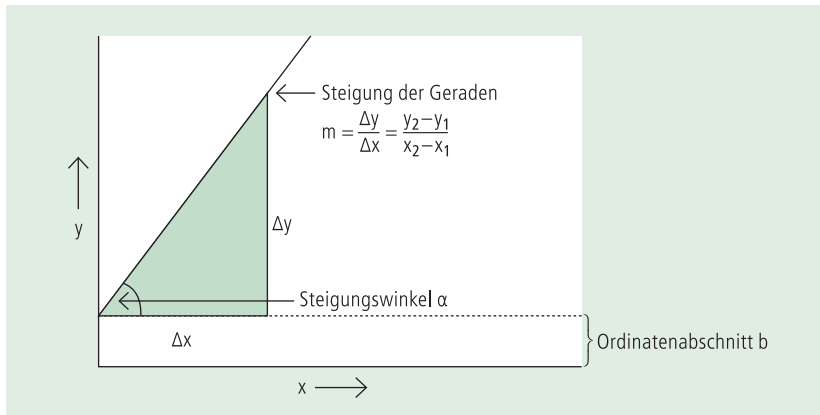
Dazu ist es manchmal nützlich, den ursprünglich nicht linearen Zusammenhang dadurch zu vereinfachen, dass man ihn auf einen linearen Zusammenhang zurückführt. So erweist sich z. B. der Übergang von den Ursprungswerten einer Variablen zu den Logarithmen doch gelegentlich als eine Transformation zur linearen Beziehung. Bei allen Transformationen wird die Skalierung der x -Achse oder/und y -Achse verändert. So können z. B. Zufallsvariable X durch Transformation überführt werden in X' mit:

$$\sqrt{X} \qquad \sqrt{\ln(X)} \qquad \sqrt{\log_{10}(X)} \qquad \sqrt{\ln \frac{X}{1-X}}$$

Stetige und monotone Funktionen

Wird der vollständige Graph einer Funktion $y = f(x)$ durch eine zusammenhängende Kurve ohne Sprünge dargestellt, so wird diese Funktion als stetig bezeichnet. Eine solche Funktion ist dann umkehrbar, wenn diese streng monoton wachsend oder streng monoton fallend ist.

Eine Funktion $y = f(x)$ ist dann streng monoton wachsend, wenn y größer wird, sobald x größer wird. Wenn y kleiner wird, sobald x größer wird, ist die Funktion streng monoton fallend.



○ **Abb. 2.1.2-1** Das Steigungsdreieck

Die lineare Funktion

Die allgemeine Funktionsgleichung linearer Funktionen ist gegeben mit:

$$y = m \cdot x + b$$

Gleichung 2.1.2-1

$$\text{bzw. } f(x) = m \cdot x + b \quad \text{bzw. } y(x) = m \cdot x + b$$

Die Funktion ist so beschaffen, dass für eingesetzte x -Werte, die mit gleich bleibenden Schritten erhöht oder vermindert werden, sich auch die Funktionswerte y um gleich bleibende Schritte erhöhen oder vermindern. In der graphischen Darstellung resultiert daraus ein gerader Kurvenverlauf. Geht man im Graphen von einem beliebigen Punkt auf der Geraden um m Einheiten nach rechts, so geht man ebenfalls auf der y -Achse um m Einheiten nach oben, um zum Graphen zurück zu gelangen. Bei negativem Faktor m muss man an der y -Achse nach unten gehen. Diese Darstellung mit den Abschnitten der Geraden wird als Steigungsdreieck (○ Abb. 2.1.2-1) bezeichnet. Weitere Ausführungen zur Statistik der Geraden finden Sie im Kap. 10.

Der Faktor m vor dem x in der Gleichung 2.1.2-1 bestimmt die Steigung. An ihm ist abzulesen, wie stark die Gerade steigt oder fällt. Der Summand b (der sowohl positiv als auch negativ sein kann), bezeichnet im Funktionsterm die Stelle, an welcher die Gerade die y -Achse schneidet. Der Winkel der Geraden mit der positiven Richtung wird als Steigungswinkel α bezeichnet.

Das Steigungsdreieck

Lineare Funktionen und ihre graphische Darstellung besitzen eine zentrale Bedeutung und werden z. B. häufig bei der analytischen Gehaltsbestimmung verwendet. Aber auch kinetische Reaktionen nullter Ordnung (z. B. Ethanol-Elimination, kutane Arzneistoffresorption aus Salben und Pflastern) zeigen einen geraden Kurvenverlauf.

Die Exponentialfunktion

Die Exponentialfunktionen gehören, wie auch die logarithmischen und die trigonometrischen Funktionen, zu den transzendenten Funktionen. Bei den transzendenten Funktionen wird y durch logarithmische, trigonometrische oder andere

Rechenverfahren bestimmt. Definiert ist die Exponentialfunktion durch die Beziehung:

$$y = a^x$$

Gleichung 2.1.2-2

Die Exponentialfunktion lässt sich graphisch nur darstellen, wenn $a > 1$, $a = 1$ und $0 < a < 1$ ist. Für $a \leq 0$ ist die Funktion nicht erklärt. Funktionen lassen sich durch einfach geteiltes logarithmisches Papier (halblogarithmische Darstellung) zu einer Geraden bildlich darstellen.

log-Funktionen sind Umkehrfunktionen der Exponentialfunktionen.

Die logarithmischen Funktionen sind die Umkehrfunktionen zu den Exponentialfunktionen. Wenn $y = a^x$, dann gilt:

$$x = \lg_a y$$

Gleichung 2.1.2-3

Also wird beim Logarithmieren die Hochzahl (der Exponent) gesucht, der zusammen mit der Basis a die Zahl y darstellen kann.

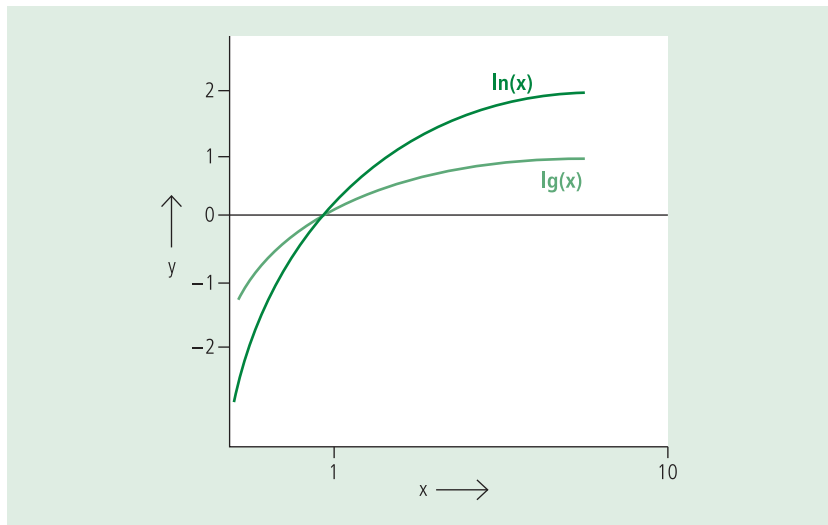
In einem Koordinatensystem verläuft eine logarithmische Kurve stets rechts der y-Achse, da keine reellen Logarithmen für negative x-Werte existieren. Die am häufigsten gebrauchten Logarithmen sind die dekadischen Logarithmen mit der Basis 10 und die natürlichen Logarithmen mit der Basis $e \approx 2,71828$.

$$y = \lg_{10} x = \lg x$$

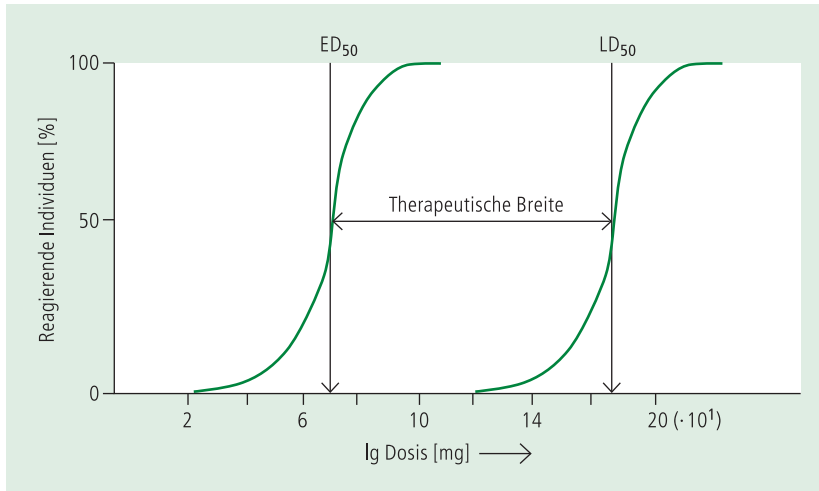
Gleichung 2.1.2-4

$$y = \lg_e x = \ln x$$

Gleichung 2.1.2-5



○ **Abb. 2.1.2-2** Graphische Darstellung von $\ln(x)$ und $\lg(x)$



○ **Abb. 2.1.2-3** Schematische Darstellung der therapeutischen Breite über lg Dosis

Beispiel 2.1.2-1

Zur Bestimmung der therapeutischen Breite eines Arzneimittels werden therapeutische Wirkung (ED_{50}) und letale Wirkung (LD_{50}) herangezogen. Die Bestimmung und graphische Darstellung erfolgt dazu über den dekadischen Logarithmus der Dosis des Arzneimittels.

Auch zur pH-Wertberechnung und zur Berechnung der Absorption von Licht durch z. B. farbige Lösungen wird der dekadische Logarithmus angewandt:

Beispiel 2.1.2-2

Welchen pH-Wert besitzt eine $5 \cdot 10^{-4}$ molare Natriumhydroxid-Lösung?

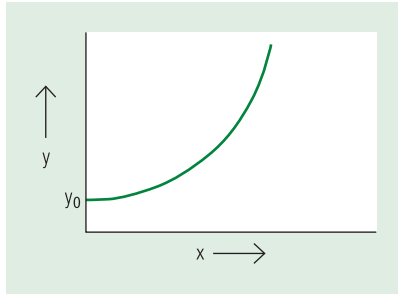
Lösung $c(\text{OH}^-) = 5 \cdot 10^{-4} = 0,0005$, $p(\text{OH}^-) = -\lg(0,0005) = 3,3$

Ionenprodukt des Wassers $pK_w = 14 \Rightarrow pH = pK_w - p(\text{OH}^-) = 14 - 3,3 = \underline{\underline{10,7}}$
Der pH-Wert der Natriumhydroxid-Lösung beträgt 10,7.

Durchläuft monochromatisches Licht eine Lösung, welches Licht der eingestrahlenen Wellenlänge absorbiert, so wird die Intensität des einfallenden Lichts I_0 auf einen Wert I_D abgeschwächt. Das Maß der Abschwächung wird als Extinktion E bezeichnet. Die Extinktion ist durch folgenden Zusammenhang gegeben (I_0 = Gesamtenergie des eingestrahlenen Lichts, I_D Energie des durchgelassenen Lichts):

$$E = \lg \frac{I_0}{I_D}$$

Gleichung 2.1.2-6



○ **Abb. 2.1.2–4** Wachstumsfunktion (schematisch)

Beispiel 2.1.2–3

Welche Extinktion errechnet sich für eine Lösung, wenn 50 % der Energie des einfallenden Lichts absorbiert werden?

Lösung
$$E = \lg \frac{I_0}{I_D} = \lg \frac{100\%}{50\%} = \lg 2 = \underline{\underline{0,301}}$$

Die Extinktion beträgt $E = 0,301$.

Vorgänge in der Natur werden häufig durch Exponentialfunktionen beschrieben.

In der HPTLC-Technik ist oft die Fläche registrierter Absorbtions-Ortskurven zur aufgetragenen Substanzmenge nicht proportional. Kalibrierkurven zur quantitativen Auswertung zeigen häufig keine lineare Regression (→ Kap. 10).

Viele Vorgänge in der Natur können durch Exponentialfunktionen beschrieben werden, insbesondere Wachstums-, Zerfalls- oder Abkling- und Sättigungsvorgänge.

Wachstumsvorgänge

Bakterien in einer Bakterienkultur (→ Kap. 4.1.5) wachsen in einer bestimmten Phase exponentiell an; auch die Zahl der gespaltenen Atomkerne bei einer Kettenreaktion in Abhängigkeit von der Zeit zeigt den folgenden Zusammenhang:

$$y(x) = y_0 \cdot e^{a \cdot x}$$

Gleichung 2.1.2–7

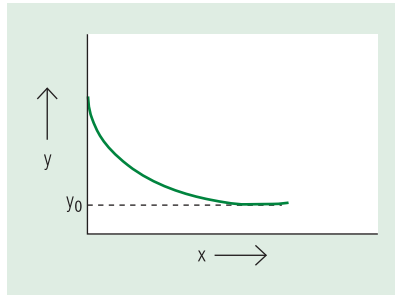
Zerfalls- oder Abklingvorgänge

Typische Zerfallsreaktionen finden sich beim radioaktiven Zerfall oder bei der Hydrolyse eines Stoffes in Abhängigkeit von der Zeit. Auch die Ausscheidung von Arzneistoffen aus dem Körper wird entsprechend beschrieben.

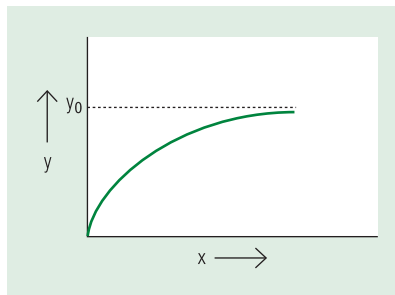
$$y(x) = y_0 \cdot e^{-a \cdot x}$$

Gleichung 2.1.2–8

○ **Abb. 2.1.2-5** Zerfalls- oder Abklingfunktion (schematisch)



○ **Abb. 2.1.2-6** Sättigungsfunktion (schematisch)



Sättigungsvorgänge

Zu solchen Vorgängen gehören z. B. enzymatische Prozesse. Ab einer gewissen Menge Substanz kann ein Enzym einfach nicht mehr zusätzliche Substanz umsetzen. Auch der Ladevorgang eines Kondensators bezüglich der Spannung in Abhängigkeit von der Zeit zeigt Sättigungsverhalten. Solche Funktionen besitzen allgemein folgenden oder ähnlichen Verlauf:

$$y(x) = y_0 \cdot (1 - e^{-a \cdot x})$$

Gleichung 2.1.2-9

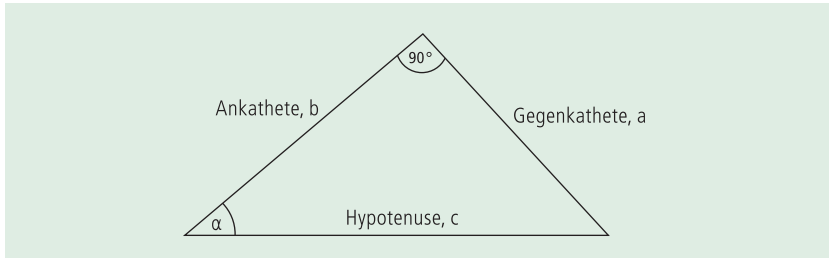
Die Winkelfunktionen

Mit Winkelfunktionen (trigonometrische Funktionen) werden rechnerische Zusammenhänge zwischen einem Winkel und dessen Seitenverhältnissen bezeichnet. Die gebräuchlichsten trigonometrischen Funktionen sind die Sinus- (sin), Kosinus- (cos) und Tangensfunktion (tan). Ursprünglich in rechtwinkligen Dreiecken nur für Seitenverhältnisse definiert, können die Winkelfunktionen auch als Sekanten- und Tangentenabschnitte am Einheitskreis für größere Winkel als 90° angewendet werden. Die Winkelfunktionen werden allgemein zur Beschreibung periodischer Vorgänge genutzt.

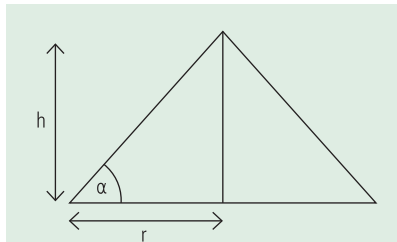
In einem rechtwinkligen Dreieck werden die Winkel α über das Verhältnis von Ankathete, Gegenkathete und Hypotenuse untereinander beschrieben:

$$\sin \alpha = \frac{\text{Gegenkathete}}{\text{Hypotenuse}} = \frac{a}{c}$$

Gleichung 2.1.2-10



○ **Abb. 2.1.2–7** Winkelfunktionen im rechtwinkligen Dreieck



○ **Abb. 2.1.2–8** Messung des Fließneigungswinkels (Haufwerk, schematisch)

$$\cos \alpha = \frac{\text{Ankathete}}{\text{Hypotenuse}} = \frac{b}{c}$$

Gleichung 2.1.2–11

$$\tan \alpha = \frac{\text{Gegenkathete}}{\text{Ankathete}} = \frac{a}{b}$$

Gleichung 2.1.2–12

$$\cot \alpha = \frac{\text{Ankathete}}{\text{Gegenkathete}} = \frac{b}{a}$$

Gleichung 2.1.2–13

Beispiel 2.1.2–4

Ein Qualitätsmerkmal für einen Trockenextrakt ist u. a. der Fließneigungswinkel. Dazu wird der Trockenextrakt über einen Trichter gegeben und bildet auf einer Unterlage einen Kegel, dessen Neigungswinkel gemessen wird (○ Abb. 2.1.2–8). Je flacher der Kegel ist, d. h. je kleiner der Winkel ist, umso besser ist die Fließeigenschaft des Trockenextraktes.

Im Wareneingang eines pharmazeutischen Betriebes wird eine Lieferung des Trockenextraktes begutachtet. Dazu wird u. a. der Fließneigungswinkel bestimmt. Der Neigungswinkel α darf laut Spezifikation höchstens 30° betragen. Sechs Messungen ergaben jeweils als Mittelwert für die Höhe $h = 5,1$ cm und den Radius $r = 9,8$ cm. Wird die Anforderung erfüllt?

Lösung Gefragt ist nach $\tan \alpha$ mit:

$$\tan - = \frac{\text{Gegenkathete}}{\text{Ankathete}} = \frac{h}{r} = \frac{5,1}{9,8} = \underline{\underline{0,5204}} \Rightarrow - = \underline{\underline{27,5^\circ}}$$

Die Qualitätsanforderung $\alpha \leq 30^\circ$ wird erfüllt.

Die quadratische Gleichung

2.1.3

Die quadratische Gleichung ist ein Spezialfall eines Polynoms. Ein Polynom (\rightarrow Kap. 2.4.5, 10.2.1) ist ein Term, der von einer oder mehreren Variablen abhängt. Hängt ein Polynom von einer Variablen ab, so wird die höchste auftretende Potenz dieser Variable als Ordnung oder Grad des Polynoms bezeichnet.

Ein Polynom erster Ordnung wird allgemein auch als linear bezeichnet. Ein Polynom zweiter Ordnung heißt quadratisch (Gleichung 2.1.3–1), ein Polynom dritter Ordnung wird als kubisch bezeichnet.

Polynom
 – 1. Ordnung = linear
 – 2. Ordnung = quadratisch
 – 3. Ordnung = kubisch

$$ax^2 + bx + c = 0$$

Gleichung 2.1.3–1

Die Graphen quadratischer Funktionen sind Parabeln und durch drei Punkte eindeutig festgelegt. Aus den Koordinaten dreier Punkte lassen sich drei Gleichungen mit drei Unbekannten erzeugen. Ein Polynom zweiter Ordnung besitzt zwei, eine oder keine Lösung. Mittels Division durch a wird eine solche Gleichung auf die Normalform gebracht.

$$x^2 + px + q = 0$$

Gleichung 2.1.3–2

Die Auflösung der allgemeinen Gleichung nach x ergibt:

$$x_{1,2} = -\frac{p}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{p}{2}\right)^2 - q}$$

Gleichung 2.1.3–3

Binomialkoeffizienten und Fakultäten zur Berechnung von Wahrscheinlichkeiten

2.1.4

Mithilfe eines Binomialkoeffizienten kann in der Kombinatorik die Anzahl von Möglichkeiten, bestimmte Elemente aus einer Gesamtheit auszuwählen, berechnet werden, ohne die Reihenfolge der Auswahl zu beachten. Es spielt also keine Rolle, in welcher Reihenfolge bestimmte Dinge ausgewählt werden.

Letztendlich sind damit die Grundlagen für diskrete Verteilungen (hypergeometrische, binomialverteilte und poissonverteilte Wahrscheinlichkeiten) gelegt. Anwendung finden sie bei attributiven Prüfungen, z. B. bei der Validierung von Gehaltsbestimmungen (Partikelmessung), der Anwendung von Qualitätsregelkarten (Prozessüberwachung) oder bei attributiven Qualitätskontrollen (\rightarrow Kap. 5). Die Berechnung von Wahrscheinlichkeiten für diskrete Verteilungen (\rightarrow Kap. 5) erfolgt über Binomialkoeffizienten. Der Binomialkoeffizient kann aus der binomischen Reihe abgeleitet werden und hat auch daher seinen Namen.

Binomialkoeffizienten bilden die Grundlage zu den diskreten Verteilungen.

Die Schreibsymbolik $\binom{n}{k}$ wird als Binomialkoeffizient (sprich: n über k) bezeichnet.

Es gilt allgemein:

$$\binom{n}{k} = \frac{n \cdot (n-1) \cdot (n-2) \cdot (\dots) \cdot (n-k+1)}{1 \cdot 2 \cdot 3 \cdot (\dots) \cdot k} = \frac{n!}{k! \cdot (n-k)!} = \binom{n}{n-k} \quad \text{Gleichung 2.1.4-1}$$

wobei n und k natürliche Zahlen darstellen. Dabei ist $n!$:

$$n! = n \cdot (n-1) \cdot (n-2) \cdot (n-3) \cdot (\dots) \cdot 1 \quad \text{Gleichung 2.1.4-2}$$

Beispiel 2.1.4-1

$$5! = 5 \cdot 4 \cdot 3 \cdot 2 \cdot 1 = 120$$

Das Produkt der ersten natürlichen Zahlen $1, 2, 3, (\dots), n$ heißt n Fakultät (auch n Faktorielle) und wird mit $n!$ angegeben. So fortfahrend erhält man die Eigenschaft, dass n verschiedene Dinge auf verschiedene Arten angeordnet werden können. Jede Anordnung von n verschiedenen Dingen heißt „Permutation“. Die Anzahl der Permutationen von n Elementen ist $n!$

Die Berechnung eines Binomialkoeffizienten ist dabei recht einfach. Im Zähler werden die Faktoren jeweils um 1 kleiner (begonnen mit der höchsten Zahl), die für die im Nenner stehende Zahl an Faktoren benötigt werden. Im Nenner stehen die aufsteigenden Faktoren für k Stücke.

Wichtige Definitionen für Binomialkoeffizienten sind:

$$\binom{n}{0} = 1 \quad \text{Gleichung 2.1.4-3}$$

$$\binom{n}{1} = n \quad \text{Gleichung 2.1.4-4}$$

$$\binom{n}{n} = 1 \quad \text{Gleichung 2.1.4-5}$$

Beispiel 2.1.4-2

Wie groß ist die Wahrscheinlichkeit, dass bei einem Skatenspiel (32 Karten) zwei Buben in dem Skat (die beiden Karten, welche in die Mitte gelegt werden) liegen?

Lösung

Dafür werden zunächst aus den 32 Karten 2 Karten in den Skat gelegt; dafür gibt es:

$$\binom{32}{2} = \frac{32 \cdot 31}{1 \cdot 2} = 496 \text{ verschiedene Möglichkeiten}$$

Es gibt somit 496 verschiedene Möglichkeiten 2 von 32 Karten in dem Skat anzuordnen. Da aber die Frage nach den „Buben“ gestellt ist, müssen zunächst die Möglichkeiten errechnet werden, mit denen aus 4 Buben zwei ausgewählt werden können:

$$\binom{4}{2} = \frac{4 \cdot 3}{1 \cdot 2} = 6 \text{ verschiedene Möglichkeiten}$$

Für das Ereignis sind somit 6 günstige Fälle gegeben, mit denen Buben in den Skat gelangen können. Die Wahrscheinlichkeit (\rightarrow Kap. 2.6) dafür beträgt dann:

$$p = \frac{6}{496} = 0,01210 \approx \underline{\underline{1,2\%}}$$

Die Wahrscheinlichkeit beträgt etwa 1,2 %, dass sich 2 Buben im Skat befinden.

Zur Berechnung für größere Zahlen kann die Stirling-Gleichung als Näherung herangezogen werden. Im Allgemeinen rechnen handelsübliche Taschenrechner nur bis 69!

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

Gleichung 2.1.4–6

Merke

Aus n Elementen kann man $\binom{n}{k}$ mal k Elemente ohne Wiederholung auswählen, wenn ihre Reihenfolge bedeutungslos ist.

Es sei darauf hingewiesen, dass es auch noch eine weitere Kombination der Elemente ohne Wiederholung gibt, bei der die Reihenfolge der Anordnung jedoch berücksichtigt wird. Daneben gibt es noch die Kombination mit Wiederholung und ohne Berücksichtigung der Anordnung, sowie mit Berücksichtigung der Anordnung. Hier sei jedoch auf weiterführende Literatur verwiesen.

Das Runden von Dezimalzahlen

2.1.5

Angaben von Zahlen aus wissenschaftlichen Bereichen sind an einige Regeln gebunden, die in verschiedenen DIN-Normen festgelegt sind. Es gibt zwei Arten der Rundung:

- Runden auf k Stellen nach dem Komma,
- Runden auf k signifikante Ziffern.

Runden auf k Stellen nach dem Komma

So wird beim Runden die letzte Stelle, die nach dem Runden bei der Zahl verbleibt, Rundestelle genannt. Für das Runden gelten folgende Regeln:

- befindet sich rechts neben der Rundestelle eine der Ziffern „0“ bis „4“, so wird abgerundet,
- befindet sich rechts neben der Rundestelle eine der Ziffern „5“ bis „9“, so wird aufgerundet.

Dadurch werden beim Abrunden die Ziffern rechts von der Dezimale weggelassen, während beim Aufrunden die letzte verbleibende Stelle um 1 größer wird.

Beispiel 2.1.5-1

Die Zahl $\pi = 3,1415926535 \dots$ ist auf zwei und vier Kommastellen genau anzugeben:

Rundeverfahren:	Abrunden	Aufrunden
Gerundete Zahl:	3,14	3,1416

Mathematisch lässt sich die Rundungsregel auf k Nachkommastellen auch wie folgt formulieren:

- Die Zahl wird auf mindestens $k + 1$ Nachkommastellen berechnet.
- An der k -ten Stelle wird abgeschnitten.
- Ist die erste abgeschnittene Ziffer (entspricht der $k + 1$ Ziffer) mindestens gleich 5, so ist $1 \cdot 10^{-k}$ hinzu zu addieren.

Das führt dazu, dass höchstens eine Differenz von $\pm 0,5 \cdot 10^{-k}$ zwischen dem auf k Nachkommastellen gerundeten Wert der Zahl z und den exakten Wert der Zahl z besteht.

Der absolute maximale Rundungsfehler beträgt somit

$$|\Delta z| = 0,5 \cdot 10^{-k} \qquad \text{Gleichung 2.1.5-1}$$

Merke

Wird eine Zahl mit k Nachkommastellen angegeben, so wird stillschweigend vorausgesetzt, dass zwischen dem angegebenen Wert und dem exakten Wert eine Differenz von maximal $\pm 0,5 \cdot 10^{-k}$ besteht.

Beispiel 2.1.5-2

Die beiden Mengenangaben „50 mg“ und „0,05 g“ hätten z. B. in einer Spezifikation nicht die gleiche Bedeutung, obwohl sie von der absoluten Masse aus betrachtet gleich sind ($0,05 \text{ g} = 50 \text{ mg}$).

50 mg besitzt keine Kommastelle,

$$\text{also } k = 0 \Rightarrow 0,5 \cdot 10^{-k} = 0,5 \cdot 10^{-0} = 0,5 \cdot 1 = 0,5$$

Damit ergibt sich für die Differenz: $50 \pm 0,5 \text{ mg} = 49,5 - 50,5 \text{ mg}$

0,05 g besitzt zwei Kommastellen, also $k = 2 \Rightarrow 0,5 \cdot 10^{-k} = 0,5 \cdot 10^{-2} = 0,005$

Damit ergibt sich für die Differenz: $0,05 \pm 0,005 \text{ g} = 0,045 - 0,055 \text{ g}$

Beispiel 2.1.5-3

Wie müsste dann die 0,05 g Angabe lauten, damit sie in ihrer Genauigkeit gleich der Angabe in Milligramm ist?

0,050 g besitzt drei Kommastellen, also $k = 3 \Rightarrow 0,5 \cdot 10^{-k} = 0,5 \cdot 10^{-3} = 0,0005$

Damit ergibt sich für die Differenz: $0,050 \pm 0,0005 \text{ g} = 0,0495 - 0,0505 \text{ g}$

Das würde dann in der Genauigkeit der Angabe zu „50 mg“ äquivalent sein.

Der relative Rundungsfehler ist dann das Verhältnis aus absolutem Rundungsfehler Δz und dem Zahlenwert z . Das Verhältnis des größtmöglichen Fehlers der zu berechnenden Größe gibt einen guten Einblick in die Tragweite eines Fehlers. Im Gegensatz zum absoluten Fehler stellt der relative Fehler eine dimensionslose Größe dar und wird im Allgemeinen in Prozent ausgedrückt.

$$\% = \left| \frac{\Delta z}{z} \right| \cdot 100\%$$

Gleichung 2.1.5-2

Beispiel 2.1.5-4

Die Nachkommastellen haben auch Relevanz in der Analytik. So formuliert das europäische Arzneibuch (Ph. Eur.) folgende Präzision für das Wägen:

Bei Einwaage:

± 5 Einheiten der letzten angegebenen Ziffer; z. B. ist dann für „0,25“ eine Angabe der Zahl wie folgt erforderlich: 0,245 – 0,255.

Beispiel 2.1.5-5

Runden Sie $\sqrt{2}$ auf 2 Stellen nach dem Komma (k Stellen) und geben Sie den absoluten und maximalen relativen Rundungsfehler an.

Lösung $\sqrt{2} = 1,4142135 \dots \Rightarrow 1,41$

max. absoluter Fehler $\Rightarrow |\Delta z| = 0,5 \cdot 10^{-k} = 0,5 \cdot 10^{-2} = \underline{\underline{0,005}}$

max. relativer Fehler $\Rightarrow \% = \left| \frac{\Delta z}{z} \right| \cdot 100\%$

$$= \left(\frac{0,005}{1,41} \right) \cdot 100 = 0,3456 = \underline{\underline{0,35\%}}$$

Beispiel 2.1.5-6

Bestimmen Sie den relativen Fehler und den absoluten Fehler für y der Funktion

$$y = \frac{a^2}{b + \sqrt{c}} \quad \text{mit den gerundeten Werten } a = 3,0 \text{ und } b = 3,8,$$

sowie dem exakten Wert $c = 14$.

Lösung In die Funktion eingesetzt ergibt sich zunächst:

$$y = \frac{a^2}{b + \sqrt{c}} = \frac{3^2}{3,8 + \sqrt{14}} = \underline{\underline{1,1934}}$$

Die k Nachkommastellen für a und b sind jeweils mit $k = 1$ gegeben. Mit Gleichung 2.1.5-1 ergeben sich der maximale (also nach oben $+\Delta$ und nach unten $-\Delta$) Fehler für a und b :

$$\begin{aligned} |\Delta z| &= 0,5 \cdot 10^{-k} = 0,5 \cdot 10^{-1} = \underline{0,05} \\ \Rightarrow a_{\min} &= 3,0 - 0,05 = 2,95 & b_{\min} &= 3,8 - 0,05 = 3,75 \\ \Rightarrow a_{\max} &= 3,0 + 0,05 = 3,05 & b_{\max} &= 3,8 + 0,05 = 3,85 \end{aligned}$$

Anschließend ist für die Fehlerberechnung das jeweilige y_{\min} und y_{\max} zu bestimmen:

$$\begin{aligned} y_{\min} &= \frac{a_{\min}^2}{b_{\max} + \sqrt{c}} = \frac{2,95^2}{3,85 + \sqrt{14}} = \underline{1,1463} \\ y_{\max} &= \frac{a_{\max}^2}{b_{\min} + \sqrt{c}} = \frac{3,05^2}{3,75 + \sqrt{14}} = \underline{1,2417} \end{aligned}$$

\Rightarrow Für Δy ist der obere max-Wert ($+\Delta$) und der untere min-Wert ($-\Delta$) zu addieren durch 2 zu dividieren.

$$|\Delta y| = 0,5 \cdot (y_{\max} - y_{\min}) = 0,5 \cdot (1,2417 - 1,1463) = \underline{0,0477}$$

Der absolute Fehler beträgt 0,0477.

Mit Gleichung 2.1.5-2 wird der relative Fehler bestimmt:

$$\% = \left| \frac{\Delta z}{z} \right| \cdot 100\% = \left| \frac{0,0477}{1,1934} \right| \cdot 100 = \underline{4,0\%}$$

Runden auf k signifikante Ziffern

Entsprechend einem zugrundeliegenden Kontext sind Messergebnisse nur mit einer bestimmten Anzahl signifikanter Stellen (oder Ziffern) anzugeben. Dabei sind „signifikante Stellen“ nicht mit Nachkommastellen (Anzahl der Ziffern nach dem Komma) zu verwechseln. Was ist nun konkret darunter zu verstehen?

Die Anzahl signifikanter Ziffern ist die Mindestzahl von Stellen, die gebraucht wird, um bei wissenschaftlichen Aussagen einen Zahlenwert ohne wesentlichen Informationsverlust anzugeben. Unter den signifikanten Stellen einer Zahl versteht man somit die Ziffernfolge ohne Berücksichtigung eines eventuell vorhandenen Kommas. Sind Zahlen kleiner als „1“, so erfolgt die Angabe ohne die Null vor dem Komma und dann ohne die noch ggf. folgenden Nullen.

Beispiel 2.1.5-7

Zahl	Signifikante Ziffern
123,4	4
$1,234 \cdot 10^{-3}$	4
1,2300	5
0,13052	5
0,0305	3

Beispiel 2.1.5–8

Ist eine Zahlenangabe auf drei signifikante Stellen genau angegeben, dann wird z. B. aus: $m = 0,0042851 \text{ mg}$ es wird dazu nach der „8“ abgetrennt mit
 $\Rightarrow m = 0,00428 \pm 51 \text{ mg} \quad \Rightarrow m = 0,00429 \text{ mg} = 4,29 \cdot 10^{-3} \text{ mg}$

Beim Umgang mit Messwerten nach arithmetischen Operationen ist die Anzahl der beizubehaltenden signifikanten Stellen zu ermitteln. Wichtig ist dabei, dass Rundungen nicht jeweils bei den Zwischenergebnissen vorgenommen werden, sondern erst am Endergebnis.

Addition und Subtraktion

Sind Anzahl der signifikanten Ziffern bei den Zahlen gleich, so besitzt das Ergebnis die gleiche Anzahl signifikanter Ziffern.

Beispiel 2.1.5–9

$$1,234 \cdot 10^{-3} + 4,321 \cdot 10^{-3} = 5,555 \cdot 10^{-3}$$

Vier signifikante Ziffern Vier signifikante Ziffern

Jedoch ist es auch möglich, dass die Anzahl signifikanter Ziffern im Endergebnis von den einzelnen Zahlen abweichen.

Beispiel 2.1.5–10

$$7,28 \cdot 10^{-9} - 6,33 \cdot 10^{-9} = 0,95 \cdot 10^{-9} \quad \Rightarrow \quad 3 \text{ zu } 2 \text{ signifikante Ziffern}$$

Prinzipiell sollten alle Zahlen zuvor so umgewandelt werden, dass die Größenordnungen gleich sind.

Multiplikation und Division

Bei der Multiplikation zweier Zahlen mit k signifikanten Ziffern sind maximal $k - 1$ Ziffern des Produktes als verlässlich zu betrachten. Das Gleiche gilt für die Division.

Somit kann folgendes festgestellt werden:

Werden zwei Zahlen mit unterschiedlichen k signifikanten Stellen (k_1 und k_2) miteinander multipliziert oder dividiert, so ist das Ergebnis mit der geringeren k signifikanten Stelle als zuverlässig anzusehen.

Beispiel 2.1.5–11

$$3,257833 \cdot 10^{-9} \cdot 3,21 \cdot 10^{12} = 10,5 \cdot 10^3$$

\Rightarrow die 3 signifikanten Ziffern der „3,21“ haben Priorität

$$28,25 : 2,46335 = 11,47$$

\Rightarrow die 4 signifikanten Ziffern der „28,25“ haben Priorität

2.2 Vektoren

2.2.1 Was sind Vektoren?

Im vorangegangenen Kapitel haben wir Zahlen und die Darstellung von funktionalen Zusammenhängen mit Zahlen besprochen. Vektoren sind eine leistungsfähige Erweiterung dieser Darstellung von Zusammenhängen. Mit Zahlen können Zustände bereits quantitativ beschrieben werden. Mithilfe von Vektoren kann ein Satz von zusammengehörenden Zahlen gemeinsam betrachtet und ausgewertet werden.

Fast alle von Ihnen sind während ihrer Schulzeit bereits mit Vektoren in Berührung gekommen, traditionell werden sie dort im Physikunterricht im Zusammenhang mit Kräften vorgestellt. Da nicht alle Leser positive Assoziationen zu diesem Stoff haben, haben wir bewusst einen anderen Einstieg gewählt. Leser/innen, die gern an ihr Schulwissen anknüpfen wollen, finden diese Bezüge aber später bei den Beispielen 2.2.2–3 und 2.2.2–4.

Vektoren sind Listen von zusammenhängenden Zahlen.

Vektoren sind allgegenwärtig, obwohl wir uns dies nicht immer bewusst machen. Listen von zusammengehörigen Zahlen sind Vektoren.

Beispiel 2.2.1–1

Die Blutdruckwerte von neun Probanden in einer Liste zusammengestellt:

Nr. Proband	1	2	3	4	5	6	7	8	9
Δp (diastolisch, in mm Hg ¹⁾)	82	79	92	78	85	65	95	84	73

¹⁾ Der Blutdruck wird aus historischen Gründen nach wie vor in mm Quecksilbersäule angegeben; 760 mm Hg = 1013 mbar.

Beispiele zur Vektordarstellung

Als Vektor geschrieben vereinfacht sich diese Tabelle zu (82, 79, 92, 78, 85, 65, 95, 84, 73); zum Teil werden Vektoren auch spaltenweise geschrieben, dann erhält man:

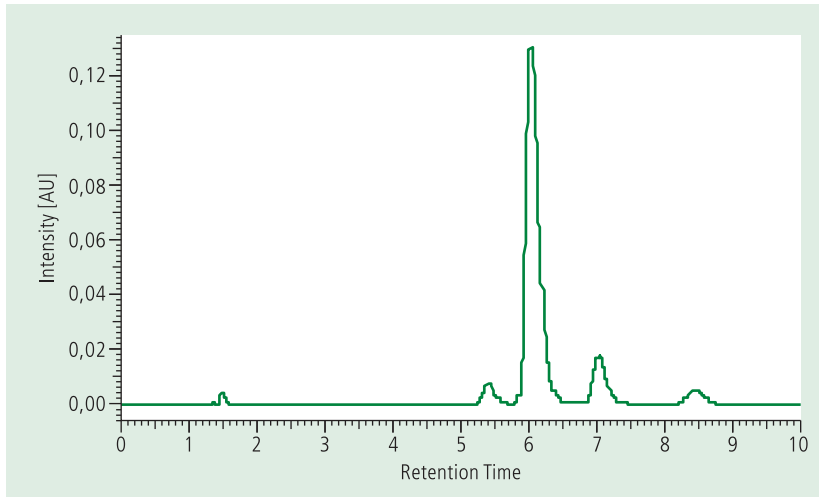
$$\begin{pmatrix} 82 \\ 79 \\ 92 \\ 78 \\ 85 \\ 65 \\ 95 \\ 84 \\ 73 \end{pmatrix}$$

Diese Kurzschreibweise erleichtert den Vergleich von Werten:

Ursprünglicher Vektor: (82, 79, 92, 78, 85, 65, 95, 84, 73)

Vektor nach Messung 6 h später: (80, 72, 93, 76, 84, 68, 102, 80, 74)

Vektor nach Messung einen Monat später: (80, 75, 84, 76, 82, 60, 88, 80, 71)
(nachdem ein blutdrucksenkendes Mittel verabreicht wurde)



○ **Abb. 2.2.1–1** Chromatographische Auftrennung des Arzneistoffs Pilocarpin von während der Lagerung entstandenen Nebenkomponenten

Auch ein rechnerischer Vergleich wird durch diese Darstellung möglich (→ Kap. 2.2.2, 2.2.3 und 2.2.6). Beispiele für Listen mit Zahlen, die sinnvoll als Vektoren dargestellt werden können, gibt es sehr viele. Hier eine kleine Auswahl:

- Blutzuckerspiegel von verschiedenen Patienten,
- Wirkstoffgehalt in verschiedenen Tabletten aus der gleichen Packung,
- Preisliste aller Antibiotika.

Auch zeitliche Verläufe können vektoriell dargestellt werden, zum Beispiel Veränderungen des Blutdrucks oder des Blutzuckers beim selben Patienten, aber jeweils mit einer Stunde Abstand gemessen.

Im Praktikum Instrumentelle Analytik werden Sie sich mit Chromatographie und Elektrophorese beschäftigen. Auch hier können die Werte auf der y-Achse, die Signalwerte, zeitlich geordnet als Vektor dargestellt werden. Ebenso können Spektren vektoriell dargestellt werden.

Schließlich dienen Vektoren auch als Kurzschreibweise für Gleichungen oder Teile von Gleichungen: statt $6x + 7y$ kann man einfacher $(6, 7)$ schreiben.

Es gibt eine allgemeine Symbolik für Vektoren. Während Zahlen durch Buchstaben a, b, c, \dots, x, y, z dargestellt werden, werden Vektoren als Frakturbuchstaben, als fettgedruckte Buchstaben oder als Buchstaben mit Pfeil dargestellt. Wir verwenden fettgedruckte Buchstaben und schreiben z. B.

$$\mathbf{a} \in \mathbb{R}^2$$

So drücken wir aus, dass \mathbf{a} ein Vektor ist, der aus zwei reellen Zahlen besteht; wollen wir offenlassen, aus wie vielen Zahlen der Vektor besteht, schreiben wir

$$\mathbf{a} \in \mathbb{R}^n$$

Verkürzte Schreibweise

Vektordarstellung als Frakturbuchstabe, fettgedrucktem Buchstaben oder mit Pfeil

2.2.2 Die Addition von Vektoren

Vektoren werden addiert, indem ihre zugehörigen Komponenten addiert werden:

$$\begin{aligned} \mathbf{a} + \mathbf{b} &= (a_1 + b_1, a_2 + b_2, \dots, a_n + b_n) && \text{Gleichung 2.2.2-1} \\ \mathbf{a} &= (a_1, a_2, \dots, a_n), \mathbf{b} = (b_1, b_2, \dots, b_n) \end{aligned}$$

Dazu müssen beide Vektoren selbstverständlich aus gleich vielen Zahlen bestehen.

Beispiel 2.2.2-1

$$\mathbf{a} = (2, 3), \mathbf{b} = (2, 5); \mathbf{a} + \mathbf{b} = (4, 5)$$

Beispiel 2.2.2-2

Durch die Addition von Vektoren wird die Verwaltung von Listen erleichtert. Beispielsweise kann man die Verkaufstatistik einer Apotheke in Vektorform darstellen:

□ **Tab. 2.2.2-1** Anzahl verkaufter Packungen in einer Apotheke

Bezeichnung	Anzahl verkaufter Packungen
Aarane N, 10 ml	0
aar gamma N 300 mg, 80 Dragees	1
aar gamma N 300 mg, 160 Dragees	0
aar gamma N 300 mg, 240 Dragees	0
ABC-Salbe	2
ACC 100 Brausetabletten, 20 St.	2
ACC 100 Brausetabletten, 50 St.	1
ACC 100 Brausetabletten, 100 St.	0
ACC 200 Brausetabletten, 20 St.	3
ACC 200 Brausetabletten, 50 St.	0
...	...

Der Anfang des entsprechenden Vektors sieht so aus: $(0, 1, 0, 0, 2, 2, 1, 0, 3, 0, \dots)$

Die Liste, die sämtliche in der Apotheke erhältlichen Arzneimittel enthält, ist recht lang. Daher ist auch der entsprechende Vektor groß. Der Vorteil der Vektoraddition zeigt sich nun, wenn aus den einzelnen Verkaufstatistiken, die zum Beispiel täglich ermittelt worden sind, Statistiken für eine bestimmte Woche, einen Monat oder einen anderen Zeitraum, z. B. vom 12. bis zum Monatsende erstellt werden sollen. Dann lässt sich mithilfe der Vektoraddition sehr schnell beschreiben, was zur Erstellung dieser Statistik passieren muss: