Lernfragen für Quantitative Systemwissenschaften 1 im SS 07

1. In einem Erdwärmesystem findet Wärmetausch zwischen kälterer strömender Flüssigkeit in Kollektoren (Schläuchen) und wärmerer Erde statt. Betrachten Sie einen einzigen Kollektor und die Erde in ihrer Nähe. Die zeitliche Änderung der Energie in der Flüssigkeit hängt von dem Zufluss, dem Abfluss und der Wärmediffusion mit der Erde ab. Die zeitliche Änderung der Energie in der Erde hängt nur von der Wärmediffusion mit der Flüssigkeit ab. Schreiben Sie mit Gleichungen die Energie-Bilanz für die Flüssigkeit und für die Erde, und verwenden Sie das Modell um zu argumentieren, dass der Wärmetausch (von der Erde entnommene Energie pro Zeiteinheit) höher ist wenn der Fluss höher ist. (Eine erhöhte Anzahl von parallelen Kollektoren ergibt diesen höheren Fluss durch niedrigeren Widerstand.) Erklären Sie das Ergebnis praktisch für Laien.

2. Sei ΔP die von der Wärmepumpe erzeugte Druckdifferenz. Sei W der Widerstand in einem Kollektorensystem mit einem einzigen Kreis 600m lang. Was ist der Fluss F in diesem einzigen Kreis? Für n ($n > 1$) gleichlange parallele Kreise mit Gesamtlänge 600m berechnen Sie den Widerstand W_n und den Fluss F_n bezüglich W und F (d.h. $W_1 = W$ und $F_1 = F$). Zwischen den 2 Konfigurationen, 3 $\times$ 200m Kreise und 6 $\times$ 100m Kreise, welche hat eine niedrigere Widerstandsbelastung und einen höheren Fluss? (Ein höherer Wärmetransport ergibt sich mit dieser Konfiguration.) Erklären Sie das Ergebnis praktisch für Laien.

3. Für den Fall dass die parallelen Kollektorenkreise nicht gleich lang sind, verwenden Sie ein mathematisches Modell, um zu zeigen dass eine Verengung an gewissen Stellen verwendet werden kann, um die Widerstände zu regulieren und die Entleerungszeiten der Leitungen auszugleichen.

4. Zu analysieren ist, ob man die Heizung während eines Urlaubs ausschalten soll oder nicht. Verwenden Sie das Newtonsche Kühlungsgesetz, um ein Modell zwischen drei Kompartimenten zu entwickeln: Heizquelle (die Heizung), Haus und Kühlungsquelle (aussen). Verwenden Sie dieses Modell, um für das Gleichgewicht des Systems zu zeigen, je wärmer die Heizquelle, desto wärmer ist das Haus und desto höher ist der Energieverlust nach aussen pro Zeiteinheit. Das heisst, wenn die Heizung während eines Urlaubs ausgeschaltet wird und nach dem Urlaub bei der üblichen Einstellung wieder eingeschaltet wird, ist der Energieverlust pro Zeiteinheit niedriger als wenn man die Heizung nie ausschaltet.

5. Verwenden Sie das Newtonsche Kühlungsgesetz, um die Zeitdauer zu finden, in der die Haustemperatur zu 90% des Unterschieds mit der Aussentemperatur sinkt, nachdem die Heizung ausgeschaltet wird. Erklären Sie physikalisch die Abhängigkeit der Zeitdauer von Parametern.

6. Verwenden Sie ein mathematisches Modell, um die Zeitdauer zu finden, in der die Schadstoffkonzentration in einem See mit Zufluss und Abfluss zu 90% der Beginnkonzentration sinkt, nachdem kein Schadstoff mehr zugeführt wird. Erklären Sie physikalisch die Abhängigkeit der Zeitdauer von Parametern.

7. Vewenden Sie jedes der obigen Beispiele, um die *Schritte der Systemanalyse* zu verdeutlichen. Z.B. im ausgewählten Beispiel, was ist der Teilbereich? Was ist die Zielfrage? Was ist die Formulierung des Modells in Wörtern? Was ist die Formulierung des Modells in einer Formel? Was ist die Lösung der mathematischen Gleichung oder wie kann man sie numerisch lösen? Was ist die Antwort der Zielfrage? Wie steht das Ergebnis im Vergleich zur Wirklichkeit? Was bedeuten die Abweichungen? Falls die Abweichungen signifikant sind, wie kann das Modell verbessert werden? Nach welchen Verbesserungsversuchen würden Sie schließlich das Modell wegwerfen und frisch starten?

8. Vewenden Sie jedes der obigen Beispiele, um die *Zwecke der Modellbildung* zu verdeutlichen. Z.B. welchen Aspekt des Phänomens würden Sie besser nach als vor der Modellierung verstehen? Was

würden Sie voraussagen? Welches qualitative Verhalten könnten Sie analysieren? Was ist der Einfluss von den Parametern im System? Welche Parameter des Systems sind steuerbar, und wie würden Sie diese steuern? Welche Parameter könnten Sie identifizieren, die ansonsten schwer messbar wären? Welche Systemeigenschaften könnten Sie verbessern?

9. Vewenden Sie jedes der obigen Beispiele, um die *Methodischen Elemente der Modellbildung* zu verdeutlichen. Z.B. erkären Sie wie Sie vereinfacht oder idealisiert haben. Erklären Sie die Größen die Sie nicht berücksichtigt haben und warum Sie diese in Ihrem Modell vernachläßigt haben. Erklären Sie in welchem Sinn Sie mit einem einfachen Modell begonnen haben, und wann würden Sie dieses Modell mit einem komplexeren weiter entwickeln? Welcher Aspekt der Modellbildung ist durch Versuch und Irrtum entstanden?

10. Seien Sie bereit, eine Regressionsgerade von einfachen gegebenen Daten zu bestimmen. Welches Mass würden Sie verwenden, um die Qualität der Anpassung zu quantifizieren?

11. Seien Sie bereit, die Formeln für eine Regressionsgerade für beliebigen Daten durch explizite Minimierung einer Fehlerfunktion (Summe der quadratischen Abweichungen) herzuleiten.

12. Seien Daten $\{t_i, u_i\}$ gegeben, die klar nicht linear sind, während die transformierten Daten $\{x_i, y_i\} = \{f(t_i), g(u_i)\}$ für gewisse Funktionen f und g ungefähr linear sind. Seien Sie bereit, eine Regressionsgerade von den transformierten Daten $\{x_i, y_i\}$ zu bestimmen. Verwenden Sie das Ergebnis, um eine Funktion $u = u(t)$ zu bestimmen, die zu den Daten $\{t_i, u_i\}$ passt. Z.B. mit $\{t_i, u_i\} = \{(1, e), (1, e^2), (1, e^3)\}$ gelten $f(t) = t$, $g(u) = \ln(u)$, $y = x$ und $u(t) = e^t$. Überlegen Sie ein einfaches Beispiel für Daten einer chemischen Reaktion $m$ter Ordnung, wobei m vorher nicht gekannt ist. Überlegen Sie ein einfaches Beispiel für Daten $\{t_i, u_i\}$, die ungefähr wie $u(t) = at/(t + b)$ für Konstanten a und b aussehen.

13. Seien Sie bereit, die logistische Funktion explizit zu schreiben und alle ihrer Eigenschaften bezüglich ihrer Parameter graphisch darzustellen. Warum ist die logistische Funktion kein gutes empirisches Modell für die Population der Osterinsel? Warum ist eine exponentielle Funktion besonders passend für die amerikanische Population ungefähr bis zum Jahr 1860? Seien Sie bereit, die logistischen Parameter grob abzuschätzen, d.h. wo liegt der Wendepunkt ungefähr, was ist die Kapizität ungefähr, wie kann man die Zeitskala ungefähr bestimmen? Diese Abschätzungen sind vernünftige Startwerte für ein Optimierungsverfahren.

14. Erklären Sie warum ein Polynom hohen Grades kein gutes empirisches Modell ist, d.h. was bedeuten die Koeffizienten? Zeigen Sie graphisch, dass ein Datensatz mit einem Polynom immer angepasst werden kann, obwohl die Interpolation und Extrapolation nicht notwendigerweise genau sein werden. Was bedeutet es, dass die Koeffizienten nicht notwendigerweise stabil von den Daten abhängen? Wann wird der Rechenaufwand der Bestimmung des Polynoms besonders hoch?

15. Warum sind die logistische Funktion und die Funktion einer chemischen Reaktion $m$ter Ordnung erkannt als „gute“ Modelle?

16. Wenn man eine Funktion $f(t; \boldsymbol{p})$ mit Parametern $\boldsymbol{p} = (p_1, p_2, ...)$ für ein empirisches Modell hat, die zu Daten $\{(t_i, y_i)\}$ angepasst werden soll, welche Funktion von $\boldsymbol{p}$ soll minimiert werden, um die Parameter $\boldsymbol{p}$ zu bestimmen? Welche Bedingungen soll diese (angenommen differenzierbare) Funktion an der minimierenden Stelle $\boldsymbol{p}^*$ notwendigerweise erfüllen?

17. Die Parameter der logistischen Funktion soll durch Minimierung der folgenden Funktion abgeschätzt werden:

```
function fehler = zielfkt(x)
t = [1790, 1800, 1810, 1820, 1830, 1840, 1850, 1860, ...
```

```
     1870, 1880, 1890, 1900, 1910, 1920, 1930, 1940, 1950];
y = [3929, 5308, 7240, 9638, 12866, 17069, 23192, 31443, 38558, ...
     50156, 62948, 75995, 91972, 105711, 122775, 131669, 150697];
k   = x(1);
t0  = x(2);
tau = x(3);
f = exp((t-t0)/tau);
f = k*f./(1+f);
fehler = sum((y-f).^2);
```

Schreiben Sie die zu minimierende Funktion mathematisch. Um diese Funktion zu minimieren, werden die folgenden Befehle in MATLAB eingegeben:

```
>> opts = optimset('TolX',1e-20,'MaxFunEvals',5);
>> x0 = [1.e5 1.e3 1.e1];
>> xf = fminsearch('myfkt',x0,opts);
```

Die erste MATLAB-Meldung ist:

```
??? Undefined command/function 'myfkt'.
```

Wo liegt das Problem? Nachdem dieser Fehler korrigiert wird,

```
>> xf = fminsearch('zielfkt',x0,opts);
```

tritt der folgende vor:

```
Exiting: Maximum number of function evaluations has been exceeded
         - increase MaxFunEvals option.
```

und das graphisch dargestellte Ergebnis ändert sich immer noch im Lauf des Codes. Was kann man zu diesem Zeitpunkt über Konvergenz der Minimierung sagen? Nachdem `opts` folgendermaßen frisch definiert wird:

```
>> opts = optimset('TolX',1e-20,'MaxFunEvals',500);
```

tritt die obige Fehlermeldung vor (`Exiting:...`), aber das graphisch dargestellte Ergebnis ändert sich überhaupt nicht in den letzten Sekunden der Ausführung. Warum läuft der Code immer noch, obwohl das Ergebnis sich nicht ändert? Nachdem `opts` folgendermaßen frisch definiert wird:

```
>> opts = optimset('TolX',1e-4,'MaxFunEvals',500);
```

tritt keine Fehlermeldung vor und das graphisch dargestellte Ergebnis ändert sich überhaupt nicht am Ende der Ausführung, aber die angepasste Kurve passt dem gegebenen Datensatz nicht sehr gut. Ist eine Minimierung irgendeiner Art überhaupt durchgeführt worden? Nachdem `x0` folgendermaßen frisch definiert wird,

```
>> x0 = [1.e5 2.e3 3.e1];
```

tritt keine Fehlermeldung vor, und die angepasste Kurve passt dem gegebenen Datensatz sehr gut. Warum soll es einen Unterschied zwischen den letzten 2 Verläufen geben? Versuchsweise wird `opts` folgendermaßen frisch definiert:

```
>> opts = optimset('TolX',1e-4,'MaxFunEvals',338);
```

und die obige Fehlermeldung (`Exiting:...`) tritt vor. Nachdem die folgenden Zeile von `zielfkt`:

```
k   = x(1);
t0  = x(2);
tau = x(3);
```

folgendermaßen geändert werden:

```
k   = x(1)*1.e5;
t0  = x(2)*1.e3;
tau = x(3)*1.e1;
```

und `x0` folgendermaßen frisch definiert wird:

```
>> x0 = [1 2 3];
```

tritt keine Fehlermeldung vor, und die angepasste Kurve passt dem gegebenen Datensatz sehr gut. Warum soll es einen Unterschied zwischen den letzten 2 Verläufen geben?

18. Was sind die Niveau Kurven einer Funktion? Z.B. skizzieren Sie die Niveau Kurven der Funktion $f(x,y) = x^2 + y^2$. Schreiben Sie eine explizite Gleichung für die Niveau Kurven dieser Funktion.

19. Was ist der Gradient einer Funktion? Z.B. zusammen mit den Niveau Kurven der Funktion $f(x,y) = x^2+y^2$, zeigen Sie den Gradient in verschiedenen Punkten. Berechnen Sie den Gradient dieser Funktion explizit.

20. Was ist die allgemeine Beziehung zwischen einer Niveau Menge und dem Gradient?

21. Wie kann diese Information verwendet werden, um die Funktion zu minimieren oder zu maximieren? Was ist das Abstiegsverfahren, und wie soll die Schrittweite gewählt werden?

22. Hat die Funktion $f(x,y) = x^2+y^2$ ein Maximum oder ein Minimum? Hat die Funktion $g(x,y) = -x^2 - y^2$ ein Maximum oder ein Minimum? Geben Sie eine Funktion an, die ein Maximum *und* ein Minimum hat. Geben Sie eine Funktion an, die ein lokales und ein globales Minimum hat.

23. Wie kann eine Funktion minimiert oder maximiert werden, wenn ihre Ableitungen nicht greifbar sind? Wie kann das Abstiegsverfahren angepasst werden? Erklären Sie das Nelder-Meade Verfahren, z.B. wie soll die Tiefe der Spiegelung gewählt werden? Welches Verfahren verwendet die MATLAB-Funktion `fminsearch`? Warum funktioniert dieses Verfahren besser, wenn die Argumente der zu minimierenden Funktion skaliert werden, damit ihre Größenordnungen ungefähr gleich sind? Interpretieren Sie diese Massnahme geometrisch.

24. Geben Sie ein Beispiel eines empirischen Modells und ein Beispiel eines strukturellen Modells an und erklären Sie den Unterschied. Was sind die Vorteile und Nachteile dieser zwei Arte von Modellen? Gibt es überhaupt einen Empirismus in Ihrem strukturellen Modell? Erklären Sie wie das logistische Modell sowie das Modell einer chemischen Reaktion $m$ter Ordnung als empirische sowie structurelle Modelle betrachtet werden können.

25. Warum entstehen Differentialgleichungen durch strukturelle Modellierung? Was ist eine Mengenbilanz? Geben Sie ein Beispiel an, in dem die modellierte Größe über den Rand des Teilgebiets strömt und/oder diffundiert und es innerhalb des Teilgebiets Quellen und Senken gibt. Was ist ein Erhaltungssatz? Geben Sie Beispiele von physikalischen Größen an, die erhalten bleiben. Was ist eine physikalische Größe, die nicht notwendigerweise erhalten bleibt? Erklären Sie das zwei-Kompartimente Modell von Wärmetausch in einem Erdwärmesystem bezüglich Energieerhaltung, Konvektion und Diffusion.

26. Leiten Sie die logistische Differentialgleichung her. Welche Faktoren führen zu Fertilität und Mortalität, die vom Zustand abhängig sind? Wie kann man die Fertilitäts- und Mortalitätsparameter abschätzen, wenn die logistische Funktion nur drei Parameter hat? Zeigen Sie, dass $P(t) = 1/(1 + e^{-t})$ eine Lösung des Anfangswertproblems ist: $P' = P(1 - P)$, $P(0) = 1/2$. (Zeigen Sie direkt, oder lösen Sie das Anfangswertproblem.)

27. Zeigen Sie, dass das Anfangswertproblem für eine chemische Reaktion $m$ter Ordnung, $x' = -kx^m, x(0) = x_0$ von den folgenden Funtionen gelöst wird: $x(t) = x_0 e^{-kt}$ für $m = 1$ und $x(t) = [(m-1)kt+x_0^{1-m}]^{1/(1-m)}$ für $m > 1$. (Zeigen Sie direkt, oder lösen Sie das Anfangswertproblem.)

28. Leiten Sie das statische Modell vom Wasserstand in einem Kessel mit Zufluss und Abfluss her. Welche Rollen spielen das Ohmsche Gesetz und das Archimedessche Prinzip? Was ist die Wasserstandshöhe bezüglich des fixierten Zuflusses, des Widerstands im Abflussrohr und des spezifischen Gewichtes der Flüssigkeit?

29. Leiten Sie das dynamische Modell vom Wasserstand in einem Kessel mit Zufluss und Abfluss her. Welche Größen im Modell sind zeitabhängig? Was ist der Wasserstand nach unendlicher Zeit? Zeigen Sie, dass dieser Wasserstand mit dem vom statischen Modell übereinstimmt. Zeigen Sie, dass dieser Zustand einem Gleichgewicht des dynamischen Modells entspricht. Zeigen Sie, dass $V(t) = z/\lambda + (V_0 - z/\lambda)e^{-\lambda t}$ eine Lösung des Anfangswertproblems ist: $V' = z - \lambda V$, $V(0) = V_0$. (Zeigen Sie direkt, oder lösen Sie das Anfangswertproblem.)

30. Wie viele Nebenbedingungen sind notwendig, um eine eindeutige Lösung der folgenden Differentialgleichung zu bestimmen: $mx'' + cx' + kx = 0$, wobei m, c und k gegebene Konstanten sind? Geben Sie solche Nebenbedingungen explizit an. Wie viele Nebenbedingungen sind notwendig, um eine eindeutige Lösung des folgenden Differentialgleichungssystems zu bestimmen: $T_1' = F(T_z - T_1) + 2(T_2 - T_1)$, $T_2' = 2(T_1 - T_2)$, wobei F eine gegebene Konstante ist. Geben Sie solche Nebenbedingungen explizit an.

31. Zeigen Sie, dass $x(t) = ae^{-t/\tau_1} + be^{-t/\tau_2}$ für beliebige Konstanten a und b die folgende Differentialgleichung löst: $\tau_1\tau_2 x'' + (\tau_1 + \tau_2)x' + x = 0$, wobei $\tau_1 > 0$ und $\tau_2 > 0$ gegeben sind. Wann ist dieses ein steifes Problem? Was sind die Zeitskalen des Problems? Wie sehen die Differentialgleichung und die Lösung aus, wenn τ_1 viel, viel kleiner als τ_2 ist?

32. Erklären bezüglich Zeitskalen, warum das Punktreaktormodell so genannt ist. Erklären Sie in Wörtern, die Mengenbilanzen für das Punktreaktormodell. Obwohl die Menge von spaltbaren Kernen im Lauf der Reaktionen kleiner wird, bleibt der Bruchteil der Neutronen, die von spaltbaren Kernen eingefangen werden, gleich im Modell. Warum? Falls die Änderung der Menge von spaltbaren Kernen signifikant ist, wie könnte der Zerfall von spaltbaren Kernen modelliert werden? Was ist der Gleichgewichtzustand des folgenden Differentialgleichungssystems: $N' = (\nu\alpha - \alpha - \beta)N + \mu\lambda I + S$, $I' = \gamma\alpha N - \lambda I$, wobei $\alpha, \beta, \gamma, \lambda, \mu, \nu$ und S gegebene Konstanten sind.

33. Für eine chemische Reaktion $aA+bB \underset{\kappa_2}{\overset{\kappa_1}{\rightleftharpoons}} cC+dD$, deren Richtung (d.h. die Werte von den Reaktionskonstanten κ_1 und κ_2) von der Temperatur abhängt, schreiben Sie die Vorwärtsreaktionsrate bezüglich der Ableitungen $d[A]/dt$, $d[B]/dt$, $d[C]/dt$ und $d[D]/dt$ und den Konzentrationen $[A]$, $[B]$, $[C]$ und $[D]$. Wenden Sie dieses Ergebnis an, um die Raten der folgenden Reaktionen darzustellen: $D \xrightarrow{k_1} \bar{D} + NO$ und $2NO + 1O_2 \xrightarrow{k_2} 1N_2 + 2O_2$, wobei D ein Donor von NO ist und $\bar{D}$ inaktiv ist. Verwenden Sie das Ergebnis, um das Stickoxid-Modell zu schreiben. Welche MATLAB-Funktion kann verwendet werden, um die Differentialgleichung zu lösen? Was sind die vernachlässigten Differentialgleichungen? Insbesondere warum wird die Differentialgleichung für Sauerstoff vernachlässigt?

34. Um die obigen Reaktionskonstanten k_1 und k_2 experimentiell abzuschätzen, warum muss die Temperatur konstant gehalten werden? Schreiben Sie die Funktion, die minimiert werden soll,

um die Reaktionskonstanten von experiementiellen Daten abzuschätzen, angenommen dass die Sauerstoffkonzentration und die Donorkonzentration zu Beginn gekannt sind. Welche MATLAB-Funktionen können verwendet werden, um diese Funktion zu minimieren?

35. Erklären Sie in Wörtern die Zuwachsraten und die Abnahmeraten für die drei Größen des kleinen Weltmodells: V, L und K. Was ist ein nicht triviales Gleichgewicht für das Differentialgleichungssytem: $V' = \beta VKL^{-1} - \mu LV$, $L' = \lambda VK - \alpha L$ (angenommen $L \le L_0$), $K' = \kappa KL(\sigma - KL)$, wobei α, β, κ, λ, μ und σ gegebene Konstanten sind. Welche Parameter dieses Weltmodells sind politisch steuerbar? Warum ist dieses Modell geeigneter als das logistische Modell für die Modellierung der Population der Osterinsel?

36. Anhand des Stickoxid-Modells finden Sie die Einheiten der Reaktionskonstanten. Schreiben Sie dieses Modell in einer dimensionslosen Form um. Welcher dimensionslose Parameter bestimmt das Verhalten des Systems? Seien Sie bereit, unsere anderen Modelle in einer dimensionslosen Form umzuschreiben.

37. Verwenden Sie Dimensionsanalyse für den Fall eines Steins, um ein Gesetz für die Aufprallgeschwindigkeit bezüglich der Anfangshöhe, der Masse des Steins, der Erdbeschleunigung und der Fallzeit zu entwickeln. Ählicherweise entwickeln Sie ein Gesetz für die maximale Masse eines Fallschirms bezüglich der Luftdichte, der Erdbeschleunigung, des Widerstandsbeiwerts für den Fallschirm und der maximalen Geschwindigkeit für den Fallschirm.

38. Numerisch zu lösen ist das skalare Anfangswertproblem: $x' = f(t,x)$, $x(t_0) = x_0$. Seien $t_0, t_1, \ldots$ die Stutzstellen, in denen die Lösung numerisch bestimmt wird. Bestimmen Sie eine Gerade im Intervall $[t_0, t_1]$, die tangent zur exakten Lösung im Punkt (t_0, x_0) ist. Werten Sie diese Gerade an der Stelle $t = t_1$ aus, um einen Wert x_1 zu berechnen, d.h. das Geradestück läuft vom Punkt (t_0, x_0) zum Punkt (t_1, x_1). Schreiben Sie die Formel für x_1 bezüglich t_0, t_1, x_0 und f. Wiederholen Sie die Rechnung, um ein Geradestück zwischen (t_1, x_1) und (t_2, x_2) zu berechnen. Schreiben Sie die Formel für x_2 bezüglich t_1, t_2, x_1 und f. Schreiben Sie im allgemeinen die Formel für x_{n+1} bezüglich t_{n+1}, t_n, x_n und f.

39. Wiederholen Sie das letzte Beispiel, aber stattdem dass die Gerade tangent zur exakten Lösung im Punkt (t_n, x_n) ist, nehmen Sie an, dass die Geradesteigung durch $[f(t_n, x_n) + f(t_{n+1}, x_{n+1})]/2$ gegeben ist. Schreiben Sie im allgemeinen die Beziehung zwischen x_n, x_{n+1}, t_n, t_{n+1}, $f(t_n, x_n)$ und $f(t_{n+1}, x_{n+1})$. Wie kann man diese Gleichung nach x_{n+1} auflösen? Erklären warum dieses Verfahren *implizit* heisst, während das Verfahren des letzten Beispiels *explizit* heisst. Schreiben Sie das Vorwärts-Eulersche Verfahren und das Rückwärts-Eulersche Verfahren, und erklären Sie welches implizit und welches explizit ist.

40. Erklären Sie Abbruchsfehler und Rundungsfehler, und stellen Sie das übliche Verhalten dieser Fehler bezüglich eines Diskretisierungsparameters graphisch dar. Erklären Sie warum es üblicherweise einen optimalen Diskretisierungsparameter mit minimalen Gesamtfehler gibt.

41. Erklären Sie wie die numerische Lösung genauer gemacht werden kann. Z.B. was ist der Test zu entscheiden, ob eine Schrittweite klein genug ist oder nicht? Zeigen Sie graphisch den Unterschied in Abbruchsfehler für Verfahren von niedrigerer bis höherer Ordnung. Geben Sie ein Beispiel eines Verfahrens mit einem Predictor und einem Corrector.

42. Was ist ein steifer Prozess? Geben Sie ein Beispiel und erklären Sie dieses graphisch. Geben Sie ein Beispiel in Formeln bezüglich Zeitskalen. Warum funktionieren die default Einstellungen für `ode45` oder `ode23s`, um die Differentialgleichung für das Stickoxid-Modell zu lösen, während die default Einstellungen für `ode23` nicht funktionieren?

43. Die Differentialgleichung des Stickoxid-Modells soll mit der folgenden Funktion (`funk.m`) gelöst werden:

```
function y = funk(t,x)
global k1 k2 o2
y = zeros(2,1);
y(1) = -k1*x(1);
y(2) = -y(1) - k2*o2*x(2)^2;
```

und die folgenden Befehle werden in MATLAB eingegeben:

```
>> tspan = [0 4000];
>> c0 = 1e-6;
>> [t,x]=ode23('func',tspan,[c0;0]);
```

Die erste MATLAB-Meldung ist:

```
??? Undefined command/function 'func'.
```

Wo liegt das Problem? Nachdem dieser Fehler korrigiert wird, tritt der folgende vor:

```
Error in ==> funk at 7
y(1) = -k1*x(1);
```

sogar nachdem die folgenden eingegeben werden:

```
>> k1=5e-3;
>> k2=1e7;
>> o2=2.5e-4;
```

Wo liegt das Problem? Nachdem die folgenden Befehle eingegeben werden:

```
>> global k1 k2 o2
>> k1=5e-3;
>> k2=1e7;
>> o2=2.5e-4;
>> [t,x]=ode23('funk',tspan,[c0;0]);
>> plot(t,x(:,1),'-',t,x(:,2),'--');
```

gibt es keine Fehlermeldung, aber die Ergebnisse sehen so aus, wie in Abbildung 6.4 im Skriptum. Wo liegt das Problem? Nachdem die folgenden Befehle eingegeben werden:

```
>> [t,x]=ode23s('funk',tspan,[c0;0]);
>> plot(t,x(:,1),'-',t,x(:,2),'--');
```

sehen die Ergebnisse genauer aus, aber die Lösungskurven bestehen aus Geradenstücken. Warum hat es eine Verbesserung gegeben, und wie kann das Ergebnis noch verbessert werden? Nachdem die folgenden Befehle eingegeben werden:

```
>> [t,x]=ode45('funk',tspan,[c0;0]);
>> plot(t,x(:,1),'-',t,x(:,2),'--');
```

sehen die Ergebnisse glatt verlaufend aus. Warum gibt es diese Unterschiede in den letzten drei Verläufen? Nachdem die folgenden Befehle eingegeben werden:

```
>> options = odeset('AbsTol',1.e-10,'RelTol',1.e-4);
>> [t,x]=ode23('funk',tspan,[c0;0],options);
>> plot(t,x(:,1),'-',t,x(:,2),'--');
```

sehen die Ergebnisse glatt verlaufend aus, und sie sind fast nicht unterscheidbar von jenen, die mit `ode23s` oder `ode45` berechnet werden:

```
>> options = odeset('AbsTol',1.e-10,'RelTol',1.e-4);
>> [t1,x1]=ode23('funk',tspan,[c0;0],options);
>> [t2,x2]=ode23s('funk',tspan,[c0;0],options);
>> [t3,x3]=ode45('funk',tspan,[c0;0],options);
>> plot(t1,x1(:,1),'r-',t1,x1(:,2),'r--', ...
          t2,x2(:,1),'g-',t1,x2(:,2),'g--', ...
          t3,x3(:,1),'b-',t1,x3(:,2),'b--');
```

Was ist der Einfluss dieser `options`? Erklären Sie was mit dem letzten `plot`-Befehl zu sehen ist.

44. Geben Sie Beispiele von dynamischen Systemen folgender Arte an,
    kontinuierlich deterministisch, diskret deterministisch
    kontinuierlich stochastisch, diskret stochastisch,
    und erklären Sie warum Ihre Beispiele so klassifiziert werden. Erklären Sie wie für ein stochastisches Modell eine Dynamik für den zeitabhängigen Erwartungswert hergeleitet werden kann, und wie diese Dynamik als deterministisch betrachtet werden kann, wenn die zeitabhängige Varianz im stochastischen Modell extrem klein wird. (Deswegen kann eine Quantenwelt auf dem makroskopischen Niveau deterministisch aussehen.)

45. Für ein gegebenes dynamisches System seien Sie bereit, ein Wirkungsdiagramm und ein Simulationsdiagramm zu erstellen. Für ein gegebenes Wirkungsdiagramm oder ein gegebenes Simulationsdiagramm seien Sie bereit, ein dazu passendes dynamisches System zu schreiben.

46. Für ein gegebenes dynamisches System seien Sie bereit, die folgenden im besonderen für das System zu identifizieren und im allgemeinen zu definieren: Zeitgröße, Zustand, exogene Größen, Steuergrößen, Beobachtungsgrößen und Parameter. Für das gegebene dynamische System seien Sie bereit, ein Beobachtungsproblem, ein Parameteridentifikationsproblem und ein Steuerungsproblem zu formulieren.

47. Die Reaktionskonstanten des Stickoxid-Modells soll von den folgenden Daten abgeschätzt werden:

```
c0     = 1.e-5;
o2     = 2.5e-4;
tdat   = [0,100,200,300,400,500,600,700,800,900,1000,1100,1200];
dondat = [1.00e-5,7.40e-6,5.57e-6,3.90e-6,2.87e-6,1.95e-6, ...
          1.46e-6,1.03e-6,7.79e-7,5.66e-7,4.21e-7,2.95e-7,2.24e-7];
nodat  = [0.00e-6,2.34e-6,2.79e-6,2.74e-6,2.50e-6,2.30e-6, ...
          1.82e-6,1.75e-6,1.64e-6,1.29e-6,1.10e-6,9.64e-7,9.30e-7];
```

die in einer Datei `dondata.m` so definiert werden. Zu diesem Zweck wird die folgende Datei `versuch.m` geschrieben:

```
k1 = 1.e-3;
k2 = 1.e-7;
simu;
```

wobei `simu.m` so gegeben ist:

```
options = odeset('AbsTol',1.e-10,'RelTol',1.e-4);
[t,x]=ode45('funk',[0,1200],[c0;0],options);
plot(t,x(:,1),'--',t,x(:,2),'-',tdat,dondat,'*',tdat,nodat,'o');
```

Nachdem es eingetppt wird:

```
>> versuch
```

ist die MATLAB-Meldung:

```
??? Undefined function or variable "c0".
```

Wo liegt das Problem? Nachdem `versuch.m` so geändert wird:

```
dondata;
k1 = 1.e-3;
k2 = 1.e-7;
simu;
```

tritt keine Fehlermeldung vor, und das Ergebnis sieht so aus, wie man in Abbildung 7.3 im Skriptum sieht. Warum gibt es eine Abweichung zwischen den glatten Kurven und den Datenpunkten? Erklären Sie diese Abweichung physikalisch. Auf Grund der physikalischen Erklärung, welcher Parameter ist erst zu ändern? Nachdem `k1 = 1.e-3` in `versuch.m` zu `k1 = 2.e-3` erhöht wird, sind die glatten Kurven und die Datenpunkten näher zu einander. Nachdem `versuch.m` so weiter geändert wird:

```
dondata;
k1 = 3.e-3;
k2 = 8.e-6;
simu;
```

sieht das Ergebnis so aus, wie man in Abbildung 7.4 im Skriptum sieht. Erklären Sie diese Änderungen physikalisch.

48. Nun werden die Reaktionskonstanten automatisch statt händisch bestimmt. Die folgende Datei `optkk.m` wird dafür geschrieben:

```
global k1 k2 o2 c0 tdat dondat nodat
dondata;
kkstart=[1;1];
kk=fminsearch('parziel',kkstart)
```

wobei `parziel.m` so gegeben ist:

```
function fehl = parziel(kk)
global k1 k2 o2 c0 tdat dondat nodat
k1=kk(1)*1e-3;
k2=kk(2)*1e7;
options = odeset('AbsTol',1.e-10,'RelTol',1.e-4);
[t,x]=ode45('funk',tdat,[c0;0],options);
donfehl=x(:,1)-dondat';
nofehl=x(:,2)-nodat';
fehl=donfehl'*donfehl+nofehl'*nofehl;
```

Warum werden die 2 Formeln für `k1` und `k2` verwendet? Schreiben Sie die Vektoren `donfehl` und `nofehl` mathematisch. Schreiben Sie die Funktion mathematisch, die minimiert wird.

49. Leiten Sie das SIR-Infektionsmodell her. Erklären Sie die Terme für Einwanderung, Todesfälle, Ansteckung und Heilung. Leiten Sie ein Gleichgewicht des Systems her, und erklären Sie für welche Parameter es realistisch ist. In diesem Modell gibt es keine Rückkopplung von den Immunen, d.h. die Anfälligen und die Infizierten bestimmen den Zustand des Systems. Wie könnte eine Rückkopplung modelliert werden, wobei die Immunen zur Heilung der Infizierten beitragen?

50. Skizzieren Sie die Trajektorien im Zustandsraum für die folgenden Modelle: logistisch, Stickoxid und SIR.

51. Erklären Sie wann ein Gleichgewicht stabil ist oder nicht. Zeigen Sie, dass das logistische Modell zwei Gleichgewichte hat, wobei eines stabil ist und das andere instabil ist. Zeigen Sie, dass das Kessel-Modell ein einziges Gleichgewicht hat, und dieses Gleichgewicht ist stabil.