

Präsenzübung 11

Ausgabe: 11.1.2018

Besprechung in der Übung in der Vorlesungswoche vom 15.1.2018 bis 19.1.2018.

Aufgabe 20: (Transformation von Ausgleichsproblemen)

Für eine chemische Reaktion von Gasen besagt das Arrhenius-Gesetz

$$K = B \exp\left(-\frac{E}{RT}\right) \quad (1)$$

mit Temperatur T , Geschwindigkeitskonstante K , allgemeiner Gaskonstante R , präexponentiellem Faktor B und Aktivierungsenergie E .

Es seien Messungen (T_i, K_i) für $i = 1, \dots, m$ gegeben, die entsprechend mit Messfehlern behaftet sind. Die Konstante R ist allgemein bekannt. Die Parameter B und E sollen aus den Messungen näherungsweise bestimmt werden. Die Gleichung (1) führt auf das nichtlineare Ausgleichsproblem

$$\min_{B, E} \sum_{i=1}^m \left(K_i - B \exp\left(-\frac{E}{RT_i}\right) \right)^2.$$

Transformieren Sie die Gleichung (1) in eine Form, die dann auf ein lineares Ausgleichsproblem für unbekannte Größen in den Parametern B und E führt. Geben Sie die Unbekannte x , die Matrix A und rechte Seite b des Ausgleichsproblems $\min \|Ax - b\|_2$ an. Spezifizieren Sie auch gegebenenfalls Formeln für die Rücktransformation der Lösung auf die Unbekannten B und E .