Lösungshinweise zur 12. Übung

<http://www.mi.uni-koeln.de/~mkurth/biologie>

Aufgabe 1

Bestimmen Sie jeweils den Gradienten

(i) $f(x, y) = \exp(2x) + y$, (ii) $g(x, y) = \sin(xy) + xy^2$, (iii) $h(x, y, z) = \ln(x^2 + 2z \exp(y))$.

Lösung:

- (i) Der Gradient von f ist der Vektor der partiellen Ableitungen. Berechnen wir zunächst die partielle Ableitung nach x . Dazu betrachten wir y als festen Parameter und differenzieren die Funktion nach x . Mathematisch gesprochen definieren wir also $g(x) = f(x, y)$ und berechnen $g'(x)$. Es gilt

$$(g'(x)) = \frac{\partial}{\partial x} f(x, y) = 2 \exp(2x)$$

Für die partielle Ableitung nach y gilt dann, indem wir x festhalten und auch y differenzieren:

$$\frac{\partial}{\partial y} f(x, y) = 1.$$

Damit folgt nun für den Gradienten

$$\text{grad } f(x, y) = \left(\frac{\partial}{\partial x} f(x, y), \frac{\partial}{\partial y} f(x, y) \right) = (2 \exp(2x), 1).$$

- (ii) Es gilt

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x} g(x, y) &= y \cos(xy) + y^2 \\ \text{und } \frac{\partial}{\partial y} g(x, y) &= x \cos(xy) + 2xy, \end{aligned}$$

also

$$\text{grad } g(x, y) = \left(\frac{\partial}{\partial x} g(x, y), \frac{\partial}{\partial y} g(x, y) \right) = (y \cos(xy) + y^2, x \cos(xy) + 2xy).$$

- (iii) Für die partiellen Ableitungen gilt jeweils

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x} h(x, y, z) &= \frac{2x}{x^2 + 2z \exp(y)}, \\ \frac{\partial}{\partial y} h(x, y, z) &= \frac{2z \exp(y)}{x^2 + 2z \exp(y)} \\ \text{und } \frac{\partial}{\partial z} h(x, y, z) &= \frac{2 \exp(y)}{x^2 + 2z \exp(y)}. \end{aligned}$$

Damit folgt für den Gradienten

$$\text{grad } h(x, y, z) = \left(\frac{2x}{x^2 + 2z \exp(y)}, \frac{2z \exp(y)}{x^2 + 2z \exp(y)}, \frac{2 \exp(y)}{x^2 + 2z \exp(y)} \right).$$

Aufgabe 2

- (i) Bestimmen Sie Gradient und maximalen Definitionsbereich in der (u, v) -Ebene von

$$g(u, v) = \frac{\ln(u^2 + v + 1)}{u + 7}.$$

Lösung:

Die Funktion ist dort nicht definiert, wo der Nenner verschwindet, also für $u = -7$. Desweiteren muss das Argument des $\ln$ positiv sein, also $u^2 + v + 1 > 0$. Insgesamt folgt

$$\mathcal{D}(g) = \{(u, v) \in \mathbb{R}^2 : v \neq -7, u^2 + v + 1 > 0\}.$$

Auf $\mathcal{D}(g)$ kann man auch den Gradienten berechnen, es gilt für die partiellen Ableitungen

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial u} g(u, v) &= \frac{(u+7) \frac{2u}{u^2+v+1} - \ln(u^2+v+1)}{(u+7)^2} \\ \text{und } \frac{\partial}{\partial v} g(u, v) &= \frac{1}{(u+7)(u^2+v+1)}. \end{aligned}$$

Für den Gradienten folgt damit

$$\text{grad } g(u, v) = \left(\frac{2u}{(u+7)(u^2+v+1)} - \frac{\ln(u^2+v+1)}{(u+7)^2}, \frac{1}{(u+7)(u^2+v+1)} \right).$$

- (ii) Wir betrachten die Funktion $f(x, y) = x \exp(xy) - y^2$.

- Berechnen Sie den Gradienten von f , also $\text{grad } f(x, y)$.

Lösung:

Es gilt

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x} f(x, y) &= \exp(xy) + xy \exp(xy) \\ \text{und } \frac{\partial}{\partial y} f(x, y) &= x^2 \exp(xy) - 2y. \end{aligned}$$

Damit berechnet sich der Gradient als

$$\text{grad } f(x, y) = ((1 + xy) \exp(xy), x^2 \exp(xy) - 2y).$$

- Berechnen Sie alle Punkte $(\bar{x}, \bar{y}) \in \mathbb{R}^2$, welche $\text{grad } f(\bar{x}, \bar{y}) = 0$ erfüllen.

Lösung:

Damit der Gradient verschwindet muss jeder seiner Einträge gleich Null sein. Demnach muss gelten

$$(1 + \bar{x}\bar{y}) \exp(\bar{x}\bar{y}) = 0 \text{ und } \bar{x}^2 \exp(\bar{x}\bar{y}) - 2\bar{y} = 0$$

Dies sind zwei nichtlineare Gleichungen mit zwei Unbekannten, aus der ersten Gleichung folgt wegen $\exp(\bar{x}\bar{y}) > 0$ die Tatsache, dass

$$\bar{y} = -1/\bar{x}$$

gelten muss. Setzen wir dies in die zweite Gleichung ein, so folgt

$$\bar{x}^2 \exp(-1) + 2/\bar{x} = 0,$$

woraus für $\bar{x}$ die Beziehung

$$\bar{x} = (-2 \exp(1))^{1/3} \sim 1.758$$

folgt. Für $\bar{y}$ folgt dann $\bar{y} = 1/\bar{x} \sim 0.569$.

- Rechnen Sie nach, dass $\frac{\partial^2}{\partial x \partial y} f(x, y) = \frac{\partial^2}{\partial y \partial x} f(x, y)$ gilt.

Lösung:

Differenzieren wir die partielle Ableitung nach x , die wir in (i) berechnet haben, nach y , so ergibt sich

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2}{\partial y \partial x} f(x, y) &= \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\partial}{\partial x} f(x, y) \right) \\ &= \frac{\partial}{\partial y} (\exp(xy) + xy \exp(xy)) \\ &= x \exp(xy) + x \exp(xy) + x^2 y \exp(xy) = (2x + x^2 y) \exp(xy) \end{aligned}$$

Analog gilt

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2}{\partial x \partial y} f(x, y) &= \frac{\partial}{\partial x} (x^2 \exp(xy) - 2y) \\ &= 2x \exp(xy) + yx^2 \exp(xy) \\ &= \frac{\partial^2}{\partial y \partial x} f(x, y), \end{aligned}$$

was zu beweisen war.

Aufgabe 3

Bei der Auswertung von n experimentell gewonnenen Datenpaaren (x_i, y_i) für $1 \leq i \leq n$ liegt häufig näherungsweise ein linearer Zusammenhang vor. Man möchte die Daten bestmöglich durch eine lineare Funktion $y(x) = ax + b$ zu approximieren; diese Gerade wird Regressionsgerade genannt. Zu diesem Zweck versucht man die quadratische Abweichung der Daten von der Regressionsgerade durch die Wahl von a und b zu minimieren.

In dieser Aufgabe wollen wir die Formel für die lineare Regression herleiten. Sei dazu

$$f(a, b) = \sum_{i=1}^n (y_i - (ax_i + b))^2$$

die quadratische Abweichung, die es zu minimieren gilt. Bekanntlich verschwindet der Gradient am Minimum, es gilt also für die gesuchten a und b die Gleichung

$$\text{grad} f(a, b) := \left(\frac{\partial}{\partial a} f(a, b), \frac{\partial}{\partial b} f(a, b) \right) = (0, 0).$$

Beweisen Sie, dass dann a und b wie folgt gegeben sind:

$$\begin{aligned} a &= \frac{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x_i y_i - \left(\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x_i \right) \left(\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n y_i \right)}{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x_i^2 - \left(\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x_i \right)^2}, \\ b &= \left(\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n y_i \right) - a \left(\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x_i \right). \end{aligned}$$

Gehen Sie dabei wie folgt vor

- Berechnen Sie $\text{grad} f(a, b)$.
- Lösen Sie die Gleichung $\text{grad} f(a, b) = (0, 0)$ nach a und b auf.

Lösung:

Zunächst berechnen wir $\frac{\partial}{\partial b}f(a, b)$. Dazu halten wir in $f(a, b)$ die Variable a fest und differenzieren nach b . Es folgt

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial b}f(a, b) &= \frac{\partial}{\partial b} \sum_{i=1}^n (y_i - (ax_i + b))^2 \quad (\text{nach Definition von } f) \\ &= \sum_{i=1}^n \frac{\partial}{\partial b} (y_i - (ax_i + b))^2 \quad (\text{nach Summenregel}) \\ &= \sum_{i=1}^n 2(y_i - (ax_i + b)) \frac{\partial}{\partial b} (y_i - (ax_i + b)) \quad (\text{nach Kettenregel}) \\ &= -2 \sum_{i=1}^n (y_i - (ax_i + b)) \\ &= -2 \left(\sum_{i=1}^n y_i - a \sum_{i=1}^n x_i - \sum_{i=1}^n b \right) \\ &= 2 \left(nb + a \sum_{i=1}^n x_i - \sum_{i=1}^n y_i \right)\end{aligned}$$

Wir dividieren nun die Gleichung $\frac{\partial}{\partial b}f(a, b) = 0$ durch $2n$ und erhalten

$$b + \frac{a}{n} \sum_{i=1}^n x_i - \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n y_i = 0.$$

Durch Berechnung von $\frac{\partial}{\partial a}f(a, b)$ gelangt man analog zu

$$\frac{\partial}{\partial a}f(a, b) = 2 \sum_{i=1}^n (y_i - (ax_i + b)) \cdot x_i = 2 \sum_{i=1}^n x_i y_i - 2a \sum_{i=1}^n x_i^2 - 2b \sum_{i=1}^n x_i$$

und damit durch Division von -2 zu der Gleichung

$$\frac{a}{n} \sum_{i=1}^n x_i^2 + \frac{b}{n} \sum_{i=1}^n x_i - \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x_i y_i = 0.$$

Wir haben also zwei Gleichungen für die beiden Unbekannten a und b . Auflösen der ersten Gleichung nach b und Einsetzen des Ausdrucks in die zweite Gleichung liefert

$$\begin{aligned}&\frac{a}{n} \sum_{i=1}^n x_i^2 - \frac{1}{n} \left(\frac{a}{n} \sum_{i=1}^n x_i - \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n y_i \right) \sum_{i=1}^n x_i - \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x_i y_i = 0 \\ \Leftrightarrow &\frac{a}{n} \sum_{i=1}^n x_i^2 - a \left(\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x_i \right) + \left(\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x_i \right) \left(\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n y_i \right) - \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x_i y_i = 0 \\ \Leftrightarrow &a \left(\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x_i^2 - \left(\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x_i \right)^2 \right) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x_i y_i - \left(\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x_i \right) \left(\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n y_i \right).\end{aligned}$$

Demnach lautet die Lösung für a

$$a = \frac{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x_i y_i - \left(\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x_i \right) \left(\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n y_i \right)}{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x_i^2 - \left(\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x_i \right)^2}.$$

Daraus lässt sich nun b berechnen als

$$b = \left(\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n y_i \right) - a \left(\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x_i \right),$$

womit die Formeln bewiesen wären.