

Introduktionsföreläsning 1

Matematik och kemi

Stig Larsson

Matematiska vetenskaper
Chalmers tekniska högskola
Göteborgs universitet

Matematikkurser

Årskurs 1

- Läsperiod 1
 - Analys och linjär algebra, del A, 5 poäng
- Läsperiod 2
 - Analys och linjär algebra, del B, 5 poäng
- Läsperiod 3
 - Analys och linjär algebra, del C, 5 poäng
- Läsperiod 4
 - Kf: Tillämpad matematik, 4 poäng

Årskurs 2

- Läsperiod 1
 - K+Bt: Tillämpad matematik, 5 poäng

Kf samläsning med F: Komplex analys, Fourieranalys, Vektorfält

Undervisning

- Föreläsning (180)
- Datorstudio (48)
- Räkneövning (20)
- SI (kompletterande studier separat från matteundervisningen)

Integration på flera sätt

- Matematik: analys, algebra, numerisk analys, programmering
- Kemi: oorganisk, organisk, fysikalisk, biokemi
- Matematik och kemi

Datorn

- ett beräkningsverktyg
- nya möjligheter att använda matematik
- behov av att reformera undervisningen i matematik och teknik

Moderniserad matematikkurs

- inte bara formler
- generella ekvationer inte bara specialfall
- konstruktiv matematik: konstruera lösning till ekvation med hjälp av algoritm
- datorberäkning med samma algoritm
- använda matematiken på problem från tekniken

Algebraisk ekvation

Enkelt exempel: $x^2 + ax + b = 0$

Lösningsformel:

Algebraisk ekvation

Enkelt exempel: $x^2 + ax + b = 0$

Lösningsformel: $x = -\frac{a}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{a}{2}\right)^2 - b}$

Algebraisk ekvation

Enkelt exempel: $x^2 + ax + b = 0$

Lösningsformel: $x = -\frac{a}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{a}{2}\right)^2 - b}$

Annat exempel: $x^5 + ax^4 + b = 0$

Lösningsformel:

Algebraisk ekvation

Enkelt exempel: $x^2 + ax + b = 0$

Lösningsformel: $x = -\frac{a}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{a}{2}\right)^2 - b}$

Annat exempel: $x^5 + ax^4 + b = 0$

Lösningsformel: ingen.

Algebraisk likning

Enkelt eksempel: $x^2 + ax + b = 0$

Lösningssformel: $x = -\frac{a}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{a}{2}\right)^2 - b}$

Annat eksempel: $x^5 + ax^4 + b = 0$

Lösningssformel: ingen.

Generell form: $f(x) = 0$

Lösningssformel: ingen.

Algebraisk ekvation

Enkelt exempel: $x^2 + ax + b = 0$

Lösningsformel: $x = -\frac{a}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{a}{2}\right)^2 - b}$

Annat exempel: $x^5 + ax^4 + b = 0$

Lösningsformel: ingen.

Generell form: $f(x) = 0$

Lösningsformel: ingen.

Intervallhalveringsmetoden. Successiv approximation. Newtons metod.
Konvergens. Datorberäkning.

Algebraisk ekvation

Enkelt exempel: $x^2 + ax + b = 0$

Lösningsformel: $x = -\frac{a}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{a}{2}\right)^2 - b}$

Annat exempel: $x^5 + ax^4 + b = 0$

Lösningsformel: ingen.

Generell form: $f(x) = 0$

Lösningsformel: ingen.

Intervallhalveringsmetoden. Successiv approximation. Newtons metod.
Konvergens. Datorberäkning.

Kemitillämpning: kemisk jämvikt

Differentialekvation

Enkelt exempel: $u'(t) = u(t)$, $u(0) = u_0$

Lösningsformel:

Differentialekvation

Enkelt exempel: $u'(t) = u(t)$, $u(0) = u_0$

Lösningsformel: $u(t) = u_0 \exp(t)$

Differentialekvation

Enkelt exempel: $u'(t) = u(t)$, $u(0) = u_0$

Lösningsformel: $u(t) = u_0 \exp(t)$

Annat exempel: $u'(t) = u^2(t) + t^2$, $u(0) = u_0$

Lösningsformel:

Differentialekvation

Enkelt exempel: $u'(t) = u(t)$, $u(0) = u_0$

Lösningsformel: $u(t) = u_0 \exp(t)$

Annat exempel: $u'(t) = u^2(t) + t^2$, $u(0) = u_0$

Lösningsformel: ingen.

Differentialekvation

Enkelt exempel: $u'(t) = u(t)$, $u(0) = u_0$

Lösningsformel: $u(t) = u_0 \exp(t)$

Annat exempel: $u'(t) = u^2(t) + t^2$, $u(0) = u_0$

Lösningsformel: ingen.

Generell form: $u'(t) = f(t, u(t))$

Lösningsformel: ingen. Eulers metod. Datorberäkning.

Differentialekvation

Enkelt exempel: $u'(t) = u(t)$, $u(0) = u_0$

Lösningsformel: $u(t) = u_0 \exp(t)$

Annat exempel: $u'(t) = u^2(t) + t^2$, $u(0) = u_0$

Lösningsformel: ingen.

Generell form: $u'(t) = f(t, u(t))$

Lösningsformel: ingen. Eulers metod. Datorberäkning.

Kemitillämpning: reaktionskinetik.

Beräkning

symbolisk beräkning: $\int_0^y \frac{dx}{1+x^2} = \left[\arctan x \right]_0^y = \arctan(y)$

för hand, Mathematica, Maple, Matlab, ...

- teori
- modellering: ställa upp och skriva om ekvationer
- exakt lösning i enkla specialfall

Beräkning

symbolisk beräkning: $\int_0^y \frac{dx}{1+x^2} = \left[\arctan x \right]_0^y = \arctan(y)$

för hand, Mathematica, Maple, Matlab, ...

- teori
- modellering: ställa upp och skriva om ekvationer
- exakt lösning i enkla specialfall

numerisk beräkning: $\int_0^1 \frac{dx}{1+x^2} \approx \sum_n \frac{h_n}{1+x_n^2} = 0.78$

(för hand), Matlab, Mathematica, Maple, Derive, ...

- approximativ lösning i allmänt fall

Beräkning

symbolisk beräkning:
$$\int_0^y \frac{dx}{1+x^2} = \left[\arctan x \right]_0^y = \arctan(y)$$

för hand, Mathematica, Maple, Matlab, ...

- teori
- modellering: ställa upp och skriva om ekvationer
- exakt lösning i enkla specialfall

numerisk beräkning:
$$\int_0^1 \frac{dx}{1+x^2} \approx \sum_n \frac{h_n}{1+x_n^2} = 0.78$$

(för hand), [Matlab](#), Mathematica, Maple, Derive, ...

- approximativ lösning i allmänt fall

Vi använder [inte](#) symbolisk programvara.

Vi gör symboliska beräkningar för hand, numeriska beräkningar i Matlab.

Tillämpad matematik

tillämpning — datorberäkning — matematik

- generella ekvationer, inte bara förenklade specialfall
- intressanta tekniska tillämpningar från början
- når mer avancerade tillämpningar till slut

Matlab

● Matlab = “Matrix laboratory”

Matlab

- Matlab = “Matrix laboratory”
- numeriska matrisberäkningar

Matlab

- Matlab = “Matrix laboratory”
- numeriska matrisberäkningar
- från kalkylator till programmeringsmiljö

Matlab

- Matlab = “Matrix laboratory”
- numeriska matrisberäkningar
- från kalkylator till programmeringsmiljö
- har “toolboxes” för olika teknikområden

Matlab

- Matlab = “Matrix laboratory”
- numeriska matrisberäkningar
- från kalkylator till programmeringsmiljö
- har “toolboxes” för olika teknikområden
- har avancerade verktyg för grafik och användargränssnitt

Matlab

- Matlab = “Matrix laboratory”
- numeriska matrisberäkningar
- från kalkylator till programmeringsmiljö
- har “toolboxes” för olika teknikområden
- har avancerade verktyg för grafik och användargränssnitt
- illustrera matematiska begrepp med interaktiva program

Matlab

- Matlab = “**M**atrix **l**aboratory”
- numeriska matrisberäkningar
- från kalkylator till programmeringsmiljö
- har “toolboxes” för olika teknikområden
- har avancerade verktyg för grafik och användargränssnitt
- illustrera matematiska begrepp med interaktiva program
- studenterna skriver sina egna program

Matlab

• ger skicklighet i programmering

Matlab

- ger skicklighet i programmering
- tvingar till förståelse av matematiken och algoritmerna

Matlab

- ger skicklighet i programmering
- tvingar till förståelse av matematiken och algoritmerna
- stark koppling till den matematiska teorin

Matlab

- ger skicklighet i programmering
- tvingar till förståelse av matematiken och algoritmerna
- stark koppling till den matematiska teorin
- fullt integrerad i kurserna: 4 timmar per vecka i datorstudio

Matlab

- ger skicklighet i programmering
- tvingar till förståelse av matematiken och algoritmerna
- stark koppling till den matematiska teorin
- fullt integrerad i kurserna: 4 timmar per vecka i datorstudio
- GNU Octave är ett icke-kommersiellt alternativ

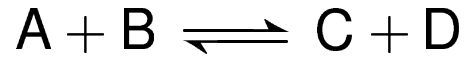
Matlab

- ger skicklighet i programmering
- tvingar till förståelse av matematiken och algoritmerna
- stark koppling till den matematiska teorin
- fullt integrerad i kurserna: 4 timmar per vecka i datorstudio
- GNU Octave är ett icke-kommersiellt alternativ
- Chalmers Matlablicens inkluderar studentlicens (förhoppningsvis)

Matlab

- ger skicklighet i programmering
- tvingar till förståelse av matematiken och algoritmerna
- stark koppling till den matematiska teorin
- fullt integrerad i kurserna: 4 timmar per vecka i datorstudio
- GNU Octave är ett icke-kommersiellt alternativ
- Chalmers Matlablicens inkluderar studentlicens (förhoppningsvis)
- vi använder **inte** symbolisk datorberäkning (Mathematica, Maple, ...)

Kemisk jämvikt



Jämviktsekvation:

$$\frac{[C][D]}{[A][B]} = K$$

Koncentrationer:

$$x_1 = [A], x_2 = [B], x_3 = [C], x_4 = [D]$$

Ekvationen blir:

$$f_1(x_1, x_2, x_3, x_4) := \frac{x_3 x_4}{x_1 x_2} - K = 0$$

Fler ekvationer behövs.

Arsenik på lekplatser

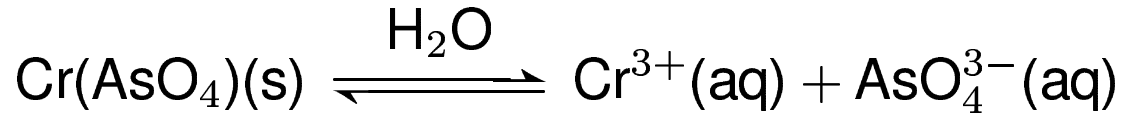
Det har diskuterats i Göteborgsposten om farhågor för höga halter av arsenik i stadens lekplatser. Den höga arsenikhalten kan bero på att man har använt tryckimpregnerat trä till lekredskap och sandlådor.

Tryckimpregnering av virke görs bland annat med lösningar av Na_3AsO_4 och dikromat varpå det antagligen bildas svårlösligt $\text{Cr}(\text{AsO}_4)$ inuti virket.

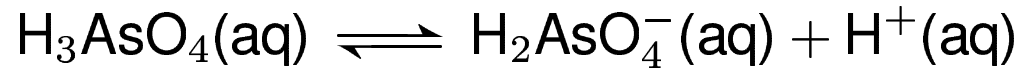
Uppgiften är att bestämma om halten av löst arsenik kommer att överskrida det tillåtna gränsvärdet som är 0.003 mg/m^3 .

Jämvikter

Reaktionen när $\text{Cr}(\text{AsO}_4)$ löses i vatten är



Arsenatjonens hydrolysis:



Teknologen ställer upp jämviktsekvationer, löser dem med Matlab, och drar slutsats om arsenikens farlighet.