

Appendix 1: Den dobbelt afledede af en funktion.

Som bekendt gælder der, at funktionen $f(x) = x^3$ er differentiabel for alle $x \in \mathbb{R}$, og at $f'(x) = 3x^2$. Vi kan derfor til et vilkårligt punkt x tilordne differentialkvotienten af f i x , hvorved vi får en funktion, som beregnes f' og som kaldes den afledede funktion af f .

Øvelse A1.1.

Angiv en funktionsforskrift for den afledede funktion f' , idet f er givet ved:

- a) $f(x) = k$ (konst.) b) $f(x) = ax + b$ c) $f(x) = \sqrt{x}$ d) $f(x) = 5x^2$ e) $f(x) = \frac{1}{x}$
f) $f(x) = x \cdot \cos(x)$ g) $f(x) = \ln(3x + x^5)$ h) $f(x) = 2e^{\sin x}$ ♥

Betragt funktionen $g(x) = 3x^2$, $x \in \mathbb{R}$. g er differentiabel, og den afledede funktion g' af g er givet ved: $g'(x) = 6x$, $x \in \mathbb{R}$. Hvis vi nu vender tilbage til funktionen $f(x) = x^3$, så ser vi, at $f' = g$. Den afledede funktion g' af g fremkommer altså ved at differentiere den afledede funktion f' af f . Der gælder altså: $(f')'(x) = 6x$, $x \in \mathbb{R}$. Almindeligvis skrives f'' i stedet for $(f')'$, så vi har, at $f''(x) = 6x$, $x \in \mathbb{R}$. Funktionen f'' kaldes den dobbelt afledede (eller den anden afledede) af f . Vi ser altså, at den dobbelt afledede af funktionen x^3 er funktionen $6x$.

I almindelighed har vi, at hvis den afledede funktion f' er differentiabel for alle x i et interval I , så kan vi definere den dobbelt afledede f'' i dette interval, og den er givet ved: $f'' = (f')'$.

Ligesom differentialkvotienten af en funktion kan anføres ved $\frac{dy}{dx}$, $\frac{df(x)}{dx}$ o.lign. i stedet for f' ,

kan den dobbelt afledede anføres ved: $\frac{d^2y}{dx^2}$, $\frac{d^2f}{dx^2}$, $\frac{d^2f(x)}{dx^2}$ o.lign. i stedet for f'' .

Øvelse A1.2

Bestem en funktionsforskrift for den dobbelt afledede f'' for hver af funktionerne i øvelse A1.1. Husk definitionsmængden for f'' . ♥

Eksempel A1.3.

Hvis en bil kører ud af en lige vej, så vil afstanden s fra startpunktet være en funktion af den tid t , som er gået siden starten. Differenskvotienten $\frac{s(t) - s(t_0)}{t - t_0}$ angiver bilens gennemsnitshastighed i

tidsrummet fra t_0 til t (eller fra t til t_0), medens differentialkvotienten $s'(t_0)$ angiver hastigheden til tidspunktet t_0 (dvs. $s'(t_0)$ angiver, hvad speedometeret viser til tiden t_0). Den afledede funktion s' angiver altså hastigheden som funktion af tiden t . Ofte skriver man v i stedet for s' , altså: $v(t) = s'(t)$. Som bekendt vil hastigheden af en bil ofte ændres i løbet af en køretur – bl.a. afhængig af, hvilken

pedal der trykkes på. Differenskvotienten $\frac{v(t) - v(t_0)}{t - t_0}$ angiver gennemsnitsaccelerationen i tids-

rummet fra t_0 til t (eller fra t til t_0), medens differentialkvotienten $v'(t_0)$ angiver, hvor stor en acceleration bilen har til tidspunktet t_0 . Vi har altså, at: $a = v'$ og $v = s'$, og dermed at: $a = s''$. Accelerationen er altså den dobbelt afledede af strækningen s – begge som funktion af tiden t . ♥

Appendix 2: Specielle løsninger til den logistiske differentialligning $y' = ky(M - y)$

Ifølge sidste del af sætning 3.9 er løsningen til ligningen: $y' = ky(M - y)$, hvor k og M er konstanter, der er forskellige fra 0, givet ved:

$$y = \frac{M}{1 + c \cdot e^{-kMx}}, \text{ hvor } c \in \mathbb{R}$$

Vi vil her i dette appendix se på løsninger, hvor $c < 0$, $k < 0$, $M < 0$ og/eller $y > M$.

Lad os starte med at se på et eksempel:

Eksempel A.2.1.

Funktionen f er givet ved forskriften:

$$f(x) = \frac{48}{1 - 0,85 \cdot e^{-0,0004 \cdot 48 \cdot x}}$$

Dens graf ser således ud:

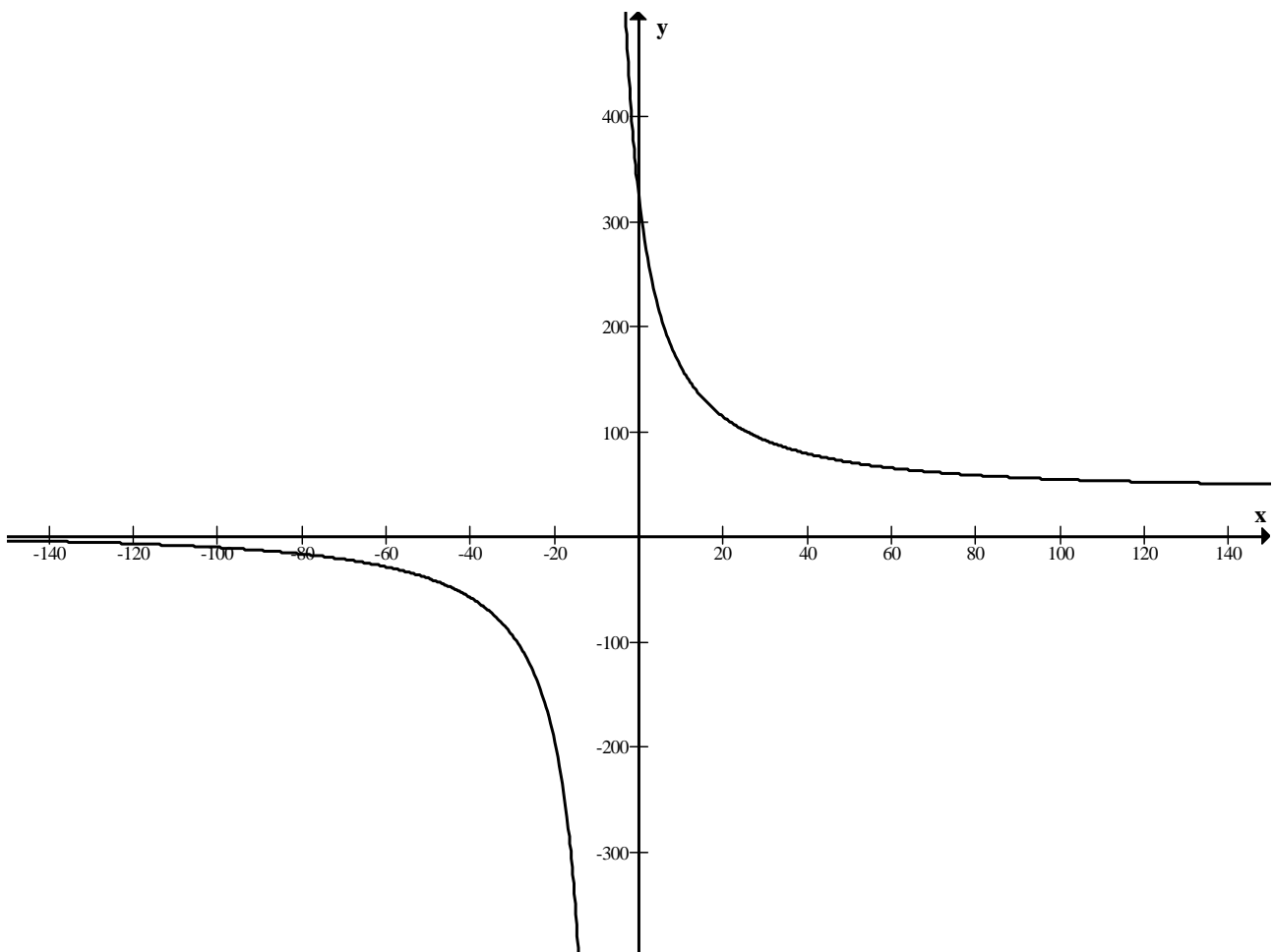


Fig. A.2.1

Det ses (kontrollér ud fra funktionsforskriften !!), at

- $f(x) \rightarrow 48$ for $x \rightarrow \infty$ og $f(x) \rightarrow 0$ for $x \rightarrow -\infty$
- grafen for f har en lodret asymptote med ligningen $x = \frac{\ln(0,85)}{0,0192} = -8,4645$
dvs. at $|f(x)| \rightarrow \infty$ for $x \rightarrow -8,4645$
- f er aftagende i $]-\infty; -8,4645[$ og i $]-8,4645; \infty[$

Hvis vi specielt interesserer os for den del af grafen, der svarer til $x \geq 0$, får vi følgende:

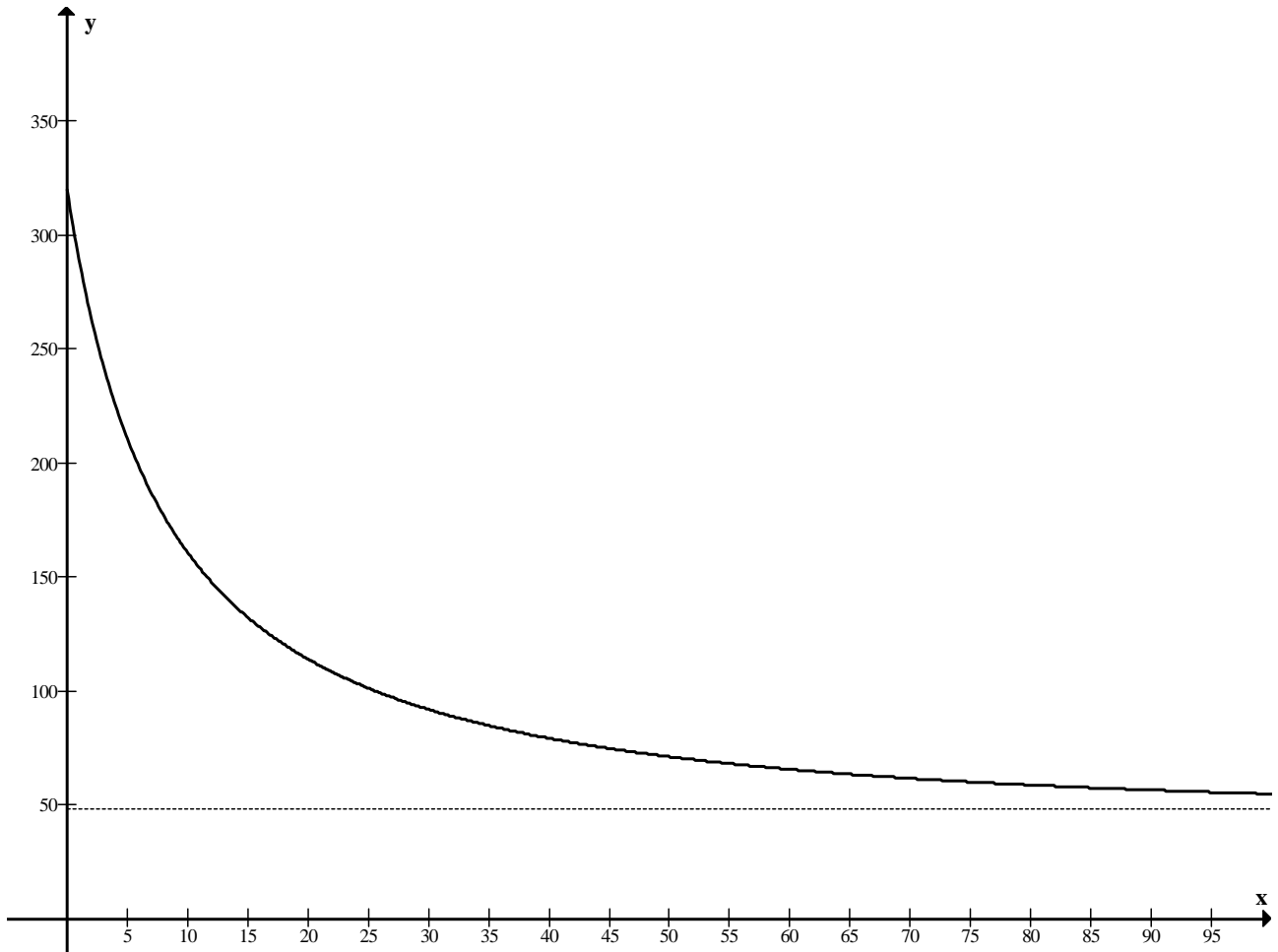


Fig. A.2.2

Bemærk, at selv om grafen her godt kunne ligne grafen for en konstant plus en eksponentielt aftagende funktion, så er der altså tale om en logistisk funktion ! ♥

Øvelse A.2.2.

Argumentér for, at den løsning til differentialligningen: $y' = 0,0004 \cdot y \cdot (48 - y)$, der går igennem punktet $(0, 320)$, er den funktion, der omtales i eksempel A.2.1. ♥

Øvelse A.2.3.

Tegn i hvert af følgende tilfælde grafen for funktionen: $f(x) = \frac{M}{1 + c \cdot e^{-k \cdot M \cdot x}}$

- a) $M = 200$, $k = 0,003$, $c = -0,3$
- b) $M = -200$, $k = 0,003$, $c = 0,3$
- c) $M = 200$, $k = -0,003$, $c = 2$
- d) $M = 200$, $k = -0,003$, $c = -2$
- e) $M = -200$, $k = 0,003$, $c = -2$
- f) $M = 200$, $k = 0,003$, $c = -2$
- g) $M = -200$, $k = -0,003$, $c = -2$

Kommentér resultaterne. ♥

Øvelse A.2.4.

- a) Bestem den løsning f til differentialligningen: $y' = 0,00028 \cdot y \cdot (300 - y)$, som opfylder, at $f(25) = 800$. Tegn grafen for f .
- b) Bestem den løsning g til differentialligningen: $y' = 0,00028 \cdot y \cdot (y + 300)$, som opfylder, at $g(25) = 800$. Tegn grafen for g . ♥

Appendix 3: Detaljerede eksempler på separation af variable.

Eksempel A.3.1.

Vi vil finde den fuldstændige løsning til ligningen: $\frac{dy}{dx} = \frac{2y}{x}$

Vi ser, at ligningen er på formen: $\frac{dy}{dx} = h(x) \cdot g(y)$, hvor $h(x) = \frac{2}{x}$ og $g(y) = y$.

For at bruge sætning 5.3 om separation af variable skal vi kræve, at $g(y) \neq 0$, hvilket i dette tilfælde vil sige: $y \neq 0$.

Så inden vi går i gang med separationen undersøger vi lige, om $y = 0$ (dvs. den konstante funktion $y(x) = 0$) er en løsning til ligningen. Dette ses at være tilfældet, idet $\frac{dy}{dx} = 0$ for en konstant funktion

og idet $\frac{2y}{x} = 0$, når $y = 0$. Vi ved altså, at $y = 0$ (for $x < 0$ eller $x > 0$) er en løsning.

Vi fortsætter nu med metoden separation af variable:

Her skal $g(y) \neq 0$, dvs. $y \neq 0$, som omtalt forudsættes. Da g skal være kontinuert i et interval J , må det kræves, at $g(y) > 0$ eller $g(y) < 0$, dvs. $y > 0$ eller $y < 0$. Intervallet J er altså enten \mathbb{R}_+ eller \mathbb{R}_- .

Desuden skal $h(x)$ være kontinuert i et interval I . Da $h(x) = \frac{2}{x}$ ser vi, at det yderligere må kræves, at $x < 0$ eller $x > 0$.

Kravene for at anvende metoden kan altså opsummeres i: $y > 0$ eller $y < 0$ og $x > 0$ eller $x < 0$ (dvs. $(y > 0 \vee y < 0) \wedge (x > 0 \vee x < 0)$). Beregningen forløber herefter således:

$$\frac{dy}{dx} = \frac{2}{x} \cdot y \Leftrightarrow \int \frac{1}{y} dy = \int \frac{2}{x} dx \Leftrightarrow \ln|y| = 2 \cdot \ln|x| + k,$$

hvor $k \in \mathbb{R}$ er en vilkårlig konstant.

$$\ln|y| = 2 \cdot \ln|x| + k \Leftrightarrow |y| = e^{2\ln|x|+k} \Leftrightarrow |y| = e^{2\ln|x|} \cdot e^k$$

Når k gennemløber de reelle tal \mathbb{R} , så vil e^k (som også er en konstant) gennemløbe \mathbb{R}_+ . Vi sætter $q = e^k$ og får dermed, at: $q \in \mathbb{R}_+$ og at $|y| = q \cdot e^{2\ln|x|}$. Da $2 \ln|x| = \ln(|x|^2) = \ln(x^2)$ ses, at

$$|y| = q \cdot e^{\ln(x^2)} \Leftrightarrow |y| = q \cdot x^2 \Leftrightarrow y = q \cdot x^2 \vee y = -q \cdot x^2$$

hvor $y = q \cdot x^2$ vælges, når $y > 0$, og $y = -q \cdot x^2$ vælges, når $y < 0$. Da $q \in \mathbb{R}_+ \Leftrightarrow -q \in \mathbb{R}_-$ ses, at løsningen kan samles til: $y = c \cdot x^2$, hvor $c \in \mathbb{R}_+ \cup \mathbb{R}_-$ (c erstatter q og $-q$).

Hvis vi endelig husker på, at $y = 0$ er en løsning, og at $y = c \cdot x^2$ giver $y = 0$, hvis $c = 0$, kan alle løsninger samles i udtrykket:

$$y = c \cdot x^2, \text{ hvor } c \in \mathbb{R}, \text{ og hvor } x > 0 \text{ eller } x < 0$$

som hermed giver den samlede (fuldstændige) løsning.

Bemærk: En sådan sammenskrivning af den fuldstændige løsning er ikke altid mulig! (Se eksempel 5.6 og eksempel A.3.2).

Vi vil nu finde den partikulære løsning, som går igennem punktet $(-2, -2)$. Vi må da vælge forudsætningen: $x < 0$, og desuden skal der gælde: $-2 = c \cdot (-2)^2$, dvs. $c = -\frac{1}{2}$.

Den søgte løsning er altså: $f(x) = -\frac{1}{2}x^2$, $x < 0$.

Bemærk: I dette tilfælde er det ikke nødvendigt med yderligere indskrænkninger, idet $f(x) < 0$ for alle $x < 0$, og idet udtrykket $-\frac{1}{2}x^2$ kan udregnes for alle x . Men i andre situationer, hvor værdien af konstanten kommer til at spille en rolle for $D_m(f)$, skal yderligere indskrænkninger i definitionsmængden foretages. (Se eksempel 5.6 og eksempel A.3.2). ♥

Eksempel A.3.2.

Vi vil løse differentiaalligningen $y' = e^y \cdot \sin x$. Da e^y er defineret for alle $y \in \mathbb{R}$ og $\sin x$ er defineret for alle $x \in \mathbb{R}$, er der ingen indskrænkning på forhånd i relation til denne differentiaalligning. Omskrivningen forløber herefter således:

$$y' = e^y \cdot \sin x \Leftrightarrow \int \frac{1}{e^y} dy = \int \sin(x) dx \Leftrightarrow \int e^{-y} dy = -\cos(x) + k \Leftrightarrow -e^{-y} = -\cos(x) + k$$

hvoraf vi får (kontrollér), at: $e^y = \frac{1}{\cos(x) - k}$

For at finde et udtryk for den fuldstændige løsning skal vi nu "blot" tage ln på begge sider af lighedstegnet. Men dette kræver, at $\frac{1}{\cos(x) - k} > 0$ (hvilket også ligger i, at $e^y > 0$ for alle y).

Et krav for at kunne finde en løsning er altså, at $\cos(x) - k > 0$ dvs. $\cos(x) > k$.

Vi inddeler her i 3 situationer: a) $k \geq 1$, b) $k < -1$ og c) $-1 \leq k < 1$.

a) $k \geq 1$: Her er løsningsmængden til uligheden $\cos(x) > k$ lig med \emptyset , så der er ingen løsninger.

b) $k < -1$: Her er løsningsmængden til uligheden $\cos(x) > k$ lig med \mathbb{R} , hvormed vi får, at

$$y = \ln\left(\frac{1}{\cos(x) - k}\right), \quad x \in \mathbb{R}$$

c) $-1 \leq k < 1$: Her er løsningsmængden L til uligheden $\cos(x) > k$ lig med (kontrollér):

$$L = \left\{ x \in \mathbb{R} \mid x \in \left] -\cos^{-1}(k) + p \cdot 2\pi; \cos^{-1}(k) + p \cdot 2\pi \right[, p \in \mathbb{Z} \right\}$$

Da definitionsmængden til en løsning til differentiaalligningen skal være et interval, ser vi, at

$$y = \ln\left(\frac{1}{\cos(x) - k}\right), \quad x \in \left] -\cos^{-1}(k) + p \cdot 2\pi; \cos^{-1}(k) + p \cdot 2\pi \right[$$

for en eller anden heltallig værdi af p (som i en konkret situation fastlægges af et punkt, som løsningen skal gå igennem).

Vi vil nu finde den løsning, der går igennem punktet $(\frac{5\pi}{2}, \frac{1}{2})$. Ved indsættelse af tallene i den ovenstående ligning får vi:

$$e^{0,5} = \frac{1}{\cos(\frac{5\pi}{2}) - k} \Leftrightarrow k = -\frac{1}{e^{0,5}} \Leftrightarrow k = -0,60653,$$

hvormed vi ser, at vi er i situation c). For at få fat i x -værdien $\frac{5\pi}{2}$ ser vi, at vi skal bruge $p = 1$.

Den søgte løsning er hermed givet ved (kontrollér!):

$$y = \ln\left(\frac{1}{\cos(x) + 0,60653}\right), \quad x \in \left] 4,0607; 8,5057 \right[$$

Øvelse: Find den løsning, der går igennem punktet $(3, 0.02)$ ♥

Appendix 4: Reaktionskinetik i kemi og tilhørende matematiske modeller.

Beskrivelsen af kemiske reaktioners hastigheder bygger på matematiske discipliner som eksponentiel vækst, logistisk vækst og separation af de variable. Afsnittet hører således ikke naturligt ind under et bestemt af bogens afsnit, og er derfor anbragt som et appendix.

Indledning

Alle stoffer består af atomer, som i de fleste tilfælde er gået sammen med andre atomer og har dannet kemiske forbindelser. Alle atomer har en kort benævnelse, som bruges både om atomets kerne og om atomet som helhed, f.eks. O (ilt), H (brint), C (kulstof), Pb (bly), U (uran) og Ar (argon).

I kemisk sammenhæng er det atomet som helhed, dvs. inklusiv elektronerne omkring kernen, der har interesse, idet det er via disse elektronstrukturer, at de kemiske forbindelser dannes.

I praksis er de kemiske forbindelser – afhængig af situationen – enten elektrisk neutrale, og kaldes da molekyler, eller også er de elektrisk ladede (der er over- eller underskud af elektroner) og kaldes da ioner. Men vi vil i det følgende anvende ”molekyle” eller ”kemisk forbindelse” som en fællesbetegnelse – og kun bruge ordet ion, når det udtrykkeligt skal fremhæves, at det er en ladet partikel.

Der findes ca. 90 forskellige, naturligt forekommende atomer (der danner de såkaldte grundstoffer). Når der findes så fantastisk mange forskellige stoffer, så skyldes det disse grundstoffers evne til på forskellig måde at gå sammen i kemiske forbindelser.

Hvis vi f.eks. ser på grundstoffet ilt, så vil det som selvstændigt stof (ren ilt) almindeligvis danne molekyler bestående af to ilt-atomer. Fri ilt optræder derfor almindeligvis som molekylet O_2 .

Ilt indgår desuden i et utal af kemiske forbindelser, hvoraf de mest berømte nok er H_2O , hvor to brint-atomer og et ilt-atom til sammen danner et vand-molekyle, og CO_2 , hvor et kulstof-atom og to ilt-atomer tilsammen danner et kuldioxid-molekyle. Ilt indgår også i mere komplekse kemiske forbindelser, f.eks. sammen med brint og svovl i forbindelsen H_2SO_4 (som i vandig opløsning kaldes svovlsyre), og sammen med kulstof og brint i forbindelsen $C_6H_{12}O_6$ (glucose/druesukker).

Undertiden anføres den kemiske formel (dvs. det udtryk, der beskriver molekylets sammensætning) på en måde, der hjælper kemikere med at ”aflæse” molekylets struktur/opbygning, og dermed de bindinger, der indgår imellem atomernes elektroner i molekylet. F.eks. skrives stoffet citronsyre som $(HOOCCH_2)_2C(OH)(COOH)$ i stedet for f.eks. $C_6H_8O_7$.

Bemærk navnet ”kuldioxid” for den kemiske forbindelse (for stoffet) CO_2 . Her er der dels anvendt benævnelsen ”oxid” for ilt, idet ilt også kaldes oxygen, dels betyder det lille ”di”, at der er to oxygen-atomer for hvert kulstof-atom. O_2 kaldes tilsvarende ”dioxygen”.

Mange af de naturligt forekommende grundstoffer har et dansk navn, som f.eks. kul, sølv og brint, men de har alle et internationalt (latinsk) navn. Således benævnes kul, sølv og brint som hhv. carbon, argentum og hydrogen – benævnelser der ofte optræder i navnene på de kemiske forbindelser, hvori de indgår. Kuldioxid kaldes således også carbondioxid, og stoffet CO (kulilte) kaldes carbonmonoxid, hvor det lille ”mon” står for ”mono” og betyder, at der kun er ét ilt-atom.

For yderligere information henvises til en lærebog i kemi.

Kemiske reaktioner.

Når visse stoffer (dvs. visse kemiske forbindelser) kommer i kontakt med hinanden, foregår der undertiden en såkaldt kemisk reaktion, hvori der sker en omdannelse af molekylerne eller ionerne. Nogle reaktioner foregår spontant, medens andre skal ”hjælpes på vej” f.eks. ved at opløse stofferne i en væske, ved at opvarme stofferne eller ved at tilsætte endnu et stof (en såkaldt katalysator) som fremmer processen – eller en kombination af disse ting.

Eksempler på kemiske reaktioner er givet ved følgende reaktionsskemaer:

- a) $2 \text{H}_2 + 2 \text{NO} \rightarrow 2 \text{H}_2\text{O} + \text{N}_2$
- b) $\text{CH}_3\text{COOCH}_3 + \text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{CH}_3\text{COOH} + \text{CH}_3\text{OH}$
- c) $\text{N}_2\text{O}_3 \rightarrow \text{NO}_2 + \text{NO}$
- d) $\text{Mg} + 2 \text{HCl} \rightarrow \text{MgCl}_2 + \text{H}_2$
- e) $\text{Mg} + 2 \text{H}^+ \rightarrow \text{Mg}^{2+} + \text{H}_2$
- f) $\text{H}_2 + \text{I}_2 \rightarrow 2 \text{HI}$
- g) $\text{BrO}_3^- + 5 \text{Br}^- + 6 \text{H}^+ \rightarrow 3 \text{Br}_2 + 3 \text{H}_2\text{O}$

De stoffer, der optræder på venstre side af pilene i reaktionsskemaerne, kaldes reaktanterne, og de stoffer der optræder på højre side af pilene, kaldes reaktionsprodukterne. Bemærk, at alle reaktionerne er "afstemte", dvs. at antallet af atomer af de forskellige indgående grundstoffer er ens før og efter reaktionen, samt at nettoladningen før og efter reaktionen er den samme. (Kontrollér !).

Ad a): Denne reaktion skal foregå ved en ret høj temperatur (omkring 800 °C). Her omdannes to hydrogenmolekyler og to nitrogenmonoxid-molekyler til to vand-molekyler og et nitrogenmolekyle.

Ad b): I denne reaktion spaltes et methylacetat-molekyle ($\text{CH}_3\text{COOCH}_3$) ved reaktion med vand i to andre molekyler. (En sådan spaltningsproces ved optagelse af vand kaldes en hydrolyse).

Ad c): I denne reaktion spaltes molekylet N_2O_3 i de to mindre molekyler NO_2 og NO . Der er altså her kun ét stof på venstre side af reaktionspilen, dvs. kun én reaktant.

Ad d): I denne reaktion opløses et metal (her magnesium Mg) i en syre (her saltsyre HCl), hvorved der dannes brint (H_2) og et såkaldt "salt" (her MgCl_2)

Ad e): Denne reaktion er reelt set den samme som d), idet saltsyren er en vandig opløsning af gasen hydrogenchlorid HCl , og i denne opløsning er HCl spaltet ($\text{HCl} \rightarrow \text{H}^+ + \text{Cl}^-$) i såkaldte ioner: en brint-ion H^+ (der også kaldes en hydron) og en chlorid-ion Cl^- . Det lille plus ved brintionen H^+ indikerer, at der mangler en elektron, hvormed vi får en positivt ladet ion, og det lille minus ved Cl^- indikerer, at der er en ekstra elektron tilstede, hvormed vi får en negativt ladet ion. De to plusser ved Mg^{2+} indikerer, at der mangler to elektroner omkring kernen i magnesium-ionen. Reaktionen består således i, at to brint-ioner hver "stjæler" en elektron fra magnesium, hvorved den dobbelt-positive magnesium-ion Mg^{2+} fremkommer, samtidig med at der dannes brintmolekylet H_2 . Vi ser således, at chlorid-ionerne reelt ikke indgår i reaktionen, hvilket stemmer fint overens med, at saltet MgCl_2 i den vandige opløsning er spaltet i en magnesium-ion Mg^{2+} og to chlorid-ioner Cl^- .

Ad f): Denne reaktion skal også foregå ved en ret høj temperatur (400-800 °C). Det interessante ved denne reaktion er, at efterhånden som processen forløber, og der dannes mere og mere hydrogeniodid (HI), kan reaktionen gå den modsatte vej, altså $\text{HI} + \text{HI} \rightarrow \text{H}_2 + \text{I}_2$. Vi siger, at reaktionen er reversibel. På et tidspunkt vil den hastighed, hvormed de to modsat rettede reaktioner foregår, være den samme. Koncentrationerne af de forskellige stoffer vil herefter ikke ændre sig, og vi siger, at der har indstillet sig, at der er opnået eller, at der er indtrådt en kemisk ligevægt. Mange andre reaktioner (i realiteten de fleste) er også reversible. Men "tidspunktet" (koncentrationen af stofferne), hvor der forekommer ligevægt, kan være "forskudt" mere eller mindre til den ene af siderne i reaktionsskemaet.

Reaktioner, der ikke kan forløbe den modsatte vej, siges at være irreversible. (Reaktionen i d) er et eksempel herpå). Reaktioner, hvor der først forekommer ligevægt, når koncentrationerne af reaktanterne er meget lavere end startkoncentrationerne, kan i praksis – og i modelsammenhænge – opfattes som irreversible. (Man siger kort, at ligevægten da er ”forskudt langt mod højre”),

Ad g): Dette er et eksempel på en reaktion med mere end to reaktanter. Reaktionen er opskrevet efter samme princip som reaktionen i e), hvor kun de i reaktionen indgående ioner anføres. Reaktionen foregår, når vi har kaliumbromat og kaliumbromid i en såkaldt sur opløsning (i en syre).

Undertiden bruges benævnelsen ”kemisk proces” synonymt med ”kemisk reaktion”. Men ofte benyttes benævnelsen ”kemisk proces” til at beskrive den kemiske omdannelse, der alt i alt på et givet tidspunkt foregår i det eksperiment, i den produktion osv., som man konkret taler om, medens den ”kemiske reaktion” står for, hvad der sker på molekylært niveau.

Reaktionshastighed – generelle forhold.

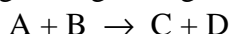
Der er meget stor forskel på, hvor hurtigt forskellige kemiske reaktioner foregår. Og for en given kemisk proces afhænger reaktionshastigheden af en række forskellige faktorer, idet det følgende spiller en rolle for, hvor hurtigt processen/reaktionen forløber:

- koncentrationerne af reaktanterne
- temperaturen, som processen foregår ved
- de kemiske stoffer selv
- de kemiske stoffers tilstandsform (fast, flydende, gas) – og dermed deres overfladeareal
- tilstedeværelse af eventuelle katalysatorer eller inhibitorer (dvs. stoffer, der hhv. øger eller mindsker reaktionens hastighed uden selv at blive forbrugt i processen).

Vi vil i denne tekst kun se på koncentrationernes betydning. Alle de øvrige faktorer indgår i den såkaldte hastighedskonstant k (se senere). Vi vil altså antage, at vi ser på en kemisk proces, hvor temperaturen, eventuelle katalysatorer osv. er kendt og fastholdt – og disse forhold fører til en given værdi af hastighedskonstanten.

Det er af stor betydning at kende et udtryk for, hvordan givne reaktioner udvikler sig efterhånden som tiden går. Dette gælder f.eks. i laboratorieforsøg, hvor diverse processer skal testes mm., og i den kemiske produktion/industri, hvor disse reaktioner indgår. Men det gælder også i mere dagligdags processer som f.eks. at ruste, at irre, at størkne, samt i biologisk/medicinske processer som at blive solbrændt, alkoholforbrænding og andre kemiske energiomdannelse i organismer, omdannelse af medicin, hvor koncentrationen af de tilbageværende kemiske stoffer i organismen følges, osv. Hvis man ved, hvordan reaktionshastigheden udvikler sig med tiden, kan man til et vilkårligt tidspunkt beregne, hvad koncentrationen af de i reaktionen indgående stoffer vil være. Det forudsætter naturligvis, at man også kender startværdien af koncentrationen af disse stoffer (eller mere præcist: deres værdi til et givet tidspunkt).

Det ville derfor være fristende at forsøge at opstille en model for reaktionshastigheden som funktion af tiden efter samme principper, som f.eks. anvendes ved opstilling af en model for radioaktivt henfald eller en gærcellepopulations vækst. Lad os analysere situationen, og starte med at se på en simpel reaktion, hvor stof A og B reagerer og fører til stof C og D, altså:



Et mål for, hvor hurtigt denne reaktion udvikler sig, må være den hastighed hvormed koncentrationen af A ændres (eller den hastighed hvormed koncentrationen af B ændres, osv.). Så reaktionshastigheden v er givet ved:

$$v(t) = -\frac{d[A](t)}{dt} \quad \text{eller kort:} \quad v(t) = -\frac{d[A]}{dt}$$

hvor $[A](t)$ betyder koncentrationen af stoffet A til tiden t (og når t er underforstået skrives der blot: $[A]$), og hvor minusset medtages, idet vi ønsker en positiv reaktionshastighed (koncentrationen af A bliver mindre, hvormed differentialkvotienten er negativ).

Hver gang der forbruges et A-molekyle, forbruges der også et B-molekyle (en sådan reaktion kaldes en 1:1-reaktion (læses: "en-til-en"-reaktion)). Og hver gang dannes der et C-molekyle og et D-molekyle. Reaktionshastigheden for den omtalte proces kan derfor angives ved (overvej !!)

$$v(t) = -\frac{d[A]}{dt} = -\frac{d[B]}{dt} = \frac{d[C]}{dt} = \frac{d[D]}{dt}$$

hvilket er væsentligt at vide, hvis man vil måle på reaktionshastigheden, idet man da vælger det stof, hvis koncentration er nemmest at bestemme. (Hvordan koncentrationer og reaktionshastigheder måles afhænger meget af den konkrete situation. Der henvises til en lærebog i kemi !).

Øvelse A.4.1.

Argumentér for, at hvis vi ser på en proces af typen: $A + 3B \rightarrow 4C + D$, så er reaktionshastigheden v givet ved:

$$v(t) = -\frac{d[A]}{dt} = -\frac{1}{3} \cdot \frac{d[B]}{dt} = \frac{1}{4} \cdot \frac{d[C]}{dt} = \frac{d[D]}{dt}$$

Kommentér dette resultat og dets betydning for måling af reaktionshastigheder. ♥

Vi vil nu fortsætte med at prøve at argumentere os frem til et udtryk for reaktionshastigheden for processen: $A + B \rightarrow C (+ D + \dots)$ Bemærk, at antallet af reaktionsprodukter er uden betydning for den følgende argumentation. Derfor står $+ D + \dots$ i parentes:

Reaktionshastigheden må afhænge af reaktanternes koncentrationer (dvs. antal molekyler pr. cm^3), idet vi må forvente, at antallet af reaktioner pr. tidsenhed vil vokse, når koncentrationerne forøges.

For at en reaktion af den omtalte type kan foregå, skal et molekyle af type A støde sammen med et molekyle af type B, hvorved der brydes en eller flere bindinger i de kemiske forbindelser og dannes en eller flere nye bindinger, hvormed der skabes nye molekyler eller ioner.

Hvis vi betragter en bestemt cm^3 af en given opløsning eller blanding af de to stoffer, så vil sandsynligheden pr. tidsenhed (P_R) for en reaktion her indenfor være proportional med sandsynligheden S_{AB} for at træffe et A-molekyle og et B-molekyle i den pågældende cm^3 . Da tilstedeværelsen af et A-molekyle er uafhængigt af tilstedeværelsen af et B-molekyle, vil S_{AB} være lig med $S_A \cdot S_B$, hvor S_A (hhv. S_B) er sandsynligheden for at træffe et A-molekyle (hhv. et B-molekyle) indenfor den givne cm^3 . Idet reaktionshastigheden v er proportional med P_R , medens S_A og S_B er proportional med koncentrationerne af A hhv. B, dvs. med $[A]$ og $[B]$, får vi i alt, at v er proportional med $[A] \cdot [B]$, dvs. at der findes en konstant k , så: $v = k \cdot [A] \cdot [B]$. Da $v = -[A]'(t)$ ville vi få differentialligningen: $-[A]'(t) = k \cdot [A] \cdot [B]$, som vi kunne løse, og problemet ville dermed stort set være løst.

Den samme argumentation ville for reaktionen $A + B + C \rightarrow D + \dots$ føre til hastighedsudtrykket: $v = k \cdot [A] \cdot [B] \cdot [C]$ Og så fremdeles ved eventuelt flere reaktanter.

Men desværre ! Sådan ser verden ikke ud.

Hvis vi f.eks. ser på processen: $\text{H}_2 + \text{NO} \rightarrow \text{H}_2\text{O} + \frac{1}{2}\text{N}_2$

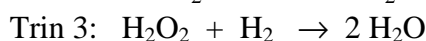
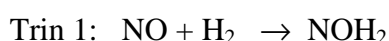
(eller mere korrekt: $2 \text{H}_2 + 2 \text{NO} \rightarrow 2 \text{H}_2\text{O} + \text{N}_2$), så viser det sig ved forskellige målinger, at der gælder følgende udtryk for reaktionshastigheden:

$$v = k \cdot [\text{H}_2] \cdot [\text{NO}]^2$$

hvilket ikke på nogen måde stemmer med den ovenfor foreslåede udledning af et udtryk for v .

Vi skulle da enten have haft: $v = k \cdot [\text{H}_2] \cdot [\text{NO}]$ eller evt. $v = k \cdot [\text{H}_2]^2 \cdot [\text{NO}]^2$ (Overvej dette !)

Pointen er, at en reaktion som $\text{H}_2 + \text{NO} \rightarrow \text{H}_2\text{O} + \frac{1}{2}\text{N}_2$ (eller: $2 \text{H}_2 + 2 \text{NO} \rightarrow 2 \text{H}_2\text{O} + \text{N}_2$) viser sig at være en såkaldt bruttoreaktion (dvs. det samlede resultat af en række "del-reaktioner"). Ifølge den kemiske litteratur er reaktionen i virkeligheden opdelt i tre del-reaktioner:



hvilket giver bruttoresultatet: $2 \text{H}_2 + 2 \text{NO} \rightarrow 2 \text{H}_2\text{O} + \text{N}_2$ (Kontrollér!)

En sådan serie af delreaktioner, der alt i alt beskriver en given bruttoreaktion, kaldes en reaktionsmekanisme for bruttoreaktionen, delreaktionerne kaldes elementarreaktioner for reaktionsmekanismen, og de stoffer der dannes og omdannes igen undervejs i reaktionsmekanismen (det vil i den ovenstående reaktionsmekanisme sige NOH_2 og H_2O_2) kaldes mellemprodukter.

Den ovenfor anførte argumentation for hastigheden af en reaktion af typen $\text{A} + \text{B} \rightarrow \text{C} (+ \text{D} \dots)$ gælder for de enkelte elementarreaktioner (når der er tale om en fuldstændig blanding af reaktanterne, så de kan komme i kontakt og dermed reagere).

For trin 1 gælder der altså: $v_1 = k_1 \cdot [\text{NO}] \cdot [\text{H}_2]$, for trin 2 gælder der: $v_2 = k_2 \cdot [\text{NOH}_2] \cdot [\text{NO}]$ og for trin 3 gælder der: $v_3 = k_3 \cdot [\text{H}_2\text{O}_2] \cdot [\text{H}_2]$

Nu forholder det sig således, at de enkelte elementarreaktioner ikke forløber lige hurtigt (nogle stoffer er mere reaktionsvillige end andre stoffer – og denne villighed afhænger også af, hvilke andre stoffer det er, man forsøger at få et givet stof til at reagere med). Det er dermed klart, at det er den langsomste elementarreaktion, der er afgørende for, hvor hurtig den samlede reaktionsmekanisme (og dermed den samlede bruttoreaktion) forløber.

I den ovenstående reaktionsmekanisme er det reaktionen i trin 2, der er den langsomste. Dermed er trin 1 og trin 2 med til at bestemme hastighedsudtrykket for bruttoreaktionen, hvorimod trin 3 forløber så hurtigt, at det ingen indflydelse får på det samlede hastighedsudtryk (mellemproduktet H_2O_2 forbruges straks – relativt set – efter at det er blevet dannet). (Overvej dette !).

Da reaktionen i trin 2 er den langsomste, er reaktionshastigheden v for bruttoreaktionen proportional med v_2 , dvs. der findes en konstant c , så $v = c \cdot k_2 \cdot [\text{NOH}_2] \cdot [\text{NO}]$.

Koncentrationen af mellemproduktet NOH_2 er proportional med koncentrationerne af NO og H_2 . (Dette skyldes, at trin 1 er hurtigere end trin 2, hvormed der relativt hurtigt opnås og løbende oprettholdes en kemisk ligevægt for denne reaktion).

Der findes derfor en konstant d , så $[\text{NOH}_2] = d \cdot [\text{NO}] \cdot [\text{H}_2]$. Udtrykket for v bliver dermed til:

$$v = k \cdot [\text{H}_2] \cdot [\text{NO}]^2$$

(hvor $k = c \cdot d \cdot k_2$), hvilket er det målte hastighedsudtryk.

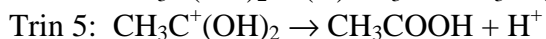
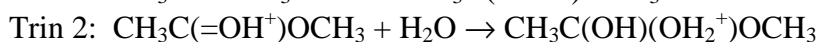
Eksempel A.4.2.

Hvis vi ser på reaktionen: $\text{CH}_3\text{COOCH}_3 + \text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{CH}_3\text{COOH} + \text{CH}_3\text{OH}$, så kan man i den kemiske litteratur læse, at hastighedsudtrykket er givet ved: $v = k \cdot [\text{CH}_3\text{COOCH}_3] \cdot [\text{H}_2\text{O}]$.

Dette stemmer jo fint med den oprindeligt fremsatte idé til argumentation for et hastighedsudtryk for en given reaktion, så her fås "det ventede" udtryk.

Det viser sig imidlertid, hvis man måler og analyserer kemisk på reaktionen, at der er tale om en ret kompliceret reaktionsmekanisme på fem trin, og at det blot ved en tilfældighed giver det omtalte "forventede" hastighedsudtryk.

Reaktionsmekanismen for bruttoreaktionen: $\text{CH}_3\text{COOCH}_3 + \text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{CH}_3\text{COOH} + \text{CH}_3\text{OH}$ er:



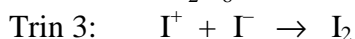
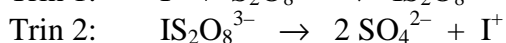
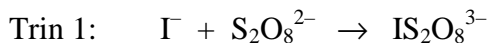
hvor trin 2 er den langsomste og dermed den hastighedsbestemmende reaktion. (Tegnet = betyder, at der optræder såkaldte dobbeltbindinger). Vi vil dog ikke gå dybere ind i sagen her. ♥

Eksempel A.4.3.

a) Bruttoreaktionen: $2 \text{I}^- + \text{S}_2\text{O}_8^{2-} \rightarrow \text{I}_2 + 2 \text{SO}_4^{2-}$ har følgende hastighedsudtryk:

$$v = k \cdot [\text{I}^-] \cdot [\text{S}_2\text{O}_8^{2-}]$$

og følgende reaktionsmekanisme (hvor trin 1 er det langsomste):

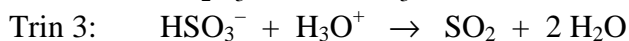
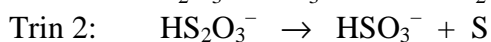
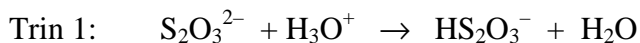


Vi ser, at hastighedsudtrykket for bruttoreaktionen stemmer overens med hastighedsudtrykket for den første elementarreaktion, men derimod ikke med udtrykket $v = k \cdot [\text{I}^-]^2 \cdot [\text{S}_2\text{O}_8^{2-}]$, som man ville få ifølge det ovenfor omtalte forsøg på at argumentere for hastigheden (overvej !).

b) Bruttoreaktionen: $\text{S}_2\text{O}_3^{2-} + 2 \text{H}_3\text{O}^+ \rightarrow \text{S} + \text{SO}_2 + 3 \text{H}_2\text{O}$ har følgende hastighedsudtryk:

$$v = k \cdot [\text{S}_2\text{O}_3^{2-}]$$

og følgende reaktionsmekanisme (hvor trin 2 er det langsomste):



så reaktanten H_3O^+ optræder slet ikke i hastighedsudtrykket. ♥

Nogle reaktioner giver ikke så "pæne" hastighedsudtryk som de ovenfor omtalte. Dette skyldes bl.a., at reaktanterne i den/de langsomste elementarreaktioner ikke står i et simpelt antalsmæssigt forhold til reaktanterne i bruttoprocessen, og at nogle af elementarreaktionerne er reversible og samtidig må "vente på" den langsomste elementarreaktion, hvilket i alt påvirker reaktionshastigheden.

Eksempel A.4.4.

Ifølge den kemiske litteratur gælder der (tilsyneladende) bl.a. følgende:

a) Hastighedsudtrykket for reaktionen: $\text{CO} + \text{Cl}_2 \rightarrow \text{COCl}_2$ er givet ved: $v = k \cdot [\text{CO}] \cdot [\text{Cl}_2]^{3/2}$

b) Hastighedsudtrykket for reaktionen: $\text{H}_2 + \text{Br}_2 \rightarrow 2 \text{HBr}$ er givet ved: $v = k \cdot \frac{[\text{H}_2] \cdot [\text{Br}_2]^{3/2}}{[\text{Br}_2] + c \cdot [\text{HBr}]}$
hvor k og c er konstanter.

c) Hastighedsudtrykket for reaktionen: $2 \text{N}_2\text{O} \rightarrow 2 \text{N}_2 + \text{O}_2$ er givet ved: $v = k \cdot \frac{[\text{N}_2\text{O}]}{1 + c \cdot [\text{O}_2]}$

hvor k og c er konstanter.

d) Hastighedsudtrykket for reaktionen: $\text{BrO}_3^- + 5 \text{Br}^- + 6 \text{H}^+ \rightarrow 3 \text{Br}_2 + 3 \text{H}_2\text{O}$ er givet ved:

$$v = k \cdot \frac{[\text{BrO}_3^-] \cdot [\text{H}^+]^2}{[\text{Br}^-]}$$

Bemærk i øvrigt vedrørende denne proces, at hvis det ovenstående forsøg på at argumentere for reaktionshastigheden ud fra bruttoreaktionen skulle være korrekt, så skulle vi hér se på sandsynligheden for at 12 partikler støder sammen samtidigt og reagerer med hinanden. Dette må betragtes som helt usandsynligt, hvormed reaktionen ikke ville kunne forløbe – men det gør den. Og det skyldes som nævnt, at bruttoreaktionen foregår i flere trin i en reaktionsmekanisme, som i alt giver den omtalte bruttoreaktion. Vi vil dog ikke komme yderligere ind på emnet her. ♥

Det er af såvel teoretiske som praktiske årsager vigtigt at kende reaktionsmekanismen – og dermed elementarreaktionerne. I industrielle sammenhænge mm. kan man derefter bl.a. lede efter katalysatorer, som kan øge hastigheden af processen – eller efter inhibitorer, som kan sænke hastigheden af processen –, afhængig af hvad man ønsker. (Overvej dette nærmere !)

Og hvis man kender reaktionsmekanismen, kan man som vist ovenfor ofte finde et udtryk for hastigheden af bruttoreaktionen – og ud fra dette kan man ad matematisk vej bestemme udviklingen i koncentrationen af reaktanter eller reaktionsprodukter, hvilket som tidligere nævnt er vigtigt.

Problemet er bare, at man i mange tilfælde ikke kender (eller kendte) reaktionsmekanismen.

Situationen vendes derfor ”på hovedet”, idet man ved hjælp af en række forskellige målemetoder forsøger at bestemme et udtryk for bruttoreaktionens hastighed, og på baggrund af dette – og anden viden om de konkrete processer – giver et kvalificeret bud på, hvordan reaktionsmekanismen kan tænkes at se ud, så den bl.a. giver det eksperimentelt fundne hastighedsudtryk.

Imidlertid kan der ofte tænkes flere forskellige mulige reaktionsmekanismer, som kan forklare den samme bruttoreaktion og det hertil hørende hastighedsudtryk. Det er derfor alt i alt en kompliceret affære at finde en korrekt reaktionsmekanisme, og der skal ofte flere forskellige målinger og målingstyper mm. til at afgøre sagen.

Reaktionshastighed og reaktionsorden.

Lad os starte med igen at fastslå, at hastighedsudtrykket for en given (brutto)reaktion bestemmes eksperimentelt – det kan ikke ” aflæses ” ud fra reaktionsskemaet.

Vi vil nu opstille nogle modeller for, hvordan visse ofte forekommende hastighedsudtryk kan føre til en beskrivelse af udviklingen af koncentrationen af en af reaktanterne eller reaktionsprodukterne.

Hvis vi ved målinger (altså eksperimentel bestemmelse) finder, at udviklingen i koncentrationen følger en af disse modeller, giver det grundlag for at antage, at reaktionen med stor sandsynlighed følger det hastighedsudtryk, der ligger til grund for modellen. (Omtales flere gange i det følgende).

I mange processer kan reaktionshastigheden v beskrives ved et udtryk på følgende form:

- Hvis der én reaktant A, så er: $v = k \cdot [A]^n$
 - Hvis der to reaktanter A og B, så er: $v = k \cdot [A]^n \cdot [B]^m$
 - Hvis der er tre reaktanter A, B og C, så er: $v = k \cdot [A]^n \cdot [B]^m \cdot [C]^p$
- hvor n , m og p enten er 0 eller et lille helt tal (almindeligvis 1, 2 eller 3).

Tallet n kaldes ordenen af reaktionen med hensyn til reaktanten A, tallet m kaldes ordenen af reaktionen med hensyn til reaktanten B, og tallet p kaldes ordenen af reaktionen med hensyn til reaktanten C. Størrelsen k er som tidligere omtalt hastighedskonstanten for den givne proces.

I reaktionerne b) og c) kaldes summen af reaktanternes orden for den samlede reaktions orden.

I b) ser vi altså på en proces af orden $n + m$, og i c) ser vi på en proces af orden $n + m + p$.

I den følgende matematiske beskrivelse vil vi indskrænke os til at se på sådanne processer, hvor den samlede orden er 0, 1, 2 eller 3. (Dette er dog ikke nogen stor indskrænkning, da der ikke findes særligt mange processer af fjerde eller højere orden).

Eksempel A.4.5.

- I 0.ordens reaktioner er hastighedsudtrykket givet ved: $v = k$. Hastigheden er altså konstant, dvs. uafhængig af reaktanternes koncentration. Sådanne reaktioner forekommer ofte, hvor der er "pladsproblemer", så reaktanterne ikke kan nå hinanden.

Dette kan f.eks. forekomme, hvis den ene reaktant A er i en metaloverflade og den anden reaktant B er i en væske eller en gas, som er i berøring med metaloverfladen. Fra et vist niveau i processen er metaloverfladen "dækket" af B-reaktanter, og selvom vi øger koncentrationen heraf, ændrer det ikke på reaktionens hastighed.

Et andet eksempel er, hvor reaktionen kun kan foregå v.hj.a. en katalysator. Hvis denne katalysator kun findes i en begrænset mængde, vil der højst kunne foregå en vis mængde processer pr. tidsenhed, uanset hvor meget vi øger koncentrationen af andre reaktanter, idet alle katalysatormolekyler er "optaget".

- I 1.ordens reaktioner er hastighedsudtrykket givet ved: $v = k \cdot [A]$

Et eksempel på en 1.ordens reaktion ses i eksempel A.4.3 b).

Et andet eksempel findes i følgende reaktion: $2 \text{N}_2\text{O}_5 \rightarrow 4 \text{NO}_2 + \text{O}_2$, hvor der gælder, at

$$v = k \cdot [\text{N}_2\text{O}_5]$$

- I 2.ordens reaktioner er hastighedsudtrykket givet ved: $v = k \cdot [A] \cdot [B]$ eller $v = k \cdot [A]^2$

(Der er selvfølgelig også muligheden $v = k \cdot [B]^2$, hvis der indgår mere en én reaktant i processen. Men den er principielt det samme som $v = k \cdot [A]^2$, idet det kun er et spørgsmål om navngivning af reaktanterne i den generelle proces – hvad kaldes A og hvad kaldes B).

Eksempler på 2.ordens reaktioner findes i eksempel A.4.2 og eksempel A.4.3 a).

Et andet eksempel findes i følgende reaktion: $\text{NO}_2 + \text{CO} \rightarrow \text{NO} + \text{CO}_2$, hvor der gælder, at

$$v = k \cdot [\text{NO}_2]^2 \cdot [\text{CO}]^0 = k \cdot [\text{NO}_2]^2$$

d) I 3.ordens reaktioner er hastighedsudtrykket givet ved: $v = k \cdot [A] \cdot [B] \cdot [C]$, $v = k \cdot [A]^2 \cdot [B]$ eller $v = k \cdot [A]^3$ (og hermed "symmetriske" udtryk).

Et eksempel på en 3.ordens reaktion er: $2 \text{H}_2 + 2 \text{NO} \rightarrow 2 \text{H}_2\text{O} + \text{N}_2$, hvor $v = k \cdot [\text{H}_2] \cdot [\text{NO}]^2$ ♥

Inden vi går i gang med den matematiske beskrivelse, skal det lige omtales, at koncentrationer måles i enheden stofmængde (dvs. antal molekyler eller ioner) pr. rumfangsenhed. Her er det almindeligt at angive stofmængden v.h.j.a. enheden "mol", som svarer til $6,02214 \cdot 10^{23}$ molekyler (begrundelse: se i en kemibog), medens der som rumfangsenhed anvendes enheden liter (L).

Enheden mol/L (mol pr. liter) kaldes molær og skrives kort M. Koncentrationerne måles altså i M. Reaktionshastigheden måles dermed i M/s, dvs. molær pr. sekund (overvej).

Vi ser desuden, at hastighedskonstanten k måles i forskellige enheder, afhængig af ordenen for reaktionen, idet der gælder følgende om hastighedskonstantens enhed (overvej !):

- I en 0.ordens reaktion er enheden for hastighedskonstanten: M/s
- I en 1.ordens reaktion er enheden for hastighedskonstanten: $1/\text{s} = \text{s}^{-1}$
- I en 2.ordens reaktion er enheden for hastighedskonstanten: $\frac{1}{\text{s} \cdot \text{M}} = \text{s}^{-1} \cdot \text{M}^{-1}$
- I en 3.ordens reaktion er enheden for hastighedskonstanten: $\frac{1}{\text{s} \cdot \text{M}^2} = \text{s}^{-1} \cdot \text{M}^{-2}$

Matematisk model for en 0.ordens reaktion.

I 0.ordens reaktioner er hastighedsudtrykket givet ved: $v = k$. Reaktionshastigheden er altså konstant lig med k, dvs. vi får:

$$-\frac{d[A](t)}{dt} = k \Leftrightarrow \frac{d[A](t)}{dt} = -k \Leftrightarrow [A](t) = -k \cdot t + c$$

hvor c er en konstant. Ved at sætte tiden lig med 0 ses, at $c = [A](0) = [A]_0$, hvor vi har indført betegnelsen $[A]_0$ for begyndelseskoncentrationen af reaktanten A. Vi får dermed i alt:

$[A](t) = -k \cdot t + [A]_0$ <p>Model for 0.ordens reaktion</p>
--

I en 0.ordens reaktion er koncentrationen altså en lineært aftagende funktion af tiden.

Hvis vi måler koncentration af A til en række forskellige tidspunkter og afsætter disse målinger i et $(t, [A](t))$ -koordinatsystem, og hvis grafen her giver en aftagende ret linie, så kan vi med stor sandsynlighed konkludere, at reaktionen er af 0.te orden (med hensyn til reaktanten A).

Hastighedskonstanten k er den numeriske værdi af liniens hældning.

Matematisk model for en 1.ordens reaktion.

I 1.ordens reaktioner er hastighedsudtrykket givet ved: $v = k \cdot [A]$. Reaktionshastigheden er altså proportional med den aktuelle værdi af koncentrationen af A, dvs. vi får:

$$-\frac{d[A](t)}{dt} = k \cdot [A](t) \Leftrightarrow \frac{d[A](t)}{dt} = -k \cdot [A](t) \Leftrightarrow [A](t) = c \cdot e^{-k \cdot t}$$

hvor c er en konstant (i sidste omskrivning har vi anvendt sætning 3.1).

Konstanten c findes ved at indsætte tiden $t = 0$, hvilket giver os: $c = [A](0) = [A]_0$. Vi får da:

$$[A](t) = [A]_0 \cdot e^{-k \cdot t}$$

Model for 1.ordens reaktion

I en 1.ordens reaktion er koncentrationen altså en eksponentielt aftagende funktion af tiden.

Vi kan derfor undersøge, om en given reaktion er af 1. orden med hensyn til reaktanten A ved at afsætte eksperimentelle data (dvs. en række målte værdier af tiden t og koncentrationen $[A](t)$) i et enkeltlogaritmisk koordinatsystem – og så se om det giver en ret linie.

Det kan imidlertid bedre betale sig at afsætte punkterne $(t, \ln[A])$ i et almindeligt koordinatsystem, og så se om det giver en ret linie. Der gælder nemlig, at

$$[A](t) = [A]_0 \cdot e^{-k \cdot t} \Leftrightarrow \ln[A](t) = \ln[A]_0 - k \cdot t$$

Hvis vi får en ret linie ved at afsætte punkterne $(t, \ln[A])$ i et almindeligt koordinatsystem, så får vi derfor dels, at der med stor sandsynlighed er tale om en 1.ordens reaktion (med hensyn til A), dels at hastighedskonstanten k er den numeriske værdi af liniens hældning.

Matematisk model for en 2.ordens reaktion – simpelt tilfælde.

I 2.ordens reaktioner er hastighedsudtrykket givet ved: $v = k \cdot [A] \cdot [B]$ eller $v = k \cdot [A]^2$.

I første omgang vil vi se på det ”simple tilfælde”, dvs. $v = k \cdot [A]^2$. Reaktionshastigheden er altså proportional med kvadratet på den aktuelle værdi af koncentrationen af A, dvs. vi får:

$$-\frac{d[A](t)}{dt} = k \cdot ([A](t))^2 \Leftrightarrow \frac{d[A](t)}{dt} = -k \cdot ([A](t))^2$$

For simpelheds skyld sætter vi $y = [A]$ (eller mere korrekt: $y(t) = [A](t)$).

Vi skal altså løse differentialligningen: $\frac{dy}{dt} = -k \cdot y^2$

Hertil anvendes metoden ”separation af de variable” (se kapitel 5):

$$\frac{dy}{dt} = -k \cdot y^2 \Leftrightarrow \int \frac{1}{y^2} dy = -\int k dt \Leftrightarrow -\frac{1}{y} = -kt + c \Leftrightarrow \frac{1}{y} = kt + q$$

hvor c og q er konstanter ($q = -c$).

q findes ved at sætte $t = 0$, hvormed vi får: $q = \frac{1}{y(0)} = \frac{1}{y_0}$, hvor y_0 er koncentrationen til tiden 0.

Da $q > 0$, da $k > 0$ (idet $v > 0$, da processen ellers ikke ville forløbe), og da $t \geq 0$, ser vi i alt, at: $kt + q > 0$ for alle værdier af t. Vi kan derfor isolere y i den ovenstående ligning:

$$\frac{1}{y} = kt + q \Leftrightarrow y = \frac{1}{kt + q} \Leftrightarrow [A](t) = \frac{1}{kt + \frac{1}{[A]_0}} \Leftrightarrow [A](t) = \frac{[A]_0}{[A]_0 \cdot kt + 1}$$

hvor vi har genindført, at $[A] = y$. Vi kan dermed konkludere:

$$[A](t) = \frac{[A]_0}{[A]_0 \cdot kt + 1}$$

Model for en 2.ordens reaktion, hvor $v = k \cdot [A]^2$

Hvis vi ser på udtrykket: $\frac{1}{y} = kt + q$ og heri indsætter den fundne værdi for q , samt $[A] = y$, får vi:

$$\frac{1}{[A](t)} = k \cdot t + \frac{1}{[A]_0}$$

Vi kan derfor undersøge, om en given reaktion er af 2. orden i det simple tilfælde ved for eksperimentelle data at afsætte punkter på formen: $(t, \frac{1}{[A](t)})$ i et almindeligt koordinatsystem – og så se om det giver en ret linie. Hvis det er tilfældet, er der med stor sandsynlighed tale om en 2.ordens reaktion (mht. A), hvor hastighedskonstanten k er lig med liniens hældningskoefficient.

En speciel udgave af det simple tilfælde får vi, hvis vi ser på en 1:1-reaktion: $A + B \rightarrow C (+ D \dots)$ med hastighedsudtrykket: $v = k \cdot [A] \cdot [B]$, hvor startkoncentrationerne $[A]_0$ og $[B]_0$ er ens, dvs. $[A]_0 = [B]_0$. (I praksis er det nok, at startkoncentrationerne stort set er ens, dvs. $[A]_0 \approx [B]_0$).

Da det er en 1:1-reaktion, vil der nemlig til ethvert tidspunkt t i processen gælde, at $[A](t) = [B](t)$, hvormed hastighedsudtrykket kan omskrives til: $v = k \cdot [A]^2$, og den ovenstående løsning kan bruges. Vi ved derfor, hvordan koncentrationen af A (og dermed af B) udvikler sig med tiden.

Men det forudsætter altså, at vi på forhånd ved, at hastighedsudtrykker er givet ved: $v = k \cdot [A] \cdot [B]$

Hvis vi derimod ikke kender hastighedsudtrykket for reaktionen: $A + B \rightarrow C (+ D \dots)$, så har vi følgende situation: Selvom vi ved, at startkoncentrationerne er ens, og selvom vi ved hjælp af et sæt eksperimentelle data for reaktionen konstaterer, at der må være tale om en 2.ordens reaktion, så er det ikke nok til at afgøre, om hastighedsudtrykket er givet ved: $v = k \cdot [A] \cdot [B]$ eller: $v = k \cdot [A]^2$.

(Begge muligheder eksisterer, jfr. eksempel A.4.5 c)).

Koncentrationen af A som funktion af tiden opfører sig ens i de to omtalte simple tilfælde, men reaktionsmekanismerne er forskellige. Hvis vi derfor måler $[A](t)$, så giver det samme type resultat i de to tilfælde, men vi ved ikke, om reaktionen er af 1. eller 2. orden med hensyn til A, kun at den er det med hensyn til A og B. Der skal flere målinger til. (Se senere under pseudo-ordens-reaktioner).

Vi skal også senere se på 2.ordens reaktioner i mindre simple tilfælde.

Matematisk model for en 3.ordens reaktion.

I 3.ordens reaktioner er hastighedsudtrykket givet ved: $v = k \cdot [A] \cdot [B] \cdot [C]$, $v = k \cdot [A]^2 \cdot [B]$ eller $v = k \cdot [A]^3$ (og hermed "symmetriske" udtryk).

Vi vil her kun se på den sidstnævnte situation (og dermed også på de specialtilfælde af de øvrige hastighedsudtryk, hvor der er tale om 1:1-reaktioner og hvor startkoncentrationerne er ens).

Vi har altså, at: $-\frac{d[A](t)}{dt} = k \cdot ([A](t))^3$ og dermed at: $\frac{d[A](t)}{dt} = -k \cdot ([A](t))^3$

Hvis vi som tidligere sætter $y(t) = [A](t)$, så skal vi løse ligningen: $\frac{dy}{dt} = -k \cdot y^3$, og det foregår v.h.j.a. metoden "separation af de variable". Vi får:

$$\frac{dy}{dt} = -k \cdot y^3 \Leftrightarrow \int \frac{1}{y^3} dy = -\int k dt \Leftrightarrow -\frac{1}{2} \cdot \frac{1}{y^2} = -k \cdot t + c \Leftrightarrow \frac{1}{y^2} = 2k \cdot t + q$$

hvor c og q er en konstanter ($q = -2c$).

q findes ved at sætte $t = 0$, hvormed vi får: $q = \frac{1}{y(0)^2} = \frac{1}{y_0^2}$, hvor y_0 er startkoncentrationen.

Da $q > 0$, da $k > 0$ (idet $v > 0$, da processen ellers ikke ville forløbe), og da $t \geq 0$, ser vi i alt, at: $2kt + q > 0$ for alle værdier af t . Vi kan derfor isolere y i den ovenstående ligning:

$$\frac{1}{y^2} = 2k \cdot t + q \Leftrightarrow y^2 = \frac{1}{2k \cdot t + q} \Leftrightarrow y = \sqrt{\frac{1}{2k \cdot t + q}}$$

hvor vi i sidste omskrivning har anvendt, at $y > 0$ (koncentrationen er et positivt tal!).

Hvis vi genindfører, at $[A] = y$, så får vi:

$$[A](t) = \sqrt{\frac{1}{2k \cdot t + \frac{1}{[A]_0^2}}} \Leftrightarrow [A](t) = \sqrt{\frac{[A]_0^2}{2 \cdot [A]_0^2 \cdot k \cdot t + 1}}$$

hvormed vi kan konkludere, at udviklingen af koncentrationen af A som funktion af tiden t er:

$$[A](t) = \sqrt{\frac{[A]_0^2}{2 \cdot [A]_0^2 \cdot k \cdot t + 1}}$$

Model for en 3.ordens reaktion, hvor $v = k \cdot [A]^3$

Hvis vi ser på udtrykket: $\frac{1}{y^2} = 2k \cdot t + q$ og heri indsætter den fundne værdi for q og $[A] = y$, får vi:

$$\frac{1}{[A](t)^2} = 2k \cdot t + \frac{1}{[A]_0^2}$$

Vi kan derfor undersøge, om en given reaktion er af 3. orden (i det simple tilfælde) ved for eksperimentelle data at afsætte punkter på formen: $(t, \frac{1}{[A](t)^2})$ i et almindeligt koordinatsystem – og så

se om det giver en ret linie. Hvis det er tilfældet, er der med stor sandsynlighed tale om en 3.ordens reaktion, hvor hastighedskonstanten k er lig med halvdelen af liniens hældningskoefficient.

Øvelse A.4.6.

Lav ud fra den ovenstående teori en kort oversigt over de grafiske og beregningstekniske metoder, der anvendes til at afgøre, om der på baggrund af et givet sæt eksperimentelle data med stor sandsynlighed kan konkluderes, at der er tale om en 0., 1., 2. eller 3.ordens reaktion mht. A ♥

Øvelse A.4.7.

I en given reaktion indgår et stof A. Der er målt følgende sammenhæng mellem tiden t (målt i minutter) og koncentrationen [A]:

Tid / min.	0	12	17	24	40	58
[A] M	0,050	0,038	0,033	0,030	0,021	0,019
Tid / min.	90	128	176	210	275	330
[A] M	0,014	0,010	0,0081	0,0066	0,0056	0,0046

- Afgør, om der kan være tale om en 0., 1., 2. eller 3.ordens reaktion med hensyn til A.
- Bestem hastighedskonstanten k (husk enheden).
- Hvornår er koncentrationen af A lig med $2,3 \cdot 10^{-3}$ M ? ♥

Øvelse A.4.8.

For reaktionen: $2 \text{N}_2\text{O}_5 \rightarrow 4 \text{NO}_2 + \text{O}_2$ er der i et givet forsøg målt følgende værdier:

Tid / sek.	30	90	150	210	270	330	390	450	510	570	630
[N ₂ O ₅] M	0,54	0,42	0,37	0,30	0,22	0,19	0,16	0,12	0,11	0,084	0,071

- Gør rede for, at reaktionen med god tilnærmelse kan beskrives som en 1.ordens reaktion.
- Bestem hastighedskonstanten.
- Bestem startkoncentrationen af [N₂O₅]
- Hvornår er koncentrationen af [N₂O₅] lig med $8,5 \cdot 10^{-3}$ M ?
- Hvor stor er reaktionshastigheden til tiden 1000 sek. ? ♥

Øvelse A.4.9.

I en 0.ordens reaktion er startkoncentrationen af reaktanten A givet ved: 0,08 M, og efter 12 minutter er [A] = 0,049 M

- Bestem hastighedskonstanten.
- Hvis reaktionen fortsætter med at være af 0.te orden, hvornår vil den så være løbet til ende ? ♥

Øvelse A.4.10.

Vi ser på reaktionen: $A + B \rightarrow \text{produkt}$. Det oplyses, at reaktionen er af 1. orden mht. A og af 2. orden mht. B. Om startkoncentrationerne gælder: $[A]_0 = [B]_0 = 0,014$ M, og hastighedskonstanten er givet ved: $k = 0,45 \text{ s}^{-1} \cdot \text{M}^{-2}$

- Bestem funktionsforskriften for [B](t)
- Bestem koncentrationen af B efter 0,5 timer og efter 3 timer.
- Tegn grafen for [B](t) ♥

Øvelse A.4.11.

Om en 2.ordens reaktion er hastighedsudtrykket givet ved: $v = k \cdot [A]^2$.

Det oplyses desuden, at $[A](200 \text{ sek.}) = 0,0028 \text{ M}$ og $[A](500 \text{ sek.}) = 0,0017 \text{ M}$

- Bestem hastighedskonstanten.
- Bestemt funktionsforskriften for $[A](t)$
- Tegn grafen for $[A](t)$ ♥

Pseudo-ordens-reaktioner

Det er vanskeligt at bestemme reaktionsordenen for en reaktion, hvor der skal indgå flere reaktanter i hastighedsudtrykket, idet alle reaktanternes koncentrationer ændrer sig løbende efterhånden som tiden (og dermed processen) skrider frem, og man skal derfor måle på flere ting på én gang.

En metode til at løse dette problem fremgår af det følgende.

Vi vil først analysere lidt på situationen.

Lad os se på reaktionen: $A + B \rightarrow C (+ D \dots)$, og lad os antage, at den har hastighedsudtrykket: $v = k \cdot [A] \cdot [B]$. Dette er altså en 2.ordens reaktion, men den er af 1. orden med hensyn til både A og B. Hvis vi nu laver et forsøg, hvor koncentrationen af B er meget større end koncentrationen af A, så vil koncentrationen af B stort set ikke ændres, dvs. den kan betragtes som værende konstant. Hastighedsudtrykket kan hermed skrives som: $v = c \cdot [A]$, hvor $c = k \cdot [B]$. Selvom der er tale om en 2.ordens reaktion, så vil processen i denne situation forløbe som en 1.ordens reaktion (dvs. hvis vi løbende måler koncentrationen af A, så vil den opføre sig, som det er beskrevet ovenfor for en 1.ordens reaktion). I en sådan proces taler vi om en pseudo-1.ordens reaktion (pseudo = uægte).

Hvis reaktionens hastighedsudtryk er givet ved: $v = k \cdot [A]^2 \cdot [B]$, så får vi efter samme princip (dvs. vi lader koncentrationen af B være meget større end koncentrationen af A), at $v = c \cdot [A]^2$. Vi får dermed en pseudo-2.ordens reaktion.

Efter denne indledende analyse kan vi vende situationen "på hovedet", idet vi nu ikke kender hastighedsudtrykket for reaktionen: $A + B \rightarrow C (+ D \dots)$. Vi laver da et forsøg, hvor vi sørger for, at koncentrationen af B er meget større end koncentrationen af A. I dette forsøg måles $[A]$ med jævne mellemrum, dvs. vi finder sammenhørende værdier af tiden t og koncentrationen $[A](t)$. Og herefter gennemføres analyser som omtalt i afsnittene for 0.ordens, 1.ordens, 2.ordens og 3.ordens reaktioner for at se, om en af disse modeller skulle passe. (Jfr. øvelse A.4.6).

Hvis det f.eks. viser sig, at modellen for en 2.ordens reaktion passer på de eksperimentelle data, så er der stor sandsynlighed for, at der er tale om en 2.ordens reaktion med hensyn til reaktanten A. Da vi derimod ikke får information om reaktanten B's betydning for hastighedsudtrykket, ved vi ikke, om vi har en 2.ordens reaktion eller kun en pseudo-2.ordens reaktion. Dette problem må løses på anden vis, f.eks. følgende:

Vi antager, at hastighedsudtrykket for reaktionen: $A + B \rightarrow C (+ D \dots)$ er $v = k \cdot [A]^n \cdot [B]^m$, da dette er det almindeligste. Vi gennemfører først en måleserie som omtalt, hvor koncentrationen af B er meget større end koncentrationen af A, således at den kan regnes for konstant. Dette giver f.eks. et hastighedsudtryk som: $v = c_1 \cdot [A]^2$ (dvs. $n = 2$), hvor konstanten c_1 er givet ved: $c_1 = k \cdot [B]^m$.

Vi gennemfører herefter en ny måleserie med samme startkoncentration for A, men med den halve koncentration af B. Da koncentrationen af B stadigvæk er meget større end koncentrationen af A, kan [B] igen regnes for konstant. Måleserien giver så hastighedsudtrykket: $v = c_2 \cdot [A]^2$, hvor

$c_2 = k \cdot (\frac{1}{2}[B])^m$. Ud fra de målte og indtegnede data kender vi værdien af konstanterne c_1 og c_2 .

Vi kan hermed fortage følgende beregning:

$$\frac{c_1}{c_2} = \frac{k \cdot [B]^m}{k \cdot (\frac{1}{2}[B])^m} = \frac{1}{(\frac{1}{2})^m} = 2^m \quad \text{hvoraf vi får (kontrollér !):} \quad m = \frac{\ln(c_1) - \ln(c_2)}{\ln 2}$$

Vi forventer, at m (indenfor målenøjagtigheden) giver et helt tal. Hvis vi f.eks. får $m = 1$, så er der altså tale om en 1.ordens reaktion med hensyn til B, og i alt giver det så en 3.ordens reaktion.

Dette princip kan udbygges til flere end 2 reaktanter, altså f.eks. processen: $A + B + C \rightarrow D + \dots$, men vi vil ikke komme yderligere ind på emnet her.

Matematisk model for en 2.ordens 1:1-reaktion, hvor startkoncentrationerne er forskellige.

Ovenfor så vi på 2.ordens reaktioner i det "simple tilfælde", hvor $v = k \cdot [A]^2$ eller $v = k \cdot [A] \cdot [B]$, hvor der i sidstnævnte situation er tale om en 1:1-reaktion og hvor startkoncentrationen er den samme for to reaktanter.

Vi vil nu se på, hvad der sker, hvis vi i den sidstnævnte situation opgiver forudsætningen, at de to startkoncentrationer er ens. Der er altså stadigvæk tale om en 1:1-proces, dvs.: $A + B \rightarrow C (+ D \dots)$ og vi har hastighedsudtrykket $v = k \cdot [A] \cdot [B]$, men startkoncentrationerne er forskellige (dog uden at være så forskellige, at vi er ovre i pseudo-1.ordens-tilfældet).

Lad os antage, at $[A]_0 > [B]_0$ og sæt $c = [A]_0 - [B]_0$. Da der er tale om en 1:1-reaktion, vil forskellen imellem de to koncentrationer være den samme igennem hele procesforløbet, dvs. $[A] - [B] = c$ – eller mere udførligt: $[A](t) - [B](t) = c$ for alle værdier af t .

Koncentrationen af A:

Vi vil først se på udviklingen i koncentrationen for reaktanten A, dvs. vi vil finde et funktionsudtryk for $[A](t)$. Vi har i denne situation følgende omskrivning:

$$-\frac{d[A](t)}{dt} = k \cdot [A](t) \cdot [B](t) \Leftrightarrow -\frac{d[A](t)}{dt} = k \cdot [A](t) \cdot ([A](t) - c)$$

hvor vi har anvendt, at $[B](t) = [A](t) - c$.

Hvis vi som tidligere sætter $y(t) = [A](t)$, så skal vi løse ligningen: $-\frac{dy}{dt} = k \cdot y \cdot (y - c)$

Vi omskriver først lidt på ligningen:

$$-\frac{dy}{dt} = k \cdot y \cdot (y - c) \Leftrightarrow \frac{dy}{dt} = -k \cdot y \cdot (y - c) \Leftrightarrow \frac{dy}{dt} = k \cdot y \cdot (c - y)$$

Vi ser, at der er tale om en logistisk differentialligning som omtalt i sætning 3.9. Vi skal blot checke, at forudsætningerne er opfyldt, dvs. at $k \neq 0$ og $c \neq 0$. Da k er hastighedskonstanten, er $k \neq 0$, idet der ellers ikke er nogen reaktion. Og $c \neq 0$ følger direkte af definitionen af c og forudsætningerne om startkoncentrationerne.

Løsningen til differentialligningen er altså en logistisk funktion med følgende forskrift:

$$y = \frac{c}{1 + q \cdot e^{-k \cdot c \cdot t}}$$

hvor q er en konstant, som findes ved at sætte $t = 0$. Vi får da (kontrollér), at: $q = \frac{c}{y(0)} - 1$. Hvis vi

heri benytter, at $y(0) = [A]_0$ og $c = [A]_0 - [B]_0$, ser vi (kontrollér), at: $q = -\frac{[B]_0}{[A]_0}$

I alt ser vi dermed, at koncentrationen af A som funktion af tiden t er givet ved forskriften:

$$[A](t) = \frac{[A]_0 - [B]_0}{1 - \frac{[B]_0}{[A]_0} \cdot e^{-k \cdot ([A]_0 - [B]_0) \cdot t}}$$

Koncentrationen af A som funktion af tiden t er altså en logistisk funktion, og vi ser, at $[A](t) \rightarrow [A]_0 - [B]_0$ for $t \rightarrow \infty$. Dette passer fint med, at reaktionen går i stå, når reaktanten B er (ved at være) opbrugt, og at koncentrationen af den tilbageværende del af A er givet ved $[A]_0 - [B]_0$.

Koncentrationen af B:

Lad os dernæst se på udviklingen i koncentrationen for reaktanten B, dvs. vi vil finde et funktionsudtryk for $[B](t)$. Da vi har en 1:1-reaktion gælder som tidligere omtalt, at $-\frac{d[A](t)}{dt} = -\frac{d[B](t)}{dt}$,

hvormed hastighedsudtrykket kan skrives således: $-\frac{d[B](t)}{dt} = k \cdot [A](t) \cdot [B](t)$.

Hvis vi i dette udtryk sætter $y(t) = [B](t)$ og anvender, at $[A](t) = [B](t) + c$ så får vi i alt følgende differentialligning: $-\frac{dy}{dt} = k \cdot (y + c) \cdot y$, som kan omskrives til: $\frac{dy}{dt} = k \cdot y \cdot (-c - y)$

Som ovenfor ved A ser vi, at løsningen ifølge sætning 3.9 er en logistisk funktion givet ved:

$$y = \frac{-c}{1 + q \cdot e^{-k \cdot (-c) \cdot t}} \quad \text{dvs.} \quad y = \frac{-c}{1 + q \cdot e^{k \cdot c \cdot t}}$$

hvor q er en konstant, som findes ved at sætte $t = 0$. Vi får da, at: $q = \frac{-c}{y(0)} - 1$.

Hvis vi heri benytter, at $y(0) = [B]_0$ og $c = [A]_0 - [B]_0$, ser vi (kontrollér), at: $q = -\frac{[A]_0}{[B]_0}$

I alt ser vi dermed, at koncentrationen af B som funktion af tiden t er givet ved forskriften:

$$[B](t) = \frac{-([A]_0 - [B]_0)}{1 - \frac{[A]_0}{[B]_0} \cdot e^{k \cdot ([A]_0 - [B]_0) \cdot t}} \quad \Leftrightarrow \quad [B](t) = \frac{[A]_0 - [B]_0}{\frac{[A]_0}{[B]_0} \cdot e^{k \cdot ([A]_0 - [B]_0) \cdot t} - 1}$$

Vi ser af det sidst anførte udtryk, at: $[B](t) \rightarrow 0$ for $t \rightarrow \infty$, idet nævneren går mod uendelig medens tælleren er en konstant. Dette passer fint med, at reaktionen går i stå, når reaktanten B er (ved at være) opbrugt og koncentrationen af B dermed er nul.

Samlet resultat for koncentrationerne af A og B som funktion af tiden t:

Den samlede model for udviklingen af koncentrationerne for to reaktanter A og B i en 1:1-reaktion, hvor startkoncentrationerne er forskellige (vi antager at: $[A]_0 > [B]_0$), ser altså således ud:

$$[A](t) = \frac{[A]_0 - [B]_0}{1 - \frac{[B]_0}{[A]_0} \cdot e^{-k([A]_0 - [B]_0)t}} \quad \text{og} \quad [B](t) = \frac{[A]_0 - [B]_0}{\frac{[A]_0}{[B]_0} \cdot e^{k([A]_0 - [B]_0)t} - 1}$$

Model for en 2.ordens 1:1-reaktion, hvor startkoncentrationerne er forskellige (hér: $[A]_0 > [B]_0$).

Vi bemærker, at begge funktioner er aftagende, hvilket stemmer fint overens med, at de beskriver koncentrationerne af reaktanter, der forbruges i processen.

Eksempel A.4.12.

Vi ser på en 1:1-reaktion: $A + B \rightarrow$ produkter, som har hastighedsudtrykket $v = k \cdot [A] \cdot [B]$.

Startkoncentrationerne er givet ved: $[A]_0 = 0,05 \text{ M}$ og $[B]_0 = 0,038 \text{ M}$, og hastighedskonstanten er givet ved: $k = 0,7 \text{ s}^{-1} \cdot \text{M}^{-1}$.

Ifølge det ovenstående får vi (kontrollér), at

$$[A](t) = \frac{[A]_0 - [B]_0}{1 - \frac{[B]_0}{[A]_0} \cdot e^{-k([A]_0 - [B]_0)t}} = \frac{0,05 - 0,038}{1 - \frac{0,038}{0,05} \cdot e^{-0,7 \cdot (0,05 - 0,038)t}} \text{ M} = \frac{0,012}{1 - 0,76 \cdot e^{-0,0084t}} \text{ M}$$

og

$$[B](t) = \frac{[A]_0 - [B]_0}{\frac{[A]_0}{[B]_0} \cdot e^{k([A]_0 - [B]_0)t} - 1} = \frac{0,012}{1,3158 \cdot e^{0,0084t} - 1} \text{ M}$$

Graferne for disse to funktioner er tegnet i koordinatsystemet på næste side (jfr. Appendix 2).

Det ses, at $[A](t) \rightarrow 0,12 \text{ M}$ for $t \rightarrow \infty$ (den stiplede linie), og at $[B](t) \rightarrow 0 \text{ M}$ for $t \rightarrow \infty$ ♥

Øvelse A.4.13.

Vi ser på en 1:1-reaktion: $A + B \rightarrow$ produkter, som har hastighedsudtrykket $v = k \cdot [A] \cdot [B]$.

Startkoncentrationerne er givet ved: $[A]_0 = 0,6 \text{ M}$ og $[B]_0 = 0,4 \text{ M}$.

8 minutter efter starten af reaktionen måles koncentrationen af A til at være 0,44 M.

a) Bestem hastighedskonstanten k.

b) Opstil forskrifter for funktionerne, der beskriver $[A](t)$ og $[B](t)$

c) Tegn graferne for disse funktioner, og kommentér resultatet. ♥

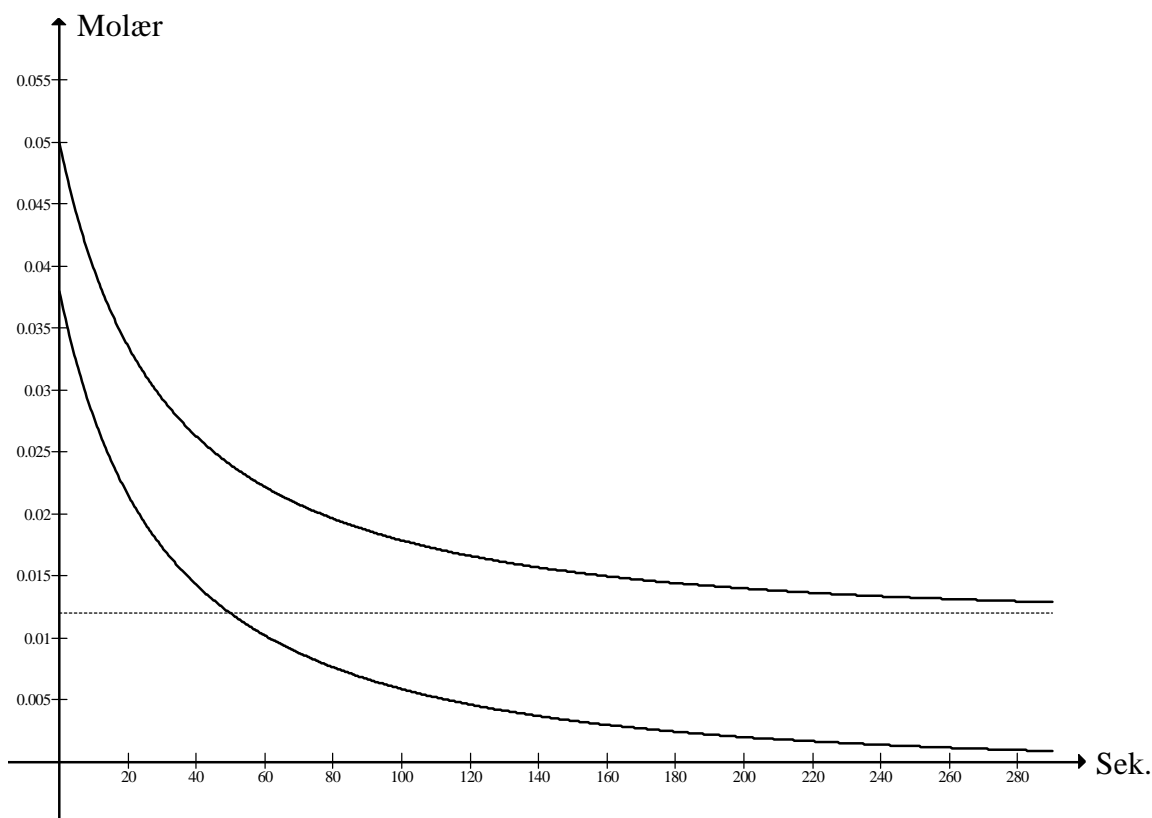


Fig. A.4.1

Matematisk model for en 2.ordens reaktion, som ikke er en 1:1-reaktion.

Lad os se på reaktionen: $A + 2B \rightarrow \text{produkter}$, der har hastighedsudtrykket: $v = k \cdot [A] \cdot [B]$.

Som i øvelse A.4.1 har vi, at: $v(t) = -\frac{d[A]}{dt} = -\frac{1}{2} \cdot \frac{d[B]}{dt}$ og dermed, at: $2 \cdot \frac{d[A]}{dt} = \frac{d[B]}{dt}$

Hvis t_0 er et vilkårligt tidspunkt i processen, så får vi ved integration, at:

$$\int_0^{t_0} \frac{d[B](t)}{dt} dt = 2 \int_0^{t_0} \frac{d[A](t)}{dt} dt \Leftrightarrow [B](t_0) - [B](0) = 2 \cdot ([A](t_0) - [A](0))$$

Da t_0 er vilkårligt valgt, gælder dette sidste udtryk for alle værdier af t_0 . Vi kan derfor lige så godt kalde det t , hvormed vi – efter reduktion – har, at: $[B](t) = 2 \cdot [A](t) - 2[A](0) + [B](0)$

Hvis vi som tidligere anvender betegnelserne $[A]_0 = [A](0)$ og $[B]_0 = [B](0)$ for begyndelseskoncentrationerne, så ser vi alt i alt, at hastighedsudtrykket kan skrives som:

$$v = k \cdot [A] \cdot [B] = k \cdot [A](t) \cdot (2 \cdot [A](t) - 2[A]_0 + [B]_0)$$

Hvis vi sætter $q = [A]_0 - \frac{1}{2}[B]_0$, så får vi alt i alt følgende ligning (kontrollér):

$$-\frac{d[A]}{dt} = 2k \cdot [A](t) \cdot ([A](t) - q) \quad \text{og dermed:} \quad \frac{d[A]}{dt} = 2k \cdot [A](t) \cdot (q - [A](t))$$

Hvis vi som tidligere sætter $y(t) = [A](t)$, så ser vi, at vi skal løse ligningen: $\frac{dy}{dt} = 2k \cdot y \cdot (q - y)$.

Ifølge sætning 3.9 får vi, (idet vi antager, at $[A]_0 \neq \frac{1}{2}[B]_0$) at løsningen er en logistisk funktion:

$$y = \frac{q}{1 + c \cdot e^{-2k \cdot q \cdot t}}$$

hvor c er en konstant, som findes ved at sætte $t = 0$. Vi får da, at: $c = \frac{q}{y(0)} - 1$.

Hvis vi heri benytter, at $y(0) = [A]_0$ og $q = [A]_0 - \frac{1}{2}[B]_0$, ser vi (kontrollér), at: $c = -\frac{1}{2} \cdot \frac{[B]_0}{[A]_0}$

I alt ser vi dermed, at koncentrationen af A som funktion af tiden t er givet ved forskriften:

$$[A](t) = \frac{[A]_0 - \frac{1}{2}[B]_0}{1 - \frac{1}{2} \frac{[B]_0}{[A]_0} \cdot e^{-2k \cdot ([A]_0 - 0,5[B]_0)t}}$$

Øvelse A.4.14.

I denne øvelse ser vi fortsat på reaktionen: $A + 2B \rightarrow$ produkter, der har hastighedsudtrykket: $v = k \cdot [A] \cdot [B]$.

- Hvilket udtryk får vi for $[A](t)$, hvis $[A]_0 = [B]_0$?
- Hvilket udtryk får vi for $[A](t)$, hvis $[A]_0 = \frac{1}{2}[B]_0$? ♥

Øvelse A.4.15.

I denne øvelse ser vi fortsat på reaktionen: $A + 2B \rightarrow$ produkter, der har hastighedsudtrykket: $v = k \cdot [A] \cdot [B]$. Bestem et udtryk for $[B](t)$, idet det stadig forudsættes, at $[A]_0 \neq \frac{1}{2}[B]_0$. ♥

Øvelse A.4.16.

Reaktion: $S_2O_8^{2-} + 2I^- \rightarrow 2SO_4^{2-} + I_2$ mellem persulfat-ioner og iodid-ioner har hastighedsudtrykket $v = k \cdot [I^-] \cdot [S_2O_8^{2-}]$ (jfr. eksempel A.4.3 a)).

Antag, at reaktanterne har følgende startkoncentrationer: $[S_2O_8^{2-}]_0 = 0,082 \text{ M}$ og $[I^-]_0 = 0,057 \text{ M}$, og at hastighedskonstanten er givet ved: $k = 0,6 \text{ s}^{-1} \cdot \text{M}^{-1}$.

- Bestem et udtryk for $[S_2O_8^{2-}](t)$ og for $[I^-](t)$.
- Tegn graferne for $[S_2O_8^{2-}](t)$ og $[I^-](t)$ i samme koordinatsystem.
- Kommentér resultaterne. ♥

Øvelse A.4.17.

- Bestem et udtryk for $[A](t)$ i en reaktion af typen: $A + 3B \rightarrow$ produkter, der har hastighedsudtrykket: $v = k \cdot [A] \cdot [B]$.
- Bestem et udtryk for $[A](t)$ i en reaktion af typen: $2A + 3B \rightarrow$ produkter, der har hastighedsudtrykket: $v = k \cdot [A] \cdot [B]$. ♥

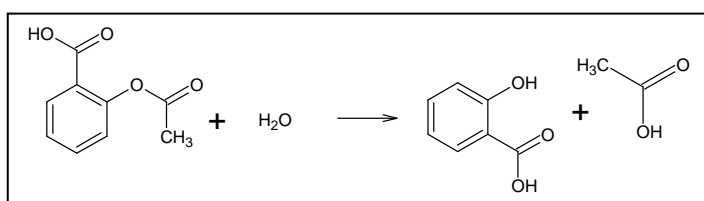
Acetylsalicylsyres hydrolyse

De følgende målinger, beregninger og grafer stammer fra en projektopgave udarbejdet af Ditte Høher-Thomsen, 3x, Herning Gymnasium, som jeg hermed også skriftligt gerne vil takke for at måtte anvende. Dittes opgave indeholder også forklaringer om avancerede målemetoder og heraf følgende beregningsmetoder til bestemmelse af de koncentrationer, som indgår i den matematiske analyse. Disse metoder ligger udenfor denne bogs rammer, og interesserede læsere henvises til den kemiske litteratur. Vi skal dog af hensyn til forståelsen af det følgende anføre nogle få informationer om målemetoden (se nedenfor).

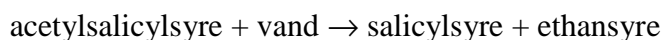
Acetylsalicylsyre er det virksomme stof i mange smertestillende lægemidler.

I den reaktion, som Ditte undersøgte, spaltes acetylsalicylsyre (ASA) ved hjælp af vand i salicylsyre og ethansyre (eddikesyre). En sådan spaltning kaldes som tidligere omtalt for en hydrolyse.

Reaktionsskemaet for hydrolyse af acetylsalicylsyre ser således ud (for en kemiker):



men vi vil her skrive det på formen:



og vi vil i det følgende anvende forkortelsen ASA for acetylsalicylsyre.

Hydrolysereaktionerne blev lavet ved samme temperatur (45 °C) i to forskellige såkaldte stødpudeopløsninger (også kaldet en pufferopløsning) med hver sin surhedsgrad (hhv. pH = 6 og pH = 10). For at starte reaktionerne (og målingerne) blev der til 50 mL af hver af disse stødpudeopløsninger (i hvert sit glas) tilsat 5 mL ASA-opløsning. Denne ASA-opløsning var lavet ved at opløse 0,360 g ASA i 50 mL ethanol i en 1000 mL kolbe, som derefter blev fyldt op med demineraliseret vand. For hvert 10. minut blev der udtaget en lille prøve fra glasset med pH = 10, og hvert 20. minut fra glasset med pH = 6. Disse prøver blev analyseret for at se, hvor langt reaktionen var kommet. Målingerne blev stoppet efter ca. 2,5 timer.

Startkoncentrationen af ASA var i begge glas givet ved: $[\text{ASA}]_0 = 1,818 \cdot 10^{-4} \text{ M}$

Af pladshensyn er her kun medtaget resultater og grafer for den reaktion, der foregik i stødpudeopløsningen med pH = 10. Der er dog anført grafen for pH = 6 for den bedst egnede model – samt knyttet nogle kommentarer hertil.

Udover tidspunktet og den aktuelle ASA-koncentration indeholder den følgende tabel også værdier for $\ln([\text{ASA}](t))$, $\frac{1}{[\text{ASA}](t)}$ og $\frac{1}{([\text{ASA}](t))^2}$, idet disse værdier som forklaret tidligere skal bruges til at fastlægge reaktionens orden. (Der er for overskuelighedens skyld udeladt enheder på koncentrationsudtrykkene).

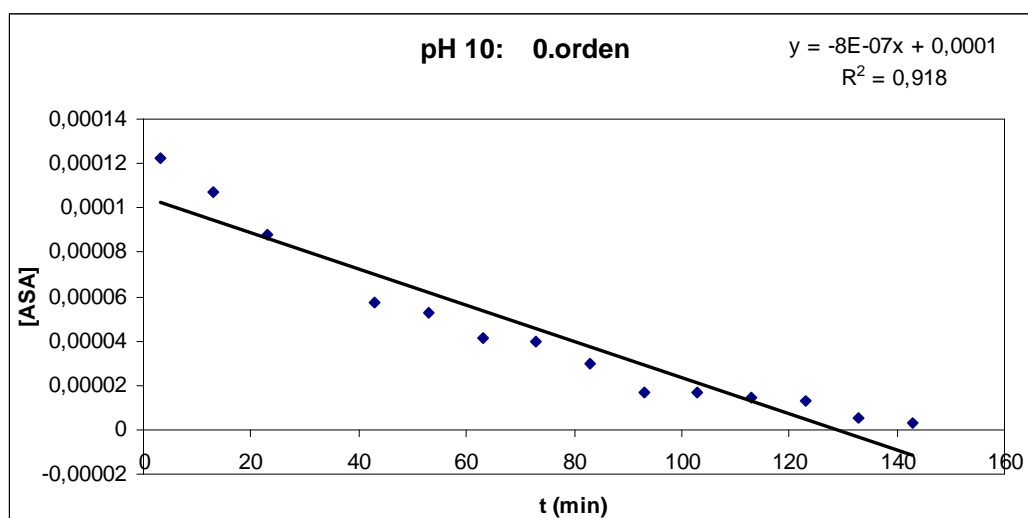
pH 10				
t (min)	[ASA]	ln([ASA])	1/[ASA]	1/[ASA]^2
3	1,2216E-04	-9,0101	8185,717	6,701E+07
13	1,0689E-04	-9,1437	9355,392	8,752E+07
23	8,7582E-05	-9,3429	11417,888	1,304E+08
43	5,7034E-05	-9,7719	17533,303	3,074E+08
53	5,3000E-05	-9,8452	18868,018	3,560E+08
63	4,1472E-05	-10,0905	24112,445	5,814E+08
73	3,9743E-05	-10,1331	25161,503	6,331E+08
83	2,9945E-05	-10,4161	33394,576	1,115E+09
93	1,6688E-05	-11,0008	59921,507	3,591E+09
103	1,6688E-05	-11,0008	59921,507	3,591E+09
113	1,4671E-05	-11,1296	68160,714	4,646E+09
123	1,2654E-05	-11,2775	79026,915	6,245E+09
133	5,1611E-06	-12,1744	193756,345	3,754E+10
143	3,1438E-06	-12,6701	318083,333	1,012E+11

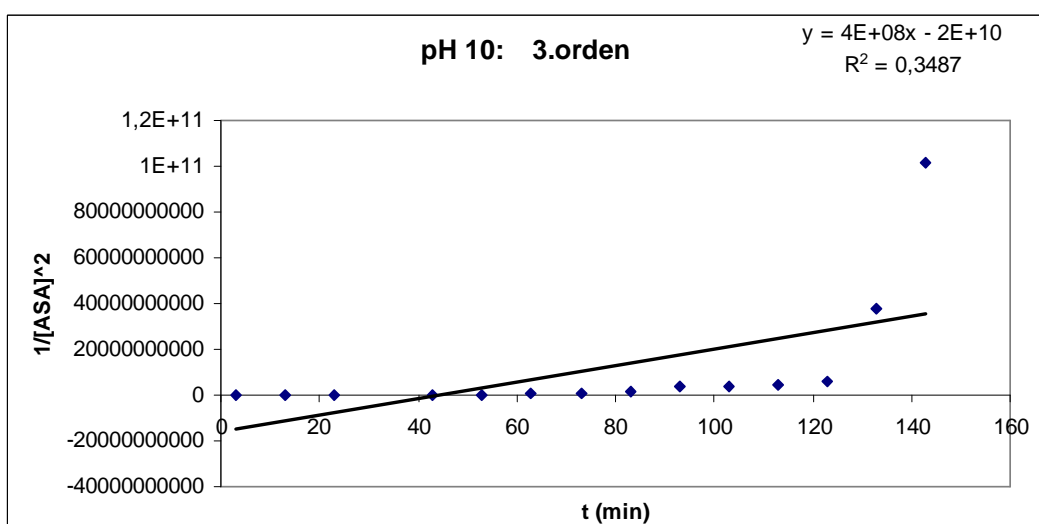
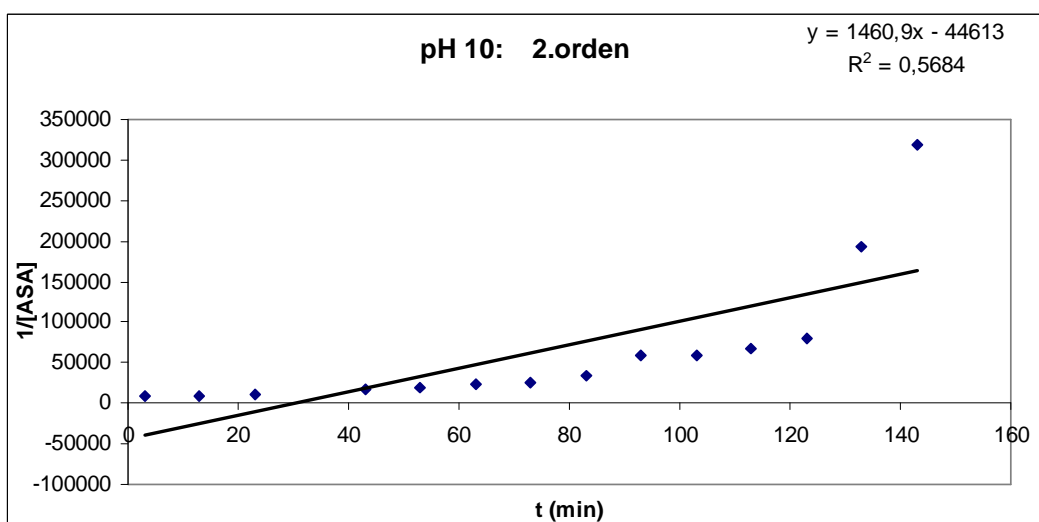
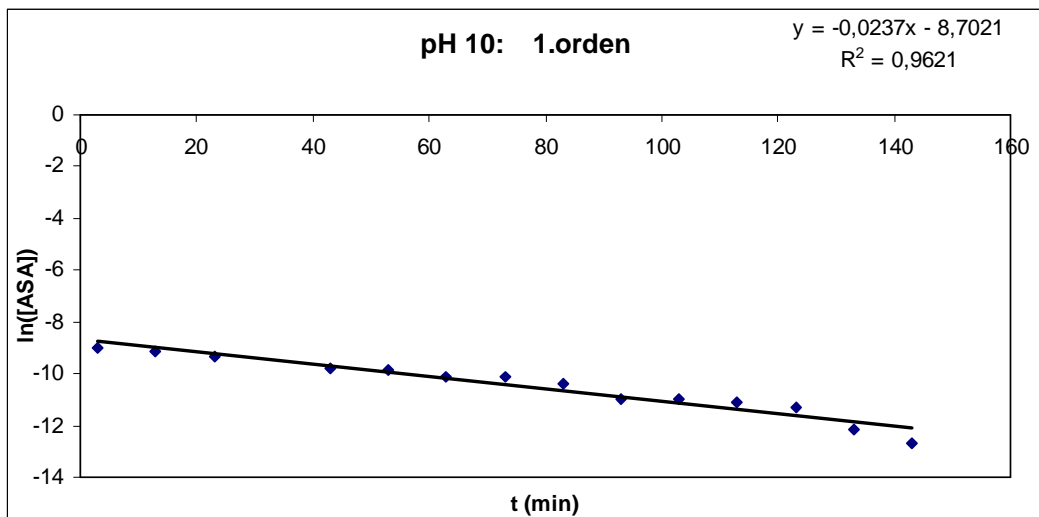
I tabellen, der er lavet i Excel, betyder 5,7034E-05 tallet: $5,7034 \cdot 10^{-5}$ og 3,074E+08 betyder tallet: $3,074 \cdot 10^8$ – og tilsvarende med de øvrige værdier.

Ud fra disse data er der i Excel tegnet følgende fire figurer:

- 1) en $(t, [ASA])$ -graf for at undersøge, om det var en 0.ordens reaktion
- 2) en $(t, \ln([ASA]))$ -graf for undersøge, om det var en 1.ordens reaktion
- 3) en $(t, \frac{1}{[ASA]})$ -graf for at undersøge, om det var en 2.ordens reaktion
- 4) en $(t, \frac{1}{[ASA]^2})$ -graf for at undersøge, om det var en 3. ordens reaktion.

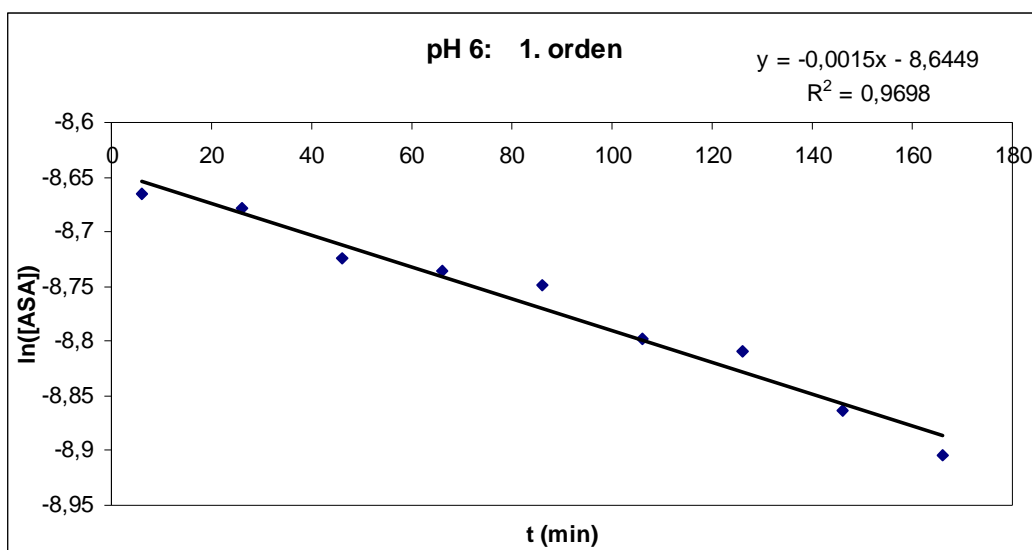
Ved alle graferne tilføjet en tendenslinje og R^2 -værdien, som hjælper med at afgøre, hvilken model der passer bedst på reaktionen.





Det ses tydeligt, at en 1.ordens model passer bedst på reaktionen. Resultatet passer ikke fuldstændigt på en 1.ordens model (så skulle vi have $R^2 = 1$). Årsagen til dette kan være de usikkerheder og fejlkilder, der er i udførelsen af et sådant forsøg. Under mere professionelle vilkår (såvel apparatur som tid) ville resultatet givet være endnu nærmere på en 1.ordens model.

Ved pH = 6 viste det sig også, at 1.ordens modellen klart var den, der bedst passede på de målte data. I dette tilfælde så grafen således ud:



Der er altså tale om en 1.ordens reaktion, og ifølge teorien herfor gælder der (se tidligere):

$$\ln[A](t) = -k \cdot t + \ln[A]_0.$$

Ved pH = 6 er liniens forskrift givet ved: $\ln([ASA]) = -0,0015 \cdot t - 8,6449$, hvoraf vi ser, at hastighedskonstanten er $k = 0,0015 \text{ min}^{-1}$. (Enheden for k er min^{-1} , idet tiden t måles i minutter. Hvis vi vil have enheden s^{-1} som tidligere anført, skal vi dele k -værdien med 60, dvs. $k = 2,5 \cdot 10^{-5} \text{ s}^{-1}$. Men så skal vi også huske at regne tiden i sekunder).

I reaktionen ved pH = 10 er liniens forskrift: $\ln([ASA]) = -0,0237 \cdot t - 8,7021$, hvormed hastighedskonstanten er $k = 0,0237 \text{ min}^{-1}$.

Ved at sammenligne disse to værdier for hastighedskonstanten ses det tydeligt, at reaktionen forløber hurtigere ved højere pH-værdier.

Startkoncentrationen af ASA var $[ASA]_0 = 1,818 \cdot 10^{-4} \text{ M}$, hvormed vi ser, at $\ln([ASA]_0) = -8,613$, hvilket stemmer fint overens med værdierne $-8,6449$ og $-8,7021$ fra forskrifterne.

Da $[A](t) = [A]_0 \cdot e^{-k \cdot t} \Leftrightarrow \ln[A](t) = -k \cdot t + \ln[A]_0$, ser vi, forskriften for koncentrationen af ASA som funktion af tiden t (målt i minutter) for pH = 10 er: $[ASA](t) = 1,818 \cdot 10^{-4} \cdot e^{-0,0237t} \text{ M}$, hvormed koncentrationen til et vilkårligt tidspunkt kan bestemmes. F.eks. er $[ASA](70) = 3,46 \cdot 10^{-5} \text{ M}$.

Og tilsvarende for pH = 6: $[ASA](t) = 1,818 \cdot 10^{-4} \cdot e^{-0,0015t} \text{ M}$.

ASA reagerer 1:1 med vand (H_2O). Men i reaktionsopløsningerne var koncentrationen af vandet meget større end koncentration af ASA (stofmængderne i reaktionsopløsningerne blev beregnet til: $n(\text{H}_2\text{O}) = 0,277 \text{ mol}$ hhv. $n(\text{ASA}) = 1,0 \cdot 10^{-5} \text{ mol}$). Dette betyder (som tidligere omtalt), at koncentrationen af vandet ikke ændrede sig ret meget under reaktionen (kan antages at være konstant).

Alt i alt kan vi derfor konkludere, at hydrolysen af acetylsalicylsyre er en pseudo-1.ordens reaktion, dvs. at vi kan konstatere, at det er en 1.ordens reaktion med hensyn til reaktanten ASA.

Appendix 5: Determinanter og løsning af to ligninger med to ubekendte.

Definition A.5.1:

Hvis α , β , γ og δ er fire givne tal, så benyttes skrivemåden: $\begin{vmatrix} \alpha & \beta \\ \gamma & \delta \end{vmatrix} = \alpha \cdot \delta - \gamma \cdot \beta$

Størrelsen: $\begin{vmatrix} \alpha & \beta \\ \gamma & \delta \end{vmatrix}$ kaldes en **determinant**

Eksempel A.5.2.

a) Vi har: $\begin{vmatrix} 2 & 3 \\ 5 & 6 \end{vmatrix} = 2 \cdot 6 - 5 \cdot 3 = -3$.

Bemærk den særlige udregningsmåde, hvor der ganges sammen på skrå og trækkes fra !

b) Vi har: $\begin{vmatrix} 2 & 6 \\ 5 & 3 \end{vmatrix} = 2 \cdot 3 - 5 \cdot 6 = -24$

Bemærk, at det ikke er ligegyldigt hvor tallene skrives henne i determinanten.

c) Vi har: $\begin{vmatrix} 28 & 19 \\ -84 & -57 \end{vmatrix} = 28 \cdot (-57) - (-84) \cdot 19 = 0$

En determinant kan altså godt antage værdien 0

d) For et vilkårligt valgt, givet x , har vi: $\begin{vmatrix} x^2 & e^{2x} \\ \sqrt{x} & 6 + \ln x \end{vmatrix} = x^2 \cdot (6 + \ln x) - \sqrt{x} \cdot e^{2x}$

En determinant kan altså godt være en funktion af en variabel ! ♥

Determinanter kan bruges til løsning af lineære ligningssystemer af to variable, idet der gælder følgende sætning:

Sætning A.5.3.

Betragt ligningssystemet bestående af to lineære ligninger:

$$a_1 \cdot x + b_1 \cdot y = c_1 \quad \wedge \quad a_2 \cdot x + b_2 \cdot y = c_2$$

hvor a_1 , b_1 , c_1 , a_2 , b_2 , c_2 er konstanter, og hvor x og y er de ubekendte.

Hvis determinanten $\begin{vmatrix} a_1 & b_1 \\ a_2 & b_2 \end{vmatrix} \neq 0$, så er netop ét talpar (x_0, y_0) løsning til ligningssystemet.

Løsningen (x_0, y_0) er givet ved følgende udtryk:

$$x_0 = \frac{\begin{vmatrix} c_1 & b_1 \\ c_2 & b_2 \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} a_1 & b_1 \\ a_2 & b_2 \end{vmatrix}} \quad \text{og} \quad y_0 = \frac{\begin{vmatrix} a_1 & c_1 \\ a_2 & c_2 \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} a_1 & b_1 \\ a_2 & b_2 \end{vmatrix}}$$

Inden vi beviser sætningen, giver vi lige et eksempel på dens anvendelse:

Eksempel A.5.4.

Vi vil løse ligningssystemet: $12x - 13y = 34 \wedge 7x + 11y = 101$.

Vi starter med at finde ligningssystemets grunddeterminant (determinanten der skal stå i nævneren):

$\begin{vmatrix} 12 & -13 \\ 7 & 11 \end{vmatrix} = 223$. Da denne er forskellig fra nul, er der netop én løsning (x_0, y_0) til ligningssystemet.

For at finde løsningen udregnes de to specifikke determinanter, der bruges til fastlæggelse af x_0 og y_0 :

Til udregning af x-værdien har vi: $\begin{vmatrix} 34 & -13 \\ 101 & 11 \end{vmatrix} = 1687$, hvormed vi ser, at: $x_0 = \frac{1687}{223}$

Til udregning af y-værdien har vi: $\begin{vmatrix} 12 & 34 \\ 7 & 101 \end{vmatrix} = 974$, hvormed vi ser, at: $y_0 = \frac{974}{223}$

Løsningen til ligningssystemet er altså: $(x_0, y_0) = \left(\frac{1687}{223}, \frac{974}{223}\right) = (7,565, 4,368)$.

Læseren bedes kontrollere udregningen ved anvendelse af den velkendte substitutionsmetode til løsning af to ligninger med to ubekendte. ♥

Bevis for sætning A.5.3:

Beviset kan gennemføres på mange måder, men vi vil her anvende den velkendte substitutionsmetode, hvor vi finder den ene variable af den ene ligning og indsætter (substituerer) denne værdi i den anden ligning.

Da $\begin{vmatrix} a_1 & b_1 \\ a_2 & b_2 \end{vmatrix} = a_1 \cdot b_2 - a_2 \cdot b_1 \neq 0$, er enten $a_1 \neq 0$ eller $b_1 \neq 0$ (eller evt. begge dele), idet hvis de begge var lig med nul, så ville determinanten også være lig med nul. Vi antager først, at $a_1 \neq 0$:

Af ligningen: $a_1 \cdot x + b_1 \cdot y = c_1$ får vi da: $x = \frac{c_1 - b_1 \cdot y}{a_1}$. Hvis dette indsættes i $a_2 \cdot x + b_2 \cdot y = c_2$

får vi, at:

$$a_2 \cdot \frac{c_1 - b_1 \cdot y}{a_1} + b_2 \cdot y = c_2 \Leftrightarrow a_2 \cdot (c_1 - b_1 \cdot y) + a_1 \cdot b_2 \cdot y = a_1 \cdot c_2 \Leftrightarrow$$

$$-a_2 \cdot b_1 \cdot y + a_1 \cdot b_2 \cdot y = a_1 \cdot c_2 - a_2 \cdot c_1 \Leftrightarrow y = \frac{a_1 \cdot c_2 - a_2 \cdot c_1}{a_1 \cdot b_2 - a_2 \cdot b_1}$$

hvilket netop er det ønskede udtryk. (Kontrollér ved udregning af determinanterne i sætning A2.3).

Vi ser altså, at der kun er én y-værdi, der tilfredsstiller ligningssystemet, og at den kan udregnes ved den ønskede formel.

Da $x = \frac{c_1 - b_1 \cdot y}{a_1}$ ser vi herefter, at der også kun er én x-værdi – nemlig den værdi, der fås ved at

indsætte den fundne y-værdi i dette udtryk for x:

$$x = \frac{c_1 - b_1 \cdot y}{a_1} \wedge y = \frac{a_1 \cdot c_2 - a_2 \cdot c_1}{a_1 \cdot b_2 - a_2 \cdot b_1} \Rightarrow x = \frac{1}{a_1} \cdot (c_1 - b_1 \cdot \frac{a_1 \cdot c_2 - a_2 \cdot c_1}{a_1 \cdot b_2 - a_2 \cdot b_1})$$

Hvis vi opfatter c_1 som en brøk med nævneren 1 og forlænger denne med $a_1 \cdot b_2 - a_2 \cdot b_1$, så får vi:

$$x = \frac{1}{a_1} \cdot \left(\frac{c_1(a_1 \cdot b_2 - a_2 \cdot b_1)}{a_1 \cdot b_2 - a_2 \cdot b_1} - \frac{b_1(a_1 \cdot c_2 - a_2 \cdot c_1)}{a_1 \cdot b_2 - a_2 \cdot b_1} \right)$$

Da de to brøker i parenteser har fælles nævner, kan de samles til én brøk. Hvis vi samtidig ganger ind i parenteserne i tællerne, så får vi:

$$x = \frac{1}{a_1} \cdot \left(\frac{c_1 \cdot a_1 \cdot b_2 - c_1 \cdot a_2 \cdot b_1 - (b_1 \cdot a_1 \cdot c_2 - b_1 \cdot a_2 \cdot c_1)}{a_1 \cdot b_2 - a_2 \cdot b_1} \right)$$

Ved at hæve minusparentesen og reducere ($c_1 \cdot a_2 \cdot b_1$ går ud), og dividere med a_1 ser vi, at:

$$x = \frac{c_1 \cdot b_2 - b_1 \cdot c_2}{a_1 \cdot b_2 - a_2 \cdot b_1} = \frac{c_1 \cdot b_2 - c_2 \cdot b_1}{a_1 \cdot b_2 - a_2 \cdot b_1}, \text{ hvilket netop er det ønskede udtryk.}$$

Hermed er sætningen bevist, hvis $a_1 \neq 0$.

Da vi som omtalt har, at enten er $a_1 \neq 0$ eller $b_1 \neq 0$, skal vi derfor også vise sætningen under forudsætning af, at $b_1 \neq 0$. Beregningerne svarende hertil er imidlertid fuldstændigt analoge til de ovenstående – og overlades derfor til den flittige læser.

Hermed er sætning A.5.3 bevist. ♥

Øvelse A.5.5.

Løs følgende tre ligningssystemer:

$$\begin{aligned} \text{a) } 5p + 7r &= 22 \\ -2p + 8r &= 5 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \text{b) } -\sqrt{3}x + 5y &= 8 \\ 5x + \sqrt{27}y &= 1 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \text{c) } 123q - \sqrt{5}w &= 0,6 \\ 2q + \frac{1}{41}w &= \sqrt{57} \quad \heartsuit \end{aligned}$$

Øvelse A.5.6.

Ofte ser man følgende ”hurtige” og ”smarte” argument (”bevis”) anvendt for sætning A.5.3:

$$a_1 \cdot x + b_1 \cdot y = c_1 \wedge a_2 \cdot x + b_2 \cdot y = c_2 \Leftrightarrow$$

$$b_2 \cdot a_1 \cdot x + b_2 \cdot b_1 \cdot y = b_2 \cdot c_1 \wedge b_1 \cdot a_2 \cdot x + b_1 \cdot b_2 \cdot y = b_1 \cdot c_2$$

Trækkes den sidste ligning fra den første fås: $a_1 \cdot b_2 \cdot x - a_2 \cdot b_1 \cdot x = c_1 \cdot b_2 - c_2 \cdot b_1$, idet leddet

$b_2 \cdot b_1 \cdot y$ går ud. Og isoleres x i denne ligning, fås det ønskede udtryk for $x = \frac{c_1 \cdot b_2 - c_2 \cdot b_1}{a_1 \cdot b_2 - a_2 \cdot b_1}$,

under forudsætning af, at $a_1 \cdot b_2 - a_2 \cdot b_1 \neq 0$.

Find fejlene i dette ”bevis” – og undersøg, hvordan de kan korrigeres. Hvor smart er beviset nu? ♥

Appendix 6: Beviser og udvidet teori for lineære 2.ordens differentiallyigninger

Formålet med dette appendix er primært at bevise sætning 6.16:

Sætning A.6.1 (= Sætning 6.16)

Betragt differentiallyigningen $y'' + py' + qy = 0$, og lad $d = p^2 - 4q$ være diskriminanten for det tilsvarende karakterpolynomium $\xi^2 + p\xi + q$. Der gælder da følgende:

- 1) Hvis $d > 0$, så har karakterpolynomiet to rødder λ og μ , og den fuldstændige løsning til differentiallyigningen er mængden af funktioner på formen:

$$y = c_1 \cdot e^{\lambda x} + c_2 \cdot e^{\mu x}$$

hvor c_1 og c_2 er vilkårlige konstanter.

- 2) Hvis $d = 0$, så har karakterpolynomiet én rod λ , og den fuldstændige løsning til differentiallyigningen er mængden af funktioner på formen:

$$y = c_1 \cdot e^{\lambda x} + c_2 \cdot x \cdot e^{\lambda x}$$

hvor c_1 og c_2 er vilkårlige konstanter.

- 3) Hvis $d < 0$, så er den fuldstændige løsning til differentiallyigningen mængden af funktioner på formen:

$$y = c_1 \cdot e^{-\frac{1}{2}px} \cdot \cos\left(\frac{1}{2}\sqrt{-d} \cdot x\right) + c_2 \cdot e^{-\frac{1}{2}px} \cdot \sin\left(\frac{1}{2}\sqrt{-d} \cdot x\right)$$

hvor c_1 og c_2 er vilkårlige konstanter.

Bevis:

Beviset bygger på, at vi ved og har bevist, hvordan differentiallyigninger af typen: $y'' = ay$ løses. Og for at få denne viden ind i billedet indfører vi en "hjælpefunktion", som opfylder denne ligning.

Ved at arbejde med emnet et stykke tid og søge efter en sådan hjælpefunktion kommer man måske forbi, at man kan prøve med en funktion af typen: $s(x) = y(x) \cdot e^{kx}$, hvor k er en eller anden endnu ukendt konstant, og hvor y er en løsning til den oprindelige differentiallyigning $y'' + py' + qy = 0$.

Vi ser, at $y(x) = s(x) \cdot e^{-kx}$, og da y skal være en løsning til $y'' + py' + qy = 0$, må vi først have fundet et udtryk for y' hhv. y'' udtrykt ved funktionen s . Vi har her, at:

$$y' = s' \cdot e^{-kx} + s \cdot e^{-kx} \cdot (-k) = s' \cdot e^{-kx} - k \cdot s \cdot e^{-kx} \quad \text{og dermed:}$$

$$y'' = s'' \cdot e^{-kx} - k \cdot s' \cdot e^{-kx} - k \cdot s' \cdot e^{-kx} + k^2 \cdot s \cdot e^{-kx} = s'' \cdot e^{-kx} - 2k \cdot s' \cdot e^{-kx} + k^2 \cdot s \cdot e^{-kx}$$

Hvis dette indsættes i differentiallyigningen $y'' + py' + qy = 0$, så får vi:

$$s'' \cdot e^{-kx} - 2k \cdot s' \cdot e^{-kx} + k^2 \cdot s \cdot e^{-kx} + p(s' \cdot e^{-kx} - k \cdot s \cdot e^{-kx}) + q \cdot s \cdot e^{-kx} = 0$$

hvilket kan omskrives (kontrollér !) til:

$$s'' \cdot e^{-kx} + (p - 2k) \cdot s' \cdot e^{-kx} + (k^2 - pk + q) \cdot s \cdot e^{-kx} = 0$$

Da faktoren e^{-kx} indgår i alle led, og da $e^{-kx} > 0$ for alle x , kan vi forkorte e^{-kx} væk. Dette giver:

$$s'' + (p - 2k) \cdot s' + (k^2 - pk + q) \cdot s = 0$$

Da vi som omtalt gerne vil have, at hjælpefunktionen $s(x)$ skal opfylde en differentialligning af typen: $s'' = a \cdot s$ (hvor a er et eller andet tal), ser vi, at vi skal vælge konstanten k , så: $p - 2k = 0$, dvs. vi skal vælge: $k = \frac{1}{2}p$.

Størrelsen $k^2 - pk + q$, der er ganget på s , bliver hermed lig med (kontrollér !): $-\frac{1}{4}p^2 + q = -\frac{1}{4}d$, hvor d som nævnt er diskriminanten for karakterpolynomiet.

Vi har hermed i alt indset, at hvis $y(x)$ er en løsning til differentialligningen: $y'' + py' + qy = 0$, så er $s(x) = y(x) \cdot e^{\frac{1}{2}px}$ løsning til differentialligningen: $s'' = \frac{1}{4}d \cdot s$.

Omvendt er det herefter ikke så svært at indse, at hvis $s(x)$ er en løsning til ligningen: $s'' = \frac{1}{4}d \cdot s$, så er $y(x) = s(x) \cdot e^{-\frac{1}{2}px}$ en løsning til ligningen: $y'' + py' + qy = 0$. Ifølge det ovenstående har vi nemlig, at hvis $y(x) = s(x) \cdot e^{-kx}$, så er

$$y'' + py' + qy = s'' \cdot e^{-kx} + (p - 2k) \cdot s' \cdot e^{-kx} + (k^2 - pk + q) \cdot s \cdot e^{-kx}$$

og hvis vi heri indsætter, at $k = \frac{1}{2}p$ og $s'' = \frac{1}{4}d \cdot s$, så får vi (kontrollér !), at:

$$\begin{aligned} y'' + py' + qy &= \frac{1}{4}d \cdot s \cdot e^{-\frac{1}{2}px} + \left(\left(\frac{1}{2}p\right)^2 - p \cdot \frac{1}{2}p + q\right) \cdot s \cdot e^{-\frac{1}{2}px} \\ &= \frac{1}{4}(p^2 - 4q) \cdot s \cdot e^{-\frac{1}{2}px} + \left(-\frac{1}{4}p^2 + q\right) \cdot s \cdot e^{-\frac{1}{2}px} = 0 \end{aligned}$$

dvs. at y er en løsning til $y'' + py' + qy = 0$.

Alt i alt har vi hermed indset, at følgende to udsagn er ensbetydende:

(*) $y(x)$ er en løsning til differentialligningen: $y'' + py' + qy = 0$

(**) $s(x) = y(x) \cdot e^{\frac{1}{2}px}$ er en løsning til differentialligningen: $s'' = \frac{1}{4}d \cdot s$

For at finde løsningerne til ligningen: $y'' + py' + qy = 0$, vil vi nu fokusere på ligningen: $s'' = \frac{1}{4}d \cdot s$. Ifølge sætning 6.4 skal vi opdele i tre tilfælde, afhængig af om $\frac{1}{4}d$ er større end 0, lige med 0 eller mindre end 0, dvs. om $d > 0$, $d = 0$ og $d < 0$.

1) $d > 0$: Ifølge sætning 6.4 har vi, at: $s(x) = c_1 \cdot e^{\sqrt{\frac{1}{4}d} \cdot x} + c_2 \cdot e^{-\sqrt{\frac{1}{4}d} \cdot x}$, hvor c_1 og c_2 er arbitrære konstanter, hvormed vi ser, at $y(x) = s(x) \cdot e^{-\frac{1}{2}px} = (c_1 \cdot e^{\sqrt{\frac{1}{4}d} \cdot x} + c_2 \cdot e^{-\sqrt{\frac{1}{4}d} \cdot x}) \cdot e^{-\frac{1}{2}px}$, dvs.

$$y(x) = c_1 \cdot e^{(-\frac{1}{2}p + \frac{1}{2}\sqrt{d}) \cdot x} + c_2 \cdot e^{(-\frac{1}{2}p - \frac{1}{2}\sqrt{d}) \cdot x}$$

Da $-\frac{1}{2}p + \frac{1}{2}\sqrt{d}$ hhv. $-\frac{1}{2}p - \frac{1}{2}\sqrt{d}$ er de to rødder i karakterpolynomiet (kontrollér !), er beviset for tilfælde 1) tilendebragt.

2) $d = 0$: Ifølge sætning 6.4 har vi, at: $s(x) = c_1 + c_2x$, hvor c_1 og c_2 er arbitrære konstanter. (Vi har byttet rundt på c_1 og c_2 i fht. sætning 6.4, men det er naturligvis uden betydning, hvad man kalder disse konstanter).

Vi ser hermed, at $y(x) = s(x) \cdot e^{-\frac{1}{2}px} = (c_1 + c_2x) \cdot e^{-\frac{1}{2}px} = c_1 \cdot e^{-\frac{1}{2}px} + c_2x \cdot e^{-\frac{1}{2}px}$, og da $-\frac{1}{2}p$ er roden i karakterpolynomiet (kontrollér!), er beviset for tilfælde 2) tilendebragt.

3) $d < 0$: Ifølge sætning 6.4 har vi, at: $s(x) = c_1 \cdot \cos(\sqrt{-\frac{1}{4}d} \cdot x) + c_2 \cdot \sin(\sqrt{-\frac{1}{4}d} \cdot x)$, hvor c_1 og c_2 er arbitrære konstanter, hvormed vi ser, at

$$y(x) = s(x) \cdot e^{-\frac{1}{2}px} = (c_1 \cdot \cos(\sqrt{-\frac{1}{4}d} \cdot x) + c_2 \cdot \sin(\sqrt{-\frac{1}{4}d} \cdot x)) \cdot e^{-\frac{1}{2}px}$$

og dermed

$$\begin{aligned} y(x) &= (c_1 \cdot \cos(\frac{1}{2}\sqrt{-d} \cdot x) + c_2 \cdot \sin(\frac{1}{2}\sqrt{-d} \cdot x)) \cdot e^{-\frac{1}{2}px} = \\ &= c_1 \cdot e^{-\frac{1}{2}px} \cdot \cos(\frac{1}{2}\sqrt{-d} \cdot x) + c_2 \cdot e^{-\frac{1}{2}px} \cdot \sin(\frac{1}{2}\sqrt{-d} \cdot x) \end{aligned}$$

Hermed er beviset for tilfælde 3) – og dermed også sætning A.6.1 (sætning 6.16) – tilendebragt. ♥

I lighed med sætning 6.13 gælder der følgende sætning vedrørende entydighed af løsninger:

Sætning A.6.2.

Hvis (x_0, y_0) er et givet punkt og α er et givet tal, så findes der netop én løsning f til differentiaalligningen $y'' + py' + qy = 0$, som går igennem punktet (x_0, y_0) **og** opfylder, at $f'(x_0) = \alpha$.

Bevis:

Lad x_0, y_0 og α være givne tal, og lad d være diskriminanten for karakterpolynomiet svarende til differentiaalligningen $y'' + py' + qy = 0$.

Ifølge beviset for sætning A.6.1 gælder der, at følgende to udsagn er ensbetydende:

- (1) $f(x)$ er en løsning til differentiaalligningen: $y'' + py' + qy = 0$
- (2) $s(x) = f(x) \cdot e^{\frac{1}{2}px}$ er en løsning til differentiaalligningen: $s'' = \frac{1}{4}d \cdot s$

Vi vil nu vise, at følgende to udsagn er ensbetydende:

- (3) $f(x)$ går igennem punktet (x_0, y_0) og $f'(x_0) = \alpha$.
- (4) $s(x)$ går igennem punktet $(x_0, y_0 \cdot e^{\frac{1}{2}px_0})$ og $s'(x_0) = \alpha \cdot e^{\frac{1}{2}px_0} + y_0 \cdot \frac{1}{2}p \cdot e^{\frac{1}{2}px_0}$

Antag at (3) er opfyldt. Vi skal da vise (4). Dette kan gøres således:

Da $s(x) = f(x) \cdot e^{\frac{1}{2}px}$ ser vi specielt, at $s(x_0) = f(x_0) \cdot e^{\frac{1}{2}px_0}$, og da vi ifølge (3) har, at $f(x_0) = y_0$,

ser vi at $s(x)$ går igennem punktet $(x_0, y_0 \cdot e^{\frac{1}{2}px_0})$. Da $s'(x) = f'(x) \cdot e^{\frac{1}{2}px} + f(x) \cdot \frac{1}{2}p \cdot e^{\frac{1}{2}px}$ (kontrollér)

ser vi (idet $f(x_0) = y_0$ og $f'(x_0) = \alpha$), at $s'(x_0) = \alpha \cdot e^{\frac{1}{2}px_0} + y_0 \cdot \frac{1}{2}p \cdot e^{\frac{1}{2}px_0}$, dvs. (4) er opfyldt.

Antag omvendt, at (4) er opfyldt. Vi skal da vise (3). Dette kan gøres således:

Da $f(x) = s(x) \cdot e^{-\frac{1}{2}px}$ ser vi specielt, at $f(x_0) = s(x_0) \cdot e^{-\frac{1}{2}px_0}$, og da vi ifølge (4) har, at $s(x_0) = y_0 \cdot e^{\frac{1}{2}px_0}$, ser vi, at $f(x_0) = y_0 \cdot e^{\frac{1}{2}px_0} \cdot e^{-\frac{1}{2}px_0} = y_0$, dvs. $f(x)$ går igennem punktet (x_0, y_0) .

Da $f'(x_0) = s'(x_0) \cdot e^{\frac{1}{2}px_0} + s(x_0) \cdot (-\frac{1}{2}p) \cdot e^{\frac{1}{2}px_0}$ (kontrollér) ser vi ved anvendelse af (4), at

$$f'(x_0) = (\alpha \cdot e^{\frac{1}{2}px_0} + y_0 \cdot \frac{1}{2}p \cdot e^{\frac{1}{2}px_0}) \cdot e^{\frac{1}{2}px_0} + y_0 \cdot e^{\frac{1}{2}px_0} \cdot (-\frac{1}{2}p) \cdot e^{\frac{1}{2}px_0} = \alpha + \frac{1}{2}py_0 - \frac{1}{2}py_0 = \alpha$$

dvs. $f'(x_0) = \alpha$, dvs. at (3) er opfyldt.

Ifølge sætning 6.13 findes der netop én løsning $s(x)$ til differentialligningen $s'' = \frac{1}{4}d \cdot s$, som går igen-

nem punktet $(x_0, y_0 \cdot e^{\frac{1}{2}px_0})$ og som opfylder, at $s'(x_0) = \alpha \cdot e^{\frac{1}{2}px_0} + y_0 \cdot \frac{1}{2}p \cdot e^{\frac{1}{2}px_0}$ (Bemærk, at i fht.

sætning 6.13 er y_0 og α erstattet med andre værdier, hhv. $y_0 \cdot e^{\frac{1}{2}px_0}$ og $\alpha \cdot e^{\frac{1}{2}px_0} + y_0 \cdot \frac{1}{2}p \cdot e^{\frac{1}{2}px_0}$).

Men da (1) og (2) er ensbetydende og (3) og (4) er ensbetydende, er der dermed netop én løsning f til differentialligningen $y'' + py' + qy = 0$, som går igennem punktet (x_0, y_0) og opfylder, at $f'(x_0) = \alpha$.

Hermed er sætningen bevist. ♥

Vi vil nu kort se på differentialligninger af typen: $y'' + py' + qy = g(x)$, hvor g er en given funktion defineret i et interval I .

Vi starter med at vise en sætning om løsninger til en vilkårlig lineær 2.ordens differentialligning.

Ved en lineær 2.ordens differentialligning forstår vi en differentialligning af typen:

$$(*) \quad y'' + h_1(x) \cdot y' + h_2(x) \cdot y = g(x)$$

hvor h_1, h_2 og g er givne funktioner defineret i et interval I .

Differentialligningen siges at være inhomogen, hvis $g(x)$ ikke er konstant nul, og den siges at være homogen, hvis $g(x) = 0$ for alle $x \in I$, dvs. hvis differentialligningen er af typen:

$$(**) \quad y'' + h_1(x) \cdot y' + h_2(x) \cdot y = 0$$

Hvis vi betragter differentialligningen (*), så siges (**) at være den tilsvarende homogene differentialligning.

Hvis $w(x)$ er en eller anden løsning til (*), så siger vi, at funktionen w er en partikulær løsning til (*).

Der gælder nu følgende sætning:

Sætning A.6.3.

Den fuldstændige løsning til differentialligningen (*), dvs. mængden L af alle de funktioner, som er løsninger til (*), er lig med mængden af funktioner af formen: $f + w$, hvor w er en vilkårlig givet partikulær løsning til (*), og hvor f er en løsning til den tilsvarende homogene ligning (**).

Der gælder altså, at

$$L = \{f + w \mid f \in L_0\}$$

hvor L_0 er den fuldstændige løsning til (**).

Bevis:

For en given funktion y sætter vi $D(y) = y'' + h_1(x) \cdot y' + h_2(x) \cdot y$. Det er da klart (overvej !), at

$$D(y_1 + y_2) = D(y_1) + D(y_2) \quad \text{og} \quad D(k \cdot y) = k \cdot D(y)$$

hvor y_1, y_2 og y er givne funktioner, og k er en konstant.

Når vi skal løse differentialligningen (*), så skal vi altså løse ligningen: $D(y) = g$, idet denne blot er en anden måde at skrive (*) på.

Vi vil bevise sætningen ved at vise, at

$$L \subseteq \{f+w \mid f \in L_0\} \quad \text{og} \quad \{f+w \mid f \in L_0\} \subseteq L$$

hvormed de to mængder må være ens (overvej!).

Antag først, at $y \in L$. Da $w \in L$ har vi dermed, at $D(y) = g$ og $D(w) = g$.

Heraf ser vi, at $D(y) - D(w) = 0$, dvs. $D(y - w) = 0$ (Overvej!). Vi har altså, at $y - w \in L_0$, og hvis vi sætter $f = y - w$ får vi, at

$$y = f + w \in \{f + w \mid f \in L_0\}$$

Vi har hermed vist, at hvis $y \in L$, så er $y \in \{f + w \mid f \in L_0\}$, dvs. at $L \subseteq \{f + w \mid f \in L_0\}$

Antag herefter, at $y \in \{f + w \mid f \in L_0\}$. Der findes da et $f \in L_0$, så $y = f + w$. Og heraf ser vi, at

$$D(y) = D(f + w) = D(f) + D(w) = 0 + g = g$$

Men det betyder jo netop, at $y \in L$.

Vi har hermed vist, at hvis $y \in \{f + w \mid f \in L_0\}$, så er $y \in L$, dvs. at $\{f + w \mid f \in L_0\} \subseteq L$.

Hermed er sætningen bevist. ♥

Sætning A.6.3 gælder specielt for differentiallyigningen: $y'' + py' + qy = g(x)$, idet h_1 og h_2 er de konstante funktioner: $h_1(x) = p$ og $h_2(x) = q$.

Når vi skal løse den inhomogene differentiallyigning: $y'' + py' + qy = g(x)$, (dvs. hvor $g(x)$ ikke er konstant nul), så kombinerer vi blot sætning A.6.3 og sætning A.6.1, idet vi først løser den tilsvarende homogene ligning som anført i sætning A.6.1, derefter gætter vi en partikulær løsning til den inhomogene ligning, hvorefter den fuldstændige løsning fremkommer som anført i sætning A.6.3.

Problemet her er naturligvis at gætte en partikulær løsning. Man må bruge sin fantasi og sit kendskab til differentiation af forskellige funktioner. Ofte er det givtigt at forsøge med partikulære løsninger af samme type som $g(x)$. Hvis f.eks. $g(x)$ er af formen: $g(x) = K \cdot \cos(\omega x)$, er det således en god idé at prøve at sætte $w(x) = a \cdot \cos(\omega x) + b \cdot \sin(\omega x)$ – og så finde ud af, hvad der skal gælde om a og b for at dette gæt kan passe. (Se det følgende eksempel).

Eksempel A.6.4.

Vi vil i dette eksempel se på løsning af den lineære, inhomogene 2.ordens differentiallyigning:

$$y''(t) + p \cdot y'(t) + q \cdot y(t) = K \cdot \cos(\omega t)$$

hvor vi har kaldt den variable t , idet der i denne situation i anvendelsessammenhæng almindeligvis er tale om tiden. (Ligningen bruges f.eks. ved såkaldte tvungne svingninger, hvor et legeme bl.a. påvirkes af en kraft der har form som en harmonisk svingning. Det kan f.eks. være et legeme ombord på et skib i søgang, eller et legeme, der er en del af en maskine, der vibrerer ved brug).

Ifølge sætning A.6.3 er den fuldstændige løsning givet ved funktioner af formen: $f(t) + w(t)$, hvor $f(t)$ er løsninger til den tilsvarende homogene ligning (disse findes ud fra sætning A.6.1), og hvor $w(t)$ er en partikulær løsning til den inhomogene ligning.

Som omtalt vil vi forsøge os med at sætte $w(t) = a \cdot \cos(\omega t) + b \cdot \sin(\omega t)$ – og så se om vi kan finde ud af, hvad der skal gælde om a og b for at dette gæt kan passe. (a og b skal jo være konstanter!).

Vi finder: $w'(t) = -a\omega \cdot \sin(\omega t) + b\omega \cdot \cos(\omega t)$ og $w''(t) = -a\omega^2 \cdot \cos(\omega t) - b\omega^2 \cdot \sin(\omega t)$

Indsættes udtrykkene for $w(t)$, $w'(t)$ og $w''(t)$ i stedet for y i den inhomogene ligning, får vi:

$$-a\omega^2 \cdot \cos(\omega t) - b\omega^2 \cdot \sin(\omega t) + p \cdot (-a\omega \cdot \sin(\omega t) + b\omega \cdot \cos(\omega t)) + q \cdot (a \cdot \cos(\omega t) + b \cdot \sin(\omega t)) = K \cdot \cos(\omega t)$$

Hvis vi indsætter $t = 0$ i denne ligning, får vi: $-a\omega^2 + p b \omega + q a = K$ (\diamond)

Hvis vi i stedet indsætter $t = \frac{\pi}{2\omega}$, så får vi (kontrollér): $-b\omega^2 - p a \omega + q b = 0$ ($\diamond\diamond$)

Af ligningen ($\diamond\diamond$) finder vi: $b = \frac{p\omega}{q - \omega^2} \cdot a$ (når $q \neq \omega^2$). Dette udtryk for b indsættes i (\diamond). Vi får:

$$-a\omega^2 + q a + p\omega \cdot \frac{p\omega}{q - \omega^2} \cdot a = K \quad \Leftrightarrow$$

$$a \cdot (q - \omega^2) \cdot (q - \omega^2) + p^2 \omega^2 a = K \cdot (q - \omega^2) \quad \Leftrightarrow$$

$$a = \frac{K \cdot (q - \omega^2)}{(q - \omega^2)^2 + p^2 \omega^2}$$

hvorefter vi finder:

$$b = \frac{p\omega}{q - \omega^2} \cdot \frac{K \cdot (q - \omega^2)}{(q - \omega^2)^2 + p^2 \omega^2} \quad \Leftrightarrow \quad b = \frac{p\omega K}{(q - \omega^2)^2 + p^2 \omega^2}$$

Det overlades til læseren at overveje, at de fundne udtryk for a og b også kan bruges, hvis $q = \omega^2$.

I dette tilfælde får vi: $a = 0$ og $b = \frac{K}{p\omega}$.

At de fundne værdier af a og b kan bruges for alle værdier af t ses ved kontrolindsætning af a og b i ligningen øverst på siden. Det overlades til en eventuel meget ihærdig læser at kontrollere dette.

Ifølge appendix 7 kan $a \cdot \cos(\omega t) + b \cdot \sin(\omega t)$ skrives på formen: $A \cdot \cos(\omega t - \psi_0)$, hvor

$A = \sqrt{a^2 + b^2}$ og $\tan(\psi_0) = \frac{b}{a}$. I det ovenstående tilfælde finder vi (idet a og b har samme nævner):

$$A = \sqrt{\frac{K^2 \cdot (q - \omega^2)^2 + p^2 \omega^2 K^2}{((q - \omega^2)^2 + p^2 \omega^2)^2}} = \sqrt{\frac{K^2 \cdot ((q - \omega^2)^2 + p^2 \omega^2)}{((q - \omega^2)^2 + p^2 \omega^2)^2}} = \frac{K}{\sqrt{(q - \omega^2)^2 + p^2 \omega^2}}$$

og

$$\tan(\psi_0) = \frac{b}{a} = \frac{p\omega K}{K \cdot (q - \omega^2)} = \frac{p\omega}{q - \omega^2}$$

hvor $\psi_0 \in]-\frac{\pi}{2}; \frac{\pi}{2}[$, hvis $q > \omega^2$ og dermed $a > 0$, og $\psi_0 \in]\frac{\pi}{2}; \frac{3\pi}{2}[$ hvis $q < \omega^2$ og dermed $a < 0$.

Hvis $q = \omega^2$, så er $a = 0$, og så skal vi have $\psi_0 = \frac{\pi}{2}$, idet der gælder: $\cos(x - \frac{\pi}{2}) = \sin(x)$.

En partikulær løsning til den inhomogene ligning er altså: $w(t) = \frac{K}{\sqrt{(q - \omega^2)^2 + p^2 \omega^2}} \cdot \cos(\omega t - \psi_0)$,

hvor ψ_0 er fastlagt som beskrevet ovenfor. (Hvis $p = 0$, så gælder løsningen ikke for $q = \omega^2$).

Den fuldstændige løsning til den inhomogene ligning er dermed som nævnt givet ved funktioner af formen: $f(t) + w(t)$, hvor $f(t)$ er løsninger til den tilsvarende homogene ligning. Og disse findes som ligeledes nævnt ud fra sætning A.6.1). ♥

Appendix 7: Bevis for omskrivning af $c_1 \cdot \cos(\omega \cdot t) + c_2 \cdot \sin(\omega \cdot t)$.

Sætning A.7.1.

Lad a og b være givne tal, som er forskellige fra 0. Der findes da et tal ψ_0 , så

$$a \cdot \cos(\omega \cdot t) + b \cdot \sin(\omega \cdot t) = \sqrt{a^2 + b^2} \cdot \cos(\omega t - \psi_0)$$

Hvis $a > 0$, så er ψ_0 fastlagt ved: $\tan(\psi_0) = \frac{b}{a}$, $-\frac{\pi}{2} < \psi_0 < \frac{\pi}{2}$

Hvis $a < 0$, så er ψ_0 fastlagt ved: $\tan(\psi_0) = \frac{b}{a}$, $\frac{\pi}{2} < \psi_0 < \frac{3\pi}{2}$

Bevis:

Sæt $f(x) = \tan(x)$, $x \in]-\frac{\pi}{2}; \frac{\pi}{2}[$. Om f gælder, at $\forall m(f) = \mathbb{R}$ samt at f er voksende. Der findes derfor netop ét tal $\psi \in]-\frac{\pi}{2}; \frac{\pi}{2}[$, så $\tan(\psi) = \frac{b}{a}$. Vi foretager herefter følgende omskrivninger:

$$\begin{aligned} a \cdot \cos(\omega \cdot t) + b \cdot \sin(\omega \cdot t) &= a \cdot (\cos(\omega \cdot t) + \frac{b}{a} \cdot \sin(\omega \cdot t)) = a \cdot (\cos(\omega \cdot t) + \tan(\psi) \cdot \sin(\omega \cdot t)) \\ &= \frac{a}{\cos(\psi)} \cdot (\cos(\omega \cdot t) \cdot \cos(\psi) + \sin(\omega \cdot t) \cdot \sin(\psi)) \\ &= \frac{a}{\cos(\psi)} \cdot \cos(\omega \cdot t - \psi) \end{aligned}$$

hvor der undervejs dels er brugt definitionen på $\tan(\psi)$, dels formlen for cosinus til en differens.

Da $\frac{1}{\cos^2(\psi)} = 1 + \tan^2(\psi) = 1 + \frac{b^2}{a^2}$, ser vi, at $\frac{1}{\cos(\psi)} = \pm \sqrt{1 + \frac{b^2}{a^2}}$. Og da $\psi \in]-\frac{\pi}{2}; \frac{\pi}{2}[$, skal vi bruge '+' et (overvej!). Hermed får vi, at

$$\frac{a}{\cos(\psi)} = a \cdot \sqrt{1 + \frac{b^2}{a^2}} = a \cdot \sqrt{\frac{a^2 + b^2}{a^2}} = \frac{a}{|a|} \cdot \sqrt{a^2 + b^2}$$

Hvis $a > 0$ ser vi nu, at $\frac{a}{\cos(\psi)} = \sqrt{a^2 + b^2}$, hvormed vi kan sætte $\psi_0 = \psi$.

Hvis $a < 0$ ser vi på samme måde, at $\frac{a}{\cos(\psi)} = -\sqrt{a^2 + b^2}$. Hvis vi derfor sætter $\psi_0 = \psi + \pi$, så

får vi (idet $\cos(x - \pi) = -\cos(x)$), at:

$$\begin{aligned} \sqrt{a^2 + b^2} \cdot \cos(\omega t - \psi_0) &= \sqrt{a^2 + b^2} \cdot \cos(\omega t - \psi - \pi) \\ &= -\sqrt{a^2 + b^2} \cdot \cos(\omega t - \psi) = \frac{a}{\cos(\psi)} \cdot \cos(\omega \cdot t - \psi) \end{aligned}$$

hvormed de omtalte formler også gælder i dette tilfælde.

Hermed er sætningen bevist. ♥

Lad os nu argumentere for formlen: $c_1 \cdot \cos(\omega \cdot t) + c_2 \cdot \sin(\omega \cdot t) = \sqrt{c_1^2 + c_2^2} \cdot \sin(\omega t - \varphi_0)$

Ud fra sætning A.7.1 og det faktum, at $\sin(x + \frac{\pi}{2}) = \cos(x)$, ser vi, at

$$c_1 \cdot \cos(\omega \cdot t) + c_2 \cdot \sin(\omega \cdot t) = \sqrt{c_1^2 + c_2^2} \cdot \cos(\omega t - \psi_0) = \sqrt{c_1^2 + c_2^2} \cdot \sin(\omega t - \psi_0 + \frac{\pi}{2}),$$

og hvis vi heri sætter $\varphi_0 = \psi_0 - \frac{\pi}{2}$, så fremkommer den ønskede formel.

Facitliste til øvelserne i teksten.

Note: I facitlisten bruges: Q.e.d., som er en forkortelse for det latinske: Quod erat demonstrandum. Det betyder: Det ønskede er hermed bevist.

Øvelser i kapitel 1:

Øvelse 1.3 a): $f'(x) = \frac{\sin x}{(\cos x + 10)^2} = \left(\frac{1}{\cos x + 10}\right)^2 \cdot \sin x = (f(x))^2 \cdot \sin x$ Q.e.d.

Øvelse 1.3. b): Da $f(x) = 0$ og $f'(x) = 0$ ser vi: $x^2 \cdot 0^2 + x \cdot 0 = 0$ Q.e.d.

$h(x) = \frac{2}{x^2 + 1}$ og $h'(x) = -\frac{4x}{(x^2 + 1)^2}$ indsat i ligningen giver:

$$x^2 \cdot \left(\frac{2}{x^2 + 1}\right)^2 + x \cdot \left(-\frac{4x}{(x^2 + 1)^2}\right) = x^2 \cdot \frac{4}{(x^2 + 1)^2} + \left(-\frac{4x^2}{(x^2 + 1)^2}\right) = 0 \quad \text{Q.e.d.}$$

Øvelse 1.4. a): Vi laver en analyse af situationen, og vi tænker os, at $f(x) = ax + b$ er en løsning til d), hvormed der altså gælder: $a = ax + b - 3x$, dvs. $(a - 3)x + (b - a) = 0$. Dette skal gælde for alle x , specielt for $x = 0$, hvoraf vi ser, at: $a = b$. Det skal også gælde for $x = 1$, hvoraf vi ser, at $a = 3$. Der er altså højst én mulighed, nemlig: $f(x) = 3x + 3$.

Omvendt ses det let ved indsætning, at $f(x) = 3x + 3$ er en løsning. Q.e.d.

Øvelse 1.4. b): Løses på samme måde som 1.4 a): Hvis $g(x) = ax^2 + bx + c$ er en løsning til e), så gælder der: $2ax + b - 2(ax^2 + bx + c) = -2x^2 + 1$, dvs. $(2 - 2a)x^2 + (2a - 2b)x + (b - 2c - 1) = 0$. Dette skal gælde for alle x , specielt $x = 0$, hvoraf vi ser, at: $b - 2c - 1 = 0$, hvilket giver os, at $(2 - 2a)x^2 + (2a - 2b)x = 0$ for alle x . Specielt for $x = 1$ får vi: $2 - 2a + 2a - 2b = 0$, dvs. $b = 1$. Specielt for $x = 2$ får vi herefter: $(2 - 2a)2^2 + (2a - 2)2 = 0$ dvs. $a = 1$. Endelig kan c findes af: $1 - 2c - 1 = 0$, dvs. $c = 0$. Alt i alt får vi, at der højst er én mulighed, nemlig: $g(x) = x^2 + x$. Omvendt ses det let ved indsætning, at $g(x) = x^2 + x$ er en løsning. Q.e.d.

Øvelse 1.6: $y = x^2 + 3x + c$, $x \in \mathbb{R}$, hvor $c \in \mathbb{R}$ er en vilkårlig konstant.

Øvelse 1.10 a): Fuldstændige løsning: $y = xe^x - e^x + c$, $x \in \mathbb{R}$, hvor $c \in \mathbb{R}$ er en vilkårlig konstant.
Løsning gennem $(-5, 0)$: $f(x) = xe^x - e^x + 6e^{-5}$, $x \in \mathbb{R}$

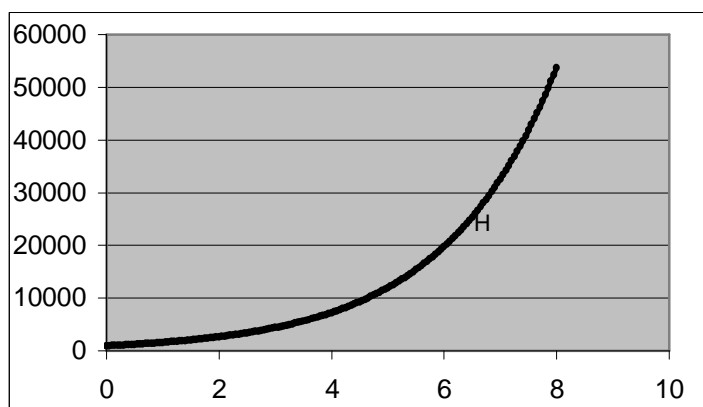
Øvelse 1.10 b): Løsning gennem $(3, 20000)$: $f(x) = \frac{1}{3}x^3 + 19991$, $x \in \mathbb{R}$

Øvelse 1.13 a): Løsning gennem $(-e^2, 22)$: $f(x) = \ln(-x) + 20$, $x < 0$

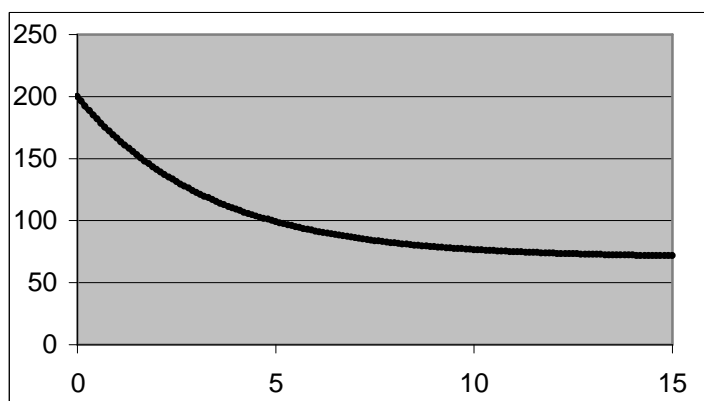
Øvelse 1.13 b): Fuldstændige løsning: $y = -\frac{1}{x} + c$, $x < 0$ og $y = -\frac{1}{x} + k$, $x > 0$, hvor c og k er vilkårlige konstanter. Løsning gennem $(5, 10)$: $f(x) = -\frac{1}{x} + \frac{51}{5}$, $x > 0$

Øvelser i kapitel 3:

Øvelsen i Eksempel 3.2. Grafen for $H(p) = 985,02 \cdot e^{0,5p}$, $p \geq 0$:



Øvelsen i Eksempel 3.5: Grafen for $T(x) = 70 + 130 \cdot e^{-0,3x}$.



Det ses, at: $T(x) \rightarrow 70$ for $x \rightarrow \infty$, (obs: $70 = T_{\text{opt}}$), samt at: $T(x) - T_{\text{opt}}$ er eksponentielt aftagende med en halveringskonstant på 2,31.

Øvelsen i Eksempel 3.7: Den fuldstændige løsning er: $y = c \cdot e^{2x} + x^2 + x$

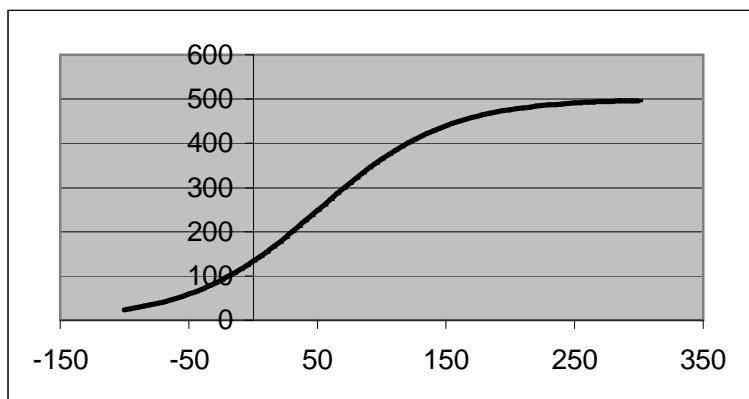
Øvelse 3.8:

$y' = b - k \cdot y \Leftrightarrow y' + ky = b$. Med $g(x) = k$ og $h(x) = b$ fås ifl. sætning 3.6 (hvor $G(x) = kx$):

$$y = e^{-kx} \cdot \left(\int b \cdot e^{kx} dx + c \right) \Leftrightarrow y = c \cdot e^{-kx} + e^{-kx} \cdot b \cdot \frac{1}{k} \cdot e^{kx} \Leftrightarrow y = \frac{b}{k} + c \cdot e^{-kx} \quad \text{Q.e.d.}$$

Øvelse i Eksempel 3.10: Grafen for $f(x) = \frac{500}{1 + 2,7558 \cdot e^{-0,02 \cdot x}}$ (se øverst næste side)

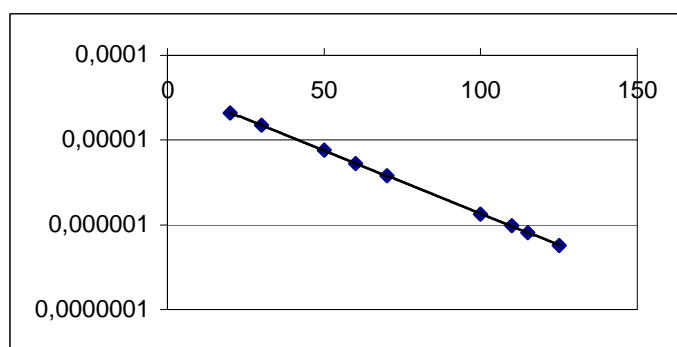
Det ses, at $f(0) \approx 133$, at f i starten vokser frit (næsten eksponentielt), men at væksten efterhånden bremses og ”dør ud”, medens $f(x) \rightarrow 500$ for $x \rightarrow \infty$.



$$f(x) = \frac{500}{1 + 2,7558 \cdot e^{-0,02 \cdot x}}$$

Øvelse 3.11: Af: $f'(x) = k \cdot f(x) \cdot (M - f(x)) = kM \cdot f(x) \cdot \left(1 - \frac{f(x)}{M}\right)$ ser vi, at når $f(x)$ er meget mindre end M , så er $f(x)/M \approx 0$, hvormed vi får, at: $f'(x) = kM \cdot f(x)$, hvilket ifølge sætning 3.1 betyder, at der findes en konstant c , så: $f(x) = c \cdot e^{kM \cdot x}$. Q.e.d.

Øvelse 3.16: Ved anvendelse af $x_1 = 20$, $x_2 = 60$ og $x_3 = 100$ fås af sætning 3.14, at: $M = 86816$. Ved indsættelse af værdierne $1/f(x) - 1/M$ i et enkeltlog. koordinatsystem fås en pæn ret linie (se grafen), hvormed vi ved (sætning 3.13), at f kan beskrives ved en logistisk vækstfunktion.



For at bestemme konstanten k anvendes sætning 3.15. Vi vælger her de to af målepunkterne, som bedst ligger på den rette linie, hvilket svarer til $x_\alpha = 30$ og $x_\beta = 70$. Vi får da $k = 3,927 \cdot 10^{-7}$, og dermed $kM = 0,0341$. Forskriften for f er hermed: $f(x) = \frac{86816}{1 + c \cdot e^{-0,0341 \cdot x}}$ Konstanten c bestemmes

som i eksempel 3.10 ud fra punktet $(70, 65200)$. Vi får: $c = 3,61$, altså: $f(x) = \frac{86816}{1 + 3,61 \cdot e^{-0,0341 \cdot x}}$

Øvelse 3.17: Regressionen giver: $f(x) = \frac{86902}{1 + 3,617 \cdot e^{-0,0341 \cdot x}}$

Sammenlignet med resultatet i øvelse 3.16 giver en pæn overensstemmelse.

Øvelser i kapitel 4: Radioaktivitet og stråling

Øvelse 4.2 a): 2659 år

Øvelse 4.2.b): 2616 år hhv. 2703 år. Dette betyder, at en relativ usikkerhed på 1,6% (0,02/1,22) på værdien af k giver resultatet: $t = 2660 \pm 40$ år, altså en nøjagtighed i aldersbestemmelsen på 1,5 %. Anvendelse af metoden kræver derfor en god bestemmelse af k -værdien for C^{14} (og på tilsvarende måde af $N(t)$ -værdien).

Øvelse 4.3 b): $5,47 \cdot 10^9$ år = 5,47 milliarder år. Jordens alder: 6,0 milliarder år.

Øvelse 4.4:

1) Antallet af partikler, der udsendes i løbet af et lille tidsinterval Δt er lig med det antal kerner, der henfalder i løbet af dette lille tidsinterval, dvs. $|\Delta N|$ (eller $-\Delta N$), idet ΔN er tilvæksten i antallet af ikke-henfaldne kerner – og denne tilvækst er negativ. Da aktiviteten $A(t)$ er antallet af partikler, der i alt udsendes pr. tidsenhed, har vi: $A(t) = \frac{-\Delta N}{\Delta t}$

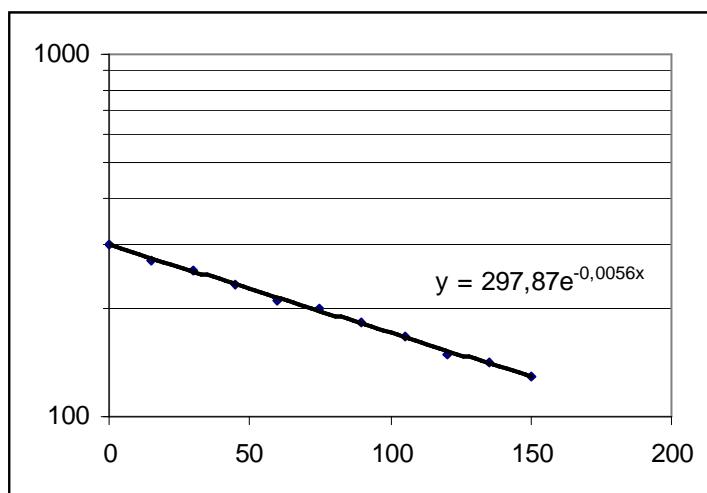
2) Da Δt er lille, har vi: $A(t) = \frac{-\Delta N}{\Delta t} \approx -N'(t)$.

Ifølge eksempel 4.1 får vi dermed, at: $A(t) = k \cdot N_0 \cdot e^{-kt} = A_0 \cdot e^{-kt}$, hvor $A_0 = k \cdot N_0$

3) Hvis GM-røret befinder sig i afstanden r fra det radioaktive materiale, og hvis a er arealet af det følsomme/aktive område på GM-røret, så rammes GM-røret hele tiden af brøkdelen: $\frac{a}{4\pi r^2}$ af

den samlede stråling, idet vi må formode, at strålingen sendes ud i alle mulige retninger, og idet overfladearealet af en kugle med radius r er lig med $4\pi r^2$.

4) og 5): Forskriften fås af tegningen, der er lavet i Excel: $A(t) = 297,9 \cdot e^{-0,0056t}$



6) $k = 0,0056 \text{ sek}^{-1}$

7) Halveringstiden giver: 123,8 sek. På grafen aflæses værdien til: 125 sek. Fin overensstemmelse!

Øvelse 4.7: a) 1,96 cm b) $x_{1/2} = 0,845$ cm

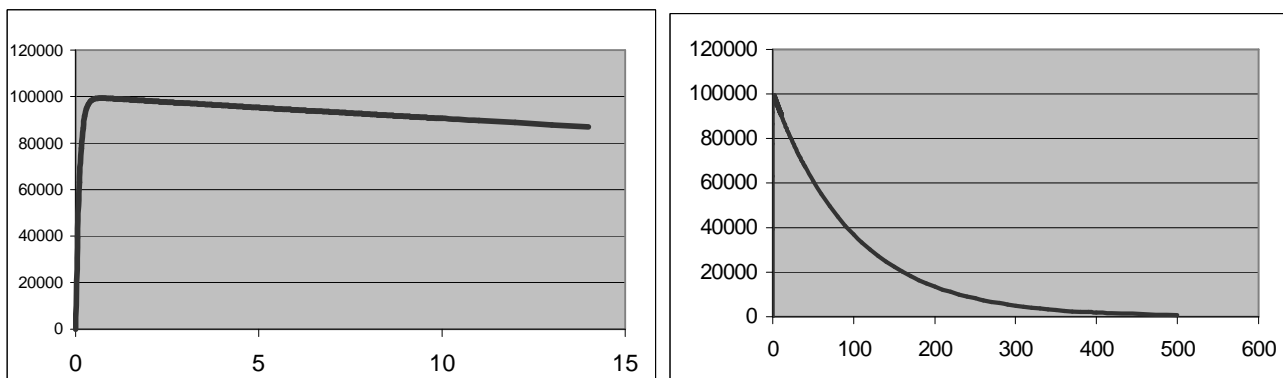
Øvelse 4.8: 0,73 mm

Øvelser i Eksempel 4.10:

a) $D(t) = M_0 \cdot \frac{k_m}{k_d - k_m} \cdot (e^{-k_m t} - e^{-k_d t})$

Kommentarer: På alle figurerne måles tiden på førsteaksen i sekunder og op af andenaksen har vi antallet af datterkerner.

b): b1: Der anvendes to figurer til at illustrere situationen i b1:



Figuren til venstre viser opvæksten af antallet af datterkerner ”i begyndelsen”, og figuren til højre viser henfaldet af datterkernerne efter den indledende opvækst, (som i praksis ikke kan ses på figuren, idet opvækstperioden er så kort i fht. enheden på 1.aksen).

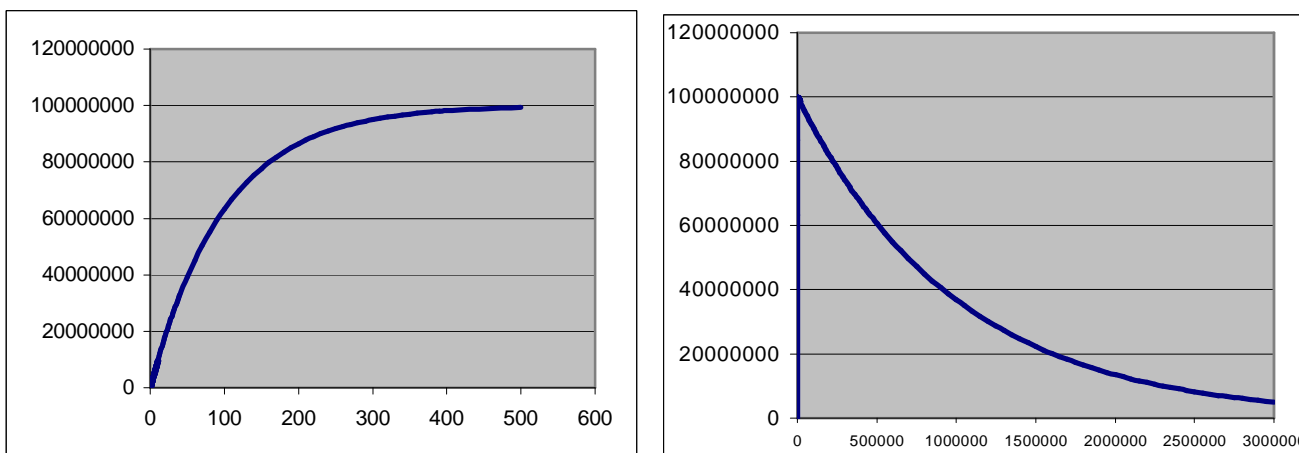
Der skal altså to figurer, med hver sin inddeling af førsteaksen, til at illustrere situationen i b1.

I starten vokser $D(t)$ hurtigt op, hvorefter den aftager med samme hastighed som $M(t)$, blot er $D(t)$ værdierne væsentligt mindre end $M(t)$.

Dette stemmer fint overens med, at da k_d er meget større end k_m , så er halveringstiden for datterkernerne meget mindre end halveringstiden for moderkernerne. Så ”populært udtrykt”:

Set i forhold til moderkernerne, så forsvinder datterkernerne næsten ”med det samme” de er dannet, hvormed der for det første ikke er ret mange af dem, for det andet aftager antallet $D(t)$ i samme tempo som $M(t)$.

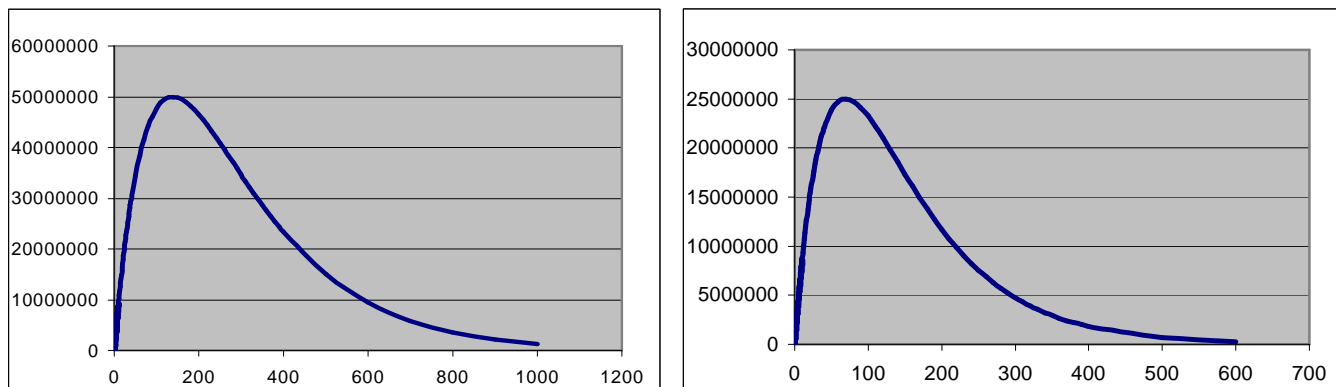
b2: Der anvendes to figurer efter samme princip som ved b1:



Bemærk igen forskellen på akseinddelingerne på de to figurer. Bemærk også, at $D(t)$ vokser langsommere op end ved b1, men når til gengæld op til næsten 10^8 , dvs. værdien af M_0 . Herefter aftager $D(t)$ meget langsomt med en hastighed bestemt af datterkernernes halveringstid.

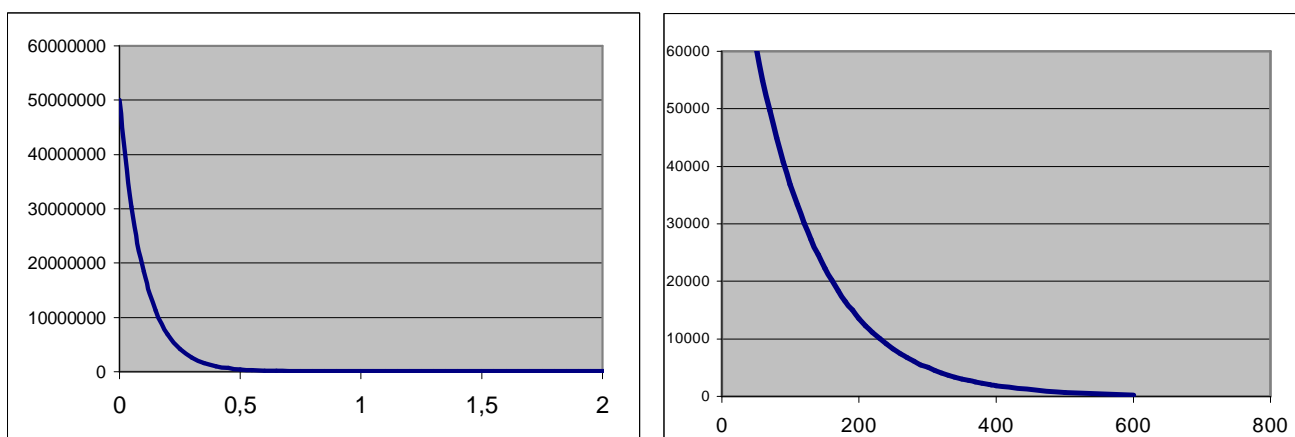
Dette stemmer fint overens med, at da k_d er meget mindre end k_m , så er halveringstiden for datterkernerne meget større end halveringstiden for moderkernerne. Så ”populært udtrykt”:
Datterkernerne henfalder så langsomt, at moderkernerne næsten alle sammen når at blive til datterkerner inden de (med væsentlig lavere hastighed) begynder at aftage i antal.

b3 og b4: Den venstre figur illustrerer situation i b3 og den højre i b4:



Her er henfaldskonstanterne – og dermed også halveringstiderne af samme størrelsesorden, hvor- med opvækst og aftagen af $D(t)$ ser stort set ens ud i de to tilfælde. Bemærk dog forskellen på akserne, på hvor den maksimale $D(t)$ -værdi antages og hvor stor den er.

c): c1: Der anvendes to figurer til at illustrere situationen i c1:



Bemærk forskellen på inddelingerne af både førsteaksen og andenaksen.

Pointen er, at i starten falder $D(t)$ meget hurtigt, hvorefter den som i b1 aftager med samme hastighed som $M(t)$, blot er $D(t)$ værdierne væsentligt mindre end $M(t)$.

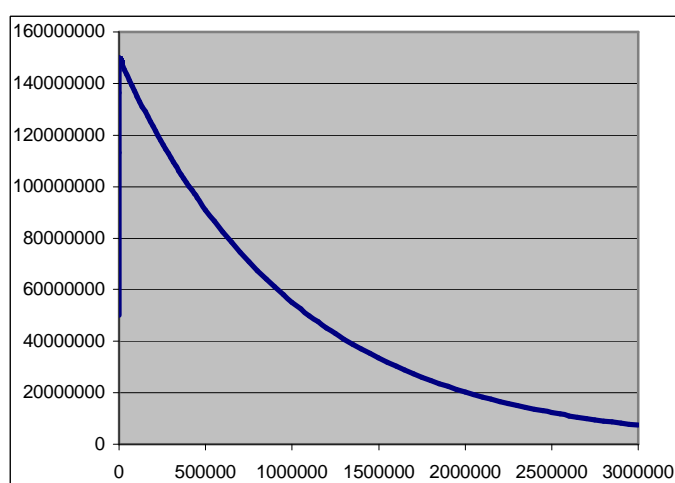
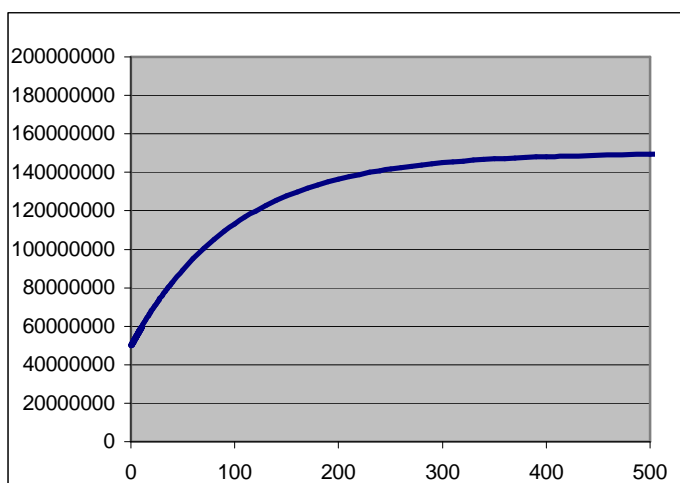
Dette stemmer fint overens med, at da k_d er meget større end k_m , så er halveringstiden for datterkernerne meget mindre end halveringstiden for moderkernerne. Så ”populært udtrykt”:

Set i forhold til moderkernerne, så forsvinder de eksisterende datterkernerne næsten ”med det samme”, hvorfor grafen falder så hurtigt i starten. Herefter sker der det samme som i b1 (se dér).

c2: Der anvendes to figurer efter samme princip som ved b1 (se øverst næste side).

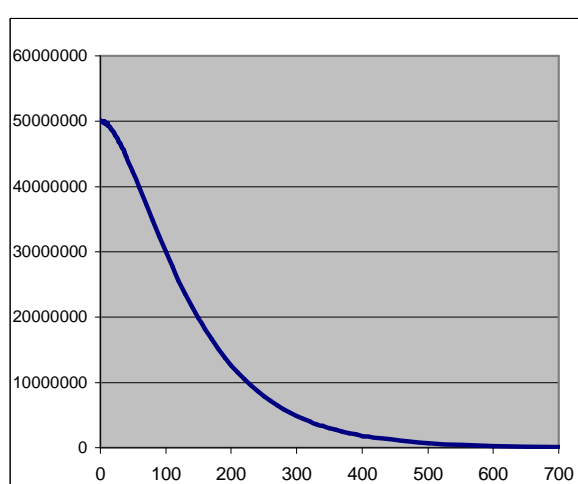
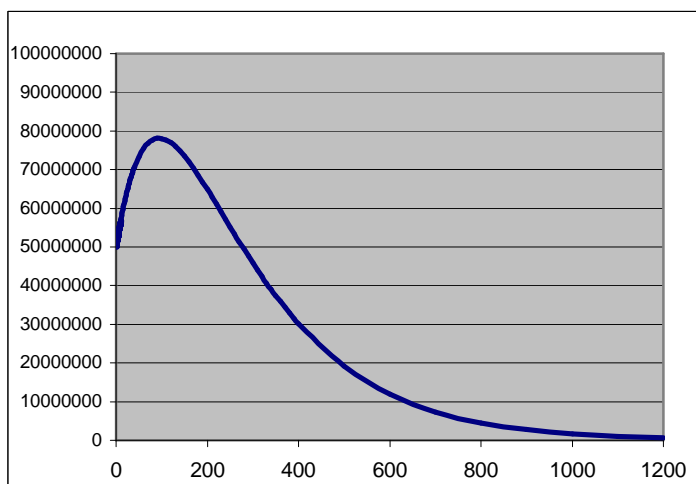
Bemærk igen akseinddelingerne.

I begyndelsen vokser $D(t)$ op til en værdi, der er ca. $1,5 \cdot 10^8$, dvs. 1,5 gange værdien af M_0 . Herefter aftager $D(t)$ meget langsomt med en hastighed bestemt af datterkernernes halveringstid.



Dette stemmer fint overens med, at da k_d er meget mindre end k_m , så er halveringstiden for datterkernerne meget større end halveringstiden for moderkernerne. Så ”populært udtrykt”:
 Datterkernerne henfalder så langsomt, at moderkernerne næsten alle sammen når at blive til datterkerner (dermed de 1,5 gange værdien af M_0), inden de (med væsentlig lavere hastighed) begynder at aftage i antal.

c3 og c4: Den venstre figur illustrerer situation i c3 og den højre i c4:



Her er henfaldskonstanterne – og dermed også halveringstiderne af samme størrelsesorden. Men da der fra starten allerede er $0,5 \cdot 10^8$ af datterkernerne, ser graferne ikke ens ud som i b3 og b4.

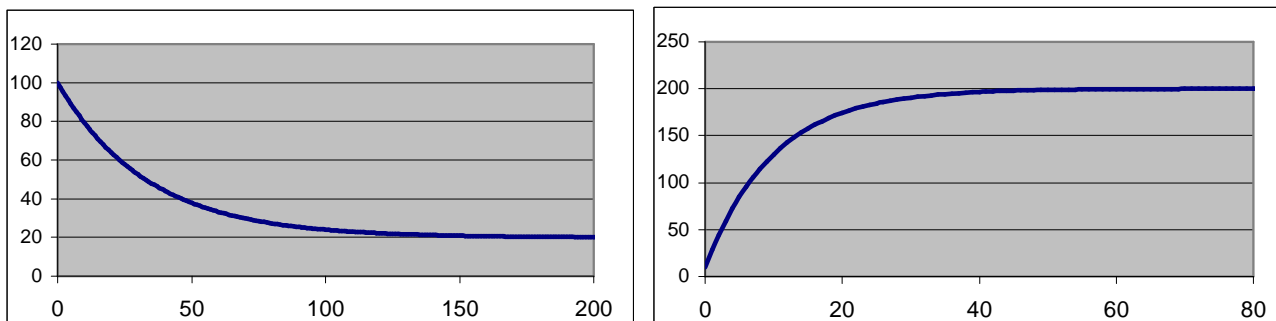
På c3, hvor k_d er det halve af k_m – og hvor halveringstiden for datterkernerne derfor er dobbelt så stor som for moderkernerne –, når antallet af datterkerne at vokse i et vist tidsinterval, indtil det efterhånden begynder at aftage.

På c4, hvor k_d er det dobbelte af k_m – og hvor halveringstiden for datterkernerne derfor er halvt så stor som for moderkernerne –, når det samlede antal $D(t)$ af datterkerner ikke at vokse. Men p.gr.a. de nydannede datterkerner viser kurven en ”blød overgang” i et vist tidsinterval, inden den begynder at aftage som en eksponentielt aftagende funktion.

Øvelser i kapitel 4: Temperatur-udligning.

Øvelser i Eksempel 4.11:

a) Figuren til venstre viser situation 1, og figuren til højre viser situation 2.



Det ses som forventet, at temperaturen gradvist nærmer sig til det ”store” legemes temperatur.

b) $T(t) \rightarrow T_0$ for $t \rightarrow \infty$, idet $e^{-at} \rightarrow 0$ for $t \rightarrow \infty$, idet $a > 0$

Øvelse 4.12:

a) $a = 0,0198 \text{ min}^{-1}$

b) Hastigheden er givet ved $T'(t)$, og $T'(30) = 0,153 \text{ }^\circ\text{C pr. min.}$

c) 77,8 minutter

Øvelse 4.13:

a) $a = 0,007621 \text{ min}^{-1}$

b) Mordet fandt sted ca. kl. 15⁴⁶

Øvelse 4.14:

a) 22,2 timer

b) Temperaturen falder med $0,457 \text{ }^\circ\text{C pr. time}$

c) $g(42) = 15,0 \text{ }^\circ\text{C}$

d) $g(x) \rightarrow 5$ for $x \rightarrow \infty$, dvs. at man – p.gr.a. pejsen og den varme, den afgiver til omgivelserne – er i stand til at opretholde $5 \text{ }^\circ\text{C}$ i soverummene mm. i den store hytte, hvorimod $f(x) \rightarrow -2$ for $x \rightarrow \infty$, idet der ikke er noget til at opvarme den billige hytte, så man her efterhånden får uden-dørstemperaturen, som altså må antages at være (gennemsnitlig) $-2 \text{ }^\circ\text{C}$.

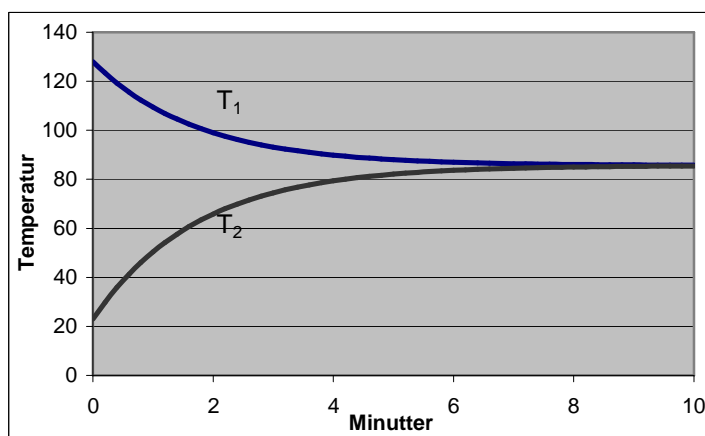
Hvis vi ser på et udtryk af formen: $a + b \cdot e^{-kx}$, så fastlægger værdierne b og k , hvor hurtigt leddet $b \cdot e^{-kx}$ går mod 0 for x gående mod uendelig (det vil i denne opgave sige, hvor hurtigt temperaturen udlignes). Jo større værdi af k , desto hurtigere går leddet $b \cdot e^{-kx}$ mod 0. For begge hytter gælder, at omgivelserne prøver at ”tvinge” temperaturen ned på $-2 \text{ }^\circ\text{C}$, men for den store hytte gælder, at samtidig med at der forsvinder varmeenergi ud igennem vægge, vinduer osv., så tilføres der varmeenergi fra stuen, hvilket gør temperaturudligningshastigheden mindre.

Øvelse i Eksempel 4.15:

Ved indsættelse af de fire værdier for $T_1(0)$, $T_2(0)$, C_1 og C_2 får vi: $T_1(t) = 85,6 + 42,37 \cdot e^{-\alpha t}$, og ved anvendelse af $T_1(2) = 99$ findes $\alpha = 0,57559$, og dermed:

$$T_1(t) = 85,6 + 42,37 \cdot e^{-0,57559t} \quad \text{og} \quad T_2(t) = 85,6 - 62,63 \cdot e^{-0,57559t}$$

Graferne ses øverst på næste side. Det ses, at $T_1(t)$ gradvist aftager og nærmer sig 85,6, og at $T_2(t)$ gradvist vokser og nærmer sig 85,6. (Temperaturstigningen er størst for legeme 2, da det har den mindste varmekapacitet). Den fælles temperatur er altså $85,6 \text{ }^\circ\text{C}$.



Figur til øvelsen i Eksempel 4.15

Øvelser i kapitel 4: Biologi og medicin.

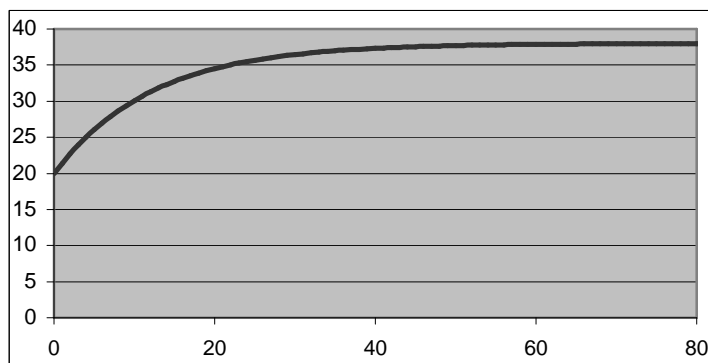
Øvelse 4.17: a) $r = 0,003646 \text{ min}^{-1}$ b) 142,3 min. hhv. 190 minutter

Øvelser i Eksempel 4.18:

a) $\lim_{t \rightarrow \infty} c(t) = c_0$

Koncentrationen inde i cellen nærmer sig efterhånden til koncentrationen i omgivelserne.

b) På figuren ses grafen for $c(t)$. Det ses, at koncentrationen vokser – med aftagende hastighed svarende til at koncentrationen inde og ude udlignes – mod koncentrationen ude ($38 \mu\text{g pr. ml}$).



Øvelser i Eksempel 4.19:

a) $c_1(0)$ er koncentrationen af det betragtede stof i afdeling 1 til tiden 0, dvs. når målingen/forsøget begynder, og m/V er den gennemsnitlige koncentration af stoffet i de to afdelinger.

$$\lim_{t \rightarrow \infty} c_1(t) = \frac{m}{V}, \text{ dvs. koncentrationen af stoffet i afd. 1 nærmer sig gennemsnitskoncentrationen.}$$

b) $\lim_{t \rightarrow \infty} c_2(t) = \frac{m}{V} = \lim_{t \rightarrow \infty} c_1(t)$

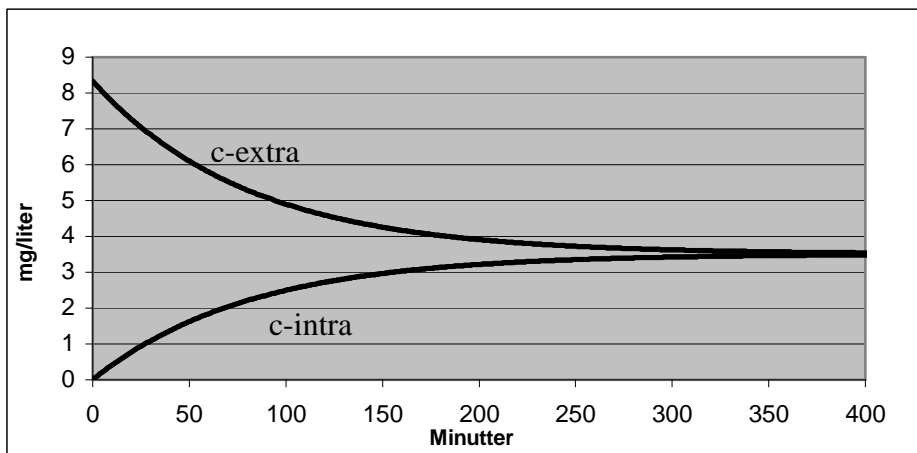
Dette resultat er rimeligt, idet stoffet diffunderer og udligner koncentrationsforskelle, så længe sådanne forekommer. Slutkoncentrationen må altså være ens i begge afdelinger, og den må derfor være lig med: den samlede masse af stoffet divideret med det samlede rumfang, som stoffet kan udbrede sig i.

Øvelse 4.20:

a) $\beta = 0,01243 \text{ min}^{-1}$

b) $c_{\text{extra}}(t) = 4,8246 \cdot e^{-0,01243 \cdot t} + 3,5088$ $c_{\text{intra}}(t) = 3,5088 \cdot (1 - e^{-0,01243 \cdot t})$

c) Koncentrationerne udlignes efterhånden og nærmer sig til 3,5088 mg/liter



Øvelse 4.21: a) $S(t) = 5 \cdot e^{-0,077 \cdot t}$, hvor $S(t)$ måles i ml og t i døgn. b) ca. 30 døgn

Øvelser i Eksempel 4.22:

a) Da $B(t) = B(0) \cdot e^{-U_{\text{Pb}} \cdot t}$, har vi, at $U_{\text{Pb}} = \frac{\ln 2}{T_{1/2}}$. Og da $T_{1/2} = 8 \text{ år} = 8 \cdot 365 \text{ døgn} = 2920 \text{ døgn}$

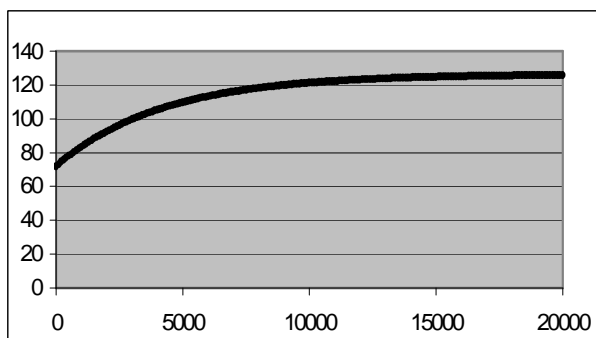
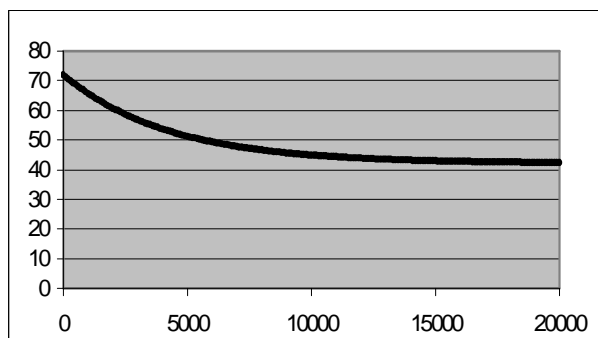
(vi ser bort fra de 2 skuddage på 8 år), ser vi: $U_{\text{Pb}} = \ln(2)/2920 \text{ døgn} = 2,374 \cdot 10^{-4} \text{ døgn}^{-1}$ Q.e.d.

b) ca. 8315 døgn (ca. 22,7 år)

c) Af sætning 3.3 får vi: $B(t) = \frac{O_{\text{Pb}}}{U_{\text{Pb}}} + c \cdot e^{-U_{\text{Pb}} \cdot t}$. Da $B(0) = \frac{O_{\text{Pb}}}{U_{\text{Pb}}} + c \cdot 1$ får vi: $c = B(0) - \frac{O_{\text{Pb}}}{U_{\text{Pb}}}$

Dermed har vi i alt: $B(t) = \frac{O_{\text{Pb}}}{U_{\text{Pb}}} + \left(B(0) - \frac{O_{\text{Pb}}}{U_{\text{Pb}}} \right) \cdot e^{-U_{\text{Pb}} \cdot t}$

d) 1) $B(t) = 42,1 + 29,9 \cdot e^{-2,374 \cdot 10^{-4} \cdot t}$ I pkt. 4) får vi: $B(t) = 126,4 - 54,4 \cdot e^{-2,374 \cdot 10^{-4} \cdot t}$
 2) Grafen til venstre er fra pkt. 1), grafen til højre er fra pkt. 4):



Vi ser, at blymængdens ændringshastighed numerisk set er aftagende, og at blymængden – p.gr.a. indtagelse og trods udskillelse – efterhånden stabiliseres omkring en bestemt værdi.

$$3) \lim_{t \rightarrow \infty} B(t) = \frac{O_{pb}}{U_{pb}} = 42,1 \text{ mg} . \quad \text{Og i pkt. 4 fås: } \lim_{t \rightarrow \infty} B(t) = \frac{O_{pb}}{U_{pb}} = 126,4 \text{ mg}$$

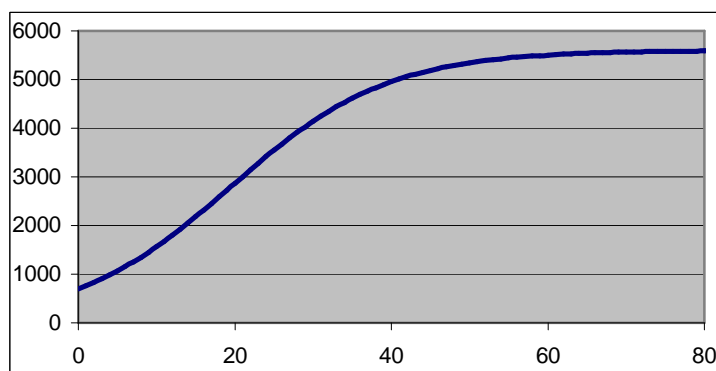
Øvelser i Eksempel 4.23:

a) Dette er allerede omtalt i sætning 3.12, men vi tager det en gang til:

$N(t) \rightarrow K$ for $t \rightarrow \infty$, idet $e^{-sKt} \rightarrow 0$ for $t \rightarrow \infty$, da $sK > 0$, hvormed nævneren i udtrykket for $N(t)$ går mod 1 for t gående mod uendelig.

$$N(0) = N_0 = \frac{K}{1+c \cdot 1} \Leftrightarrow 1+c = \frac{K}{N_0} \Leftrightarrow c = \frac{K}{N_0} - 1$$

b) Grafen er en logistisk kurve, der starter i 700 og efterhånden nærmer sig mætningsværdien 5600



Øvelse 4.24:

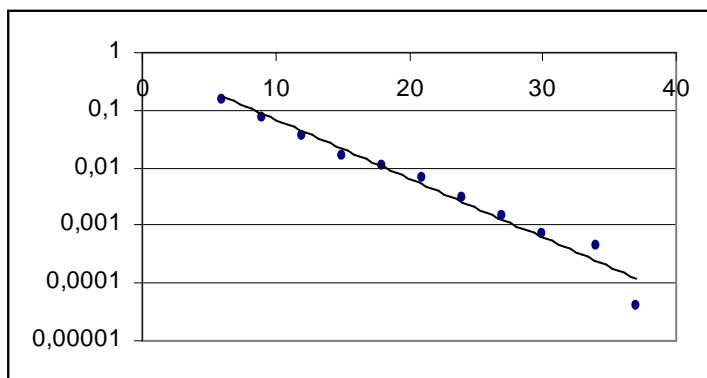
a) $sK \approx 0,094 \text{ år}^{-1}$

b) $K \approx 6205. \quad N(t) = \frac{6205}{1+11,4 \cdot e^{-0,094t}}$

Øvelse 4.25: (Denne øvelse løses på samme måde som øvelse 3.16 (se evt. denne)).

Ved anvendelse af $x_1 = 6$, $x_2 = 18$ og $x_3 = 30$ fås af sætning 3.14, at et bud på M er: $M = 328,5$

Ved indsættelse af værdierne $1/f(x) - 1/M$ i et enkeltlog. koordinatsystem fås med tilnærmelse ret linie (se grafen), hvormed vi ved (sætning 3.13), at f kan beskrives ved en logistisk vækstfunktion.



For at bestemme konstanten k anvendes sætning 3.15. Vi vælger her de to af målepunkterne, som bedst ligger på den rette linie, hvilket svarer til $x_\alpha = 6$ og $x_\beta = 18$. Vi får da $k = 6,793 \cdot 10^{-4}$, og dermed $kM = 0,223$. Konstanten c i forskriften bestemmes ud fra punktet $(6, 6)$. Vi får: $c = 205$.

Forskriften for funktionen er hermed: $f(x) = \frac{328,5}{1 + 205 \cdot e^{-0,223x}}$, hvor x er tiden målt i dage og $f(x)$ er populationsstørrelsen til tiden x .

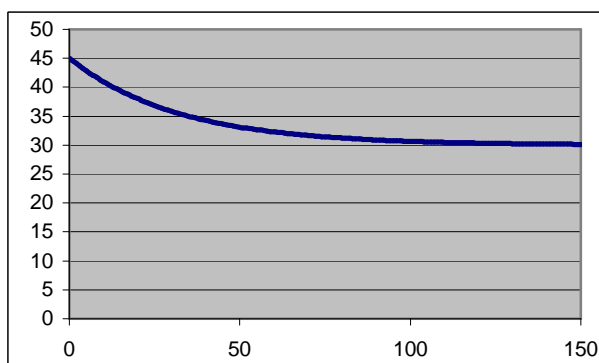
Ved logistisk regression på grafregneren fås: $f(x) = \frac{340,6}{1 + 162,6 \cdot e^{-0,2078x}}$, hvilket fortæller noget om nøjagtigheden i bestemmelsen af brugbare værdier for M og k ved den formelbaserede og grafiske metode, (som dog ikke kan undværes til identifikation af, om der er tale om logistisk vækst). Den interesserede læser kan prøve at løse opgaven igen på baggrund af værdien $M = 340,6$!!

Øvelser i kapitel 4: Økonomiske, behavioristiske emner.

Øvelse i Eksempel 4.26:

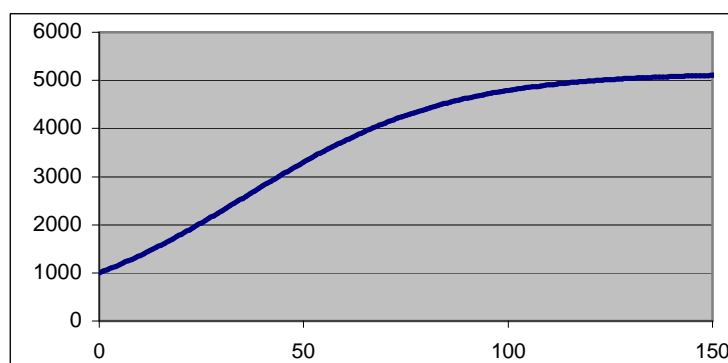
$T(0) = 45$ og $T_{\text{opt}} = 30$ indsat i udtrykket: $T(x) = T_{\text{opt}} + (T(0) - T_{\text{opt}}) \cdot e^{-sx}$ giver:

$T(x) = 30 + 15 \cdot e^{-sx}$. $T(20) = 38$ indsat heri giver: $38 = 30 + 15 \cdot e^{-s \cdot 20}$, hvoraf $s = 0,03143$ findes.



Øvelser i Eksempel 4.27:

a) Der opstilles to ligninger med de to ubekendte b og M : $b = \frac{M}{1000} - 1$ og $3300 = \frac{M}{1 + b \cdot e^{-2}}$, som har løsningerne: $b = 4,156$ og $M = 5156$.



b) Introfasen varer ca. 13 dage. Vækstfasen varer ca. 77 dage.

Øvelse i Eksempel 4.28:

Differentialkvotienten af en funktion i et punkt er det samme som funktionens væksthastighed i punktet, hvormed $S'(t)$ er væksthastigheden af $S(t)$ i t , dvs. den hastighed, hvormed det daglige salg forøges til tiden t .

$$S'(t) = \frac{531,8 \cdot e^{-0,02659 \cdot t}}{(1 + 4 \cdot e^{-0,02659 \cdot t})^2} \quad \text{og dermed: } S'(40) = \frac{531,8 \cdot e^{-0,02659 \cdot 40}}{(1 + 4 \cdot e^{-0,02659 \cdot 40})^2} = 32,4 \text{ kg pr. dag. Q.e.d.}$$

Øvelse 4.29:

221.243 stk (dvs. ca. 220.000 stk)

Øvelse i Eksempel 4.30:

Ifølge sætning 3.12 har vi: $c = \frac{L_{\max}}{L(0)} - 1 = \frac{90}{25} - 1 = 2,6$.

Desuden har, at $L(T) = \frac{L_{\max}}{1 + c \cdot e^{-\alpha L_{\max} \cdot T}}$ med værdierne indsat giver: $75 = \frac{90}{1 + 2,6 \cdot e^{-\alpha 90 \cdot 40}}$

$$\Leftrightarrow 2,6 \cdot e^{-\alpha \cdot 3600} = \frac{90}{75} - 1 \Leftrightarrow e^{-3600\alpha} = \frac{0,2}{2,6} \Leftrightarrow \alpha = \frac{\ln(\frac{1}{13})}{-3600} \Leftrightarrow \alpha = 7,1249 \cdot 10^{-4} \quad \text{Q.e.d.}$$

Loyalitetspotentialet for Service: $L(100) - L(0) = 64,6\%$. Dette er så mange procent af den nuværende kundemasse, som man v.h.j.a. service (og dermed øget tilfredshed) kan påvirke til at være loyale – og man får alle 64,6 % med ved at sikre en 100%’s tilfredshed med alle ydelser.

$100\% - L(100) = 10,4\%$ Dette er så mange procent af de nuværende kunder, som uanset service-niveauet størrelse vil skifte bilmærke.

L_{\max} er i dette eksempel en ”modelteknisk” parameter (en matematisk abstraktion), som ikke helt kan nås, idet $L(100) < L_{\max}$, og den variable T kan højst blive 100.

Øvelser i kapitel 5:

Øvelse 5.4: Overlades til den interesserede læser (Følg blot de enkelte punkter. I pkt. d) skal den grundlæggende definition på kontinuitet benyttes, og i pkt. e) skal $D_m(f)$ fra side 50 øverst bruges).

Øvelse 5.5:

a) $f(x) = -\sqrt{100 - x^2}$, $x \in]-10; 10[$

b) $f(x) = -\ln(-x^2 - 3x + 40 + e^{-3})$, $x \in]-8,004; 5,004[$

Vi ser, at funktionsforskriften i sin grundform er den samme som for løsningen, der går igennem $(-2, 0)$, men at såvel konstanten k som definitionsmængden er ændret.

Øvelse 5.7:

Løsning gennem $(-3, 8)$: $f(x) = \sqrt{2 \ln(-x) + 64 - 2 \ln 3}$, $x < -3 \cdot e^{-32}$

Løsning gennem $(5, -4)$: $f(x) = -\sqrt{2 \ln(x) + 16 - 2 \ln 5}$, $x > 5 \cdot e^{-8}$

Øvelse 5.8:

Den fuldstændige løsning til $y' = y^2 \cdot \sin(x)$ er: $y = \frac{1}{\cos x - k}$, hvor k er en vilkårlig konstant, samt funktionen $y = 0$, (dvs. den funktion, der er konstant lig med 0).

Løsningen igennem $(\pi, -4)$ er: $f(x) = \frac{1}{\cos x + \frac{3}{4}}$, $x \in]2,4189; 3,8643[$

Den fuldstændige løsning til $x^2 y^2 + xy' = 0$ er: $y = 0 \vee y = \frac{1}{\frac{1}{2}x^2 - k}$, $k \in \mathbb{R}$.

For at komme til den sidstnævnte løsning må det i beregningen forudsættes, at $x \neq 0$ – for at isolere $y' (= -x \cdot y^2)$. Men da $y' = \frac{-x}{(\frac{1}{2}x^2 - k)^2}$ ser vi, at $y'(0) = 0 = -0 \cdot (\frac{1}{\frac{1}{2} \cdot 0^2 - k})^2$, hvormed $x = 0$ også

kan bruges (hvis $k \neq 0$). Løsningen gennem $(10,10)$ er givet ved: $f(x) = \frac{1}{\frac{1}{2}x^2 - 49,9}$, $x > \sqrt{99,8}$

Øvelse 5.9:

Den fuldstændige løsning er: $y = 0 \vee y = -\frac{1}{x+k}$, $k \in \mathbb{R}$.

Løsningen gennem $(5, -8)$: $y = -\frac{1}{x - \frac{39}{8}}$, $x > \frac{39}{8}$

Øvelser i kapitel 6: Teori:

Øvelse 6.3:

a) Den fuldstændige løsning: $y = e^{2x} + c_1 x + c_2$, hvor c_1 og c_2 er vilkårlige konstanter.

b) Der skal gælde: $c_2 = -c_1$, hvormed der er uendeligt mange muligheder, f.eks.:

$$f(x) = e^{2x} + x - 1, \quad f(x) = e^{2x} - 5x + 5 \quad \text{og} \quad f(x) = e^{2x} + \pi x - \pi.$$

c) $f(x) = e^{2x} + \frac{1}{4}e^{10} \cdot x - \frac{1}{4}e^{10}$, $x \in \mathbb{R}$

d) $f(x) = e^{2x} + (2 - 2e^2) \cdot x + (2e^2 - 2)$

Øvelse 6.5:

a) Den fuldstændige løsning: $y = c_1 \cdot e^{3x} + c_2 \cdot e^{-3x}$, hvor c_1 og c_2 er vilkårlige konstanter.

$$f(x) = \frac{37}{6}e^{-6} \cdot e^{3x} + \frac{35}{6}e^6 \cdot e^{-3x}, \quad x \in \mathbb{R}$$

b) $y = c_1 \cdot \cos(5x) + c_2 \cdot \sin(5x)$, hvor c_1 og c_2 er vilkårlige konstanter.

Øvelse 6.8:

$$W(x^2, \cos x) = \begin{vmatrix} x^2 & \cos x \\ 2x & -\sin x \end{vmatrix} = -x^2 \sin x - 2x \cos x \quad \text{Q.e.d.}$$

Øvelse 6.14:

a) $f(x) = 4e^{-4} \cdot e^{2x} + 6e^4 \cdot e^{-2x}$, $x \in \mathbb{R}$

b) $f(x) = 2 \cdot \cos(10x) + \frac{1}{20} \cdot \sin(10x)$, $x \in \mathbb{R}$

Øvelse 6.18:

a) Den fuldstændige løsning: $y = c_1 \cdot e^x \cdot \cos(2x) + c_2 \cdot e^x \cdot \sin(2x)$, hvor c_1 og c_2 er vilkårlige konstanter.

$$f(x) = -e^{\frac{\pi}{2}} \cdot e^x \cdot \sin(2x), \quad x \in \mathbb{R}$$

b) Den fuldstændige løsning: $y = c_1 \cdot e^{-2,5x} + c_2 \cdot x \cdot e^{-2,5x}$, hvor c_1 og c_2 er vilkårlige konstanter.

$$f(x) = 8 \cdot e^{-2,5x} + 23 \cdot x \cdot e^{-2,5x}, \quad x \in \mathbb{R}$$

Øvelser i kapitel 6: Nogle udvalgte modeleksempler:

Øvelser i Eksempel 6.20:

a) Højeste punkt (her er $v = 0$) nås til tiden: $t = 2,04$ sek. Passage af nulpunktet: $t = 4,17$ sek.

b) 1) $v(t) \rightarrow -\frac{mg}{\tau}$ for $t \rightarrow \infty$, idet $\left(v_0 + \frac{mg}{\tau}\right) \cdot e^{-\frac{\tau}{m}t} \rightarrow 0$ for $t \rightarrow \infty$

Dette betyder, at hastigheden efterhånden bliver konstant (det sker, når luftmodstanden, som jo vokser med hastigheden, er blevet lige så stor som tyngdekraften).

2) I både sky diving og faldskærmsudspring opnås efterhånden en konstant hastighed/fart (farten er den numeriske værdi af hastigheden!). Farten er størst ved sky diving p.gr.a. den mindre luftmodstand. Hvis vi tænker på den samme person som sky diver og som faldskærmsudspringer, så er mg den samme. Da den konstante fart er givet ved: $\frac{mg}{\tau}$ ses derfor, at τ er størst ved faldskærmspringet.

3) Hvis $v_0 = 0$ fås: $v(t) = \frac{mg}{\tau} \cdot (e^{-\frac{\tau}{m}t} - 1)$, dvs. at afstanden til den konstante sluthastighed af-

tager eksponentielt med tiden, og at hastigheden er lig med den slutfarten gange en størrelse, som går mod -1 for t gående mod uendelig ($-$ 'et optræder p.gr.a. bevægelsesretningen).

Øvelse 6.21: $\tau = 101,47$ kg/s

Øvelser i Eksempel 6.22:

a) Svingningstiden er den tid der går fra legemet er i en given position til det igen er i den samme position og med bevægelsen i den samme retning, f.eks. den tid der går, fra legemet er i aksens begyndelsespunkt og på vej udad til det igen er i begyndelsespunktet på vej udad. Hvis vi ser på udtrykket $s(t) = A \cdot \sin(\omega \cdot t)$, så svarer dette til, at den størrelse vi tager sinus til, er vokset med 2π , altså: $\omega \cdot (t + T) = \omega \cdot t + 2\pi$. Heraf ses, at $\omega \cdot T = 2\pi$, og dermed: $T = \frac{2\pi}{\omega}$. Q.e.d.

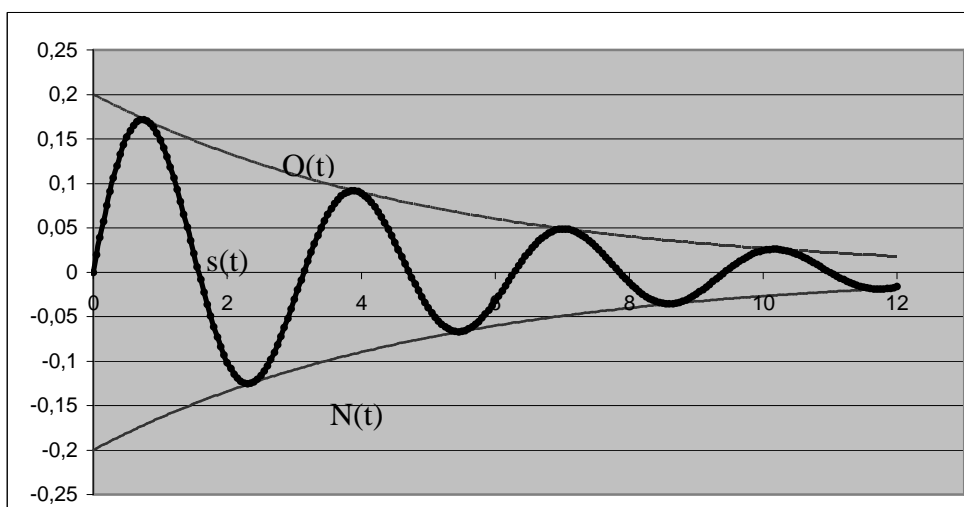
b) 1) Da $e^{-\frac{\tau}{2m}t} \cdot A > 0$ har vi: $-1 \leq \sin(\omega \cdot t) \leq 1 \Rightarrow$

$$-e^{-\frac{\tau}{2m}t} \cdot A \leq e^{-\frac{\tau}{2m}t} \cdot A \cdot \sin(\omega \cdot t) \leq e^{-\frac{\tau}{2m}t} \cdot A \Leftrightarrow -e^{-\frac{\tau}{2m}t} \cdot A \leq s(t) \leq e^{-\frac{\tau}{2m}t} \cdot A \quad \text{Q.e.d.}$$

$$2) \omega = \frac{1}{2} \cdot \sqrt{-\frac{\tau^2 - 4km}{m^2}} \Rightarrow \omega = \frac{1}{2} \cdot \sqrt{-\frac{(0,8 \text{ kg/s})^2 - 4 \cdot 8,08 \text{ kg/s}^2 \cdot 2 \text{ kg}}{(2 \text{ kg})^2}} \Leftrightarrow \omega = 2 \text{ sek.}^{-1}$$

og heraf fås: $s(t) = e^{-\frac{\tau}{2m}t} \cdot A \cdot \sin(\omega \cdot t) = 0,2 \cdot e^{-0,2t} \cdot \sin(2 \cdot t)$

3) Det ses, at graferne for $O(t) = 0,2 \cdot e^{-0,2t}$ og $N(t) = -0,2 \cdot e^{-0,2t}$ danner en øvre hhv. nedre grænse for udsvingene i bevægelsen, og at bevægelsen dermed er en gradvist dæmpet svingning (en svingning af typen $0,2 \cdot \sin(2 \cdot t)$ med dæmpningsfaktoren $e^{-0,2t}$).



Øvelse 6.24:

Ved anvendelse af samme metode som i begyndelsen af Eksempel 6.23 finder vi, at der cirka

(afhængig af tegnenøjagtigheden) gælder, at: $c(t) = 400 \cdot e^{-0,123t} + 250 \cdot e^{-0,0138t}$

Da $K = 2000 \text{ mg}$, $A = 400 \text{ mg/L}$, $B = 250 \text{ mg/L}$, $a = 0,123 \text{ min}^{-1}$ og $b = 0,0138 \text{ min}^{-1}$ finder vi:

$$V_1 = \frac{K}{A + B} = \frac{2000 \text{ mg}}{(400 + 250) \text{ mg/L}} = 3,08 \text{ liter}$$

$$G = \frac{a \cdot b \cdot K}{b \cdot A + a \cdot B} = \frac{0,123 \text{ min}^{-1} \cdot 0,0138 \text{ min}^{-1} \cdot 2000 \text{ mg}}{0,0138 \text{ min}^{-1} \cdot 400 \text{ mg/L} + 0,123 \text{ min}^{-1} \cdot 250 \text{ mg/L}} = 0,094 \text{ L/min}$$

Og tilsvarende findes: $\alpha = \frac{V_1 \cdot (Aa + Bb)}{A + B} - G = 0,155 \text{ L/min}$ og $V_2 = \frac{\alpha \cdot G}{V_1 \cdot a \cdot b} = 2,79 \text{ liter}$

Det ses, at i fht. hunden i Eksempel 6.23 har denne hund et mindre extracellulært volumen (V_1 er 21 % mindre), en noget ringere evne til at rense blodet for cratinin (G er 37 % mindre) og en lidt lavere gennemtrængelighed for creatinin (α er 15 % mindre).

Opgavesamling.

Kapitel 1.

1.1. Bestem et andengradspolynomium, som er løsning til ligningen: $y' - 2y = 3x^2 + x - 5$

1.2. Bestem den fuldstændige løsning til differentialligningen: $f'(x) = x^4 - x^3 + 8$
Bestem den løsning, som opfylder, at $f(2) = 100$.

1.3. Bestem den fuldstændige løsning til differentialligningen: $\frac{d\psi(t)}{dt} = \frac{t}{2t^2 + 3}$

1.4. Gøre rede for, at funktionen $h(x) = \frac{3}{5}x + \frac{3}{25} - 3e^{5x}$ er en løsning til ligningen $y' - 5y = -3x$

1.5. Vis, at funktionen $f(p) = \frac{5}{5p^2 + 1}$ er løsning til differentialligningen: $\frac{df(p)}{dp} = -2p \cdot (f(p))^2$

1.6. Lad g være en løsning til differentialligningen: $\frac{dy}{dx} = \frac{x^2}{y^2}$, hvis graf går igennem punktet (2,4). Find ligningen for tangenten til grafen for g i (2, 4).

1.7. Om en funktion f gælder, at den er løsning til differentialligningen: $y' - 5y = -3x$, at den går igennem punktet (2, k), og at dens graf i dette punkt har en tangent med hældningen 5. Bestem værdien af k og angiv en ligning for den omtalte tangent.

1.8. Betragt differentialligningen i opgave 1.6. Indtegn linieelementer i punkterne (x_0, y_0) , hvor $x_0 \in \{-4, -3, -2, -1, 0, 1, 2, 3, 4\}$ og $y_0 \in \{-4, -3, -2, -1, -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 1, 2, 3, 4\}$, så der fremkommer en figur i stil med figur 1.1. (Hint: Lav et beregningsskema v.h.j.a. grafregneren eller i Excel). Ser det ud til, at $y = x$ er en løsning? Og hvad med: $y = \sqrt[3]{x^3 + 8}$?

Kapitel 3.

3.1. Bestem den fuldstændige løsning til hver af de følgende differentialligninger, og bestem i hvert tilfælde en funktionsforskrift for den løsning, hvis graf går igennem punktet (1,5):

a) $y' = 3y$ b) $5 \frac{dy}{dx} = -12y$ c) $6x \cdot \frac{dy}{dx} = 18xy$, $x \neq 0$

3.2. Bestem den fuldstændige løsning til hver af de følgende differentialligninger, og bestem i hvert tilfælde en funktionsforskrift for den løsning, hvis graf går igennem punktet (1,5):

a) $y' + 8y = 23$ b) $5000 \cdot y' - 300y = 1400$

3.3. Bestem den fuldstændige løsning til differentialligningen: $\frac{dy}{dx} = -2y + 1$

Bestem en forskrift for den løsning f , der opfylder, at $f(3) = 1$.

- 3.4.** Funktionen f er løsning til differentialligningen: $\frac{dy}{dx} = 2y + c$, hvor c er en konstant.
Bestem værdien af c , idet det oplyses, at grafen for f har en asymptote med ligningen $y = -4$.
- 3.5.** Bestem den løsning h til differentialligningen $s' - s = 3$, der opfylder, at $h'(-2) = 1$
- 3.6.** Om funktionen g gælder, at $g(0) = 2000$, at g er kontinuert i $]0; \infty[$ og differentiabel i $]0; \infty[$, samt at $g'(t) = 2 \cdot (4000 - g(t))$ for alle $t \in]0; \infty[$.
Bestem en funktionsforskrift for g , og skitsér grafen.
- 3.7.** Opstil en formel for den fuldstændige løsning til differentialligningen: $y' + ay + b = 0$, hvor a og b er konstanter, og $a \neq 0$.
(Benyt først sætning 3.3 – og derefter også sætning 3.6 – til beviset for formelen).
- 3.8.** Opstil en formel for den fuldstændige løsning til differentialligningen: $ay' + by + c = 0$, hvor a , b og c er konstanter, og hvor $a \neq 0$ og $b \neq 0$.
(Benyt først sætning 3.3 – og derefter også sætning 3.6 – til beviset for formelen).
- 3.9.** Bestem den fuldstændige løsning til hver af de følgende differentialligninger, og bestem i hvert tilfælde en funktionsforskrift for den løsning, hvis graf går igennem punktet $(1,5)$:
- a) $y' - \frac{1}{x}y = 3x^2$, $x > 0$ b) $y' + y = 2e^x$ c) $y' - 2y = 4x^2 - 4x$
- 3.10.** Bestem den fuldstændige løsning til differentialligningen: $t \cdot \phi'(t) = 2t^2 + 3t \cdot \phi(t)$, $t \in \mathbb{R}$
- 3.11.** Eftersvis påstanden i eksempel 1.15 om løsninger til differentialligningen: $y' = y + x$
- 3.12.** Løs differentialligningen: $y' - y = \frac{1}{e^{-x} + 1}$
Bestem en forskrift for den løsning, som går igennem punktet: $(0, 20)$.
- 3.13.** Bestem den løsning til differentialligningen $\frac{d\psi}{dt} = 2 \cdot (0,6 - \psi(t)) \cdot \psi(t)$, som går igennem punktet $(10, 0.5)$.
- 3.14.** Om en funktion f gælder, at den er løsning til differentialligningen: $y' = a \cdot y \cdot (500 - y)$, at $f(20) = 100$ og $f'(20) = 4$. Bestem værdien af a , og anfør en forskrift for f .
- 3.15.** Bestem den løsning til ligningen $y' = -0,05y^2 + 100y$, som går igennem punktet $(0,20)$.
- 3.16.** Undersøg, om de følgende data med rimelighed kan beskrives ved en logistisk vækstfunktion, og bestemt i bekræftende fald en forskrift for denne:

x	5	10	17	30	38	44	55	61
y	123	160	349	628	726	760	771	796

3.17. Beregn følgende integraler – og kontrollér resultaterne i b) og c) v.hj.a. grafregneren:

$$\text{a) } \int \frac{2000}{1 + 0,3 \cdot e^{-0,002x}} dx \quad \text{b) } \int_0^{200} \frac{50000}{10 + 35 \cdot e^{-0,0042q}} dq \quad \text{c) } \int_{20}^{50} \frac{300 \cdot 1,02^x}{3 + 1,02^x} dx$$

Kapitel 5.

5.1. Løs differentiaalligningerne: a) $\frac{dy}{dx} = -\frac{y}{x}$ og b) $\frac{dy}{dx} = \frac{x^2}{y^2}$

Bestem for hver af ligningerne forskriften for den løsning, som går igennem punktet $(-2, -2)$.

5.2. Bestem den løsning til differentiaalligningen: $y' = \frac{(\tan(x))^2}{y}$, som går igennem punktet $(\frac{3\pi}{4}, 5)$

5.3. Bestem den løsning til differentiaalligningen: $y' = \frac{5y^2}{x}$, som går igennem punktet $(-1, 8)$

5.4. Bestem de to løsninger til differentiaalligningen: $\frac{dy}{dx} = e^{-y} \cdot \cos x$, som går igennem punkterne $(\frac{\pi}{3}, 3)$ hhv. $(\frac{\pi}{3}, -2)$. (Husk definitionsmængderne).

5.5. Bestem den fuldstændige løsning til differentiaalligningen: $\frac{dy}{dx} = 2e^{y-x}$
(Husk definitionsmængden udtrykt ved den arbitrære konstant, som indgår i løsningen).

5.6. Bevis, at den fuldstændige løsning til differentiaalligningen: $\frac{dy}{dx} = \frac{2+y^3}{3y^2}$ kan angives på formen: $y = \sqrt[3]{q \cdot e^x - 2}$, hvor $q \in \mathbb{R}$ er en vilkårlig konstant.
Angiv definitionsmængden udtrykt ved konstanten q , når $q \neq 0$. (Husk begrænsninger på y)

5.7. Find den fuldstændige løsning til differentiaalligningen: $y' = 2xy^2$.
Lad f , g og h være de løsninger, hvis grafer går igennem hhv. $(1, \frac{1}{3})$, $(\frac{5}{2}, -\frac{4}{9})$ og $(1, \frac{1}{8})$.
Bestem forskrifter for hver af disse tre funktioner og skitsér deres grafer i samme koordinat-system. Sammenlign og kommentér forskrifterne, definitionsmængderne og graferne.

5.8. Bestem samtlige funktioner $q(p)$, som er løsning til ligningen: $\frac{dq}{dp} = -\frac{2q}{p-5}$.

5.9. Bevis sætning 3.1 v.hj.a. metoden: separation af de variable

5.10. Løs differentialligningen: $y' = \sqrt{y}$ Husk definitionsmængden.

Bestem forskriften for den løsning, som går igennem punktet (4, 9).

5.11. Bestem forskriften og tegn grafen for de løsninger f og g til differentialligningen: $\frac{dy}{dx} = \frac{1}{y}$,

som opfylder, at: $f(2) = -3$ og $g(2) = 4$.

Kapitel 6.

6.1. Bestem den fuldstændige løsning til hver af følgende differentialligninger:

a) $\frac{d^2y}{dx^2} = \sin x$ b) $\frac{d^2y}{dx^2} = x \cdot \sin x$

6.2. Bestem den fuldstændige løsning til ligningen: $\phi''(t) = t \cdot e^t$.

Bestem den løsning, som går igennem (0, 4) og (2, 12).

6.3. Udregn Wronski-determinanten for hver af følgende funktionspar:

a) $x \cdot \cos x$ og $x \cdot \sin x$ b) $x^2 e^{2x}$ og $x^2 e^{-2x}$

6.4. Løs differentialligningerne: $y'' = 2x$ og $y'' = 2y$, og bestem for hver af ligningerne en løsning, som går igennem (0, 2), og som i (0, 2) har en tangent med hældningskoefficienten 1.

6.5. Bestem den fuldstændige løsning til differentialligningen: $y'' = \frac{1}{9}y$.

Bestem forskriften for den løsning f, som opfylder, at $f(3) = e$ og $f'(3) = 2e$.

6.6. Bestem den fuldstændige løsning til differentialligningen: $y'' = -\frac{1}{9}y$.

Bestem forskriften for den løsning f, som opfylder, at $f(\pi) = 0$ og $f'(\pi) = 1$.

6.7. Bestem den fuldstændige løsning til hver af differentialligningerne:

a) $\frac{d^2y(t)}{dt^2} = (\ln 2)^2 y(t)$ og b) $\frac{d^2y(t)}{dt^2} = -\left(\frac{\pi}{2}\right)^2 y(t)$.

Bestem for hver af disse ligninger forskriften for en løsning, som går igennem punktet (1, 1) og som i dette punkt har en tangent med hældningen 0.

6.8. a) Gør rede for, at ligningen $y'' + py' = 0$ ifølge sætning 6.16 har den fuldstændige løsning:

$y = c_1 + c_2 \cdot e^{-px}$, hvor c_1 og c_2 er vilkårlige konstanter.

b) Bevis dette resultat v.h.j.a. sætning 3.1 (Vejledning: Sæt $u = y'$)

c) Find den løsning $h(x)$ til ligningen: $\psi'' - 4\psi' = 0$, som opfylder, at $h(2) = 5$ og $h'(2) = 1$.

6.9. Bestem den fuldstændige løsning til hver af differentialligningerne:

a) $3y'' + 12y' = -9y$ b) $y'' + 2y' + 2y = 0$ c) $y'' + 9y = -6y'$

Stikordsregister

- absorption 11, 31
absorptionskoefficient 11, 31
acceleration 60ff, 77
acetylsalicylsyre 102ff
afledede funktion 77
afsætning 43
aktivitet af radioaktivt stof 29
amplitude 63
analyse af datasæt for logistisk vækst 24ff, 42
anden afledede 3, 77
andenordens differentialligning 3, 53ff
atomkerne 10
atom 83
- begyndeshastighed 61
begyndelsesposition 61
betastråling 11
blodprøve 65
blyforgiftning 17, 40
bruttoreaktion 87
bærekapacitet 17, 23, 41
- celledeling 14
cellemembran 14, 65
celler 14
Coulomb-konstanten 61
creatinin 65ff
cytoplasma 14
- determinant 106
differentialligning 3
diffusion 15, 37ff, 65ff
dobbelt afledede 77
dæmpet svingning 64
dødsrate 14
- effektivitet 18, 42
elektrisk kraft 61
elementarreaktion 87
energiudveksling 13
en-til-en-reaktion 86
entydighed af løsning 6, 48, 53, 58, 59, 78
extracellulære område/volumen
15, 40, 65, 66, 68
- faldskærmsudspring 62, 63
- fjederkonstant 63
fjederkraft 61, 63
fjeders ligevægtsstilling 63
frit fald 61, 62
fuldstændige løsning 4, 6, 20ff, 53, 54, 59
fødselsrate 14
første afledede 3
førsteordens differentialligning 3, 20ff,
- gammastråling 11
Geiger-Müller-rør 10, 29
gennemtrængelighed 15, 16, 37ff, 65
gennemtrængelighedskoefficient 67, 68
gravitationskraft 61
grundstoffer 83
gærceller 14, 37
- halveringstid 28, 40
halveringstykkelse 31
harmonisk svingning 63
hastighed 61, 62, 77
hastighedskonstant 85, 90, 91
henfald 10, 28
henfaldskonstant 10, 28, 29
homogen differentialligning 112
Hookes lov 63
hydrolyse 84, 102
- ikke-henfaldne kerner 10, 28
indlæringshastighed 18, 42
indrængningshastighed 43
inhibitor 85
inhomogen differentialligning 112
integralkurve 4
intensitet af stråling 11, 31
intracellulære område/volumen 15, 40, 65, 66
introduktionsfase 43
ion 83, 84
irreversibel 85
- kalium-40 28
karaktérpolynomium 59, 64, 68
katalysator 83, 85
kemi 83 ff
kemiske forbindelser 83
kemisk formel 83

- kemisk ligevægt 84
kemisk proces 85
kemisk reaktion 83ff
koblede differentiallyigninger 67
koncentration 15, 37ff, 65ff
koncentrationsudligning 15, 37ff
konvention om definitions­mængde 7
kulstof-14 28
kundeloyalitet 18, 19, 45
kundefredshed 19, 45
- ladet partikel 61
ligningssystem 106
linearkombination af funktioner 56
lineær 2.ordens differentiallyigning 59, 109ff
lineært ligningssystem 106
linielement 8, 54, 58
logistisk kurve 24, 41
logistisk regression 27
logistisk vækst 22ff, 97, 98
logistisk vækstfunktion 23, 42, 78ff
logistisk vækstmodel 23, 41
loyalitet 18, 19, 45
loyal­itets­grænse 45
luftmodstand 61, 62
løse en differentiallyigning 4
løsning 3, 4, 7
løsningskurve 4
- massetil­trækning 61
mellemprodukt 87
moder-datter-henfald 11, 32
molekyle 83
molær 91
mætning af marked 18, 43
mætningsfase 43
mætningsværdi 18, 23, 43
- Newtons 2. lov 60ff
Newtons afkølingslov 13, 34
- Orden for reaktion 90ff
- partikulær løsning 4, 112
population 14, 37
populationsvækst 14, 17, 37
pseudo-ordens-reaktion 96
- Q.e.d 116
- radioaktiv stråling 10, 29
radioaktivitet 10, 28
reaktant 84
reaktionshastighed 85ff
reaktionskinetik 83ff
reaktionsmekanisme 87
reaktionsorden 89ff
reaktionspil 84
reaktionsprodukt 84
reaktions­skema 84
resulterende kraft 60ff
retlinet bevægelse 61ff
reversibel 84
røntgenstråling 11, 32
- salg pr. dag 18, 43, 44
separation af de variable 46ff, 81ff, 92, 94
serviceniveau 19, 45
sky diving 62
stamfunktion 5, 53
stamfunktion til logistisk vækstfunktion 27
stedfunktion 61ff, 77
stråling 10, 29
stødpudeopløsning 102
svingningstid 63
- temperatur-udligning 12, 13, 34ff,
termisk kontakt 13, 35
tyngdekraft 61, 62
tæthedsafhængig populationsvækst 17, 41
tør gnidning 63
- udbredelsesvolumen 65, 68
udskillelse af stof 15, 17, 40, 65ff
udskillelsegraden 67, 68
udskillelses­koefficient 17, 40
uran 28
- varmekapacitet 13, 35
viskøs gnidning 62, 64
vækstfase 43
- Wronski-determinant 55ff