Mathematische Modellierung
SS17, Übungsblatt 2

Ausarbeitung bis 21. März 2017

1. Gegeben sind Daten $\{(x_i, y_i)\}_{i=1}^n$, wobei the Messpunkte verschieden sind $x_i \neq x_j$, und die Parameter k und d des empirischen Modells $y(x) = k \cdot x + d$ sollen so bestimmt werden, dass die Summe der quadratischen Abstände zwischen der Gerade und den Daten,

$$E(k, d) = \sum_{i=1}^{n} [(k \cdot x_i + d) - y_i]^2$$

minimiert wird. Zeigen Sie durch die Optimalitätsbedingungen

$$\frac{\partial E}{\partial k}(k^*, d^*) = \frac{\partial E}{\partial d}(k^*, d^*) = 0$$

dass die Parameter

$$k^* = \frac{\overline{xy} - \overline{x}\,\overline{y}}{\overline{x^2} - \overline{x}^2}, \quad d^* = \overline{y} - k^* \cdot \overline{x}$$

kritisch für E sind, und beweisen Sie dass diese Parameter global minimierend sind. (Gelöst vom Herrn Schorn)

2. Schreiben Sie einen Matlab-Code mit der Funktion `fminsearch`, um die Parameter (K, t_0, τ) eines logistischen Modells $P(t; K, t_0, \tau) = K/\{1 + \exp[-(t - t_0)/\tau]\}$ für die Bevölkerungsdaten (P in Einheiten zu tausend Einwohnern)

t	1790	1800	1810	1820	1830	1840	1850	1860	1870	1880	1890	1900	1910	1920	1930	1940	1950
$P(t)$	3929	5308	7240	9638	12866	17069	23192	31443	38558	50156	62948	75995	91972	105711	122775	131669	150697

zu bestimmen. Stellen Sie die abgeschätzte Kurve im Lauf der Iterationen grafisch dar. (Gelöst vom Herrn Ranzinger)

3. Für die Konzentrationsdaten (u in Mol pro Liter)

t_i	0	15	30	45	60	75	90	105	120
u_i	0.0190	0.0130	0.0091	0.0069	0.0057	0.0052	0.0043	0.0039	0.0035

soll die Reaktionsordnung m bestimmt werden. Für $m = 1$ und $m > 1$ sind empirische Modelle gegeben durch $u(t; k, d) = de^{-kt}$ bzw. $u(t; k, d) = (kt + d)^{-\frac{1}{m-1}}$. Für die Reaktionsordnungen $m = 1, 2, 3$ transformieren Sie die Daten so, dass lineare Regression verwendet werden kann, um die Parameter (k, d) abzuschätzen. Dann schreibne Sie einen Matlab-Code mit der Funktion `fminsearch`, um die Parameter (k, d) direkt abzuschätzen, ohne dass die Daten transformiert werden. Entwickeln Sie eine Methode, um die Reaktionsordnung zu bestimmen. (Gelöst vom Herrn Berghold)

4. Die (unbekannte) Funktion $f(x) = x^2/(1+20x^2)$ soll von einer verfügbaren Abtastung geschätzt werden. In den folgenden seien $n = 10$ und $m = 100$.

(a) Bestimmen Sie ein Polynom P $n$ten Grades, das erfüllt

$$P(x_k) = f(x_k), \qquad x_k = -1 + 2k/n, \quad k = 0, \ldots, n$$

unter der Annahme dass die Werte $f(x_k)$ in den gleichmäßig verteilten Stutzstellen x_k verfügbar sind.

(b) Bestimmen Sie ein Polynom Q $n$ten Grades, das erfüllt

$$Q(t_j) = f(t_j), \qquad t_j = \cos((j + 1/2) * \pi/(n + 1)), \quad j = 0, \ldots, n$$

unter der Annahme dass die Werte $f(t_j)$ in den Nullstellen t_j des Tchebyshev'chen Polynoms $T_n(t) = \cos(n \cos^{-1}(t))$ verfügbar sind.

(c) Bestimmen Sie ein Polynom R $n$ten Grades, das die Zielfunktion minimiert:

$$\sum_{i=0}^{m} |R(y_i) - f(y_i)|^2, \qquad y_i = -1 + 2i/m, \quad i = 0, \ldots, m$$

unter der Annahme dass die Werte $f(y_i)$ in den gleichmäßig verteilten Stutzstellen y_i verfügbar sind.

Stellen Sie P, Q, R und f gemeinsam grafisch dar. (Gelöst vom Herrn Schorn)