Nichtlineares Fitten, Exponentialfunktion

- Siehe auch Skriptum Kapitel 14

Beim radioaktiven Zerfall ergibt sich bei einer Zerfallskette von Isotop 1 zu Isotop 2 (Halbwertszeit τ_1) und dem weiteren Zerfall von Isotop 2 (Halbwertszeit τ_2) folgender Typ von Gleichung für die Anzahl der Teilchensorte 2 nach der Zeit t

$$y(t) = a_1 \big[1 - exp(-a_2 t) \big] exp(-a_3 t) \tag{1}$$

Schreiben Sie nun ein MATLAB-Skript

`expfit,`

das die Parameter der Funktion 1 an die Daten in der Datei `'/temp/appdata/expfun1.dat'` anpasst. `expfun1.dat` enthält in jeder Zeile Messwerte für t und $y(t)$. Laden Sie diese Datei mit dem Befehl `load`, und speichern Sie die Zeitwerte in der Variablen `td` und die y-Werte in `yd`.

Hinweis:

Definieren Sie Gleichung 1 als einen `function_handle` auf eine `anonyme Funktion` mit Hilfe des Operators `@`. Mit einem `function_handle` können Sie wie mit einer `inline`-Funktion umgehen.

Zum Thema `anonyme Funktion` und `function_handle` lesen Sie bitte auch die Hilfe auf der Hints-Seite.

Zur nichtlinearen Anpassung sollen Sie die Funktion `nlinfit` verwenden. Im Gegensatz zum linearen Fitten, wo sich aus dem Lösen des linearen Gleichungssystems immer eine exakte Lösung ergibt, braucht man hier Anfangswerte für die Parameter a, die nicht zu weit von der Lösung entfernt sein sollen. Verwenden Sie in diesem Fall `[0.8, 4, 0.5]` als Startwerte. Bedenken Sie auch, dass bei `nlinfit` die Modellfunktion für y als $y(a, t)$ aufgerufen wird. Sie müssen ihre Funktion also so definieren, dass a den ersten Inputparameter darstellt. Speichern sie die angepaßten Parameter in einem Vektor mit dem Namen `a_fit`.

Der Zusammenhang zwischen den Parametern a und den physikalischen Größen beim Zerfall lautet:

$$\tau_1 = ln2/a_3 \quad , \quad \tau_2 = ln2/(a_2 + a_3) \quad , \quad y_{01} = a1a2/a3, \tag{2}$$

wobei y_{01} die Anzahl der Teilchen 1 zum Zeitpunkt $t = 0$ ist.

Bestimmen Sie nun auch die Extremmstelle $y_{max} = y(t_{max})$ (Variable: `t_max`) der Modellfunktion mit Hilfe der Routine `fminsearch`. Verwenden Sie hier 1.0 als Startwert.

Beachten Sie, dass `fminsearch`, wie der Name schon sagt, das Minimum einer Funktion findet. Um das Maximum zu erhalten müssen Sie also das Minimum der Funktion $-y(t, a)$ finden. Bedenken Sie auch, dass beim Suchen des maximalen Funktionswertes nun die Parameter `a_fit` festgehalten werden und die unabhängige Variable `t` variiert wird. Definieren Sie den `function_handle` auf die Modellfunktion dementsprechend.

Hinweis:

Sie müssen die Funktion nicht noch einmal komplett neu definieren. Sie können den `function_handle` den Sie zum Fitten der Parameter verwendet haben, als Basis nutzen (siehe auch Hinweise auf Hints-Seite).

Berechnen Sie auch die analytischen Ergebnisse für t_{max} (Variable: `A_tmax`) und y_{max} (`A_ymax`).

$$t_{max} = -ln(a_3/(a_2 + a_3))/a_2 \quad , \quad y_{max} = \frac{a_1 a_2 exp(a_3 ln(a_3/(a_2 + a_3))/a_2)}{a_2 + a_3}. \tag{3}$$

Vergleichen Sie das analytische Integral für die Fläche unter der gesamten Kurve

$$\int_0^\infty y(t)dt = \frac{a_1 a_2}{(a_2 + a_3)a_3}. \tag{4}$$

mit dem numerischen Ergebnis. Verwenden Sie dafür die Routine `quadl`. Auch `quadl` variiert die Zeit `t` um das Ergebnis zu erhalten. Übergeben Sie also wieder einen passenden `function_handle`.

Aufpassen muss man bei der oberen Grenze, da man bei numerischen Rechnungen nicht ∞ einsetzen kann. Man darf daher die obere Grenze weder zu klein noch zu groß wählen. Wählen Sie die Obergrenze hier so, dass analytisches und numerisches Ergebnisse bis auf die 10. Nachkommastelle übereinstimmen.

Hinweis:

Mit Hilfe des Befehls `fix` können Sie die Kommastellen einer Zahl abschneiden. Um nach der 10. Kommastelle abzuschneiden müssen Sie das Ergebnis der Integration also mit einer geeigneten Zahl multiplizieren, und nach dem Abschneiden der Kommastellen wieder durch diese Zahl dividieren. Speichern Sie das Ergebnis in den Variablen `F_num` und `F_an`.

Graphische Ausgabe:

Erstellen Sie einen Plot, der folgendes zeigt:

1. Die Datenpunkte markiert mit schwarzen x
2. Die Funktion mit den gefitteten Parametern als blaue Linie über einem Vektor `t`, der im Intervall $[0, 10]$ 200 Stützstellen enthält.
3. Das numerische Maximum dieser Funktion markiert mit einem roten o
4. Das analytische Maximum markiert mit einem grünen x

Halten Sie sich bitte wie immer an diese Reihenfolge.