

Abschlussbericht

# Identifizierung verketteter Reaktoren mit Methoden der nichtlinearen Dynamik

Prof. Dr. Bernold Fiedler  
Dr. Vassili Gelfreich  
Dr. Jörg Härterich  
Dipl. Math. Juliette Blanca  
Dipl. Math. Marc Georgi

31. Juli 2004

Freie Universität Berlin  
Institut für Mathematik I  
Arnimalle 2-6  
14195 Berlin

# 1 Einleitung

Im Rahmen des durch das BMBF geförderten Verbundprojektes *Identifizierung verketteter Reaktoren mit Methoden der nichtlinearen Dynamik* wurde die Gleichung  $\Phi = \varphi^n$  mit unbekannter Abbildung  $\varphi$  untersucht. Man stelle sich bei einem chemischen Prozess einen Gesamtreaktor vor, der aus  $n \geq 2$  Einzel-Reaktoren besteht. Idealisiert betrachten wir also den Gesamtreaktor als Verkettung  $n$  identischer Reaktoren. Der grosse Reaktor kann nun durch eine „globale“ Input-Output Funktion,  $y = \Phi(x)$ , modelliert werden. Jeder der Einzel-Reaktoren wird ebenfalls durch eine Input-Output Funktion  $\varphi$  beschrieben. In der Realität ist es aber in den meisten Fällen sehr kompliziert und kostspielig, an jedem der kleinen Reaktoren Messungen vorzunehmen und somit die Funktion  $\varphi$  direkt zu identifizieren. Dies führt zu folgenden Fragen: Kann man eventuell schon anhand der Abbildung  $\Phi$  Informationen über  $\varphi$  gewinnen? Ist es vielleicht sogar möglich,  $\varphi$  direkt zu bestimmen?

Mathematisch gesehen geht es also um folgendes Problem: Finde für gegebenes  $\Phi$  ein  $\varphi$ , so dass

$$\Phi(x) = \varphi \circ \varphi \circ \dots \circ \varphi(x) \quad (1)$$

gilt, wobei  $\varphi$  auf der rechten Seite  $n$ -mal auftritt. Dieses Problem schreiben wir in der Form  $\Phi = \varphi^n$ . Wir betrachten den Fall  $\Phi : \mathbb{R}^N \rightarrow \mathbb{R}^N$ , für  $N \in \mathbb{N}$  beliebig. Etwas anders ausgedrückt stellen wir uns also die Frage, ob man aus einer Abbildung  $\Phi$  eine „ $n$ -te Wurzel“  $\varphi$  ziehen kann.

Der Frage der Existenz und Eindeutigkeit von Lösungen zu (1) widmen wir uns im folgenden Abschnitt. Wir werden hier sehen, dass bereits im zweidimensionalen Fall  $N = 2$  die Lösung  $\varphi$  zu (1) i.a. nicht mehr eindeutig ist. Die Ergebnisse in diesem Abschnitt sind den Arbeitsblöcken *Resultate für skalare identische Reaktoren*, *Fehlerschätzer verrauschter Daten niedriger Dimensionen sowie hochdimensionaler Daten* und *Zweidimensionale Input-Output-Relationen* zugeordnet; vgl. Balkenplan, S. 26. Zu letzterer Kategorie sei auch auf Abschnitt 3 unseres Berichtes verwiesen, wo die globale Input-Output-Funktion  $\Phi$  „kompliziertes Verhalten“ nahe des Fixpunktes Null aufweist und wir ein notwendiges Kriterium für die Existenz einer Lösung  $\varphi$  zu (1) angeben.

Im vierten Abschnitt interessieren wir uns speziell für die Dynamik der Iterierten von  $\Phi$  und untersuchen, was man daraus über die Dynamik und das Langzeitverhalten von  $\varphi$  aussagen kann. In dieser Hinsicht sind *isolierte, invariante Mengen* wichtig. Grob ausgedrückt sind das beschränkte Mengen, die sich unter Anwendung von  $\Phi$  und  $\Phi^{-1}$  (bzw.  $\varphi$  und  $\varphi^{-1}$ ) nicht verändern.

Für diese Fragestellung ist der *Conley-Index* besonders geeignet. Dabei handelt es sich um ein Werkzeug, das auch zur effizienten Untersuchung leicht gestörter Systeme oder prozessbedingt leicht unterschiedlicher Reaktoren herangezogen werden kann.

Die Ergebnisse dieses Abschnittes sind den Arbeitspaketen *Störungsrechnung*

*fast identischer Reaktoren sowohl niedriger als auch höherer Dimensionen, Hochdimensionale Input-Output-Relationen, Identifizierung in Ketten prozessbedingt unterschiedlicher Reaktoren zuzuordnen.*

In Abschnitt 5 behandeln wir ausführlich ein praxisbezogenes Beispiel, in dem zwei Reaktoren hintereinandergeschaltet sind. Es wird sich zeigen, dass die in diesem Beispiel auftretende Fragestellung zu (1) äquivalent ist. Wir zeigen dann, wie man unter gewissen sinnvollen Strukturannahmen eine eindeutige Lösung zu (1) finden kann. Auch ohne diese Strukturannahmen an die Lösung können wir im Falle von Diffusion zumindest lokal die Eindeutigkeit der Lösung mit den im ersten Abschnitt dieses Berichts dargestellten Methoden konstruktiv und algorithmisch garantieren.

## 2 Existenz und Eindeutigkeit der Lösung

### 2.1 Existenz der Lösung

Im folgenden erfülle  $\Phi : \mathbb{R}^N \rightarrow \mathbb{R}^N$  die aus der Modellierung resultierenden Annahme  $\Phi(0) = 0$ . Bei Inputkonzentrationen gleich Null sind also auch die Outputkonzentrationen Null. Außerdem nehmen wir an, dass  $\Phi$  injektiv (d.h.  $\Phi$  liefert für verschiedene Inputs auch verschiedene Outputs) und stetig (d.h. eine kleine Änderung der Inputs resultiert in einer kleinen Änderung der Outputs) ist. Wir werden meistens sogar annehmen, dass  $\Phi$  differenzierbar ist und bezeichnen dann mit  $A$  die Ableitung von  $\Phi$  in der Null.

Die im Projekt hergeleiteten Existenzsätze beruhen auf dem folgenden Resultat von Grobman-Hartman:

**Satz 2.1.1** *Sei  $f : \mathbb{R}^N \rightarrow \mathbb{R}^N$  eine genügend glatte Abbildung mit  $f(x_0) = x_0$ . Erfüllt  $A := Df(x_0)$  eine Nichtausartungsbedingung, so existiert lokal um  $x_0$  eine stetige Abbildung  $h$ , die  $A$  und  $f$  nahe  $x_0$  konjugiert, d.h es gilt*

$$h \circ f = A \circ h$$

*in einer kleinen Umgebung um  $x_0$ .*

Kurz: in geeigneten, durch  $h$  gegebenen Koordinaten, ist  $f$  lokal linear. Damit haben wir das entscheidende Werkzeug für die Existenz einer Lösung (zumindest nahe  $x_0 = 0$ ).

Wir bemerken nämlich, dass für eine lineare Input-Output-Funktion  $\Phi = A$  eine Lösung von (1) durch  $\varphi(x) := \exp(\frac{1}{n} \log(A)x)$  gegeben ist. In diesem Fall kann man eine Lösung also explizit angeben und diese Lösung ist überall erklärt! Ist  $A$  sogar von Diagonalgestalt mit positiven Einträgen  $a_1, \dots, a_N$ , so ist z.B diejenige Diagonalmatrix eine Lösung, deren Einträge aus  $(a_1)^{1/n}, \dots, (a_N)^{1/n}$  bestehen.

Ist die globale Input-Output-Funktion also *linear*, so lässt sich schnell eine Lösung finden und diese kann man sogar explizit angeben!

Der Satz von Grobman-Hartman schlägt eine wichtige Brücke von den nicht-linearen Funktionen  $\Phi$  zu ihren Linearisierungen  $D\Phi = A$  mittels einer stetigen Abbildung  $h$ . Nun ist klar, wie man zumindest nahe  $x_0 = 0$  eine Lösung von (1) konstruiert: Der Satz von Grobman-Hartman erlaubt zunächst den Übergang zu einer linearen Abbildung  $D\Phi(0)$ . Aus dieser kann man dann, wie oben angedeutet, eine „ $n$ -te Wurzel ziehen“ (also eine Lösung für das lineare Problem finden). Danach geht man mittels der Konjugation  $h$  wieder zu der nichtlinearen Abbildung  $f$  über. Eine Lösung sieht also wie folgt aus:

$$\varphi(x) := h^{-1} \circ \exp\left(\frac{1}{n}\log(A)\right) \circ h(x). \quad (2)$$

Dieses wichtige Konzept werden wir gleich noch etwas präzisieren. Es gilt folgender Satz:

**Satz 2.1.2** *Falls  $\Phi$  die oben angegebenen Bedingungen erfüllt, dann existiert in einer Umgebung des Fixpunktes  $x = 0$  von  $\Phi$  eine Lösung  $\varphi$  des Problems (1). Diese ist durch (2) gegeben.*

Wir wollen noch einige Bemerkungen über die Konstruktion der Lösung mittels dieses Satzes machen. Zunächst sind die Voraussetzungen des Satzes von Grobman-Hartman relativ leicht zu überprüfen: Es genügt die stetige Differenzierbarkeit der Abbildung  $\Phi$  und die Eigenschaft, dass die Ableitung  $D\Phi$  in  $x = 0$  keinen Eigenwert vom Betrag Eins besitzt. Weiterhin gilt der Satz für Räume beliebiger Dimension. Man hat also keine Einschränkung an die Dimension  $N$  des umliegenden Raumes, solange diese endlich ist. Wir stellen allerdings auch einige Nachteile fest: Die im Satz von Grobman-Hartman auftretende Konjugation  $h$ , die auch in der konstruierten Lösung  $\varphi$  auftritt, ist im allgemeinen nicht explizit bekannt! Dies liegt an der Tatsache, dass die Abbildung  $h$  abstrakt gewonnen wird. Ein weiteres Problem ist, dass  $h$  die Abbildungen  $\Phi$  und  $A$  aus dem Satz von Grobman-Hartman nur *lokal* in einer kleinen Umgebung des Fixpunktes  $x = 0$  konjugiert. Wir wissen allerdings a priori nicht, wie groß diese Umgebung ist! Damit ist unsere Lösung  $\varphi$ , mit  $\varphi(x) = h^{-1} \circ \exp\left(\frac{1}{n}\log(A)\right) \circ h(x)$ , ebenfalls nur in einer kleinen Umgebung um die Null definiert, deren Größe unbekannt ist.

Die so konstruierte Lösung bezeichnen wir im weiteren stets mit  $\varphi$ . Wir gehen im nachfolgenden Abschnitt 2.1.1 kurz auf die Frage ein, ob man den Definitionsbereich unserer konstruierten Lösung  $\varphi$  aus Satz 2.1.2 noch erweitern kann.

### 2.1.1 Erweiterung des Definitionsbereiches

Unsere konstruierte Lösung  $\varphi$  aus Satz 2.1.2 ist zunächst nur auf einer kleinen Umgebung um die Null definiert. Wir können allerdings den Definitionsbereich unserer Lösung  $\varphi$  noch erweitern. Sind die Voraussetzungen des Satzes von Grobman-Hartman nämlich für unsere globale Input-Output-Funktion  $\Phi$  erfüllt (also insbesondere die Voraussetzungen an das Spektrum von  $A := D\Phi(0)$ ), so

wissen wir, dass Teilmengen  $W^s(0)$  bzw.  $W^u(0)$  des  $\mathbb{R}^N$  existieren, auf denen die Iterationen  $x_{n+1} = \Phi(x_n)$  und  $x_0 \in \mathbb{R}^N$  für  $n \rightarrow \infty$  bzw.  $n \rightarrow -\infty$  gegen den Fixpunkt Null konvergieren.  $W^s(0)$  heisst die *stabile* Mannigfaltigkeit von  $\Phi$ ,  $W^u(0)$  ist die *instabile* Mannigfaltigkeit von  $\Phi$ . Man kann nun zeigen, dass es möglich ist, die Abbildungen  $h$  und  $h^{-1}$  entlang „endlicher Abschnitte“ von  $W^s(0)$  bzw.  $W^u(0)$  fortzusetzen und damit dann auch die Lösung  $\varphi$  von (1), die weiterhin durch  $\varphi(x) := h \circ \exp(\frac{1}{n} \log(A)) \circ h^{-1}(x)$  gegeben ist. Weiterhin wollen wir zur Vereinfachung annehmen, dass die stabile Mannigfaltigkeit der Null die instabile Mannigfaltigkeit nicht schneidet. Dann gilt für die in Satz 2.1.2 konstruierte Lösung  $\varphi$ :

**Satz 2.1.3** *Die in Satz 2.1.2 konstruierte Lösung  $\varphi$  lässt sich auf Abschnitte beliebiger endlicher Länge der stabilen und instabilen Mannigfaltigkeit von  $\Phi$  fortsetzen.*

Da aber die Konstruktion dieser Fortsetzung des Definitionsbereiches von  $\varphi$  stark von der uns unbekanntem Umgebung (aus Satz 2.1.2) abhängt, können wir auch nach diesem Satz noch nicht explizit die Menge bestimmen, auf der  $\varphi$  definiert ist.

## 2.2 Eindeutigkeit der Lösung

Wir werden uns nun mit der Frage der Eindeutigkeit der allgemeinen Lösung von (1) beschäftigen. Diese Frage ist insbesondere deswegen wichtig, da wir in einigen Fällen zusätzliche Eigenschaften über unsere in Abschnitt 2.1 konstruierte Lösung  $\varphi$  nachweisen können. Wüssten wir bereits, dass eine Lösung von (1) eindeutig ist, und somit mit unserer konstruierten Lösung  $\varphi$  zumindest auf dem Definitionsbereich von  $\varphi$  übereinstimmt, so hätten wir analoge Eigenschaften auch für unsere allgemeine Lösung von (1) nachgewiesen. Leider wird sich herausstellen, dass es bereits im  $\mathbb{R}^2$  im allgemeinen mehr als eine Lösung von (1) gibt.

Wir betrachten zunächst den eindimensionalen Fall, also

$$\Phi : I \rightarrow I$$

für ein Intervall  $I$  um die Null. Die Abbildung  $\Phi$  besitze Null als eindeutigen Fixpunkt im Intervall  $I$ , also  $\Phi(0) = 0$ . In diesem Fall ist dann die Lösung von  $\Phi = \varphi^n$  i.a. eindeutig und wir können den folgenden Satz zeigen:

**Satz 2.2.1** *Sei  $\Phi : I \rightarrow I$  wie oben beschrieben und zusätzlich umkehrbar differenzierbar. Gilt außerdem  $\Phi'(0) \neq 1$  so existiert eine eindeutige stetige Lösung  $\varphi : I \rightarrow I$  von (1) und es gilt  $\varphi'(x) > 0$ , für alle  $x \in I$ .*

Den Beweis hiervon kann man Gelfreich [4] entnehmen.

Die Situation ändert sich bereits, wenn  $\Phi : I \rightarrow I$  genau *zwei* Fixpunkte besitzt, diese seien etwa 0 und  $x_0$  (wir nehmen an, dass  $x_0 > 0$  ist), also gilt  $\Phi(0) = 0$  und  $\Phi(x_0) = x_0$ . Man stelle sich etwa vor, dass  $I = (a, b)$  und  $0, x_0 \in (a, b)$ . Dann besitzt  $\Phi$  auf dem Intervall  $I_0 = (a, x_0)$  genau einen Fixpunkt (nämlich die Null) und auf dem Intervall  $I_1 = (0, b)$  ebenfalls genau einen Fixpunkt (nämlich  $x_0$ ). Also existieren nach dem obigen Satz Lösungen auf  $I_0$  und  $I_1$ . Aber diese müssen auf dem Intervall  $I_0 \cap I_1 = (0, x_0)$  nicht übereinstimmen! Es gilt sogar der folgende Satz:

**Satz 2.2.2** *Erfülle  $\Phi : I \rightarrow I$  die Voraussetzungen des vorigen Satzes, außer der Tatsache, dass es nun genau zwei Fixpunkte 0 und  $x_0$  gibt. Falls dann eine stetige Lösung  $\varphi : I \rightarrow I$  von (1) existiert, so ist sie eindeutig. Für allgemeine stetige, oder sogar differenzierbare Input-Output-Funktionen  $\Phi$  existiert aber nicht einmal eine stetige Lösung  $\varphi$  von (1).*

Für ein genaueres Kriterium, wann für ein gegebenes  $\Phi$  eine eindeutige Lösung existiert, sei auf Gelfreich [4] verwiesen.

Wir betrachten nun den zweidimensionalen Fall, also  $N = 2$ . In diesem Fall gibt es für eine allgemeine Input-Output-Funktion  $\Phi$  keine eindeutige Lösung von (1). Eine positive Aussage können wir aber treffen, wenn  $\Phi$  eine *Kontraktion* nahe der Null ist. Dies bedeutet das folgende: Wählt man als Input einen Wert nahe Null so erhält man als Output unter  $\Phi$  einen Wert, der näher an Null liegt als der Input (man bedenke:  $\Phi(0) = 0$ ). Wiederholt man diesen Vorgang (indem man also den Output als neuen Input eines fiktiven Gesamtreaktors wählt), so bedeutet dies, dass sich die neu erzielten Outputs immer mehr dem Wert Null nähern.

Sei nun  $\Phi$  eine Kontraktion,  $\Phi : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}^2$ ,  $k$ -mal differenzierbar und  $\Phi(0) = 0$ . Wir haben dann folgendes Resultat:

**Satz 2.2.3** *Sei  $I_2 \subset \mathbb{R}^2$  ein offenes Gebiet um 0, und  $\Phi$  eine Kontraktion. Erfüllt dann  $D\Phi(0)$  eine bestimmte Nichtresonanzbedingung, so existiert eine eindeutige Lösung der Gleichung  $\Phi = \varphi^n$  mit den folgenden Eigenschaften: Es ist  $\varphi(0) = 0$  und auch  $D\varphi(0)$  erfüllt eine gewisse Nichtresonanzbedingung an die Eigenwerte.*

Die Existenz einer Lösung zu  $\Phi = \varphi^2$  ist bereits durch den Satz (2.1.2) aus dem vorigen Abschnitt gesichert. Allein die Eindeutigkeit ist der zentrale Aspekt des Satzes.

Ist die Input-Output-Funktion (I-O-Funktion)  $\Phi$  keine Kontraktion mehr, ändert sich die Situation. Erstaunlicherweise kann man in diesem Fall schon für *lineare* Input-Output-Funktionen  $\Phi$  zeigen, dass eine Lösung zu (1) nicht mehr eindeutig ist. Sei  $\Phi$  z.B. eine Diagonalmatrix  $\text{diag}(\lambda, \mu)$  mit  $0 < \mu < 1 < \lambda$ , so können wir zeigen, dass  $\Phi$  bereits unendlich viele Wurzeln besitzt, d.h. es existieren unendlich

viele verschiedene Lösungen  $\varphi$  zu

$$\text{diag}(\lambda, \mu) = \varphi^n. \quad (3)$$

Eine Lösung ist sicherlich  $M = \text{diag}(\lambda^{1/n}, \mu^{1/n})$ . Man kann aber überraschenderweise zeigen, dass es noch weitere *nichtlineare* Lösungen gibt. Wir halten fest:

**Satz 2.2.4** *Erfüllt  $\Phi$  die obigen Voraussetzung (ist also insbesondere keine Kontraktion), so ist die Lösung  $\varphi$  von (1) im allgemeinen nicht eindeutig. Bereits für lineares  $\Phi$  existieren unendlich viele verschiedene Lösungen zu (1).*

Für einen konstruktiven Beweis dieses Satzes sei auf Gelfreich [4] verwiesen.

## 2.3 Stabilität der Lösung

Wir kommen nun auf eine weitere, für die Praxis besonders wichtige Frage zu sprechen: Die Frage der *Stabilität*. Man stelle sich etwa einen Reaktor vor, der aus der Hintereinanderausführung von  $n$  (idealisiert identischen) Reaktoren  $\varphi$  besteht. Alle Messwerte, die man zur Modellierung des Gesamt-Reaktors  $\Phi$  entnehmen kann, sind aber nur bis auf eine kleine Fehlertoleranz exakt. Die Frage ist natürlich: Inwieweit ist unsere Lösung (die hier den In- und Output des Einzel-Reaktors  $\varphi$  modelliert) robust gegenüber kleinen Störungen von  $\Phi$ ?

Die Frage, ob eine Lösung  $\varphi$  auch für kleine Störungen der globalen Input-Output-Funktion  $\Phi$  weiterhin *existiert*, ist hierbei (jedenfalls in praktischer Hinsicht) nicht sonderlich interessant, da ja der Einzel-Reaktor selbst stets eine Lösung liefert.

Um den Begriff der „Robustheit der Lösung gegenüber kleinen Störungen“ mathematisch präziser zu fassen, stelle man sich etwa vor, dass die globale Input-Output-Funktion  $\Phi = \Phi(x, \varepsilon)$  glatt von einem Parameter  $\varepsilon$  abhängt, dass also  $\Phi(x, \varepsilon)$  beliebig oft stetig differenzierbar ist. Die *Störung* wird hier durch den Parameter  $\varepsilon$  modelliert.

Für  $\varepsilon = 0$  existiere eine Lösung  $\varphi_0$  von  $\Phi(x, 0) = \varphi_0^n(x)$ . Existiert dann eine Lösung zu

$$\Phi(x, \varepsilon) = \varphi_\varepsilon^n(x), \quad (4)$$

so dass  $\varphi_\varepsilon|_{\varepsilon=0} = \varphi_0$  und  $\varepsilon \rightarrow \varphi_\varepsilon$  zumindest stetig ist? Die Beantwortung dieser Frage ist besonders deswegen wichtig, weil die globale Input-Output Funktion  $\Phi$  aufgrund von Störungen nicht wirklich exakt bekannt ist.

Es gilt nun folgender Satz:

**Satz 2.3.1** *Sei  $\varepsilon \rightarrow \Phi(\cdot, \varepsilon)$  eine differenzierbare Abbildung. Des weiteren gelte  $\Phi(0, \varepsilon) = 0$  für alle  $\varepsilon$  und  $\Phi(\cdot, 0)$  erfülle die Voraussetzungen von Satz 2.1.2 aus dem ersten Kapitel. Dann existiert eine Familie von Lösungen  $\varphi_\varepsilon$  zu (4) und diese Familie hängt stetig von dem Parameter  $\varepsilon$  ab. Alle  $\varphi_\varepsilon$  sind auf einer gemeinsamen, kleinen Umgebung um die Null definiert.*

Es sei betont, dass die Umgebung  $U$ , auf der alle  $\varphi_\varepsilon$  zunächst erklärt sind, i.a. nicht explizit bestimmbar ist. Weiterhin kann man für jedes feste  $\varepsilon$  den Definitionsbereich der Lösung  $\varphi_\varepsilon$  von (4), wie im Abschnitt 2.1.1 beschrieben, fortsetzen. Da aber die Konstruktion dieser Fortsetzung stark von der uns nicht expliziten bekannten Umgebung  $U$  abhängt, ist auch nach der Erweiterung der neue Definitionsbereich i.a. nicht explizit bekannt.

Man kann die Lösungen  $\varphi_\varepsilon$  jedoch noch ein wenig konkreter angeben: Bezeichne dazu mit  $h_\varepsilon$  die nach dem Satz von Grobman-Hartman existierende Abbildung, für die

$$h_\varepsilon \circ \Phi(\cdot, \varepsilon) = A_\varepsilon \circ h_\varepsilon$$

gilt, wobei  $A_\varepsilon = D_x \Phi(0, \varepsilon)$ . Dann ist  $\varphi_\varepsilon$  durch

$$\varphi_\varepsilon = h_\varepsilon^{-1} \circ \exp\left(\frac{1}{n} \log(A_\varepsilon)\right) \circ h_\varepsilon(x) \quad (5)$$

gegeben. Das ist also für  $\varepsilon = 0$  unsere bereits im ersten Kapitel konstruierte Lösung  $\varphi$  zu  $\Phi(\cdot, 0) = \varphi^n$ . Leider ist aber  $\varphi_\varepsilon$ , wie  $h_\varepsilon$ , im allgemeinen nur stetig.

## 2.4 Die Glattheit der Lösung $\varphi_\varepsilon$

Wir wollen nun die Regularität der Abbildung  $x \rightarrow \varphi_\varepsilon(x)$  untersuchen. Hierbei bezeichnet  $\varphi_\varepsilon$  stets die in Satz (2.3.1) konstruierte Lösung zu (4).

Wir erinnern uns, dass diese Lösung  $\varphi$  durch

$$\varphi(x) := h^{-1} \circ \exp\left(\frac{1}{n} \log(A)\right) \circ h(x) \quad (6)$$

gegeben ist, vergleiche (5). Hierbei bezeichnet  $A = D\Phi(0)$  die Ableitung der Input-Output-Funktion  $\Phi$  in der Null. Die Abbildung  $h$  (die die Bedingung  $\Phi \circ h = h \circ A$  nahe Null erfüllt) ist durch den Satz von Grobman-Hartman gegeben. Wir wissen, dass diese Funktion stetig ist. Es stellt sich aber heraus, dass sie unter Umständen sogar  $k$ -mal differenzierbar ist. Damit dies der Fall ist, sollte  $\Phi$  folgende Form haben (siehe den Satz von Belitskii [1]):

$$\Phi(x) = Ax + g(x) \quad (7)$$

und für den Restterm  $g(x)$  sollte nahe Null die Abschätzung  $|g(x)|/|x|^k \rightarrow 0$  für  $|x| \rightarrow 0$  erfüllen, für irgendein  $k \in \mathbb{N}$ , das größer als Null ist. Für  $k = 1$  ist das z.B. genau dann der Fall, wenn  $\Phi$  in Null differenzierbar ist. Der Fall  $k > 1$  bedeutet, dass sämtliche Ableitungen von  $\Phi$  an der Stelle Null bis zur Ordnung  $k$  verschwinden müssen. Wir sehen hier schon, dass diese Bedingung (gerade für grosses  $k$ ) für eine „gewöhnliche“ differenzierbare Abbildung i.a. nicht erfüllt ist. Wir können aber unter gewissen Umständen die Koordinaten so ändern, dass  $\Phi$  in den neuen Koordinaten nahe Null die verlangte Form annimmt. Dazu muss allein  $D\Phi(0)$  eine gewisse Nichtresonanzbedingung erfüllen. Es stellt sich sogar heraus, dass dies für die meisten differenzierbaren Input-Output-Funktionen  $\Phi$  der Fall ist. Wir haben folgenden Satz:

**Satz 2.4.1 ( $C^k$ -Regularität)** Sei  $\Phi_\varepsilon(x)$  genügend oft differenzierbar in beiden Komponenten und gelte für  $\Phi := \Phi_0$  eine Nichtresonanzbedingung. Dann existiert eine Familie  $\varphi_\varepsilon$  von Lösungen zu (4), die in  $\varepsilon$  stetig ist und jedes  $\varphi_\varepsilon(\cdot)$  ist  $k$ -mal stetig differenzierbar.

Der Vollständigkeit halber diskutieren wir noch kurz den Fall, ob und wann unsere konstruierte Lösung  $\varphi$ , die durch (6) gegeben ist, beliebig oft differenzierbar ist. In diesem Fall gilt folgendes Resultat:

**Satz 2.4.2** Sei  $\Phi$  nichtlinear und erfülle  $A = D\Phi(0)$  eine gewisse Bedingung an die Eigenwerte, die z.B. erfüllt ist, wenn  $\Phi$  nicht alle Punkte kontrahiert. Dann ist die durch (6) definierte Lösung  $\varphi$  im allgemeinen nicht beliebig oft stetig differenzierbar.

## 2.5 Die allgemeine Lösung

In den vorigen Abschnitten haben wir im wesentlichen eine spezielle Lösung  $\varphi$  zu (1) konstruiert und uns gefragt, wann diese Lösung etwa  $k$ -mal differenzierbar ist. Ein sehr positiver Aspekt dieser Lösung ist, dass sie „robust“ gegenüber kleinen Störungen der globalen Input-Output-Funktion  $\Phi$  ist. Diese Störung haben wir durch eine Familie  $\Phi_\varepsilon$  modelliert, wobei  $\Phi_0 = \Phi$  und  $\varepsilon \rightarrow \Phi_\varepsilon$  einmal stetig differenzierbar ist.

Leider haben wir aber schon im  $\mathbb{R}^2$  i.a. keine Eindeutigkeit der Lösung mehr (siehe dazu den Abschnitt über die Eindeutigkeit). Wir können also nicht stillschweigend davon ausgehen, dass sämtliche Eigenschaften, die für unsere spezielle Lösung<sup>1</sup>  $\varphi_\varepsilon$  gelten auch für jede andere Lösung von  $\Phi_\varepsilon = \varphi_\varepsilon^n$  erfüllt sind.

Sei nun also  $\varphi$  zunächst irgendeine Lösung zu  $\varphi^n = \Phi_0$ , wobei  $\Phi_\varepsilon$  glatt von  $\varepsilon$  abhängt. Wir nehmen weiterhin an, dass  $\varphi(0) = 0$  ist und stellen uns nun folgende Frage: Ist diese Lösung stabil, d.h. existiert eine Familie von Lösungen  $\varphi_\varepsilon$  mit

$$\varphi_\varepsilon^n = \Phi_\varepsilon, \quad (8)$$

für die  $\varphi_0 = \varphi$  ist und die stetig von  $\varepsilon$  abhängt ?

Für unsere in Satz 2.1.2 konstruierte Lösung war das klar. Wir machen zunächst folgende Beobachtung: Wenn wir mit  $A$ , wie auch in den Abschnitten davor, die Linearisierung von  $\Phi := \Phi_0$  in der Null bezeichnen, gilt

$$D\varphi(0)^n = A. \quad (9)$$

Also gilt nach dem Satz von Grobman-Hartman, für  $M := D\varphi(0)$ , dass eine stetige Abbildung  $h$  existiert mit

$$\varphi = h^{-1} \circ M \circ h. \quad (10)$$

---

<sup>1</sup>für die Notation siehe den ersten Abschnitt

Falls  $M$  eine entsprechende Nichtresonanzbedingung erfüllt, ist  $h$  sogar  $k$ -mal stetig differenzierbar. Man kann weiterhin zeigen, dass stetig umkehrbare Funktionen  $h_\varepsilon(\cdot)$  existieren, die auch in  $\varepsilon$  stetig sind, so dass

$$\Phi_\varepsilon = h_\varepsilon^{-1} \circ A_\varepsilon \circ h_\varepsilon \quad (11)$$

gilt.

Wir definieren nun  $\varphi_\varepsilon$  durch

$$\varphi_\varepsilon := h_\varepsilon^{-1} \circ M_\varepsilon \circ h_\varepsilon. \quad (12)$$

Iterieren von  $\varphi_\varepsilon$  ergibt dann:

$$\varphi_\varepsilon^n = h_\varepsilon^{-1} \circ M_\varepsilon^n \circ h_\varepsilon \quad (13)$$

und damit

$$\varphi_\varepsilon^n = h_\varepsilon \circ A_\varepsilon \circ h_\varepsilon^{-1} = \Phi_\varepsilon, \quad (14)$$

wegen (11). Also ist die so definierte Abbildung  $\varphi_\varepsilon$  tatsächlich eine Lösung von  $\Phi_\varepsilon = \varphi_\varepsilon^n$ , die stetig von  $\varepsilon$  abhängt. Wir halten dies in einem Satz fest:

**Satz 2.5.1** *Sei  $\varphi$  eine beliebige differenzierbare Lösung zu  $\varphi^n = \Phi_0$  mit  $\varphi(0) = 0$ . Hänge die Familie  $\Phi_\varepsilon$  differenzierbar von  $\varepsilon$  ab und sei ebenfalls  $\Phi_\varepsilon(0) = 0$ . Dann existiert eine Familie von Lösungen  $\varphi_\varepsilon$ , die in  $\varepsilon$  stetig ist und  $\varphi_0 = \varphi$  in einer kleinen Umgebung um die Null. Erfüllt  $\Phi_0$  eine Nichtresonanzbedingung, so ist  $\varphi_\varepsilon(\cdot)$  sogar differenzierbar.*

### 3 Homokline Punkte

Da die Bestimmung der Input-Output-Relation  $\varphi$  der Einzelreaktoren im allgemeinen ein schwieriges Problem darstellt, werden zunächst notwendige Bedingungen gesucht, die  $\Phi$  erfüllen muss, um von der Form  $\Phi = \varphi^n$  zu sein.

Wir befassen uns in diesem Abschnitt mit Reaktionen zweier Messgrößen, d.h.  $N = 2$ . Verallgemeinerungen auf Systeme höherer Dimension sind möglich, siehe dazu [6].

Dabei sollen die folgenden Annahmen an die Input-Output-Relation  $\Phi$  gelten:

- (H1)  $\Phi : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}^2$  ist differenzierbar, orientierungserhaltend und bijektiv.
- (H2)  $\Phi(0) = 0$  und  $D\Phi(0)$  hat nur Eigenwerte, die nicht auf dem Einheitskreis liegen. Jeweils einer der Eigenwerte ist vom Betrag kleiner bzw. größer als eins. Wir wollen weiterhin annehmen, dass die Eigenwerte  $\lambda, \mu$  der Linearisierung  $D\Phi(0)$  in  $x = 0$  beide positiv sind.

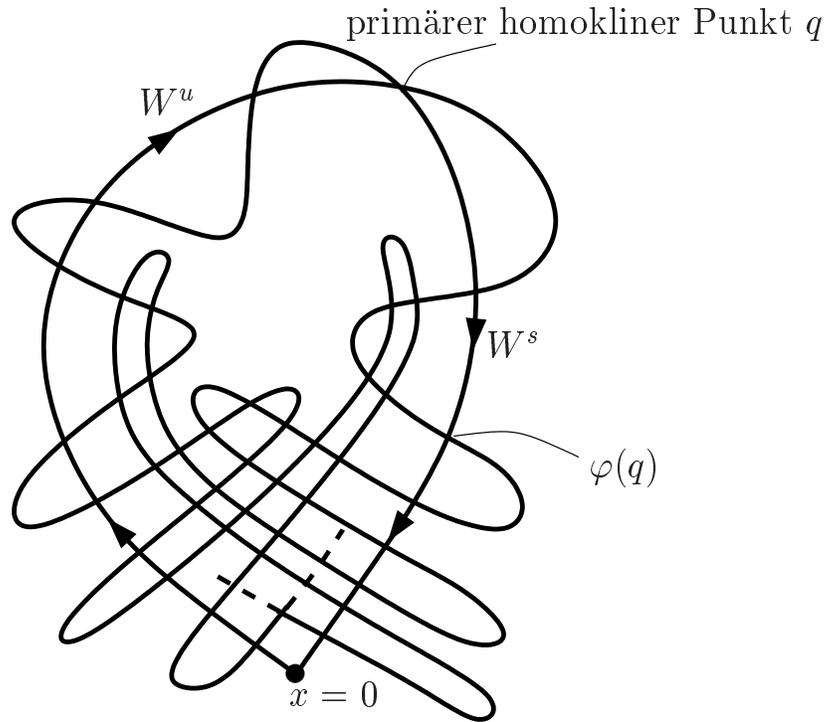


Abbildung 1: Schnittpunkte zwischen stabiler und instabiler Mannigfaltigkeit

- (H3)** Es existiert ein *homokliner Orbit* an  $x = 0$ , d.h. ein Ast der stabilen Mannigfaltigkeit  $W^s$  schneidet die instabile Mannigfaltigkeit von  $x = 0$  in einem Punkt  $p \neq 0$ , der *homokliner Punkt* heißt, während der andere Ast von  $W^s$  die instabile Mannigfaltigkeit  $W^u$  nicht schneidet (siehe 2.1.1 zur Definition von stabiler bzw. instabiler Mannigfaltigkeit).

Es lässt sich zeigen, dass die invarianten Mannigfaltigkeiten  $W^s$  und  $W^u$  für die Abbildungen  $\Phi$  und  $\varphi$  übereinstimmen, falls  $\Phi = \varphi^n$  und  $\Phi(0) = \varphi(0) = 0$  ist.

Annahme **(H2)** impliziert, dass die stabile Mannigfaltigkeit  $W_\varphi^s$ , die aus allen Punkten besteht, deren Iterierte  $\varphi^k$  für  $k \rightarrow \infty$  gegen 0 konvergieren, eine Kurve ist. Analog ist auch die instabile Mannigfaltigkeit, bestehend aus allen Punkten, deren Rückwärts-Iterierte gegen  $x = 0$  konvergieren, eine Kurve.

Voraussetzung **(H3)** ist motiviert durch unser Resultat aus Abschnitt 2.2, wo gezeigt werden konnte, dass selbst für lineares  $\Phi$  die Gleichung  $\varphi \circ \varphi = \Phi$  im allgemeinen unendlich viele Lösungen  $\varphi$  besitzt, falls  $D\Phi$  keine reine Kontraktion ist. Dieser rein lineare Fall wird durch **(H3)** ausgeschlossen.

Es ist seit Poincaré bekannt, dass aus der Existenz eines einzigen Schnittpunkts  $p \neq 0$  von  $W^u$  und  $W^s$  sofort unendlich viele weitere Schnittpunkte folgen, siehe Abbildung 1. Diese Schnittpunkte entsprechen weiteren homoklinen Punkten.

**Definition 3.0.2** *Ein homokliner Punkt  $q \in W^s \cap W^u \setminus \{0\}$  heißt primärer homokliner Punkt, falls für die endlichen Abschnitte  $W^u[0, q]$  bzw.  $W^s[0, q]$  zwischen den Punkten  $x = 0$  und  $q$  gilt:  $W^u[0, q] \cap W^s[0, q] = \{0, q\}$ . Der entsprechende Orbit, bestehend aus allen Iterierten von  $q$ , heißt dann primärer homokliner Orbit.*

Numerische Algorithmen zur Berechnung invarianter Mannigfaltigkeiten liefern oft gerade solche Abschnitte  $W^{s/u}[0, q]$ . Siehe dazu [2]. Die Entscheidung, ob ein homokliner Punkt primär ist, lässt sich mit Hilfe dieser Information treffen.

**(H4)** Es gibt nur endlich viele primäre homokline Orbits und alle sind transversale homokline Orbits, d.h.  $W^u$  und  $W^s$  sind im Schnittpunkt nicht tangential zueinander.

Eine notwendige Bedingung an  $\Phi$ , um von der Form  $\Phi = \varphi^n$  zu sein, stellt das folgende Kriterium aus [6] dar.

**Theorem 3.0.3** *Falls die Input-Output-Relationen  $\Phi$  und  $\varphi$  die Voraussetzungen (H1)–(H4) erfüllen und  $\Phi = \varphi^n$ , dann gibt es ein  $m \in \mathbb{N}$ , so dass  $\Phi$  genau  $2mn$  verschiedene primäre homokline Orbits besitzt. Insbesondere besitzt  $\Phi$  mindestens  $2n$  verschiedene primäre homokline Orbits.*

Außer der Anzahl der primären homoklinen Orbits kann auch die Anordnung der primären homoklinen Punkte entlang der stabilen und instabilen Mannigfaltigkeit benutzt werden, um auszuschließen, dass  $\Phi$  von der Form  $\Phi = \varphi^n$  ist, siehe [6].

## 4 Conley–Index Methoden

### 4.1 Einleitung zum Conley–Index

Der Conley–Index ist ein topologisches Werkzeug, mit dem man die Dynamik stetiger Abbildungen untersuchen kann. Wir skizzieren kurz seine Konstruktion. Sei dazu  $\varphi : \mathbb{R}^N \rightarrow \mathbb{R}^N$  eine stetige Abbildung mit stetiger Inverser  $\varphi^{-1}$ . Weil wir Lösungen der Gleichung  $\Phi = \varphi^n$  suchen, interessieren wir uns für  $\varphi$  als diskretes dynamisches System, also für Trajektorien von  $\varphi$ . Dabei versteht man unter einer Trajektorie mit Anfangswert  $x \in \mathbb{R}^N$  die Folge  $(\varphi^n(x))_{n \in \mathbb{Z}}$ , also die Vorwärts- und Rückwärts-Iterierten von  $x$  unter  $\varphi$ .

Die isolierten invarianten Mengen von  $\varphi$  spielen eine wichtige Rolle, weil sie insbesondere eng mit dem Langzeitverhalten dynamischer Systeme in Verbindung stehen. Dabei heißt eine Menge  $S \subseteq \mathbb{R}^N$  invariant unter  $\varphi$ , falls für jeden Punkt  $x \in S$  seine volle Trajektorie  $(\varphi^n(x))_{n \in \mathbb{Z}}$  auch in  $S$  liegt. Somit besteht eine invariante Menge ausschließlich aus der Vereinigung von Trajektorien. Beispiele für invariante Mengen sind Fixpunkte, periodische Trajektorien, homokline Trajektorien, ...

Eine invariante Menge  $S$  ist isoliert invariant bezüglich  $\varphi$ , falls man ein Kompaktum (d.h. in  $\mathbb{R}^N$  eine beschränkte und abgeschlossene Menge)  $\mathcal{N}$  finden kann, so dass  $S$  die größte unter  $\varphi$  invariante Menge ist, die in  $\mathcal{N}$  enthalten ist und den Rand von  $\mathcal{N}$  nicht schneidet. Diese Menge  $\mathcal{N}$  heißt isolierende Umgebung von  $S$  bezüglich  $\varphi$ .

Zu jeder isolierten invarianten Menge gehört also mindestens eine isolierende Umgebung. Diese hat gegenüber der dazugehörigen isolierten invarianten Menge selbst den Vorteil, dass sie robust bezüglich kleiner Störungen des Systems ist (siehe Satz 4.3.1). Isolierende Umgebungen bilden den Grundstein der Konstruktion des Conley-Index. Diese wollen wir hier nicht näher beschreiben, siehe dazu [3].

Isolierende Umgebungen und der Conley-Index können aus einer Datenbasis numerisch bestimmt werden. Dazu wurden bereits Algorithmen entwickelt, siehe [9], [15]. Aufgrund dieser Tatsache ist der Conley-Index ein besonders nützliches Werkzeug für die Analyse der globalen Input-Output Relation. Die topologische Natur des Conley-Index macht ihn automatisch stabil bezüglich kleiner Messfehler, vermeidet Regularitätsannahmen, und erlaubt uns auch im Falle prozessbedingt *unterschiedlicher* Reaktoren, die Ergebnisse anzuwenden, die wir im Fall *identischer* Reaktoren erzielt haben. Das gilt, solange die Reaktoren nicht zu unterschiedlich sind. Ausserdem wollen wir hier noch einmal betonen, dass der Conley-Index in beliebig hohen Dimensionen  $N$  angewendet werden kann. Aus diesen Gründen gehören die Ergebnisse dieses Kapitels zu den Arbeitsblöcken *Hoch-Dimensionale Input-Output-Relationen* und *Identifizierung in Ketten prozessbedingt unterschiedlicher Reaktoren*.

Allerdings müssen die Informationen, die uns der Conley-Index liefert, bei jedem System neu interpretiert werden, da er nur eine Invariante der isolierten invarianten Mengen ist. Mit Hilfe des Conley-Index kann man aber zum Beispiel Fixpunkte, heterokline Orbits, periodische Orbits und Chaos aufspüren.

Den Conley-Index einer isolierten invarianten Menge  $S$  bezüglich einer Abbildung  $\varphi$  bezeichnen wir mit  $h(S, \varphi)$ .

## 4.2 Ergebnisse bei identischen verketteten Reaktoren

Wir beschreiben nun die im Projekt erreichten Resultate. Wir betrachten eine Kette  $n$  identischer Reaktoren mit globaler Input-Output-Relation  $\Phi = \varphi^n$ , wobei  $\varphi$  die I-O-Relation jedes einzelnen Reaktors ist. Wir stellen uns vor, dass diese Abbildungen auf  $\mathbb{R}^N$  oder  $\mathbb{R}_+^N$  definiert sind ( die Variablen sind in unserem Fall Konzentrationen und damit nicht negativ). Unter der Voraussetzung, dass  $\Phi$  (und damit auch  $\varphi$ ) eine stetige Abbildung mit stetiger Inversen ist, wurden folgende Sätze bewiesen. Dabei befassen sich die drei ersten damit, einen Zusammenhang zwischen den bezüglich  $\Phi$  isolierten invarianten Mengen  $S$  und denen bezüglich  $\varphi$  herzustellen.

**Satz 4.2.1** *Sei  $S \subseteq \mathbb{R}^N$  eine kompakte Menge. Falls  $S$  bezüglich  $\varphi$  isoliert invariant ist, dann ist  $S$  auch bezüglich  $\Phi$  isoliert und invariant.*

Dieser Satz besagt insbesondere, dass die bezüglich  $\varphi$  isolierten invarianten Mengen – also genau die Mengen, die uns interessieren – sich unter den isolierten invarianten Mengen von  $\Phi$  befinden. Diese wiederum können algorithmisch aus den Daten bestimmt werden. Die folgenden Sätze helfen uns dabei, diejenigen isolierten invarianten Mengen von  $\Phi$  zu bestimmen, die auch bezüglich  $\varphi$  isoliert, invariant sind.

**Satz 4.2.2** *Sei  $S$  eine isolierte invariante Menge bezüglich  $\Phi$ . Dann ist auch  $\varphi(S)$  isoliert invariant bezüglich  $\Phi$ .*

Dass eine Menge  $S$  unter  $\Phi = \varphi^n$  invariant ist, bedeutet insbesondere, dass  $\varphi^n(S) = S$  gilt. Der Satz besagt dann, dass die “Zwischenschritte”  $\varphi^j(S)$ ,  $j = 1, \dots, n-1$ , ebenfalls isolierte invariante Mengen bezüglich  $\Phi$  sind. Diese können mit  $S$  übereinstimmen, müssen aber nicht.

**Satz 4.2.3** *Sei  $S$  eine isolierte invariante Menge bezüglich  $\Phi = \varphi^n$ . Dann ist die Vereinigung  $\bigcup_{l=0}^{n-1} \varphi^l(S)$  eine isolierte invariante Menge bezüglich  $\varphi$ .*

Die Idee ist nun, diesen Satz zu benutzen, um aus den isolierten invarianten Mengen bezüglich  $\Phi$ , die isolierten invarianten Mengen bezüglich  $\varphi$  zu rekonstruieren.

Wenn man alle isolierten invarianten Mengen und ihre Conley–Indizes bezüglich  $\Phi$  kennt, möchte man diese auch bezüglich  $\varphi$  kennen. Die Sätze 4.2.1 und 4.2.3 machen dies möglich und zwar im folgenden Sinne: Sei  $S$  eine bezüglich der globalen Input–Output Relation  $\Phi$  isolierte invariante Menge. Entweder ist dann  $S$  schon unter  $\varphi$  isoliert invariant, oder nicht; im letzteren Fall ist dann  $\bigcup_{l=0}^{n-1} \varphi^l(S)$  bezüglich  $\varphi$  isoliert invariant. So können wir aus den isolierten invarianten Mengen bezüglich  $\Phi$  *alle* isolierten invarianten Mengen bezüglich  $\varphi$  herleiten. Nach Satz 4.2.1 ist die Menge  $\bigcup_{l=0}^{n-1} \varphi^l(S)$  auch für  $\Phi$  isoliert invariant, was uns eine für  $\Phi$  und  $\varphi$  gemeinsame isolierte invariante Menge liefert. Was dies genau bedeutet, sieht man am einfachsten, wenn  $S$  ein periodischer Orbit von  $\varphi$  ist; siehe dazu Abbildung 2. Der periodische Orbit  $S$  von  $\varphi$  zerfällt unter Anwendung von  $\Phi$  in mehrere gleich lange periodische Orbits  $\Sigma_0, \dots, \Sigma_k$  von  $\Phi$  mit  $\Sigma_i = \varphi^i(\Sigma_0)$  für alle  $i \in \{1, \dots, k\}$ . Ausserdem ergibt die Vereinigung dieser Orbits den ursprünglichen Orbit wieder, d.h.  $S = \bigcup_{i=0}^k \Sigma_i$ . Also teilt  $k$  die  $\varphi$ -Periode von  $S$ .

Wir wissen dann, dass  $\varphi$  und  $\Phi$  gemeinsame isolierte invariante Mengen besitzen. Bei diesen können wir nun die Conley–Indizes vergleichen.

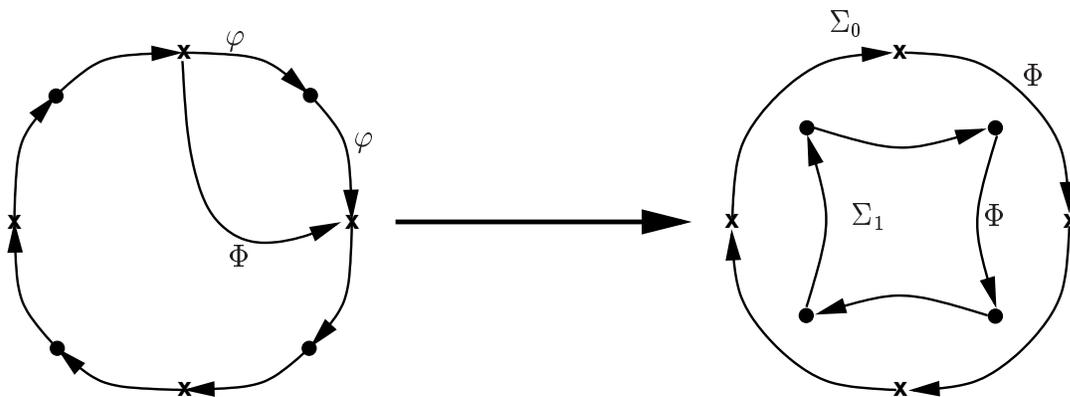


Abbildung 2:  $\varphi$  hat einen Orbit der Periode 8,  $\Phi = \varphi^2$  hat 2 Orbits der Periode 4.

**Theorem 4.2.4** Sei  $\varphi : \mathbb{R}^N \rightarrow \mathbb{R}^N$  eine stetige Bijektion und  $\Phi = \varphi^n$ . Sei  $S$  eine Menge, die sowohl bezüglich  $\varphi$  als auch bezüglich  $\Phi$  isoliert und invariant ist. Dann ist  $h(S, \Phi)$ , der Conley-Index von  $S$  bezüglich  $\Phi$ , gleich der  $n$ -ten Potenz von  $h(S, \varphi)$ , dem Conley-Index von  $S$  bezüglich  $\varphi$ . Oder kurz:

$$h(S, \varphi^n) = (h(S, \varphi))^n$$

Ausführliche Beweise für 4.2.1, 4.2.3, und 4.2.4 sind in [3] gegeben.

Sei  $S$  eine isolierte invariante Menge bezüglich  $\Phi$ . Satz 4.2.3 wirft dann folgende Frage auf: Wie kann man die isolierten invarianten Mengen  $\varphi^l(S)$ ,  $l = 1, \dots, n-1$  identifizieren, die wir ja zur Konstruktion von  $\bigcup_{l=0}^{n-1} \varphi^l(S)$  brauchen? Dazu dient folgender Satz.

**Satz 4.2.5** Sei  $S$  eine isolierte invariante Menge bezüglich  $\Phi = \varphi^n$ . Dann gilt  $h(S, \Phi) = h(\varphi^l(S), \Phi)$  für alle  $l = 1, \dots, n-1$ .

Dieser Satz hilft uns bei der Identifizierung der  $\varphi^l(S)$  weiter, weil er eine notwendige Bedingung dafür liefert, dass Mengen von dieser Form sind: alle  $\varphi^l(S)$ ,  $l = 1, \dots, n-1$ , müssen gleiche Conley-Indizes haben. Wir sehen in den folgenden Beispielen, wie man dies ausnutzen kann.

**Beispiel 4.2.6** 1. Falls für eine Abbildung  $\Phi : \mathbb{R}^N \rightarrow \mathbb{R}^n$  die Conley-Indizes der nichttrivialen, isolierten invarianten Mengen paarweise verschieden sind, kann aus den Sätzen 4.2.1, 4.2.3 und 4.2.5 gefolgert werden, dass dieselben isolierten invarianten Mengen auch für  $\varphi$  isoliert invariant sind. Mit Satz 4.2.4 kann man schließlich deren Conley-Indizes ausrechnen.

2. Auch wenn mehrere isolierte invariante Mengen identischen Conley-Index haben, kann man noch Aussagen treffen: Wir nehmen z.B. an, dass  $n$  gerade

ist, und dass genau zwei bezüglich  $\Phi$  isolierte invariante Mengen identischen Conley-Index haben. Wir bezeichnen diese mit  $S_1$  und  $S_2$ . Falls einer dieser Conley-Index keine  $n$ -te Wurzel besitzt (z.B. könnte der Conley-Index eine Matrix mit negativer Determinante enthalten), dann folgt nach Satz 4.2.4 und Satz 4.2.1, dass keine dieser Mengen bezüglich  $\varphi$  isoliert invariant ist. Es muss also  $\varphi(S_1) = S_2$  und  $\varphi(S_2) = S_1$  gelten. Ausserdem gilt dann nach Satz 4.2.4  $[h(S_1 \cup S_2, \varphi)]^n = h(S_1 \cup S_2, \Phi)$ .

Nun wollen wir die Methode etwas systematischer darstellen. Sei  $S$  eine bezüglich  $\Phi$  isolierte invariante Menge. Wir bezeichnen mit  $p$  die kleinste Zahl mit  $\varphi^p(S) = S$ , d.h.  $p := \min\{j \geq 1 : \varphi^j(S) = S\}$ . Die Zahl  $p$  muss ein Teiler von  $n$  sein. Da  $\varphi^p(S) = S$ , gilt für die erwartete isolierte invariante Menge bezüglich  $\varphi$ :

$$\bigcup_{l=0}^{n-1} \varphi^l(S) = \bigcup_{l=0}^{p-1} \varphi^l(S),$$

weil die Iteration von  $S$  bezüglich  $\varphi$ ,  $S, \varphi(S), \dots$ , sich nach dem  $p$ -ten Mal wiederholt. Alle  $p$  "Stücke"  $\varphi^l(S)$  haben denselben Conley-Index unter  $\Phi$ .

Wie oben nehmen wir an, dass wir über alle isolierten invarianten Mengen und ihre Conley-Indizes bezüglich  $\Phi$  verfügen. Es sei hier bemerkt, dass die Vereinigungen von isolierten invarianten Mengen wieder isoliert und invariant sind.

Wir wollen nun aus den isolierten invarianten Mengen bezüglich  $\Phi$  die isolierten invarianten Mengen von  $\varphi$  bestimmen. Dazu führen wir folgende Schritte durch:

Zuerst werden die isolierten invarianten Mengen sortiert, deren Conley-Index nur einmal vorkommt: das sind Mengen, die schon bezüglich  $\varphi$  isoliert invariant waren.

Dann durchläuft man jeden Teiler  $p$  von  $n$  in wachsende Reihenfolge. (Diese Operation ist um so effektiver, je weniger Teiler  $n$  hat. Also ist es ein Vorteil, wenn  $n$  eine Primzahl ist oder wenige Teiler besitzt). Wir prüfen dann, ob es mindestens  $p$  isolierte invariante Mengen gibt, die gleichen Conley-Index haben.

Wenn dies der Fall ist, besteht die Möglichkeit, dass sie von der Form  $\varphi^l(S)$  sind. Dafür gibt es notwendige Bedingungen, die wir gleich erläutern. Seien dazu  $S_0, \dots, S_{p-1}$  Mengen mit identischen Conley-Index. Wenn  $S_l = \varphi^l(S_0)$  (bis auf Umnummerierung), dann ist  $h(\bigcup_{l=0}^{p-1} S_l, \Phi)$  eine  $n$ -te Potenz. Der Index  $h(S_l, \Phi)$  ist identisch für alle  $l \in \{0, \dots, p-1\}$  und eine  $\frac{n}{p}$ -te Potenz.

Wenn eine dieser notwendigen Bedingungen verletzt ist, oder weniger als  $p$  Mengen mit identischem Conley-Index unter den Daten  $\Phi$  existieren, dann sind diese Mengen bereits bezüglich  $\varphi$  isoliert invariant.

Wenn beide notwendigen Bedingungen erfüllt sind, hat man gute Kandidaten für Mengen der Form  $\varphi^l(S)$ ,  $l \in \{0, \dots, p-1\}$ . Sicherheit besteht aber nicht!

Nachdem die isolierten, invarianten Mengen wie beschrieben sortiert wurden, kann man deren Conley–Indizes ausrechnen. Diese Aufgabe besteht im wesentlichen darin, Wurzeln von Matrizen zu berechnen.

### 4.3 Ketten prozessbedingt unterschiedlicher Reaktoren

Wir betrachten nun den Fall  $\Phi = \varphi_n \circ \dots \circ \varphi_1$  mit verschiedenen Abbildungen  $\varphi_i$ ,  $i = 1, \dots, n$ . Wir wollen mit Hilfe des folgenden Satzes aus [5] noch Informationen aus der globalen Input–Output–Relation über die einzelnen Reaktoren gewinnen, wenn diese nahezu identisch sind.

**Satz 4.3.1** *Sei  $f : \mathbb{R}^N \rightarrow \mathbb{R}^N$  eine stetige Abbildung. Für jede isolierte invariante Menge  $S$  gibt es ein  $\delta > 0$  mit der Eigenschaft, dass*

$$h(S, f) = h(S', g)$$

*für alle  $g$ , die  $\delta$ -nahe an  $f$  sind. Dabei bezeichnen wir mit  $S'$  die bezüglich  $g$  isolierte invariante Menge, die die gleiche isolierende Umgebung hat wie  $S$ .*

Für zwei Abbildungen, die genügend nahe beieinander sind, ändert sich der Conley–Index also nicht, obwohl die isolierten invarianten Mengen  $S$  und  $S'$  nicht übereinstimmen müssen! Es stellt sich nun folgende Frage: Wie nah müssen die  $\varphi_i$  beieinander sein, damit sich  $\Phi = \varphi_n \circ \dots \circ \varphi_1$  nur wenig von einer Abbildung  $\tilde{\Phi}$  unterscheidet, die eine  $n$ -te Potenz (das heißt von der Form  $\varphi_0^n$ ) ist.

**Satz 4.3.2** *Seien  $\varphi_i : \mathbb{R}^N \rightarrow \mathbb{R}^N$  stetige Abbildungen,  $i = 1, \dots, n$ ,  $\Phi = \varphi_n \circ \dots \circ \varphi_1$ , und  $S$  eine unter  $\Phi$  isolierte invariante Menge mit isolierender Umgebung  $\mathcal{N}$ .*

*Wenn alle  $\varphi_j$ ,  $j \in \{1, \dots, n\}$ , nahe genug beieinander sind, dann gibt es eine stetige Abbildung  $\varphi_0$ , die nahe an allen  $\varphi_j$  ist und es gelten folgende Aussagen:*

1.  $\mathcal{N}$  ist eine isolierende Umgebung bezüglich  $\tilde{\Phi} := (\varphi_0)^n$ ,
2.  $h(S, \Phi) = h(\tilde{S}, \tilde{\Phi})$ , wobei wir mit  $\tilde{S}$  die größte bezüglich  $g$  isolierte invariante Menge bezeichnen, die in  $\mathcal{N}$  enthalten ist.

Seien die  $\varphi_j$  also  $\varepsilon$ -nahe beieinander. Wir wollen nun Satz 4.3.1 auf  $\Phi$ ,  $\tilde{\Phi}$  und die isolierende Umgebung  $\mathcal{N}$  anwenden. Dies ist möglich, da  $\Phi$  und  $\tilde{\Phi}$   $\delta$ -nahe aneinander sind, wenn  $\varepsilon$  klein genug ist. Wir geben eine obere Schranke für  $\varepsilon$  an, wenn  $\varphi_0$  Lipschitz–stetig mit Konstante  $C$  ist. In diesem Fall kann man  $\varepsilon \leq \delta \frac{1-C}{2(1-C^n)}$  wählen, für  $C \neq 1$ .

**Korollar 4.3.3** *Seien  $\varphi_i$ ,  $i = 1, \dots, n$ ,  $\varepsilon > 0$ , wie im Satz 4.3.2 und  $\mathcal{N}$  eine feste, unter jedem  $\varphi_i$  isolierte und invariante Menge. Wir bezeichnen mit  $S_i$  die*

grösste bezüglich  $\varphi_i$  isolierte invariante Menge, die in  $\mathcal{N}$  enthalten ist. Dann gilt für alle  $i \in \{1, \dots, n\}$

$$(h(S_i, \varphi_i))^n = h(S', \Phi).$$

Dabei ist  $S'$  die größte bezüglich  $\Phi$  isolierte invariante Menge, die in einer bezüglich  $\tilde{\Phi}$  isolierenden Umgebung  $\mathcal{M}$  von  $S_0$  liegt.

Die Sätze aus diesem Paragraph erlauben uns, die Conley-Index Methode, wie sie im vorigen Paragraph beschrieben wurde, auch dann anzuwenden, wenn die Einzel-Reaktoren  $\varphi_i$  prozessbedingt nicht genau gleich sind. Sind nämlich die Einzel-Reaktoren leicht unterschiedlich, gilt trotzdem die Regel:

*Die  $n$ -te Wurzel des Conley-Indexes der Input-Output Reaktion ist der Conley-Index der einzelnen Reaktoren,*

falls eine gemeinsame isolierende Umgebung für alle Reaktoren  $\varphi_i$ ,  $i = 1, \dots, n$ , existiert.

Ausserdem warnen uns die Sätze 4.3.2 und 4.3.3 per Kontraposition, falls die Reaktoren zu "weit" auseinander geraten: Wenn nämlich die Input-Output Relation  $\Phi$  keine isolierte invariante Menge besitzt, deren Conley-Index eine  $n$ -te Potenz ist, bedeutet dies, dass die  $\varphi_i$  der einzelnen Reaktoren nicht mehr nahe genug beieinander sind.

## 5 Ein Beispiel

### 5.1 Einführung

Wir betrachten zwei identische seriell verschaltete Reaktoren, in denen jeweils folgende Reaktionen stattfinden:



Reaktion (15) ist die Hauptreaktion, bei der der gewünschte Stoff  $P$  produziert wird, (16) und (17) sind Nebenreaktionen, bei denen unerwünschte Nebenprodukte  $D_1$  und  $D_2$  entstehen. Alle auftretenden Reaktionen laufen in beide Richtungen ab.

Der Prozess beschreibt den reaktiven Teil für die Produktion eines Zwischenprodukts, das für die Herstellung von Polycarbonat verwendet wird. Es handelt sich hierbei um eine Technikumsanlage der Bayer AG, in der neue Verfahrensvarianten erprobt werden. Gerade hier leidet eine zielgerichtete Modellierung typischerweise unter fehlendem quantitativen Prozessverständnis, ist jedoch von ho-

her Bedeutung, um eine schnelle, gezielte Verfahrensentwicklung zu ermöglichen. Die folgende Analyse leistet dazu einen Beitrag.

Wir verwenden die folgende Notation:

- $X_0 \in \mathbb{R}^5$  sei der Input-Vektor, dessen Komponenten die Konzentrationen  $x_0^1$  von  $E_1$ ,  $x_0^2$  von  $E_2$ ,  $x_0^3$  von  $P$ ,  $x_0^4$  von  $D_1$ ,  $x_0^5$  von  $D_2$  sind. Kurz

$$X_0 = \begin{pmatrix} x_0^1 \\ x_0^2 \\ x_0^3 \\ x_0^4 \\ x_0^5 \end{pmatrix}$$

- $X_1$  sei der Vektor der Konzentrationen am Output des **ersten** Reaktors.
- $X_2$  sei der Vektor der Konzentrationen des Gesamtoutputs, das heißt des Outputs des zweiten Reaktors.
- Der obere Index bezeichnet wie oben die Konzentrationen der jeweiligen Komponenten:

$$X_1 = \begin{pmatrix} x_1^1 \\ x_1^2 \\ x_1^3 \\ x_1^4 \\ x_1^5 \end{pmatrix}, \quad X_2 = \begin{pmatrix} x_2^1 \\ x_2^2 \\ x_2^3 \\ x_2^4 \\ x_2^5 \end{pmatrix}$$

- $R_i$  bezeichnen die Reaktionsrate der  $i$ -ten Reaktion.

Dann erfüllen die Konzentrationen in jedem einzelnen Reaktor folgende Differentialgleichungen:

$$\dot{X}_1 = \lambda X_0 - \mathbf{R}(X_1) - \lambda X_1 \quad (18)$$

$$\dot{X}_2 = \lambda X_1 - \mathbf{R}(X_2) - \lambda X_2, \quad (19)$$

wobei  $\lambda$  positiv ist. Durch Umskalieren der Zeit können wir  $\lambda = 1$  annehmen.

Die Abbildung  $\mathbf{R} : \mathbb{R}^5 \rightarrow \mathbb{R}^5$  ist wie folgt aus den Reaktionsraten  $R_j$ ,  $j = 1, 2, \dots, 6$  zusammengesetzt. Sei  $\mathbf{S}$  die stöchiometrische  $5 \times 6$ -Matrix, deren Koeffizienten die stöchiometrische Koeffizienten der Gleichungen (15)–(17) sind. In dieser Matrix gibt etwa der  $j$ -te Eintrag in der ersten Zeile an, wieviele „Einheiten“ von  $E_1$  in der  $j$ -ten Reaktion verbraucht werden. Ist der Eintrag negativ, so wird der entsprechende Stoff verbraucht. Ist er positiv, so wird er produziert. Dabei bezeichnen  $j = 1, 2, 3$  die Hinreaktionen von (15)–(17) und  $j = 4, 5, 6$  die entsprechenden Rückreaktionen. In unserem Beispiel gilt

$$\mathbf{S} = \begin{pmatrix} -2 & -2 & -1 & 2 & 2 & 1 \\ -1 & 0 & -1 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -1 & 0 & -1 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (20)$$

Nun ist

$$\mathbf{R} = \mathbf{S} \begin{pmatrix} R_1 \\ R_2 \\ R_3 \\ R_4 \\ R_5 \\ R_6 \end{pmatrix}. \quad (21)$$

Zur genaueren Modellierung der Reaktionsraten  $R_1, \dots, R_6$  siehe Abschnitt 5.2. Ziel ist es, die Abbildung  $R$  zu identifizieren.

Wir betrachten das System (18) und (19) im stationären Zustand  $\dot{X}_1 = \dot{X}_2 = 0$ : die Konzentrationen ändern sich nicht mehr. Aus den Gleichungen (18) und (19) erhalten wir also mit der Skalierung  $\lambda = 1$

$$0 = X_0 - \mathbf{R}(X_1) - X_1 \quad (22)$$

$$0 = X_1 - \mathbf{R}(X_2) - X_2. \quad (23)$$

Im folgenden bezeichnen wir mit  $X_i$ ,  $i = 1, 2$ , die Gleichgewichte, die in den Gleichungen (22) und (23) auftreten, und nicht mehr die zeitabhängigen Konzentrationen in den Gleichungen (18) und (19). Die gesamte Input-Output Relation  $\Phi$  ist dann die Abbildung, die dem Input  $X_0$  den entsprechenden Output  $X_2$  zuordnet.

## 5.2 Stöchiometrische Unterräume

Die besondere Struktur unserer Gleichung (22) erlaubt uns eine weitere Beobachtung. Betrachten wir noch einmal die stöchiometrische Matrix  $\mathbf{S}$ :

$$\mathbf{S} = \begin{pmatrix} -2 & -2 & -1 & 2 & 2 & 1 \\ -1 & 0 & -1 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -1 & 0 & -1 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Wir stellen fest, dass  $\mathbf{S}$  zwei Links-Kernvektoren  $\ell_1 = (1, 1, 3, 2, 4)$  und  $\ell_2 = (1, -2, 0, 2, 1)$  besitzt. Multipliziert man  $\mathbf{S}$  von *links* mit diesen Vektoren, so erhält man den Nullvektor.

Aus (21) folgt dann

$$\ell_i \mathbf{R}(X) = 0$$

für alle  $X \in \mathbb{R}^5$  und  $i = 1, 2$ . Deswegen gilt

$$0 = \ell_i(X_0 - X_1) \quad \text{und} \quad 0 = \ell_i(X_1 - X_2) \quad (24)$$

für  $i = 1, 2$ , was unmittelbar aus (22) und (23) folgt. Also liegen die Vektoren  $X_0 - X_1$  und  $X_1 - X_2$  in einem dreidimensionalen Unterraum des  $\mathbb{R}^5$ . Diesen Unterraum, der durch die stöchiometrische Matrix  $\mathbf{S}$  bestimmt ist, nennen wir *stöchiometrischen Unterraum*. Das erlaubt eine Dimensionsreduktion.

### 5.3 Annahmen an die Abbildung $\mathbf{R}$

Wir wollen nun eine Methode zur Identifizierung von  $\mathbf{R}$  beschreiben, die eine Modellierung der Reaktionsraten benutzt. Wir können dann im Nachhinein testen, ob die Annahme unseres Modells korrekt war (also insbesondere die Annahme an die spezielle Form der  $R_i$ ).

Der Einfachheit halber werden wir im folgenden unsere Reaktionen (15),(16) und (17) *ohne* Rückreaktion betrachten. Die nachstehenden Resultate behalten aber auch im Fall mit Rückreaktion ihre Gültigkeit. Die stöchiometrische Matrix  $\mathbf{S}$  reduziert sich damit auf ihre ersten drei Spalten

$$\mathbf{S} = \begin{pmatrix} -2 & -2 & -1 \\ -1 & 0 & -1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -1 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Wir betrachten weiterhin die Gleichungen

$$\begin{aligned} 0 &= X_0 - R(X_1) - X_1 \\ 0 &= X_1 - R(X_2) - X_2, \end{aligned} \quad (25)$$

und es ist

$$\mathbf{R} = \mathbf{S} \begin{pmatrix} R_1 \\ R_2 \\ R_3 \end{pmatrix}. \quad (26)$$

Die Reaktionsraten  $R_1, R_2, R_3$  hängen von verschiedenen Parametern wie Temperatur und Konzentrationen  $X_{Kat}$  der Katalysatoren ab. Laut Modellierung können wir folgende Abhängigkeit annehmen:

$$\begin{aligned} R_1(x_i^1, x_i^2) &= K_1(T, X_{Kat})r_1(x_i^1, x_i^2) \\ R_2(x_i^1) &= K_2(T, X_{Kat})r_2(x_i^1) \\ R_3(x_i^1, x_i^2, x_i^4) &= K_3(T, X_{Kat})r_3(x_i^1, x_i^2, x_i^4) \end{aligned}$$

Wir nehmen an, dass die Parameter  $T, X_{Kat}$  zeitlich konstant und in beiden Reaktoren identisch sind. Die  $K_j, j = 1, 2, 3$ , sind die zu bestimmenden konstanten Koeffizienten.

Sei  $\rho(X_i) := \begin{pmatrix} r_1(x_i^1, x_i^2) \\ r_2(x_i^1) \\ r_3(x_i^1, x_i^2, x_i^4) \end{pmatrix}$ . Dann erhalten wir aus (22) und (23)

$$0 = X_0 - \mathbf{S} \begin{pmatrix} K_1 & 0 & 0 \\ 0 & K_2 & 0 \\ 0 & 0 & K_3 \end{pmatrix} \rho(X_1) - X_1 \quad (27)$$

$$0 = X_1 - \mathbf{S} \begin{pmatrix} K_1 & 0 & 0 \\ 0 & K_2 & 0 \\ 0 & 0 & K_3 \end{pmatrix} \rho(X_2) - X_2 \quad (28)$$

Die Matrix

$$\begin{pmatrix} K_1 & 0 & 0 \\ 0 & K_2 & 0 \\ 0 & 0 & K_3 \end{pmatrix}$$

bezeichnen wir von nun an mit  $\mathbf{K}$ . Wir wollen im weiteren Verlauf für  $\rho = \begin{pmatrix} r_1 \\ r_2 \\ r_3 \end{pmatrix}$  folgende Form annehmen:

$$\begin{aligned} r_1(x_i^1, x_i^2) &= (x_i^1)^2 x_i^2 \\ r_2(x_i^1) &= (x_i^1)^2 \\ r_3(x_i^1, x_i^2, x_i^4) &= x_i^1 x_i^2 x_i^4 \end{aligned} \quad (29)$$

## 6 Identifikation und Eindeutigkeit von $K_1, K_2$ und $K_3$

In diesem Abschnitt betrachten wir das System (25), also

$$\begin{aligned} 0 &= X_0 - \mathbf{R}(X_1, T, X_{Kat}) - X_1 \\ 0 &= X_1 - \mathbf{R}(X_2, T, X_{Kat}) - X_2, \end{aligned}$$

wobei wir im folgenden die Abhängigkeit von den Parametern  $T$  und  $X_{Kat}$  unterdrücken werden. Das Massenwirkungsgesetz liefert folgende Form der Reduktionsrate  $\mathbf{R}$ :

$$\mathbf{R}(x^1, \dots, x^5) = \mathbf{S} \begin{pmatrix} K_1 (x^1)^2 x^2 \\ K_2 (x^1)^2 \\ K_3 x^1 x^2 x^4 \end{pmatrix}. \quad (30)$$

Dabei sei die  $5 \times 3$ -Matrix  $\mathbf{S}$  wie oben gegeben. Ziel wird es sein, die unbekanntenen Konstanten  $K_1, K_2$  und  $K_3$  zu bestimmen. Wir gehen davon aus, dass die Datenbasis, auf der wir die globale Input-Output-Funktion  $X_2 = X_2(X_0)$  kennen, dreidimensional ist.

Wie wir an der speziellen Form von  $\mathbf{R}$  sehen, hängt  $\mathbf{R}$  nicht von  $x^3$  und  $x^5$  ab. Deswegen liegt es nahe, zu neuen Koordinaten überzugehen. Wir schreiben von nun an  $x = (\xi, \eta)$  für jedes Element  $x \in \mathbb{R}^5$  mit  $\xi = (x^1, x^2, x^4) \in \mathbb{R}^3$  und  $\eta = (x^3, x^5) \in \mathbb{R}^2$ . Weiterhin nehmen wir an, dass die dreidimensionale Datenbasis  $\mathcal{D}$  im Input-Raum über  $\xi_{in} \in \mathbb{R}^3$  parametrisiert ist. In der Datenbasis  $\mathcal{D}$  ist also stets  $\eta_{in} = (x^3, x^5)$  eine Funktion von  $\xi_{in} = (x^1, x^2, x^4)$ . Im weiteren Verlauf werden wir meistens die Komponenten  $x^3, x^5$  von Elementen der Datenbasis unterdrücken.

In diesen Koordinaten können wir nun leicht zeigen, dass eine  $2 \times 3$  Matrix  $\mathbf{Q}$  existiert, so dass sich  $\mathbf{R}$  schreiben lässt als

$$\mathbf{R}(x^1, \dots, x^5) = (\rho(x^1, x^2, x^4), Q\rho(x^1, x^2, x^4)).$$

Hierbei ist  $\rho$  gegeben durch

$$\rho(x^1, x^2, x^3) = S_{1,2,4} \begin{pmatrix} K_1(x^1)^2 x^2 \\ K_2(x^1)^2 \\ K_3 x^1 x^2 x^4 \end{pmatrix}$$

und die  $3 \times 3$  Matrix  $S_{1,2,4}$  besteht aus den Zeilen 1, 2 und 4 von  $\mathbf{S}$ , also

$$S_{1,2,4} = \begin{pmatrix} -2 & -2 & -1 \\ -1 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & -1 \end{pmatrix}.$$

Mittels dieser Koordinaten lässt sich (25) reduzieren auf:

$$\begin{aligned} 0 &= \xi_{in} - \rho(\xi_1) - \xi_1 \\ 0 &= \xi_1 - \rho(\xi_2) - \xi_2, \end{aligned} \tag{31}$$

wobei wir  $X_i = (\xi_i, \eta_i)$  für  $i \in \{1, 2\}$  gesetzt haben. Da die  $\eta$ -Gleichungen keine zusätzlichen Informationen liefern, werden wir sie im weiteren nicht mehr betrachten. Da  $\xi_1 = \xi_1(\xi_{in})$  a priori unbekannt ist (man beachte  $X_1 \circ X_1 = X_2$ , und  $X_2$  ist die globale Input-Output-Funktion), empfiehlt es sich,  $\xi_1$  aus (31) zu eliminieren:

$$0 = \xi_{in} - \rho(\rho(\xi_2) + \xi_2) - \rho(\xi_2) - \xi_2. \tag{32}$$

Wir wollen nun noch explizit festhalten, dass (32) von den gesuchten Konstanten  $K_1, K_2$  und  $K_3$  abhängt und schreiben deshalb  $\rho$  in der Form  $\rho(\xi) = S_{1,2,4} \mathbf{K} \cdot f(\xi)$ . Hier bezeichnet  $\mathbf{K}$  die Diagonalmatrix mit Diagonaleinträgen  $K_1, K_2$  und  $K_3$  und

$$f(x^1, x^2, x^3) = \begin{pmatrix} (x^1)^2 x^2 \\ (x^1)^2 \\ x^1 x^2 x^4 \end{pmatrix}.$$

Dann lässt sich (32) wie folgt schreiben:

$$0 = \xi_{in} - S_{1,2,4} \mathbf{K} f(S_{1,2,4} \mathbf{K} f(\xi_2) + \xi_2) - S_{1,2,4} \mathbf{K} f(\xi_2) - \xi_2. \tag{33}$$

Diese Gleichung lässt sich als Bestimmungsgleichung für  $K_1, K_2$  und  $K_3$  verwenden. Ein kurzer Blick auf (33) zeigt, dass diese Gleichung nichtlinear in  $(K_1, K_2, K_3)$  ist. Allerdings ist (33) affin linear in  $\vec{K} = (K_1, K_2, K_3, K_1^2 K_2, \dots, K_1^4)$ , wenn  $\vec{K}$  alle Terme  $K_1^{i_1} K_2^{i_2} K_3^{i_3}$  mit  $i_1 + i_2 + i_3 \leq 4$  enthält, die in (33) auftauchen! Zum Beispiel treten die unbekanntenen Konstanten  $K_1, K_2$  und  $K_3$  selbst in der Gleichung auf, wegen des letzten Terms  $S_{1,2,4} \mathbf{K}f(\xi_2) - \xi_2$ , der nicht im Argument von  $f$  steht. Gleichung (33) hat also die Form

$$0 = \xi_{in} + A(\xi_2(\xi_{in}), \vec{K}) - \xi_2(\xi_{in}) \quad (34)$$

und die bekannte Abbildung  $A$  ist linear in  $\vec{K}$ . Diese wichtige Erkenntnis ist der Schlüssel für die Existenz und Eindeutigkeit von  $K_1, K_2, K_3$ .

Die Existenz eines Vektors  $\vec{K}_*$ , der (34) für alle  $\xi_{in}$  aus der Datenbasis löst, ist bereits vom Reaktor selbst gegeben, falls das Modell korrekt ist. Damit sind ebenfalls die Konstanten  $K_1, K_2$  und  $K_3$  gegeben, falls wir davon ausgehen, dass unser Modell korrekt ist und  $R$  bzw.  $\rho$  wirklich in der obigen Form geschrieben werden können.

Sei nun  $\vec{K}_*$  gegeben, so dass (34) für alle zulässigen  $\xi_{in}$  gelöst ist. Wir können dann zunächst die gesuchten Konstanten  $K_1, K_2$  und  $K_3$  direkt ablesen, da ja  $\vec{K}_*$  die Form  $\vec{K}_* = (K_1, K_2, K_3, K_1^2 K_2, \dots, K_1^4)$  haben sollte. Danach können wir überprüfen, ob die Einträge von  $\vec{K}_*$  wirklich die Form  $K_1^{i_1} K_2^{i_2} K_3^{i_3}$  mit  $i_1 + i_2 + i_3 \leq 4$  haben, was zusätzliche Tests der Korrektheit der Modellierung erlaubt.

Wir kümmern uns nun um die Eindeutigkeit von  $\vec{K}_*$ . Dieser Abschnitt ist in ANLAGE1 bearbeitet. Wir ziehen dort eine ähnliche, aber leichter zu implementierende, Bestimmungsgleichung für den Vektor  $\vec{K}_*$  heran, die ebenfalls die Form (34) hat und in der die Konstanten  $K_1, K_2$  und  $K_3$  ebenfalls explizit auftreten.

Wir zeigen in ANLAGE 1, dass der einzige Vektor  $\vec{K}_*$ , der im Kern aller linearen Abbildungen  $A(\xi_2, \cdot)$ , mit  $\xi_2$  aus der Datenbasis, liegt, der Nullvektor ist. Dies zeigt dann die Eindeutigkeit der Lösung  $\vec{K}_*$ .

## 6.1 Bestimmung von $\vec{K}_*$ unter Störung der Datenbasis

Da wir Output-Daten nie wirklich exakt messen können, haben wir in ANLAGE2 zunächst Konstanten  $K_1, K_2$  und  $K_3$  vorgegeben ( $K_1 = 2$ ,  $K_2 = 4$  und  $K_3 = 3$ ), mit diesen eine Datenbasis konstruiert und die Daten dann ein wenig gestört (so dass der relative Fehler pro Eintrag ca. 0,1 Prozent beträgt). Mit Hilfe dieser gestörten Datenbasis wurde dann der Vektor  $\vec{K}_{*gest}$  bestimmt.

Unserer Verfahren hat  $\vec{K}_{*1,gest} = 1.8972951$ ,  $\vec{K}_{*2,gest} = 4.0011931$ ,  $\vec{K}_{*3,gest} = 2.9199949$  geliefert, was einen relativen Fehler von 2.4 Prozent bedeutet. Ausserdem wurde der Modellfehler auf etwa 1 Prozent abgeschätzt.

Es sei noch bemerkt, dass die Berechnungen auch mit anfänglich anderen  $K_1, K_2$  und  $K_3$  durchgeführt werden können.

## 6.2 Eindeutigkeit der Lösung ohne Strukturannahmen

Wir untersuchen, ob die Eindeutigkeit der Funktion  $R$  in

$$\begin{aligned} 0 &= X_0 - R(X_1) - X_1 \\ 0 &= X_1 - R(X_2) - X_2. \end{aligned} \tag{35}$$

auch ohne spezielle Strukturvoraussetzungen, wie zum Beispiel (29), garantiert werden kann. Zumindest unter gewissen Annahmen an die Linearisierung  $DR(0)$  im Fixpunkt  $R(0) = 0$  ist das möglich.

Das Problem lautet also: Ist es möglich, die Funktion  $R(X) = R(X, T, X_{Kat})$  eindeutig aus den Daten  $\{X_0, X_2(X_0)\}$  zu identifizieren?

Wir drücken dies noch einmal anders aus. Wir wissen, dass Funktionen  $\mathbf{R}$  und  $X_i$  mit  $i = 1, 2$ , existieren, so dass (35) gilt und  $X_1 \circ X_1 = X_2$ . Dabei sind  $X_1$  und  $X_2$  beide als Funktionen von  $X_0$  aufzufassen. Die Funktionen  $\mathbf{R}$  und  $X_1$  sind aber zunächst unbekannt. Die einzigen Daten, die wir messen können, beziehen sich auf den Input  $X_0$  und den Gesamt-Output  $X_2 = X_2(X_0)$ . Wir interessieren uns also für folgende Frage: Ist das Tupel  $(R, X_1)$ , das (35) löst und  $X_1 \circ X_1 = X_2$  erfüllt, unter bestimmten Annahmen eindeutig?

Wir betrachten nun  $X_1, X_2$  und  $\mathbf{R}$  die (35) erfüllen, mit  $X_0 \in \mathbb{R}^5$ . Wir nehmen weiterhin an, dass  $X_1(0) = 0$  und  $D\mathbf{R}(0)$  eine Diagonalmatrix ist. Erfüllen nun  $X_1, X_2$  und  $\mathbf{R}$  die Gleichungen (35), so gilt automatisch  $X_1 \circ X_1 = X_2$ , wie man leicht sehen kann und wir können folgende Beziehung zwischen  $X_1$  und  $\mathbf{R}$  aus (35) herleiten: Aus der ersten Gleichung von (35) ergibt sich direkt

$$X_0 = ((R + id) \circ X_1)(X_0).$$

Wir wenden  $(R + id)^{-1}$  auf beide Seiten an und erhalten dadurch:

$$(R + id)^{-1}(X_0) = X_1(X_0). \tag{36}$$

Wir sehen also, dass zwischen den Funktionen  $X_1$  und  $R$  eine enge Verbindung besteht.

Ist nun die Lösung  $X_1$  von  $X_1 \circ X_1 = X_2$  nahe Null *eindeutig*, so ist  $R$  eindeutig durch (36) gegeben. In diesem Fall gibt es also ein eindeutiges Paar  $(X_1, R)$ , für das (35) gilt.

Aus den Überlegungen von Kapitel 2, und insbesondere Satz (2.2.3), erhalten wir folgendes Resultat.

**Satz 6.2.1** *Erfülle  $DX_2(0)$  eine gewisse Nichtresonanzbedingung. Dann existiert nahe Null ein eindeutiges Paar  $(X_1, R)$ , das (35) löst. Dabei ist  $X_1$  nahe Null durch  $X_1 \circ X_1 = X_2$  definiert und  $R$  hängt mit  $X_1$  durch (36) zusammen.*

An der Identität (36) sehen wir auch, dass der Fall  $DR(0) = 0$  zu Problemen führt: Aus  $DR(0) = 0$  ergibt sich nämlich  $DX_1(0) = id$  und damit auch

$(DX_1(0))^2 = DX_2(0) = id$ . Die Nichtresonanzbedingung ist dann verletzt, und offensichtlich ist es nicht möglich, eine eindeutige „n-te Wurzel“ aus  $X_2$  zu ziehen.

Mit Blick auf die Modellierung durch das Massenwirkungsgesetz in Abschnitt 6.1, stellen wir leider fest, daß dort  $DR(0) = 0$ . Satz 6.2.1) ist dennoch von Relevanz für praxisnahe Probleme, beispielsweise wenn Diffusionsprozesse die spezielle Struktur  $DR(0) = 0$  aufheben.

## 7 Zusammenfassung

Im Zuwendungszeitraum wurden folgende Resultate für die Identifikation des Einzelreaktors  $\varphi$  aus der Verkettung  $\Phi = \varphi^n$  erzielt. Für die Bezeichnung der einzelnen Arbeitspakete wird auf den Balkenplan in Abbildung 3 verwiesen:

- Lokale Identifikation von  $\varphi$  aus der Input–Output–Relation  $\Phi$  mit Hilfe des Satzes von Grobman–Hartman (Arbeitspakete 1, 2 und 5)
- Nicht-Eindeutigkeit von Lösungen  $\varphi$  bei globalen Input–Output–Relationen  $\Phi$  mit Fixpunkten vom Satteltyp (Arbeitspakete 2 und 5)
- Kriterien für Identifizierbarkeit von  $\varphi$  bei globalen Input–Output–Funktionen  $\Phi$  mit homoklinen Punkten (Arbeitspakete 2 und 5)
- Glattheit der Lösung  $\varphi$  bei Störung der Input–Output–Relation  $\Phi$  (Arbeitspakete 3, 6 und 7)
- Konstruktion isolierter invarianter Mengen von  $\varphi$  mittels Conley–Index–Techniken (Arbeitspakete 4, 5 und 7)
- Conley–Index Methode zur Formulierung von topologischen Lösbarkeitskriterien (Arbeitspakete 3 und 6)
- Robustheit isolierter invarianter Mengen bei prozessbedingt leicht verschiedenen Einzelreaktoren (Arbeitspaket 8)
- Exemplarische Behandlung eines praxisbezogenen Beispiels des Kooperationspartners
- Berechnung der zugehörigen Input–Output–Relation  $\Phi$  und der Lösung  $\varphi$  mit MATHEMATICA

Verbundprojekt:  
 Identifikation hybrider, verfahrenstechnischer Prozessmodelle –  
 Identifizierung verketteter Reaktoren  
 mit Methoden der nichtlinearen Dynamik

# Balkenplan

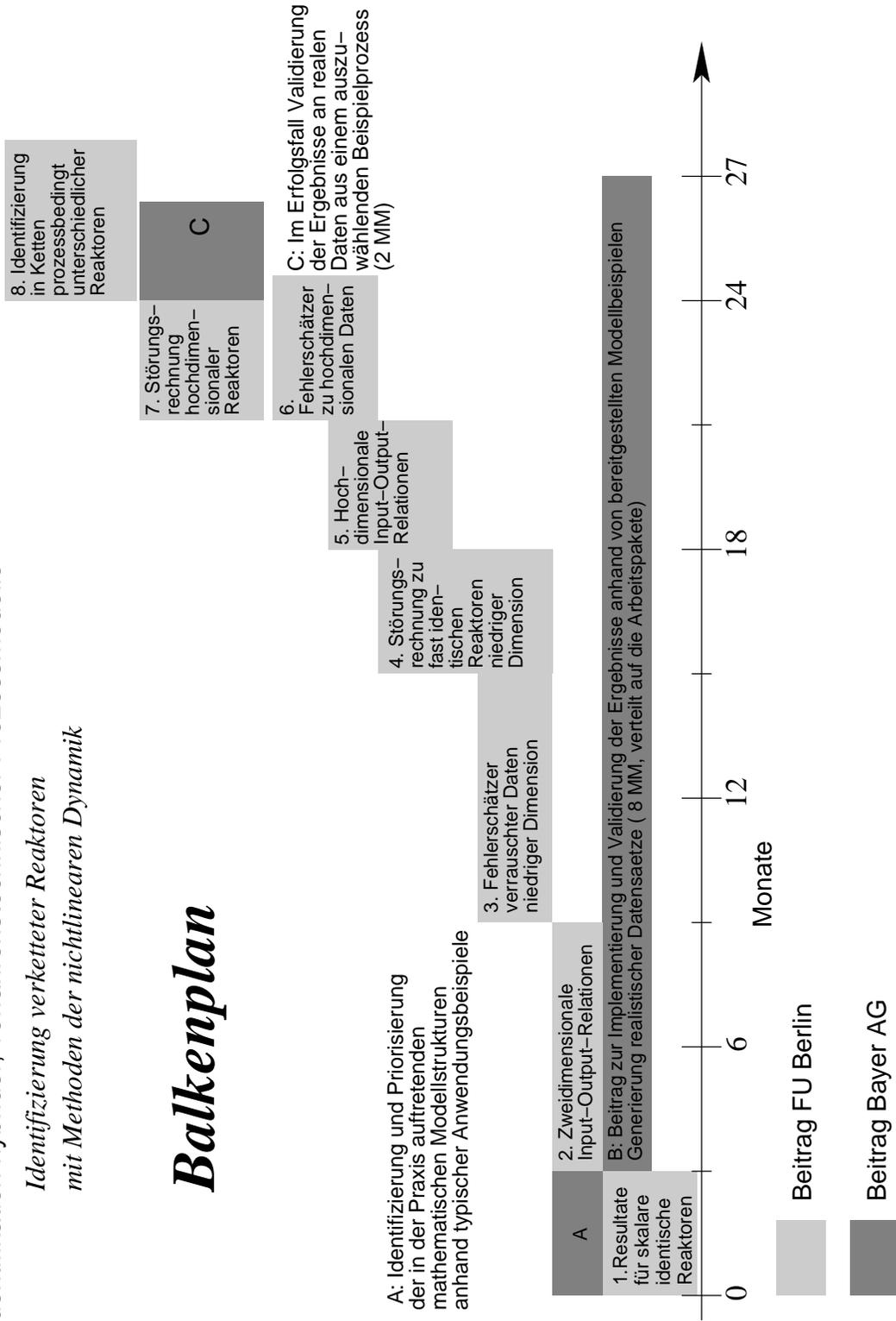


Abbildung 3: Balkenplan zum Projektablauf

## Literatur

- [1] G. Belitskii, *Equivalence of normal forms of germs of smooth mappings*, Russian Math. Surveys 33:1 (1978), 107–177
- [2] W.J. Beyn, *Numerical Taylor expansions of invariants manifolds in large dynamical systems*, Numer. Matn. **80** (1998), 1–38.
- [3] J. Blanca, *Der Conley–Index und das  $n$ -te Wurzelproblem*, Diplomarbeit, Freie Universität Berlin (2004).
- [4] B. Fiedler and V. Gelfreich, *Roots of a diffeomorphism and an identification problem for a chain of chemical reactors*, In preparation (2004).
- [5] J. Franks and D. Richeson, *Shift Equivalence and the Conley Index*, Trans. Americ. Math. Soc. **352** (2000) 3305–3322.
- [6] J. Härterich, *Homokline Punkte und Wurzeln von Diffeomorphismen*, Technical Report, Freie Universität Berlin (2004)
- [7] D. M. Grobman, *Homeomorphisms of systems of differential equations*, Dokl. Akad. Nauk SSSR **128** (1959), 880–881.
- [8] P. Hartman, *On local homeomorphisms of Euclidean spaces*, Bol. Soc. Mat. Mex. II. Ser. **5** (1960), 220–241.
- [9] M. Mrozek, *An algorithmic approach to the Conley Index theory*, J. Dyn. Differ. Equations **11** (1999) 711–734.
- [10] J. Palis, *On Morse–Smale dynamical systems*, Topology **8** (1969), 385–405.
- [11] J. Palis and W. de Melo, *Geometric Theory of Dynamical Systems*, Springer-Verlag, New York Springer (1982).
- [12] J. Palis and F. Takens, *Hyperbolicity and Sensitive Chaotic Dynamics at Homoclinic Bifurcations. Fractal Dimensions and Infinitely many Attractors*, Cambridge Studies in Adv. Math. **35** (1993).
- [13] V. Rom-Kedar, *Homoclinic tangles – classification and applications*, Nonlinearity **7** (1994), 441–473.
- [14] S. Sternberg, *On the structure of local homeomorphisms of Euclidean  $n$ -Space, II*, Am. J. Math. **80** (1958), 623–631.
- [15] A. Szymczak, *A combinatorial procedure for finding isolating neighborhoods and index pairs*, Proc. Royal Soc. Edinb. **A 127** (1997), 1075–1088.

## ANLAGE 1

In dieser Anlage zeigen wir, dass die zu bestimmenden Konstanten  $K_1$ ,  $K_2$  und  $K_3$ , die die Reaktionskinetik bestimmen, eindeutig sind. Wir betrachten hierzu Gleichung (33).

Wir zeigen, dass nur der Nullvektor das Gleichungssystem

$$A(\xi, (K_1, K_2, K_3, K_1^2, \dots, K_1^4)) = 0$$

für alle  $\xi$  löst.

Dies wird dann die Eindeutigkeit der Konstanten  $K_1^*$ ,  $K_2^*$  und  $K_3^*$ , die unser Problem lösen, zeigen.

Die stöchiometrische Matrix  $S$  ist durch

$$S := ((-2, -2, -1), (-1, 0, -1), (0, 1, -1))$$

gegeben. Die Funktion  $\rho$ , die in Abschnitt 6 definiert ist, ist

$$\rho[(x_-, y_-, z_-), K_1, K_2, K_3] := S \cdot (K_1 x_-^2 y_-, K_2 x_-^2, K_3 x_- y_- z_-) + (x_-, y_-, z_-)$$

Also ist die zweifache Hintereinanderausführung dieser Funktion gegeben durch:

$$\rho\rho[(x_-, y_-, z_-), K_1, K_2, K_3] := \rho[\rho[(x_-, y_-, z_-), K_1, K_2, K_3], K_1, K_2, K_3];$$

Wir haben also folgende explizite Darstellung von  $\rho\rho$  :

$$\begin{aligned} \rho\rho[(x, y, z), K_1, K_2, K_3] = & (x-4, K_2, x^2+8, K_2^2, x^3-8, K_2^3, x^4-4, K_1, x^2, y+16, K_1, K_2, x^3, y-K_2, K_3, x^3, y+ \\ & 2, K_1^2, x^4, y-24, K_1, K_2^2, x^4, y+2, K_2^2, K_3, x^4, y-8, K_1^2, K_2, x^5, y+K_1, K_2, K_3, x^5, y+ \\ & 8, K_1^2, K_2^2, x^6, y-2, K_1, K_2^2, K_3, x^6, y+8, K_1^2, x^3, y^2-24, K_1^2, K_2, x^4, y^2+2, K_1, K_2, K_3, x^4, y^2- \\ & 8, K_1^3, x^5, y^2+16, K_1^3, K_2, x^6, y^2-2, K_1^2, K_2, K_3, x^6, y^2-8, K_1^3, x^4, y^3+8, K_1^4, x^6, y^3- \\ & 2, K_3, x, y, z+6, K_2, K_3, x^2, y, z+3, K_1, K_3, x^3, y, z-8, K_2^2, K_3, x^3, y, z-10, K_1, K_2, K_3, x^4, y, z+ \\ & K_2, K_3^2, x^4, y, z+8, K_1, K_2^2, K_3, x^5, y, z-2, K_2^2, K_3^2, x^5, y, z+6, K_1, K_3, x^2, y^2, z+ \\ & K_3^2, x^2, y^2, z-16, K_1, K_2, K_3, x^3, y^2, z-K_2, K_3^2, x^3, y^2, z-14, K_1^2, K_3, x^4, y^2, z- \\ & K_1, K_3^2, x^4, y^2, z+24, K_1^2, K_2, K_3, x^5, y^2, z-K_1, K_2, K_3^2, x^5, y^2, z-8, K_1^2, K_3, x^3, y^3, z- \\ & 2, K_1, K_3^2, x^3, y^3, z+16, K_1^3, K_3, x^5, y^3, z+2, K_1^2, K_3^2, x^5, y^3, z+K_3^2, x^2, y, z^2- \\ & 2, K_2, K_3^2, x^3, y, z^2+K_3^2, x, y^2, z^2-2, K_2, K_3^2, x^2, y^2, z^2-7, K_1, K_3^2, x^3, y^2, z^2- \\ & K_3^3, x^3, y^2, z^2+8, K_1, K_2, K_3^2, x^4, y^2, z^2+K_2, K_3^3, x^4, y^2, z^2-2, K_1, K_3^2, x^2, y^3, z^2- \\ & K_3^3, x^2, y^3, z^2+10, K_1^2, K_3^2, x^4, y^3, z^2+3, K_1, K_3^3, x^4, y^3, z^2-K_3^3, x^2, y^2, z^3+ \\ & 2, K_1, K_3^3, x^3, y^3, z^3+K_3^4, x^3, y^3, z^3, y-2, K_1, x^2, y+4, K_1, K_2, x^3, y-K_2, K_3, x^3, y+ \\ & K_1^2, x^4, y-4, K_1, K_2^2, x^4, y+2, K_2^2, K_3, x^4, y-4, K_1^2, K_2, x^5, y+K_1, K_2, K_3, x^5, y+ \\ & 4, K_1^2, K_2^2, x^6, y-2, K_1, K_2^2, K_3, x^6, y+4, K_1^2, x^3, y^2-8, K_1^2, K_2, x^4, y^2+2, K_1, K_2, K_3, x^4, y^2- \\ & 4, K_1^3, x^5, y^2+8, K_1^3, K_2, x^6, y^2-2, K_1^2, K_2, K_3, x^6, y^2-4, K_1^3, x^4, y^3+4, K_1^4, x^6, y^3- \\ & 2, K_3, x, y, z+2, K_2, K_3, x^2, y, z+2, K_1, K_3, x^3, y, z-6, K_1, K_2, K_3, x^4, y, z+K_2, K_3^2, x^4, y, z+ \\ & 4, K_1, K_2^2, K_3, x^5, y, z-2, K_2^2, K_3^2, x^5, y, z+4, K_1, K_3, x^2, y^2, z+K_3^2, x^2, y^2, z- \\ & 4, K_1, K_2, K_3, x^3, y^2, z-K_2, K_3^2, x^3, y^2, z-8, K_1^2, K_3, x^4, y^2, z-K_1, K_3^2, x^4, y^2, z+ \\ & 12, K_1^2, K_2, K_3, x^5, y^2, z-K_1, K_2, K_3^2, x^5, y^2, z-4, K_1^2, K_3, x^3, y^3, z-2, K_1, K_3^2, x^3, y^3, z+ \\ & 8, K_1^3, K_3, x^5, y^3, z+2, K_1^2, K_3^2, x^5, y^3, z+K_3^2, x^2, y, z^2-2, K_2, K_3^2, x^3, y, z^2+ \\ & K_3^2, x, y^2, z^2-5, K_1, K_3^2, x^3, y^2, z^2-K_3^3, x^3, y^2, z^2+4, K_1, K_2, K_3^2, x^4, y^2, z^2+ \\ & K_2, K_3^3, x^4, y^2, z^2-K_1, K_3^2, x^2, y^3, z^2-K_3^3, x^2, y^3, z^2+5, K_1^2, K_3^2, x^4, y^3, z^2+ \\ & 3, K_1, K_3^3, x^4, y^3, z^2-K_3^3, x^2, y^2, z^3+K_1, K_3^3, x^3, y^3, z^3+K_3^4, x^3, y^3, z^3, 2, K_2, x^2- \\ & 4, K_2^2, x^3+4, K_2^3, x^4-4, K_1, K_2, x^3, y-K_2, K_3, x^3, y+8, K_1, K_2^2, x^4, y+2, K_2^2, K_3, x^4, y+ \\ & K_1, K_2, K_3, x^5, y-2, K_1, K_2^2, K_3, x^6, y+4, K_1^2, K_2, x^4, y^2+2, K_1, K_2, K_3, x^4, y^2- \\ & 2, K_1^2, K_2, K_3, x^6, y^2+z-2, K_3, x, y, z+K_1, K_3, x^3, y, z+4, K_2^2, K_3, x^3, y, z- \\ & 2, K_1, K_2, K_3, x^4, y, z+K_2, K_3^2, x^4, y, z-2, K_2^2, K_3^2, x^5, y, z+2, K_1, K_3, x^2, y^2, z+ \\ & K_3^2, x^2, y^2, z+4, K_1, K_2, K_3, x^3, y^2, z-K_2, K_3^2, x^3, y^2, z-2, K_1^2, K_3, x^4, y^2, z- \end{aligned}$$

$K1, K3^2, x^4, y^2, z - K1, K2, K3^2, x^5, y^2, z - 2, K1, K3^2, x^3, y^3, z + 2, K1^2, K3^2, x^5, y^3, z +$   
 $K3^2, x^2, y, z^2 - 2, K2, K3^2, x^3, y, z^2 + K3^2, x, y^2, z^2 + K2, K3^2, x^2, y^2, z^2 - 3, K1, K3^2, x^3, y^2, z^2 -$   
 $K3^3, x^3, y^2, z^2 + K2, K3^3, x^4, y^2, z^2 - K3^3, x^2, y^3, z^2 + 3, K1, K3^3, x^4, y^3, z^2 - K3^3, x^2, y^2, z^3 +$   
 $K3^4, x^3, y^3, z^3)$

Dieser Ausdruck hat die Form  $A(\xi, (K1, K2, K3, K1^2, \dots, K1^4)) + \xi$  mit  $\xi = (x, y, z)$  und  $A(\xi, (K1, K2, K3, K1^2, \dots, K1^4))$  ist linear in  $(K1, K2, K3, K1^2, \dots, K1^4)$ . Wir können also  $A(\xi, (K1, K2, K3, K1^2, \dots, K1^4))$  auch in der Form

$$A(\xi)(K1, K2, K3, K1^2, \dots, K1^4)$$

schreiben, wobei nicht alle Monome  $K1^i K2^j K3^k$  in dem obigen Ausdruck vorkommen. Den Vektor der auftretenden Monome in  $K1, K2$  und  $K3$  kann man Anlage 2 entnehmen (dieser heisst dort "Konstantenvektor").

Wir werden nun die Matrix  $A(\xi)$  explizit angeben, die als Funktion von  $(K1, K2, K3, K1^2, \dots, K1^4)$  zu verstehen ist und als solche durch

$$(K1, K2, K3, K1^2, \dots, K1^4) \rightarrow A(\xi)(K1, K2, K3, K1^2, \dots, K1^4)$$

definiert ist. Um dies zu tun, bildet man zeilenweise eine Koeffizientenliste von den Monomen in  $x, y, z$ , die vor den Monomen  $K1^i K2^j K3^k$  stehen. Die Koeffizientenliste der  $i$ -ten Zeile, für  $i = 1, 2, 3$ , ergibt dann die  $i$ -te Zeile der Matrix  $A(\xi)$ . Somit erhalten wir für  $B := A(\xi)$  explizit:

$$\begin{aligned} &((x, -2xyz, x^2y^2z + x^2yz^2 + xy^2z^2, -(x^3y^2z^2) - x^2y^3z^2 - x^2y^2z^3, x^3y^3z^3, -4x^2, -(x^3y) + \\ &6x^2yz, x^4yz - x^3y^2z - 2x^3yz^2 - 2x^2y^2z^2, x^4y^2z^2, 8x^3, 2x^4y - 8x^3yz, -2x^5yz, -8x^4, 0, -4x^2y, 3x^3yz + \\ &6x^2y^2z, -(x^4y^2z) - 2x^3y^3z - 7x^3y^2z^2 - 2x^2y^3z^2, 3x^4y^3z^2 + 2x^3y^3z^3, 16x^3y, x^5y + \\ &2x^4y^2 - 10x^4yz - 16x^3y^2z, -(x^5y^2z) + 8x^4y^2z^2, -24x^4y, -2x^6y + 8x^5yz, 2x^4y + \\ &8x^3y^2, -14x^4y^2z - 8x^3y^3z, 2x^5y^3z + 10x^4y^3z^2, -8x^5y - 24x^4y^2, -2x^6y^2 + 24x^5y^2z, 8x^6y, -8x^5y^2 - \\ &8x^4y^3, 16x^5y^3z, 16x^6y^2, 8x^6y^3), (y, -2xyz, x^2y^2z + x^2yz^2 + xy^2z^2, -(x^3y^2z^2) - x^2y^3z^2 - \\ &x^2y^2z^3, x^3y^3z^3, 0, -(x^3y) + 2x^2yz, x^4yz - x^3y^2z - 2x^3yz^2, x^4y^2z^2, 0, 2x^4y, \\ &-2x^5yz, 0, 0, -2x^2y, 2x^3yz + 4x^2y^2z, -(x^4y^2z) - 2x^3y^3z - 5x^3y^2z^2 - x^2y^3z^2, 3x^4y^3z^2 + \\ &x^3y^3z^3, 4x^3y, x^5y + 2x^4y^2 - 6x^4yz - 4x^3y^2z, -(x^5y^2z) + 4x^4y^2z^2, -4x^4y, -2x^6y + \\ &4x^5yz, x^4y + 4x^3y^2, -8x^4y^2z - 4x^3y^3z, 2x^5y^3z + 5x^4y^3z^2, -4x^5y - 8x^4y^2, -2x^6y^2 + \\ &12x^5y^2z, 4x^6y, -4x^5y^2 - 4x^4y^3, 8x^5y^3z, 8x^6y^2, 4x^6y^3), (z, -2xyz, x^2y^2z + x^2yz^2 + \\ &xy^2z^2, -(x^3y^2z^2) - x^2y^3z^2 - x^2y^2z^3, x^3y^3z^3, 2x^2, -(x^3y), x^4yz - x^3y^2z - 2x^3yz^2 + \\ &x^2y^2z^2, x^4y^2z^2, -4x^3, 2x^4y + 4x^3yz, -2x^5yz, 4x^4, 0, 0, x^3yz + 2x^2y^2z, -(x^4y^2z) - 2x^3y^3z - \\ &3x^3y^2z^2, 3x^4y^3z^2, -4x^3y, x^5y + 2x^4y^2 - 2x^4yz + 4x^3y^2z, -(x^5y^2z), 8x^4y, -2x^6y, 0, -2x^4y^2z, \\ &2x^5y^3z, 4x^4y^2, -2x^6y^2, 0, 0, 0, 0, 0)) \end{aligned}$$

Die Länge jeder Zeile ist nun 33, d.h. auch die Länge des Vektors  $(K1, K2, K3, K1^2, \dots, K1^4)$ , in dem die Monome in  $K1, K2, K3$  stehen, die tatsächlich auftreten, ist 33. Wir zeigen nun, dass es keinen festen Vektor  $(v[1], v[2], v[3], \dots, v[33])$  gibt, der im Kern aller  $A(\xi)$  für alle  $\xi = (x, y, z)$  liegt. Dies liefert dann die Eindeutigkeit der Konstanten  $K1, K2, K3$ . Wenden wir also  $A(\xi)$  auf einem Vektor  $(v[1], v[2], v[3], \dots, v[33])$  an, so erhalten wir:

$$\begin{aligned} \text{Bestimmungsgl} := &(xv[1] - 2xyzv[2] + (x^2y^2z + x^2yz^2 + xy^2z^2)v[3] + (-x^3y^2z^2 - \\ &x^2y^3z^2 - x^2y^2z^3)v[4] + x^3y^3z^3v[5] - 4x^2v[6] + (-x^3y + 6x^2yz)v[7] + (x^4yz - x^3y^2z - \\ &2x^3yz^2 - 2x^2y^2z^2)v[8] + x^4y^2z^2v[9] + 8x^3v[10] + (2x^4y - 8x^3yz)v[11] - 2x^5yzv[12] - \\ &8x^4v[13] - 4x^2yv[15] + (3x^3yz + 6x^2y^2z)v[16] + (-x^4y^2z - 2x^3y^3z - 7x^3y^2z^2 - \\ &2x^2y^3z^2)v[17] + (3x^4y^3z^2 + 2x^3y^3z^3)v[18] + 16x^3yv[19] + (x^5y + 2x^4y^2 - 10x^4yz - \\ &16x^3y^2z)v[20] + (-x^5y^2z + 8x^4y^2z^2)v[21] - 24x^4yv[22] + (-2x^6y + 8x^5yz)v[23] + \\ &(2x^4y + 8x^3y^2)v[24] + (-14x^4y^2z - 8x^3y^3z)v[25] + (2x^5y^3z + 10x^4y^3z^2)v[26] + (-8x^5y - \\ &24x^4y^2)v[27] + (-2x^6y^2 + 24x^5y^2z)v[28] + 8x^6yv[29] + (-8x^5y^2 - 8x^4y^3)v[30] + \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& 16x^5y^3zv[31]+16x^6y^2v[32]+8x^6y^3v[33], yv[1]-2xyzv[2]+(x^2y^2z+x^2yz^2+xy^2z^2)v[3]+ \\
& (-x^3y^2z^2-x^2y^3z^2-x^2y^2z^3)v[4]+x^3y^3z^3v[5]+(-x^3y+2x^2yz)v[7]+(x^4yz-x^3y^2z-2x^3yz^2)v[8]+ \\
& x^4y^2z^2v[9]+2x^4yv[11]-2x^5yzv[12]-2x^2yv[15]+(2x^3yz+4x^2y^2z)v[16]+(-x^4y^2z-2x^3y^3z-5x^3y^2z^2-x^2y^3z^2)v[17]+(3x^4y^3z^2+x^3y^3z^3)v[18]+ \\
& 4x^3yv[19]+(x^5y+2x^4y^2-6x^4yz-4x^3y^2z)v[20]+(-x^5y^2z+4x^4y^2z^2)v[21]-4x^4yv[22]+ \\
& (-2x^6y+4x^5yz)v[23]+(x^4y+4x^3y^2)v[24]+(-8x^4y^2z-4x^3y^3z)v[25]+(2x^5y^3z+5x^4y^3z^2)v[26]+ \\
& (-4x^5y-8x^4y^2)v[27]+(-2x^6y^2+12x^5y^2z)v[28]+4x^6yv[29]+(-4x^5y^2-4x^4y^3)v[30]+ \\
& 8x^5y^3zv[31]+8x^6y^2v[32]+4x^6y^3v[33], zv[1]-2xyzv[2]+(x^2y^2z+x^2yz^2+xy^2z^2)v[3]+ \\
& (-x^3y^2z^2-x^2y^3z^2-x^2y^2z^3)v[4]+x^3y^3z^3v[5]+2x^2v[6]-x^3yv[7]+(x^4yz-x^3y^2z-2x^3yz^2+ \\
& x^2y^2z^2)v[8]+x^4y^2z^2v[9]-4x^3v[10]+(2x^4y+4x^3yz)v[11]-2x^5yzv[12]+4x^4v[13]+ \\
& (x^3yz+2x^2y^2z)v[16]+(-x^4y^2z-2x^3y^3z-3x^3y^2z^2)v[17]+3x^4y^3z^2v[18]-4x^3yv[19]+ \\
& (x^5y+2x^4y^2-2x^4yz+4x^3y^2z)v[20]-x^5y^2zv[21]+8x^4yv[22]-2x^6yv[23]-2x^4y^2zv[25]+ \\
& 2x^5y^3zv[26]+4x^4y^2v[27]-2x^6y^2v[28])
\end{aligned}$$

Wir nehmen nun an, dieser Vektor ist für ALLE Punkte  $(x, y, z)$  der Nullvektor und bestimmen den Vektor  $(v[1], v[2], v[3], \dots, v[33])$ . Da man die einzelnen Komponenten des obigen Vektors als Polynome in  $x, y, z$  auffassen kann, und man für alle  $x, y, z$  nach Annahme den Wert Null erhält, müssen die Koeffiziente der Monome in  $x, y, z$  (also die Ausdrücke in den  $v[i]$ ) bereits Null sein. Für die erste Zeile sind diese Koeffizienten durch

$$\begin{aligned}
& (0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, v[1], 0, 0, 0, 0, -2v[2], 0, 0, 0, 0, v[3], 0, 0, 0, 0, 0, -4v[6], \\
& 0, 0, 0, -4v[15], 6v[7], v[3], 0, 0, v[3]+6v[16], -2v[8], -v[4], 0, 0, -v[4]-2v[17], 0, 8v[10], 0, 0, 0, -v[7]+ \\
& 16v[19], -8v[11]+3v[16], -2v[8], 0, 8v[24], -v[8]-16v[20], -v[4]-7v[17], 0, 0, -2v[17]- \\
& 8v[25], 0, v[5]+2v[18], -8v[13], 0, 0, 0, 2v[11]-24v[22]+2v[24], v[8]-10v[20], 0, 0, 2v[20]- \\
& 24v[27], -v[17]-14v[25], v[9]+8v[21], 0, -8v[30], 0, 3v[18]+10v[26], 0, 0, 0, 0, v[20]- \\
& 8v[27], -2v[12]+8v[23], 0, 0, -8v[30], -v[21]+24v[28], 0, 0, 0, 2v[26]+16v[31], 0, 0, 0, 0, 0, 0, \\
& -2v[23]+8v[29], 0, 0, 0, -2v[28]+16v[32], 0, 0, 0, 8v[33], 0, 0, 0)
\end{aligned}$$

gegeben. Wir bestimmen nun die Einträge des Vektors  $(v[1], v[2], v[3], \dots, v[33])$ , so dass die Koeffizienten der ersten Zeile Null sind:

$$\begin{aligned}
& (v[1] \rightarrow 0, v[2] \rightarrow 0, v[3] \rightarrow 0, v[4] \rightarrow 0, v[5] \rightarrow \frac{-160v[31]}{3}, v[6] \rightarrow 0, v[7] \rightarrow 0, v[8] \rightarrow \\
& 0, v[9] \rightarrow -1536v[32], v[10] \rightarrow 0, v[11] \rightarrow 0, v[12] \rightarrow 16v[29], v[13] \rightarrow 0, v[15] \rightarrow \\
& 0, v[16] \rightarrow 0, v[17] \rightarrow 0, v[18] \rightarrow 80\frac{v[31]}{3}, v[19] \rightarrow 0, v[20] \rightarrow 0, v[21] \rightarrow 192v[32], v[22] \rightarrow \\
& 0, v[23] \rightarrow 4v[29], v[24] \rightarrow 0, v[25] \rightarrow 0, v[26] \rightarrow -8v[31], v[27] \rightarrow 0, v[28] \rightarrow 8v[32], \\
& v[30] \rightarrow 0, v[33] \rightarrow 0)
\end{aligned}$$

Analog bestimmen wir nun die Einträge des Vektors  $(v[1], v[2], v[3], \dots, v[33])$ , so dass die Koeffizienten der Zweiten Zeile Null sind:

$$\begin{aligned}
& v[1] \rightarrow 0, v[2] \rightarrow 0, v[3] \rightarrow 0, v[4] \rightarrow 0, v[5] \rightarrow -20v[31]3, v[7] \rightarrow 0, v[8] \rightarrow 0, v[9] \rightarrow \\
& -192v[32], v[11] \rightarrow 2v[22], v[12] \rightarrow 4v[29], v[15] \rightarrow 0, v[16] \rightarrow 0, v[17] \rightarrow 0, v[18] \rightarrow \\
& 20v[31]3, v[19] \rightarrow 0, v[20] \rightarrow 0, v[21] \rightarrow 48v[32], v[23] \rightarrow 2v[29], v[24] \rightarrow 0, v[25] \rightarrow \\
& 0, v[26] \rightarrow -4v[31], v[27] \rightarrow 0, v[28] \rightarrow 4v[32], v[30] \rightarrow 0, v[33] \rightarrow 0
\end{aligned}$$

Für die Einträge von  $(v[1], v[2], v[3], \dots, v[33])$ , so dass die dritte Zeile aus Nullen besteht, muss dann gelten:

$$\begin{aligned}
& v[1] \rightarrow 0, v[2] \rightarrow 0, v[3] \rightarrow 0, v[4] \rightarrow 0, v[5] \rightarrow 0, v[6] \rightarrow 0, v[7] \rightarrow -4v[19], v[8] \rightarrow \\
& 0, v[9] \rightarrow 0, v[10] \rightarrow 0, v[11] \rightarrow 0, v[12] \rightarrow 0, v[13] \rightarrow 0, v[16] \rightarrow 0, v[17] \rightarrow 0, v[18] \rightarrow \\
& 0, v[20] \rightarrow 0, v[21] \rightarrow 0, v[22] \rightarrow 0, v[23] \rightarrow 0, v[25] \rightarrow 0, v[26] \rightarrow 0, v[27] \rightarrow \\
& 0, v[28] \rightarrow 0
\end{aligned}$$

Aus diesen drei Bedingungen ergibt sich, dass der Vektor  $(v[1], v[2], v[3], \dots, v[33])$  der Nullvektor ist – was zu zeigen war.

Wir folgern also, dass der einzige Vektor  $(v[1], v[2], v[3], \dots, v[33])$ , der im Kern ALLER  $A(\xi, \cdot)$  liegt, der Nullvektor ist. Nehmen wir also an, es gäbe zwei verschiedene Lösungen  $(K1, K2, K3, K1^2, \dots, K1^4)$  und  $(L1, L2, L3, L1^2, \dots, L1^4)$  von (33) für alle  $\xi$ . Der Differenzvektor liegt im Kern aller  $A(\xi, \cdot)$  und ist deswegen nach dem eben gezeigtem der Nullvektor. Daraus folgt insbesondere  $K1 = L1$ ,  $K2 = L2$  und  $K3 = L3$ . Es ist uns also gelungen, die Eindeutigkeit der Konstanten zu zeigen.

## ANLAGE 2

### Bestimmung der Konstanten $K1$ , $K2$ und $K3$ aus einer gestörten Datenbasis

Da die Datenbasis nie exakt bekannt ist, weil die Messwerte nur bis auf eine kleine Fehlertoleranz genau bestimmbar sind, befassen wir uns in dieser Anlage mit der Bestimmung der Konstanten  $K1$ ,  $K2$  und  $K3$  (die die Reaktionskinetik bestimmen (siehe Abschnitt 6)), falls die Daten leicht gestört sind. Um dies zu tun, werden wir uns zunächst für die Beispielkonstanten  $K1 = 2$ ,  $K2 = 4$ ,  $K3 = 3$  eine Datenbasis erzeugen. Dann stören wir die Daten und bestimmen aus dieser gestörten Datenbasis erneut die nun leicht gestörten Konstanten  $K1$ ,  $K2$  und  $K3$ . Als letztes berechnen wir, wie weit die Werte der gestörten Konstanten von den ursprünglichen Werten  $K1 = 2$ ,  $K2 = 4$ ,  $K3 = 3$  abweichen. Es sei darauf hingewiesen, dass die gesamte Anlage so konstruiert ist, dass man in der beigefügten Mathematica - Datei Anlage2.nb die Anzahl der Eingabedaten sowie die Grösse des relativen Fehlers, mit dem man die dazugehörigen Ausgabedaten stört, selbst auswählen kann und mit diesen geänderten Grössen das Programm starten kann.

Zunächst geben wir die stöchiometrische Matrix an:

$$S := ((-2, -2, -1), (-1, 0, -1), (0, 1, -1))$$

Die Funktion  $\rho$ , siehe Abschnitt 6, ist gegeben durch:

$$\rho[(x_-, y_-, z_-), K1_-, K2_-, K3_-] := S.(K1x^2y, K2x^2, K3xyz) + (x, y, z)$$

Die Funktion  $\rho\rho$  ist gegeben durch:

$$\rho\rho[(x_-, y_-, z_-), K1_-, K2_-, K3_-] := \rho[\rho[(x, y, z), K1, K2, K3], K1, K2, K3]$$

Der nächste Vektor enthält alle Monome in  $K1$ ,  $K2$  und  $K3$ , die in wenigstens einer der drei Zeilen von  $\rho\rho$  als Koeffizienten der Polynome in  $x$ ,  $y$  und  $z$  auftreten. Die Sortierung ist folgendermaßen: Zunächst sind alle Monome aufgelistet, bei denen  $K3^0$  vorkommt (also  $K3$  gar nicht auftritt). Bei diesen wird nun nach aufsteigender Ordnung von Monomen in  $K1$  sortiert, dann nach aufsteigender Ordnung von Monomen in  $K2$ , schliesslich nach aufsteigender Ordnung von Monomen in  $K1$  multipliziert mit  $K2^1$  usw.

Konstantenvektor :=  $(1, K1, K1^2, K1^3, K1^4, K2, K1K2, K1^2K2, K1^3K2, K2^2, K1K2^2, K1^2K2^2, K2^3, K3, K1K3, K1^2K3, K1^3K3, K2K3, K1K2K3, K1^2K2K3, K2^2K3, K1K2^2K3, K3^2, K1K3^2, K1^2K3^2, K2K3^2, K1K2K3^2, K2^2K3^2, K3^3, K1K3^3, K2K3^3, K3^4)$

Dies sind die Polynome in  $x$ ,  $y$ ,  $z$  der drei Zeilen von  $\rho\rho$ , vor denen die Konstanten  $K1$ ,  $K2$  und  $K3$  auftreten:

Monomvektor =  $((x, -4x^2y, 2x^4y+8x^3y^2, -8x^5y^2-8x^4y^3, 8x^6y^3, -4x^2, 16x^3y, -8x^5y-24x^4y^2, 16x^6y^2, 8x^3, -24x^4y, 8x^6y, -8x^4, -2xyz, 3x^3yz+6x^2y^2z, -14x^4y^2z-8x^3y^3z, 16x^5y^3z, -x^3y+6x^2yz, x^5y+2x^4y^2-10x^4yz-16x^3y^2z, -2x^6y^2+24x^5y^2z, 2x^4y-8x^3yz, -2x^6y+8x^5yz, x^2y^2z+x^2yz^2+xy^2z^2, -x^4y^2z-2x^3y^3z-7x^3y^2z^2-2x^2y^3z^2, 2x^5y^3z+10x^4y^3z^2, x^4yz-x^3y^2z-2x^3yz^2-2x^2y^2z^2, -x^5y^2z+8x^4y^2z^2, -2x^5yz, -x^3y^2z^2-x^2y^3z^2-x^2y^2z^3, 3x^4y^3z^2+2x^3y^3z^3, x^4y^2z^2, x^3y^3z^3), (y, -2x^2y, x^4y+4x^3y^2, -4x^5y^2-4x^4y^3, 4x^6y^3, 0, 4x^3y, -4x^5y-8x^4y^2, 8x^6y^2, 0, -4x^4y, 4x^6y, 0, -2xyz, 2x^3yz+4x^2y^2z, -8x^4y^2z-4x^3y^3z, 8x^5y^3z, -x^3y+2x^2yz, x^5y+2x^4y^2-6x^4yz-4x^3y^2z, -2x^6y^2+12x^5y^2z, 2x^4y, -2x^6y+4x^5yz, x^2y^2z+x^2yz^2+xy^2z^2, -x^4y^2z-2x^3y^3z-5x^3y^2z^2-x^2y^3z^2, 2x^5y^3z+5x^4y^3z^2, x^4yz-$

$x^3y^2z - 2x^3yz^2, -x^5y^2z + 4x^4y^2z^2, -2x^5yz, -x^3y^2z^2 - x^2y^3z^2 - x^2y^2z^3, 3x^4y^3z^2 +$   
 $x^3y^3z^3, x^4y^2z^2, x^3y^3z^3),$   
 $(z, 0, 0, 0, 0, 2x^2, -4x^3y, 4x^4y^2, 0, -4x^3, 8x^4y, 0, 4x^4, -2xyz, x^3yz + 2x^2y^2z, -2x^4y^2z, 0, -x^3y, x^5y +$   
 $2x^4y^2 - 2x^4yz + 4x^3y^2z, -2x^6y^2, 2x^4y + 4x^3yz, -2x^6y, x^2y^2z + x^2yz^2 + xy^2z^2, -x^4y^2z -$   
 $2x^3y^3z - 3x^3y^2z^2, 2x^5y^3z, x^4yz - x^3y^2z - 2x^3yz^2 + x^2y^2z^2, -x^5y^2z, -2x^5yz, -x^3y^2z^2 -$   
 $x^2y^3z^2 - x^2y^2z^3, 3x^4y^3z^2, x^4y^2z^2, x^3y^3z^3))$

Wir erzeugen uns nun ein paar Daten in Dreier-Tupeln; der Einfachheit halber durchrastern wir den Würfel  $[0, 2.1]^3$  in 0.1er Schritten.

Eingabedaten =  $Flatten[Table[(x, y, z), (x, 0, 2.1, 0.1), (y, 0, 2.1, 0.1), (z, 0, 2.1, 0.1)], 2]$

In den folgenden Zeilen werden diejenigen Eingabedaten entfernt, auf denen die Funktion  $\rho\rho$  negative Werte für  $K1 = 2, K2 = 4, K3 = 3$  annimmt. Wir erzeugen also zunächst die Funktionswerte von  $\rho\rho$  auf den Eingabedaten:

$Xi0 = Table[\rho\rho][Part[Eingabedaten, n], 2, 4, 3], (n, 1, Length[Eingabedaten], 1)]$

Um Eingabedaten und die dazugehörigen Werte von  $\rho\rho$  auseinanderzuhalten, führen wir zwei Hilfslisten Hilf0 und Hilf2 ein:

$$\text{Hilf0} = x.Xi0$$

$$\text{Hilf2} = b.\text{Eingabedaten}$$

Die Liste mit Eingabedaten und dazugehörigen Werten von  $\rho\rho$  ist also :

$$\text{Hilf0} + \text{Hilf2}$$

Im nächsten Schritt sortieren wir diejenigen Eingabe- und Ausgabewerte (die von  $\rho\rho$ ) aus, deren Ausgabewerte für die dazugehörigen Eingabewerte negativ sind.

$\text{Hilf3} = \text{Cases}[\text{Hilf0} + \text{Hilf2}, (x.(g-/; g > 0) + b.h-, x.(k-/; k > 0) + b.l-, x.(j-/; j > 0) + b.m-)]$

Leider haben nun die Ausgabedaten verschiedene Größenordnungen, so dass der Algorithmus, den wir später anwenden wollen, nicht optimal arbeitet. Wir sortieren also noch die Werte heraus, deren Größenordnung nicht zwischen  $10^2$  und  $10^3$  liegt.

Zunächst eliminieren wir alle Eingaben und die dazugehörigen Ausgaben, deren Ausgaben kleiner als  $10^2$  sind:

$\text{Hilf4} = \text{Cases}[\text{Hilf3}, (x.(g-/; g > 100) + b.h-, x.(k-/; k > 100) + b.l-, x.(j-/; j > 100) + b.m-)]$

Nun eliminieren wir analog alle Eingaben und dazugehörigen Ausgaben, deren Werte grösser als  $10^3$  sind:  $\text{Hilf5} = \text{Cases}[\text{Hilf4}, (x.(g-/; g < 1000) + b.h-, x.(k-/; k < 1000) + b.l-, x.(j-/; j < 1000) + b.m-)]$

Im Gegensatz zu den  $21^3$  Tupeln, die wir am Anfang generiert haben, bleiben nun noch übrig:

$$\text{Length}[\text{Hilf5}] = 507$$

Wir erhalten also als neue Eingabedaten:

$\text{EingabeNeu} = \text{Hilf5}/.\{b \rightarrow 1, x \rightarrow 0\}$

Auf diesen Werten nimmt  $\rho\rho$  die folgenden positiven Werte an:

AusgabeNeu = Hilf5/.{b → 0, x → 1}

((103.63852800000018, 190.54435200000012, 157.83577600000004), (138.79152000000033, 219.98083200000025, 173.69254400000014), (110.73974784000019, 202.50689536000002, 169.43522688000013), (150.40751308800023, 235.75137894400018, 187.68110080000008), (194.85086208000027, 272.2614968320002, 207.3877475840001), (112.4621414400002, 209.9970342400002, 178.45352704000013), (156.22461312000036, 246.77859328000025, 198.98322944000012), (205.5418122240003, 287.38232243200025, 221.26961664000012), (260.69539584000046, 331.9880028160004, 245.3905937920002), (108.39753830400022, 212.64409036800015, 184.60817843200007), (155.67194112000035, 252.57192192000025, 207.2463027200001), (209.30926848000038, 296.9023795200003, 231.95350656000014), (269.6488028160003, 345.85381324800017, 258.8272076800001), (337.02982656000063, 399.6445731840005, 287.9648238080003), (148.44996940800036, 252.8406376960003, 212.23216998400017), (205.68564480000032, 300.40708480000023, 239.12852480000015), (270.51286656000025, 353.2336998400002, 268.53779712000016), (343.3358622720002, 411.5824821760002, 300.5797580800001), (424.55885952000057, 475.71543116800046, 335.37417881600027), (134.5440000000001, 247.50400000000016, 213.8240000000001), (194.4983040000002, 297.69856000000016, 242.6084160000001), (262.9428480000002, 353.8028800000002, 274.2613120000001), (340.35456000000033, 416.1280000000002, 308.9278400000001), (427.21036800000047, 484.98496000000034, 346.75315200000017), (523.9872000000005, 560.6848000000005, 387.8824000000002), (114.22893388799999, 236.695194624, 212.02939136000003), (175.8786816000002, 288.8026821120002, 242.3365386240001), (246.91081267200033, 347.46891110400026, 275.8707535360001), (327.88314624000003, 413.05966464000005, 312.80578304000005), (419.35350144000023, 485.9407257600001, 353.31537408), (521.8796974080005, 566.4778775040005, 397.5732736000002), (636.0195532800004, 655.0369029120003, 445.7532285440002), (113.13250000000008, 203.30750000000006, 153.54250000000002), (147.92428862500017, 230.89605687500017, 166.1309251250001), (105.08572800000013, 204.35712000000012, 161.3941120000001), (143.6535360000003, 235.34592000000023, 176.2207040000001), (186.4800000000002, 269.1600000000002, 192.1800000000001), (233.7517440000003, 305.9160000000002, 209.31865600000015), (123.41797487500001, 226.70788562500002, 179.024896375), (169.09664200000012, 263.3273500000001, 196.99365800000004), (220.0571571250001, 303.482554375, 216.447851625), (276.5425000000002, 347.3275000000001, 237.45250000000004), (338.7956503750003, 395.0161881250002, 260.0726258750001), (135.1609120000001, 243.78368000000012, 193.9560480000001), (187.67076100000008, 285.8763950000001, 215.03842900000006), (246.57750400000012, 332.2827200000001, 237.99833600000008), (312.19072300000005, 383.20110500000004, 262.92308700000007), (384.82000000000005, 438.8300000000001, 289.9000000000001), (464.7749170000004, 499.36785500000036, 319.01639300000016), (139.154296875, 254.666015625, 205.615234375), (197.93400000000014, 301.8720000000001, 229.67000000000007), (264.30239062500004, 354.22654687500005, 256.028203125), (338.6467500000002, 411.9802500000002, 284.8037500000001), (421.3543593750002, 475.3837031250001, 316.11054687500007), (512.8125, 544.6875, 350.0625), (613.4084531250004, 620.1422343750004, 386.7735156250002), (134.64707200000004, 258.73408000000006, 213.59468800000008), (198.85600000000005, 310.492, 240.36800000000002), (271.9036480000002, 368.27776000000017, 269.8974720000001), (354.26694400000036, 432.40240000000034, 302.3282560000002), (446.42281599999995, 503.17696, 337.80550400000004), (548.848192, 580.9124800000001, 376.474368), (662.0200000000001, 665.9200000000001, 418.4800000000001), (786.4151680000002, 758.5105600000002, 463.9675520000001), (121.33421987500019, 255.69106062500018, 217.66700137500007), (189.8632960000002, 311.24552000000017, 246.79614400000014), (268.51745312500026, 373.73623437500015, 279.1525156250001), (357.87606400000005, 443.5436000000003, 314.91753600000015), (458.5185013750001, 521.0480131250001, 354.2726248750001), (571.0241380000006, 606.6298700000004, 397.3992020000002), (695.9723466250003, 700.6695668750003, 444.47868712500025),

(833.9425000000006, 803.5475000000004, 495.69250000000017), (985.5139708750011, 915.6440656250007, 551.2220603750004), (170.8676670000001, 303.99322500000005, 248.81438300000005), (253.78118400000014, 370.2643200000001, 283.54185600000005), (348.812625, 444.850875, 322.1991249999999), (456.6574560000007, 528.2121600000005, 365.0092640000002), (578.0111430000004, 620.8074450000003, 412.19534700000014), (713.5691520000003, 723.0960000000001, 463.9804480000001), (864.0269490000002, 835.537095, 520.587641), (142.27747600000023, 288.9554200000002, 246.48376400000012), (227.8532646250001, 357.9010168750001, 283.0246691250001), (326.9572480000001, 436.1624800000001, 324.01931200000007), (440.41548437500006, 524.2880781250001, 369.7381718750001), (569.0540320000006, 622.8260800000005, 420.4517280000003), (713.6989491250002, 732.3247543750002, 476.43045962500014), (875.1762940000007, 853.3323700000005, 537.9448460000002), (104.9920000000002, 266.70800000000014, 240.06400000000008), (191.4160000000002, 337.06400000000014, 277.7720000000001), (292.74400000000014, 417.7160000000001, 320.44800000000004), (409.94800000000004, 509.3119999999995, 368.416), (544., 612.5, 422.), (695.8720000000004, 727.9280000000003, 481.52400000000017), (866.5360000000004, 856.2440000000003, 547.3120000000002), (145.66140112500017, 308.5394943750001, 268.16068762500004), (247.15472400000036, 390.14430000000027, 311.7762760000001), (365.99286037500013, 483.7397381250001, 361.23451587500006), (503.3099519999995, 590.08488, 416.919408), (660.2401406250003, 709.9387968750003, 479.2149531250002), (837.9175680000002, 844.0605600000001, 548.5051520000001), (124.85286132000027, 232.64024248800024, 162.5847596560001), (164.5657221120004, 262.42442265600033, 173.81169920000016), (207.9074166000006, 294.5126394000005, 185.80792620000022), (132.11779200000035, 248.28068800000034, 179.4299840000002), (179.05574400000026, 283.8142720000003, 193.76640000000015), (230.70768000000027, 322.3925920000003, 209.21910400000013), (287.2602240000002, 364.13228800000024, 225.83475200000012), (348.90000000000066, 409.1500000000005, 243.66000000000017), (118.47430600800021, 247.6250218640002, 188.4215137200001), (170.79546624000037, 287.7112409600003, 205.3909196800001), (228.97904532000044, 331.63318892000035, 223.85573252000015), (293.2804965120006, 379.55317030400045, 243.88510809600018), (363.9552730800006, 431.6334896720005, 265.5482022640002), (441.25882828800053, 488.03645158400053, 288.91417088000026), (525.4466154000008, 548.9243606000007, 314.05216980000034), (139.4856268800003, 273.5838658560003, 208.04600883200013), (201.6565232640004, 321.15396403200043, 228.7773888000002), (271.1856307200008, 373.5815116800007, 251.49220864000034), (348.4122316800007, 431.0848588800006, 276.2878860800003), (433.6756085760006, 493.8823557120005, 303.26183884800025), (527.315043840001, 562.1923522560007, 332.51148467200034), (629.6698199040007, 636.2331985920006, 364.1342412800003), (741.0792192000011, 716.2232448000007, 398.22752640000033), (150.6164328240003, 291.9690464080003, 224.1671159920002), (222.1435507200003, 346.7207511040003, 248.55721548800017), (302.6663774160004, 407.45264216800035, 275.4739309200002), (392.6244940800007, 474.45054592000054, 305.04933376000025), (492.4574818800009, 548.0002886800006, 337.4154954800003), (602.6049219840005, 628.3876967680005, 372.7044875520003), (723.5063955600009, 715.8985965040007, 411.04838144800027), (855.6014837760008, 810.8188142080006, 452.5792486400003), (999.3297678000012, 913.4341762000009, 497.4291606000004), (150.33101568000055, 301.62046208000055, 236.14030848000027), (230.28014860800053, 362.9402792960004, 263.9196739840002), (320.9792870400005, 431.44676556800044, 294.81434009600025), (422.98625011200045, 507.50570393600043, 328.99805376000023), (536.8588569600014, 591.4828774400012, 366.6445619200005), (663.154926720001, 683.7440691200007, 407.92761152000037), (802.4322785280012, 784.6550620160009, 453.0209495040004), (955.248731520001, 894.581639168001, 502.09832281600046), (137.7630150000002, 301.8565050000002, 243.57759500000012), (224.76595200000045, 368.82441600000044, 274.31328000000025), (324.35920500000043, 444.24775500000044, 308.78630500000025), (437.2382400000006, 528.5857920000004, 347.2197440000002), (564.0985230000005, 622.2977970000004, 389.8366710000002), (705.635520000001,

725.8430400000008, 436.8601600000004), (862.5446970000008, 839.6807910000007, 488.5132850000003), (112.76635084800026, 292.5089751040003, 246.36641536000016), (205.04226048000038, 363.91363072000036, 279.47098496000024), (311.79814656000065, 445.07908096000057, 316.9536153600003), (433.88800051200076, 536.5726627840006, 359.0949890560003), (572.1658137600008, 638.9617131520007, 406.17578854400034), (727.4855777280011, 752.8135690240009, 458.4766963200004), (900.7012838400015, 878.6955673600012, 516.2783948800005), (171.32827430400027, 348.3014117120003, 279.4227731200016), (283.0962296400007, 433.7387255600006, 319.1898774800003), (412.27549440000087, 530.9399744000007, 364.32445440000043), (559.9009336560009, 640.5961919120008, 415.17370616800036), (727.0074124800013, 763.398411776001, 472.0848350720005), (914.629795944001, 900.0376676720007, 535.4050434000004), (124.6279372800005, 322.63768742400043, 274.4956615680002), (238.88321433600066, 410.6131015680007, 315.6848128000004), (372.6093465600011, 511.7776070400009, 362.94148352000036), (527.0458905600011, 626.9626137600009, 416.68893696000043), (703.4324029440013, 756.999531648001, 477.35043635200054), (903.0084403200015, 902.7197706240011, 545.3492449280004), (180.61064916000055, 376.6699762480005, 306.9379593360003), (315.9736869120005, 479.7950844160005, 355.31209792000027), (474.266035320001, 598.4760926800009, 410.9330140400005), (656.9572300800015, 733.7025164800012, 474.3102028800006), (865.5168068880014, 886.4638712560011, 545.9531596240005), (110.51462400000044, 333.4304000000004, 293.73977600000023), (244.30560000000057, 436.3040000000004, 342.1224000000002), (403.14220800000055, 556.1984000000006, 398.4641920000003), (588.7507200000008, 694.2800000000008, 463.3716800000003), (802.857408000001, 851.7152000000008, 537.4513920000004), (160.3431813120005, 383.1794480640005, 324.35337881600026), (316.13349084000066, 501.80989303200056, 380.1685512240003), (500.93129356800097, 640.1740880640008, 445.3006585600004), (716.7478246800013, 799.635146520001, 520.4646923600004), (965.5943193600014, 981.5561817600011, 606.3756441600005), (135.1614989760001, 261.6257385280001, 160.50588208000005), (176.52624189900038, 290.4571359130003, 167.95986592700007), (136.32126144000023, 276.6845689600002, 182.16493248000006), (186.3655718400003, 312.2478223360003, 192.9606968320001), (240.78226368000034, 350.53156288000025, 204.59926208000007), (299.71968230400034, 391.6272363520004, 217.1151744000002), (363.3261730560006, 435.6262885120005, 230.5429799680002), (150.67695432300027, 300.32853084900023, 203.8730633750001), (211.33547635200048, 343.8240675840004, 218.34040281600016), (277.85506150500066, 391.0342639950005, 234.09023048500018), (350.4549652800007, 442.0973603520005, 251.1797714240002), (429.3544431750005, 497.15159692500043, 269.6662506750002), (514.7727506880007, 556.3352139840005, 289.60689328000024), (606.929143317001, 619.7864517990007, 311.05892428100026), (135.7000050000002, 302.32570300000015, 216.71900100000005), (204.64348800000033, 352.2617920000003, 234.28249600000012), (281.0600310000004, 406.99671700000033, 253.61780300000012), (365.25921600000044, 466.72892800000045, 274.8122400000002), (457.5506250000007, 531.6568750000006, 297.9531250000002), (558.2438400000005, 601.9790080000005, 323.1277760000002), (667.6484430000005, 677.8937770000003, 350.4235110000002), (786.0740160000007, 759.5996320000006, 379.9276480000002), (913.8301410000012, 847.2950230000009, 411.72750500000035), (164.93996400000046, 336.31272400000046, 239.86586800000023), (247.8579002550005, 396.33907261300044, 261.8296809710002), (340.32870984000056, 462.5588994400005, 286.2006890400002), (442.7740513770007, 535.2459464110007, 313.10471744500023), (555.6155834880005, 614.6739554560005, 342.66759142400025), (679.2749647950006, 701.1166685050006, 375.01513621500027), (814.173853920001, 794.8478274880008, 410.2731770560003), (960.7339094850012, 896.141174335001, 448.56753918500044), (180.15510374400043, 360.0854330880004, 258.9664184320002), (276.4473600000008, 429.82579200000066, 285.1793600000003), (384.59495424000073, 507.3084618240006, 314.51355340800023), (505.1557056000007, 592.8992256000006, 347.1427456000003), (638.6874332160008, 686.9638663680007, 383.24068352000035), (785.7479562240014,

789.8681671680012, 422.98111411200057), (946.8950937600014, 901.9779110400011, 466.5377843200004), (179.00703878400031, 371.98492115200037, 273.23878752000024), (287.4081367710005, 450.60181905700045, 303.3137373430002), (410.15444400000104, 538.6393480000008, 337.2885080000004), (547.966357785001, 636.5737482910008, 375.39518279700036), (701.564275440001, 744.8812602400008, 417.86584504000035), (871.6685942790008, 864.0381241570008, 464.93257803500035), (160.17324204000028, 371.06636644000037, 282.2710908400002), (278.7581690880005, 457.2660951040005, 315.5891571200002), (414.32100343200085, 554.6628913840008, 353.63196333600035), (567.7734720000012, 663.863536000001, 396.70134400000046), (740.0273017200007, 785.4748096720007, 445.09913362400033), (931.9942195200013, 920.1034931200011, 499.12716672000045), (123.42960000000033, 357.1536480000004, 286.0480960000002), (249.64295737500032, 449.20791712500034, 321.77277687500015), (395.55583200000063, 554.2957680000005, 363.0713040000002), (562.3023656250003, 673.1762718750003, 410.32767812500015), (751.0167000000007, 806.6085000000006, 463.9259000000003), (962.832976875001, 955.3515236250007, 524.2499703750003), (200.3947814400005, 426.6448814080005, 322.0592373760003), (353.55005952000033, 537.3146099200004, 365.5815603200002), (530.5421022720005, 663.8045839360005, 416.00444160000023), (732.7608852480009, 807.0495823360008, 473.8074634240003), (961.5963840000014, 967.984384000001, 539.4702080000005), (132.54524251500038, 390.6274875850005, 317.06732865500027), (289.26062592000056, 504.37727910400054, 361.59207628800027), (472.80470926500095, 635.9639887150008, 413.94236816500035), (684.8590546560006, 786.5231870080006, 474.70778336000024), (927.1052241990012, 957.1904445730008, 544.4779009470004), (204.89948556000058, 457.0108016400006, 351.9731737200003), (390.7377196800008, 590.7974952960006, 404.8293349120003), (608.3170674000011, 745.7335974000009, 467.1001274000004), (859.6487639040012, 923.1822213120008, 539.5005427200002), (103.87613611200076, 397.5659623840007, 338.00281265600034), (287.29003894500056, 530.3468697550006, 389.8070245650003), (505.5366489600012, 686.3521841920009, 451.9537354240003), (760.997294715001, 867.2009798650008, 525.2997650150004), (166.63113600000028, 457.4905600000004, 370.4275840000003), (380.2579200000003, 610.9720000000003, 430.7004800000002), (634.3680000000001, 791.4880000000007, 503.1480000000003), (237.45524980800067, 523.0290344160005, 405.1815230240003), (484.3441460550009, 699.2225004450008, 474.78513883500034), (777.9423590400017, 906.6515969280014, 558.5948508160004), (129.30258892800035, 296.8094300160003, 167.96641510400008), (176.9860485120003, 327.9829416960002, 172.7490508800003), (227.98071552000047, 361.0974259200003, 177.93653632000007), (152.9532928000002, 331.7153728000001, 199.15745280000002), (214.17664576000035, 372.57849126400026, 207.82024076800008), (280.27347712000034, 416.3972108800002, 217.29496064000006), (351.3921322240003, 463.26297740800027, 227.6161585920001), (427.6809564160001, 513.2672366080001, 238.81838080000006), (509.2882950400008, 566.5014342400005, 250.93617344000018), (118.76058112000052, 326.0450508800003, 216.98753664000006), (189.48861337600025, 374.0888453120002, 228.68453324800004), (266.81412198400056, 426.2198251520004, 241.6635123200001), (350.96802304000045, 482.5839718400003, 255.98552064000003), (442.1812326400006, 543.3272668160004, 271.7116049920001), (540.6846668800008, 608.5956915200005, 288.9028121600001), (646.7092418560007, 678.5352273920005, 307.6201889280001), (760.4858736640008, 753.2918558720006, 327.9247820800002), (882.2454784000008, 833.0115584000006, 349.87763840000014), (103.36449600000016, 332.00049600000017, 234.17649600000004), (185.6824934400002, 388.42341811200015, 249.065718784), (276.6813062400005, 450.30303936000035, 265.8142764800001), (376.7002168320005, 517.8577098240004, 284.51958681600007), (486.0785076480003, 591.3057795840002, 305.27906752), (605.1554611200007, 670.8655987200005, 328.19013632000014), (734.2703596800005, 756.7555173120004, 353.35021094400014), (873.7624857600006, 849.1938854400005, 380.8567091200002), (138.41305600000024, 372.3656320000002, 259.08460800000006), (238.93676800000037, 441.2984320000002, 278.47849600000006), (350.8134400000006, 517.4462080000004, 300.4885760000001), (474.5200000000002, 601.1200000000002,

325.2600000000001), (610.5333760000005, 692.6308480000005, 352.93792000000013), (759.3304960000003, 792.2897920000001, 383.66748799999993), (921.3882880000008, 900.4078720000006, 417.5938560000002), (155.01196556800022, 399.97844057600014, 279.97233958400005), (273.0838789120005, 480.9915292160004, 303.65847552000014), (405.5066041600007, 571.1979257600005, 330.82284736000014), (552.9274777600009, 671.0241697280006, 361.67119769600015), (715.9938361600008, 780.8968006400005, 396.40926912000015), (895.3530158080007, 901.2423580160004, 435.24280422400005), (149.8830950400004, 412.65286656000035, 296.0129740800001), (283.9059824640005, 504.6764513280003, 323.46589619200006), (435.55712409600073, 608.0590510080004, 355.34504192000014), (605.6905113600008, 723.3680025600006, 391.93109376000024), (795.1601356800013, 851.1706429440009, 433.50473420800023), (121.19709760000029, 409.20562009600013, 306.88124659199997), (268.63584256000047, 510.53352064000035, 337.2682547200001), (437.1998229760003, 625.5308849920002, 373.09020300800006), (627.9894154240004, 754.9336337920003, 414.71855616), (842.1049964800008, 899.4776876800006, 462.52477888000016), (226.11608320000042, 497.8541496320003, 344.9900720640001), (408.30211072000066, 622.2445644800005, 383.6651622400002), (616.6458833920002, 763.6418263040001, 429.2930332160001), (852.5373767680005, 922.9807139840004, 482.35326720000006), (156.88876800000048, 467.0955840000004, 347.1328000000001), (348.4884000000007, 598.0406880000004, 387.2833760000001), (570.2822400000008, 748.6564800000007, 435.54432000000025), (823.9965600000008, 920.1093600000006, 492.52216000000016), (259.19484928000065, 553.9991756800006, 384.7699020800002), (489.41102080000064, 710.4393748480006, 434.0124648960002), (755.9765708800011, 890.6397491200009, 493.24635136000035), (143.65443289600051, 492.4193626880003, 377.53651648000005), (376.45487872000075, 650.7551475200006, 425.87781632000025), (649.980918400001, 835.7243498240007, 485.4286452480002), (235.6968176640002, 572.6265016320002, 412.9212096), (509.5076659200008, 757.8720691200007, 470.6348723200002), (831.2950656000011, 974.5697525760007, 541.7832235520002), (339.96482828800066, 660.8785795840005, 451.0391468800001), (659.1920204800006, 875.8585100800004, 519.2193996800002), (148.51609600000015, 549.7068800000002, 429.3392640000001), (457.0808320000006, 757.5468800000004, 492.0105280000002), (233.32252876800044, 625.4118044160003, 463.25730406400015), (587.6671960320008, 863.0026863360006, 535.9555526400001), (107.10374062500001, 328.542996875, 167.12135312499996), (158.99202000000002, 359.94182, 167.51162), (214.0026468750001, 393.09174162500005, 168.135936375), (114.61604968800026, 359.16879962400014, 205.35308556), (182.27089728000038, 401.4578181120003, 209.37091494400008), (254.8101615120004, 446.61613394400024, 214.032970376), (332.3651673600004, 494.7240537600003, 219.3685401600001), (415.0672398000006, 545.8618842000004, 225.40691260000017), (503.04770380800085, 600.1099319040005, 232.17737600000007), (596.437884360001, 657.5485035120007, 239.7092186640002), (181.99826410500052, 424.94839355500034, 240.6864230050001), (271.89450288000046, 481.9367291200004, 249.1428113600001), (369.0396733590003, 543.3066002770003, 258.8275711950001), (473.6530310400006, 609.1962472960005, 269.7979275520001), (585.9538314210008, 679.7439104470005, 282.11110547300007), (706.1613300000009, 755.0878300000006, 295.8243300000001), (834.4947822750006, 835.3662462250005, 310.9948261750001), (971.1734437440006, 920.7173993920004, 327.6798190400001), (199.03654080000038, 457.71578662400015, 268.513816448), (309.19650278400053, 528.2078842880003, 281.024481792), (429.36297408000064, 604.8590508800005, 295.47352768000013), (559.8752371200003, 687.8876364800003, 311.95837184000004), (701.0725743360005, 777.5119911680003, 330.57643200000007), (853.2942681600008, 873.9504650240006, 351.42512588800014), (157.59972895500024, 451.99521634500024, 286.644747735), (283.5811833120002, 533.139194736, 302.04730216), (422.61178432500026, 622.4099951430002, 320.181961961), (575.1878978880004, 720.1317965760003, 341.2007192640001), (741.8058898950007, 826.6287780450004, 365.25556619500003), (922.962126240001, 942.2251185600006, 392.4984948800001), (193.0108320000004, 495.3782080000003, 311.9639840000001), (344.2893750000004, 592.9581250000002, 331.93687499999993), (512.4925440000002, 701.1786880000001,

355.68323200000003), (698.3158050000001, 820.499167, 383.42612900000006), (902.4546240000008, 951.3788320000003, 415.38863999999995), (199.18747622700033, 519.7677726890003, 332.685153151), (374.25143808000064, 632.7398316800004, 356.6466252800001), (570.5576703450006, 759.1571911550004, 385.5507559650001), (789.0477158880005, 899.6470171040003, 419.71033431999996), (172.50926976000062, 522.9666140160004, 348.3489822720001), (368.500260096001, 649.3860433920007, 375.2970426880002), (590.4220953600011, 792.2951961600007, 408.4538969600002), (839.5143321600009, 952.5254822400007, 448.24280832000017), (111.55225301100037, 504.2712285130002, 359.217368015), (324.288080640001, 641.3138717440006, 387.75004684800007), (567.9231823890004, 798.0651958630002, 423.815205337), (844.0520256000015, 975.6007456000009, 467.9694656000002), (241.26407575199997, 608.565861176, 394.6515026), (501.3479116800006, 775.6079636480006, 431.87419161600013), (799.4796248880008, 967.0359468560006, 478.67769282400013), (121.55274000000023, 552.8491800000002, 397.43121999999994), (391.5608636250001, 725.8071738750001, 433.7085841250001), (705.2760000000007, 926.8012320000005, 481.03886400000016), (242.03299968000061, 651.2931635200003, 431.21307136), (563.6584442880003, 856.7129443840001, 476.60834048000004), (379.56185424000046, 760.4019569600003, 467.7829556800001), (160.5187069200005, 643.2111457200004, 457.71598452000006), (535.043496960001, 880.6990406400007, 507.28364032000013), (275.6228379750003, 738.3757917250001, 490.38624547499995), (404.73100800000054, 842.2356800000003, 525.1307520000001), (548.4905908650003, 955.1567175150002, 562.0339441650002), (139.08000000000018, 433.49200000000013, 205.664), (215.84062500000005, 477.805375, 203.860125), (297.18000000000002, 524.704, 202.468), (383.1993750000001, 574.2486250000001, 201.507875), (474., 626.5, 201.), (569.6831250000001, 681.5188750000001, 200.96462499999996), (103.70707200000032, 443.91840000000013, 246.5953279999999), (199.9932480000005, 500.98776000000043, 247.77187200000017), (303.3020160000004, 562.1740800000003, 249.90054400000008), (413.82000000000033, 627.5940000000003, 253.02800000000013), (531.7338240000006, 697.3641600000003, 257.20089600000006), (657.2301120000011, 771.6012000000006, 262.465888), (790.495488000001, 850.4217600000005, 268.869632), (931.716576000001, 933.9424800000006, 276.458784), (151.36800000000008, 500.3320000000001, 279.4560000000001), (275.26877700000045, 574.7399350000003, 284.30269300000003), (409.42809600000027, 655.3086400000001, 290.859584), (554.1555390000003, 742.2365650000003, 299.2139910000001), (709.7606880000003, 835.7221600000001, 309.45323199999996), (876.5531250000004, 935.9638750000003, 321.66462500000006), (126.10617600000029, 511.5558400000002, 305.627904), (273.54163200000005, 600.7024, 313.08476800000005), (434.95200000000017, 698.3680000000002, 323.1440000000002), (610.8142080000003, 804.8636800000002, 335.950752), (801.6051840000008, 920.5004800000007, 351.6501760000002), (186.70926300000036, 573.9295050000003, 333.049347), (368.34547200000065, 684.1425600000005, 344.66924800000004), (568.6852290000003, 805.8916350000002, 360.0744410000001), (788.4240000000002, 939.6360000000001, 379.48800000000006), (210.43200000000024, 613.6480000000004, 357.10400000000016), (425.22599999999996, 744.1239999999997, 372.282), (664.1040000000002, 889.5760000000001, 392.608), (191.0193750000002, 627.0756250000002, 377.221875), (436.09166400000055, 775.7965600000003, 394.80385600000005), (711.2021370000007, 943.2997750000005, 419.0410130000001), (125.13388800000041, 612.5433600000003, 393.76243200000005), (395.76000000000045, 776.2800000000003, 412.06), (702.8469120000004, 962.8953600000003, 438.6174080000001), (302.2686720000002, 744.8584, 424.8977279999999), (635.1581250000008, 946.3918750000004, 451.63562499999995), (157.05043200000011, 683.0773600000002, 435.20588800000013), (507.7511040000004, 894.1609600000003, 459.49721600000015), (323.8436249999998, 808.9653749999999, 464.6971249999999), (514.2238080000005, 948.8569600000003, 496.687712), (233.1600960000007, 807.5190400000004, 497.148384), (394.6640640000005, 930.0556800000003, 525.133696), (142.58399999999997, 836.9920000000001, 551.0600000000002), (278.7344489999999, 944.7151350000001, 575.7522210000002), (129.18485324800042, 490.1549916160004, 183.5704739840001), (208.4152576000006, 531.8294740480004, 174.10538649599997), (291.3921387520007, 575.4993909760005, 164.74529920000003), (378.18073216000073, 621.2023782400004,

155.50024831999986), (128.0155401250004, 533.9969873750003, 245.37433462500013),  
 (235.57369000000028, 593.0896460000004, 238.64120200000002), (349.56070187500063,  
 655.8189706250006, 232.53473937500007), (470.1162400000003, 722.2707200000002,  
 227.08679999999998), (597.3799686250007, 792.5306528750006, 222.32923712500008),  
 (731.4915520000005, 866.6845280000005, 218.29390400000003), (872.5906543750008,  
 944.8181041250006, 215.01265387500004), (148.2875412480006, 582.3879767040006,  
 287.4312281600001), (288.1433293200012, 660.876802680001, 283.1693000400002),  
 (437.95027584000076, 745.1840582400006, 280.27944064), (597.9638340720015, 835.4720479440009,  
 278.830805816), (768.4394572800011, 931.9030763520008, 278.89255142400015), (182.39463193600065,  
 635.4510104320005, 320.63996492800004), (358.74584135500055, 735.5478008410004,  
 318.836924327), (549.4843752640013, 844.233282592001, 319.3970539200002), (755.0318922850014,  
 961.781197615001, 322.44617894500016), (111.70859392000068, 627.3683916800005,  
 350.25100544000014), (317.9464288000006, 744.7861088000003, 349.02578879999993),  
 (543.6254179840013, 873.9550023680008, 351.3042027520001), (159.47891153700027,  
 685.6429177710003, 374.90596000500017), (409.51186584000106, 828.4145709600009,  
 375.8991800800001), (685.370020335001, 986.9570096850007, 381.9030990350001),  
 (153.41392000000064, 712.9282720000006, 398.0322240000001), (444.7865290000006,  
 879.2016430000004, 399.9571570000001), (415.1162910400009, 892.4691744320007,  
 421.05511382400016), (315.99990681600127, 866.3116024320008, 440.33619404800004),  
 (147.4104860800011, 801.7825628800007, 460.2830396799999), (365.1940019200008,  
 955.2855603200003, 478.88351871999976), (267.36709120000114, 962.9948608000005,  
 515.8230143999998), (123.86673868800084, 611.3397821440007, 220.68620159999986),  
 (234.40638259200114, 667.0100899840007, 204.4730613759999), (350.1285888000017,  
 725.4648832000012, 188.4804416), (471.12144384000067, 786.7564165120006, 172.72476518399995),  
 (597.4730342400013, 850.936944640001, 157.2224550400003), (729.2714465280014,  
 918.0587223040011, 141.98993408), (866.6047672320019, 988.1740042240015, 127.04362521600011),  
 (183.88444800000076, 693.8784320000005, 277.6828159999999), (337.0598400000009,  
 773.9931200000009, 262.8480000000001), (499.14480000000134, 859.1527040000012,  
 248.9342080000002), (670.325952000001, 949.4738240000008, 235.9880959999996),  
 (165.66210048000107, 728.2858490880009, 324.453533696), (360.69074688000137, 831.990497280001,  
 309.95664767999995), (569.3593681920014, 943.6408488960012, 297.3379456000001),  
 (165.16226150400146, 768.1045281280014, 359.0208107520004), (406.6079692800014,  
 897.5388083200012, 344.30782336000016), (298.47584870400107, 877.728776192001,  
 379.67600768000005), (366.11742720000206, 951.1831872000014, 401.32894719999985),  
 (354.7315200000009, 981.419968000001, 423.9860160000002), (256.1310566400016,  
 964.8256217600015, 449.22937088000026), (167.78708918400045, 701.9271088320005,  
 131.36015248000027), (272.86750510500116, 749.0780525550005, 105.1005000049996),  
 (195.38468352000064, 795.5921036800003, 241.3583078399998), (350.9970347520005,  
 870.7264061440002, 214.8611215359997), (513.6805140479998, 949.6852195839997,  
 188.74714111999972), (215.7439098749999, 865.6775226249998, 305.26703537499975),  
 (426.4263900000006, 970.6006900000002, 277.3049899999998), (127.94775552000107,  
 872.9882419200009, 361.63912832000017), (170.76206784000087, 986.0093305600006,  
 416.0082092800001), (158.94511466400184, 866.9385959280014, 159.7397731919999),  
 (301.5248544000011, 928.8243744000008, 122.0438943999997), (252.7529267200008,  
 999.3290644480008, 255.3584181759999)

Wir bestimmen zunächst den Konstantenvektor (s.o.) für die ungestörten Ein- und Ausgabedaten. Für diese ist natürlich  $K1 = 2$ ,  $K2 = 4$  und  $K3 = 3$  und aus diesen kann man bereits allein den gesamten Konstantenvektor bestimmen. Wir lesen nun zunächst unsere Ein- und Ausgabedaten in den Monomvektor (siehe den Anfang von ANLAGE2) ein:

```

matA1 = Flatten[Table[Monomvektor/.{x → EingabeNeu[[l]][[1]], y → EingabeNeu[[l]][[2]],
z → EingabeNeu[[l]][[3]]}, {l, 1, Length[EingabeNeu, 1]}, 1]

```

Auch unsere neuen Ausgabedaten speichern wir in einer Liste, die wir mit AusNeu bezeichnen.

```
AusNeu = Flatten[AusgabeNeu]
```

Jetzt bestimmen wir den Konstantenvektor:

```
system1 = Transpose[matA1].matA1
```

```
absolute1 = Transpose[matA1].AusNeu
```

```
ErgebUngest = LinearSolve[system1, absolute1]
```

Wir stören nun die Daten ein wenig und versuchen dann erneut den Vektor der Konstanten, insbesondere also auch  $K1$ ,  $K2$  und  $K3$  zu bestimmen.

Die Störung ist so gewählt, dass der relative Fehler jedes einzelnen Wertes 1 Promille ist. Wir nehmen an, dass die Eingabedaten exakt bekannt sind und nur die Ausgabedaten gestört sind. Die gestörten Ausgabedaten sind also:

```
AusDatengest = AusNeu + AusNeu.Table[0.001.Random[], (Length[AusNeu])]
```

```
(103.66488858293724, 190.62190268466438, 157.86145938938807, 138.8389116483043,
220.13924235252247, 173.7244291735391, 110.81985186407674, 202.59451658379382,
169.5283582068621, 150.41928084826552, 235.93335364188175, 187.7915003240437,
194.9140931133021, 272.3118725903708, 207.54167998637317, 112.57200776201412,
210.09774379925105, 178.49817496815106, 156.35763049362603, 247.0069199109791,
199.00894417563802, 205.5545099701225, 287.6168136514507, 221.29195182556586,
260.9234728917731, 332.20538241759215, 245.55089112015597, 108.47986426060719,
212.67700122574797, 184.69516746772172, 155.8166972705882, 252.65446220272884,
207.37171000197247, 209.39152070651906, 296.94928627296696, 232.12482041857288,
269.72446691145507, 345.92573102820825, 258.934813198185, 337.2865258442513,
399.9646989881549, 288.24062186613014, 148.5337387093476, 253.05211938483646,
212.37474662368248, 205.86993341474187, 300.63189069853115, 239.30439948182044,
270.7284426268072, 353.3188965157775, 268.5633361800876, 343.67095808212616,
411.8467784060623, 300.8111989857574, 424.62900710038156, 476.0242660546778,
335.38659912183164, 134.5947246824738, 247.5057913116977, 214.01871478126458,
194.64542870137868, 297.7488916389245, 242.7519176216889, 262.9820211077318,
354.1409052245038, 274.3192689039262, 340.363818211767, 416.2580635919572, 309.01545499746607,
427.3450878653551, 485.12020490849244, 346.9532545326761, 524.242221311861, 560.7263787913317,
387.9536772600532, 114.29759402758732, 236.89509491887026, 212.0938855024256,
175.88194157204822, 289.07758586213725, 242.53222856725088, 247.1397393977524,
347.4728367518106, 275.88213123638707, 327.8998949572695, 413.3728028972797,
312.93709985164276, 419.72767518467253, 485.9872185475361, 353.50855791025765,
522.0845880814958, 566.8062684793271, 397.896129309774, 636.1667451508783, 655.1114049886239,
445.7544016514918, 113.1693101644702, 203.33947406606032, 153.68529103123743,
147.9836886422222, 231.00707742917328, 166.27265042104548, 105.18150753565388,
204.44901591018606, 161.50278053745447, 143.78654917203906, 235.55776523231216,
176.29267959717004, 186.59603350619636, 269.2051747050592, 192.2723119418379,
233.8724012177261, 306.07708143368575, 209.44865573704016, 123.42880353040873,
226.9201907903965, 179.1528076099299, 169.16252792840285, 263.58383149038184,
197.17761824200895, 220.14278496979654, 303.5530731798392, 216.45738079110575,
276.68969845907253, 347.6429746386957, 237.54255890970856, 338.8405690297748,
395.04881589735305, 260.1337377160529, 135.2221859683386, 243.84034489969125,
194.086805117886, 187.78575618491664, 285.9580141438614, 215.20015902015388,
246.6164587426356, 332.31136115820595, 238.15647247482212, 312.398129569098,
383.28598848911645, 263.0208172516134, 384.9257519462688, 439.1329489470345,
```

289.9833964606655, 465.2316002956846, 499.3890499668841, 319.2225831285624, 139.2594128746849, 254.6849369715632, 205.7515927093165, 198.03568809716216, 302.07509740508334, 229.8627663409192, 264.3578495761554, 354.3261937183658, 256.2838817533041, 338.7234769094829, 412.36105423238973, 284.95447099511944, 421.7085721331405, 475.45043464239626, 316.19269857264317, 513.2560066502809, 545.0247385201928, 350.33158162922706, 614.0127058125408, 620.2504463594081, 386.90171870265146, 134.75291498745514, 258.9779705975934, 213.70750115346388, 198.97055624788632, 310.713001525377, 240.43517276617658, 271.90756806342927, 368.61041914124286, 270.1329466726708, 354.29161039702143, 432.7193980364457, 302.6017568490829, 446.71115628259247, 503.250071691232, 337.87438215873, 548.8833159602839, 581.2061408718467, 376.8077049355505, 662.2444561486749, 666.2162374939105, 418.78835663461865, 787.1232117030427, 758.635374395989, 464.02015960581764, 121.44958105381546, 255.9359392883208, 217.80552190188183, 189.96531144636305, 311.31990566062575, 246.96353472307402, 268.6844629919775, 373.9731931332298, 279.2548344559174, 358.093877548489, 443.93784877396916, 315.14722994366093, 458.8489296311392, 521.2894294033434, 354.5152883413319, 571.4040873550372, 606.7603722738911, 397.6288633431622, 696.2130939874285, 700.8240840095148, 444.6912712940528, 834.5075523647829, 803.6932339226928, 495.7456092049617, 986.0338349461783, 916.3031961210091, 551.5224630681781, 170.9650327686933, 304.08093069862156, 248.82473354809747, 254.01542544629768, 370.61081509880165, 283.8032754163905, 348.9636507658222, 444.8660640750544, 322.2656354874181, 456.7493971231812, 528.7243370993104, 365.13671854989866, 578.323872664942, 621.4196904555351, 412.356817038863, 713.5714829153777, 723.3277642205416, 464.2161179461908, 864.6440061987938, 836.2238257687159, 520.6987214380324, 142.4169684283079, 289.2427312066473, 246.55202214970558, 227.99989814807452, 358.1486533203376, 283.2943096498212, 327.0729653631127, 436.47116916917327, 324.2687858084656, 440.64438560342006, 524.4557338157497, 369.9235261612519, 569.3775961288159, 623.1686944584438, 420.85981681573304, 714.3842913359074, 732.7512542409803, 476.50590938502467, 876.0228779004807, 853.8782905767234, 537.9849018789358, 105.03863748719587, 266.74678632396007, 240.16635760050667, 191.4339993789484, 337.2156419204349, 278.01324459428946, 292.9731695598895, 417.8839729942432, 320.60732041987666, 410.15894964976144, 509.3502461276282, 368.6489079835637, 544.5317278909216, 612.6193142646152, 422.2421357631112, 695.916248741037, 728.2390759959906, 481.63195897110955, 867.0676315354779, 856.6560209836898, 547.4592158566293, 145.69881762333762, 308.8399384420143, 268.26975791442237, 247.3585721207201, 390.1877803901911, 311.946937906759, 366.10730602026877, 483.9210867334601, 361.322277201125, 503.6947592124452, 590.6221975066417, 417.2853417237234, 660.7210408824957, 710.4282708848651, 479.34836137147647, 838.6719180054596, 844.5109278718083, 548.5686019884168, 124.8796799249488, 232.75026343361728, 162.63505854490032, 164.64836117815952, 262.6169387668232, 173.84714693720295, 207.91833114449295, 294.6682605891472, 185.86866144151514, 132.1678863038699, 248.51433258963985, 179.60600779478264, 179.05828157474923, 283.81548534942993, 193.90166868303058, 230.75761978137513, 322.4259903711536, 209.24558415395043, 287.53878889079886, 364.3241871752304, 226.02111223453042, 348.97895574013216, 409.3284537105345, 243.7602236909223, 118.54662325776553, 247.81157660020037, 188.44540310408235, 170.95074689801572, 287.96350576722796, 205.50376815065374, 228.99605612403832, 331.7594612621447, 223.97883693828962, 293.3304329914302, 379.60374181311363, 243.98259932706713, 364.1502641177033, 431.7051380320621, 265.6637523078271, 441.33970176363107, 488.2473614913814, 288.92556186984405, 525.6911622584589, 549.2846059289019, 314.2427850099423, 139.59904652712163, 273.59186830409675, 208.09696949351053, 201.85748396412833, 321.17315358963, 228.98385204644973, 271.27669147134725, 373.6262483965754, 251.6205499619163, 348.7007775375024, 431.4965571892858, 276.4453213846703, 433.82308023060654, 494.22557142173315, 303.43023590420177, 527.33300836241, 562.290205822951, 332.59786995937145, 629.9040614920682, 636.6161522909125, 364.1832647438001, 741.6679242187289, 716.7358687114709, 398.62374438802266, 150.66485636113418, 292.19244312063114, 224.272650064714, 222.36533980283156,

346.81150541876684, 248.7716395413359, 302.7072360150599, 407.8106518356269,  
275.68093062092754, 392.63804005647467, 474.53593138012604, 305.1435421571482,  
492.6600693202386, 548.1863714719051, 337.62627253938575, 602.7704949932445,  
628.5368279214617, 372.7342183967709, 723.6892068285055, 716.3802920005163, 411.0905933557117,  
855.8456568461106, 811.2541768807434, 452.8860523719613, 1000.110435153344, 913.9093843299113,  
497.46207000213644, 150.4331650404152, 301.7771359565414, 236.29558693257744,  
230.4945770707351, 363.2309374049874, 264.1223667471868, 321.17927880301886,  
431.7708668391656, 294.9593925135107, 423.13709915921453, 507.6495820790305,  
329.0396770811089, 536.975489887916, 591.5534444512443, 366.7192584115492, 663.7344189386848,  
684.1162968403731, 407.9343879991615, 803.1691907756365, 784.9194118256053, 453.413490207091,  
955.4736171624137, 894.937776394788, 502.23426112419145, 137.7887766084445, 302.0726283882056,  
243.7579730212285, 224.8422773348033, 368.9668400025417, 274.5733211054306, 324.3973070458811,  
444.5091417206833, 309.06240438891945, 437.49679756870006, 529.0266157048994,  
347.3801126845012, 564.4803574868274, 622.5915447631771, 390.0823609402026, 706.0504504264395,  
725.9392120167747, 437.0591171786455, 863.1587338868029, 839.891655281929, 488.6432301649538,  
112.79115992882716, 292.6007600775465, 246.60794903258753, 205.0584591956509,  
364.09705182669103, 279.6311914157306, 311.9979489885099, 445.3874518580125,  
317.12985820197144, 434.08575811534035, 536.6007933943022, 359.3817986874971,  
572.7177878080117, 639.3590273213604, 406.4156602707338, 727.5741913158649, 753.184459683218,  
458.9313099033224, 900.7035694932184, 879.5648705904555, 516.2976248733786, 171.3761920968527,  
348.56313002529185, 279.6248823371674, 283.32758806453876, 434.15767333481386,  
319.43598225274803, 412.54112676402616, 531.1062750530522, 364.46750638381997,  
559.9738452985953, 641.2056953135623, 415.48806192996443, 727.688523669585, 763.4578010648214,  
472.1569514305273, 915.3546006338919, 900.3212312833107, 535.6659112448283, 124.63179493898328,  
322.7344091187652, 274.58445637648435, 238.9990002966853, 410.63020046626355,  
315.7676917151157, 372.6256666167331, 512.1528851814085, 363.0570196281363, 527.2805808617294,  
627.0114544213735, 417.0898976612569, 703.9065337520689, 757.0995120235239, 477.6775409642399,  
903.7597721059747, 903.372041591772, 545.5537005683077, 180.74581470387804, 376.9540742755319,  
307.11285274561305, 316.1577260450334, 480.00299081329763, 355.4069667320352,  
474.5215922062037, 598.645261868749, 410.9781508601787, 657.4711706287613, 734.0673168626007,  
474.31975058686595, 865.573966027571, 886.5073264206237, 546.0508154410961, 110.5781517626011,  
333.7598759276755, 293.76526278527524, 244.42893706209964, 436.4971785038659,  
342.22602530449126, 403.2449023058448, 556.6335059439232, 398.49122920275084,  
589.0771874281434, 694.6274862841442, 463.47013952138656, 803.2471171631071,  
851.8184154789699, 537.5768855085865, 160.451194549611, 383.2571323841342, 324.3570587959269,  
316.27612805341226, 501.8984289080042, 380.23797245986515, 501.4048264821195,  
640.4315482783608, 445.74487310751266, 717.1834429812583, 800.4005293577459,  
520.628849861877, 966.0700807041056, 981.718147771514, 606.7723808966703, 135.16969935303646,  
261.8116047745404, 160.52147617074922, 176.5438533503353, 290.619841921866, 168.04350036782722,  
136.40465640401717, 276.95532731166014, 182.22444116838946, 186.51919394013842,  
312.3755370150638, 193.14733531343168, 240.99306416726859, 350.75866248059515,  
204.64558551559887, 299.7262553424405, 391.81259728306526, 217.25636680710878,  
363.55094112567065, 435.65450208446464, 230.57938361666783, 150.7007006507952,  
300.4647690279602, 203.9567512342522, 211.35602513496846, 343.9778152627801,  
218.41823562547395, 277.9413975372154, 391.2442731760887, 234.3124351622059,  
350.71595660515396, 442.2441994281284, 251.23261614172617, 429.40807876244264,  
497.31849290334077, 269.76465356387024, 514.9451502704491, 556.6006133767844,  
289.638545526366, 607.1373051966419, 620.3204564898091, 311.3160886155118, 135.76658673980273,  
302.409813047811, 216.87150414404888, 204.78042329031348, 352.27483394043963,  
234.4857876119794, 281.2304820172661, 407.0870585064557, 253.79040229756743,  
365.46266419743137, 466.76131752858004, 274.8871935210351, 457.97881340605005,  
531.776420605944, 298.2090699620393, 558.3263612847813, 602.3402694409621, 323.4056492795465,  
667.9983619433722, 678.3484902405007, 350.59550907706495, 786.4803950542384,  
760.1028758199177, 380.248320331395, 913.8303011356048, 847.4973256752954, 412.12227807647645,

164.9688110997093, 336.63664420676605, 239.95486853916162, 247.94523634428234,  
396.71675340931654, 261.903674819056, 340.60575313171813, 462.6897881936094,  
286.39535673027285, 442.92759461093823, 535.5613087118152, 313.2374600190776,  
555.9113687560549, 615.1329033656929, 342.91747929190115, 679.8862098693864,  
701.7207382688036, 375.11107387936306, 814.3466784146364, 795.036474547336, 410.2803761660161,  
960.9795193893794, 897.0135738606039, 448.69247246154777, 180.306911905174, 360.19075678314874,  
259.1224363371869, 276.70339242467907, 430.20822052382107, 285.18218140103045,  
384.8981756910498, 507.6347554560828, 314.57945976997786, 505.49068335740054,  
593.0173466994501, 347.21884971231384, 639.1199486335362, 687.5934448656195,  
383.4208003117949, 785.9989090062892, 790.5123929763, 423.2605531098157, 947.1391216141512,  
902.0519124069301, 466.9101116568978, 179.0795354843797, 372.0906418401528, 273.45834235807916,  
287.6827299911336, 450.6525104853207, 303.5205193813319, 410.51430317615774,  
538.6747274534954, 337.3231150627306, 548.4558700600055, 636.7228268233328, 375.71657094872586,  
701.8726030518421, 745.3982816894622, 417.8720958608875, 871.8245695005147, 864.4900339617843,  
465.03677670912185, 160.28465504806712, 371.20118481754406, 282.514515470895,  
279.0275615257782, 457.5466437288945, 315.7675477284234, 414.5105077764647, 555.0412796518747,  
353.91840783300665, 568.1197286685655, 664.0924946679969, 396.7015232933531,  
740.7174752799857, 785.9022391582276, 445.2069742053324, 932.094060839447, 920.7461335369519,  
499.47058326040826, 123.52868909821562, 357.3011622404275, 286.24360549842777,  
249.7700494777335, 449.3335955398045, 321.8335635264184, 395.94660419748544,  
554.3765669328865, 363.22284957509396, 562.4274834005679, 673.4282901091657,  
410.56587599588096, 751.7376862565033, 807.0443224698136, 464.1877232903921,  
963.7675569027139, 955.939184672714, 524.5329934262446, 200.52137721534172, 426.82684093528957,  
322.1793142807414, 353.70305344536814, 537.8160793448412, 365.8515259459044,  
530.8445338436496, 663.8176667621169, 416.1083609943163, 732.9289511184259, 807.2838403578365,  
474.20110130164045, 961.8482232262554, 968.065298924422, 539.9410930879005, 132.62586810846898,  
390.97417931888407, 317.2268403702979, 289.5246781109968, 504.41156293591774,  
361.7089286458952, 473.05644384475556, 636.1533321815642, 414.16097518817014,  
685.332585950499, 786.6065103485713, 475.146833781152, 927.19364552386, 957.9161294684027,  
544.6779876263366, 204.9721927310034, 457.0453812285594, 352.152094702399, 390.7916898549051,  
590.8356480473742, 404.92846449316494, 608.4669810383433, 745.7742642247554,  
467.18967638133205, 860.1959993208203, 923.513565056554, 539.7980491963091, 103.90510305597176,  
397.79202143025356, 338.0148976270637, 287.2955031221621, 530.8672109517152,  
389.82281090830236, 505.7107179805432, 686.9788792626455, 451.9791569447534,  
761.7165317375056, 867.7093197849878, 525.5863671680573, 166.7480119033359, 457.88832954814825,  
370.45642092928784, 380.4128650433758, 611.3610831956721, 430.9694920706033,  
634.8954184499072, 791.7673484893393, 503.37195819608, 237.6898583851951, 523.2761619396298,  
405.5062731533314, 484.42466997650627, 699.5157572316925, 474.99249596496446,  
778.5510780982595, 906.8194360955125, 558.8065059031964, 129.3145382528589, 297.0674738530298,  
167.9880612291704, 177.062821870481, 328.1489761677925, 172.80498615482432, 228.07816970637683,  
361.3012012874574, 178.01276100509355, 153.09344717988972, 331.97764032189406,  
199.34460711523553, 214.3045035602728, 372.78839473057764, 207.89204812375985,  
280.5402186183913, 416.4490442758615, 217.46051497354873, 351.45512726148405,  
463.5095790343852, 227.772699731915, 428.0998332922509, 513.7775027477336, 238.85501752037712,  
509.5914886808983, 566.5637618951406, 251.15330379543653, 118.84604435929222,  
326.07410121039567, 217.15813811828073, 189.5715742216585, 374.14694277254466,  
228.83562919613084, 267.04622509754546, 426.4956636140989, 241.7156085687299,  
350.99039523060964, 482.73189595396695, 256.062738131179, 442.29790429708515,  
543.8375943357711, 271.85958933213294, 540.7508332341524, 609.040903782886, 288.975477521277,  
647.0747769010883, 678.6222306521751, 307.798033998909, 760.9848997071317, 753.634755157378,  
328.0110069378997, 883.0028911473496, 833.4839547357273, 350.1116974505748, 103.4497847901538,  
332.23395933362974, 234.38874813065465, 185.83086644660688, 388.4925389838926,  
249.18717026792442, 276.9144469021367, 450.52483307682405, 266.0472107251475,  
376.7845123302299, 518.3255263808288, 284.78928455336825, 486.4449765103258,

591.5968398880476, 305.4780627927936, 605.3870435438308, 671.2853641534767, 328.49013530410326, 735.0014384514209, 757.4573939985329, 353.4783944694791, 873.8110630111943, 849.557814963617, 380.9551633997012, 138.48747235152024, 372.49685131239994, 259.2198973359095, 239.0465448791932, 441.45716144250815, 278.7193145853451, 351.0518351192279, 517.9465245663246, 300.63382701161254, 474.82416354091527, 601.5865777107844, 325.26617672144863, 610.9787316709835, 692.7338829962173, 352.9818020259985, 759.8136637451302, 792.3719890886383, 383.75751854210057, 921.5068523978949, 901.0461046425345, 417.9032846986324, 155.03972235831563, 400.25847402297524, 280.09841637561397, 273.1394078766684, 481.3891497704838, 303.7125082925755, 405.9084124230835, 571.6798186165906, 331.1410668676589, 553.2030511339182, 671.0402635045122, 361.801497056053, 716.2236064718305, 781.460771398535, 396.4112487067097, 895.9178195102207, 901.3975088069022, 435.50302524363764, 149.93835487206115, 412.8703637263865, 296.2904845850801, 284.0391898330642, 505.00946716911244, 323.7201696683064, 435.8874646242735, 608.5266934176176, 355.4195013940017, 606.0434776269628, 724.0420105612037, 392.16277783663867, 795.3340066927307, 851.7997407641193, 433.9251733618114, 121.2083380239126, 409.2852833179631, 306.99750148270516, 268.81017367252997, 510.72269164488625, 337.33222909024437, 437.5268528977122, 625.8291365124497, 373.3784750299031, 628.5049932988173, 755.1004285683665, 414.9422151359532, 842.3605459000746, 899.6226273912531, 462.7259073773443, 226.29265066483123, 498.1201984225517, 345.31836334207253, 408.65002451112656, 622.7729168462948, 384.02705682495434, 617.0978445415061, 763.7281191673416, 429.6704876818305, 853.262469454934, 923.4775147607955, 482.7073988074921, 156.92489902796285, 467.3197783909035, 347.25380112343083, 348.83206692350257, 598.4913114577873, 387.5573073457619, 570.583106818744, 749.2293706137716, 435.63761212541533, 824.3293309939555, 920.4465227131653, 492.6848774104197, 259.30716508242057, 554.4808552227744, 384.92952054407834, 489.64509477955664, 710.8544266791461, 434.4144483879986, 756.4920763475718, 890.9650776758003, 493.59407615127776, 143.66530629051383, 492.4900985964191, 377.77477990721894, 376.63357234505634, 651.1428127237316, 426.2164218591363, 650.4001143304524, 836.32705340255, 485.859900498923, 235.75986690053136, 573.1302473521192, 413.1305517567838, 509.75454833434463, 758.5549601925295, 470.893408522004, 831.3562927301724, 975.1692026145488, 542.0466507104946, 339.98898554310824, 661.2020361612845, 451.34986293884367, 659.7222190132672, 876.4766760958645, 519.6267077508004, 148.60716577466332, 550.0700526641024, 429.3713281793443, 457.2224299747403, 757.5601235007513, 492.43640705316284, 233.42279839371307, 625.7799296325401, 463.3171018615283, 588.0186726571909, 863.4773689358905, 535.9993048690931, 107.1727722250701, 328.77199925995353, 167.12147028956758, 158.99328897216682, 359.9524160623724, 167.54693172741648, 214.20159293203832, 393.29557823125356, 168.1931948877506, 114.66263949560548, 359.24920315476174, 205.5038321406607, 182.4034721841342, 401.75723332645873, 209.4021483513087, 254.91827675200193, 446.93317281593653, 214.22136873575894, 332.6042810072903, 495.1374870776635, 219.49594669957645, 415.184347981864, 545.9543501809691, 225.57688082395762, 503.51868594779836, 600.4610673761581, 232.21654278831772, 596.882868337109, 658.1447810836942, 239.79894588102175, 182.04177086553395, 425.04507871021525, 240.82271655816382, 272.15765081593275, 481.9440499344415, 249.26574771635873, 369.34926786401644, 543.427220408289, 259.0517192396442, 473.6857794547181, 609.2748643596935, 269.89013925294506, 586.0397219903771, 679.9026003354751, 282.26577650316784, 706.2034440044167, 755.825692783592, 295.9661495963882, 835.0054975969462, 835.7626436771, 311.24626382320207, 971.8856397116925, 921.3666766567144, 327.71265335485674, 199.14988100758578, 457.94730539984386, 268.5511173262227, 309.23743155959187, 528.500645522229, 281.0279597773687, 429.49178157528695, 605.4096905109049, 295.67688461739317, 560.403331599532, 688.0052283082272, 312.13574501493133, 701.4523161252729, 778.0638540938687, 330.7822764744965, 853.728545188135, 874.4437840983712, 351.5060857404907, 157.6014118117352, 452.01077507654117, 286.8614441868072, 283.72213459347927, 533.302064376284, 302.32948076178434, 422.69061470918587, 623.0269446873954, 320.2352965048939, 575.6491114406838, 720.5871197981888, 341.53470387098434,

742.4487232886758, 827.3657078951052, 365.6003808997066, 922.9949973778971, 942.880561171965, 392.62523603171815, 193.08849541083615, 495.53961917735313, 311.9867415402961, 344.56961516895046, 593.4549694852558, 331.9685611656763, 512.5244575318112, 701.7252880619632, 355.7123740373477, 698.7336898104439, 821.1201038954935, 383.7502485768832, 903.262682881146, 951.956500823433, 415.63380391427415, 199.19613614140792, 519.9045358018597, 332.8941926525631, 374.52225567276423, 632.8360005037978, 356.7604264642835, 570.8958544307927, 759.1784414926083, 385.87040811941114, 789.7710423689981, 899.8871250466864, 420.1111756349504, 172.51187678381967, 523.0078237561968, 348.4087007379686, 368.8292466426775, 649.5390178118153, 375.6711640698026, 590.7604159472111, 792.4029420562741, 408.6132932618831, 839.5995145442184, 953.4454538427705, 448.4874540479353, 111.5909356364764, 504.6939806519316, 359.33859786882556, 324.5546985231811, 641.438786172689, 387.9513884251214, 568.3461475894031, 798.6989966338447, 423.97019439619766, 844.5606074080255, 976.0669525011057, 468.36215230971857, 241.34865986077708, 608.8845963249739, 394.7724370872333, 501.82236597074757, 775.6971736751983, 432.1017377527672, 800.0659783041851, 967.8195991907395, 479.02462712627806, 121.60445027898264, 553.2735443897883, 397.53637110107184, 391.70887736950573, 726.2332746334365, 433.89512736908665, 705.5880233892018, 926.971050362668, 481.0714858775217, 242.19887800864524, 651.7153587744999, 431.56560141300673, 563.920696261996, 856.8907017784948, 476.99397028458577, 379.7390882752947, 761.11789026024, 468.2044534202392, 160.65719527102019, 643.4375073303344, 457.905771386569, 535.1331891063611, 880.7451804220783, 507.60178216472866, 275.8954908634682, 738.6711715908776, 490.7725781841453, 404.83184199697575, 842.5743876194035, 525.6400910572742, 548.6800394790073, 955.2196696840043, 562.2218532139825, 139.11957853639694, 433.7942126058058, 205.71508214295395, 216.0282056144501, 477.842207197322, 204.04116213946776, 297.41222624043655, 525.1906894429355, 202.5036408700712, 383.2090663594567, 574.4952697641759, 201.61123071469862, 474.0039801171242, 627.10952228318, 201.1612745250277, 569.9814606196657, 681.9334816776451, 201.0018210580346, 103.76444508738943, 443.9723511504029, 246.75276155477042, 200.1611798615033, 501.2318987655407, 247.96691712347456, 303.40934090244326, 562.2542062313884, 249.96025477214096, 414.1999390584413, 627.7676983756005, 253.09239141552376, 531.9770949927697, 698.0549521356787, 257.2268055401995, 657.380744353345, 771.6228021595468, 262.5912586021187, 790.5684821276834, 850.6397163132357, 268.9302985912216, 932.605412569681, 934.3944921545176, 276.47846909106266, 151.46978184072879, 500.74849811020886, 279.69229516116036, 275.33250634033357, 574.8463184226254, 284.31555686861856, 409.6294114621687, 655.3669543176319, 291.1347837684893, 554.2259836439523, 742.3960942666932, 299.46368633262006, 710.1075161200479, 835.8362735148108, 309.48856967184327, 877.0837126755807, 936.3950346970814, 321.8765635274154, 126.10893194793073, 511.73438294513664, 305.699733515911, 273.734452322253, 601.0255005956489, 313.171747654447, 435.19670815824804, 698.9772978248521, 323.3677181635192, 610.8424876305854, 805.1675250582298, 336.2286546461222, 801.7660004741044, 921.3816849511867, 351.80186064941785, 186.8399766141757, 574.4952201786164, 333.09024762137557, 368.6927097914186, 684.528106451536, 344.9696250671035, 568.9795207643797, 806.2801049786883, 360.4001882895853, 789.0938761581144, 939.7943056816175, 379.58173912183935, 210.47403663190894, 613.839315905525, 357.4220584301613, 425.5170268635177, 744.3675547277907, 372.51261042447345, 664.6647443513699, 889.8490054857646, 392.8043399236431, 191.0993801903119, 627.6318734138405, 377.55214895646156, 436.4405372233567, 776.1325926232727, 395.1055829020178, 711.8655797729073, 943.5228208776816, 419.2763680632839, 125.16476479568858, 612.8195003676748, 393.89307697652777, 396.04178592367253, 776.3407629532826, 412.14397567851745, 702.9397038134798, 963.2807530727767, 438.69969877653693, 302.42566721535536, 745.4578015877141, 425.22948520126283, 635.3761441491006, 946.5929791973026, 451.7732055591419, 157.10727800795323, 683.3889800307616, 435.3525318140053, 508.00732921461395, 894.9914700470791, 459.81516745583235, 323.9744920691053, 809.1823191134765, 464.8677447338892, 514.4527430410286, 949.761501773485, 497.15280465778216, 233.31285110985795, 807.8153433877355, 497.52099743850897, 394.9815182352064, 930.2927578790799,

525.2278611389594, 142.61681026406694, 837.8286964226256, 551.3212653267452,  
278.9674890438782, 944.7317772239718, 576.1523800308269, 129.19934183385456,  
490.34118411328956, 183.69542368601878, 208.45493818315194, 531.9269791204633,  
174.2251552285904, 291.4727254772974, 576.030126382787, 164.87976030493147, 378.27251826656266,  
621.4031889962607, 155.6535449206991, 128.0361537632329, 534.4646479544245, 245.51512059135857,  
235.61643789851345, 593.6270547946644, 238.80740540989436, 349.6808277562857,  
655.9382090725346, 232.63519512430602, 470.52072452178396, 722.5062033674003,  
227.19734507817188, 597.5710401806799, 792.9114860765228, 222.4727214346497,  
731.7083694992269, 866.8028393703997, 218.46692781659047, 872.9124753671804,  
945.1716432539099, 215.0815298753124, 148.36908668634413, 582.4145042114947,  
287.5428546210916, 288.1892334733578, 661.322326482647, 283.30289636899823, 438.04088595296105,  
745.3727334985142, 280.55346513067553, 598.0404580333084, 835.4930014091776,  
279.05977878414495, 768.5295879983222, 932.6505646293472, 279.0426746016825,  
182.4860737249827, 635.8556418384226, 320.6902223115755, 358.8326142814573, 735.8161507787992,  
319.1060685763137, 549.9173304353682, 844.9658162572898, 319.4112656226274, 755.2540450330301,  
962.4952050860843, 322.60073778219703, 111.80747672208862, 627.7574160097342,  
350.34578012774523, 318.0330489520624, 745.2568079936914, 349.250005053893, 543.7028570450005,  
874.1711808348929, 351.5890411860389, 159.56265636761893, 685.8762693699275,  
375.1717958147073, 409.6385943877382, 829.150495394913, 375.96819478527254, 685.6902216117923,  
987.8893212638524, 381.9199825598684, 153.47462114356895, 713.3556751368617,  
398.39050753240497, 445.12010969045093, 879.776015510736, 400.0052204504028,  
415.12249774630163, 892.585097392774, 421.21625075220277, 316.26779105596444,  
866.6433645032635, 440.55085097496374, 147.44590124983233, 802.2639360270248,  
460.5463936021108, 365.545453228967, 956.1452302117043, 479.3103501664044, 267.4373269361176,  
963.0661377796251, 516.192503496765, 123.91927188566929, 611.5342258594854, 220.69277959950753,  
234.48154283233367, 667.5601111109327, 204.55851570027033, 350.22656448644983,  
725.9490236730551, 188.61321389701666, 471.31129300514016, 786.8743808560338,  
172.77393199592507, 597.9848895214834, 850.9539749481174, 157.32660758861883,  
729.3038301541899, 918.2940405431134, 142.05352528287597, 867.2114638872883,  
988.3167920466763, 127.08999819682336, 183.91849661426542, 694.3128475358445,  
277.80171611844236, 337.3769814875128, 774.6642505867414, 263.00472617616293,  
499.1984810510069, 859.2526223280917, 249.04602349079352, 670.538065856704, 949.8917766844908,  
236.08529082981414, 165.66975473160738, 728.4071060117781, 324.50399916878774,  
360.8909890555752, 832.0122874469382, 310.1128791405454, 569.4226436372462, 943.9228479393257,  
297.50990603057255, 165.29504508123836, 768.8470070142005, 359.35607346838276,  
406.7678354105213, 897.6984712150229, 344.49321625596684, 298.77221125729733,  
878.1905218248666, 379.8968378986079, 366.2751890165479, 952.0170143828046, 401.3598061117553,  
354.82559272561974, 982.3922715177966, 424.18306678831965, 256.13891674299236,  
964.920847946563, 449.6045542458628, 167.93970743144143, 701.9302656883576, 131.43826643560385,  
273.0650711635475, 749.5355543771083, 105.1452900680669, 195.53917351348795,  
796.1946841629983, 241.5216900138597, 351.00861552858, 871.259993256509, 214.90816489742446,  
514.0318757293286, 950.1666389995072, 188.7530260294323, 215.91392530925407,  
866.3764595482343, 305.398310405768, 426.7530260672148, 971.374580832369, 277.4000028463053,  
127.99885089506407, 873.5707754718115, 361.98708330837064, 170.83601374286312,  
986.398654570564, 416.0384247655206, 158.98296334145695, 867.6514635022831, 159.89451056595362,  
301.60986493164893, 929.2708838893719, 122.06163391944183, 252.98942513830133,  
999.9977440526011, 255.42526530550634)

In den nächsten Zeilen berechnen wir den Konstantenvektor im Fall gestörter Daten:

```
EinDatengest = EingabeNeu + EingabeNeu* Table[0.0000.(Random[], Random[],
Random[]), (Length[EingabeNeu])]
matA2 = Flatten[Table[Monomvektor/.{x → EinDatengest[[l]][[1]], y → EinDatengest[[l]][[2]],
z → EinDatengest[[l]][[3]]}, {l, 1, Length[EinDatengest], 1}], 1]
```

```
system2 = Transpose[matA2].matA2
absolute2 = Transpose[matA2].AusDatengest
```

Unser neuer Konstantenvektor für den Fall gestörter Daten:

```
Ergebnis = LinearSolve[system2, absolute2]
(0.9760412791768351, 1.897295112115236, 4.028859249122118, 8.072748892262371,
16.091689836753215, 4.001193077124903, 8.009844211884657, 15.984027945754141,
31.959140103848206, 15.988216506036832, 32.02718330055968, 64.0834353688796,
64.0325386141843, 2.9199949102952556, 5.87575456494877, 11.934921783175712, 23.98017605213798,
11.944771407305645, 24.05265383326188, 48.03210832933926, 47.94154589297883,
96.04145087482686, 9.107122677818454, 18.0060177333394, 36.0213868051303, 35.98547597877273,
72.02124683616562, 144.051160586612, 27.12453126218872, 54.039626553249, 108.14172431608431,
81.12658770480809)
```

Also ist im Fall gestörter Daten  $K1$ :

```
Ergebnis[[2]]
1.897295112115236
```

$K2$  beträgt nun:

```
Ergebnis[[6]]
4.001193077124903
```

Und schliesslich ist  $K3$  im Fall dieser gestörten Daten:

```
Ergebnis[[14]]
2.9199949102952556
```

Wir rechnen nun nach, wie weit die zugehörigen Konstanten  $K1$ ,  $K2$ ,  $K3$  von den ursprünglichen Werten 2, 4, 3 in der euklidischen Norm abweichen (d.h. man summiert die Einträge zum Quadrat genommen auf und zieht dann die Wurzel):

```
Datenfehler = Sqrt[(Ergebnis[[2]] - ErgebUngest[[2]])^2 + (Ergebnis[[6]] - ErgebUngest[[6]])^2
+ (Ergebnis[[14]] - ErgebUngest[[14]])^2]
0.1301942080524223
```

Stört man also die Ausgabedaten, so dass in unserem Fall der relative Fehler ungefähr 1 Promille beträgt, so ist der relative Fehler zwischen den gestörten und den ungestörten Konstanten:

```
Datenfehler/ Sqrt[(ErgebUngest[[2]])^2 + (ErgebUngest[[6]])^2 + (ErgebUngest[[14]])^2]
0.02417645750097692
```

Zusammenfassend stellen wir also fest, dass der relative Fehler der Summe der Konstanten  $K1$ ,  $K2$ ,  $K3$  in diesem Beispiel um einen Faktor 24 grösser ist als der relative Fehler, mit dem man die Ausgabedaten stört.

Wir bestimmen nun noch, wie weit der GESAMTE gestörte Konstantenvektor, den wir mit Ergebnis bezeichnet haben, von der Form abweicht, die der ursprüngliche Konstantenvektor hat. Dies gibt Aufschluss darüber, ob das Modell konsistent ist. Wir fassen zunächst den Konstantenvektor als Abbildung von  $K1$ ,  $K2$ ,  $K3$  auf und bezeichnen diese Abbildung mit  $f$ :

$$f[K1_, K2_, K3_] = (1, K1, K1^2, K1^3, K1^4, K2, K1K2, K1^2K2, K1^3K2, K2^2, K1K2^2, K1^2K2^2, K2^3, K3, K1K3, K1^2K3, K1^3K3, K2K3, K1K2K3, K1^2K2K3, K2^2K3, K1K2^2K3, K3^2, K1K3^2,$$

$K1^2K3^2, K2K3^2, K1K2K3^2, K2^2K3^2, K3^3, K1K3^3, K2K3^3, K3^4$ )

Wir berechnen nun den relativen Fehler, der angibt, wie weit die Form des gestörten Konstantenvektors Ergebnis von der Form des ursprünglichen Konstantenvektors ErgebUngest abweicht. Diesen relativen Fehler bezeichnen wir als Modellfehler. Da die Einträge in dem gestörten Konstantenvektor Ergebnis aber Monomen in  $K1$ ,  $K2$ ,  $K3$  entsprechen, müssen wir den Vektor Ergebnis vorher noch normieren, damit der Fehler in jedem Eintrag des Vektors von der gleichen Grössenordnung ist.

```
L = Sqrt[Ergebnis[[2]]^2/3 + Ergebnis[[6]]^2/3 + Ergebnis[[14]]^2/3]
ErgebnisK = (x1, x2/L, x3/L^2, x4/L^3, x5/L^4, x6/L, x7/L^2, x8/L^3, x9/L^4, x10/L^2,
x11/L^3, x12/L^4, x13/L^3, x14/L, x15/L^2, x16/L^3, x17/L^4, x18/L^2, x19/L^3, x20/L^4,
x21/L^3, x22/L^4, x23/L^2, x24/L^3, x25/L^4, x26/L^3, x27/L^4, x28/L^4, x29/L^3, x30/L^4,
x31/L^4, x32/L^4)
DifferenzListe = f[K1, K2, K3] - ErgebnisK /. {x1 -> Ergebnis[[1]], x2 -> Ergebnis[[2]],
x3 -> Ergebnis[[3]], x4 -> Ergebnis[[4]], x5 -> Ergebnis[[5]], x6 -> Ergebnis[[6]], x7 ->
Ergebnis[[7]], x8 -> Ergebnis[[8]], x9 -> Ergebnis[[9]], x10 -> Ergebnis[[10]], x11 ->
Ergebnis[[11]], x12 -> Ergebnis[[12]], x13 -> Ergebnis[[13]], x14 -> Ergebnis[[14]], x15 ->
Ergebnis[[15]], x16 -> Ergebnis[[16]], x17 -> Ergebnis[[17]], x18 -> Ergebnis[[18]], x19 ->
Ergebnis[[19]], x20 -> Ergebnis[[20]], x21 -> Ergebnis[[21]], x22 -> Ergebnis[[22]], x23 ->
Ergebnis[[23]], x24 -> Ergebnis[[24]], x25 -> Ergebnis[[25]], x26 -> Ergebnis[[26]], x27 ->
Ergebnis[[27]], x28 -> Ergebnis[[28]], x29 -> Ergebnis[[29]], x30 -> Ergebnis[[30]], x31 ->
Ergebnis[[31]], x32 -> Ergebnis[[32]]}
```

Als nächstes bestimmen wir den Abstand in der euklidischen Norm als Funktion von  $K1$ ,  $K2$ ,  $K3$ , den unser Konstantenvektor ErgebnisK zu  $f(K1, K2, K3)$  hat.

```
Abstand[K1_, K2_, K3_] = Sqrt[Sum[(DifferenzListe[[i]])^2, {i, 1, Length[DifferenzListe]}]]
```

Als nächstes berechnen wir den kleinsten Abstand des Vektors ErgebnisK zum Graphen von  $(K1, K2, K3) \rightarrow f(K1, K2, K3)$ , indem wir das Minimum der Funktion Abstand bestimmen.

Wir teilen anschliessend das Minimum noch durch die Wurzel der Länge des Vektors ErgebnisK (hier: 32). Wir erhalten also als Modellfehler:

```
Modellfehler = FindMinimum[Abstand[K1, K2, K3], (K1, 0.619), (K2, 1.306),
(K3, 0.4155)]/Sqrt[32](0.009269894298653148, ((K1 -> 0.6520927006310425)/(4*Sqrt[2]),
(K2 -> 1.306290538549176)/(4*Sqrt[2]), (K3 -> 0.9797681461808856)/(4*Sqrt[2])))
```

Der erste Eintrag dieser Liste gibt den gesuchten Abstand wieder.

Es ist uns also gelungen, eine Datenbasis zu konstruieren, indem wir zunächst Konstanten  $K1$ ,  $K2$ ,  $K3$  gewählt haben und dann die Daten explizit ausgerechnet haben. Durch die Annahme, dass die Funktion  $\rho$  tatsächlich die im gesamten Abschnitt angenommene Form hat, und durch die Wahl unserer Konstanten und Eingabedaten (die wir durch Rasterung eines Würfels erhalten haben), kann es jedoch passieren, dass manche Ausgabedaten negativ sind. Wir haben dieses Problem berücksichtigt und alle Eingabedaten mit dazugehörigen Ausgabedaten eliminiert, deren Ausgabedaten negativ sind. Wir haben dann unsere konstruierten Ein- und Ausgabedaten leicht gestört und konnten mit Hilfe dieser gestörten Datenbasis die dazugehörigen Konstanten  $K1$ ,  $K2$ ,  $K3$  bestimmen und diese mit den ungestörten Werten (hier: 2, 4, 3) vergleichen. Dabei wurde festgestellt, dass der relative Fehler der Konstanten  $K1$ ,  $K2$ ,  $K3$  ungefähr um einen Faktor 24 grösser ist als der relative Fehler, mit dem wir jeden Eintrag der exakten Datenbasis gestört haben. Weiterhin ist es uns gelungen, den Modellfehler zu bestimmen. Dieser relative Fehler

gibt an, wie weit der gestörte Konstantenvektor von der Form des ursprünglichen Konstantenvektors abweicht, der eine Liste von Monomen in  $K_1, K_2, K_3$  ist (siehe ANLAGE 2, S.1). Dieser Modellfehler beträgt in unserem Beispiel ungefähr 1 Prozent.