

TMA4400 OG KJEMI

I middelalderen trodde de at lus var bra for helsen siden syke folk har få lus. Dette er et klassisk eksempel på sammenblanding av korrelasjon og kausalitet; den korrekte mekanismen går motsatt vei. Syke folk får ofte feber før de får andre symptomer, og lusen liker ikke høy kroppstemperatur, så de forlater verten før andre symptomer oppstår. Hvis du ikke kan måle feber¹, vil det derfor se ut som om lusen forlater verten *før* verten blir syk,² men dette er altså feil. I moderne kvantitativ vitenskap er man fullstendig opphengt i dette med å finne den korrekte **mekanismen**.³

Et av standardverktøyene for å kvantifisere den korrekte mekanismen når man først har funnet den, kalles **differensiallikninger**. Differensiallikninger er uunværlige for å modellere alle slags tidsavhengige prosesser i fysikk, kjemi, og biologi. I tidsavhengige prosesser bruker vi gjerne x (eller en annen passelig bokstav) for størrelsen som modelleres, t for tiden, og en spesiell notasjon for den tidsderiverte, oppfunnet av Isaac Newton:

$$\dot{x}(t) = x'(t)$$

Differensiallikninger er subtile greier, og det er lurt å studere de enkleste av dem ganske nøye.

Her er den aller enkleste. Prokaryoter og mange typer sopp (for eksempel ølgjær) deler seg ved såkalt avsnøring; dette betyr at de kloner seg selv fra tid til annen.⁴ *E. Coli* deler seg for eksempel omtrent hvert tjuende minutt ved vår kroppstemperatur 310 K. La $x(t)$ være antall bakterier ved tiden t . Dersom bakteriene alltid deler seg i to etter det samme tidsintervallet, er *den endringen* $\dot{x}(t)$ *proporsjonal med antall bakterier* $x(t)$:

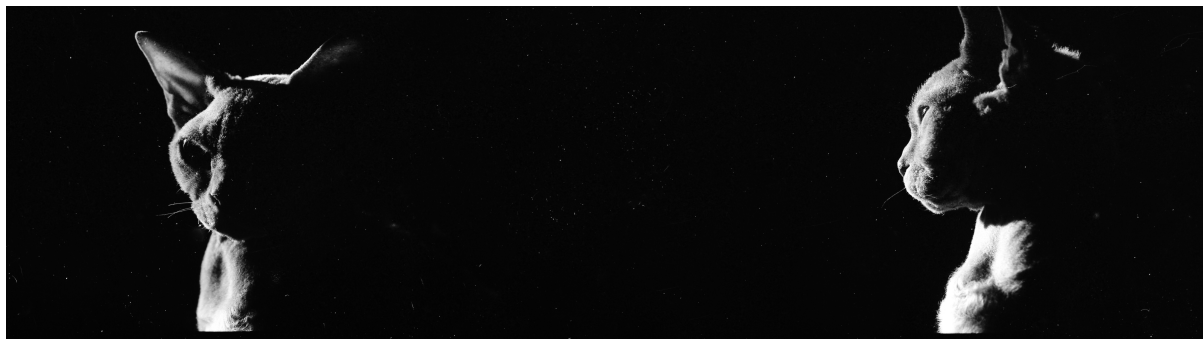
$$\dot{x}(t) = \lambda x(t)$$

Det er en spesiell grunn for å kalle proporsjonalitetskonstanten λ ; dette vil bli klart litt lenger ut i semesteret. I biologi kalles λ **vekstraten**.

1 Dersom $\lambda = 1$, er likningen så enkel at selv barn i barnehagen kan løse den:

$$\dot{x}(t) = x(t)$$

Finn en løsning.



¹Pålitelige termometere ble ikke oppfunnet før på 1700-tallet: <https://en.wikipedia.org/wiki/Thermometer>

²<https://www.ecdc.europa.eu/en/all-topics-z/disease-vectors/facts/factsheet-lice-phthiraptera>

³https://en.wikipedia.org/wiki/Scientific_method

⁴<https://snl.no/celledeling>

Hvis du slår opp i en tabell over derivasjonsregler, finner du nok regelen

$$\frac{d}{dt}e^t = e^t$$

og hvis du ser nøye etter, ser du vel at dette i bunn og grunn er det samme som $\dot{x} = x$. Med andre ord passer $x(t) = e^t$ i likningen. Men det gjør også

$$x(t) = ce^t$$

der c er en vilkårlig konstant.

2 Dobbeltsjekk dette.

Vi har altså en hel familie av løsninger. Dette kan vi utnytte som følger. Dersom man har en petriskål full av bakterier og ønsker å spå hvor stor kulturen er etter så og så lang tid, må man starte med en kultur på en gitt størrelse. I matematikk kalles dette en **initialbetingelse** eller et **initialkrav**:

$$x(0) = x_0.$$

Kombinasjonen av en differensiallikning og en initialbetingelse kalles et **initialverdiproblem**.

3 Finn løsningen til initialverdi problemet $\dot{x} = x$, $x(0) = 2$.

Som sagt deler *E. Coli* seg omtrent hvert 20. minutt ved vanlig kroppstemperatur, og

$$\dot{x} = \lambda x \quad x(0) = x_0$$

er en enkel modell for veksten. En bestemt verdi $x(t)$ kan du tenke på som totalt antall bakterier i et bestemt volum eller totalt antall bakterier per liter eller arealet bakteriene dekker i en petriskål eller noe annet i den dur. Alt er lov så lenge det er korrekt, og du er konsistent.

4 Finn løsningen til $\dot{x} = \lambda x$, $x(0) = x_0$.

Verdien til vekstraten λ avhenger av hva vi måler t i. Finn λ for *E. Coli* dersom t måles i

5 timer **6** minutter **7** sekunder **8** 20-minutters inkremitter (denne blir pen)

Hvis du synes alt dette er litt corny, kan du ta i betraktning denne videoen av bakterievekst:
<https://www.youtube.com/watch?v=gEwzDydcIWc>

5678 Stopp videoen om lag en gang i sekundet og tell antall bakterier på skjermen.



Fra gymnasen sitter du antagelig igjen med følgende leveregel:

$$\text{INTEGRASJON} = \text{ANTIDERIVASJON}$$

Dette er feil, men en naturlig konklusjon å trekke etter gymnasen. At man sitter igjen med et slikt inntrykk, skyldes **analysens fundamentalteorem**:

$$\int_a^b f'(t) dt = f(b) - f(a)$$

Denne, sammen med **kjerneregelen** eller **integrasjon ved substitusjon**:

$$f(g(b)) - f(g(a)) = \int_a^b \frac{d}{dt} (f(g(t))) dt = \int_a^b f'(g(t)) g'(t) dt$$

og **produktregelen** eller **delvis integrasjon**:

$$f(b)g(b) - f(a)g(a) = \int_a^b \frac{d}{dt} (f(t)g(t)) dt = \int_a^b f'(t)g(t) dt + \int_a^b f(t)g'(t) dt$$

er det man fokuserer mest på på gymnasen, for det er så enkelt lage eksamensoppgaver om det.

Det finnes empirisk evidens for at Homo Sapiens' store styrke er å følge oppskrift.⁵ Nå skal du få en oppskrift for å løse differensiallikninger:

- 1: Herj litt med likningen. Gang eller del med noen greier.
- 2: Integrer med en av reglene over. Gjør du steg 1 riktig, får du det til, men det trengs gjerne litt erfaring får å finne korrekt steg 1.

Oppskriften funker stort sett på alle difflikninger dersom de faktisk kan løses med penn og papir. Jeg skal nå illustrere med et eksempel, la oss løse

$$\dot{x}(t) = \lambda x(t) \quad x(0) = x_0.$$

Steg 1 er å skrive alt på én side

$$\dot{x}(t) - \lambda x(t) = 0$$

gange likningen med $e^{-\lambda t}$, og så observere at

$$0 = e^{-\lambda t} (\dot{x}(t) - \lambda x(t)) = \frac{d}{dt} (e^{-\lambda t} x(t)).$$

Hvis vi nå bruker analysens fundamentalteorem med $f(t) = e^{-\lambda t} x(t)$, $a = 0$ og $b = t$, får vi

$$e^{-\lambda t} x(t) - x(0) = 0,$$

og bruker vi $x(0) = x_0$ og løser for $x(t)$, sitter vi til slutt igjen med

$$x(t) = x_0 e^{\lambda t}.$$

Nå har jeg brukt bestemt integral, og da blir det ikke noen integrasjonskonstant. Resonnementet funker fint med ubestemt integral óg; dette er mest smak og behag.

⁵https://www.eva.mpg.de/documents/Springer/Call_Copying_AnimCog_2005_1555317.pdf
https://www.eva.mpg.de/documents/Wiley-Blackwell/Tennie_Push_Ethology_2006_1555112.pdf

Styrken til differensiallikninger er at en og samme differensiallikning kan modellere vidt forskjellige fysiske prosesser. Dette hjelper oss til å klassifisere fysiske fenomener etter *oppførsel istedet for innpakning*. Nå tar vi en helt annen modell som leder til nøyaktig samme differensiallikning.

Første Mosebok påstår at jorden er omtrent seks tusen år gammel. Hvis dette er sant, er det noe galt med vår forståelse av grunnstoffet karbon. Karbon forekommer i de tre isotopene C-12, C-13 og C-14. C-14 er et ustabilt isotop, og halveringstiden er på omtrent 5700 år, men C-14-konsentrasjonen i atmosfæren ligger allikevel nogenlunde stabilt på grunn av kosmisk stråling og et par atombombeprøvesprengninger. Når du puster utveksler du karbon med atmosfæren, og derfor er C-14-konsentrasjonen i kroppen din og i atmosfæren omtrent den samme. Når du dør blir du avskåret fra denne utvekslingen, og etter 5700 år vil C-14-andelen i kroppen din være omtrent halvert. Siden det finnes fossiler som har vesentlig lavere C-14-andel enn femti prosent, er jorden pent nødt til å være mye eldre enn 6000 år. Med andre ord: om du tror at jorden er 6000 år gammel, kan du ikke samtidig tro på kjernefysikk. Du er pent nødt til å velge en av dem.^{6 7}

Radiokarbondatering modelleres av akkurat den samme likningen som *E. Coli*.⁸ Dersom t måles i år og $x(t)$ er C-14-konsentrasjonen, tilfredsstiller x likningen

$$\dot{x}(t) = -\frac{\ln 2}{5700}x(t)$$

der $\lambda = \ln(2)/5700$ kalles **desintegrasjonsskonstanten** eller **nedbrytningskonstanten**.

9 En død *Felis silvestris lybica*⁹ inneholder omtrent en tiendedel av min C-14-konsentrasjon. (Jeg lever ennå.) Finn ut omtrent når dyret avgikk med døden.

10 Tritium¹⁰ har halveringstid på 12 år og 3 måneder. Finn desintegrasjonsskonstanten.



⁶ Jorden er faktisk ganske gammel: https://en.wikipedia.org/wiki/Uranium-lead_dating

⁷ <https://www.nature.com/articles/s41586-021-03972-8>

⁸ https://en.wikipedia.org/wiki/Radiocarbon_dating

⁹ *Felis silvestris lybica* er den ancestrale huskatten: https://en.wikipedia.org/wiki/African_wildcat

¹⁰ https://en.wikipedia.org/wiki/Isotopes_of_hydrogen

I kjemi er det vanlig å skrive

$$\frac{d[A]}{dt} = -k[A]$$

der $[A]$ er konsentrasjonen av stoffet som halveres, så egentlig burde den ukjente i forrige eksempel hete $[^{14}_6\text{C}]$ og ikke x . Men hvis du så din første differensiallikning i dag og så måtte dechifrere likningen

$$\frac{d}{dt} [^{14}_6\text{C}] = -\frac{\ln 2}{5700} [^{14}_6\text{C}]$$

kan det tenkes du ikke ville skjønne noe som helst bare fordi den ukjente hadde et rart navn du ikke var vant til.¹¹ Nå skal vi se på enda en helt annen situasjon som gir opphav til den samme differensiallikningen, og da støter vi på et uungåelig notasjonsproblem.

La oss finne ut hvordan trykket varierer med høyden i en høy og tynn sylinder dersom den er fylt av en ideell gass.¹² Nå er du blitt vant til at den ukjente størrelsen i en differensiallikning heter $x(t)$, men nå skal jeg sette opp en differensiallikning for trykket som funksjon av høyden, og du er antagelig vant til at trykket heter p og at høyden h , så da får det nesten bli $p(h)$ og ikke $x(t)$. Jeg skal bruke den ideelle gasslov¹³

$$pV = NkT$$

og dersom jeg hadde skrevet den

$$xV = NkT$$

samt brukt t istedet for h for høyden, hadde noen garantert blitt forvirret av dette også.

Så da får det bli $p(h)$. Hvis vi antar at trykkforskjellen mellom h og $h+dh$ kun skyldes vekten av gassen mellom disse to høydene, kan vi skrive (trykket er naturligvis høyere ved h enn ved $h+dh$)

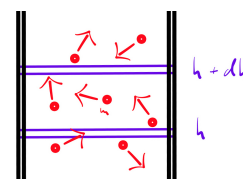
$$p(h) - p(h+dh) = \frac{mgN}{V}dh$$

der N er antall gassmolekyler mellom h og $h+dh$, m er massen til hvert molekyl, og g er tyngdeakselerasjonen. Jeg har også brukt at arealet av tverrsnittet kan skrives V/dh , der V er volumet mellom h og $h+dh$. La oss nå bruke den ideelle gasslov, og dele på dh :

$$\frac{p(h+dh) - p(h)}{dh} = -\frac{mg}{T}$$

Dersom vi lar $dh \rightarrow 0$ og antar at T er konstant, får vi differensiallikningen

$$p'(h) = -\frac{mg}{T}p(h).$$



- 11** Anta at dette er en modell for trykket i atmosfæren, finn trykket som funksjon av høyden over havet, og sammenlikne med faktiske kurven. (Søk på nett.)



¹¹Det går rykter om at det en gang var en instituttstyrer som satt ut et helt totimersmøte og trodde at diskusjonen handlet om auditoriet R2 i realfagsbygget, mens det i realiteten handlet som om faget R2 i videregående skole.

¹²https://en.wikipedia.org/wiki/Ideal_gas_law

¹³Jeg skriver NkT istedet for NkT . Det er lettere å huske siden det rimer på "NTH"

Dersom vi nå bare kompliserer ecoliradiokarbondateringatmosfæretrykksdifferensiallikningen litt og slenger på en konstant β :

$$\dot{x} = \lambda x + \beta$$

får vi en modell for et par helt andre ting.

12 Vis at løsningen er

$$x(t) = ce^{\lambda t} - \beta/\lambda$$

der c er en vilkårlig konstant.

(Du kan kopiere resonnementet på side 2.)

Den første modellen vi får er Newtons avkjølingslov:

https://en.wikipedia.org/wiki/Newton%27s_law_of_cooling

La oss si at vi har en kokt elgtunge med temperatur $T(t)$ som ved tiden $t = 0$ har temperaturen T_0 , og så setter vi den inn i et kjøleskap med temperatur T_k . Newtons avkjølingslov sier at temperatur-
endringen $\dot{T}(t)$ er proporsjonal med temperaturforskjellen mellom kjøleskapet og elgtungen:

$$\dot{T}(t) = \alpha (T_k - T(t)) \quad T(0) = T_0$$

Proporsjonalitetskonstanten $\alpha > 0$ inneholder all informasjon om hvor fort varmekraften går mellom elgtungen og omgivelsene, og varmekapasiteten til elgtungen og så videre. Det er lurt å holde tungen beint i munnen, sortere alt slik vi pleier, og se at dette er en likning på formen over.

13 Hva er λ og β , og hva er løsningen?

(Hint: Har du λ og β , har du også løsningen, jf. forrige oppgave.)

Jeg har brukt Newtons avkjølingslov med hell et par ganger når jeg skulle brygge øl og ikke hadde spiralkjøler. Vørteren må kjøles fra 373 til 298 K (da skal gjæren oppi), og dette tar noen timer. Dersom du måler temperaturen på minst to forskjellige tidspunkt, kan du estimere α og så gjøre et anslag på når temperaturen er riktig. Dette er gunstig, for da kan man gjøre noe annet i mellomtiden. Hvis du også vil lære å gjøre dette, kan du løse følgende gamle eksamensoppgaver i TMA4100.

14 En elgtunge med temperatur 6°C settes på kjøkkenbenken. Etter to timer er temperaturen steget til 13°C , og lufttemperaturen i kjøkkenet var 20°C . Finn α og lag et plot av temperaturen.

15 Da temperaturen var 15°C , ble elgtungen satt inn igjen i kjøleskapet. En time senere var temperaturen i tungen sunket til 12°C . Hva var temperaturen i kjøleskapet? Anta samme α som i forrige oppgave.

Klassiker! Oppgave 7 herfra:

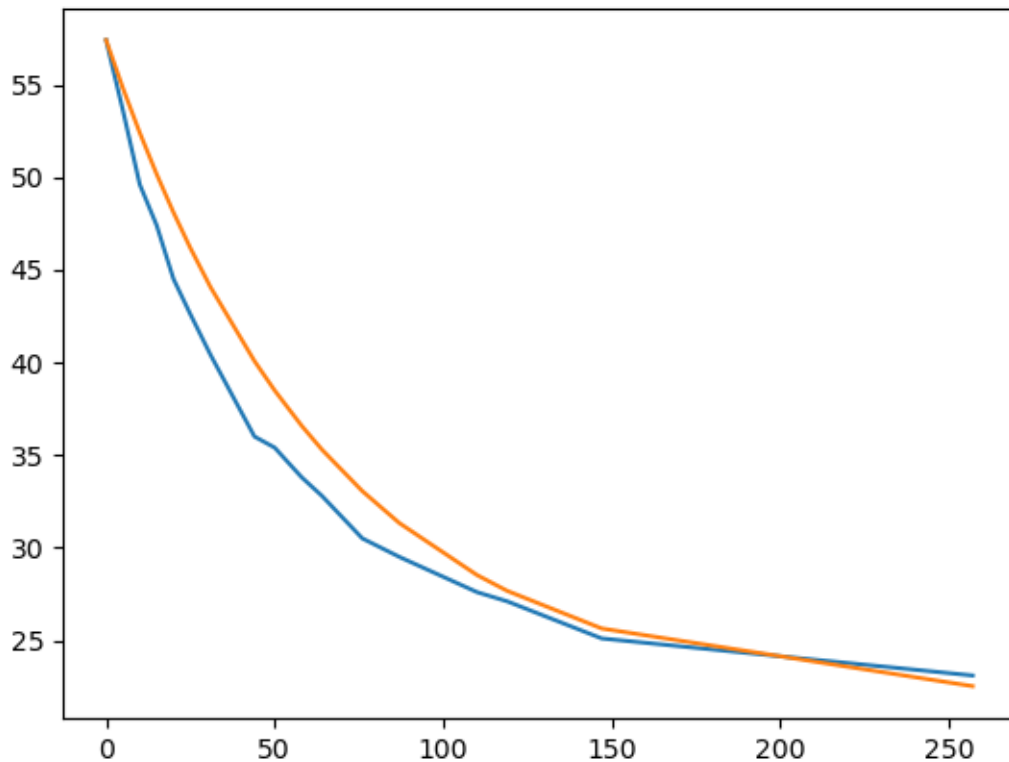
https://wiki.math.ntnu.no/_media/tma4100/eksamen/tma4100_2013h.pdf



Hvis du ikke tror på at Newtons avkjølingslov har noe for seg, kan du studere dette plottet av målte temperaturer (blå) i en liten rektangulær boks med vann som jeg lot avkjøle på kjøkkenbenken en tidlig morgen her i Vallegata 8 i Norges hippeste strøk St. Hanshaugen. Den første temperaturmålingen var 57.4 grader, og temperaturen i rommet var stort sett 21.8. De små uregelmessighetene i kurven skyldes det dårlige termometeret mitt og unøyaktige tidspunkt for målingene. I tillegg ser det ut til at formen på Newtons avkjølingslov bommer litt på stigningen på begynnelsen. Antagelig har det med fordampning å gjøre; Newtons avkjølingslov tar ikke høyde for det, og vann fordamper raskest ved høy temperatur.

Mer realistisk 15 Finn ut omtrent hva α er i dette tilfellet.

(Dette kan gjøres på flere måter; til våren skal vi lære å gjøre det ordentlig.)



Newtons avkjølingslov og E. Coli og radioaktiv nedbrytning modelleres av den samme differensiallikning. Dette er grunnen til å lære matematikk i et nøtteskall - ett og samme initialverdiproblem

$$\dot{x}(t) = \lambda x(t) + \beta \quad x(0) = x_0$$

med løsning

$$x(t) = \left(x_0 + \frac{\beta}{\lambda}\right) e^{\lambda t} - \frac{\beta}{\lambda}$$

er en modell for så mange forskjellige ting at det er galskap å bli ingeniør uten å lære seg det.

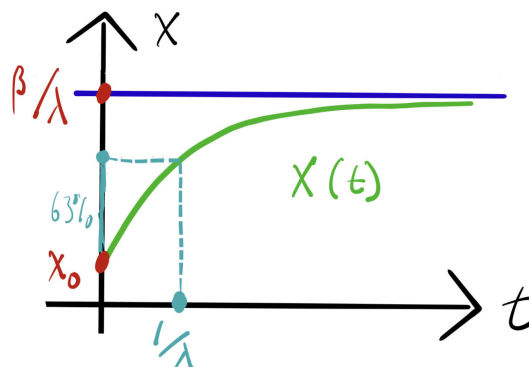
Matematikere foretrekker av ymse grunner å bytte fortegn på a og sortere likningen slik at alt som involverer den ukjente x står på den ene siden av likningen:

$$\dot{x}(t) + \lambda x(t) = \beta$$

Løsningen blir da

$$x(t) = \left(x_0 - \frac{\beta}{\lambda}\right) e^{-\lambda t} + \frac{\beta}{\lambda}$$

istedet. Til høyre er et generisk plot.



Vi kaller $1/\lambda$ **tidskonstanten** til differensiallikningen.¹⁴ Siden $1/e \approx 0.36787944117$, ser vi at ved $t = 1/\lambda$, har x nådd om lag 63 prosent av veien fra x_0 til β/λ . Dette initialverdiproblemet er forresten et eksempel på et **lineært tidsinvariant system**¹⁵ og hvis du sier til en gammel ingeniør at du har et LTI-system med tidskonstant sånn og sånn, vil figuren over umiddelbart dukke opp på vedkommendes hjernebark. Til og med leger bruker dette; naboen min er nukleærmedisiner.¹⁶

20 Finn tidskonstantene til alle problemene du har løst så langt.



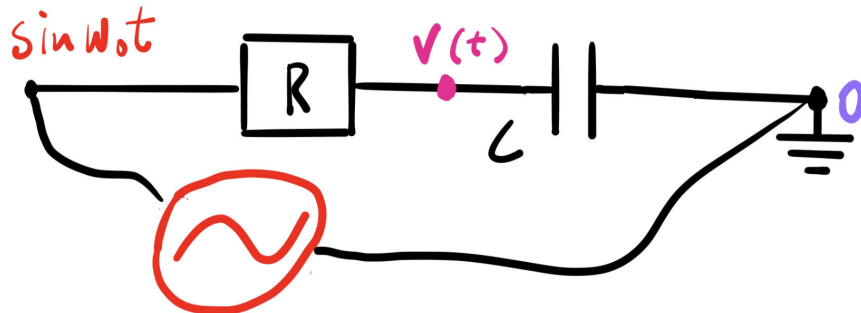
¹⁴https://en.wikipedia.org/wiki/Time_constant

¹⁵https://en.wikipedia.org/wiki/Linear_time-invariant_system

¹⁶<https://link.springer.com/book/10.1007/978-1-4614-4012-3>

Stikkontakten i veggen har ikke likespenning, slik som et batteri. Spenningen er mere sinusoidal, for den er generert av en roterende turbin i et vannkraftverk.¹⁷ Dersom du bytter ut batteriet i RC-kretsen med en sinusoidal spenning med vinkelfrekvens ω_0 , gir Kirchhoffs spenningslov

$$RC\dot{v}(t) + v(t) = \sin(\omega_0 t).$$



Det går faktisk an å utlede en formel for løsningen til

$$\dot{x}(t) + \lambda x(t) = f(t) \quad x(0) = x_0$$

der x er den ukjente og f er en gitt funksjon, kalt **påtrykket**. Påtrykket er noe som leverer en påvirkning av systemet som er *uavhengig av oppførselen til x* . Vi har behandlet spesialtilfellet $f(t) = \beta$, men nå kan altså f få være hva som helst. Trikset er å gjette på en løsning på formen

$$x(t) = c(t)e^{-\lambda t}.$$

Det er lettere å forstå hvor denne ideen kommer fra når man studerer systemer av differensiallikninger, så det skal vi komme tilbake til et annet semester, men la oss nå teste ut hva som skjer. Dersom vi setter $c(t)e^{-\lambda t}$ inn i likningen, får vi en pen kansellering, og så står vi igjen med

$$\dot{c}(t)e^{-\lambda t} = f(t).$$

Vi kan nå gange opp med $e^{\lambda t}$ og integrere:

$$c(t) = \int_0^t f(s)e^{\lambda s} ds$$

Vi har nå en funksjon

$$x(t) = c(t)e^{-\lambda t} = e^{-\lambda t} \int_0^t f(s)e^{\lambda s} ds$$

som løser initialverdi problemet

$$\dot{x}(t) + \lambda x(t) = f(t) \quad x(0) = 0.$$

Å finne en løsning som tilfredsstiller $x(0) = x_0$ er nå lett - vi bare legger til $x_0 e^{-\lambda t}$ (dette går bra siden den kansellerer på venstresiden av differensiallikningen), og får

$$\begin{aligned} x(t) &= x_0 e^{-\lambda t} + e^{-\lambda t} \int_0^t f(s)e^{\lambda s} ds \\ &= x_0 e^{-\lambda t} + \int_0^t f(s)e^{-\lambda(t-s)} ds \\ &= x_h(t) + x_p(t) \end{aligned}$$

¹⁷https://en.wikipedia.org/wiki/Alternating_current

der x_h står for **homogen løsning** og x_p for **partikulær løsning**. Uttrykket

$$\int_0^t f(s)e^{-\lambda(t-s)} ds$$

kalles en **foldning** eller **konvolusjon**. Hvis du har lest en mer avansert bok om differensiallikninger vet du at dette er den eneste løsningen du noensinne kommer til å finne.

21 Denne utledningen kan du bli spurt om på eksamen.

22 Løs $RC\dot{v}(t) + v(t) = \sin(\omega_0 t)$ $v(0) = v_0$.



UKENS NØTTER

Da jeg var student, syntes jeg alt dette var litt irriterende, for jeg skjønnte ikke hvordan man kunne være sikker på at det ikke fantes noen andre løsninger. Løsningen til

$$\dot{x} + ax = 0 \quad x(0) = x_0$$

er

$$x(t) = x_0 e^{-at}.$$

og dette er faktisk den eneste løsningen.

2 Vis dette.

3 Initialverdiproblemet

$$\dot{x} - \sqrt{x} = 0 \quad x(0) = 0$$

har flere løsninger. Finn to av dem.

Det er andre differensiallikninger enn de vi har studert i denne økten som lar seg løse analytisk. Trikket er det samme - gang eller del med et eller annet og integrer.

4 Fallskjermlikningen

$$\dot{v} = 1 - v^2$$

er en separabel likning som modellerer farten til en fallskjermhopper. Løs likningen med forskjellige initialkrav, plott løsningene oppå hverandre, og forklar hva som skjer.

Differensiallikninger har i noen tilfeller enorm prediktiv kraft. Hvis du skal sende en rakett til månen, må du løse en haug med differensiallikninger bygget på Newtons gravitasjonslov. Men realistisk modellering er fryktelig komplisert - noen av de enkle modellene vi studerer her passer greit til måledata (for eksempel RC-kretsen), mens noen er håpløst inadekvate (for eksempel atmosfæretrykkmodellen). Vi må allikevel gjennom dem, for det er umulig å forstå kompliserte modeller uten å først forstå enklere modeller. Ecolimodellen

$$\dot{x} = ax \quad x(0) = x_0 \quad a > 0$$

spår eksponensiell vekst for all fremtid. Men som David Attenborough i 2013 uttalte under et foredrag i The Royal Geographical Society:

"Anyone who thinks that you can have infinite growth in a finite environment is either a madman or an economist."¹⁸

Dyr som formerer seg kan sjelden fortsette med det uten å før eller siden oppleve noen som helst form for begrensning i veksten. De må jo ha mat. Maurkolonier og sjimpanseflokker dreper hverandre.

¹⁹ Den enkleste utvidelsen for å inkorporere dette i modellen vi startet med, er å erstatte a med en positiv funksjon som har et nullpunkt i den bestanden x som maksimalt kan opprettholdes på området. Hvis vi gjør det enkelt og sier at denne funksjonen skal være en rett linje, får vi det **logistiske problemet**²⁰

$$\dot{x} = a(1 - x/k)x \quad x(0) = x_0 \quad a > 0, k > 0$$

¹⁸Sitatets opprinnelse er noe usikker. Det var nok ikke han som fant det på.

¹⁹https://en.wikipedia.org/wiki/Gombe_Chimpanzee_War

²⁰https://en.wikipedia.org/wiki/Logistic_function

der k er en konstant som kalles **bærekapasiteten**. Hvis du ser nøye på likningen, vil du nok se at når x stiger mot k , vil vekstraten synke mot null, slik at dyrene formerer seg saktere og saktere. Denne likningen kan løses, men det er ikke trivielt.

$$x(t) = \frac{kx_0 e^{at}}{k - x_0 + x_0 e^{at}}.$$

- 5 Løs og plott i python for forskjellige a , k og x_0 .
(Søk opp "separable equation".)

- 6 Likningen

$$\dot{x}(t) + p(t)x(t) = q(t)$$

løses på samme måte som Balchens foldingstriks; det er bare litt mer hårete. Prøv.

Kjemiske reaksjoner kan gå fort og langsomt, og det finnes differensiallikninger som modellerer reaksjonshastighet. Reaksjonshastighet er viktig, for noen reaksjoner bør helst gå fort (for eksempel forbrenning) mens andre bør gå sakte (for eksempel korrosjon). Atmosfæren består av 78 prosent nitrogen og 21 prosent oksygen. Ved vanlig trykk og temperatur reagerer ikke disse, men ved for eksempel lynnedslag eller forbrenning i dieselmotorer eller skogbrann blir det mer fart i dem, og så kombinerer de til nitrogenoksider (NO_x). Det er disse som gir Los Angeles sin berømte smog: <https://www.latimes.com/local/la-me-air-pollution-0428-pictures-photogallery.html>

I atmosfæren er det mange forskjellige reaksjoner mellom nitrogenoksider og oksygen. En av dem er at nitrogendioksid splitter i nitrogenmonoksid og oksygen:



I noen tilfeller av denne går visst reaksjonsratene som kvadratet av konsentrasjonene

$$\frac{d[A]}{dt} = -k[A]^2$$

der **reaksjonshastigheten** k er en empirisk konstant som avhenger av trykk og temperatur og de støkiometriske koeffisientene og så videre.

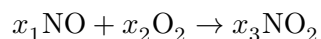
- 7 Det ryktes på internett at $k = 0.54$ per mol per sek for reaksjonen over ved 300 grader celsius. Løs likningen

$$\frac{d[\text{NO}_2]}{dt} = -k[\text{NO}_2]^2.$$

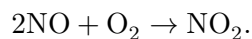
- 13 Bildet til høyre viser en ammonitt.
Finn bredden på kamrene som funksjon av vinkelen.



Å balansere en reaksjonslikning er enkelt når den er liten. For eksempel ser vi raskt at



tilfredsstilles av $x_1 = 2$, $x_2 = 1$ og $x_3 = 1$, slik at



Men vi kan late som om vi ikke visste det. I såfall gir nitrogenet gir likningen

$$x_1 = x_3$$

mens oksygenet gir likningen

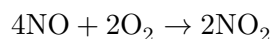
$$x_1 + 2x_2 = 2x_3.$$

En matematiker ville stilt dette opp slik:

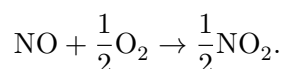
$$x_1 + 0x_2 - x_3 = 0$$

$$x_1 + 2x_2 - 2x_3 = 0$$

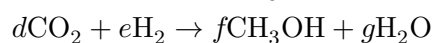
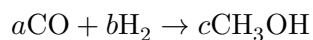
Dette problemet har uendelig mange løsninger; vi kunne like gjerne skrevet



eller

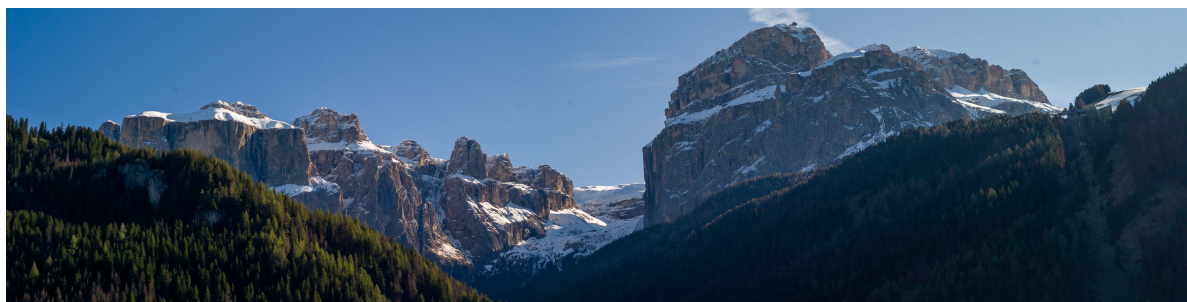


N Men det kan fort bli komplisert. Her en prosess for å lage metanol.²¹



Klarer du å balansere denne?

Nå skal vi se på systematiske teknikker for å håndtere slikt skrømt. Dette kalles **lineæralgebra**.



²¹<https://en.wikipedia.org/wiki/Methanol>

Disse oppstår naturlig når man prøver å løse likninger. En likning kan fint ha mange løsninger. En likning kan faktisk ha uendelig mange løsninger. For eksempel er det uendelig mange punkter i $\mathbb{R}^2$ som passer i likningen

$$2x_1 + 3x_2 = 0,$$

og de ligger alle sammen på en linje med normalvektor

$$\mathbf{n} = \begin{pmatrix} 2 \\ 3 \end{pmatrix}.$$

Det er lett å se at denne linjen går gjennom origo, siden

$$\mathbf{x} = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

passer i likningen. (Sjekk slutten av økt 1-2 om du ikke husker vektorer på høykant.)

0 Løs likningssystemet

$$2x_1 + 3x_2 = 0$$

$$4x_1 + 5x_2 = 1$$

(Et bra stalltips er å gange den første likningen med 2 og så trekke likningene fra hverandre.)



Dersom du skjønnte hvordan oppgave 0 skulle løses, ganget du den første likningen med 2 og fikk

$$4x_1 + 6x_2 = 0$$

og så trakk du likningene fra hverandre og fikk

$$x_2 = -1$$

og så er det bare å sette inn denne i en av likningene, og så ser vi at

$$x_1 = 3/2.$$

Det er altså bare en kombinasjon av x_1 og x_2 som passer i likningssystemet, og jeg avsløre at uansett hva du hadde satt inn på høyresiden, så ville det samme skjedd. Likningssystemet

$$2x_1 + 3x_2 = b_1$$

$$4x_1 + 5x_2 = b_2$$

løses med de samme stegene; vi ganger den første likningen med 2 og trekker dem fra hverandre:

$$x_2 = 2b_1 - b_2$$

Så setter vi uttrykket for x_2 inn i en av likningene (velg og vrak), og får

$$x_1 = (b_1 - 3(2b_1 - b_2)) / 2 = (3b_2 - 5b_1) / 2.$$

Det spiller ingen rolle hva b_1 og b_2 er, x_1 og x_2 blir entydig bestemt uansett. Dette eksemplet var kanskje ikke så interessant, men det å vite hvordan man håndterer **lineære likningssystemer**:

$$a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \dots + a_{1n}x_n = b_1$$

$$a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \dots + a_{2n}x_n = b_2$$

$$\vdots$$

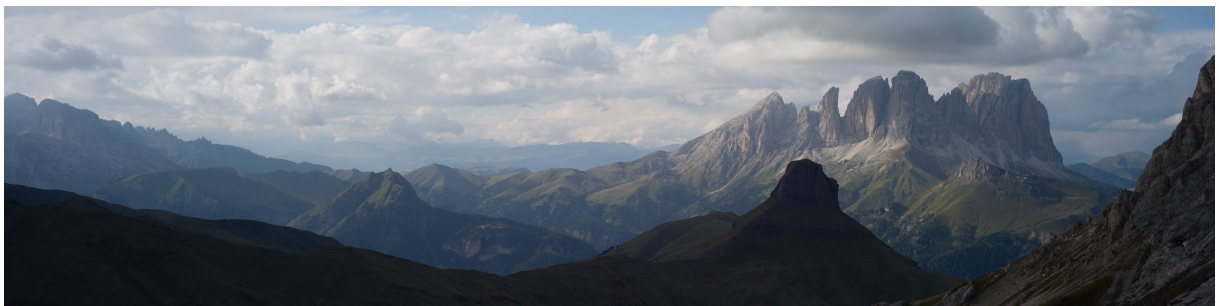
$$a_{m1}x_1 + a_{m2}x_2 + \dots + a_{mn}x_n = b_m$$

er ekstremt viktig. Lineære likningssystemer dukker opp i alle fagfelt uten unntak.

1 Her er et eksempel. Et annengradspolynom er et polynom på formen

$$p(x) = ax^2 + bx + c$$

Finn koeffisientene til et annengradspolynom som går gjennom punktene $(1, 2)$, $(2, 3)$ og $(3, 1)$.



Dersom du skjønnte hvordan oppgave 1 skulle løses, brukte du likningene $p(1) = 2$, $p(2) = 3$ og $p(3) = 1$ til å sette opp likningssystemet

$$\begin{aligned}a + b + c &= 2 \\4a + 2a + c &= 3 \\9a + 3b + c &= 1\end{aligned}$$

Realistiske modeller av fysiske problemer kan hoste opp likningssystemer med så mange likninger og ukjente at det ikke er trivielt å regne ut løsningen på rimelig tid, selv med datamaskin. Det er for eksempel ikke noe problem å lage et likningssystem med 10000 likninger som laptopen min trenger flere sekunder på å løse, og likningssystemer i anvendelser kan bli mye større enn som så. Men:

If you can reduce a mathematical problem to a problem in linear algebra, you can most likely solve it, provided that you know enough linear algebra.

- Peter D. Lax

Hvis du lærte det samme som jeg (født i 1983) på ungdomsskolen, lærte du å løse lineære likningssystemer med tre likninger og tre ukjente ved innsettingsmetoden. Det finnes tusenvis av forskjellige teknikker for å løse lineære likningssystemer, men metoden alle universitetskurs begynner med, kalles **gausseliminasjon**.²² Dette er en kjedelig teknikk for å herje med likningssystemer.

- ² Les wikipediaartikkelen i fotnoten eller kapittel 1 og 2 i Skartsæterhagens kompendium eller kap. 7.1 og 7.2 i Arnes bok og regn ut a , b og c i systemet over ved gausseliminasjon.



²²https://en.wikipedia.org/wiki/Gaussian_elimination

Gausseliminasjon ble oppfunnet av noen kinesere for omtrent to tusen år siden, til tross for at det er oppkalt etter den hvite middelaldrende mannen Karl Friedrich Gauss. Selv om du antagelig ikke skal gausseliminere så mye etter du er ferdig å studere, må du dessverre gausseliminere litt nå, for det er ikke mulig å forstå lineær algebra uten å løse noen lineære likningssystemer.

3 Løs likningssystemene:

$$\begin{array}{rcl} 2x + 3y + 4z = 4 & 3x_1 - x_2 - x_3 & = 1 \\ 3x + 4y + 5z = 5 & -x_1 + 3x_2 & - x_4 = 0 \\ 4x + 5y + 7z = 3 & -x_1 & + 3x_3 - x_4 = 0 \\ & -x_2 - x_3 + 3x_4 & = 0 \end{array} \quad \begin{array}{l} 2z + iw + (5 - 3i)u = 10 \\ 4z + 2iw + (10 + 2i)u = 20 + 16i \\ 2iz - w + (4 + 6i)u = 2 + 12i \end{array}$$

En av de første tingene man gjør når man skal studere lineære likningssystemer, er å gå lei av å skrive $+$ og $-$ og $=$ og x_1 og x_2 . Derfor lager vi oss notasjon som er litt mer minimalistisk. Systemet

$$\begin{array}{l} 2x + 3y + 4z = 4 \\ 3x + 4y + 5z = 5 \\ 4x + 5y + 6z = 3 \end{array}$$

skriver vi kort og godt

$$\begin{array}{ccc|c} 2 & 3 & 4 & 4 \\ 3 & 4 & 5 & 5 \\ 4 & 5 & 7 & 3 \end{array}$$

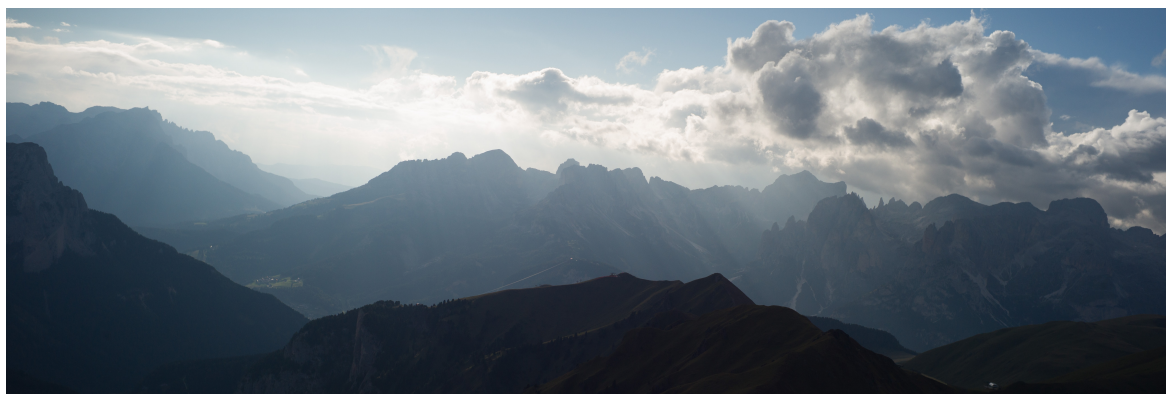
4 Løs likningssystemene på nytt og nyt hvor mye mindre skrijving det blir:

$$\begin{array}{ccc|c} 2 & 3 & 4 & 4 \\ 3 & 4 & 5 & 5 \\ 4 & 5 & 7 & 3 \end{array} \quad \begin{array}{cccc|c} 3 & -1 & -1 & 0 & 1 \\ -1 & 3 & 0 & -1 & 0 \\ -1 & 0 & 3 & -1 & 0 \\ 0 & -1 & -1 & 3 & 0 \end{array} \quad \begin{array}{ccc|c} 2 & i & 5 - 3i & 10 \\ 4 & 2i & 10 + 2i & 20 + 16i \\ 2i & -1 & 4 + 6i & 2 + 12i \end{array}$$

Hvis du nå har skjønt foran og bak på gausseliminasjon, kan vi begynne på det som er gøy.

5 Prøv å løse systemene

$$\begin{array}{ccc|c} 2 & 3 & 4 & 4 \\ 3 & 4 & 5 & 5 \\ 4 & 5 & 6 & 3 \end{array} \quad \begin{array}{ccc|c} 2 & 3 & 4 & 8 \\ 3 & 4 & 5 & 10 \\ 4 & 5 & 6 & 12 \end{array} \quad \begin{array}{ccc|c} 2 & 3 & 4 & 0 \\ 3 & 4 & 5 & 0 \\ 4 & 5 & 7 & 0 \end{array} \quad \begin{array}{ccc|c} 2 & 3 & 4 & 0 \\ 3 & 4 & 5 & 0 \\ 4 & 5 & 6 & 0 \end{array} \quad \begin{array}{cc|c} 2 & 3 & 1 \\ 3 & 4 & 2 \\ 4 & 5 & 3 \end{array}$$



For å skjønne hva som skjer i alle disse systemene, må man studere teorien som ligger i bunn for lineære likningssystemer. Les Skartsætherhagens kompendium kap. 3-6.

- 6 Alle punkter (x, y, z) som passer i likningen $ax + by + cz = d$ ligger på ett og samme plan i rommet. Forklar hva som skjedde i oppgave 5.

Antagelig har du nå oppdaget at et lineært system kan ha entydig løsning eller ingen løsning eller uendelig mange løsninger. Med tre likninger og tre ukjente er dette geometrisk innlysende - tre plan kan skjære hverandre i ett enkelt punkt eller i uendelig mange eller ikke i det hele tatt. Men geometriske ideer om plan i $\mathbb{R}^3$ hjelper oss ikke dersom vi skal forstå hvorfor

$$\begin{array}{cc|c} i & 1 & -1 \\ 1 & i & i \end{array}$$

har entydig løsning, mens

$$\begin{array}{cc|c} i & 1 & -1 \\ -1 & i & i \end{array}$$

ikke har løsning i det hele tatt. La oss gå tilbake til likningssystemet fra reaksjonsbalanseringen:

$$\begin{aligned} x_1 + 0x_2 - x_3 &= 0 \\ x_1 + 2x_2 - 2x_3 &= 0 \end{aligned}$$

Om vi bare tar et lite typografisk grep og skriver

$$\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} x_1 + \begin{pmatrix} 0 \\ 2 \end{pmatrix} x_2 + \begin{pmatrix} -1 \\ -2 \end{pmatrix} x_3 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

ser vi at systemet er en vektorlikning

$$\mathbf{v}_1 x_1 + \mathbf{v}_2 x_2 + \mathbf{v}_3 x_3 = \mathbf{b}$$

der lineærkombinasjonen av

$$\mathbf{v}_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \quad \text{og} \quad \mathbf{v}_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 2 \end{pmatrix} \quad \text{og} \quad \mathbf{v}_3 = \begin{pmatrix} -1 \\ -2 \end{pmatrix}$$

kreves å være lik

$$\mathbf{b} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

En viktig definisjon: Vi sier at vektorene $\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, \dots, \mathbf{v}_n$ er **lineært uavhengige** dersom

$$\mathbf{v}_1 x_1 + \mathbf{v}_2 x_2 + \dots + \mathbf{v}_n x_n = \mathbf{0} \quad \implies \quad x_1 = x_2 = \dots = x_n = 0.$$

Har vi lineær uavhengighet, har vi også entydig løsning.

- 7 Vis dette.

(Det er kanskje ikke så lett å komme på, men ikke så vanskelig å skjønne om man får det forklart. Vi hadde det på eksamen i 2022 og det gikk helt fint.)

Fordelen med lineær uavhengighet er at man kan analysere likningssett som flere dimensjoner enn tre eller forskjellig antall likninger og ukjente.

- 8 Hvilke av systemene så langt har lineært uavhengige vektorer på venstresiden?

Lineærkombinasjonen

$$\mathbf{v}_1 x_1 + \mathbf{v}_2 x_2 + \mathbf{v}_3 x_3$$

likner mistenkelig på et skalarprodukt mellom "vektoren" $(\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, \mathbf{v}_3)$ og den ukjente $\mathbf{x}$. Denne nye vektoren kalles en **matrise**:

$$A = (\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, \mathbf{v}_3) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & -1 \\ 1 & 2 & -2 \end{pmatrix}$$

En matrise er et tableau med tall. Faktisk er også $\mathbf{x}$ en matrise:

$$\mathbf{x} = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix}$$

og vi tenker på det store dyret på venstresiden

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} x_1 + 0x_2 - x_3 \\ x_1 + 2x_2 - 2x_3 \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} x_1 + \begin{pmatrix} 0 \\ 2 \end{pmatrix} x_2 + \begin{pmatrix} -1 \\ -2 \end{pmatrix} x_3 \\ &= \mathbf{v}_1 x_1 + \mathbf{v}_2 x_2 + \mathbf{v}_3 x_3 \\ &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & -1 \\ 1 & 2 & -2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = A\mathbf{x} \end{aligned}$$

som et produkt mellom den kjente matrisen A og den ukjente matrisen $\mathbf{x}$. Dette produktet er en generalisering av skalarproduktet og kalles et **matriseprodukt**. Dette er det viktigste produktet du kommer til å lære noen gang, så la oss ta unna definisjonen. En matrise

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{m1} & a_{m2} & \cdots & a_{mn} \end{pmatrix}$$

har **dimensjon** $m \times n$. Matrisens **kolonner** er

$$\begin{pmatrix} a_{11} \\ a_{21} \\ \vdots \\ a_{m1} \end{pmatrix} \quad \begin{pmatrix} a_{12} \\ a_{22} \\ \vdots \\ a_{m2} \end{pmatrix} \quad \cdots \quad \begin{pmatrix} a_{1n} \\ a_{2n} \\ \vdots \\ a_{mn} \end{pmatrix}$$

og matrisens **rader** er

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{m1} & a_{m2} & \cdots & a_{mn} \end{pmatrix}$$

og her er definisjonen på matriseprodukt:

Dersom A og B er matriser med dimensjoner $m \times n$ og $n \times p$, er elementet c_{ij} i produktet $C = AB$ gitt ved skalarproduktet mellom rad nummer i i A og kolonne nummer j i B .

9 Les kapittel 4 i Skartsæterhagens lineæralgebrakompendium og gang sammen matrisene

$$\begin{pmatrix} 2 & 3 & 4 \\ 3 & 4 & 5 \\ 4 & 5 & 7 \end{pmatrix} \quad \text{og} \quad \begin{pmatrix} 1 & 4 & 7 \\ 2 & 5 & 8 \\ 3 & 6 & 9 \end{pmatrix}.$$

Siden et matriseprodukt består av $m \times p$ skalarprodukter, bør det være klart at man ikke kan gange sammen matriser med vilkårlig dimensjon. La

$$A = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 5 \\ 2 & 3 & -1 \\ -8 & 0 & 2 \end{pmatrix} \quad \text{og} \quad B = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 5 \\ 0 & 0 & 3 \end{pmatrix}$$

- [10] Regn ut AB , BA , A^2 , B^2 og $A + B$ eller forklar hvorfor uttrykkene ikke gir mening.

La nå

$$A = \begin{pmatrix} 2 & 3 & 4 \\ 3 & 4 & 5 \\ 4 & 5 & 7 \end{pmatrix} \quad \text{og} \quad I = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad \text{og} \quad B = \begin{pmatrix} -3 & 1 & 1 \\ 1 & 2 & -2 \\ 1 & -2 & 1 \end{pmatrix}$$

- [11] Regn ut AI , IA , AB og BA . Hva tror du dette kan brukes til? Gang

$$\mathbf{b} = \begin{pmatrix} 4 \\ 5 \\ 3 \end{pmatrix}$$

inn på høyre side av B og ta en ny titt på det første systemet i oppgave 3.

Matrisen I kalles **identitetsmatrisen**. Matrisen B kalles A sin **inverse matrise**, og vi skriver $B = A^{-1}$. Kvadratiske matriser (matriser med like mange rader som kolonner) har invers hvis og bare hvis kolonnene er lineært uavhengige, og inversen kan beregnes på mange forskjellige måter:

https://en.wikipedia.org/wiki/Invertible_matrix

- [12] I praksis beregner man aldri den inverse matrisen, for det koster for mange regneoperasjoner. Men én invers må man beregne i sitt liv. Regn ut A^{-1} (A som over) på en eller annen måte og løs oppgave 4 og 5 på nytt med invers. Hvilke matriser i oppgave 5 har invers?

Matrisemultiplikasjon tilfredsstiller ellers mange regneregler du er vant til, men ikke kommutativitet, unntatt i noen spesialtilfeller. Kommutativitet er at faktorenes orden er likegyldig. La

$$A = \begin{pmatrix} 2 & 3 & 4 \\ 3 & 4 & 5 \\ 4 & 5 & 7 \end{pmatrix} \quad \text{og} \quad B = \begin{pmatrix} 1 & 4 & 7 \\ 2 & 5 & 8 \\ 3 & 6 & 9 \end{pmatrix}.$$

- [14] Regn ut AB og BA . Er det noen matriser i denne økten som kommuterer?

En liten ting til slutt: Vi skriver $\mathbb{R}^{m \times n}$ for mengden av alle $m \times n$ -matriser med reelle komponenter. Det er praktisk, for nå kan vi si $\mathbb{R}^{m \times 1}$ og $\mathbb{R}^{1 \times n}$ dersom vi trenger å skille mellom rad- og kolonnevektorer. Det må vi etterhvert.

Trenger du flere oppgaver, er disse relevante:

https://wiki.math.ntnu.no/_media/tma4110/2024h/oving02.pdf

https://wiki.math.ntnu.no/_media/tma4110/2024h/oving03.pdf

https://wiki.math.ntnu.no/_media/tma4110/2024h/oving04.pdf

Løsningsforslag finner du her:

https://wiki.math.ntnu.no/_media/tma4110/2024h/oving02-lf.pdf

https://wiki.math.ntnu.no/_media/tma4110/2024h/oving03-lf.pdf

https://wiki.math.ntnu.no/_media/tma4110/2024h/oving04-lf.pdf

Dersom kolonnene i en matrise A er lineært avhengige, betyr dette at likningen

$$A\mathbf{x} = \mathbf{0}$$

har ikke-trivielle løsninger, altså andre løsninger enn $\mathbf{x} = \mathbf{0}$. Disse løsningene kalles **nullrommet** til A . Nullrommet til A dukker opp naturlig når man vil balansere reaksjonslikninger. Reaksjonslikningen på den første siden er

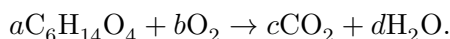
$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & -1 \\ 1 & 2 & -2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

på matriseform, og matrisen

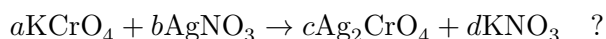
$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & -1 \\ 1 & 2 & -2 \end{pmatrix}$$

kalles **atommatrisen**.

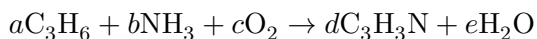
- 15 Balanser reaksjonen



- 16 Hva med

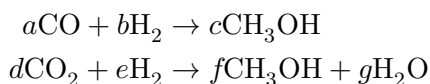


- 17 Man produserer acrylonitril fra propylen, ammoniakk og oksygen slik:



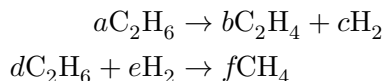
Se eksempel 3.2 i Sigurd Skogestads klassiker om prosessteknikk.

- 18 Vi kan kjøre på systemer av reaksjonslikninger og. Her en prosess for å lage metanol.

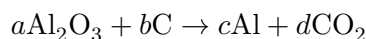


<https://en.wikipedia.org/wiki/Methanol#Production>

- 19 Eller hva med litt dehydrogenering av etan?



- 20 Eller kanskje litt aluminiumproduksjon fra aluminiumoksid:



Takk til Svein Sunde og Sigurd Skogestad for eksempler.

Av og til er det slik at ting er lineæralgebra selv om det ser ut som noe helt annet.

21 La

$$\begin{aligned}p(x) &= 8x^3 - 8x^2 - 4x - 6 \\q(x) &= -7x^3 - 7x^2 + 5x + 6 \\r(x) &= 3x^2 - 8x - 4\end{aligned}$$

Finnes det konstanter a , b og c slik at

$$a \cdot p(x) + b \cdot q(x) + c \cdot r(x) = -3x^3 - 7x^2 - 3x?$$

22 La

$$\begin{aligned}p(x) &= -6x^3 - 4x^2 - 8x + 8 \\q(x) &= 6x^3 + 5x^2 - 7x - 7 \\r(x) &= -4x^3 - 8x^2 + 3x\end{aligned}$$

Finnes det konstanter a , b og c slik at

$$a \cdot p(x) + b \cdot q(x) + c \cdot r(x) = -3x^2 - 7x - 3?$$

23 La

$$z = \begin{pmatrix} a & b \\ -b & a \end{pmatrix}$$

Mengden av alle matriser på denne formen oppfører seg nøyaktig som noe du allerede har sett. Hva?

24 La

$$A = \begin{pmatrix} 2 & 3 & 4 \\ 3 & 4 & 5 \\ 4 & 5 & 6 \end{pmatrix} \quad \text{og} \quad B = \begin{pmatrix} 1 & 4 & 7 \\ 2 & 5 & 8 \\ 3 & 6 & 9 \end{pmatrix}$$

Er kolonnene i AB lineært uavhengige?

25 Kan en lineært uavhengig vektormengde inneholde nullvektoren?

26 Vis at to vektorer er lineært avhengige hvis og bare hvis de er parallelle.



UKENS NØTTER

Det er en ting matematiske modeller trenger, og dette kravet har de til felles med andre ting, for eksempel software og orienteringskart, nemlig *korrekt balanse mellom lesbarhet og detaljnivå*. Dersom et orienteringskart har for mange detaljer, blir det umulig å lese, og har det for få, gir det ikke korrekt beskrivelse av terrenget. Software som er skrevet for ytelse heller enn lesbarhet kan fort bli uforståelig for alle andre enn det store geniet som har skrevet koden, og da kan den bli ubrukelig når det geniet dør eller skifter jobb eller glemmer hva det har gjort.

Lotkavolterramodellen er lesbar. Begge likningene i lotkavolterra har ett ledd som beskriver veksten ved fravær av den andre arten, og ett ledd som beskriver hvordan arten påvirkes av samspillet med den andre arten. Jeg introduserte den logistiske modellen ved å si at du tok modellen for eksponensiell vekst, og bytte ut proporsjonalitetsfaktoren med en monotont synkende funksjon som har et nullpunkt i bærekapasiteten, men du kan også skrive den slik:

$$\dot{x} = a(x - x^2/k)$$

Hvis du har skjønnet lotkavolterra skjønner du kanskje at det kvadratiske leddet kan representere kannibalisme.²³ Når man først har vendt seg til tanken at endring i en størrelse kan være proporsjonal med produktet av størrelsen med seg selv eller andre størrelser, er det en lavhengende frukt å forstå **kinetikk**, nemlig modellering av kjemisk reaksjonshastighet.

La oss si at du har en kjemisk reaksjon som tar speciene A og B produserer C :



Produktet av konsentrasjonene $[A]$ og $[B]$ forteller noe om sannsynligheten for at disse to molekylene tilfeldigvis møter på hverandre i suppen, og massevirkningsloven²⁴ sier at dersom reaksjonen kun går den ene veien, tilfredsstiller konsentrasjonene $[A]$, $[B]$ og $[C]$ differensiallikningen

$$\frac{d}{dt} [C] = k [A] [B]$$

der k er en konstant som avhenger av sannsynligheten for at A og B faktisk kombinerer til C når de møtes.²⁵ Dette avhenger av temperatur og farten til molekylene og masse annet, og siden det trengs én av A og én av B for å produsere én av C , er

$$\frac{d}{dt} [A] = \frac{d}{dt} [B] = \frac{d}{dt} [C].$$

Dersom reaksjonen kan gå begge veier, tilfredsstiller konsentrasjonene differensiallikningen

$$\frac{d}{dt} [C] = k_+ [A] [B] - k_- [C].$$

En av de mest kjente kjemiske reaksjonsdifferensiallikningene kalles Michaelis-Menten-systemet.²⁶ Det er en modell for et enzymkatalysert reaksjon som visstnok skjer i levende celler:



²³Kannibalisme er faktisk ikke helt uvanlig i naturen:

<https://www.youtube.com/watch?v=7wKu13wmHog>

²⁴https://en.wikipedia.org/wiki/Law_of_mass_action

²⁵Radioaktiv nedbrytning er det enkleste eksemplet: https://en.wikipedia.org/wiki/Uranium-lead_dating

²⁶https://en.wikipedia.org/wiki/Michaelis-Menten_kinetics

Reaksjonsratene er k_1 og k_{-1} for den første reaksjonen, og k_2 for den andre. I virkeligheten går den andre reaksjonen begge veier, men man sørger visst for å ta de uinteressante produktene ut av suppen når man tester dette i lab, så ikke alt skal bli så komplisert. På skolen lærte du at en katalysator er noe som påvirker en kjemisk reaksjon uten å bli brukt opp. Dette forvirret alltid meg, men man må huske på at dette betyr at det er snakk om flere reaksjoner som skjer samtidig, og at katalysatoren blir brukt i en reaksjon og produsert i en annen.

1 La $s = [S]$, $e = [E]$ og $c = [C]$, og vis at differensiallikningsystemet blir

$$\begin{aligned}\dot{s} &= -k_1 s e + k_{-1} c \\ \dot{e} &= -k_1 s e + (k_{-1} + k_2) c \\ \dot{c} &= k_1 s e - (k_{-1} + k_2) c\end{aligned}$$

Vi kan forenkle litt. Summen av to av konsentrasjonene må være konstant.

2 Hvilke?
(Hint: Tenk logisk eller herje litt med likningene.)

Dersom du bruker relasjonen du fant over, bør det være mulig å koke alt ned til

$$\begin{aligned}\dot{s} &= -k_1 s (e_0 - c) + k_{-1} c \\ \dot{c} &= k_1 s (e_0 - c) - (k_{-1} + k_2) c\end{aligned}$$

3 Løs numerisk.

med initialverdier $e(0) = e_0$ og $c(0) = 0$. Det er nå vanlig å anta at produksjonen av c går veldig fort unna og raskt går i likevekt, slik at $\dot{c} = 0$. I så fall blir den andre likningen en algebraisk likning.

4 Vis at i så fall er

$$\dot{s} = -\frac{k_2 e_0 s}{s + K_m} \quad \text{der} \quad K_m = \frac{k_{-1} + k_2}{k_1}.$$

og løs numerisk.

Konstanten K_m kalles *michaelismentenkonstanten*. Likningen for s kan ikke løses i ordinær forstand, men du kan herje litt, integrere, og få

$$s + K_m \ln s + k_2 e_0 t = C.$$

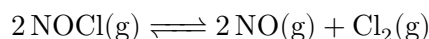
5 Ligger den numeriske løsningen fra oppgave 4 på denne kurven?



- 10] Dersom man skal finne likevektskonsentrasjoner, ender man ofte opp med å måtte løse en ikkelineær likning. For eksempel må man løse likningen

$$K_c = \frac{16x^3}{(1-4x)^2}$$

dersom man skal finne likevektskonsentrasjonene i



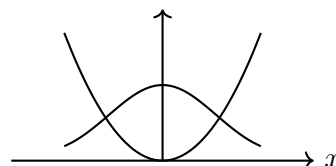
Nå er det i prinsippet mulig å regne ut løsningen av en tredjegradslikning for hånd, men det er enklere å kjøre en numerisk likningsløser. Prøv.

- 11] Når man løser partikkel-i-boks med ikke helt tette vegger,²⁷ støter man gjerne på likningen

$$\tan \sqrt{x} = \frac{2\sqrt{x(1-x)}}{2x-1}.$$

Finn x .

- 12] Når man jobber med den kvantemekaniske harmoniske oscillatoren, støter man visst på en situasjon der man må finne skjæringspunktet mellom kurvene gitt ved $y = \exp(-ax^2)$ og $y = bx^2$, der $a > 0$ og $b > 0$ er konstanter. Finner skjæringspunktene med en numerisk likningsløser når $a = b = 1$. Hvorfor er det kun nødvendig å beregne det ene skjæringspunktet?



²⁷https://en.wikipedia.org/wiki/Finite_potential_well