Hinweis:
Die Aufgaben sind in der üblichen mathematischen Notation gestellt. Sie sind mit **Mathematica** zu lösen. Sie müssen bei der Umsetzung natürlich die Mathematica-Konventionen (Syntax) beachten.

Zur Bewertung:
Es ist wichtig, dass Ihr Programm die Aufgabe korrekt bearbeitet. **Kommentieren Sie** relevante Schritte und Ergebnisse.

1) (**10 Punkte**)
Untersuchen Sie die chemische Reaktion A + A → X (X ist natürlich A_2).
x(t) und a(t) sind die jeweiligen **Teilchen**zahlen.

a)
Die Differentialgleichung (DGL) für die Reaktionsgeschwindigkeit lautet **ab t = 0**:

$\dot{x}(t) = k\ (\ a(t)\ )^2$, dabei ist $a(t) = a_0 - \mathbf{2}\ (\ x(t) - x_0\ )$.
$\dot{x}$ ist die erste Ableitung nach der Zeit. a_0 und x_0 sind die Anfangswerte für t = 0.
Setzen Sie k = 0.001, a_0 = 1000 und x_0 = 0. Lösen Sie damit die DGL für x(t) .

Lassen Sie die Lösung x(t) zeichnen, zusammen mit a(t) .
Welchem Grenzwert muss x(t) zustreben? Überprüfen Sie dies!
Wann hat x(t) 99% seines Grenzwertes erreicht?

b)
Vorbereitung: Nennen Sie die Lösungsfunktion aus (a) jetzt xL1 .
Zur Zeit t = 2 werden 50% der noch existierenden A-Teilchen neutralisiert.

Die DGL lautet dann **ab t = 2**: $\dot{x}(t) = k\ (\ a(t)\ )^2$, $a(t) = \mathbf{0.5}\ a_2 - 2\ (\ x(t) - x_2\ )$.
a_2 und x_2 sind die Teilchenzahlen für t = 2 **vor** der Neutralisation. Lösen Sie die DGL.
Tipp: Nennen Sie diese zweite Lösungsfunktion anschließend xL2.

Lassen Sie diese Lösung zeichnen.
Lassen Sie dann den gesamten Verlauf der X-Teilchenzahl zeichnen für 0 < t < 10.

2) (**10 Punkte**)
Im Vorlage-Notebook data.nb finden Sie den Datensatz „data“.
a)
Bestimmen Sie für diesen Datensatz die Ausgleichsgerade $\hat{y}(x)$. Lassen Sie diese Gerade zusammen mit den Daten plotten.
Zeigen Sie: die Gerade geht durch den Schwerpunkt $(\bar{x}, \bar{y})$ des (Daten-) Punkteschwarms. $\bar{x}$ und $\bar{y}$ sind die jeweiligen Mittelwerte.

Berechnen Sie die Varianz der Residuen, also SQR / (n - 2) .
n ist die Anzahl der Datenpaare (x_i , y_i) , SQR = $\sum_{i=1}^{n}(\ y_i - \hat{y}\ (x_i)\ )^2$.

b)
Bestimmen Sie die optimalen Parameter für die Ausgleichsgerade „von Hand“, also aus der Minimalforderung für die Summe der quadrierten Abweichungen, S(a,b) .
Es ist: S(a,b) = $\sum_{i=1}^{n}(\ y_i - y\ (x_i)\ )^2$, wobei y(x) = a x + b .
Den Befehl Minimize dürfen Sie nicht benutzen.