

Matematisk Modelleringsuge 2025

UNF København

Faglige:

Rasmus Frigaard Lemvig	rle@unf.dk
Knut Ibæk Topp Lindenhoff	knut@unf.dk
Kasper Dornonville de la Cour	kddc@unf.dk
Valdemar Willendrup	vw@unf.dk
Marcus Presutti	mapr@unf.dk
Marike Øie Bischoff	moeb@unf.dk
Mette Thorup	mkth@unf.dk

Ungdommens Naturvidenskabelige Forening

Kompendium til UNF Matematisk Modelleringsuge 2025

ISBN 978-87-976300-0-6

Kompendiet er skrevet af Knut Ibæk Topp Lindenhoff, Rasmus Frigaard Lemvig, Kasper Dornonville de la Cour, Valdemar Willendrup, Marcus Presutti, Marike Øie Bischoff og Mette Thorup. Kompendiet er trykt i Juni 2025, og teksten er copyright © 2025 af UNF og forfatterne. Gengivelse med kildehenvisning tilladt.

Layout: Morten Raahauge Bastholm på forarbejde af Esben Skovhus Ditlefsen, Niels Jakob Søe Loft og Mick Althoff Kristensen.

Opsætning/TExnisk ansvarlig: Rasmus Frigaard Lemvig.

Indhold

1 Matematiske forudsætninger	1
1.1 Differentialregning	1
1.2 Integralregning	22
1.3 Sandsynlighedsteori	40
1.4 Lineær algebra	67
1.5 Funktioner i flere variable	103
1.6 Taylor-aproksimationer	119
1.7 Komplekse tal	126
2 Introduktion til Python programmering	135
2.1 Motivation	135
2.2 Setup	135
2.3 Basis Python	137
2.4 Visualisering	146
2.5 Matematiske funktioner og operationer	148
2.6 Linear algebra	150
2.7 Datafiler	154
2.8 Numeriske algoritmer	156
2.9 Differentialligninger	164
3 Differentialligninger og numeriske metoder	169
3.1 Introduktion - hvad er differentialligninger?	169
3.2 Separation af variable	172
3.3 Førsteordens lineære differentialligninger	176
3.4 Aandenordens homogene differentialligninger med konstante koefficenter	183
3.5 Introduktion til numeriske metoder	189
3.6 Numerisk løsning af ordinære differentialligninger	203
4 Reaktorlære og reaktionskinetik	211
4.1 Reaktionskinetik	211
4.2 Heterogen katalyse	216
4.3 Kemisk reaktionsteknik	222
4.4 Parallelle og serielle reaktioner	232
4.5 Dynamisk isoterm reaktor	234
4.6 Energibalancen for reaktoren med en reaktion	238
5 Differentialgeometri	245
5.1 Differentialgeometri	245
6 Produktintegralet, Markovkæder og pension	271
6.1 Produktintegralet	272
6.2 Markovkæder	279
6.3 Anwendelser i livsforsikring og pension	287
7 IR spektroskopi af molekylære klynger	301
7.1 Introduktion	301
7.2 Matrixisolering	302
7.3 Infrarød spektroskopi	303

INDHOLD

7.4 Kvantemekanik [11]	305
7.5 Beregningskemi	306
7.6 Sammenspil mellem teori og eksperiment	306
Bibliografi	309
Appendiks	311
A Grundlæggende algebra	311
B Ligninger og uligheder	321
C Trigonometriske funktioner	329
D Logaritmer, potensfunktioner og eksponentialfunktionen	336
Indeks	341
Om UNF	345
Sponsorer	346

Introduktion

Dette er kompendiet til Matematisk Modelleringsuge 2025. Kompendiet indeholder alt det essentielle materiale til de forskellige forløb på campen. Kapitel 1 omhandler de matematiske forudsætninger, som alle forløbene skal bruge. Kapitel 2 er en introduktion til programmering i Python, som er vores valgte programmeringssprog på campen. Kapitel 3 er en gennemgang af den mest basale teori om differentialligninger samt nogle numeriske metoder til differentiering, integration og løsning af differentialligninger. De resterende kapitler omhandler de specialiserede forløb, I kan vælge at arbejde med ianden halvdel af campen.

Vi ved, at jer deltagere kommer fra forskellige baggrunde og med et bredt spænd af faglige kompetencer. Vi har så vidt muligt forsøgt at tilpasse materialet til dette. De fleste afsnit i kapitel 1 og 3 har et stort udvalg af opgaver på forskellige niveauer. Derudover er der et appendiks, som dækker noget mere basal matematik, som vi ikke vil gennemgå i undervisningen, men som det kan være rart at slå op i.

Alle os faglige ønsker jer stor fornøjelse med campen!

Kapitel 1

Matematiske forudsætninger

I dette kapitel gennemgår vi de mest grundlæggende matematiske redskaber, vi skal bruge i løbet af ugen. Vi starter med differentialregning og springer derefter direkte videre til integralregning. Dette vil nok være velkendt for jer alle, men selv for dem med masser af træning indenfor infinitesimalregning, skal der nok være udfordrende opgaver, I kan arbejde med. Efter integralregning introducerer vi sandsynlighedsteori og derefter alle de centrale koncepter fra lineær algebra og funktioner i flere variable. Dette er essentielle værktøjer i de fleste grene af matematikken. Taylorapproksimationer skal vi også gennemgå. Dette er det vigtigste redskab i udviklingen af numeriske metoder til differentialligninger. Til slut har vi et kort afsnit om komplekse tal.

1.1 Differentialregning

Sekanten

Målet med denne sektion er at introducere den såkaldte *differentialkvotient*. Denne beskriver en funktions ændring i et bestemt punkt. For at kunne gøre dette skal vi dog først have nogle andre begreber på plads.

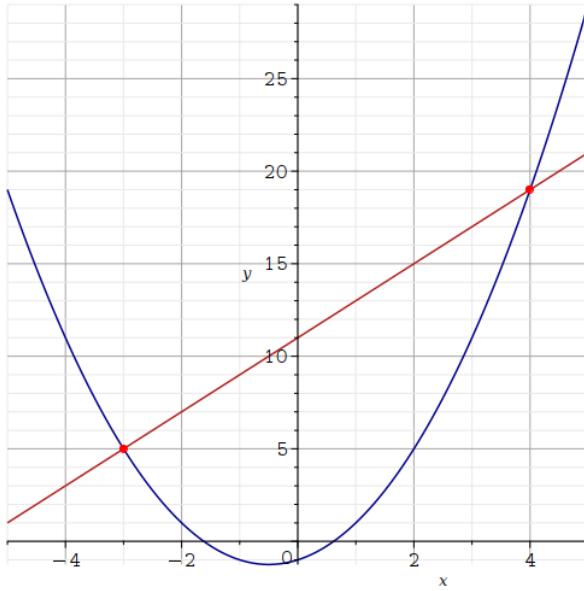
Definition 1.1.1. Lad en funktion f være defineret på et åbent interval (a, b) , og lad to punkter x_0 og x_1 ligge i (a, b) . *Sekanten* tilhørende f mellem x_0 og x_1 er den rette linje, der går gennem $f(x_0)$ og $f(x_1)$.

Bemærkning 1.1.2. Hældningen for sekanten er givet ved

$$\frac{f(x_1) - f(x_0)}{x_1 - x_0},$$

som er veldefineret, så længe $x_1 \neq x_0$ (ellers får vi division med nul).

Eksempel 1.1.3. Betragt funktionen $f(x) = x^2 + x - 1$ og de to punkter $x_0 = -3$ og $x_1 = 4$. Grafen herunder viser funktionen f (blå), punkterne $(x_0, f(x_0))$ og $(x_1, f(x_1))$ (rød) samt sekanten gennem x_0 og x_1 (mørkerød).



Figur 1.1: Illustration af en sekant (mørkerød) for et andengradspolynomium (blå).

Vi kan bestemme sekanten eksplisit som følger. Hældningen af sekanten er givet ved

$$\frac{f(x_1) - f(x_0)}{x_1 - x_0} = \frac{f(4) - f(-3)}{4 - (-3)} = \frac{19 - 5}{7} = 2,$$

og vi kan dermed bestemme skæringen med y -aksen b ved at bruge, at vi ved, at sekanten går gennem punktet $(4, f(4)) = (4, 19)$. Betegner vi sekanten med s , får vi ligningen

$$s(4) = 19 \Leftrightarrow 19 = 2 \cdot 4 + b \Leftrightarrow b = 19 - 8 = 11.$$

Dermed har sekanten gennem -3 og 4 forskriften $s(x) = 2x + 11$.

○

Differenskvotienten og differentialkvotienten

Lad os se endnu en gang på hældningen af sekanten mellem de to punkter x_0 og x_1 :

$$\frac{f(x_1) - f(x_0)}{x_1 - x_0}.$$

Denne størrelse kaldes også for *differenskvotienten*. Til tider skriver man ovenstående på en anden måde. Lad $\Delta x = x_1 - x_0$, hvor Δ er det græske bogstav (store) delta (Δ) betegner som regel en form for forskel/differens). Vi ser, at $x_1 = x_0 + \Delta x$, og dermed kan vi skrive differenskvotienten som

$$\frac{f(x_0 + \Delta x) - f(x_0)}{\Delta x}.$$

I differentialregning er vi interesseret i at beskrive udviklingen i en funktion i et enkelt punkt. Vi gør dette ved at betragte differenskvotienten og se, hvad den går imod, når Δx nærmer sig 0, svarende til at x_1 nærmer sig x_0 . Rent formelt ønsker vi at betragte grænseværdien

$$\lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{f(x_0 + \Delta x) - f(x_0)}{\Delta x},$$

såfremt denne eksisterer. Inden vi fortsætter diskussionen, vil vi studere nogle eksempler, der involverer grænseværdier.

Eksempel 1.1.4. Lad os betragte funktionen $g(x) = x + 3$. Vi ønsker at bestemme

$$\lim_{x \rightarrow 0} g(x).$$

Vi ser, at når x kommer arbitràrt tæt på 0, da vil $x + 3$ nærme sig 3. Dermed er

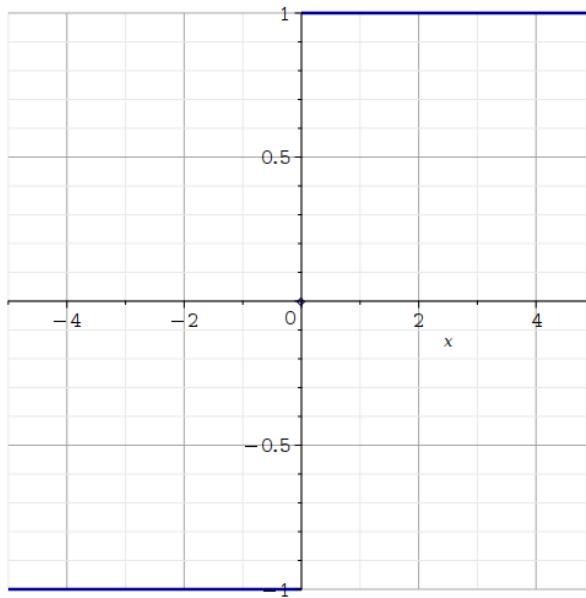
$$\lim_{x \rightarrow 0} g(x) = 3,$$

hvilket stemmer med funktionsværdien $g(0) = 3$. ○

Eksempel 1.1.5. Betragt gaffelfunktionen

$$g(x) = \begin{cases} -1, & \text{for } x < 0 \\ 0 & \text{for } x = 0 \\ 1 & \text{for } x > 0 \end{cases}$$

Funktionens graf er illustreret i figuren herunder:



Figur 1.2: Eksempel på en diskontinuert funktion.

I dette tilfælde vil grænseværdien

$$\lim_{x \rightarrow 0} g(x)$$

ikke findes. Årsagen er, at funktionen nærmer sig noget forskelligt afhængigt af, hvilken retning, man nærmer sig 0. Kommer man fra højre, bliver grænsen 1, og nærmer man sig fra venstre, bliver grænsen -1. Med matematisk notation kan man skrive dette som

$$\lim_{x \rightarrow 0^+} g(x) = 1 \quad \text{og} \quad \lim_{x \rightarrow 0^-} g(x) = -1$$

○

Eksempel 1.1.6. Betragt funktionen

$$h(x) = \begin{cases} 1 & \text{for } x \neq 0 \\ 0 & \text{for } x = 0 \end{cases}.$$

I dette tilfælde har vi

$$\lim_{x \rightarrow 0} h(x) = 1,$$

KAPITEL 1. MATEMATISKE FORUDSÆTNINGER

fordi funktionen nærmer sig 1 uanset hvilken retning, x nærmer sig 0. Bemærk dog, at $h(0) = 0 \neq 1$. Dermed er en grænseværdi for en funktion ikke altid det samme som at tage funktionsværdien i punktet, selv hvis funktionen er defineret der.

○

Med en bedre forståelse for grænseværdier kan vi nu vende tilbage til differenskvotienten og lave følgende definition.

Definition 1.1.7. Lad f være en funktion defineret på et åbent interval (a, b) , og lad x_0 ligge i (a, b) . Såfremt grænseværdien

$$\lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{f(x_0 + \Delta x) - f(x_0)}{\Delta x}$$

eksisterer, kaldes denne for *differentialkvotienten* i x_0 og betegnes $f'(x_0)$. $f'(x_0)$ udtales " f mærke af x_0 " og kaldes også for den *aflæste* af f i x_0 . Hvis differentialkvotienten eksisterer i x_0 , siger vi, at f er differentiabel i x_0 .

Eksempel 1.1.8. Lad $f(x) = a$ være en konstant funktion og x_0 et vilkårligt reelt tal. Her er differenskvotienten lig

$$\frac{f(x_0 + \Delta x) - f(x_0)}{\Delta x} = \frac{a - a}{\Delta x} = 0.$$

Heraf er det klart, at

$$f'(x_0) = \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{f(x_0 + \Delta x) - f(x_0)}{\Delta x} = 0.$$

Altså er den aflæste funktion af en konstant lig 0. Dette stemmer fint overens med vores intuition, da en konstant funktion ikke har nogen ændring i nogle punkter.

○

Eksempel 1.1.9. Betragt $f(x) = x^2$, og lad x_0 være et vilkårligt reelt tal. Vi ønsker at bestemme $f'(x_0)$. Vi opskriver først differenskvotienten

$$\frac{f(x_0 + \Delta x) - f(x_0)}{\Delta x} = \frac{(x_0 + \Delta x)^2 - x_0^2}{\Delta x}.$$

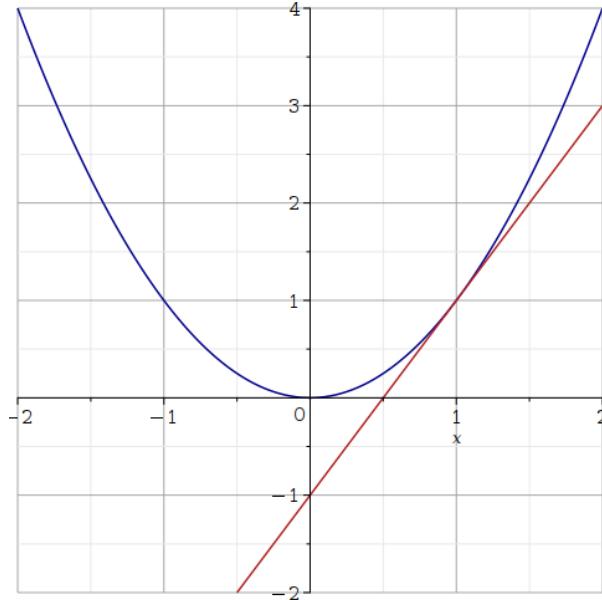
Vi kan nu benytte kvadratsætningerne og få, at ovenstående er lig

$$\frac{x_0^2 + (\Delta x)^2 + 2x_0\Delta x - x_0^2}{\Delta x} = \frac{(\Delta x)^2 + 2x_0\Delta x}{\Delta x} = \Delta x + 2x_0.$$

Til slut skal vi betragte grænseværdien for $\Delta x \rightarrow 0$. Ovenstående udtryk ses klart at gå mod $2x_0$ i denne grænseovergang, og dermed har vi

$$f'(x_0) = \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{f(x_0 + \Delta x) - f(x_0)}{\Delta x} = 2x_0.$$

Herunder ses funktionen f illustreret (blå) med tangenten gennem 1 tegnet ind (rød):



Figur 1.3: Funktionen $f(x) = x^2$ (blå) med tangentlinjen gennem $(1, f(1))$ tegnet ind (rød).

Det ses, at linjen, som tangerer gennem $(1, f(1))$, har hældning 2, hvilket stemmer overens med, at $f'(1) = 2$. Dette er netop den geometriske tolkning af differentialkvotienten. Den angiver hældningen af grafen i et punkt. \circ

Centrale eksempler på afledte funktioner

I dette afsnit ser vi på nogle centrale funktioner og deres afledte.

Polynomier

Et polynomium er en funktion på formen

$$f(x) = a_n x^n + a_{n-1} x^{n-1} + \cdots + a_1 x + a_0,$$

hvor hvert a_i er en konstant. Ønsker vi at differentiere sådan en funktion, kan vi nøjes med at differentiere hvert led og lægge disse afledte sammen jævnfør sætning 1.1.14, som vi gennemgår om ikke så længe. Fra opgave 1.3 har vi, at konstanter ganget på en funktion blot beholdes. Altså behøver vi kun at studere en funktion af formen x^n , hvor n er et positivt heltal. Vi har følgende resultat.

Sætning 1.1.10. *Funktionen $f(x) = x^n$ for et heltal $n \geq 1$ har den afledte $f'(x) = nx^{n-1}$.*

Bevis. Beviset bygger på observationen, at $(x_0 + \Delta x)^n$ er lig $x_0^n + nx_0^{n-1}\Delta x +$ (led, der alle har $(\Delta x)^2$ ganget på sig). Dette følger af binomialformlen, Sætning A.22, som findes i appendikset. Dermed er $(x_0 + \Delta x)^n - x_0^n = nx_0^{n-1}\Delta x +$ (led, der alle har $(\Delta x)^2$ ganget på sig). Når vi opstiller differenskvotienten, deler vi med Δx , og dermed bliver differenskvotienten på formen $nx_0^{n-1} +$ (led, der alle har Δx ganget på sig). Idet vi lader Δx gå mod 0, har vi kun nx_0^{n-1} tilbage som ønsket. \blacksquare

Eksempel 1.1.11. Lad $f(x) = 5x^4 - 3x^2 + 8x + 10$. Første led har den afledte $5 \cdot 4x^{4-1} = 20x^3$. Andet led har den afledte $3 \cdot 2x^{2-1} = 6x$, mens tredje led har den afledte 8, og sidste led er en konstant, som dermed har den afledte 0. Alt i alt fås

$$f'(x) = 20x^3 - 6x + 8.$$

\circ

Trigonometriske funktioner

I dette afsnit ser vi på de trigonometriske funktioner \cos og \sin . Vi genkalder os additionsformlerne, der er præsenteret i appendikset som Sætning ??.

$$\begin{aligned}\cos(x+y) &= \cos(x)\cos(y) - \sin(x)\sin(y), \\ \sin(x+y) &= \cos(x)\sin(y) + \sin(x)\cos(y).\end{aligned}$$

Sætning 1.1.12. Funktionerne \cos og \sin er begge differentiable i alle punkter $x \in \mathbb{R}$ med

$$\cos'(x) = -\sin(x) \quad \text{og} \quad \sin'(x) = \cos(x).$$

Bevis. Vi opstiller differenskvotienten for \cos og benytter additionsformlerne:

$$\begin{aligned}\frac{\cos(x_0 + \Delta x) - \cos(x_0)}{\Delta x} &= \frac{\cos(x_0)\cos(\Delta x) - \sin(x_0)\sin(\Delta x) - \cos(x_0)}{\Delta x} \\ &= \cos(x_0)\frac{\cos(\Delta x) - 1}{\Delta x} - \sin(x_0)\frac{\sin(\Delta x)}{\Delta x}.\end{aligned}$$

Vi skal nu benytte to resultater, nemlig

$$\lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{\cos(\Delta x) - 1}{\Delta x} = 0 \quad \text{og} \quad \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{\sin(\Delta x)}{\Delta x} = 1.$$

Tages grænseværdien $\Delta x \rightarrow 0$ af differenskvotienten, fås altså grænseværdien $-\sin(x_0)$. Dermed har vi

$$\cos'(x_0) = -\sin(x_0),$$

hvilket beviser den første påstand. Nu undersøges differentialkvotienten af \sin . Vi opstiller differenskvotienten og benytter additionsformlerne:

$$\begin{aligned}\frac{\sin(x_0 + \Delta x) - \sin(x_0)}{\Delta x} &= \frac{\cos(x_0)\sin(\Delta x) + \sin(x_0)\cos(\Delta x) - \sin(x_0)}{\Delta x} \\ &= \cos(x_0)\frac{\sin(\Delta x)}{\Delta x} + \sin(x_0)\frac{\cos(\Delta x) - 1}{\Delta x}.\end{aligned}$$

Benyttes de samme grænsesresultater som ovenover, fås $\sin'(x_0) = \cos(x_0)$. ■

De to grænsesresultater i ovenstående bevis er ikke-trivielle. At vise dem kræver en række uligheder, der introduceres i appendikset, og beviset for de to grænsesresultater kan findes i det supplerende materiale til denne sektion. Vi er nu klar til at tackle mere komplekse differentiations-problemer.

Eksponentialfunktionen og den naturlige logaritme

Vi skal nu se på eksponentialfunktionen e^x og den naturlige logaritme $\ln(x)$. Følgende resultat (hvor vi udelader beviset) giver differentialkvotienten til disse to funktioner.

Sætning 1.1.13. Vi har

$$(e^x)' = e^x, \quad x \in \mathbb{R}, \quad \text{og} \quad \ln'(x) = \frac{1}{x}, \quad x > 0.$$

Bevis. Vi starter med at vise $(e^x)' = e^x$. Vi ser først og fremmest, at

$$\frac{e^{x+\Delta x} - e^x}{\Delta x} = \frac{e^x e^{\Delta x} - e^x}{\Delta x} = e^x \frac{e^{\Delta x} - 1}{\Delta x}.$$

Vi bruger nu grænseværdiresultatet (se det supplerende materiale)

$$\lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{e^{\Delta x} - 1}{\Delta x} = 1$$

til at konkludere, at

$$(e^x)' = \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{e^{x+\Delta x} - e^x}{\Delta x} = e^x \cdot 1 = e^x$$

som ønsket. Man kan nu benytte, at e^x og $\ln(x)$ er hinandens inverser til at give et nemt bevis for $\ln'(x) = 1/x$. Dette kræver dog kædereglen, som vi endnu ikke har diskuteret, så vi venter med at vise dette. ■

Bemærk, at $(e^x)' = e^x$ fortæller os, at ændringen af eksponentialfunktionen i et vilkårligt punkt er lig funktionsværdien i det punkt. Det er en særdeles interessant egen-skab.

Regneregler for afledte funktioner

Vi har nu set nogle eksempler på, hvordan man beregner differentialkvotienter direkte ud fra definitionen. Dog er dette kun en plausibel strategi for meget simple eksempler. For mere komplicerede funktioner er det helt essentielt at have en række regneregler på plads. Dem gennemgår vi i dette afsnit.

Sætning 1.1.14. *Lad f og g være funktioner, der begge er differentiable i x_0 . Da gælder*

$$(f + g)'(x_0) = f'(x_0) + g'(x_0).$$

Bevis. Husk, at funktionen $f + g$ er defineret ved $(f + g)(x) = f(x) + g(x)$. Vi opstiller differenskvotienten

$$\begin{aligned} \frac{(f + g)(x_0 + \Delta x) - (f + g)(x_0)}{\Delta x} &= \frac{f(x_0 + \Delta x) + g(x_0 + \Delta x) - (f(x_0) + g(x_0))}{\Delta x} \\ &= \frac{f(x_0 + \Delta x) - f(x_0)}{\Delta x} + \frac{g(x_0 + \Delta x) - g(x_0)}{\Delta x}, \end{aligned}$$

og ved at tage grænseværdien $\Delta x \rightarrow 0$ på begge sider af lighedstegnet får vi

$$(f + g)'(x_0) = f'(x_0) + g'(x_0)$$

som ønsket. ■

Bemærkning 1.1.15. Med et fuldstændigt analogt bevis kan man vise, at $(f - g)'(x_0) = f'(x_0) - g'(x_0)$.

Eksempel 1.1.16. Lad $f(x) = x^2 + 5$. Vi ved, at differentialkvotienten af 5 er 0. Vi ved også fra tidligere, at x^2 har differentialkvotienten $2x$. Dermed fås per ovenstående sætning, at $f'(x) = 2x + 0 = 2x$. ○

Selvom den afledte af en sum af funktioner blot er summen af de afledte funktioner hver især, er situationen lidt mere kompliceret for produktet af to funktioner, som nedenstående sætning viser. Det viser sig, at differentialkvotienten af et produkt er lig den første funktion afledt gange den anden bibeholdt plus den første funktion bibeholdt gange den anden funktion afledt.

Sætning 1.1.17 (Produktreglen). *Lad f og g være funktioner, der begge er differentiable i et punkt x_0 . Da gælder*

$$(fg)'(x_0) = f'(x_0)g(x_0) + f(x_0)g'(x_0).$$

Bevis. Husk, at funktionen fg er defineret ved $(fg)(x) = f(x)g(x)$. Vi opskriver differenskvotienten

$$\frac{(fg)(x_0 + \Delta x) - (fg)(x_0)}{\Delta x} = \frac{f(x_0 + \Delta x)g(x_0 + \Delta x) - f(x_0)g(x_0)}{\Delta x}.$$

Det er ikke umiddelbart klart, hvordan vi skal komme videre herfra. Det kræver også et trick at regne videre på ovenstående udtryk, nemlig at vi skal lægge 0 til på en smart

KAPITEL 1. MATEMATISKE FORUDSÆTNINGER

måde i tælleren. Vi får idéen at lægge $f(x_0)g(x_0 + \Delta x) - f(x_0)g(x_0 + \Delta x)$ til i tælleren. Da bliver ovenstående lig

$$\begin{aligned} & \frac{f(x_0 + \Delta x)g(x_0 + \Delta x) + f(x_0)g(x_0 + \Delta x) - f(x_0)g(x_0 + \Delta x) - f(x_0)g(x_0)}{\Delta x} = \\ & \frac{(f(x_0 + \Delta x) - f(x_0))g(x_0 + \Delta x) + f(x_0)(g(x_0 + \Delta x) - g(x_0))}{\Delta x} \\ & \frac{f(x_0 + \Delta x) - f(x_0)}{\Delta x} g(x_0 + \Delta x) + f(x_0) \frac{g(x_0 + \Delta x) - g(x_0)}{\Delta x}. \end{aligned}$$

Vi bemærker nu, at vi har omskrevet udtrykket til at involvere differenskvotienterne af f og g i x_0 samt $g(x_0 + \Delta x)$ og $f(x_0)$. Idet g er differentiel i x_0 , er g også kontinuert (tænk: man kan tegne g uden at løfte blyanten/kridtet), hvilket medfører

$$\lim_{\Delta x \rightarrow 0} g(x_0 + \Delta x) = g(x_0).$$

Tager vi grænsen $\Delta x \rightarrow 0$ på begge sider, fås altså

$$f'(x_0)g(x_0) + f(x_0)g'(x_0),$$

hvilket var det, der skulle vises. ■

Sætning 1.1.18 (Kvotientreglen). *Lad f og g være funktioner, der begge er differentiable i punktet x_0 . Antag, at $g(x_0) \neq 0$. Da gælder*

$$\left(\frac{f}{g}\right)'(x_0) = \frac{f'(x_0)g(x_0) - f(x_0)g'(x_0)}{g(x_0)^2}.$$

Beweis. Husk, at $(f/g)(x) = f(x)/g(x)$. Vi opstiller differenskvotienten

$$\frac{(f/g)(x_0 + \Delta x) - (f/g)(x_0)}{\Delta x} = \frac{\frac{f(x_0 + \Delta x)}{g(x_0 + \Delta x)} - \frac{f(x_0)}{g(x_0)}}{\Delta x} = \frac{f(x_0 + \Delta x)g(x_0) - f(x_0)g(x_0 + \Delta x)}{\Delta x g(x_0)g(x_0 + \Delta x)}.$$

Tricket herfra minder om det fra tidligere. Vi lægger nul til i tælleren på en smart måde, nemlig ved at lægge $f(x_0 + \Delta x)g(x_0 + \Delta x) - f(x_0 + \Delta x)g(x_0 + \Delta x)$ til i tælleren. Da bliver differenskvotienten lig

$$\begin{aligned} & \frac{f(x_0 + \Delta x)g(x_0) + f(x_0 + \Delta x)g(x_0 + \Delta x) - f(x_0 + \Delta x)g(x_0 + \Delta x) - f(x_0)g(x_0 + \Delta x)}{\Delta x g(x_0)g(x_0 + \Delta x)} = \\ & \frac{(f(x_0 + \Delta x) - f(x_0))g(x_0 + \Delta x) - f(x_0 + \Delta x)(g(x_0 + \Delta x) - g(x_0))}{\Delta x g(x_0)g(x_0 + \Delta x)} = \\ & \left(\frac{f(x_0 + \Delta x) - f(x_0)}{\Delta x} g(x_0 + \Delta x) - f(x_0 + \Delta x) \frac{g(x_0 + \Delta x) - g(x_0)}{\Delta x} \right) \frac{1}{g(x_0)g(x_0 + \Delta x)}. \end{aligned}$$

Bruges kontinuiteten af f og g i x_0 , får vi

$$\lim_{\Delta x \rightarrow 0} f(x_0 + \Delta x) = f(x_0) \quad \text{og} \quad \lim_{\Delta x \rightarrow 0} g(x_0 + \Delta x) = g(x_0).$$

Tager vi grænseværdien $\Delta x \rightarrow 0$ af ovenstående udtryk, får vi altså

$$(f'(x_0)g(x_0) - f(x_0)g'(x_0)) \frac{1}{g(x_0)^2} = \frac{f'(x_0)g(x_0) - f(x_0)g'(x_0)}{g(x_0)^2}.$$

Dette konkluderer beviset. ■

Eksempler på brug af de seneste to regneregler får vi adskillige af i næste afsnit. Vi har nu formuleret og bevist regneregler, som involverer alle basale regneoperationer. Den eneste fundamentale regneregel, vi mangler, er den såkaldte *kæderegel*.

Sætning 1.1.19 (Kædereglen). *Lad f være en funktion, der er differentiabel i punktet x_0 , og antag, at g er en funktion, som er differentiabel i punktet $f(x_0)$. Da er sammenstillingen $g \circ f$ differentiabel i x_0 med differentialkvotient*

$$(g \circ f)'(x_0) = g'(f(x_0))f'(x_0).$$

Bemærkning 1.1.20. Sætningen skal forstås på følgende måde: For at differentiere den sammensatte funktion $(g \circ f)(x) = g(f(x))$ i et punkt x_0 skal man bestemme $g'(x)$ og indsætte $f(x_0)$ på x 's plads. Dernæst ganger man $f'(x_0)$ på.

Bevis. Vi opskriver differenskvotienten

$$\frac{(g \circ f)(x_0 + \Delta x) - (g \circ f)(x_0)}{\Delta x} = \frac{g(f(x_0 + \Delta x)) - g(f(x_0))}{\Delta x},$$

og vi får ideen at gange med 1 på en smart måde. Vi gør dette ved at gange og dividere med $f(x_0 + \Delta x) - f(x_0)$ i ovenstående. Da bliver differenskvotienten lig

$$\frac{(g \circ f)(x_0 + \Delta x) - (g \circ f)(x_0)}{\Delta x} = \frac{g(f(x_0 + \Delta x)) - g(f(x_0))}{f(x_0 + \Delta x) - f(x_0)} \frac{f(x_0 + \Delta x) - f(x_0)}{\Delta x}.$$

Skriv nu $\Delta f = f(x_0 + \Delta x) - f(x_0)$. Da er differenskvotienten lig

$$\frac{g(f(x_0 + \Delta x)) - g(f(x_0))}{\Delta f} \frac{f(x_0 + \Delta x) - f(x_0)}{\Delta x}.$$

Kontinuiteten af f i x_0 giver, at

$$\lim_{\Delta x \rightarrow 0} \Delta f = \lim_{\Delta x \rightarrow 0} f(x_0 + \Delta x) - \lim_{\Delta x \rightarrow 0} f(x_0) = f(x_0) - f(x_0) = 0.$$

Ved at bruge, at g er differentiabel i $f(x_0)$, får vi

$$\lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{g(f(x_0 + \Delta x)) - g(f(x_0))}{\Delta f} = \lim_{\Delta f \rightarrow 0} \frac{g(f(x_0 + \Delta x)) - g(f(x_0))}{\Delta f} = g'(f(x_0)).$$

Altså fås $g'(f(x_0))f'(x_0)$ ved at tage grænseværdien $\Delta x \rightarrow 0$ af differenskvotienten, og dermed er beviset fuldført. \blacksquare

Eksempel 1.1.21. Lad $f(x) = \ln(x^2 + 1)$. Ved at bruge kædereglen fås

$$f'(x) = \frac{1}{x^2 + 1} \cdot 2x = \frac{2x}{x^2 + 1}.$$

○

Eksempel 1.1.22. Lad $g(x) = x^2$ og $f(x) = x + 2$. Vi ønsker at bestemme differentialkvotienten af $g(f(x)) = (x+2)^2$. Vi har $g'(x) = 2x$ og $f'(x) = 1$ (se opgaverne). Dermed er

$$(g \circ f)'(x) = g'(f(x))f'(x) = 2f(x) \cdot 1 = 2x + 4.$$

Dette kan også vises ved direkte udregning. Vi har $g(f(x)) = x^2 + 4 + 4x$. Differentieres ledvist, fås præcist samme svar som ovenover. ○

Eksempel 1.1.23. Betragt funktionen $f(x) = x^3 \cos(x)$. Vi ønsker at bestemme $f'(x)$. Vi bemærker til en start, at $f(x)$ er produktet af $g(x) = x^3$ og $\cos(x)$. Vi ved, at $g'(x) = 3x^2$ og $\cos'(x) = -\sin(x)$. Med produktreglen fås altså

$$f'(x) = g'(x)\cos(x) + g(x)\cos'(x) = 3x^2 \cos(x) - x^3 \sin(x).$$

○

Eksempel 1.1.24. Betragt funktionen $f(x) = \sin(4x^2)$. Vi ønsker at bestemme $f'(x)$. Vi bemærker, at $f(x) = h(g(x))$ hvor $g(x) = 4x^2$ og $h(x) = \sin(x)$. Vi ved, at $h'(x) = \cos(x)$ og $g'(x) = 8x$. Dermed giver kæderegralen, at

$$f'(x) = h'(g(x))g'(x) = 8x \cos(4x^2).$$

○

Vi blev kun halvt færdige med beviset for Sætning 1.1.13, idet vi endnu ikke har bevist, at $\ln'(x) = 1/x$. Dette færdiggør vi nu.

Bevis for den afledte af den naturlige logaritme. Vi har $\exp(\ln(x)) = x$. Vi ved, at $\exp'(x) = \exp(x)$, så ved at benytte kæderegralen, har vi

$$(\exp(\ln(x)))' = \exp(\ln(x)) \cdot \ln'(x) = x \ln'(x).$$

Men idet $\exp(\ln(x)) = x$, må vi også have $(\exp(\ln(x)))' = x' = 1$, og dermed har vi

$$1 = x \ln'(x) \Leftrightarrow \ln'(x) = \frac{1}{x}$$

som ønsket. ■

L'Hospitals regel

I dette korte afsnit skal vi introducere en regel, som er særdeles nyttig til at bestemme grænseværdier, nemlig L'Hospitals regel. Hvis man betragter grænseværdier af formen

$$\lim_{x \rightarrow a} \frac{f(x)}{g(x)},$$

og vi har $\lim_{x \rightarrow a} f(x) = b$ og $\lim_{x \rightarrow a} g(x) = c$, hvor c hverken er nul, uendelig eller minus uendelig, da ved vi, at

$$\lim_{x \rightarrow a} \frac{f(x)}{g(x)} = \frac{b}{c}.$$

L'Hospitals regel giver en metode til at finde grænseværdier af brøker, hvor $f(x)$ og $g(x)$ begge går mod nul, uendelig eller minus uendelig.

Sætning 1.1.25 (L'Hospitals regel). *Lad i det følgende $a \in \mathbb{R}$ eller $a = \pm\infty$.*

1. *Antag $\lim_{x \rightarrow a} f(x) = \lim_{x \rightarrow a} g(x) = 0$ med $g(x) \neq 0$ for alle x tilstrækkeligt tæt på a . Antag, at*

$$\lim_{x \rightarrow a} \frac{f'(x)}{g'(x)}$$

eksisterer (hvor værdierne $\pm\infty$ også er tilladte). Da findes

$$\lim_{x \rightarrow a} \frac{f(x)}{g(x)}$$

også, og

$$\lim_{x \rightarrow a} \frac{f(x)}{g(x)} = \lim_{x \rightarrow a} \frac{f'(x)}{g'(x)}$$

2. *Den samme regel gælder for tilfældene $\lim_{x \rightarrow a} f(x) = \lim_{x \rightarrow a} g(x) = \pm\infty$.*

Bemærkning 1.1.26. Selvom L'Hospitals regel er defineret for tosidede grænseværdier, så er sætningen også gyldig for $x \rightarrow a^+$ og $x \rightarrow a^-$, så længe disse giver mening naturligvis.

Vi giver ikke et fuldt bevis for resultatet, men vi giver et for et specialtilfælde til slut. L'Hospitals sætning siger ganske enkelt, at hvis en grænseværdi tager formen af et 0/0-udtryk eller et ∞/∞ -udtryk, da må vi differentiere tæller og nævner og regne den tilhørende grænse for at få vores svar.

Eksempel 1.1.27. Vi ønsker at bestemme

$$\lim_{x \rightarrow 0} \frac{1 - \cos(x)}{x^2}.$$

Idet $\cos(x)$ går mod 1, når x går mod 0, har vi her et 0/0-udtryk. Altså giver L'Hospitals regel,

$$\lim_{x \rightarrow 0} \frac{1 - \cos(x)}{x^2} = \lim_{x \rightarrow 0} \frac{\sin(x)}{2x}.$$

Dette er igen et 0/0-udtryk! Dermed kan vi bruge L'Hospital en gang mere og få

$$\lim_{x \rightarrow 0} \frac{\sin(x)}{2x} = \lim_{x \rightarrow 0} \frac{\cos(x)}{2} = \frac{1}{2},$$

og vi kan dermed konkludere, at

$$\lim_{x \rightarrow 0} \frac{1 - \cos(x)}{x^2} = \frac{1}{2}.$$

○

Eksempel 1.1.28. Lad os bestemme

$$\lim_{x \rightarrow \infty} \frac{e^x}{x^4}.$$

Både tæller og nævner går mod uendelig, så vi har et ∞/∞ -udtryk. Dermed giver L'Hospital

$$\lim_{x \rightarrow \infty} \frac{e^x}{x^4} = \lim_{x \rightarrow \infty} \frac{e^x}{4x^3},$$

som igen er et ∞/∞ -udtryk. Dog ser vi, at vi efter kan bruge L'Hospital, og gør man det yderligere to gange, får vi

$$\lim_{x \rightarrow \infty} \frac{e^x}{4x^3} = \lim_{x \rightarrow \infty} \frac{e^x}{12x^2} = \lim_{x \rightarrow \infty} \frac{e^x}{24x} = \lim_{x \rightarrow \infty} \frac{e^x}{24} = \infty.$$

Ergo kan vi konkludere, at svaret på vores oprindelige spørgsmål er

$$\lim_{x \rightarrow \infty} \frac{e^x}{x^4} = \infty.$$

Med præcist samme argument kan vi argumentere for, at

$$\lim_{x \rightarrow \infty} \frac{e^x}{x^n} = \infty$$

for alle $n > 0$. Med andre ord, eksponentialfunktionen går hurtigere mod uendelig end enhver potensfunktion. ○

Eksempel 1.1.29. Nogle gange kan L'Hospitals regel komme i spil på snedig vis. Beträgt

$$\lim_{x \rightarrow \infty} \left(1 + \frac{1}{x}\right)^x.$$

Lad os starte med at tage logaritmen af udtrykket og betragte grænseværdien

$$\lim_{x \rightarrow \infty} \log\left(\left(1 + \frac{1}{x}\right)^x\right) = \lim_{x \rightarrow \infty} x \log\left(1 + \frac{1}{x}\right).$$

Vi får nu den snedige idé at lave omskrivningen

$$\lim_{x \rightarrow \infty} x \log\left(1 + \frac{1}{x}\right) = \lim_{x \rightarrow \infty} \frac{\log(1 + 1/x)}{1/x},$$

KAPITEL 1. MATEMATISKE FORUDSÆTNINGER

som er et 0/0-udtryk! L'Hospital giver

$$\lim_{x \rightarrow \infty} \frac{\log(1 + 1/x)}{1/x} = \lim_{x \rightarrow \infty} \frac{\frac{-1/x^2}{1+1/x}}{-1/x^2} = \lim_{x \rightarrow \infty} \frac{1}{1+1/x} = 1.$$

Ved at tage eksponentialfunktionen, kan vi altså konkludere, at

$$\lim_{x \rightarrow \infty} \left(1 + \frac{1}{x}\right)^x = e.$$

Det er faktisk ud fra denne betragtning, at Eulers tal er opstået. Udtrykket

$$\left(1 + \frac{1}{x}\right)^x$$

er værdien af en bankkonto med startkapital 1, hvor der er sket x rentetilskrivninger af størrelse $1/x$. For $x = 2$ kan man fortolke det som en rentetilskrivning på 50% to gange på et år, for $x = 3$ som tre rentetilskrivninger på et år, hver med ca. 33% tilskrivning. Vi har altså vist, at hvis du får rente uendeligt ofte, men hvor renten er givet som én over antal rentetilskrivninger, da vil du med en startkapital på én krone ende med godt og vel 2,718 kr. i slutningen af året. Med præcist samme fremgangsmåde kan man vise

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \left(1 + \frac{x}{n}\right)^n = e^x.$$

○

Lad os slutte af med at give et bevis for L'Hospital i et simpelt specialtilfælde, nemlig hvor f og g er kontinuert differentiable i a med $f(a) = g(a) = 0$ og $g'(a) \neq 0$. Da har vi

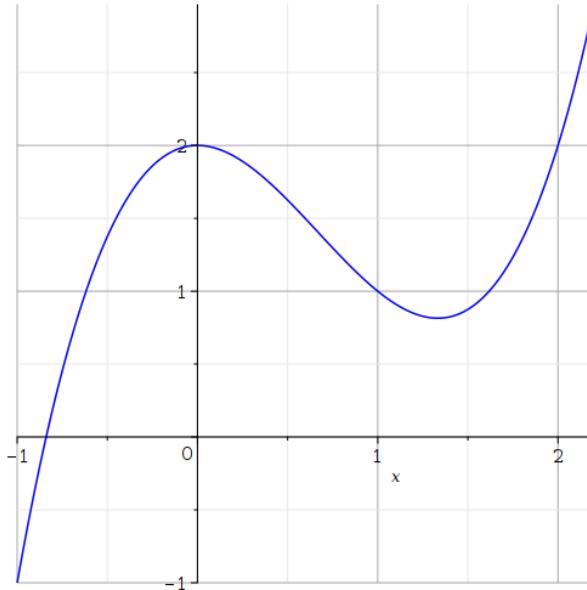
$$\begin{aligned} \lim_{x \rightarrow a} \frac{f(x)}{g(x)} &= \lim_{x \rightarrow a} \frac{f(x) - 0}{g(x) - 0} = \lim_{x \rightarrow a} \frac{f(x) - f(a)}{g(x) - g(a)} \\ &= \lim_{x \rightarrow a} \frac{\frac{f(x) - f(a)}{x - a}}{\frac{g(x) - g(a)}{x - a}} = \frac{\lim_{x \rightarrow a} \frac{f(x) - f(a)}{x - a}}{\lim_{x \rightarrow a} \frac{g(x) - g(a)}{x - a}} \\ &= \frac{f'(a)}{g'(a)} = \lim_{x \rightarrow a} \frac{f'(x)}{g'(x)}. \end{aligned}$$

Nogle simple anvendelser

Differentialregning har utallige anvendelser. Vi skal her se på nogle forholdsvis simple anvendelser.

Optimering: At finde maksima og minima

Et eksempel på et optimeringsproblem kunne være, at man ønsker at lave en beholder i en bestemt form, og man ønsker at maksimere volumen ud fra et givet areal. Generelt i et optimeringsproblem er der en funktion, som man enten skal finde et minimum eller et maksimum af. For at se, hvordan differentialregning indgår i at finde maksima eller minima, betragter vi grafen for funktionen $f(x) = x^3 - 2x^2 + 2$ som eksempel:



På figuren ser det ud til, at funktionen har to ekstremumspunkter (et generelt begreb for minima og maksima), nemlig et maksimum og et minimum. Hvilke x -værdier har disse punkter? Lad os genkalde, hvad differentialkvotienten fortæller. Differentialkvotienten angiver hældningen i et punkt. I et maksimum eller et minimum vil hældningen være nul, thi hvis den var forskellig fra nul, ville der være et punkt umiddelbart ved siden af, hvor funktionen antog en højere eller lavere værdi. Vi konkluderer, at en x -værdi til et ekstremumspunkt opfylder

$$f'(x) = 0.$$

Lad os finde ekstrema for funktionen f . Vi differentierer og får

$$f'(x) = 3x^2 - 4x.$$

Vi skal dermed løse ligningen $3x^2 - 4x = 0$ for x . Det ses let, at $x = 0$ er en løsning. For at finde en anden løsning antager vi, at $x \neq 0$. Da kan vi dele med x på begge sider af lighedsteget og få $3x - 4 = 0$, som har løsningen $x = 4/3$. Altså har f ekstrema i $x = 0$ og $x = 4/3$. På grafen er det tydeligt, at $x = 0$ er et (lokalt) maksimum, mens $x = 4/3$ er et (lokalt) minimum. Men hvad nu hvis vi ikke havde grafen til rådighed?

Heldigvis kan vi nemt tjekke, om et ekstremum er et minimum eller et maksimum ved blot at se på den andenaflædte $f''(x)$. Den andenaflædte angiver hældningen af hældningen eller med andre ord, hvordan ændringen i f udvikler sig. Antag, at x er et minimum. Da vil hældningen gå fra negativ (du går ned ad bakkens) til positiv (efter minimummet går du op igen), og dermed er $f''(x)$ positiv. Omvendt, hvis x er et maksimum, går du opad mod x og nedad efter x . Altså er $f''(x)$ negativ. For vores konkrete funktion f har vi $f''(x) = 6x - 4$. Dermed er $f''(0) = -4 < 0$, og $f''(4/3) = 24/3 - 4 = 2 > 0$. Vores diskussion fortæller os, at 0 burde være et maksimum, mens $4/3$ bør være et minimum. Dette er heldigvis også tilfældet.

Lad os opsummere metoden til at finde ekstrema: Givet en to gange differentiabel funktion f (dvs. f og f' er differentiable) findes ekstrema ved at løse ligningen $f'(x) = 0$. Hvis $f''(x) < 0$, er punktet et maksimum, mens $f''(x) > 0$ giver, at punktet er et minimum.

Eksempel 1.1.30. Antag, at vi har 20 m^2 stål til rådighed, og at vi ønsker at lave en kasse-formet container med så stort volumen som muligt. Højden og bredden skal være ens. Lad x betegne højden/bredelsen og y længden af kassen. Da er arealet af kassen lig

KAPITEL 1. MATEMATISKE FORUDSÆTNINGER

$A(x,y) = 2x^2 + 4xy$, mens volumen er $V(x,y) = x^2y$. Vi ved, at $A(x,y) = 20$. Vi har da ligningen $20 = 2x^2 + 4xy$, som omskrives til $10 = x^2 + 2xy$. Vi vælger at isolere længden y . Vi får da

$$10 = x^2 + 2xy \Leftrightarrow 10 - x^2 = 2xy \Leftrightarrow y = \frac{10 - x^2}{2x}.$$

Vi kan indsætte dette udtryk for y i funktionen for volumen, og dermed kan volumen skrives som en funktion af x alene, nemlig

$$V(x) = x^2 \frac{10 - x^2}{2x} = \frac{1}{2}x(10 - x^2) = 5x - \frac{1}{2}x^3.$$

Vi differentierer denne funktion og får

$$V'(x) = 5 - \frac{3}{2}x^2.$$

Vi løser $V'(x) = 0$ for x :

$$0 = 5 - \frac{3}{2}x^2 \Leftrightarrow 5 = \frac{3}{2}x^2 \Leftrightarrow \frac{10}{3} = x^2.$$

x kan ikke være negativ, så løsningen bliver $x = \sqrt{10/3} \approx 1.826$. Lad os undersøge, om dette er et maksimum for volumen. Vi har

$$V''(x) = -3x,$$

som er negativ for alle positive x -værdier. Dermed er $x = \sqrt{10/3}$ et maksimum. Den maksimale volumen bliver da $V(\sqrt{10/3}) \approx 6.086m^3$. \circ

Supplerende: Grænseværdibegrebet gjort stringent

Vi skal i dette afsnit forsøge at redegøre kort for grænseværdibegrebet på matematisk vis. Dette afsnit er forbeholdt de matematisk interesserede og vil ved første gennemlæsning forekomme temmelig tungt for de fleste læsere.

Lidt løst kan man sige, at en grænseværdi for en funktion i et punkt a er den værdi, som punkterne "omkring a " siger, at funktionen burde antage i a . Det er denne intuition, vi skal have gjort præcis. Det tog matematikere overraskende mange år at nå frem til den definition, vi præsenterer her.

Definition 1.1.31. Lad f være defineret på mængden $A \subseteq \mathbb{R}$, og lad $a \in A$. Tallet b siges at være en grænseværdi for f i grænseovergangen $x \rightarrow a$, hvis vi for alle $\varepsilon > 0$ kan bestemme et $\delta > 0$, så $0 < |x - a| < \delta$ medfører $|f(x) - b| < \varepsilon$ for alle $x \in A$. Hvis b er en grænseværdi, skriver vi enten $f(x) \rightarrow b$ for $x \rightarrow a$ eller mere kortfattet,

$$\lim_{x \rightarrow a} f(x) = b.$$

Bemærkning 1.1.32. Til de læsere, som kan lide kvantorer, kan definitionen opskrives kortfattet på følgende måde. b er en grænseværdi for f i grænseovergangen $x \rightarrow a$, hvis

$$\forall \varepsilon > 0 \exists \delta > 0 : 0 < |x - a| < \delta \Rightarrow |f(x) - b| < \varepsilon.$$

Inden vi tager nogle eksempler på brugen af denne definition, vil vi nævne lidt terminologi. Vi siger (for en given grænseovergang), at $\varepsilon > 0$ er givet, og at vi skal bestemme et $\delta > 0$, som afparerer ε . Vil man gøre situationen endnu mere spændende, kan man sige, at ens værste fjende giver en et epsilon, og at fjenden først giver op, når man har bevist, at han/hun aldrig kan fremtrylle et epsilon, hvor afpareringsstrategien fejler.

Eksempel 1.1.33. Det giver intuitivt mening, at for $f(x) = 2x + 1$ vil $f(x) \rightarrow 1$ for $x \rightarrow 0$. Lad os bevise dette stringent. Vi har et $\varepsilon > 0$ givet. Vi skal da bestemme et $\delta > 0$, sådan at $0 < |x - 0| < \delta$ medfører $|f(x) - 1| < \varepsilon$. Vi har $|f(x) - 1| = |2x| = 2|x|$. Vælg nu $\delta = \varepsilon/2$. Da må vi for $|x - 0| < \delta$ have

$$|f(x) - 1| = 2|x - 0| < 2\delta = \varepsilon$$

som ønsket. Det er hermed bevist, at $f(x) \rightarrow 1$ for $x \rightarrow 0$. \circ

Eksempel 1.1.34. Lad os tage et lidt sværere eksempel. Betragt $f(x) = x^2 + 4x + 2$. Mon ikke, at $f(x) \rightarrow 2$ for $x \rightarrow 0$. Lad $\varepsilon > 0$ være givet. Vi har

$$|f(x) - 2| = |x^2 + 4x| = |x||x + 4|.$$

Hvad gør vi herfra? Vi betragter grænseovergangen $x \rightarrow 0$. Altså er det ikke urimeligt at antage, at $|x| < 1$. I så fald må vi have $|x + 4| \leq 5$. Dette kan ses ved at tegne en tallinje eller ved at tegne grafen for funktionen $|x + 4|$. Dermed har vi

$$|f(x) - 2| < 5|x - 0|,$$

og vi har hermed en afpareringsstrategi. Vælger vi $\delta = \min\{1, \varepsilon/5\}$, vil vi sikre, at $|f(x) - 2| < \varepsilon$ for $|x - 0| < \delta$ som ønsket. \circ

Dette eksempel illustrerer, hvordan man nogle gange skal være skarp ift. at vælge afpareringsstrategi. Følgende lemma kan hjælpe os en smule på vej ift. at vælge et passende δ .

Lemma 1.1.35. For en funktion f , et tal a i f 's definitionsmængde og et tal b , da vil betingelsen

$$|f(x) - b| \leq C|x - a|^d$$

sikre, at $f(x) \rightarrow b$ for $x \rightarrow a$.

Bevis. Afpareringsstrategien består i, for et givet $\varepsilon > 0$, at vælge $\delta = \varepsilon^{1/d}/C$. Da vil $|x - a| < \delta$ nemlig medføre

$$|f(x) - b| < C \frac{(\varepsilon^{1/d})^d}{C} = \varepsilon$$

som ønsket. \blacksquare

I begge af de forrige eksempler benyttede vi dette lemma (omend i specialtilfældet $d = 1$). Lad os se på et eksempel, hvor lemmaet kommer i spil i lidt større generalitet.

Eksempel 1.1.36. Se på $f(x) = 7\cos(x)(x - 1)^3$ for $x \rightarrow 1$. Vores bud er, at grænseværdien er 0. Idet $|\cos(x)| \leq 1$ har vi

$$|f(x) - 0| = 7|\cos(x)||x - 1|^3 \leq 7|x - 1|^3.$$

Ifølge lemmaet ovenover har vi nu bevist udsagnet. δ kan for givet $\varepsilon > 0$ eksplisit vælges til $\delta = \varepsilon^{1/3}/7$. \circ

Det viser sig (heldigvis), at der gælder en række regneregler for vores grænseværdifunktion, som giver god intuitiv mening. Beviset er værd at næstudere, første gang man støder på teorien, da en række brugbare standardargumenter kommer i spil.

Proposition 1.1.37. Lad f og g være funktioner med et punkt a i begge funktioners definitionsmængde. Antag, at $f(x) \rightarrow b$ og $g(x) \rightarrow c$ for $x \rightarrow a$. Da gælder følgende.

1. $f(x) + g(x) \rightarrow b + c$ for $x \rightarrow a$,
2. $f(x) - g(x) \rightarrow b - c$ for $x \rightarrow a$ og

KAPITEL 1. MATEMATISKE FORUDSÆTNINGER

3. $f(x)g(x) \rightarrow bc$ for $x \rightarrow a$.

4. Hvis $g(x) \neq 0$ for alle x og $c \neq 0$, da vil $f(x)/g(x) \rightarrow b/c$ for $x \rightarrow a$.

Bevis. Vi beviser punkt 1. Lad $\varepsilon > 0$ være givet. Vi har ifølge trekantsuligheden (se Proposition B.11), at

$$|f(x) + g(x) - (b + c)| = |f(x) - b + g(x) - c| \leq |f(x) - b| + |g(x) - c|.$$

Idet $f(x) \rightarrow b$ for $x \rightarrow a$ kan vi bestemme et $\delta_1 > 0$, sådan at $|x - a| < \delta_1$ medfører $|f(x) - b| < \varepsilon/2$. Ligeledes kan vi finde et $\delta_2 > 0$, således at $|x - a| < \delta_2$ medfører $|g(x) - c| < \varepsilon/2$. Vælger vi nu $\delta = \min\{\delta_1, \delta_2\}$, vil $|x - a| < \delta$ medføre

$$|f(x) + g(x) - (b + c)| < \frac{\varepsilon}{2} + \frac{\varepsilon}{2} = \varepsilon$$

som ønsket. Dermed er punkt 1 bevist. Beviset for punkt 2 er næsten identisk og overlades som øvelse til læseren. Vi viser nu punkt 3, så lad igen $\varepsilon > 0$ være givet. Her skal man være mere listig. Som matematikere ofte gør, lægger vi nul til på en smart måde. Vi har

$$|f(x)g(x) - bc| = |f(x)g(x) - f(x)c + f(x)c - bc| \leq |f(x)||g(x) - c| + |c||f(x) - b|.$$

Vælg nu et $\delta_1 > 0$ sådan at $|x - a| < \delta_1$ medfører $|f(x) - b| \leq \varepsilon/2(1 + |c|)$. Årsagen til den spøjse nævner er, at vi kan have, at $c = 0$. For $|x - a| < \delta_1$ har vi da

$$|f(x)g(x) - bc| \leq |f(x)||g(x) - c| + \frac{\varepsilon}{2}.$$

Vi har dog også

$$\begin{aligned} |f(x)| &= |f(x) - b + b| \leq |f(x) - b| + |b| \\ &< \frac{\varepsilon}{2(1 + |c|)} + |b| < \frac{\varepsilon}{2} + |b|. \end{aligned}$$

Vi får herfra idéen til at vælge $\delta_2 > 0$ sådan at $|x - a| < \delta_2$ medfører

$$|g(x) - c| < \frac{\frac{\varepsilon}{2}}{\frac{\varepsilon}{2} + |b|}.$$

Dermed har vi for $|x - a| < \delta = \min\{\delta_1, \delta_2\}$, at

$$|f(x)g(x) - bc| < \left(\frac{\varepsilon}{2} + |b|\right) \frac{\frac{\varepsilon}{2}}{\frac{\varepsilon}{2} + |b|} + \frac{\varepsilon}{2} = \varepsilon,$$

hvilket viser det ønskede. Ift. punkt 4 starter vi med at bevise, at $1/g(x) \rightarrow 1/c$ for $x \rightarrow a$. Vi har

$$\left| \frac{1}{g(x)} - \frac{1}{c} \right| = \left| \frac{c - g(x)}{cg(x)} \right| = \frac{|g(x) - c|}{|c||g(x)|}$$

Vælg nu $\delta_1 > 0$ sådan at $|x - a| < \delta_1$ medfører $|g(x) - c| < |c|/2$. Denne ulighed er ækvivalent med $-|c|/2 < g(x) - c < |c|/2$, hvilket omarrangeres til $-|c|/2 + c < g(x) < |c|/2 + c$. Hvis $c > 0$, har vi $g(x) > c/2$, sådan at $|g(x)| > |c|/2$. Hvis $c < 0$ er $3c/2 < g(x) < c/2$. Specielt er $g(x) < 0$, så $|g(x)| = -g(x) > -c/2 = |c|/2$. Vi konkluderer, at uanset fortegnet på c , vil $|g(x)| > |c|/2$. Dermed har vi for $|x - a| < \delta_1$, at

$$\left| \frac{1}{g(x)} - \frac{1}{c} \right| < \frac{|g(x) - c|}{|c||c|/2} = 2 \frac{|g(x) - c|}{c^2}.$$

Vælg nu $\delta_2 > 0$, således at $|x - a| < \delta_2$ medfører $|g(x) - c| < c^2\varepsilon/2$. Da fås for $|x - a| < \delta = \min\{\delta_1, \delta_2\}$, at

$$\left| \frac{1}{g(x)} - \frac{1}{c} \right| < 2 \frac{c^2\varepsilon}{2c^2} = \varepsilon,$$

hvilket viser det ønskede. Den generelle påstand $f(x)/g(x) \rightarrow b/c$ for $x \rightarrow a$ følger nu ved at kombinere det netop viste med punkt 3, som vi allerede har bevist. ■

Eksempel 1.1.38. Betragt $f(x) = 7 \cos(x)(x-1)^3 + 3x$ for $x \rightarrow 1$. Det er ikke svært at vise, at $3x \rightarrow 3$ for $x \rightarrow 1$, og dermed får vi direkte fra punkt 1 i propositionen ovenover, at $f(x) \rightarrow 0 + 3 = 3$ for $x \rightarrow 1$ ved at bruge resultatet fra Eksempel 1.1.36. \circ

Man kan sige langt mere om det stringente grænseværdibegreb. Faktisk er der et helt felt af matematikken dedikeret til studiet af grænseværdier, nemlig *matematisk analyse*. Dette afsnit er blot en kort forsmag på emnet. Til de interesserede er der nogle opgaver i slutningen af sektionen.

Supplerende: Flere beviser

I dette afsnit gennemgår vi beiset for nogle af de grænseværdiresultater, vi har benyttet indtil videre. Beviserne bygger på de teknikker, der er introduceret i forrige afsnit om grænseværdier og afpareringsstrategier.

Lemma 1.1.39. *Der gælder, at*

$$\lim_{x \rightarrow 0} \frac{\sin(x)}{x} = 1.$$

Bewis. Ved at bruge Lemma C.5 og C.7 har vi

$$x \cos(x) \leq \sin(x) \leq x \quad \text{for } x \in \left(0, \frac{\pi}{2}\right).$$

Bemærk, at alle størrelser er positive, så det gør ingen forskel at sætte numeriske tegn. Omarrangering (dividér med x og træk én fra) giver

$$\cos(x) - 1 \leq \frac{\sin(x)}{x} - 1 \leq 0 \quad \text{for } x \in \left(0, \frac{\pi}{2}\right).$$

Husk på, at $a \leq x \leq b$ giver $|x| \leq |a| + |b|$ som vist i appendikset. I vores tilfælde giver det os

$$\left| \frac{\sin(x)}{x} - 1 \right| \leq |\cos(x) - 1| \leq x^2 \quad \text{for } |x| < \frac{\pi}{2}, x \neq 0.$$

Vi har her benyttet, at $\sin(x)/x$ er en lige funktion, så vi kan uden problemer udvide til negative x større end $-\pi/2$. Vi har desuden benyttet Korollar C.6. Vi ser, at $\varepsilon > 0$ kan afpareres af $\delta = \min\{\pi/2, \sqrt{\varepsilon}\}$. \blacksquare

Lemma 1.1.40. *Der gælder, at*

$$\lim_{x \rightarrow 0} \frac{\cos(x) - 1}{x} = 0.$$

Bewis. Idet vi ser på grænseværdien $x \rightarrow 0$, kan vi uden problemer antage, at $|x| < \pi/2$. I så fald har vi

$$0 \leq 1 - \cos(x) \leq x^2$$

jævnfør Korollar C.6. Dermed har vi

$$|\cos(x) - 1| \leq x^2$$

og ved at dele med $|x|$ på begge sider,

$$\left| \frac{\cos(x) - 1}{x} \right| \leq |x|.$$

Dermed kan $\varepsilon > 0$ afpareres med $\delta = \min\{\varepsilon, \pi/2\}$. \blacksquare

Lemma 1.1.41. *Vi har*

$$\lim_{x \rightarrow 0} \frac{e^x - 1}{x} = 1.$$

KAPITEL 1. MATEMATISKE FORUDSÆTNINGER

Bevis. Fra Lemma D.9 har vi for $x < 1$, at

$$1 + x \leq e^x \leq \frac{1}{1-x}$$

og dermed

$$x \leq e^x - 1 \leq \frac{1}{1-x} - x = \frac{x}{1-x}.$$

Lad nu $x > 0$. Da kan vi dividere med x (såfrem $x \neq 0$) og opnå

$$1 \leq \frac{e^x - 1}{x} \leq \frac{1}{1-x}.$$

Trækker vi 1 fra, fås

$$0 \leq \frac{e^x - 1}{x} - 1 \leq \frac{x}{1-x}.$$

Hvis $x < 0$, ville vi i stedet være nødt til at vende ulighederne, så vi ender med

$$1 \geq \frac{e^x - 1}{x} \geq \frac{1}{1-x},$$

dvs.

$$0 \geq \frac{e^x - 1}{x} - 1 \geq \frac{x}{1-x}.$$

Uanset om x er positiv eller negativ, kan vi dog konkludere

$$\left| \frac{e^x - 1}{x} - 1 \right| \leq \left| \frac{x}{1-x} \right|, \quad x < 1, x \neq 0.$$

Antag nu, at $|x| < 1/2$, da vil $|1-x| \geq 1/2$ og dermed

$$\left| \frac{e^x - 1}{x} - 1 \right| \leq 2|x|.$$

Altså kan et $\varepsilon > 0$ afpareres med $\delta = \min\{\varepsilon/2, 1/2\}$. ■

Opsummering af regneregler

Funktion	Afledt	Note
$f + g$	$(f + g)'(x) = f'(x) + g'(x)$	
fg	$(fg)'(x) = f'(x)g(x) + f(x)g'(x)$	
f/g	$(f/g)'(x) = (f'(x)g(x) - f(x)g'(x))/g(x)^2$	$g(x) \neq 0$

Figur 1.4: Tabel over regneregler for differentiation.

$f(x)$	$f'(x)$	Note
a	0	
x^n	nx^{n-1}	
$\cos(x)$	$-\sin(x)$	
$\sin(x)$	$\cos(x)$	
$\tan(x)$	$1 + \tan(x)^2$	
e^x	e^x	
$\ln(x)$	$1/x$	

Figur 1.5: Tabel over nogle vigtige funktioner og deres afledte.

Opgaver

• **Opgave 1.1.1:**

Betræt funktionen $f(x) = x^2 - 4$. Skitsér funktionen og tegn sekanten gennem $x_0 = -1$ og $x_1 = 2$.

•• **Opgave 1.1.2:**

Vis direkte ud fra definitionen af en differentialkvotient, at $f(x) = ax$ har den afledte $f'(x) = a$.

•• **Opgave 1.1.3:**

Lad f være en funktion, der er differentiabel i x_0 . Vis, at funktionen $g(x) = af(x)$ er differentiabel i x_0 med afledt $g'(x_0) = af'(x_0)$.

••• **Opgave 1.1.4:**

Vis direkte ud fra definitionen af en differentialkvotient, at $f(x) = x^3$ har den afledte funktion $f'(x) = 3x^2$. Vink: Her er kubiksætningerne nyttige: $(a + b)^3 = a^3 + 3a^2b + 3ab^2 + b^3$.

• **Opgave 1.1.5:**

Bestem den afledte af følgende polynomier:

- 1) $6x^2 + 7$.
- 2) $3x^4 - 7x^3 + 10x - 11$.
- 3) $3x^7 + 12x^5$.

• **Opgave 1.1.6:**

Bestem den afledte af følgende funktioner:

- 1) $4\cos(x) + \sin(x)$.
- 2) $e^x + 2\sin(x)$.
- 3) $x^2 + x + \ln(x)$.

•• **Opgave 1.1.7: Produktregel**

Bestem den afledte af følgende funktioner:

- 1) $2x^2 \cos(x)$.
- 2) $\cos(x) \sin(x)$.
- 3) $4x^3 e^x$.
- 4) $\cos(x) e^x$.
- 5) $x^2 \cos(x) \sin(x)$.
- 6) $\sin(x) \ln(x)$.

•• **Opgave 1.1.8: Kvotientregel**

Bestem den afledte af følgende funktioner:

- 1) $\frac{x+1}{x^3}$.
- 2) $\frac{\cos(x)}{\sin(x)}$.
- 3) $\frac{\cos(x)}{x^2}$.
- 4) $\frac{\ln(x)}{x^2}$.
- 5) $\frac{e^x}{4x+1}$.
- 6) $\frac{x^3}{2e^x+4}$.

••• **Opgave 1.1.9: Kæderegel**

Bestem den afledte af følgende funktioner:

- 1) $\cos(x^3)$.

- 2) $\sin(\cos(x))$.
- 3) $\cos(e^x)$.
- 4) $e^{\cos(x)+1}$.
- 5) $\ln(e^x)$.
- 6) e^{x^2} .
- 7) $\sin(e^{2x} + 10x)$.
- 8) $\cos(x)^7$.
- 9) $\ln(x)^3$.
- 10) $\ln(\cos(x))$.
- 11) $\tan(x^2)$.

•• **Opgave 1.1.10:**

Genkald, at $\tan(x) = \sin(x)/\cos(x)$. Herunder skal " og "" forstås som, at man skal differentiere funktionen hhv. to og tre gange.

- 1) Vis, at $\tan'(x) = 1 + \tan(x)^2$.
- 2) Udregn $\tan''(x)$ og $\tan'''(x)$.

•• **Opgave 1.1.11: Hyperbolske funktioner**

I denne opgave skal vi se på de hyperbolske funktioner. *Hyperbolisk cosinus* og *hyperbolisk sinus* er givet ved hhv.

$$\cosh(x) = \frac{e^x + e^{-x}}{2} \quad \text{og} \quad \sinh(x) = \frac{e^x - e^{-x}}{2}.$$

- 1) Vis, at $\cosh'(x) = \sinh(x)$, og at $\sinh'(x) = \cosh(x)$.
- 2) Vi definerer *hyperbolisk tangens* til

$$\tanh(x) = \frac{\sinh(x)}{\cosh(x)}.$$

Bestem $\tanh'(x)$ og $\tanh''(x)$.

••• **Opgave 1.1.12: Blandede øvelser**

Bestem den afledte af følgende funktioner:

- 1) $\frac{\cos(e^x)+x^2}{\sin(x)}$.
- 2) $e^{\cos(x)\sin(x)}$.
- 3) e^{e^x} .
- 4) $x^3e^x - \frac{\cos(x)}{x}$.
- 5) $\cos(x)\tan(x)$.

•• **Opgave 1.1.13:**

Bestem følgende grænseværdier.

1)

$$\lim_{x \rightarrow \infty} \frac{x^2}{e^x}.$$

2)

$$\lim_{x \rightarrow 1} \frac{1-x}{\sin(x-1)}.$$

3)

$$\lim_{x \rightarrow 0} \frac{\sin(x)^2}{x}.$$

••• Opgave 1.1.14:

Bestem følgende grænseværdier.

1)

$$\lim_{x \rightarrow 0^+} x^2 \log(x).$$

2)

$$\lim_{x \rightarrow 1} \frac{\log(x)}{\sin(x-1)}.$$

3)

$$\lim_{x \rightarrow 0^+} x^x.$$

Vink: Til 1), brug $x^2 = 1/(1/x^2)$. Til 3), tag først logaritmen.**•• Opgave 1.1.15:**Bestem alle lokale maksima og minima for funktionen $f(x) = x^3 + 2x^2 - 4x + 2$.**••• Opgave 1.1.16:**

Vi ønsker at lave en indhegning til en have. Vi har 40m hegn til rådighed, og vi ønsker, at haven skal være rektangulær. Bestem den optimale længde og bredde af haven samt det størst mulige areal.

De resterende opgaver omhandler det stringente grænseværdibegreb og er for de særligt interesserede.

•• Opgave 1.1.17:Lad $f(x) = x \sin(x)$. Vis, at $f(x) \rightarrow 0$ for $x \rightarrow 0$ ved at lave en eksplisit afpareringsstrategi.**•• Opgave 1.1.18:**Lad $f(x) = x^2 - 4$. Vis, at $f(x) \rightarrow 0$ for $x \rightarrow 2$ ved at lave en eksplisit afpareringsstrategi.

Vink: To tals sum gange to tals differens!

•• Opgave 1.1.19:Lad $f(x) = x^2 + 45x - x \sin(x) \cos(x)$. Bestem

$$\lim_{x \rightarrow 0} f(x).$$

Det er her tilladt at bruge alle resultater vist ovenover!

••• Opgave 1.1.20: KlemmelemmaetVi skal i denne opgave bevise det utroligt brugbare resultat kendt som *klemmelemmaet*. Resultatet siger, at hvis vi har tre funktioner, som opfylder $g(x) \leq f(x) \leq h(x)$ samt $h(x) \rightarrow b$ og $g(x) \rightarrow b$ for $x \rightarrow a$, da vil også $f(x) \rightarrow b$ for $x \rightarrow a$. Bevis dette resultat. Vink: Du må frit bruge, at $a \leq b \leq c$ medfører $|b| \leq |a| + |c|$.

1.2 Integralregning

Stamfunktioner

Vi skal til en start stifte bekendtskab med stamfunktioner. At bestemme stamfunktioner svarer til det omvendte af differentiering.

Definition 1.2.1. Lad f være en funktion. En stamfunktion F til f er en funktion, som opfylder, at $F'(x) = f(x)$ for alle x i f 's definitionsmængde. Vi skriver også $\int f(x)dx$ for en stamfunktion til f . \int kaldes et *integraltegn*.

Eksempel 1.2.2. Lad $f(x) = x^2$ og $F(x) = \frac{1}{3}x^3$. Idet

$$F'(x) = \frac{1}{3}3x^{3-1} = x^2 = f(x),$$

er F en stamfunktion til f . Betragt nu i stedet funktionen $F(x) = \frac{1}{3}x^3 + 10$. Idet den afledte funktion af en konstant er 0, vil $F'(x) = x^2 = f(x)$ også, så dette nye valg af F er også en stamfunktion til f . \circ

Givet en funktion f , som har en stamfunktion, er sådan en stamfunktion **unik**? Eksemplet ovenover viser, at svaret er nej, idet vi fandt to forskellige stamfunktioner til $f(x) = x^2$. De to funktioner havde dog kun en konstant til forskel. Dette viser sig at gælde helt generelt.

Sætning 1.2.3 (Stamfunktioner er unikke op til addition med en konstant).
Antag, at F og G begge er stamfunktioner til f . Da er $F - G$ lig en konstant.

Bevis. Differentierer vi $F - G$, får vi

$$(F - G)'(x) = F'(x) - G'(x) = f(x) - f(x) = 0.$$

Dermed er differentialkvotienten til $F - G$ identisk nul. Men en funktion, som har nul som afledt, er konstant. Dette fuldfører beviset. \blacksquare

Bemærkning 1.2.4. Grundet ovenstående resultat er det ikke interessant at inkludere konstanter i en stamfunktion til en given funktion. F.eks. vil vi for $f(x) = x^2$ blot benytte stamfunktionen $F(x) = \frac{1}{3}x^3$.

I differentialregning er der en lang række regneregler (produktreglen, kædereglen, kvotientreglen etc.), som kan løse de fleste differentiationsproblemer, hvis man ellers kan holde tungen lige i munden. Det viser sig, at integralregning er en del sværere. Ofte er man nødt til at gætte sig frem, og det er ikke sikkert, at regnereglerne (som vi kommer ind på om lidt) er behjælpelige. Derudover kan det forekomme, at selvom stamfunktionen eksisterer, kan man ikke opskrive den! Ønsker man at blive god til stamfunktioner, er man nødt til at opbygge et arsenal af velkendte stamfunktioner, man kan tage udgangspunkt i. Vi skal starte med at se på polynomier, der viser sig at være nemme at integrere. Inden skal vi dog have en central regneregel på plads.

Proposition 1.2.5. Lad f og g være funktioner. Antag, at F er en stamfunktion til f , og at G er en stamfunktion til g . Da er $F + G$ en stamfunktion til $f + g$. Skrevet på en anden måde,

$$\int f(x) + g(x)dx = \int f(x)dx + \int g(x)dx.$$

Bevis. Vi differentierer og får

$$(F + G)'(x) = F'(x) + G'(x) = f(x) + g(x),$$

hvilket færdiggør beviset. \blacksquare

Vigtige eksempler på stamfunktioner

Stamfunktioner af polynomier

Husk, at et polynomium er en funktion på formen

$$f(x) = a_n x^n + a_{n-1} x^{n-1} + \cdots + a_1 x + a_0,$$

hvor alle a_i er konstanter. Vi genkalder den vigtige regneregel, at hvis $f(x) = x^n$, da er $f'(x) = nx^{n-1}$. Altså skal vi gange eksponenten ned og trække én fra eksponenten bagefter. Den omvendte operation er at lægge én til eksponenten og derefter dividere med den nye eksponent. Denne tankegang leder til følgende resultat:

Proposition 1.2.6. *Lad $f(x) = x^n$ for $n \neq -1$. Da er*

$$\int f(x) dx = \frac{1}{n+1} x^{n+1}.$$

Bevis. Lad $F(x) = \frac{1}{n+1} x^{n+1}$. Da er

$$F'(x) = \frac{1}{n+1} (n+1) x^{n+1-1} = x^n,$$

hvilket viser det ønskede. ■

Eksempel 1.2.7. Lad $f(x) = 2x^2 + 3x - 6$. En stamfunktion til f bestemmes:

$$\begin{aligned} \int f(x) dx &= \int 2x^2 dx + \int 3x dx - \int 6 dx \\ &= 2 \int x^2 dx + 3 \int x dx - 6 \int 1 dx \\ &= 2 \frac{1}{3} x^3 + 3 \frac{1}{2} x^2 - 6x. \end{aligned}$$

○

Trigonometriske funktioner, eksponentialfunktioner og logaritmer

I dette korte afsnit fastlægger vi stamfunktionerne til en række centrale funktioner. Resultatet herunder bygger direkte ovenpå vores kendskab til den afledte af de involverede funktioner.

Proposition 1.2.8. *Der gælder følgende:*

1. $\int \cos(x) dx = \sin(x)$.
2. $\int \sin(x) dx = -\cos(x)$.
3. $\int e^x dx = e^x$.
4. $\int \frac{1}{x} dx = \ln(x)$.

Bevis. Vi viser hvert punkt for sig:

1. Dette følger af, at $\sin'(x) = \cos(x)$.
2. Vi ved, at $\cos'(x) = -\sin(x)$. Dermed vil differentialkvotienten af $-\cos(x)$ være $\sin(x)$.
3. Dette følger af, at $(e^x)' = e^x$.
4. Dette følger af, at $\ln'(x) = 1/x$. ■

Regneregler for stamfunktioner

I dette afsnit introducerer vi to centrale teknikker til at finde stamfunktioner. De bygger begge direkte på velkendte regler fra differentialregningen, hvilket også fremgår af deres beviser.

Sætning 1.2.9 (Substitution). *Lad f være differentiabel med f' kontinuert, og lad g være kontinuert. Da gælder*

$$\int g(f(x))f'(x)dx = \int g(u)du \quad \text{for } u = f(x).$$

Bevis. Lad G være en stamfunktion til g . Fra kædereglen fås

$$(G(f(x)))' = G'(f(x))f'(x) = g(f(x))f'(x).$$

Tages stamfunktioner på begge sider, får vi

$$\int g(f(x))f'(x)dx = \int (G(f(x)))'dx = G(f(x)) = G(u) = \int g(u)du.$$

■

Substitution kan godt være mystisk første gang, man støder på det. Lad os tage nogle eksempler på brug af sætningen. Tricket er altid det samme. Vælg en passende ydre funktion og find den afledte af inputtet ganget på et andet sted.

Eksempel 1.2.10. Lad os bestemme

$$\int 2x \cos(x^2)dx.$$

Vi ser, at $(x^2)' = 2x$ indgår i integralet. Lad $g(x) = \cos(x)$ og $f(x) = x^2$. Da er ovenstående lig $\int g(f(x))f'(x)dx$, og dermed giver sætningen om substitution, at udtrykket ovenover er lig

$$\int g(u)du = \int \cos(u)du = \sin(u)$$

for $u = x^2$. Dermed er

$$\int 2x \cos(x^2)dx = \sin(x^2).$$

Læseren kan selv tjekke, at resultatet er korrekt ved at differentiere $\sin(x^2)$ ved brug af kædereglen (at tjekke, at en stamfunktion er valid ved at differentiere den, kaldes til tider *integrationsprøven*). ◯

Eksempel 1.2.11. Lad os bestemme

$$\int x^2 e^{x^3} dx.$$

Vi gætter på, at e^x spiller rollen som den ydre funktion og x^3 som den indre. Desværre indgår $(x^3)' = 3x^2$ ikke i integralet. Vi kan dog fremtrylle denne afledte ved at gange med $1/3$ og derefter med 3 som følger:

$$\int x^2 e^{x^3} dx = \frac{1}{3} \int 3x^2 e^{x^3} dx.$$

Nu kan sætningen om substitution bruges direkte med $u = x^3$:

$$\int x^2 e^{x^3} dx = \frac{1}{3} \int 3x^2 e^{x^3} dx = \frac{1}{3} \int e^u du = \frac{1}{3} e^u = \frac{1}{3} e^{x^3}.$$

Igen kan læseren tjekke resultatet efter ved at differentiere resultatet. ◯

Inden vi går videre med den anden vigtige regneregel til at bestemme stamfunktioner, gennemgår vi en teknik til at benytte substitution. Denne teknik (der nok nærmere er en huskeregel) benytter, at man kan skrive differentialkvotienten for en funktion f som

$$f'(x) = \frac{df}{dx}.$$

Denne notation kan bruges til at huske kæderegen på følgende vis. Man leger, at $\frac{df}{dx}$ er en brøk, og ved at skrive differentialkvotienten af den sammensatte funktion som $dg(f)/dx$, kan man "gange og dividere" med df og få

$$\frac{dg(f)}{dx} = \frac{dg(f)}{df} \frac{df}{dx},$$

som jo blot er $g'(f(x))f'(x)$. På samme måde kan man bruge denne notation til at huske substitutions-reglen. Skriv $u = f(x)$. Da er

$$\int g(f(x))f'(x)dx = \int g(u) \frac{du}{dx} dx = \int g(u)du,$$

hvor man i andet trin lader som om, at der bliver ganget og divideret med dx . Bemærk, at dette blot er en huskeregel og ikke et formelt bevis. Notationen df/dx kan også bruges til at bestemme stamfunktioner. Lad os genbesøge de to forrige eksempler for at illustrere teknikken.

Eksempel 1.2.12. Vi ser på

$$\int 2x \cos(x^2)dx.$$

Lad $u = x^2$. Da er $du/dx = 2x$, og dermed skriver vi $du = 2xdx$ ved at "gange over" med dx . Vi får da $dx = \frac{1}{2x}du$, og vi kan erstatte x^2 med u i integralet og få

$$\int 2x \cos(x^2)dx = \int 2x \cos(u) \frac{1}{2x} du = \int \cos(u)du.$$

Udregningerne er herefter identiske med dem fra tidligere. ○

Eksempel 1.2.13. Vi betragter igen $\int x^2 e^{x^3} dx$. Vi lader $u = x^3$ og får da $du = 3x^2 dx$, hvilket omskrives til $dx = \frac{1}{3x^2}du$. Altså fås med samme kneb som før

$$\int x^2 e^{x^3} dx = \frac{1}{3} \int 3x^2 e^{x^3} dx = \frac{1}{3} \int 3x^2 e^u \frac{1}{3x^2} du = \frac{1}{3} \int e^u du,$$

og resten af udregningerne er identiske med dem fra tidligere. ○

Nu ser vi på den anden centrale regneteknik, nemlig *partiel integration*.

Sætning 1.2.14 (Partiel integration). *Lad f og g være kontinuerte funktioner. Lad F være en stamfunktion til f , og lad G være en stamfunktion til g . Da gælder*

$$\int F(x)g(x)dx = F(x)G(x) - \int G(x)f(x)dx.$$

Bevis. Beviset er en direkte konsekvens af produktreglen. Produktreglen giver os, at

$$(F(x)G(x))' = F'(x)G(x) + F(x)G'(x) = f(x)G(x) + F(x)g(x).$$

Tager vi stamfunktioner af begge sider, får vi

$$F(x)G(x) = \int f(x)G(x)dx + \int F(x)g(x)dx.$$

Trækker vi $\int f(x)G(x)dx$ fra på begge sider, fås det ønskede. ■

KAPITEL 1. MATEMATISKE FORUDSÆTNINGER

Tricket i at bruge partiell integration er at vælge funktionerne f og g passende. Nogle gange kan det "forkerte" valg af f og g resultere i en lang sekvens af udregninger, der ikke fører til noget, mens det rigtige valg fører til smarte smutveje. Lad os se nogle eksempler.

Eksempel 1.2.15. Lad os bestemme en stamfunktion til $x^2 \cos(x)$. Vi ved, at vi får et polynomium af lavere grad ved at differentiere et polynomium, så det giver mening at lade $F(x) = x^2$ og $g(x) = \cos(x)$. Da giver partiell integration

$$\int x^2 \cos(x) dx = x^2 \sin(x) - \int \sin(x) 2x dx.$$

Nu skal vi blot evaluere stamfunktionen på højre side af lighedstegnet. Her giver det igen mening at benytte partiell integration som følger:

$$\begin{aligned} \int \sin(x) 2x dx &= 2 \int \sin(x) x dx = 2 \left(-x \cos(x) - \int -\cos(x) dx \right) \\ &= -2x \cos(x) + 2 \sin(x) \end{aligned}$$

Altså fås

$$\int x^2 \cos(x) dx = x^2 \sin(x) + 2x \cos(x) - 2 \sin(x).$$

Eksemplet her illustrerer, at det til tider kan være nødvendigt at foretage partiell integration flere gange for at komme i mål.

○

Eksempel 1.2.16. Lad os bestemme en stamfunktion til $\ln(x)$. Umiddelbart ser det ud til, at partiell integration ikke kan benyttes, da vi jo ikke har et produkt af funktioner. Men det har vi faktisk. Vi kan nemlig skrive $\ln(x) = \ln(x) \cdot 1$ og vælge $F(x) = \ln(x)$ og $g(x) = 1$. Da giver partiell integration

$$\begin{aligned} \int \ln(x) dx &= \int \ln(x) \cdot 1 dx = \ln(x) \cdot x - \int x \cdot \frac{1}{x} dx \\ &= \ln(x) \cdot x - \int 1 dx = \ln(x) \cdot x - x. \end{aligned}$$

○

Det bestemte integral

Arealet under en kurve

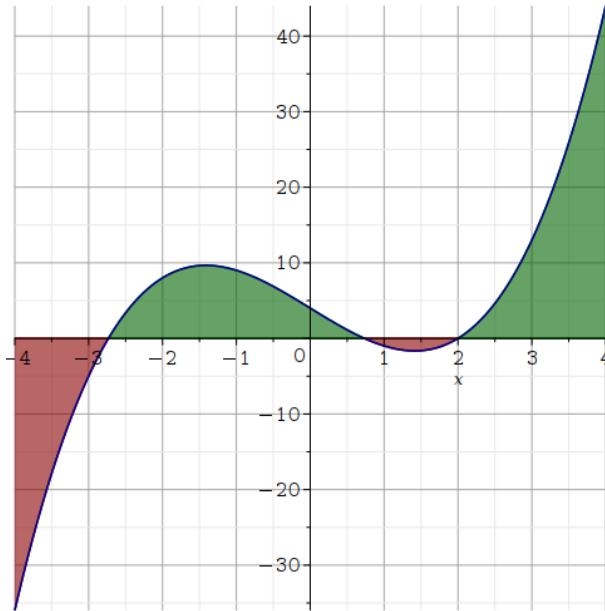
Hvorfor er stamfunktioner interessante? En af flere grunde er, at de bruges til at bestemme arealet under kurver.

Definition 1.2.17. Givet en funktion f defineret på $[a, b]$, da betegner *det bestemte integrale*

$$\int_a^b f(x) dx$$

arealet under grafen for f i intervallet $[a, b]$.

Hvordan skal areal forstås? Det skal forstås på den måde, at hvis funktionen f er positiv i intervallet $[a, b]$, da er integralet blot lig arealet i klassisk forstand. Hvis f er negativ nogle steder i intervallet, da betegner integralet arealet med negativt fortegn. Lad os illustrere dette med funktionen $f(x) = x^3 - 6x + 4$. Se figuren herunder:



Figur 1.6: Arealet under kurven for en funktion. Rød indikerer negativt fortegn og grøn positivt fortegn.

De grønne områder indikerer areal med positivt fortegn, mens det røde areal har negativt fortegn. I dette tilfælde er integralet over de områder, hvor funktionen er negativ (over de røde områder) ca. $-20,785$. Integralet, hvor funktionen er positiv (under de grønne områder), giver ca. $52,785$. Alt i alt fås

$$\int_{-4}^4 f(x)dx = 52,785 - 20.785 = 32.$$

Hvordan indgår stamfunktioner i beregning af det bestemte integrale? Det er en længere fortælling, men vi skal på denne camp tage en af de vigtigste resultater i matematisk analyse for givet, nemlig *Analysens Fundamentalsætning*. Den fortæller os følgende.

Sætning 1.2.18 (Analysens Fundamentalsætning). *Lad f være en kontinuert funktion. Da er en stamfunktion til f givet ved*

$$F(x) = \int_a^x f(t)dt.$$

Som en direkte konsekvens af denne sætning får vi en opskrift til at beregne arealet under kurver. Lad os dog først opliste nogle regneregler for integraler, som følger direkte af definitionen af det bestemte integral som arealet under kurven.

Proposition 1.2.19. *Lad f og g være kontinuerte funktioner defineret på $[a, b]$. Da gælder*

1.

$$\int_a^b f(x) + g(x)dx = \int_a^b f(x)dx + \int_a^b g(x)dx.$$

2.

$$\int_b^a f(x)dx = - \int_a^b f(x)dx.$$

3.

$$\int_a^a f(x)dx = 0.$$

4. Hvis intervallet $[a, b]$ deles op i de to dele $[a, c]$ og $[c, b]$ for et punkt c , da gælder

$$\int_a^c f(x)dx + \int_c^b f(x)dx = \int_a^b f(x)dx.$$

Lad os forsøge at sætte noget intuition på disse regneregler. Den første regneregel siger, at arealet under summen af to funktioner blot er summen af arealet under hvert af dem. Den anden er mindre klar. Den siger, at hvis man bytter rundt på integralgrænsene, skal man ændre fortegnet af det oprindelige integral. Man kan tænke på det sådan, at $\int_a^b f(x)dx$ betyder, at man integrerer fra a til b . Hvis man ændrer retning, får arealet også omvendt fortegn. Trejde punkt giver sig selv. At integrere over et punkt burde give nul, eftersom man får en linje (som har areal 0). Den fjerde regel er så vigtig, at den har sit eget navn, nemlig *indskudsreglen*. Intuitivt giver den mening, da den blot siger, at arealet fra a til b er lig arealet fra a til c lagt til arealet fra c til b .

Korollar 1.2.20. *Lad f være en kontinuert funktion. Hvis F er en stamfunktion til f , da er*

$$\int_a^b f(t)dt = F(b) - F(a).$$

Bevis. Husk, at to stamfunktioner kun kan have en konstant til forskel. Dermed er F givet ved

$$F(x) = \int_c^x f(t)dt + d$$

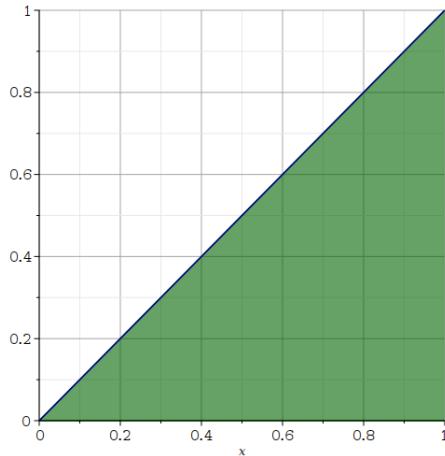
for konstanter c og d , hvor vi har brugt Analysens Fundamentalsætning. Bruger vi nu indskudsreglen samt regel 2 i propositionen ovenover, har vi

$$\begin{aligned} F(b) - F(a) &= \int_c^b f(t)dt + c - \left(\int_c^a f(t)dt + c \right) \\ &= \int_c^b f(t)dt - \int_c^a f(t)dt = \int_c^b f(t)dt + \int_a^c f(t)dt \\ &= \int_a^b f(t)dt \end{aligned}$$

som ønsket. ■

Lad os tage nogle eksempler på brugen af dette resultat.

Eksempel 1.2.21. Lad $f(x) = x$ på intervallet $[0, 1]$ som skitseret herunder.



Figur 1.7: Funktionen $f(x) = x$ i intervallet $[0, 1]$ med arealet under kurven farvet grøn.

Det er ikke svært at se, at arealet under kurven bør være $1/2$. Lad os tjekke, at Analysens Fundamentalsætning giver samme resultat. Vi ved, at $F(x) = \frac{1}{2}x^2$ er en stamfunktion til f . Vi får da

$$\int_0^1 f(x)dx = F(1) - F(0) = \frac{1}{2} - 0 = \frac{1}{2},$$

hvilket stemmer overens med vores forventning. \circ

Eksempel 1.2.22. Lad $f(x) = x^3 - 6x + 4$, som også er den funktion, vi så grafen for til at starte med. Vi ønsker at beregne

$$\int_{-4}^4 f(x)dx.$$

Vi bestemmer nemt en stamfunktion til $F(x) = \frac{1}{4}x^4 - 3x^2 + 4x$. Vi får da

$$\int_{-4}^4 f(x)dx = F(4) - F(-4) = \frac{1}{4}4^4 - 3 \cdot 4^2 + 4 \cdot 4 - (\frac{1}{4}(-4)^4 - 3 \cdot (-4)^2 + 4 \cdot (-4)) = 32,$$

hvilket lettest indsese ved at bemærke, at de fleste led går ud med hinanden. Kun $4 \cdot 4$ og $-(4 \cdot (-4))$ overlever. \circ

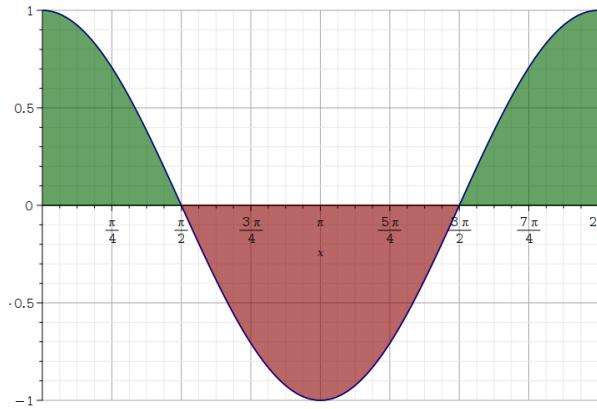
Eksempel 1.2.23. Vi ønsker at beregne

$$\int_0^{2\pi} \cos(x)dx.$$

Vi ved, at sin er en stamfunktion til cos, så vi får

$$\int_0^{2\pi} \cos(x)dx = \sin(2\pi) - \sin(0) = 0 - 0 = 0.$$

Ser vi på grafen for cosinus i intervallet med arealerne illustrerede, får vi figuren herunder.



Det ses, at de positive og de negative arealer udligner hinanden, hvilket forklarer vores resultat. \circ

Uegentlige integraler

I mange henseender er man ikke kun interesseret i at integrere over et begrænset interval. Man kunne f.eks. være interesseret i at integrere over hele den reelle talakse eller alle

KAPITEL 1. MATEMATISKE FORUDSÆTNINGER

positive reelle tal. Hvordan udregner vi bestemte integraler i dette tilfælde? Lad os studere det konkrete eksempel

$$\int_1^\infty \frac{1}{x^2} dx,$$

hvor kun den ene grænse er ikke-endelig. Her udregnes integralet som:

$$\int_1^\infty \frac{1}{x^2} dx = \lim_{N \rightarrow \infty} \int_1^N \frac{1}{x^2} dx.$$

Dermed skal vi blot udregne integralet med øvre grænse N . Dette gøres snildt. $1/x^2$ har $-1/x$ som stamfunktion. Dermed fås

$$\int_1^N \frac{1}{x^2} dx = -\frac{1}{N} - \left(-\frac{1}{1}\right) = 1 - \frac{1}{N},$$

og det endelige resultat bliver

$$\int_1^\infty \frac{1}{x^2} dx = \lim_{N \rightarrow \infty} \left(1 - \frac{1}{N}\right) = 1.$$

Hvad hvis vi har et integral på formen

$$\int_{-\infty}^\infty f(x) dx?$$

Da gør vi noget fuldstændigt analogt:

$$\int_{-\infty}^\infty f(x) dx = \lim_{N \rightarrow \infty} \int_{-N}^N f(x) dx.$$

Bemærk, at sådanne integraler ikke nødvendigvis er endelige, som det følgende eksempel viser.

Eksempel 1.2.24. Lad os beregne

$$\int_1^\infty \frac{1}{x} dx.$$

Husk, at $1/x$ har $\ln(x)$ som stamfunktion. I dette tilfælde fås da

$$\int_1^\infty \frac{1}{x} dx = \lim_{N \rightarrow \infty} \int_1^N \frac{1}{x} dx = \lim_{N \rightarrow \infty} (\ln(N) - \ln(1)) = \lim_{N \rightarrow \infty} \ln(N) = \infty.$$

○

For en god ordens skyld tager vi endnu et eksempel.

Eksempel 1.2.25. Lad os beregne

$$\int_{-\infty}^\infty e^{-x^2} x dx.$$

Vi starter med at beregne en stamfunktion til $e^{-x^2} x$. Vi benytter substitutionen $u = x^2$. Da er $du = 2x dx$, og dermed er

$$\int e^{-x^2} x dx = \int e^{-u} x \frac{1}{2x} du = \frac{1}{2} \int e^{-u} du = -\frac{1}{2} e^{-u} = -\frac{1}{2} e^{-x^2}.$$

Vi har dermed

$$\int_{-N}^N e^{-x^2} x dx = \left[-\frac{1}{2} e^{-x^2} \right]_{-N}^N = -\frac{1}{2} (e^{-N^2} - e^{N^2}) = 0.$$

Og dermed må vi få

$$\int_{-\infty}^\infty e^{-x^2} x dx = \lim_{N \rightarrow \infty} 0 = 0.$$

Så selvom vi integrerer over hele den reelle akse, bliver arealet alligevel nul! Årsagen er, at det positive areal og det negative areal går ud med hinanden. ○

Substitution og partiel integration for bestemte integraler

Vi har tidligere set substitution og partiel integration for ubestemte integraler/stamfunktioner. Disse er faktisk tilstrækkelige til at udregne bestemte integraler i mange tilfælde. Vi kan nemlig bruge substitution eller partiel integration til at bestemme en stamfunktion, og derefter kan vi blot bruge Analysens Fundamentalsætning i form af Korollar 1.2.20 til at udregne integralet. Ikke desto mindre er det brugbart at have udgaver for bestemte integraler også.

Sætning 1.2.26 (Substitution). *Lad f være differentiabel med f' kontinuert, og lad g være kontinuert. Da gælder*

$$\int_a^b g(f(x))f'(x)dx = \int_{f(a)}^{f(b)} g(u)du \quad \text{for } u = f(x).$$

Bevis. Vi ved fra substitution for ubestemte integraler, at $H(u) = \int g(u)du$ for $u = f(x)$ er en stamfunktion til $g(f(x))f'(x)$. Dermed fås per Korollar 1.2.20, at

$$\int_a^b g(f(x))f'(x)dx = [H(f(x))]_a^b = H(f(b)) - H(f(a)) = \int_{f(a)}^{f(b)} g(u)du,$$

hvilket viser det ønskede. ■

Eksempel 1.2.27. Vi bestemmer

$$\int_0^{\sqrt{\pi}} \cos(x^2) x dx.$$

Lad $u = x^2$. Da er $du = 2x dx$, så

$$\int_0^{\sqrt{\pi}} \cos(x^2) x dx = \int_0^{\pi} \frac{1}{2} \cos(u) du = \frac{1}{2} [\sin(u)]_0^{\pi} = \frac{1}{2}(0 - 0) = 0.$$

○

Den bestemte form af partiel integration er som følger.

Sætning 1.2.28 (Partiel integration). *Lad f og g være kontinuerte funktioner. Lad F være en stamfunktion til f og G en stamfunktion til g . Da gælder*

$$\begin{aligned} \int_a^b F(x)g(x)dx &= [F(x)G(x)]_a^b - \int_a^b G(x)f(x)dx \\ &= F(b)G(b) - F(a)G(a) - \int_a^b G(x)f(x)dx. \end{aligned}$$

Bevis. Overlades som øvelse. ■

Eksempel 1.2.29. Vi ønsker at bestemme

$$\int_0^{\pi} x \cos(x) dx.$$

Med partiel integration fås

$$\int_0^{\pi} x \cos(x) dx = [x \sin(x)]_0^{\pi} - \int_0^{\pi} \sin(x) dx = 0 - [-\cos(x)]_0^{\pi} = -2.$$

○

Partiel integration (og substitution for den sags skyld) virker også med grænser såsom ∞ og $-\infty$. Lad os tage et (faktisk ret vigtigt!) eksempel.

KAPITEL 1. MATEMATISKE FORUDSÆTNINGER

Eksempel 1.2.30. Vi ønsker at bestemme

$$\int_0^\infty xe^{-x} dx.$$

Vi benytter partiel integration som følger.

$$\int_0^\infty xe^{-x} dx = [-xe^{-x}]_0^\infty - \int_0^\infty -e^{-x} dx.$$

Idet e^{-x} aftager hurtigere end enhver potens af x vokser, som $x \rightarrow \infty$, vil første led blive $0 - 0 = 0$. Dermed fås

$$\int_0^\infty xe^{-x} dx = -[e^{-x}]_0^\infty = 0 - (-1) = 1.$$

○

Leibniz' regel

En omformulering af Analysens Fundamentalsætning er

$$\frac{d}{dt} \int_a^t f(x) dx = f(t).$$

Dette er kun sandt, såfremt f ikke afhænger af t , altså den variabel vi differentierer med hensyn til. Leibniz' integrationsregel (eller blot Leibniz' regel) udvider dette resultat til tilfældet, hvor f både afhænger af x og t , og hvor integralgrænserne er mere generelle funktioner af t . Beviset for sætningen kan springes over ved første gennemlæsning og står i slutningen af dette afsnit.

Sætning 1.2.31 (Leibniz' regel). *Lad $f(x, t)$, $a(t)$ og $b(t)$ være differentiable funktioner med kontinuerte afdede. Da har vi*

$$\frac{d}{dt} \int_{a(t)}^{b(t)} f(x, t) dx = f(b(t), t) \cdot b'(t) - f(a(t), t) \cdot a'(t) + \int_{a(t)}^{b(t)} \frac{d}{dt} f(x, t) dx.$$

I mange henseender er det tilstrækkeligt at betragte følgende specialtilfælde af Leibniz' regel.

Korollar 1.2.32. *Lad $f(x, t)$ være differentiabel med kontinuert afdelt. Da gælder*

$$\frac{d}{dt} \int_a^t f(x, t) dx = f(t, t) + \int_a^t \frac{d}{dt} f(x, t) dx$$

og

$$\frac{d}{dt} \int_t^a f(x, t) dx = -f(t, t) + \int_t^a \frac{d}{dt} f(x, t) dx.$$

Eksempel 1.2.33. Vi har

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \int_0^t 2 \cos(t) x^2 dx &= 2 \cos(t) t^2 + \int_0^t \frac{d}{dt} 2 \cos(t) x^2 dx = 2 \cos(t) t^2 - \int_0^t 2 \sin(t) x^2 dx \\ &= 2 \cos(t) t^2 - 2 \sin(t) \left[\frac{1}{3} x^3 \right]_0^t = 2 \cos(t) t^2 - \frac{2}{3} \sin(t) t^3, \end{aligned}$$

hvor vi har benyttet Leibniz' regel, som den står i ovenstående korollar. I dette tilfælde kan vi dog også opnå samme resultat ved produktreglen og Analysens Fundamentalsætning. Vi har nemlig

$$\frac{d}{dt} \int_0^t 2 \cos(t) x^2 dx = 2 \frac{d}{dt} \left(\cos(t) \int_0^t x^2 dx \right) = -2 \sin(t) \frac{1}{3} t^2 + 2 \cos(t) t^2.$$

○

Eksempel 1.2.34. Lad os tage et eksempel, hvor vi ikke blot kan bruge produktreglen. Vi ønsker at bestemme

$$\frac{d}{dt} \int_0^{t^2} e^{tx^2} dx.$$

Bemærk, at vi ikke blot kan "snyde" og beregne integralet. Selvom e^{tx^2} har en stamfunktion mht. x (idet funktionen er kontinuert), kan denne ikke opskrives eksplisit. Dermed er vi nødt til at benytte Leibniz' regel som følger:

$$\frac{d}{dt} \int_0^{t^2} e^{tx^2} dx = e^{t^5} \frac{d}{dt} t^2 + \int_0^{t^2} \frac{d}{dt} e^{tx^2} dx = 2te^{t^5} + \int_0^{t^2} x^2 e^{tx^2} dx.$$

Vi kan dog ikke gøre så meget mere for at forsimple funktionen. \circ

Eksempel 1.2.35. Vi ønsker at udregne

$$\frac{d}{dt} \int_{-t}^t \cos(tx) dx.$$

Ved at benytte Leibniz' regel, får vi

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \int_{-t}^t \cos(tx) dx &= \cos(t^2) - (-\cos(-t^2)) + \int_{-t}^t \frac{d}{dt} \cos(tx) dx \\ &= 2\cos(t^2) + \int_{-t}^t -\sin(tx) x dx = 2\cos(t^2) - \int_{-t}^t \sin(tx) x dx \end{aligned}$$

idet cos er en lige funktion. Det sidste integral håndteres med partiell integration som følger.

$$\begin{aligned} \int_{-t}^t \sin(tx) x dx &= \left[-\frac{1}{t} \cos(tx)x \right]_{-t}^t - \int_{-t}^t -\frac{1}{t} \cos(tx) dx \\ &= -\cos(t^2) - \cos(-t^2) + \frac{1}{t} \left[\frac{1}{t} \sin(tx) \right]_{-t}^t \\ &= -2\cos(t^2) + \frac{1}{t^2} (\sin(t^2) - \sin(-t^2)) \\ &= -2\cos(t^2) + \frac{2\sin(t^2)}{t^2}, \end{aligned}$$

og indsættes dette i forrige resultat, fås det endelige svar

$$\frac{d}{dt} \int_{-t}^t \cos(tx) dx = 4\cos(t^2) - \frac{2\sin(t^2)}{t^2}.$$

Lad os tjekke med standardmetoder, at dette giver mening.

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \int_{-t}^t \cos(tx) dx &= \frac{d}{dt} \left[\frac{1}{t} \sin(tx) \right]_{-t}^t = \frac{d}{dt} \left(\frac{1}{t} (\sin(t^2) - \sin(-t^2)) \right) \\ &= \frac{d}{dt} \frac{2\sin(t^2)}{t} = \frac{4t\cos(t^2)t - 2\sin(t^2)}{t^2} \\ &= 4\cos(t^2) - \frac{2\sin(t^2)}{t^2}. \end{aligned}$$

Dette var faktisk markant nemmere. Udover at vi ikke behøvede Leibniz' regel, slap vi også for at benytte partiell integration. \circ

Det sidste eksempel viser, at Leibniz' regel ikke behøver at være den nemmeste fremgangsmåde. Ikke desto mindre viser Leibniz' regel sig at være virkelig nyttig til mange

KAPITEL 1. MATEMATISKE FORUDSÆTNINGER

andre sammenhænge, hvor integranden ikke er givet eksplisit. Vi skal bl.a. se, hvor nytig Leibniz kan være i projektet om Markovkæder og livsforsikring.

Vi slutter denne præsentation af Leibniz' regel ved at give et bevis for sætningen. Dette er primært henvendt til de særligt interesserede læsere. Vi får brug for følgende resultater.

Sætning 1.2.36 (Middelværdisætningen). *Lad f være en kontinuert funktion på $[a, b]$, som er differentiabel på (a, b) , hvor $a < b$. Da eksisterer der et $c \in (a, b)$, sådan at*

$$f'(c) = \frac{f(b) - f(a)}{b - a}.$$

Bevis. Beviset bygger på en del matematisk analyse, vi ikke har præsenteret og udelades derfor. ■

Korollar 1.2.37. *Betrægt intervallet $[a, b]$ for $a < b$ og en kontinuert funktion f på dette interval. Da eksisterer der et $c \in [a, b]$, sådan at*

$$\int_a^b f(t)dt = f(c)(b - a).$$

Bevis. Lad

$$F(x) = \int_d^x f(t)dt$$

for et tal d . Dermed er $F'(x) = f(x)$ per Analysens Fundamentalsætning. Per Middelværdisætningen eksisterer et $c \in (a, b)$, sådan at

$$F'(c) = \frac{F(b) - F(a)}{b - a} = \frac{1}{b - a} \int_a^b f(t)dt.$$

Vi ser nu, at $F'(c) = f(c)$ og ved at gange igennem med $b - a$ fås det ønskede. ■

Bevis for Sætning 1.2.31. Per definitionen af den afledte, har vi

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \int_{a(t)}^{b(t)} f(x, t)dx &= \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta t} \left(\int_{a(t+\Delta t)}^{b(t+\Delta t)} f(x, t + \Delta t)dx - \int_{a(t)}^{b(t)} f(x, t)dx \right) \\ &= \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta t} \left(\int_{a(t+\Delta t)}^{a(t)} f(x, t + \Delta t)dx + \int_{a(t)}^{b(t)} f(x, t + \Delta t)dx \right) \\ &\quad + \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta t} \left(\int_{b(t)}^{b(t+\Delta t)} f(x, t + \Delta t)dx - \int_{a(t)}^{b(t)} f(x, t)dx \right) \\ &= \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta t} \left(\int_{b(t)}^{b(t+\Delta t)} f(x, t + \Delta t)dx - \int_{a(t)}^{a(t+\Delta t)} f(x, t + \Delta t)dx \right) \\ &\quad + \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta t} \int_{a(t)}^{b(t)} (f(x, t + \Delta t) - f(x, t))dx. \end{aligned}$$

Vi kan nu benytte ovenstående korollar til at bestemme (for ethvert t) $c_{a,t}$ imellem $a(t)$ og $a(t + \Delta t)$ og $c_{b,t}$ mellem $b(t)$ og $b(t + \Delta t)$, sådan at

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt} \int_{a(t)}^{b(t)} f(x, t) dx &= \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta t} ((b(t + \Delta t) - b(t))f(c_{b,t}, t + \Delta t) - (a(t + \Delta t) - a(t))f(c_{a,t}, t + \Delta t)) \\
&\quad + \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta t} \int_{a(t)}^{b(t)} (f(x, t + \Delta t) - f(x, t)) dx. \\
&= \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{b(t + \Delta t) - b(t)}{\Delta t} \lim_{\Delta t \rightarrow 0} f(c_{b,t}, t + \Delta t) - \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{a(t + \Delta t) - a(t)}{\Delta t} \lim_{\Delta t \rightarrow 0} f(c_{a,t}, t + \Delta t) \\
&\quad + \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \int_{a(t)}^{b(t)} \frac{f(x, t + \Delta t) - f(x, t)}{\Delta t} dx \\
&= b'(t)f(b(t), t) - a'(t)f(a(t), t) + \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \int_{a(t)}^{b(t)} \frac{f(x, t + \Delta t) - f(x, t)}{\Delta t} dx.
\end{aligned}$$

Vi mangler kun at bestemme det sidste led. Idet den afledte af f er kontinuert, er integranden begrænset i et lukket og begrænset område af planen. Ved at vælge Δt tæt nok på nul, kan vi nøjes med at betragte integranden på et lukket og begrænset område, og dermed er det tilladt at trække grænseværdien ind i integralet. Vi får dermed

$$\lim_{\Delta t \rightarrow 0} \int_{a(t)}^{b(t)} \frac{f(x, t + \Delta t) - f(x, t)}{\Delta t} dx = \int_{a(t)}^{b(t)} \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{f(x, t + \Delta t) - f(x, t)}{\Delta t} dx = \int_{a(t)}^{b(t)} \frac{d}{dt} f(t, x) dx.$$

Beviset er hermed færdigt. ■

Opsummering

$\int f(x) dx$	$f(x)$	$f'(x)$	Note
$ax + c$	a	0	
$\frac{x^{n+1}}{n+1} + c$	x^n	nx^{n-1}	$n \neq -1$
$x \ln(x) - x + c$	$\ln(x)$	$1/x$	
$\ln(x) + c$	$1/x$	$-1/x^2$	
$e^x + c$	e^x	e^x	
$\sin(x) + c$	$\cos(x)$	$-\sin(x)$	
$-\cos(x) + c$	$\sin(x)$	$\cos(x)$	

Figur 1.8: Tabel over en række kendte funktioner, deres afledte og deres stamfunktioner.

KAPITEL 1. MATEMATISKE FORUDSÆTNINGER

Her er en samling af de vigtigste regneregler for stamfunktioner/ubestemte integraler. Lad i det følgende f og g være funktioner, kontinuerte eller differentiable efter behov.

1. Linearitet: Lad a, b være konstanter. Da er

$$\int a f(x) + b g(x) dx = a \int f(x) dx + b \int g(x) dx.$$

2. Substitution: Vi har

$$\int g(f(x)) f'(x) dx = \int g(u) du, \quad u = f(x).$$

3. Partiel integration: Hvis F og G er stamfunktioner til hhv. f og g , da har vi

$$\int F(x) g(x) dx = F(x) G(x) - \int G(x) f(x) dx.$$

4. Stamfunktioner er unikke op til addition med en konstant: Hvis F_1 og F_2 begge er stamfunktioner til den samme funktion f , da er $F_1 - F_2 = c$, hvor c er en konstant.

Her er de mest centrale regneregler for bestemte integraler. Lad i det følgende f og g være funktioner, kontinuerte eller differentiable efter behov og a, b tal.

1. Linearitet: Lad c og d være konstanter. Da er

$$\int_a^b cf(x) + dg(x) dx = c \int_a^b f(x) dx + d \int_a^b g(x) dx.$$

2. Indskudsreglen: Lad a, b, c være punkter. Da gælder

$$\int_a^b f(x) dx = \int_a^c f(x) dx + \int_c^b f(x) dx.$$

3. Ombytning af grænser skifter fortegn: Der gælder

$$\int_a^b f(x) dx = - \int_b^a f(x) dx.$$

4. Integralet er nul over étpunktsmængder: Der gælder

$$\int_a^a f(x) dx = 0.$$

5. Substitution: Vi har

$$\int_a^b g(f(x)) f'(x) dx = \int_{f(a)}^{f(b)} g(u) du.$$

6. Partiel integration: Vi har

$$\int_a^b F(x) g(x) dx = F(b)G(b) - F(a)G(a) - \int_a^b G(x) f(x) dx.$$

Opgaver

• **Opgave 1.2.1:**

Find en stamfunktion til følgende funktioner:

- 1) $x^2 + x + 1$.
- 2) $3x^4 - 2x^2 + 5x - 11$.
- 3) $\cos(x) + 2\sin(x)$.
- 4) $e^x + 4x^3$.
- 5) $10/x$.

•• **Opgave 1.2.2:**

Find en stamfunktion til følgende funktioner:

- 1) e^{-x} .
- 2) $2 + 2\tan(x)^2$.
- 3) $3x^2 + 2\ln(x)$.
- 4) $\sin(5x)$.
- 5) $1/x^2$.

•• **Opgave 1.2.3: Substitution**

Find en stamfunktion til følgende funktioner:

- 1) $e^x \cos(e^x)$.
- 2) $x^2 \cos(x^3)$.
- 3) $\cos(x) \cos(\sin(x))$.
- 4) $\sin(x)^4 \cos(x)$.
- 5) $(x^3 + 10x^2 - 5x + 2)^3 (3x^2 + 20x - 5)$.
- 6) $\cos(x) \sin(x)$.

•• **Opgave 1.2.4: Partiel integration**

Find en stamfunktion til følgende funktioner:

- 1) xe^x .
- 2) $x^2 \sin(x)$.
- 3) $x \ln(x)$.
- 4) $x^2 \ln(x)$.
- 5) $x^2 e^x$.
- 6) $e^x \cos(x)$.

••• **Opgave 1.2.5: Blandet øvelse**

Find en stamfunktion til følgende funktioner (i nogle af opgaverne kan det være en god idé at genkalde sig de vigtige logaritmeregneregler):

- 1) $\ln(x)/x^2$.
- 2) $\frac{e^x + e^{-x}}{2}$.
- 3) $\ln(x^2)$.
- 4) $\ln(2x)$.
- 5) $\cos(x) \ln(2 \sin(x))$.
- 6) $x \cos(e^x)$.

• **Opgave 1.2.6:**

Udregn følgende:

- 1)

$$\int_{-2}^3 x^2 dx.$$

2)

$$\int_0^1 x^3 - 4x^2 + x - 1 dx.$$

3)

$$\int_0^{\ln(3)} e^x dx.$$

4)

$$\int_{-2}^1 x^2 + 2x + 4 dx.$$

5)

$$\int_1^3 \frac{1}{x} dx.$$

6)

$$\int_0^\pi \sin(x) dx.$$

•• Opgave 1.2.7:

Udregn følgende bestemte integraaler. Det kan være smart at bruge nogle resultater fra tidligere opgaver.

1)

$$\int_0^{\pi/2} \cos(x) + 2 \sin(x) dx.$$

2)

$$\int_0^\pi \sin(x)^4 \cos(x) dx.$$

3)

$$\int_3^4 \frac{1}{x^2} dx.$$

4)

$$\int_0^{\pi/2} e^x \cos(x) dx.$$

5)

$$\int_0^a 1 dx.$$

6)

$$\int_1^e x^2 \ln(x) dx.$$

•• Opgave 1.2.8:

Udregn følgende ugentlige integraler:

1)

$$\int_0^\infty e^{-x} dx.$$

2)

$$\int_5^\infty \frac{1}{x^2} dx.$$

••• Opgave 1.2.9:

Beregn

$$\int_0^\infty x^2 e^{-x} dx.$$

Vink: Det er nødvendigt at bruge partiel integration flere gange.

••• Opgave 1.2.10:Bestem de p , hvorom det gælder, at

$$\int_1^\infty \frac{1}{x^p} dx$$

er endelig. Vink: Der skal deles op i en række tilfælde for p .**•• Opgave 1.2.11:**

Benyt Leibniz' regel til at finde et udtryk for

$$\frac{d}{dt} \int_{\log(t)}^{t^3} f(x, t) dx,$$

hvor $f(x, t)$ er en vilkårlig funktion.**•• Opgave 1.2.12:**

Udregn

$$\frac{d}{dt} \int_0^t e^{x+t} dx$$

både med og uden Leibniz' regel.

••• Opgave 1.2.13:

Udregn

$$\frac{d}{dt} \int_0^t e^{xt} dx$$

både med og uden Leibniz' regel.

1.3 Sandsynlighedsteori

Udfaldsrum og sandsynligheder

Definition 1.3.1. Et *udfaldsrum* for et eksperiment er en mængde, altså en samling af elementer, som vi kalder *udfald*. Vi skriver et udfaldsrum på formen $\{a_1, a_2, \dots\}$, hvor a_1, a_2 osv. betegner de forskellige udfald. Vi betegner som regel et udfaldsrum med bogstavet Ω , kaldet *omega*.

Eksempel 1.3.2. Lad os se på et simpelt eksempel, nemlig et møntkast. Der er to udfald, nemlig K (krone) og P (plat). Dermed er udfaldsrummet lig

$$\Omega = \{K, P\}.$$

Hvad hvis vi har to møntkast? Da har vi fire muligheder, og vi kan skrive dem som KK, KP, PK, PP . F.eks. svarer PK til, at første kast er plat og andet kast krone. Dermed er udfaldsrummet for dette eksperiment lig

$$\Omega = \{KK, KP, PK, PP\}.$$

○

Eksempel 1.3.3. Et andet typisk eksempel er med terningekast. Lad os sige, at vi slår med en sekssidet terning. Da er udfaldsrummet lig

$$\Omega = \{1, 2, 3, 4, 5, 6\}.$$

○

Til tider er man interesseret i at betragte bestemte samlinger af udfald. Disse kaldes hændelser.

Definition 1.3.4. Lad Ω være udfaldsrummet for et eksperiment. En samling af udfald A i Ω kaldes en *hændelse* eller en *begivenhed*. Vi skriver til tider $A \subseteq \Omega$, når A er en hændelse. Hændelsen uden nogle begivenheder kaldes den *tomme begivenhed* og betegnes \emptyset .

Lad os se på eksemplet med at slå plat eller krone to gange, altså $\Omega = \{KK, KP, PK, PP\}$. Vi kunne være interesseret i hændelsen at slå mindst én plat. Denne hændelse beskrives matematisk med

$$A = \{KP, PK, PP\}.$$

Med terningekastet fra før, $\Omega = \{1, 2, 3, 4, 5, 6\}$, ville

$$A = \{2, 4, 6\}$$

være hændelsen at slå et lige tal. Inden vi kan tale om sandsynligheder, er vi nødt til at tale om, hvordan man kan relatere hændelser til hinanden.

Definition 1.3.5. Lad A og B være hændelser i udfaldsrummet Ω .

1. Hændelsen $A \cup B$ består af alle de udfald, der ligger enten i A eller i B (eller i begge to). $A \cup B$ kaldes *foreningen* af A og B .
2. Hændelsen $A \cap B$ består af alle de udfald, der ligger i både A og B . $A \cap B$ kaldes *snittet* af A og B .
3. Hændelsen $A \setminus B$ består af alle de udfald, der ligger i A , men ikke i B . $A \setminus B$ kaldes *differensen* af A med B .
4. Hændelsen $\Omega \setminus A$ kaldes *komplementet* til A .

Ser vi igen på $\Omega = \{1, 2, 3, 4, 5, 6\}$, kunne vi f.eks. betragte $A = \{2, 4, 6\}$ og $B = \{1, 2, 3\}$. Da har vi

$$\begin{aligned} A \cup B &= \{1, 2, 3, 4, 6\} \\ A \cap B &= \{2\} \\ A \setminus B &= \{4, 6\} \\ B \setminus A &= \{1, 3\} \\ \Omega \setminus A &= \{1, 3, 5\} \end{aligned}$$

Vi er nu klar til at definere sandsynligheder.

Definition 1.3.6. Lad Ω være et udfaldsrum. En *sandsynlighed* \mathbb{P} på Ω tildeler alle hændelser $A \subseteq \Omega$ et tal i $[0, 1]$. Derudover skal den opfylde følgende egenskaber:

1. $\mathbb{P}(\Omega) = 1$
2. Hvis A og B er hændelser med $A \cap B = \emptyset$, da vil $\mathbb{P}(A \cup B) = \mathbb{P}(A) + \mathbb{P}(B)$.

Man skal tænke på $\mathbb{P}(A) = 0$ som, at A har 0% sandsynlighed for at indtræffe, mens $\mathbb{P}(A) = 1$ betyder, at A har 100% sandsynlighed for at ske. Kravet $\mathbb{P}(\Omega) = 1$ siger blot, at der sker noget med 100% sandsynlighed. Ω ville jo også være et dårligt udfaldsrum, hvis alle mulige udfald ikke var medtaget. Lad os se på et konkret eksempel, nemlig terningekastet fra før. En fair terning svarer til

$$\mathbb{P}(\{1\}) = \mathbb{P}(\{2\}) = \mathbb{P}(\{3\}) = \mathbb{P}(\{4\}) = \mathbb{P}(\{5\}) = \mathbb{P}(\{6\}) = \frac{1}{6}.$$

Hvad er sandsynligheden for at slå 1 eller 3? Den er

$$\mathbb{P}(\{1, 3\}) = \mathbb{P}(\{1\}) + \mathbb{P}(\{3\}) = \frac{1}{6} + \frac{1}{6} = \frac{1}{3},$$

hvor vi bruger regel to, idet $\{1\} \cup \{3\} = \{1, 3\}$, og de to begivenheder ikke overlapper. Regel to fortæller os, at det er tilstrækkeligt at specificere, hvad sandsynligheden er på hvert udfald.

I sandsynlighedsteori er man ofte interesseret i at kende en sandsynlighed, hvor man ved, at en bestemt hændelse er indtruffet. Hvad er f.eks. sandsynligheden for at slå en sekser på en sekssidet terning, hvis man ved, at man har slået et lige tal? Svaret burde være $1/3$, da halvdelen af mulighederne, nemlig 1, 3 og 5, er udelukket. Vi formaliserer en betinget sandsynlighed som følger.

Definition 1.3.7. Lad Ω være et udfaldsrum med en sandsynlighed P . Lad A og B være hændelser med $\mathbb{P}(B) \neq 0$. Den *betingede sandsynlighed for A givet B* er defineret ved

$$\mathbb{P}(A | B) = \frac{\mathbb{P}(A \cap B)}{\mathbb{P}(B)}.$$

Lad os tage den forrige overvejelse som eksempel. Hvad er sandsynligheden for at slå 6, hvis man ved, at man har slået et lige tal? Lad $A = \{6\}$ og $B = \{2, 4, 6\}$. Da er den ønskede sandsynlighed lig $\mathbb{P}(A | B)$. Vi udregner

$$\mathbb{P}(A | B) = \frac{\mathbb{P}(A \cap B)}{\mathbb{P}(B)} = \frac{\mathbb{P}(\{6\})}{\mathbb{P}(\{2, 4, 6\})} = \frac{1/6}{1/2} = \frac{1}{3}$$

som forventet. Lad os tage et andet eksempel. Betragt $\Omega = \{KK, KP, PK, PP\}$, altså at vi slår plat eller krone to gange. Hvad er sandsynligheden for at slå krone to gange, hvis vi ved, at vi slår mindst én krone? Lad $A = \{KK\}$ være hændelsen, at vi slår

KAPITEL 1. MATEMATISKE FORUDSÆTNINGER

krone to gange og $B = \{KK, KP, PK\}$ hændelsen, at vi slår mindst én krone. Da får vi sandsynligheden

$$\mathbb{P}(A | B) = \frac{\mathbb{P}(\{KK\})}{\mathbb{P}(\{KK, KP, PK\})} = \frac{1/4}{3/4} = \frac{1}{3},$$

som vi også ville forvente. Lad os tage endnu et eksempel.

Eksempel 1.3.8. En familie har to børn. Udfaldsrummet for kønnene på børnene er

$$\Omega = \{DD, DP, PD, PP\},$$

hvor D står for dreng og P for pige. Rækkefølgen indikerer, hvilket barn der er født først. Vi antager, at alle udfald er lige sandsynlige. Dermed er sandsynligheden for, at begge børn er piger, lig

$$\mathbb{P}(\{PP\}) = \frac{1}{4}.$$

Hvad hvis vi ved, at én af børnene er en pige? Da får vi

$$\mathbb{P}(\{PP\} | \{DP, PD, PP\}) = \frac{\mathbb{P}(\{PP\})}{\mathbb{P}(\{DP, PD, PP\})} = \frac{1/4}{3/4} = \frac{1}{3}.$$

Hvad hvis vi ved, at den ældste af børnene er en pige? Dette svarer til at betinge på begivenheden $\{PP, DP\}$. Dermed har vi

$$\mathbb{P}(\{PP\} | \{PP, DP\}) = \frac{\mathbb{P}(\{PP\})}{\mathbb{P}(\{PP, DP\})} = \frac{1/4}{2/4} = \frac{1}{2},$$

så nu er sandsynligheden større end før. Hvorfor er sandsynligheden større blot fordi, vi ved, at den ældste er en pige? Det er fordi, vi udelukker endnu et udfald, nemlig PD . Dermed må sandsynligheden være større for, at de begge er piger. \circ

Er der en relation mellem de to størrelser $\mathbb{P}(A | B)$ og $\mathbb{P}(B | A)$? De er i hvert fald ikke det samme. I skal finde et eksempel i opgaverne. Generelt har vi følgende sammenhæng.

Sætning 1.3.9 (Bayes sætning). *For hændelser A og B gælder*

$$\mathbb{P}(A | B) = \frac{\mathbb{P}(B | A)\mathbb{P}(A)}{\mathbb{P}(B)}.$$

Bevis. Per definition har vi

$$\mathbb{P}(A | B) = \frac{\mathbb{P}(A \cap B)}{\mathbb{P}(B)} \quad \text{og} \quad \mathbb{P}(B | A) = \frac{\mathbb{P}(A \cap B)}{\mathbb{P}(A)}.$$

Vi har altså $\mathbb{P}(A \cap B) = \mathbb{P}(B | A)\mathbb{P}(A)$. Indsætter vi dette udtryk på $\mathbb{P}(A \cap B)$'s plads i definitionen for $\mathbb{P}(A | B)$, får vi det ønskede resultat. \blacksquare

Konceptet *uafhængighed* er af stor vigtighed i sandsynlighedsteori, og vi har faktisk allerede benyttet det flere gange i beregninger ovenover.

Definition 1.3.10. Begivenhederne A_1, A_2, \dots, A_n siges at være *uafhængige*, hvis

$$\mathbb{P}(A_1 \cap A_2 \cap \dots \cap A_n) = \mathbb{P}(A_1)\mathbb{P}(A_2) \cdots \mathbb{P}(A_n).$$

Eksempel 1.3.11. Lad os slå med en sekssidet terning tre gange. Lad A, B og C være begivenhederne, at vi slår 1 hhv. første, anden og tredje gang, vi slår med terningen. Hvis de tre terningkast er uafhængige, er A, B og C uafhængige. Dermed er sandsynligheden for at slå 1 i alle tre slag lig

$$\mathbb{P}(A \cap B \cap C) = \mathbb{P}(A)\mathbb{P}(B)\mathbb{P}(C) = \frac{1}{6^3}.$$

\circ

Stokastiske variable

I praksis er det ikke så smart at skulle angive et udfaldsrum eksplisit. Vi vil hellere tildele hvert udfald et tal. Dette gøres gennem stokastiske variable.

Definition 1.3.12. En *stokastisk variabel* X er en funktion, der tildeler alle værdier i et udfaldsrum Ω et reelt tal.

Eksempel 1.3.13. Lad os som eksempel se på plat eller krone, $\Omega = \{K, P\}$. Vi kunne da se på den stokastiske variabel X givet ved

$$X(K) = 1 \quad \text{og} \quad X(P) = 0.$$

Begivenheden $\{K\}$ er da det samme som begivenheden, at $X = 1$. Vi skriver dette som $\{K\} = (X = 1)$. Tilsvarende er $\{P\} = (X = 0)$. I dette eksempel har vi mere eller mindre bare omskrevet de oprindelige udfald, men stokastiske variable er langt mere fleksible. \circ

Eksempel 1.3.14. Lad os se på et mere kompliceret eksempel, nemlig to kast med en sekssidet terning. Der er i alt 36 udfald. Vi har nemlig seks udfald for hvert kast. Vi beskriver et udfald som et par (i, j) , hvor i er øjnene i første kast og j er øjnene i andet kast. Dermed bliver Ω alle par af disse, hvor i og j løber fra 1 til 6. Lad nu X være den stokastiske variabel, der angiver summen af de to kast

$$X(i, j) = i + j.$$

Hvad er $\mathbb{P}(X = 7)$, altså sandsynligheden for, at X er lig 7? Følgende udfald giver en sum på 7:

$$(1,6), (2,5), (3,4), (4,3), (5,2), (6,1),$$

som er seks ud af 36 udfald, så

$$\mathbb{P}(X = 7) = \frac{6}{36} = \frac{1}{6}.$$

\circ

En stokastisk variabel er tilfældig per konstruktion. Vi ved jo ikke på forhånd, hvilken værdi den vil tage. Derfor er det bedste, vi kan håbe på, at beskrive *fordelingen* for X .

Definition 1.3.15. For en stokastisk variabel X kaldes funktionen

$$F_X(x) = \mathbb{P}(X \leq x)$$

for *fordelingsfunktionen* for X .

Før vi kan arbejde videre med stokastiske variable, inddeler vi dem i to klasser, såkaldte *kontinuerte* stokastiske variable og *diskrete* stokastiske variable.

Definition 1.3.16. En stokastisk variabel X kaldes *diskret*, hvis X antager et *tælleligt* antal værdier, dvs. X med sandsynlighed 1 antager én af værdierne x_1, x_2, \dots . X kaldes *kontinuert*, hvis X ikke er diskret.

Lemma 1.3.17. *Antag, at X har fordelingsfunktion F_X . Da gælder*

$$\mathbb{P}(X = x) = F_X(x) - \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} F_X(x - \varepsilon).$$

Specielt hvis F_X er kontinuert, må vi have $\mathbb{P}(X = x) = 0$ for alle $x \in \mathbb{R}$.

KAPITEL 1. MATEMATISKE FORUDSÆTNINGER

Bevis. Vi har

$$\begin{aligned}\mathbb{P}(X = x) &= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \mathbb{P}(x - \varepsilon < X \leq x) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} (\mathbb{P}(X \leq x) - \mathbb{P}(X \leq x - \varepsilon)) \\ &= F_X(x) - \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} F_X(x - \varepsilon).\end{aligned}$$

Dette viser første del af lemmaet. Hvis F_X er kontinuert, skal vi have

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} F_X(x - \varepsilon) = F_X(x),$$

og den anden påstand følger af den første. ■

Bemærkning 1.3.18. For alle fordelingsfunktioner gælder, at

$$F_X(x) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} F_X(x + \varepsilon).$$

Denne egenskab kaldes *højrekontinuitet*. Altså kan man i ovenstående lemma nøjes med at antage, at F_X er *venstrekontinuert* i anden påstand.

Proposition 1.3.19. *Lad F_X være en fordelingsfunktion for en stokastisk variabel X . Da har vi*

$$\lim_{x \rightarrow \infty} F_X(x) = 1 \quad \text{og} \quad \lim_{x \rightarrow -\infty} F_X(x) = 0.$$

Bevis. Vi har

$$\lim_{x \rightarrow \infty} F_X(x) = \lim_{x \rightarrow \infty} \mathbb{P}(X \leq x) = \mathbb{P}(X \leq \infty) = 1.$$

Den anden påstand vises tilsvarende. ■

Alle ovenstående eksempler på stokastiske variable er diskrete. Lad os tage et kontinuert eksempel.

Eksempel 1.3.20. Lad X være såkaldt *uniformt* fordelet på $[0, 1]$. Dette betyder, at alle værdier i $[0, 1]$ er lige sandsynlige. F.eks. er $\mathbb{P}(X \in [0, 1/2]) = \mathbb{P}(X \in [1/4, 3/4]) = 1/2$. Formelt kan vi beskrive X gennem fordelingsfunktionen F_X givet ved

$$F_X(x) = \begin{cases} 0, & x < 0 \\ x, & 0 \leq x \leq 1 \\ 1, & x > 1 \end{cases}$$

Vi kan dermed formelt verificere ovenstående sandsynligheder. F.eks. er

$$\mathbb{P}(X \in [0, 1/2]) = \mathbb{P}(X \leq 1/2) = F_X(1/2) = \frac{1}{2}.$$

Ift. den anden sandsynlighed, så har vi

$$\mathbb{P}(X \in [1/4, 3/4]) = \mathbb{P}(X \leq 3/4) - \mathbb{P}(X < 1/4).$$

Vi har $\mathbb{P}(X < 1/4) = \mathbb{P}(X \leq 1/4) - \mathbb{P}(X = 1/4)$, og $\mathbb{P}(X = 1/4) = 0$, hvilket følger af lemmaet ovenover. Altså har vi

$$\mathbb{P}(X \in [1/4, 3/4]) = F_X(3/4) - F_X(1/4) = \frac{3}{4} - \frac{1}{4} = \frac{1}{2}.$$

○

Definition 1.3.21. Lad X være en stokastisk variabel

- Hvis X er diskret, kaldes funktionen

$$f_X(x) = \mathbb{P}(X = x)$$

for *tætheden* af X .

- Hvis X er kontinuert, og vi kan skrive

$$F_X(x) = \int_{-\infty}^x f_X(t)dt,$$

da kaldes f_X tætheden for X .

Bemærkning 1.3.22. Det er ikke altid tilfældet, at tætheden eksisterer for en kontinuert stokastisk variabel. Vi skal dog ikke bekymre os så meget om dette, og alle eksempler i dette kapitel på kontinuerte variable vil have tætheden.

Lad os arbejde videre med eksemplet fra før med de to terningekast. Her er tætheden givet ved

$$f_X(x) = \begin{cases} \frac{1}{36}, & x = 2, x = 12 \\ \frac{2}{36}, & x = 3, x = 11 \\ \frac{3}{36}, & x = 4, x = 10 \\ \frac{4}{36}, & x = 5, x = 9 \\ \frac{5}{36}, & x = 6, x = 8 \\ \frac{6}{36}, & x = 7 \\ 0, & \text{ellers} \end{cases}$$

Når vi skal arbejde med diskrete stokastiske variable, er sumtegn en nødvendighed. Hvis sumtegn ikke sidder på rygraden, er der baggrundsmateriale i Appendiks A.

Proposition 1.3.23. *Lad X være en diskret stokastisk variabel, der kan tage værdierne x_1, x_2, \dots . Da er f_X en ikke-negativ funktion, og vi har*

$$\sum_{i=1}^{\infty} f_X(x_i) = 1.$$

Bevis. f_X er en ikke-negativ funktion, da sandsynligheder altid er større end eller lig nul. Da x_1, x_2, \dots udgør alle de værdier, X kan antage, må der være sandsynlighed 1 for, at X antager en af disse værdier. Dermed har vi

$$1 = \mathbb{P}((X = x_1) \cup (X = x_2) \cup \dots) = \sum_{i=1}^{\infty} \mathbb{P}(X = x_i),$$

fordi ingen af begivenhederne $(X = x_i)$ overlapper. Dette beviser sætningen. ■

For en diskret variabel er tætheden en meget naturlig størrelse. Tætheden i et punkt er blot sandsynligheden for, at vores variabel tager den værdi. Det er mindre oplagt, hvordan en tæthed for en kontinuert stokastisk variabel skal fortolkes. Én mulig fortolkning er følgende. Lad dx være meget tæt på nul. Da er

$$\mathbb{P}(X \in [x, x + dx]) \approx f_X(x)dx$$

Vi tager et eksempel.

Eksempel 1.3.24. Antag, at X har tætheden

$$f_X(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-x^2/2}.$$

Denne fordeling kaldes *standardnormalfordelingen* og er muligvis den vigtigste fordeling i sandsynlighedsteori. Ønsker vi at finde f.eks. $\mathbb{P}(X \in [1, 3])$, skal vi først "beregne" fordelingsfunktionen

$$\Phi(x) = \int_{-\infty}^x f_X(t)dt$$

KAPITEL 1. MATEMATISKE FORUDSÆTNINGER

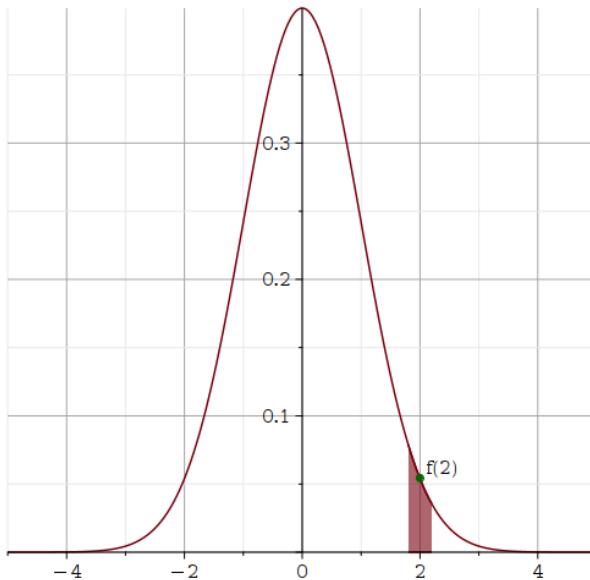
og derefter udregne $\mathbb{P}(X \in [1, 3]) = \Phi(3) - \Phi(1)$. Problemet er, at man ikke kan bestemme et eksplizit udtryk for Φ , så man er nødt til at benytte numeriske metoder. Vi skal arbejde med dette i næste kapitel. Dog kan vi benytte vores tæthed til at lave approksimationer til $\mathbb{P}(X \in [a, b])$, så længe $[a, b]$ ikke er for stort. F.eks. er

$$\mathbb{P}(X \in [1.8, 2.2]) \approx f_X(2)(2.2 - 1.8) = 0.4f_X(2) = 0.02159638660$$

I Maple kan vi approksimere Φ meget præcist og få det "eksakte" resultat

$$\mathbb{P}(X \in [1.8, 2.2]) = \Phi(2.2) - \Phi(1.8) = 0.0220268716.$$

Resultaterne ses at være forholdsvis tæt på hinanden. En illustration af tætheden er herunder med området arealet under tætheden i intervallet $[1.8, 2.2]$ tegnet ind.



Figur 1.9: Tætheden $f(x)$ for standardnormalfordelingen med arealet under tætheden i intervallet $[1.8, 2.2]$ skitseret. Dette areal er netop sandsynligheden $\mathbb{P}(X \in [1.8, 2.2])$, når X har tæthed f .

Den generelle normalfordeling med middelværdi μ og varians σ^2 (vi skal studere begreberne middelværdi og varians i næste afsnit) har tæthed

$$f_X(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} e^{-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}}.$$

Vi slutter med at bemærke, at en normalfordelt stokastisk variabel X kan tage værdier på hele den reelle akse. ○

Eksempel 1.3.25. En af de simpleste, men vigtigste kontinuerede fordelinger er *eksponentiafordelingen*. Eksponentiafordelingen med rate $\lambda > 0$ har tæthed givet ved

$$f_X(x) = \begin{cases} \lambda e^{-\lambda x}, & x > 0 \\ 0, & \text{ellers} \end{cases}$$

Vi bemærker, at denne fordeling har alt sin sandsynlighedsmasse på den positive reelle akse. Det betyder, at hvis X har tæthed f_X , da er $\mathbb{P}(X \leq 0) = 0$. I dette tilfælde kan vi bestemme fordelingsfunktionen eksplizit. Den er givet ved

$$F_X(x) = \int_{-\infty}^x f_X(t) dt = \int_0^x \lambda e^{-\lambda t} dt = [-e^{-\lambda t}]_0^x = 1 - e^{-\lambda x}.$$

Lad X have tæthed $f_X(x)$. Da har vi f.eks.

$$\mathbb{P}(X \in [1, 4]) = (1 - e^{-\lambda}) - (1 - e^{-4\lambda}) = e^{-\lambda} - e^{-4\lambda}.$$

○

Eksempel 1.3.26. Betragt igen tilfældet med den uniforme variabel X fra før med fordelingsfunktionen

$$F_X(x) = \begin{cases} 0, & x < 0 \\ x, & 0 \leq x \leq 1 \\ 1, & x > 1 \end{cases}$$

Tætheden fås ved at differentiere F_X og er givet ved

$$f_X(x) = \begin{cases} 1, & 0 \leq x \leq 1 \\ 0, & \text{ellers} \end{cases}.$$

○

Proposition 1.3.27. *Lad X være en kontinuert stokastisk variabel med tæthed f_X . Da har vi*

$$\int_{-\infty}^{\infty} f_X(t)dt = 1.$$

Hvis også f_X er kontinuert, da skal f_X være ikke negativ.

Bevis. Første påstand følger af Proposition 1.3.19, idet

$$\int_{-\infty}^{\infty} f_X(t)dt = \lim_{x \rightarrow \infty} F_X(x) = 1.$$

Antag nu, at f_X er kontinuert, men at $f_X(x) < 0$ for et $x \in \mathbb{R}$. Da findes et lille område omkring x , $(x - \delta, x + \delta)$ for et $\delta > 0$, sådan at $f(y) < 0$ for alle $y \in (x - \delta, x + \delta)$. Men da er

$$\mathbb{P}(X \in (x - \delta, x + \delta)) = \int_{x-\delta}^{x+\delta} f_X(x)dx < 0,$$

hvilket er en modstrid, thi sandsynligheder ikke kan være negative. ■

Middelværdier og varians

Vi har indtil nu set to måder at beskrive fordelinger på, nemlig tætheder og fordelingsfunktioner. I dette afsnit skal vi se på to måder at opsummere en fordeling med et enkelt tal, nemlig *middelværdien* og *variansen* af en fordeling.

Definition 1.3.28. Middelværdien af en stokastisk variabel X er defineret således.

- Hvis X er diskret med værdier x_1, x_2, \dots , da definerer vi middelværdien af X til

$$\mathbb{E}[X] = \sum_{i=1}^{\infty} \mathbb{P}(X = x_i)x_i.$$

- Hvis X er kontinuert med tæthed f_X , da definerer vi middelværdien af X til

$$\mathbb{E}[X] = \int_{-\infty}^{\infty} xf_X(x)dx.$$

Middelværdien kan man fortolke som den forventede værdi af den stokastiske variabel. Det er også her "E" kommer fra i definitionen, nemlig det engelske "expectation".

Eksempel 1.3.29. Betragt et terningkast med en sekssidet terning. Da tager X værdierne 1, 2, 3, 4, 5 og 6, alle med sandsynlighed $1/6$. Ergo bliver middelværdien

$$\mathbb{E}[X] = \frac{1}{6} \cdot 1 + \frac{1}{6} \cdot 2 + \cdots + \frac{1}{6} \cdot 6 = \frac{21}{6} = \frac{7}{2}.$$

○

Eksempel 1.3.30. Betragt igen den uniforme variabel X med tæthed

$$f_X(x) = \begin{cases} 1, & 0 \leq x \leq 1 \\ 0, & \text{ellers} \end{cases}$$

Vi får her middelværdien til

$$\mathbb{E}[X] = \int_0^1 x \cdot 1 dx = \frac{1}{2}.$$

Dette er netop midtpunktet af intervallet $[0, 1]$, hvilket ikke er overraskende, da alle værdier er lige sandsynlige for denne fordeling. ○

Det er naturligt at spørge sig selv, hvordan man beregner middelværdien af en transformert variabel. Det viser sig heldigvis at være ganske let.

Sætning 1.3.31. *Lad X være en stokastisk variabel og g en funktion.*

- *Hvis X er diskret med værdier x_1, x_2, \dots , da gælder*

$$\mathbb{E}[g(X)] = \sum_{i=1}^{\infty} \mathbb{P}(X = x_i) g(x_i).$$

- *Hvis X er kontinuert med tæthed f_X , da gælder*

$$\mathbb{E}[g(X)] = \int_{-\infty}^{\infty} g(x) f_X(x) dx.$$

Denne sætning bruges ofte i forbindelse med beregning af *momenter*, et vigtigt begreb, vi gennemgår nu.

Definition 1.3.32. For en stokastisk variabel X kalder vi $\mathbb{E}[X^k]$ det k 'te moment af X . Middelværdien $\mathbb{E}[(X - \mathbb{E}[X])^k]$ kaldes det k 'te *centraliserede moment* af X . Det centraliserede andetmoment $\mathbb{E}[(X - \mathbb{E}[X])^2]$ kaldes *variansen* af X og betegnes $\text{Var}[X]$.

Variansen fortæller noget om, i hvilken grad X er koncentreret omkring sin middelværdi. En *høj* varians betyder, at fordelingen er meget spredt ud. Af samme årsag kalder man $\sqrt{\text{Var}[X]}$ for *spredningen* for X . Følgende regneregler for middelværdier og varianser er uundværlig i mange henseender.

Proposition 1.3.33. *Lad X og Y være stokastiske variable og a og b reelle tal.*

1. *Middelværdien opfylder linearitet, dvs.*

$$\mathbb{E}[aX + bY] = a\mathbb{E}[X] + b\mathbb{E}[Y].$$

2. $\text{Var}[aX] = a^2 \text{Var}[X].$
3. $\text{Var}[X + a] = \text{Var}[X].$
4. $\text{Var}[X] = \mathbb{E}[X^2] - \mathbb{E}[X]^2.$

Bevis. 1. Dette følger direkte af definitionen af middelværdien, idet både summer og integraler opfylder linearitet.

2. Fra definitionen af varians samt linearitet af middelværdien fås

$$\begin{aligned}\text{Var}[aX] &= E[(aX - E[aX])^2] = E[(aX - aE[X])^2] \\ &= E[a^2(X - E[X])^2] = a^2E[(X - E[X])^2] = a^2\text{Var}[X].\end{aligned}$$

3. Overlades som øvelse til læseren.

4. Vi udregner

$$\begin{aligned}\text{Var}[X] &= E[(X - E[X])^2] = E[X^2 + E[X]^2 - 2XE[X]] \\ &= E[X^2] + E[E[X]^2] - E[2XE[X]].\end{aligned}$$

Husk, at middelværdien er et tal, og derfor giver linearitet

$$\text{Var}[X] = E[X^2] + E[X]^2 - 2E[X]E[X] = E[X^2] - E[X]^2$$

som ønsket. ■

Eksempel 1.3.34. Lad os beregne variansen for et terningkast med en sekssidet terning X . Med Sætning 1.3.31 får vi

$$\mathbb{E}[X^2] = \frac{1}{6} \cdot 1^2 + \frac{1}{6} \cdot 2^2 + \dots + \frac{1}{6} \cdot 6^2 = \frac{91}{6}.$$

Vi husker, at $\mathbb{E}[X] = 7/2$. Dermed bliver variansen

$$\text{Var}(X) = \mathbb{E}[X^2] - \mathbb{E}[X]^2 = \frac{91}{6} - \left(\frac{7}{2}\right)^2 = \frac{91}{6} - \frac{49}{4} = \frac{182}{12} - \frac{147}{12} = \frac{35}{12}.$$

○

Eksempel 1.3.35. Vi ser igen på eksponentialfordelingen med rateparameter $\lambda > 0$. Vi beregner middelværdien og variansen. Med partiel integration findes stamfunktionen

$$-xe^{-\lambda x} - \frac{1}{\lambda}e^{-\lambda x}$$

til $\lambda xe^{-\lambda x}$. Dermed fås

$$E[X] = \int_0^\infty x\lambda e^{-\lambda x} dx = \lim_{N \rightarrow \infty} \left(-Ne^{-\lambda N} - \frac{1}{\lambda}e^{-\lambda N} - \left(-0e^{-\lambda 0} - \frac{1}{\lambda}e^{-\lambda 0} \right) \right)$$

og idéet $-Ne^{-\lambda N}$ går mod nul, som N går mod uendelig, er ovenstående lig $1/\lambda^2$. Med partiel integration kan vi finde stamfunktionen

$$-x^2e^{-\lambda x} - \frac{2}{\lambda}xe^{-\lambda x} - \frac{2}{\lambda^2}e^{-\lambda x},$$

og en udregning som ovenover giver

$$E[X^2] = \int_0^\infty x^2\lambda e^{-\lambda x} dx = \frac{2}{\lambda^2}.$$

Ergo giver propositionen ovenover, at

$$\text{Var}[X] = E[X^2] - E[X]^2 = \frac{2}{\lambda^2} - \left(\frac{1}{\lambda}\right)^2 = \frac{1}{\lambda^2}.$$

○

KAPITEL 1. MATEMATISKE FORUDSÆTNINGER

Eksempel 1.3.36. I dette eksempel beregner vi middelværdien og variansen for normalfordelingen, dvs. for X med tætheden

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} e^{-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}},$$

hvor $\mu \in \mathbb{R}$ og $\sigma^2 > 0$ er parametre. Vi starter med at finde middelværdien. Vi har

$$\mathbb{E}[X] = \int_{-\infty}^{\infty} xf(x)dx = \int_{-\infty}^{\infty} x \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} e^{-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}} dx.$$

Vi får idéen at lave følgende omskrivning:

$$\mathbb{E}[X] = \int_{-\infty}^{\infty} (x - \mu)f(x)dx + \int_{-\infty}^{\infty} \mu f(x)dx = \int_{-\infty}^{\infty} (x - \mu) \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} e^{-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}} dx + \mu.$$

Vi har her benyttet, at f integrerer til 1. Betragt første led. Vi benytter nu substitutionen $u = (x - \mu)/\sigma$. Da har vi $du = \frac{1}{\sigma}dx$ og dermed fås

$$\begin{aligned} \int (x - \mu) \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} e^{-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}} dx &= \int \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} ue^{-\frac{u^2}{2}} du \\ &= \int \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} e^{-v} dv = -\frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} e^{-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}}. \end{aligned}$$

Dermed fås

$$\mathbb{E}[X] = \mu + \left[-\frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} e^{-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}} \right]_{-\infty}^{\infty} = \mu.$$

Dette forklarer også, hvorfor vi tidligere refererede til μ som middelværdien. Tidligere kaldte vi også σ^2 for variansen, og man kan også vise, at vi ganske rigtigt har $\text{Var}[X] = \sigma^2$. \circ

Eksempel 1.3.37. I dette eksempel introducerer vi en ny diskret fordeling, nemlig *Poissonfordelingen*. En variabel N med denne fordeling tager værdierne $0, 1, 2, \dots$ og har tætheden

$$f_N(n) = \mathbb{P}(N = n) = e^{-\lambda} \frac{\lambda^n}{n!},$$

hvor $\lambda > 0$ er en fast parameter. Lad os starte med at fastlægge, at dette faktisk er en fordeling. Vi ser, at $f_N(n) \geq 0$ for alle $n \in \mathbb{N}_0$. Derudover har vi

$$\sum_{n=0}^{\infty} f_N(n) = e^{-\lambda} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\lambda^n}{n!} = e^{-\lambda} e^{\lambda} = 1,$$

idet vi genkender Taylorrækken for eksponentialekfunktionen (Taylorpolynomier er et emne i et senere kapitel). Vi kan beregne middelværdien i denne fordeling ved

$$\begin{aligned} \mathbb{E}[N] &= \sum_{n=0}^{\infty} ne^{-\lambda} \frac{\lambda^n}{n!} = \lambda \sum_{n=1}^{\infty} e^{-\lambda} \frac{\lambda^{n-1}}{(n-1)!} \\ &= \lambda \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\lambda} \frac{\lambda^n}{n!} = \lambda, \end{aligned}$$

hvor vi har lavet et indekseringsskift og til slut genkendt ovenstående sum, som vi ved er 1. Vi kan beregne andenmomentet således.

$$\begin{aligned} \mathbb{E}[N^2] &= \sum_{n=0}^{\infty} n^2 e^{-\lambda} \frac{\lambda^n}{n!} = \lambda \sum_{n=1}^{\infty} ne^{-\lambda} \frac{\lambda^{n-1}}{(n-1)!} = \lambda \sum_{n=0}^{\infty} (n+1) \frac{\lambda^n}{n!} \\ &= \lambda \left(\sum_{n=0}^{\infty} n \frac{\lambda^n}{n!} + \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\lambda^n}{n!} \right) = \lambda(\lambda + 1) = \lambda^2 + \lambda \end{aligned}$$

Til slut har vi genbrugt ovenstående resultat for middelværdien. Altså bliver variansen

$$\text{Var}[N] = \mathbb{E}[N^2] - \mathbb{E}[N]^2 = \lambda^2 + \lambda - \lambda^2 = \lambda.$$

Poissonfordelingen har altså den interessante egenskab, at middelværdien er lig variansen. \circ

Inden vi bevæger os videre til betingede fordelinger, vil vi kort nævne tætheder for flerdimensionelle variable. Disse fungerer, som man ville forvente. For overskuelighedens skyld vil vi kun præsentere begreberne for todimensionelle variable (X, Y) . Altig generaliseres let til tilfældet med n variable, (X_1, \dots, X_n) . Vi nøjes med at se på tilfældet, hvor både X og Y er kontinuerte. I dette tilfælde siger vi, at (X, Y) har tæthed $f_{X,Y}$, hvis der for alle $x, y \in \mathbb{R}$ gælder

$$F_{X,Y}(x, y) = \mathbb{P}(X \leq x, Y \leq y) = \int_{-\infty}^x \int_{-\infty}^y f_{X,Y}(t, s) ds dt = \int_{-\infty}^y \int_{-\infty}^x f_{X,Y}(t, s) dt ds.$$

Ikke overraskende kalder vi $F_{X,Y}(x, y)$ fordelingsfunktionen for (X, Y) . Vi ser, at forholdet mellem tætheden og denne er givet ved

$$\frac{\partial^2}{\partial x \partial y} F_{X,Y}(x, y) = f_{X,Y}(x, y).$$

Hvis (X, Y) har tæthed, har hver af de to (marginale) variable X og Y også tæthed.

Proposition 1.3.38. *Antag, at (X, Y) har tæthed $f_{X,Y}$. Da har både X og Y tæthed, og deres tætheder er givet ved*

$$f_X(x) = \int_{-\infty}^{\infty} f_{X,Y}(x, y) dy \quad \text{og} \quad f_Y(y) = \int_{-\infty}^{\infty} f_{X,Y}(x, y) dx.$$

I ord, tætheden for den ene marginal findes ved at integrere over den anden variabel i den samlede tæthed.

Bevis. Vi har

$$\mathbb{P}(X \leq x) = \mathbb{P}(X \leq x, Y \leq \infty) = \int_{-\infty}^x \int_{-\infty}^{\infty} f_{X,Y}(t, s) ds dt,$$

hvilket netop viser, at X har den ønskede tæthed. Beviset er det samme i tilfældet med Y . \blacksquare

Præcist som i tilfældet med én dimension, skal en tæthed for flere variable være ikke-negativ og integrere til én.

Eksempel 1.3.39. Lad (U_1, U_2) være uniformt fordelte på $[0, 1]^2$. Denne fordeling har tæthed

$$f_{U_1, U_2}(u_1, u_2) = \begin{cases} 1, & (u_1, u_2) \in [0, 1]^2 \\ 0, & \text{ellers} \end{cases}$$

Vi kan finde den marginale tæthed for U_1 ved at bruge propositionen ovenover.

$$f_{U_1}(u_1) = \int_{-\infty}^{\infty} f_{U_1, U_2}(u_1, u_2) du_2 = \int_0^1 1_{[0,1]}(u_1) du_2 = 1_{[0,1]}(u_1),$$

hvor

$$1_{(0,1)}(u_1) = \begin{cases} 1, & u_1 \in [0, 1] \\ 0, & \text{ellers} \end{cases}$$

KAPITEL 1. MATEMATISKE FORUDSÆTNINGER

Vi kan altså konkludere, at U_1 er uniformt fordelt på $[0, 1]$. Dette er næppe overraskende. Den samme konklusion holder naturligvis for U_2 . En funktion på formen 1_A for en mængde A som ovenover kaldes en *indikatorfunktion*. Generelt definerer vi indikatorfunktionen ved

$$1_A(x) = \begin{cases} 1, & x \in A \\ 0, & \text{ellers} \end{cases}$$

○

Vi kan beregne middelværdier med flerdimensionelle fordelinger som forventet.

Sætning 1.3.40. *Lad (X, Y) have tæthed $f_{X,Y}$, og lad $g : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$ være en funktion af to variable. Da har vi*

$$\mathbb{E}[g(X, Y)] = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} g(x, y) f_{X,Y}(x, y) dx dy.$$

Integrationsrækkefølgen kan også uden videre ombyttes.

Vi er nu klar til at introducere betingede fordelinger.

Betingede fordelinger

Ligesom vi har betingede sandsynligheder, har vi betingede fordelinger. Vi vælger at definere disse ud fra tætheder, da dette er den simpleste tilgang.

Definition 1.3.41. Lad (X, Y) være stokastiske variable.

- Antag, at (X, Y) er diskret. Da definerer vi den *betingede tæthed* $f_{Y|X=x}(x)$ for Y givet $X = x$ ved

$$f_{Y|X=x}(y) = \mathbb{P}(Y = y | X = x) = \frac{\mathbb{P}(X = x, Y = y)}{\mathbb{P}(X = x)}.$$

- Antag, at (X, Y) er kontinuert med tæthed $f_{X,Y}$. Da definerer vi den betingede tæthed $f_{Y|X=x}$ ved

$$f_{Y|X=x}(y) = \frac{f_{X,Y}(x, y)}{f_X(x)} = \frac{f_{X,Y}(x, y)}{\int_{-\infty}^{\infty} f_{X,Y}(x, y) dy}.$$

I begge tilfælde er den betingede tæthed naturligvis kun defineret dør, hvor nævneren er forskellig fra nul.

Man kan fortolke $f_{X|Y=y}$ som tætheden for fordelingen af X , givet at vi ved, at $Y = y$. Dermed er fortolkningen så godt som identisk med den for betingede sandsynligheder.

Eksempel 1.3.42. Lad os betragte tilfældet med (U_1, U_2) uniformt fordelt på $[0, 1]^2$ fra før. Da er tætheden for U_1 givet ved $U_2 = u_2$ givet ved

$$f_{U_1|U_2=u_2}(u_1) = \frac{1_{[0,1]}(u_1)1_{[0,1]}(u_2)}{1_{[0,1]}(u_2)} = 1_{[0,1]}(u_1),$$

dvs. blot den marginale tæthed f_{U_1} fra før. ○

Eksempel 1.3.43. Et mere interessant eksempel opstår, når (X, Y) er uniformt fordelte på enhedscirklen. Denne fordeling har tæthed

$$f_{X,Y}(x, y) = \begin{cases} 1/\pi, & x^2 + y^2 \leq 1 \\ 0, & \text{ellers} \end{cases}$$

Værdien $1/\pi$ er valgt for at sikre, at tæthedens integrerer til 1. Vi kan bestemme den marginale tæthed f_X for X som følger. For en fast værdi af x , kan y løbe mellem $-\sqrt{1-x^2}$ og $\sqrt{1-x^2}$ (lav en tegning!). Dermed får vi den marginale tæthed

$$f_X(x) = \int_{-\sqrt{1-x^2}}^{\sqrt{1-x^2}} \frac{1}{\pi} dy = \frac{2}{\pi} \sqrt{1-x^2}$$

for $x \in [-1, 1]$ og nul ellers. Dermed bliver den betingede tæthed for Y givet $X = x$ lig

$$\begin{aligned} f_{Y|X=x}(y) &= \begin{cases} \frac{1/\pi}{f_X(x)}, & -\sqrt{1-x^2} \leq y \leq \sqrt{1-x^2} \\ 0, & \text{ellers} \end{cases} \\ &= \begin{cases} \frac{1}{2\sqrt{1-x^2}}, & -\sqrt{1-x^2} \leq y \leq \sqrt{1-x^2} \\ 0, & \text{ellers} \end{cases} \end{aligned}$$

Vi kan genkende dette som den uniforme fordeling på intervallet $[-\sqrt{1-x^2}, \sqrt{1-x^2}]$. Dette er ikke så overraskende. Hvis (X, Y) er uniform over enhedscirklen, og vi ved, at $X = x$, da må Y være uniform indenfor det interval, $x^2 + Y^2 \leq 1$ tillader, hvilket netop er $[-\sqrt{1-x^2}, \sqrt{1-x^2}]$. \circ

Det første eksempel er ikke som det andet. I det første eksempel viste det sig, at den betingede tæthed blot var lig den marginale, mens den anden var meget afhængig af værdien x , som X var antaget at være lig. Dette fører til definitionen af uafhængighed for stokastiske variable.

Definition 1.3.44. Lad (X, Y) være stokastiske variable med tæthed $f_{X,Y}$. Da siger vi, at X og Y er *uafhængige*, såfremt

$$\mathbb{P}(X \leq x, Y \leq y) = \mathbb{P}(X \leq x)\mathbb{P}(Y \leq y)$$

for alle $x, y \in \mathbb{R}$.

Proposition 1.3.45. Lad (X, Y) være et par af stokastiske variable (diskrete eller kontinuerte) med tæthed $f_{X,Y}$. Da er X og Y uafhængige hvis og kun hvis

$$f_{X,Y}(x, y) = f_X(x)f_Y(y).$$

Bevis. Vi nøjes med at bevise resultatet for tilfældet, hvor X og Y er kontinuerte. Antag, at X og Y er uafhængige. Da har vi per antagelse, at

$$\begin{aligned} \mathbb{P}(X \leq x, Y \leq y) &= \mathbb{P}(X \leq x)\mathbb{P}(Y \leq y) = \int_{-\infty}^x f_X(t)dt \int_{-\infty}^y f_Y(s)ds \\ &= \int_{-\infty}^x \int_{-\infty}^y f_X(t)f_Y(s)dtds, \end{aligned}$$

hvilket viser, at $f_X(x)f_Y(y)$ er tæthedens for (X, Y) . Den omvendte implikation overlades det til jer at vise. \blacksquare

Proposition 1.3.46 (Bayes sætning for fordelinger). For (X, Y) med tæthed $f_{X,Y}(x, y)$ har vi relationen

$$f_{Y|X=x}(y) = \frac{f_{X|Y=y}(x)f_Y(y)}{f_X(x)}.$$

I skal se flere eksempler på flerdimensionelle tætheder i opgaverne. Inden vi går videre til betingede middelværdier, skal vi kort se på samspillet mellem uafhængighed og momenter.

Proposition 1.3.47. Lad X og Y være uafhængige. Da gælder følgende.

1. $\mathbb{E}[g(X)h(Y)] = \mathbb{E}[g(X)]\mathbb{E}[h(Y)]$ for alle funktioner g og h .

$$2. \text{ } \text{Var}[X + Y] = \text{Var}[X] + \text{Var}[Y].$$

Bevis. Antag, at X og Y er kontinuerte med tæthed $f_{X,Y}$. Beviset for det diskrete tilfælde er helt analogt. Ved at benytte Sætning 1.3.40 samt Proposition 1.3.45 fås

$$\begin{aligned} \mathbb{E}[g(X)h(Y)] &= \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} g(x)h(y)f_{X,Y}(x,y)dxdy \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} g(x)f_X(x)h(y)f_Y(y)dxdy \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} g(x)f_X(x)dx \int_{-\infty}^{\infty} h(y)f_Y(y)dy \\ &= \mathbb{E}[g(X)]\mathbb{E}[h(Y)]. \end{aligned}$$

Dette beviser første punkt. For at vise andet punkt, kan vi bruge punkt 1 med funktionen $g(x) = x^2$ til at få $\mathbb{E}[(XY)^2] = \mathbb{E}[X^2]\mathbb{E}[Y^2]$. Dermed har vi

$$\begin{aligned} \text{Var}[X + Y] &= \mathbb{E}[(X + Y)^2] - \mathbb{E}[X + Y]^2 \\ &= \mathbb{E}[X^2] + \mathbb{E}[Y^2] + \mathbb{E}[2(XY)^2] - (\mathbb{E}[X] + \mathbb{E}[Y])^2 \\ &= \mathbb{E}[X^2] + \mathbb{E}[Y^2] + 2\mathbb{E}[X^2]\mathbb{E}[Y^2] - \mathbb{E}[X]^2 - \mathbb{E}[Y]^2 - 2\mathbb{E}[X]^2\mathbb{E}[Y]^2 \\ &= \mathbb{E}[X^2] - \mathbb{E}[X]^2 + \mathbb{E}[Y^2] - \mathbb{E}[Y]^2 \\ &= \text{Var}[X] + \text{Var}[Y]. \end{aligned}$$

■

Det er klart, at ovenstående resultat generaliserer til tilfældet med n variable.

Betingede middelværdier

Betingede middelværdier defineres blot som middelværdien i den betingede fordeling.

Definition 1.3.48. Lad X og Y være stokastiske variable.

- Hvis X og Y er diskrete, og Y antager værdierne y_1, y_2, \dots , da definerer vi den *betingede middelværdi* af Y givet $X = x$ ved

$$\mathbb{E}[Y \mid X = x] = \sum_{i=1}^{\infty} \mathbb{P}(Y = y_i \mid X = x)y_i.$$

- Hvis Y er kontinuert med betinget tæthed $f_{Y|X=x}$, da definerer vi tilsvarende den betingede middelværdi til

$$\mathbb{E}[Y \mid X = x] = \int_{-\infty}^{\infty} y f_{Y|X=x}(y) dy.$$

Ligesom almindelige middelværdier, er betingede middelværdier givet *begivenheden* $X = x$ et tal. Mere specifikt er $\mathbb{E}[Y \mid X = x]$ en funktion af x , og vi kan derfor skrive $g(x) = \mathbb{E}[Y \mid X = x]$ for en passende funktion g . Denne funktion er deterministisk. Hvis vi nu indsætter X på x 's plads i $g(x)$, får vi den betingede middelværdi givet den stokastiske variabel X .

Definition 1.3.49. Lad $g(x) = \mathbb{E}[Y \mid X = x]$. Funktionen $g(X)$ kaldes den *betingede middelværdi af Y givet X* og betegnes $\mathbb{E}[Y \mid X]$.

Det er virkelig vigtigt at understrege, at $\mathbb{E}[Y \mid X = x]$ er et tal, mens $\mathbb{E}[Y \mid X]$ er en stokastisk variabel (en funktion af X , nemlig $g(X)$). Notationen gør det ikke mindre forvirrende, men det er desværre konventionen i sandsynlighedsteori at bruge notationen

sådan her.

Betingede middelværdier er særdeles nyttige. I statistik udgør de grundlaget for en række modeller. I er muligvis bekendte med den *lineære model*, hvor data $(X_1, Y_1), \dots, (Y_n, X_n)$ er antaget at opfylde

$$Y_i = \beta X_i + \varepsilon_i,$$

hvor ε_i er en *støjvariabel* uafhængig af Y_i med $\mathbb{E}[\varepsilon_i | X_i]$. Da har vi netop $\mathbb{E}[Y_i | X_i] = \beta X_i$.

Eksempel 1.3.50. Antag, at vi har en stokastisk variabel X , som er eksponentialfordelt med parameter 1, dvs. X har tæthed

$$f_X(x) = e^{-x}$$

for $x > 0$ og nul ellers. Antag, at Y betinget på $X = x$ er normalfordelt med middelværdi x og varians 1, dvs

$$f_{Y|X=x}(y) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{(y-x)^2}{2}}.$$

Vi ved, at middelværdien i normalfordelingen med parametre $\mu \in \mathbb{R}$ og $\sigma^2 > 0$ er μ . Dermed må vi have

$$\mathbb{E}[Y | X = x] = x.$$

Det følger herfra, at $\mathbb{E}[Y | X] = X$. Begge disse svar kunne vi uden problemer være nået frem til uden at skrive tæthederne op. Lad os beregne $\mathbb{E}[Y]$. Vi kan bestemme tætheden for Y ved

$$\begin{aligned} f_Y(y) &= \int_{-\infty}^{\infty} f_{X,Y}(x,y) dx = \int_{-\infty}^{\infty} f_{Y|X=x}(y) f_X(x) dx \\ &= \int_0^{\infty} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{(y-x)^2}{2}} e^{-x} dx. \end{aligned}$$

Umiddelbart virker dette integral svært at løse, så vi lader være med at prøve at regne videre. Vi putter i stedet udtrykket ind direkte i definitionen af $\mathbb{E}[Y]$.

$$\mathbb{E}[Y] = \int_{-\infty}^{\infty} y f_Y(y) dy = \int_{-\infty}^{\infty} y \int_0^{\infty} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{(y-x)^2}{2}} e^{-x} dx dy.$$

Vi trækker y ind i det indre integral og bytter rundt på integrationsrækkefølgen. Dette giver

$$\mathbb{E}[Y] = \int_0^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} y \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{(y-x)^2}{2}} e^{-x} dy dx = \int_0^{\infty} e^{-x} \int_{-\infty}^{\infty} y \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{(y-x)^2}{2}} dy dx,$$

og det indre integral er blot middelværdien i en normalfordeling med middelværdi x . Dermed er det indre integral blot x , og vi får

$$\mathbb{E}[Y] = \int_0^{\infty} x e^{-x} dx = 1.$$

Vi bemærker noget overraskende. Dette er netop middelværdien af X , og vi så før, at $X = \mathbb{E}[Y | X]$. \circ

Hvis man kigger eksemplet herover grundigt igennem, så kan man se, at vi slet ikke brugte de konkrete fordelinger til at nå frem til $\mathbb{E}[Y] = \mathbb{E}[\mathbb{E}[Y | X]]$. Noget kunne tyde på, at dette resultat gælder generelt. Det viser sig at være tilfældet, og det er en af de suverænt stærkeste værktøjer i sandsynlighedsteori.

Sætning 1.3.51 (Tårnegenskaben). *Der gælder*

$$\mathbb{E}[Y] = \mathbb{E}[\mathbb{E}[Y | X]].$$

KAPITEL 1. MATEMATISKE FORUDSÆTNINGER

Bevis. Antag, at X og Y er kontinuerte med fælles tæthed $f_{X,Y}$. Tilfældet, hvor variablene er diskrete, bevises helt analogt. Vi har da

$$\begin{aligned}\mathbb{E}[\mathbb{E}[Y | X]] &= \int_{-\infty}^{\infty} \mathbb{E}[Y | X = x] f_X(x) dx = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} y f_{Y|X=x}(y) f_X(x) dy dx \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} y f_Y(y) f_X(x) dx dy = \int_{-\infty}^{\infty} y \int_{-\infty}^{\infty} f_{X,Y}(x, y) dx dy \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} y f_Y(y) dy = \mathbb{E}[Y].\end{aligned}$$

■

Bemærkning 1.3.52. Ovenstående resultat kaldes også *Loven om itererede middelværdier*, *Loven om betingede middelværdier*, *Adams lov*, *Loven om total middelværdi* for ikke at nævne det eksklusivt danske begreb *beting og bland ud*. Kært barn har mange navne, og ovenstående sætning er i sandhed et kært barn!

Eksempel 1.3.53. Antag, at Y er uniformt fordelt på intervallet $[x^2 - 1, x^2 + 1]$ givet $X = x$, hvor X er antaget at være normalfordelt med middelværdi 0 og varians 1. Da har vi $\mathbb{E}[Y | X = x] = x^2$ (midtpunktet af intervallet jævnfør tidligere eksempel). Ergo er $\mathbb{E}[Y | X] = X^2$, og altså har vi per tårnegenskaben, at

$$\mathbb{E}[Y] = \mathbb{E}[\mathbb{E}[Y | X]] = \mathbb{E}[X^2] = \text{Var}[X] + \mathbb{E}[X]^2 = 1 + 0^2 = 1.$$

○

Følgende egenskaber for betingede middelværdier er centrale.

Proposition 1.3.54. *Lad X, Y og Z være stokastiske variable. Da gælder følgende regler for den betingede middelværdi.*

1. *Hvis X og Y er uafhængige, har vi $\mathbb{E}[Y | X] = \mathbb{E}[Y]$.*
2. *For enhver funktion h gælder $\mathbb{E}[h(X)Y | X] = h(X)\mathbb{E}[Y | X]$.*
3. *$\mathbb{E}[aY + bZ | X] = a\mathbb{E}[Y | X] + b\mathbb{E}[Z | X]$ for alle konstanter a og b .*

Bevis. Regel 1. følger direkte af, at hvis X og Y er uafhængige, har vi

$$f_{Y|X=x}(y) = \frac{f_X(x)f_Y(y)}{f_X(x)} = f_Y(y).$$

Dermed stemmer definitionen af $\mathbb{E}[Y]$ og $\mathbb{E}[Y | X = x]$ overens i dette tilfælde. Regel 3 gælder åbenlyst. Ift. regel 2, så har vi

$$\begin{aligned}\mathbb{E}[h(X)Y | X = x] &= \int_{-\infty}^{\infty} h(x)y f_{Y|X=x}(y) dy = h(x) \int_{-\infty}^{\infty} y f_{Y|X=x}(y) dy \\ &= h(x)\mathbb{E}[Y | X = x],\end{aligned}$$

hvilket giver det ønskede ved at sætte X ind på x 's plads. ■

Vi har følgende fortolkninger af de to første regler.

1. Den betingede middelværdi $\mathbb{E}[Y | X = x]$ er vores bedste skøn på værdien af Y , givet at vi ved $X = x$. Hvis X og Y er uafhængige, bidrager informationen $X = x$ ikke med noget viden om Y , og vores bedste skøn bliver dermed $\mathbb{E}[Y]$, ligesom hvis vi intet yderligere information havde til rådighed.
2. Når vi betinger på X , svarer det til at lade som om, at X er kendt. Dermed er $h(X)$ også kendt og kan behandles som en konstant. Og vi ved, at konstanter ganget på en integrand altid kan tages ud af integralet.

Tårnegenskaben er straks sværere at tolke på, og en egentlig forståelse kommer med lidt tid og ikke mindst træning i at benytte den. Vi ved, at $\mathbb{E}[Y]$ er den forventede værdi for Y (uden yderligere information). Udtrykket $\mathbb{E}[\mathbb{E}[Y \mid X]]$ siger, at vi først beregner middelværdien for Y i grupper baseret på X 's værdier. Disse middelværdier vil normalt være forskellige, men på tværs af alle populationer (værdier) for X får vi blot den marginale middelværdi tilbage. Følgende eksempel illustrerer denne tankegang og er klassisk inden for forsikringsmatematik.

Eksempel 1.3.55. Betragt den stokastiske variabel

$$S = \sum_{i=1}^N X_i,$$

hvor N er en diskret stokastisk variabel uafhængig af følgen X_1, X_2, \dots af uafhængige og ensfordelte variable med $X_i \geq 0$ ($S = 0$, hvis $N = 0$). Man kan tænke på X_1, X_2, \dots som skadestørrelserne i en portefølje for et forsikringsselskab og N som antallet af skader. Det er naturligvis tilfældigt, hvor mange skader der indberettes til selskabet, og derfor bør N være stokastisk. Vi er interesserede i at beregne $\mathbb{E}[S]$. Vi kan ikke blot bruge linearitet, da antallet af variable i summen er stokastisk, men vi kan benytte tårnegenskaben! Vi har

$$\mathbb{E}[S \mid N = n] = \mathbb{E} \left[\sum_{i=1}^N X_i \mid N = n \right] = \mathbb{E} \left[\sum_{i=1}^n X_i \mid N = n \right].$$

Idet vi betinger på $N = n$, må vi erstatte N med n over summen. Nu må vi bruge linearitet,

$$\mathbb{E}[S \mid N = n] = \sum_{i=1}^n \mathbb{E}[X_i \mid N = n].$$

Idet N er uafhængig af X_i for alle i , har vi $\mathbb{E}[X_i \mid N = n] = \mathbb{E}[X_i] = \mathbb{E}[X_1]$, hvor sidste lighed skyldes, at alle X_i har samme fordeling og dermed samme middelværdi. Dermed er

$$\mathbb{E}[S \mid N = n] = \sum_{i=1}^n \mathbb{E}[X_1] = n\mathbb{E}[X_1].$$

Altså er $\mathbb{E}[S \mid N] = N\mathbb{E}[X_1]$. Vi kan nu bruge tårnegenskaben og få

$$\mathbb{E}[S] = \mathbb{E}[\mathbb{E}[S \mid N]] = \mathbb{E}[N\mathbb{E}[X_1]] = \mathbb{E}[N]\mathbb{E}[X_1].$$

Dermed er den forventede samlede udgift for selskabet lig forventet antal skader gange den forventede værdi af én skade. Dette virker som et rimeligt resultat. \circ

Opgaver

- **Opgave 1.3.1:**

Du har en firesidet terning, som du slår med én gang. Hvad er udfaldsrummet Ω for eksperimentet? Opskriv hændelsen at slå 3 eller 4.

- **Opgave 1.3.2:**

Betræt en ottesidet terning, altså hvor udfaldsrummet er $\Omega = \{1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8\}$. Lad $A = \{1, 2, 5, 7\}$ og $B = \{2, 4, 5, 6\}$. Bestem følgende hændelser:

1. $A \cup B$
2. $A \cap B$
3. $A \setminus B$
4. $B \setminus A$
5. $\Omega \setminus A$

- **Opgave 1.3.3:**

Betræt udfaldsrummet for at slå plat eller krone to gange, nemlig $\Omega = \{KK, KP, PK, PP\}$. Opskriv hændelsen at slå krone mindst én gang. Bestem sandsynligheden for denne hændelse.

- **Opgave 1.3.4:**

Du har en pose med 5 kugler. To af dem er blå, to af dem er røde, og en er grøn. Alle kugler har samme sandsynlighed for at blive trukket.

1. Du trækker én kugle fra posen. Opskriv udfaldsrummet Ω . Angiv sandsynligheden for hvert udfald.
2. Du trækker nu to kugler med tilbagelægning. Opskriv udfaldsrummet Ω og angiv sandsynligheden for hvert udfald.

- **Opgave 1.3.5:**

Udregn sandsynligheden for at slå 2 med en firesidet terning, såfremt du ved, at du har slået et lige tal. Hvad bliver sandsynligheden, hvis du i stedet betinger på at have slået et ulige tal?

- **Opgave 1.3.6:**

Find et eksempel, der viser, at $P(A | B)$ og $P(B | A)$ ikke behøver at være det samme.

- **Opgave 1.3.7:**

Du har et almindeligt kortspil med 52 kort. Hvad er sandsynligheden for at trække en hjerter 2, hvis du ved, at du trækker et hjerter?

- **Opgave 1.3.8:**

Vis, at for alle hændelser A har vi $P(A | A) = 1$. Kan du give en fortolkning af dette?

- **Opgave 1.3.9: Bernoullifordelingen**

Lad X være *Bernoullifordelt* med succesparameter $p \in (0, 1)$. Sådan en variabel opfylder

$$\mathbb{P}(X = 1) = p \quad \text{og} \quad \mathbb{P}(X = 0) = 1 - p.$$

Altså tager X kun to værdier, nemlig 0 og 1. Vis, at $\mathbb{E}[X] = p$ og $\text{Var}(X) = p(1 - p)$.

• **Opgave 1.3.10:**

Lad X være en stokastisk variabel med $\mathbb{E}[X] = 1$ og $\text{Var}[X] = 2$.

- 1) Hvad er $\mathbb{E}[X^2]$?
- 2) Beregn $\mathbb{E}[X^2 + 4X + 5]$.

•• **Opgave 1.3.11:**

Du har en firesidet terning, som du slår to gange. Lad X være den stokastiske variabel, der angiver summen af de to kast. Opskriv tætheden for X .

•• **Opgave 1.3.12: Paretofordelingen**

Betrægt fordelingsfunktionen

$$F(x) = \begin{cases} 1 - \left(\frac{\kappa}{\kappa+x}\right)^\alpha, & x > 0 \\ 0, & \text{ellers} \end{cases}$$

Denne fordeling kaldes *Paretofordelingen* med parametre $\alpha, \kappa > 0$.

- 1) Vis, at tætheden i denne fordeling er givet ved

$$f(x) = \begin{cases} \frac{\alpha\kappa^\alpha}{(\kappa+x)^{\alpha+1}}, & x > 0 \\ 0, & \text{ellers} \end{cases}$$

- 2) Antag, at $\alpha > 1$. Bestem middelværdien i fordelingen. Hvad sker der i tilfældet $\alpha \leq 1$?
- 3) Antag, at $\alpha > 2$. Bestem andenmomentet og benyt dette til at finde variansen.

•• **Opgave 1.3.13: Den geometriske fordeling**

En diskret stokastisk variabel N kaldes *geometrisk fordelt* med parameter $p \in [0, 1]$, hvis tætheden er givet ved

$$\mathbb{P}(N = n) = p(1-p)^n, \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

Vi minder om følgende identiteter for den geometriske sum:

$$\sum_{n=0}^{\infty} x^n = \frac{1}{1-x} \quad \text{og} \quad \sum_{n=0}^{\infty} nx^{n-1} = \frac{1}{(1-x)^2} \quad \text{for } |x| < 1.$$

- 1) Vis, at ovenstående tæthed er gyldig, dvs. at

$$\sum_{n=0}^{\infty} \mathbb{P}(N = n) = 1.$$

- 2) Vis, at

$$\mathbb{E}[N] = \frac{1-p}{p}.$$

- 3) Ved at bruge identiteten

$$\sum_{n=0}^{\infty} n(n-1)x^{n-2} = \frac{2}{(1-x)^3},$$

vis at

$$\text{Var}[N] = \frac{1-p}{p^2}.$$

4) Giv en fortolkning af denne fordeling. Vink: Tænk på p som sandsynligheden for at slå krone med et møntkast.

•• **Opgave 1.3.14: Den uniforme fordeling**

En kontinuert stokastisk variabel U kaldes *uniformt fordelt* på $[a, b]$ hvis den har en tæthed givet ved

$$f_U(x) = \begin{cases} \frac{1}{b-a}, & a \leq x \leq b \\ 0, & \text{ellers} \end{cases}$$

1) Skitsér tætheden i et koordinatsystem. Giv en forklaring af, hvordan denne variabel opfører sig.

2) Vis, at

$$\int_{-\infty}^{\infty} f_U(x)dx = 1.$$

Vink: Husk, at integralet er nul alle steder, hvor f_U er nul.

3) Vis, at

$$E[U] = \frac{1}{2}(a + b).$$

4) Vis, at

$$\text{Var}[X] = \frac{1}{12}(b - a)^2.$$

•• **Opgave 1.3.15:**

Bevis punkt 3. i Proposition 1.3.33.

•• **Opgave 1.3.16:**

Lad X være en stokastisk variabel. Bevis, at X er konstant hvis og kun hvis $\text{Var}[X] = 0$. Fortolk på dette resultat. Vink: Hvis X er konstant, hvad er så relationen mellem X og $E[X]$?

•• **Opgave 1.3.17:**

Lad X være en stokastisk variabel. Bevis, at det tal c , som minimerer *mean squared error*

$$\text{MSE}(c) = \mathbb{E}[(X - c)^2]$$

er $c = E[X]$. Vink: Skriv $\text{MSE}(c)$ ud og differentier.

•• **Opgave 1.3.18: Kovarians**

For stokastiske variable X og Y definerer vi *kovariansen* til

$$\text{Cov}[X, Y] = \mathbb{E}[(X - E[X])(Y - E[Y])].$$

1) Vis, at $\text{Cov}[X, Y] = E[XY] - E[X]E[Y]$.

2) Vis, at for $a, b \in \mathbb{R}$ konstanter gælder $\text{Cov}[aX, bY] = ab\text{Cov}[X, Y]$ og $\text{Cov}[X + a, Y + b] = \text{Cov}[X, Y]$.

3) Vis, at $\text{Var}[X + Y] = \text{Var}[X] + \text{Var}[Y] + 2\text{Cov}[X, Y]$.

4) Vis, at hvis X og Y er uafhængige, da er $\text{Cov}[X, Y] = 0$. Brug dette til at give et andet bevis for, at $\text{Var}[X + Y] = \text{Var}[X] + \text{Var}[Y]$ for uafhængige X og Y .

5) Lad nu Z og W være andre stokastiske variable og a, b, c, d konstanter. Vis, at

$$\text{Cov}[aX + bY, cW + dZ] = ac\text{Cov}[X, W] + ad\text{Cov}[X, Z] + bc\text{Cov}[Y, W] + bd\text{Cov}[Y, Z].$$

Opgave 1.3.19:

Bevis Proposition 1.3.46.

Opgave 1.3.20:

Lad (X, Y) have tæthed

$$f_{X,Y}(x, y) = \begin{cases} x + y, & (x, y) \in (0, 1)^2 \\ 0, & \text{ellers} \end{cases}$$

1) Vis, at dette er en gyldig tæthed. Dvs. vis, at $f_{X,Y}$ er ikke-negativ og at

$$\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} f_{X,Y}(x, y) dx dy = 1.$$

2) Bestem de marginale tætheder f_X og f_Y .

3) Er X og Y uafhængige?

4) Bestem den betingede tæthed $f_{Y|X=x}$.

Opgave 1.3.21:

Lad (X, Y) have tæthed

$$f_{X,Y}(x, y) = \begin{cases} cxy, & 0 < x < y < 1 \\ 0, & \text{ellers} \end{cases}$$

1) Tegn det område, hvor $f_{X,Y}(x, y) > 0$. Bestem c sådan, at $f_{X,Y}$ er en gyldig tæthed.

2) Bestem de marginale fordelinger f_X og f_Y .

3) Er X og Y uafhængige?

4) Find den betingede tæthed $f_{Y|X=x}$.

Opgave 1.3.22:

Lad $F_{X,Y}$ være fordelingsfunktionen for (X, Y) . Argumentér for, at

$$\mathbb{P}(a_1 \leq X \leq a_2, b_1 \leq Y \leq b_2) = F_{X,Y}(a_2, b_2) - F_{X,Y}(a_1, b_2) + F_{X,Y}(a_1, b_1) - F_{X,Y}(a_2, b_1).$$

Vink: Lav en tegning.

Opgave 1.3.23:

Bevis, at hvis (X, Y) er kontinuerte med tæthed $f_{X,Y}(x, y)$, som opfylder $f_{X,Y}(x, y) = f_X(x)f_Y(y)$, da er X og Y uafhængige.

Opgave 1.3.24:

I denne opgave skal vi blive mere komfortable med indikatorfunktioner. Lad A være en begivenhed. Da definerer vi

$$1_A(x) = \begin{cases} 1, & x \in A \\ 0, & \text{ellers} \end{cases}$$

1) Lad A og B være mængder. Vis, at $1_{A \cap B} = 1_A 1_B$, $1_{A \setminus B} = 1_A - 1_{A \cap B}$ og $1_{A \cup B} = 1_A + 1_B - 1_{A \cap B}$. Vink: Der er fire tilfælde for x ift. A og B .

2) Hvad er tætheden for 1_A ? Vink: $A = (1_A = 1)$.

3) Udregn det k 'te moment $\mathbb{E}[1_A^k]$.

4) Beregn $\text{Var}[1_A]$.

•• **Opgave 1.3.25:**

Antag, at Y givet $X = x$ følger en normalfordeling med parametre x og varians $2x^2$.
 Antag, at $\text{Var}[X] = 1$ og $\mathbb{E}[X] = 0$.

- 1) Bestem $\mathbb{E}[Y | X = x]$ og $\mathbb{E}[Y^2 | X = x]$. Hvad er $\mathbb{E}[Y | X]$ og $\mathbb{E}[Y^2 | X]$?
- 2) Bestem $\mathbb{E}[Y]$ og $\text{Var}[Y]$.

•• **Opgave 1.3.26:**

Lad X_1, \dots, X_n være uafhængige og identisk fordelte variable. Vis, at for alle $i = 1, \dots, n$ gælder

$$\mathbb{E}[X_i | S_n] = \frac{1}{n} S_n,$$

hvor $S_n = X_1 + \dots + X_n$. Vink: Brug linearitet af betingede middelværdier.

•• **Opgave 1.3.27:**

Lad N være Bernoullifordelt med parameter p , se Opgave 1.3.9. Lad X være eksponentielfordelt med parameter $\lambda_0 + \lambda_1 n$ betinget på $N = n$. Definér $Y = (1 + N)X$.

- 1) Vis, at $\mathbb{E}[Y | N] = \lambda(1 + N)N$.
- 2) Beregn $\mathbb{E}[Y]$.
- 3) Lad $x > 0$. Beregn $\mathbb{P}(X \leq x | N = 0)$ og $\mathbb{P}(X \leq x | N = 1)$. Bestem herudfra et udtryk for $\mathbb{P}(X \leq x | N)$.
- 4) Beregn $F_X(x)$. Vink: Tårnegenskaben kan bruges på sandsynligheder, $\mathbb{P}(X \leq x) = \mathbb{E}[\mathbb{P}(X \leq x | N)]$.

•• **Opgave 1.3.28: Blandingsfordelinger**

I denne opgave skal vi betragte såkaldte *blandingsfordelinger* (på engelsk: *mixture distributions*). Disse er defineret således. Lad X og Y være stokastiske variable, og lad I være en stokastisk variabel uafhængig af X og Y med

$$\mathbb{P}(I = 1) = p \quad \text{og} \quad \mathbb{P}(I = 2) = 1 - p$$

for et $p \in (0, 1)$. Da siger

$$Z = 1_{\{I=1\}} X + 1_{\{I=2\}} Y$$

at være en blandingsfordeling af X og Y .

- 1) Vis, at

$$\mathbb{E}[Z] = p\mathbb{E}[X] + (1 - p)\mathbb{E}[Y].$$

- 2) Argumentér for, at der for $z \in \mathbb{R}$ gælder

$$1_{\{Z \leq z\}} = 1_{\{I=1\}} 1_{\{X \leq z\}} + 1_{\{I=2\}} 1_{\{Y \leq z\}}.$$

- 3) Vis, at fordelingsfunktionen F_Z for Z er givet ved

$$F_Z(z) = pF_X(z) + (1 - p)F_Y(z).$$

Vink: Brug forrige delopgave og tårn op med I . Brug herefter uafhængighed.

••• **Opgave 1.3.29: Betinget varians**

I denne opgave indfører vi den *betingede varians*. Denne er givet ved

$$\text{Var}[Y | X] = \mathbb{E}[(Y - \mathbb{E}[Y | X])^2 | X].$$

- 1) Bevis, at

$$\text{Var}[Y | X] = \mathbb{E}[Y^2 | X] - \mathbb{E}[Y | X]^2.$$

2) Antag, at $Y = h(X)$. Vis, at $\text{Var}[Y | X] = 0$. Giv en fortolkning af dette resultat.

3) Vis, at

$$\text{Var}[Y + X | X] = \text{Var}[Y | X].$$

Giv igen en fortolkning af dette resultat.

4) Antag, at Y og X er uafhængige. Vis, at $\text{Var}[Y | X] = \text{Var}[Y]$. Fortolk.

•• **Opgave 1.3.30: Loven om total varians**

Bevis *Loven om total varians*, nemlig

$$\text{Var}[Y] = \mathbb{E}[\text{Var}[Y | X]] + \text{Var}[\mathbb{E}[Y | X]].$$

Vink: Skriv højresiden ud først.

En måde at huske denne regel er gennem det alternative (engelske) navn "Eve's law". Eve idet variansen er lig "Expectation of the Variance plus the Variance of the Expectation".

••• **Opgave 1.3.31:**

Læs eksempel 1.3.55 igen. Der fandt vi ud af, at $\mathbb{E}[S] = \mathbb{E}[N]\mathbb{E}[X_1]$. Brug loven om total varians fra forrige opgave til at vise

$$\text{Var}[S] = \mathbb{E}[N]\text{Var}[X_1] + \mathbb{E}[X_1^2]\text{Var}[N].$$

•• **Opgave 1.3.32:**

Antag, at vi vil minimere

$$\mathbb{E}[(X - g(X))^2]$$

for alle funktioner g . Vis, at det g , som minimerer denne størrelse, er lig $g(X) = \mathbb{E}[Y | X]$.

Vink: Ved at lægge 0 til, har vi

$$\mathbb{E}[(X - g(X))^2] = \mathbb{E}[(X - \mathbb{E}[Y | X] + \mathbb{E}[Y | X] - g(X))^2].$$

Skriv denne størrelse ud.

••• **Opgave 1.3.33: Binomialfordelingen**

I denne opgave introducerer vi *binomialfordelingen*. N siges at være binomialfordelt med parametre $n \in \mathbb{N}$ og $p \in [0, 1]$, hvis N er antallet af succeser i n uafhængige forsøg, hver med sandsynlighed p for succes. Tætheden for N er givet ved

$$f_N(k) = \mathbb{P}(N = k) = \binom{n}{k} p^k (1-p)^{n-k}, \quad k = 0, 1, \dots, n$$

og nul ellers.

1) Vis, at f_N er en gyldig tæthed, dvs. at

$$\sum_{k=0}^n f_N(k) = 1.$$

Vink: Du får brug for Binomialsætningen, Sætning A.22.

2) Argumentér for, at N må have samme fordeling som

$$I_1 + I_2 + \dots + I_n,$$

hvor I_1, \dots, I_n er uafhængige og Bernoullifordelte med succesparameter p (se Opgave 1.3.9).

3) Beregn $\mathbb{E}[N]$.

KAPITEL 1. MATEMATISKE FORUDSÆTNINGER

4) Beregn $\text{Var}[N]$.

••• **Opgave 1.3.34: Lognormalfordelingen**

En stokastisk variabel X siges at være *lognormalfordelt* med parametre $\mu \in \mathbb{R}$ og $\sigma^2 > 0$, hvis $\log(X)$ er normalfordelt med parametre μ og σ^2 .

1) Udled, at tætheden for X er givet ved

$$f_X(x) = \frac{1}{x\sqrt{2\pi\sigma^2}} e^{-\frac{(\log(x)-\mu)^2}{2\sigma^2}}$$

for $x > 0$ og nul ellers.

2) Vis, at

$$\mathbb{E}[X] = e^{\mu + \sigma^2/2}$$

3) Vis, at

$$\text{Var}[X] = (e^{\sigma^2} - 1)e^{2\mu + \sigma^2}.$$

••• **Opgave 1.3.35: Gammafordelingen**

I denne opgaver introducerer vi *gammafordelingen*. For at kunne gøre dette, skal vi først introducere *gammafunktionen* givet ved

$$\Gamma(\alpha) = \int_0^\infty x^{\alpha-1} e^{-x} dx, \quad \alpha > 0.$$

Dette er endnu et eksempel på et integral, der ikke kan løses analytisk. Dog kan man vise en særdeles pæn egenskab, nemlig

$$\Gamma(\alpha + 1) = \alpha\Gamma(\alpha).$$

I første omgang må I tage denne egenskab for givet. Vi definerer da gammafordelingen med parametre $\alpha, \beta > 0$ til at være fordelingen med tætheden

$$f(x) = \begin{cases} \frac{\beta^\alpha}{\Gamma(\alpha)} x^{\alpha-1} e^{-\beta x}, & x > 0 \\ 0, & \text{ellers} \end{cases}.$$

1) Vis, at f er en gyldig tæthed, dvs. at $f(x) \geq 0$ for alle $x \in \mathbb{R}$, og at

$$\int_0^\infty f(x) dx = 1.$$

2) Lad nu i det følgende X have tæthed f . Vis, at

$$\mathbb{E}[X] = \frac{\alpha}{\beta}.$$

3) Vis, at

$$\text{Var}(X) = \frac{\alpha}{\beta^2}.$$

4) Vis, at det n ’te moment er givet ved

$$\mathbb{E}[X^n] = \frac{\Gamma(\alpha + n)}{\Gamma(\alpha)\beta^n}.$$

5) Bevis nu, at $\Gamma(\alpha + 1) = \alpha\Gamma(\alpha)$ for alle $\alpha > 0$. Vink: Brug partiell integration.

6) Vis, at hvis $n \in \mathbb{N}$ gælder $\Gamma(n) = (n - 1)!$.

••• **Opgave 1.3.36: Den negative binomialfordeling**

Denne opgave bygger ovenpå forrige om gammafordelingen. En diskret variabel N siges at være *negativ binomialfordelt*, hvis N har tæthed givet ved

$$\mathbb{P}(N = n) = \frac{\Gamma(n + \alpha)}{n! \Gamma(\alpha)} p^\alpha (1 - p)^n, \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

Her er $\alpha > 0$ og $p \in [0, 1]$ parametre.

1) Hvilken fordeling fås i tilfældet $\alpha = 1$?

2) Vi viser nu en måde at konstruere den negative binomialfordeling. Lad N være Poissonfordelt med parameter x givet $X = x$, hvor X er gammafordelt med parametre $\alpha > 0$ og $\beta > 0$. Vis, at N er negativ binomialfordelt med parametre α og $p = 1/(1 + \beta)$.
Vink: Brug tårnegenskaben med X som følger:

$$\mathbb{P}(N = n) = \mathbb{E}[\mathbb{P}(N = n | X)] = \int_0^\infty f_X(x) \mathbb{P}(N = n | X = x) dx.$$

Genkald herefter tætheden for Poissonfordelingen.

3) Vis, at

$$\mathbb{E}[N] = \alpha \frac{1 - p}{p}.$$

Vink: Tårnegenskaben.

4) Vis, at

$$\text{Var}[N] = \alpha \frac{1 - p}{p^2}.$$

Vink: Loven om total varians, se Opgave 1.3.30.

5) Vis, at hvis $p \neq 1$, da er $\text{Var}[N] > \mathbb{E}[N]$. Sammenlign med Poissonfordelingen.

••• **Opgave 1.3.37: Zipf-fordelingen**

En diskret variabel N siges at være *Zipf-fordelt* med parametre $\alpha \geq 0$ og $n \in \mathbb{N}$, hvis tætheden er givet ved

$$\mathbb{P}(N = k) = \frac{1}{k^\alpha H_{n,\alpha}}, \quad k = 1, \dots, n$$

og nul ellers. Her er $H_{n,\alpha}$ det såkaldte *generaliserede harmoniske tal* givet ved

$$H_{n,\alpha} = \sum_{i=1}^n \frac{1}{i^\alpha}.$$

1) Vis, at $\mathbb{P}(N = k)$ ovenover er en gyldig tæthed, dvs. at den summerer til 1,

$$\sum_{k=1}^n \mathbb{P}(N = k) = 1.$$

2) Beregn $H_{4,1}$. Find da $\mathbb{P}(N = k)$ for alle k , når $n = 4$ og $\alpha = 1$.

3) Lad igen α og n være vilkårlige. Vis, at fordelingsfunktionen for N er givet ved

$$F_N(k) = \frac{H_{k,\alpha}}{H_{n,\alpha}}.$$

4) Vis, at

$$\mathbb{E}[N] = \frac{H_{n,\alpha-1}}{H_{n,\alpha}}.$$

KAPITEL 1. MATEMATISKE FORUDSÆTNINGER

5) Vis, at

$$\text{Var}[N] = \frac{H_{n,\alpha-2}H_{n,\alpha} - H_{n,\alpha-1}^2}{H_{n,\alpha}^2}.$$

6) En stokastisk variabel X siges at være *diskret uniformt fordelt* på $1, 2, \dots, n$, hvis tætheden er givet ved $\mathbb{P}(X = x) = 1/n$ for $x = 1, \dots, n$ og nul ellers. Vi har set denne fordeling flere gange, f.eks. i forbindelse med terningkast.. Vis, at den diskrete uniforme fordeling er et specialtilfælde af Zipf-fordelingen.

Zipf-fordelingen fremkommer utrolig mange steder, f.eks. i udlån af bøger. Enkelte bestsellere står for en stor del af de samlede udlån, mens rigtig mange mindre kendte værker står for resten. Zipf-fordelingen kan netop fange denne tendens. Et andet godt eksempel er forekomster af ord.

1.4 Lineær algebra

Vektorer, matricer og regneoperationer

Definition 1.4.1. En n -dimensional (real) *vektor* er en ordnet liste

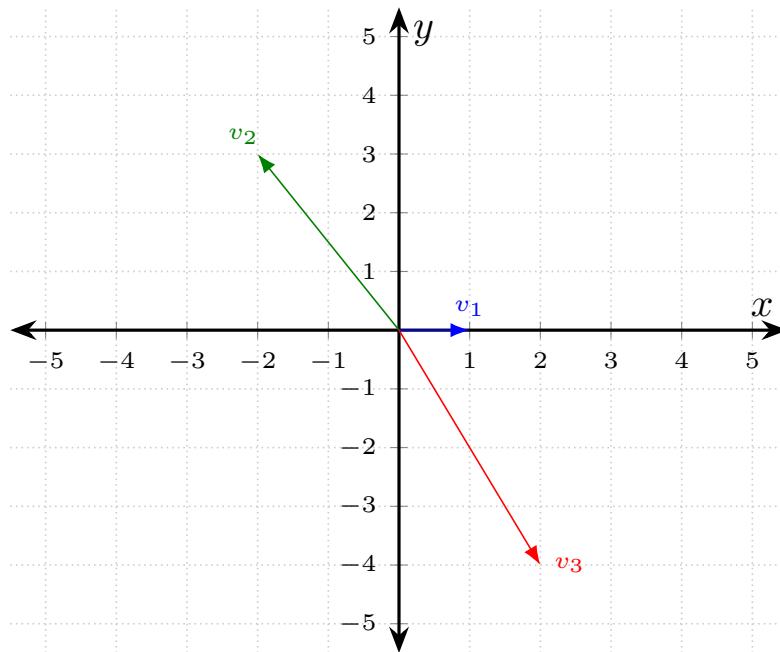
$$v = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix}$$

hvor $x_1, x_2, \dots, x_n \in \mathbb{R}$ kaldes vektorens *indgange*. Mængden af n -dimensionelle vektorer betegnes \mathbb{R}^n .

Eksempler på vektorer i \mathbb{R}^2 er

$$v_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad v_2 = \begin{pmatrix} -2 \\ 3 \end{pmatrix} \quad \text{og} \quad v_3 = \begin{pmatrix} 2 \\ -4 \end{pmatrix}.$$

Disse vektorer kan nemt illustreres. Den øverste koordinat indikerer, hvor langt ud af første-aksen, man skal gå, mens andenkoordinaten indikerer, hvor langt ud af andenaksen, man skal gå. De tre vektorer ser sådan ud i planet:



Princippet med vektorer i \mathbb{R}^3 er det samme. I er velkommen til at tænke på en vektor

$$v = \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}$$

i \mathbb{R}^3 som et punkt med koordinaterne (x, y, z) . Selvom en vektor er defineret som en søjle, vil vi ofte bedrive misbrug af notation og skrive $v = (x_1, x_2, \dots, x_n)$ for en vektor. Vi indfører nu to fundamentale regneoperatorer for vektorer, nemlig addition og skalarmultiplikation. Disse er defineret som følger.

KAPITEL 1. MATEMATISKE FORUDSÆTNINGER

Definition 1.4.2. Lad $v_1 = (x_1, x_2, \dots, x_n) \in \mathbb{R}^n$, $v_2 = (y_1, y_2, \dots, y_n) \in \mathbb{R}^n$ og $a \in \mathbb{R}$. Summen af v_1 og v_2 er defineret som

$$v_1 + v_2 = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x_1 + y_1 \\ x_2 + y_2 \\ \vdots \\ x_n + y_n \end{pmatrix}$$

og skalarmultiplikationen af a på v_1 er defineret som

$$a \cdot v_1 = a \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a \cdot x_1 \\ a \cdot x_2 \\ \vdots \\ a \cdot x_n \end{pmatrix}$$

hvor \cdot inde i vektoren er almindelig multiplikation af reelle tal.

Bemærkning 1.4.3. Definitionen ovenover forudsætter, at de to vektorer v_1 og v_2 har samme dimension. Vi har ingen definition af addition for vektorer med forskelligt antal indgange. F.eks. giver det ikke mening at lægge vektorerne

$$v_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ -2 \\ 8 \end{pmatrix} \quad \text{og} \quad v_2 = \begin{pmatrix} 4 \\ 6 \end{pmatrix}$$

sammen.

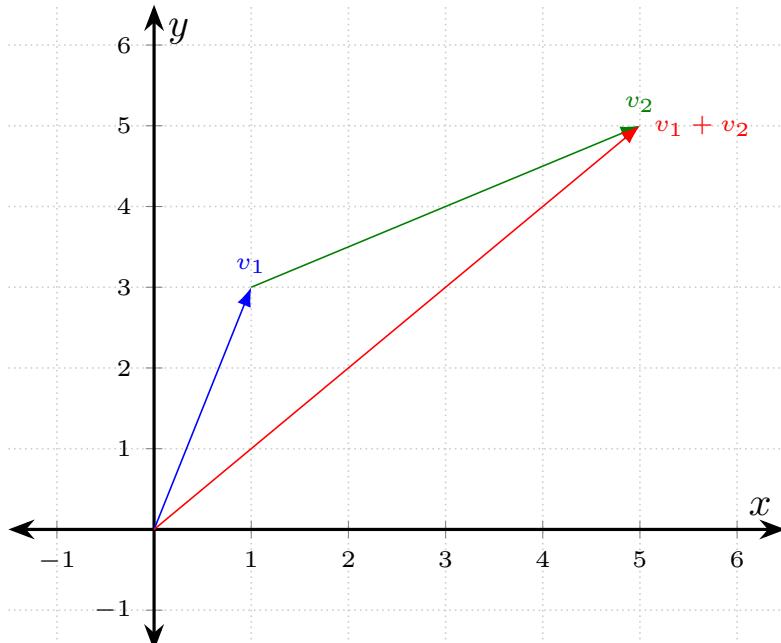
Både addition af vektorer og skalarmultiplikation har en geometrisk fortolkning. Summen af to vektorer giver vektoren, som fås ved at lægge de to vektorer i forlængelse af hinanden. Lad os se på vektorerne

$$v_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 3 \end{pmatrix} \quad \text{og} \quad v_2 = \begin{pmatrix} 4 \\ 2 \end{pmatrix}.$$

Deres sum er

$$\begin{pmatrix} 1 \\ 3 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 4 \\ 2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 5 \\ 5 \end{pmatrix}$$

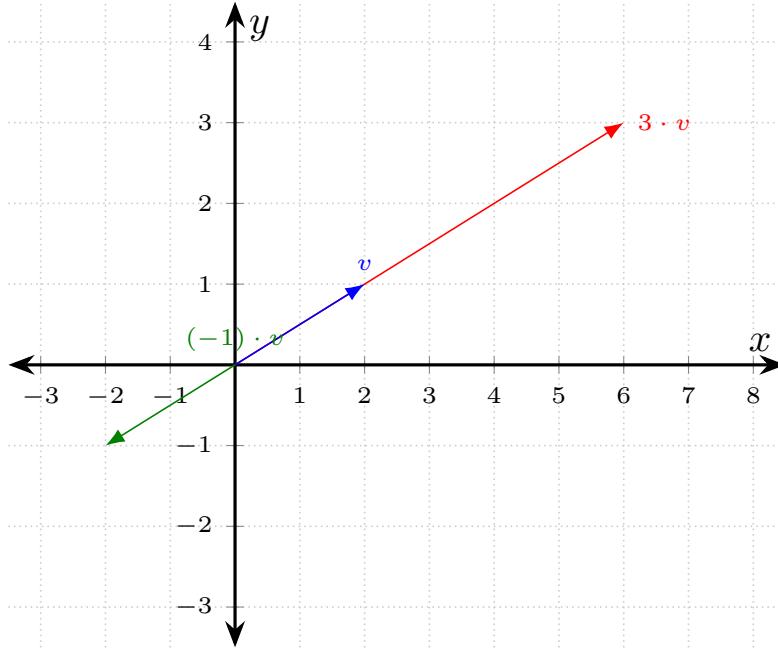
og i et koordinatsystem ser det hele således ud:



Skalarmultiplikation skal fortolkes som en skalering. Betragt vektoren

$$v = \begin{pmatrix} 2 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

Skalerer vi vektoren med hhv. -1 og 3 fås



Skalarmultiplikation med -1 er et vigtig specialtilfælde, da det svarer til at spejle vektoren. Den skalerede vektor har samme længde, men peger i den modsatte retning. Inden vi bevæger os videre til matricer, vil vi nævne, at \mathbb{R}^n er et eksempel på en mængde med struktur kaldet et *vektorrum*. Den mere teoretiske side af lineær algebra beskæftiger sig med generelle (abstrakte) vektorrum samt særlige afbildninger mellem disse kaldet *lineære* afbildninger. Vi er nu klar til at se på matricer.

Definition 1.4.4. En $m \times n$ -matrix A er et skema af reelle tal i m rækker og n søjler

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

hvor $a_{ij} \in \mathbb{R}$ betegner det reelle tal i række i og søjle j . Disse kaldes matricens *indgange*. Mængden af $m \times n$ -matricer betegnes $\mathbb{R}^{m \times n}$.

Vi bruger som regel store bogstaver A, B, C, \dots til at betegne matricer og de tilhørende små bogstaver til at betegne deres indgange. Et eksempel på matricer i $\mathbb{R}^{2 \times 3}$ er

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 4 & 5 & 6 \end{pmatrix}, \quad B = \begin{pmatrix} 0 & 1 & -4 \\ 11 & -3 & -1 \end{pmatrix},$$

mens matricer i $\mathbb{R}^{3 \times 3}$ kunne være

$$C = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad \text{og} \quad D = \begin{pmatrix} -3 & 7 & 10 \\ 1/2 & 0 & 0 \\ 6 & -2 & -2 \end{pmatrix}.$$

I mange henseender er $n \times n$ -matricer (altså matricer med samme antal rækker og søjler) særligt interessante. De kaldes *kvadratiske* matricer. Det skal vi se senere, når vi arbejder

KAPITEL 1. MATEMATISKE FORUDSÆTNINGER

med inverse matricer. Matricen C ovenover er i øvrigt ikke helt tilfældig, men spiller derimod en meget central rolle. Faktisk er den så vigtig, at den har en særlig betegnelse. I definitionen nedenunder definerer vi en række centrale matricer og vektorer.

Definition 1.4.5. $0 \in \mathbb{R}^n$ defineres til at være vektoren, hvori alle indgange er 0:

$$0 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Denne vektor betegnes *nulvektoren*. $O \in \mathbb{R}^{n \times n}$ defineres tilsvarende til at være den kvadratiske matrix med n rækker og søjler, hvori alle indgange er 0:

$$O = \begin{pmatrix} 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 0 \end{pmatrix}.$$

$I_n \in \mathbb{R}^{n \times n}$ defineres til at være den kvadratiske matrix, hvor diagonalen består af 1-taller, og alle andre indgange er 0:

$$I_n = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 1 \end{pmatrix}$$

I_n kaldes *identitetsmatricen* af dimension n .

Bemærkning 1.4.6. Bemærk, at nulvektoren opfylder $0 + v = v + 0 = v$ for alle $v \in \mathbb{R}^n$. Dermed spiller nulvektoren samme rolle som 0 gør i de reelle tal.

Matricer er brugbare, fordi de indeholder information på en form, vi kan regne med. Vi skal dog først have defineret, hvordan vi kan regne med matricer. Tilfældet med addition minder meget om addition af vektorer, men når vi indfører multiplikation af matricer, bliver det straks mere regnetungt. Lad os dog starte med at få addition og skalarmultiplikation af matricer på plads.

Definition 1.4.7. Lad $A, B \in \mathbb{R}^{m \times n}$. Skriv

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ a_{m1} & a_{m2} & \cdots & a_{mn} \end{pmatrix} \quad \text{og} \quad B = \begin{pmatrix} b_{11} & b_{12} & \cdots & b_{1n} \\ b_{21} & b_{22} & \cdots & b_{2n} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ b_{m1} & b_{m2} & \cdots & b_{mn} \end{pmatrix},$$

da er summen $A + B$ defineret til

$$A + B = \begin{pmatrix} a_{11} + b_{11} & a_{12} + b_{12} & \cdots & a_{1n} + b_{1n} \\ a_{21} + b_{21} & a_{22} + b_{22} & \cdots & a_{2n} + b_{2n} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ a_{m1} + b_{m1} & a_{m2} + b_{m2} & \cdots & a_{mn} + b_{mn} \end{pmatrix}.$$

Altså skal man blot lægge indgangene sammen. Hvis $a \in \mathbb{R}$ er skalarmultiplikationen aA defineret som

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

altså skal man blot gange a på alle indgangene i A .

Bemærkning 1.4.8. Addition af to matricer er kun defineret, hvis de har samme dimensioner, dvs. samme antal rækker og samme antal søjler. Det giver altså kun mening at lægge matricerne A og B sammen, hvis de begge ligger i $\mathbb{R}^{m \times n}$.

Som eksempel kunne vi tage matricerne

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 4 & 5 & 6 \end{pmatrix} \quad \text{og} \quad B = \begin{pmatrix} 0 & 1 & -4 \\ 11 & -3 & -1 \end{pmatrix},$$

fra tidligere. Vi har

$$A + B = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 4 & 5 & 6 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & 1 & -4 \\ 11 & -3 & -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 3 & -1 \\ 15 & 2 & 5 \end{pmatrix}.$$

Vi har følgende resultater for matrix-addition. I skal ikke tænke for meget over begreberne i parantes. Vi kommer ikke til at bruge dem i forløbet, men det er passende, at I har set dem.

Sætning 1.4.9. For matricer $A, B, C \in \mathbb{R}^{m \times n}$ gælder

1. $(A + B) + C = A + (B + C)$ (associativitet).
2. $A + O = A = O + A$ (O er neutralelement for addition).
3. $A + (-A) = O = (-A) + A$ (eksistens af additiv invers). Her betegner $-A$ matricen med de samme indgange i A , blot med omvendt fortegn.
4. $A + B = B + A$ (kommutativitet).

Bevis. Alle egenskaberne følger direkte af definitionen af matrix-addition samt de tilsvarende egenskaber for de reelle tal. ■

Inden vi definerer multiplikation af to matricer, definerer vi et specieltilfælde, nemlig multiplikation af en matrix og en vektor.

Definition 1.4.10. Lad $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ og $v \in \mathbb{R}^n$ med indgange a_{ij} og x_j , hvor $i = 1, \dots, m$ og $j = 1, \dots, n$. Da definerer vi produktet af A og v til

$$Av = \begin{pmatrix} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \dots + a_{1n}x_n \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \dots + a_{2n}x_n \\ \vdots \\ a_{m1}x_1 + a_{m2}x_2 + \dots + a_{mn}x_n \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^m.$$

Bemærkning 1.4.11. Matrix-vektorproduktet Av er kun defineret, hvis A har samme antal søjler som indgange i v . Resultatet af at gange en $m \times n$ -matrix på en n -dimensional vektor er en m -dimensional vektor.

Lad os tage nogle eksempler. Vi farvelægger indgangene i vektoren, så man kan se, hvad der foregår i multiplikationen:

$$\begin{pmatrix} 1 & 2 \\ -1 & 4 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \cdot 1 + 2 \cdot 3 \\ -1 \cdot 1 + 4 \cdot 3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 7 \\ 11 \end{pmatrix}$$

Lad os tage et eksempel med en større matrix og vektor:

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & -1 \\ 3 & -2 & 4 & 1 \\ 10 & 0 & -1 & 4 \\ 8 & 7 & -1 & 0 \\ 7 & -9 & -2 & 11 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2 \\ 0 \\ 5 \\ 6 \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} 1 \cdot 2 + 0 \cdot 0 + 0 \cdot 5 - 1 \cdot 6 \\ 3 \cdot 2 - 2 \cdot 0 + 4 \cdot 5 + 1 \cdot 6 \\ 10 \cdot 2 + 0 \cdot 0 - 1 \cdot 5 + 4 \cdot 6 \\ 8 \cdot 2 + 7 \cdot 0 - 1 \cdot 5 + 0 \cdot 6 \\ 7 \cdot 2 - 9 \cdot 0 - 2 \cdot 5 + 11 \cdot 6 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} -4 \\ 32 \\ 39 \\ 11 \\ 70 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

KAPITEL 1. MATEMATISKE FORUDSÆTNINGER

Der findes en god måde at huske, hvordan man tager matrix-vektorprodukter på, såfremt man kender til prikproduktet/skalarproduktet af to vektorer. Definitionen er herunder.

Definition 1.4.12. Lad $v_1 = (x_1, x_2, \dots, x_n)$ og $v_2 = (y_1, y_2, \dots, y_n)$ være vektorer i \mathbb{R}^n . Da er *prikproduktet/skalarproduktet* af v_1 og v_2 defineret til

$$v_1 \cdot v_2 = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{pmatrix} = x_1 y_1 + x_2 y_2 + \dots + x_n y_n \in \mathbb{R}.$$

Vi bemærker, at prikproduktet af to vektorer kun er defineret, hvis de to vektorer har samme antal indgange, og at prikproduktet giver et reelt tal og ikke en vektor. Nu kan vi forklare sammenhængen mellem prikproduktet og matrix-vektormultiplikation. Antag, at vi har en $m \times n$ -matrix A og en vektor v i \mathbb{R}^n . Lad A_1, A_2, \dots, A_m betegne rækkerne i A . Da er A_1, A_2, \dots, A_m vektorer i \mathbb{R}^m , og vi har

$$Av = \begin{pmatrix} A_1 \cdot v \\ A_2 \cdot v \\ \vdots \\ A_m \cdot v \end{pmatrix}.$$

Lad os nu definere matrix-matrixmultiplikation.

Definition 1.4.13. Lad $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ og $B \in \mathbb{R}^{n \times p}$. Lad B_1, B_2, \dots, B_p betegne søjlerne i B . Da definerer vi produktet AB til at være $m \times p$ -matricen givet ved

$$AB = (AB_1 \ AB_2 \ \cdots \ AB_p).$$

I ord: AB er matricen, hvis søjler er produktet af A med søjlerne i B .

Bemærkning 1.4.14. Bemærk, at matrixproduktet AB er defineret hvis og kun hvis A har samme antal søjler som B har rækker.

Lad os tage en række eksempler. Betragt de to matricer

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 4 & 5 & 6 \end{pmatrix} \quad \text{og} \quad B = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 2 \\ 3 & -1 \end{pmatrix}.$$

Da A har tre søjler, og B har tre rækker, er AB veldefineret. Vi beregner

$$\begin{aligned} AB &= \left(A \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 3 \end{pmatrix} \ A \begin{pmatrix} 0 \\ 2 \\ -1 \end{pmatrix} \right) \\ &= \begin{pmatrix} 1 \cdot 1 + 2 \cdot 0 + 3 \cdot 3 & 1 \cdot 0 + 2 \cdot 2 + 3 \cdot (-1) \\ 4 \cdot 1 + 5 \cdot 0 + 6 \cdot 3 & 4 \cdot 0 + 5 \cdot 2 + 6 \cdot (-1) \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} 10 & 1 \\ 22 & 4 \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

Vi kan også beregne produktet BA fordi antal søjler i B er lig antal rækker i A . Da fås

$$BA = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 8 & 10 & 12 \\ -1 & 1 & 3 \end{pmatrix}$$

I dette eksempel kunne man tage matrixproduktet fra begge sider, men dette er ikke altid muligt. Vi kan f.eks. se på matricen

$$C = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 4 & 2 \end{pmatrix}.$$

Da eksisterer matrixproduktet CA , men AC giver ikke mening. Et simpelt og vigtigt eksempel på matrix-produkter er mellem kvadratiske matricer. Her kan man altid tage produktet fra begge sider, men det er ikke nødvendigvis det samme resultat, man får. Definér

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ -1 & 7 \end{pmatrix} \quad \text{og} \quad B = \begin{pmatrix} 2 & 0 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}.$$

Da udregner vi

$$AB = \begin{pmatrix} 4 & 2 \\ 5 & 7 \end{pmatrix} \quad \text{men} \quad BA = \begin{pmatrix} 2 & 4 \\ 0 & 9 \end{pmatrix}$$

så $AB \neq BA$. Dette står i kontrast til, hvad vi kender fra tallene normalt. Hvis $a, b \in \mathbb{R}$ gælder $ab = ba$. Lad os til slut opskrive nogle grundlæggende resultater for matrixprodukter.

Sætning 1.4.15. *For matricer A, B og C af passende dimensioner, så produkterne giver mening, har vi følgende:*

1. $(AB)C = A(BC)$ (associativitet).
2. $AI_n = A = I_n A$ (I_n er neutralelement for multiplikation).
3. $A(B + C) = AB + AC$ (distributiv lov).

Bevis. Beviserne for punkt 1. og 3. udelades, da de er lange og involverer adskillige mindre behagelige summer. Vi refererer til [1]. Punkt 2. overlades til øvelserne. ■

Matricer, ligningssystemer og invertering

Genkald identitetsmatricen

$$I_n = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 1 \end{pmatrix}.$$

Denne matrix har den interessante egenskab, at $I_n v = v$ for alle $v \in \mathbb{R}^n$. I_n fungerer på samme måde som *identitetsafbildingen* $f(x) = x$. Vi vil nu relatere matricer til lineære ligningssystemer. Lineær algebra er nyttigt, fordi vi kan bruge det til at løse lineære ligningssystemer effektivt. Et simpelt eksempel er

$$\begin{aligned} 2x + 3y &= 1 \\ x - 4y &= 0. \end{aligned}$$

I dette tilfælde har vi to ligninger med to ubekendte, men vi kunne lige så vel have betragtet m ligninger med n ubekendte. Bemærk, at vi kan omskrive ligningssystemet således:

$$\begin{pmatrix} 2 & 3 \\ 1 & -4 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

Bemærk også, hvordan det trivielle ligningssystem

$$\begin{aligned} x &= a \\ y &= b \end{aligned}$$

for $a, b \in \mathbb{R}$ kan omskrives til

$$I_2 \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}.$$

For at se, hvordan vi kan benytte matrixberegninger til at løse lineære ligningssystemer, skal vi først introducere inverse matricer.

Definition 1.4.16. En matrix $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ (bemærk, at A er kvadratisk) er *invertibel*, hvis der findes en matrix $A^{-1} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ som opfylder

$$AA^{-1} = I_n = A^{-1}A.$$

Det viser sig, at matricen

$$A = \begin{pmatrix} 2 & 3 \\ 1 & -4 \end{pmatrix}$$

fra før har en invers. Den er givet ved

$$A^{-1} = \frac{1}{11} \begin{pmatrix} 4 & 3 \\ 1 & -2 \end{pmatrix}.$$

Men nu kan vi jo løse vores ligningssystem ved at gange begge sider med A^{-1} :

$$A^{-1}A \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = A^{-1} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \Leftrightarrow I_2 \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \frac{1}{11} \begin{pmatrix} 4 & 3 \\ 1 & -2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{11} \begin{pmatrix} 4 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Altså er løsningen lig $x = 4/11$ og $y = 1/11$. Fremgangsmåden, vi har benyttet, er helt generel og kan formuleres som sætning således:

Sætning 1.4.17. *Givet et ligningssystem*

$$Av = w$$

med $v, w \in \mathbb{R}^n$ og hvor A har en invers A^{-1} , da er den entydige løsning v til systemet givet ved

$$v = A^{-1}w.$$

Der er et problem med denne fremgangsmåde. Den forudsætter, at vi har en metode til at bestemme inverse matricer, såfremt de findes. Sådanne metoder beror på såkaldt *Gauss-elimination*, som vi ikke har tid til at komme ind på i denne workshop. Dog kan vi komme uden om dette problem ved at holde os til det simple tilfælde med to gange to matricer. Helt konkret har vi følgende sætning.

Sætning 1.4.18. *Betrægt en matrix $A \in \mathbb{R}^{2 \times 2}$ givet ved*

$$A = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}.$$

Da gælder, at hvis $ad - bc \neq 0$, så er A invertibel med invers

$$A^{-1} = \frac{1}{ad - bc} \begin{pmatrix} d & -b \\ -c & a \end{pmatrix}.$$

Bevis. Beviset overlades til jer. Se opgave 1.4.14. ■

Størrelsen $ad - bc$ er så vigtig, at den har sit eget navn.

Definition 1.4.19. Lad $A \in \mathbb{R}^{2 \times 2}$ være givet ved

$$A = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}.$$

Da defineres determinanten af A ved

$$\det A = ad - bc.$$

Determinanten har et væld af interessante og brugbare egenskaber. Vi har allerede set en af dem, nemlig, at hvis $\det A \neq 0$, da er A invertibel. En anden interessant egenskab er såkaldt *multiplikativitet*.

Sætning 1.4.20. Lad $A, B \in \mathbb{R}^{2 \times 2}$. Da gælder, at

$$\det(AB) = \det A \cdot \det B.$$

Bevis. Lad

$$A = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}, \quad B = \begin{pmatrix} e & f \\ g & h \end{pmatrix}.$$

Da har vi

$$\begin{aligned} \det(AB) &= \det \left(\begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e & f \\ g & h \end{pmatrix} \right) = \det \begin{pmatrix} ae + bg & af + bh \\ ce + dg & cf + dh \end{pmatrix} \\ &= (ae + bg)(cf + dh) - (ce + dg)(af + bh) \\ &= aecf + aedh + bgcf + bgdh - ceaf - cebh - dgaf - dgah \\ &= adeh - adgf - bceh + bcgf \end{aligned}$$

mens

$$\det A \det B = (ad - bc)(eh - gf) = adeh - adgf - bceh + bcgf.$$

De to udregninger har samme resultat, ergo fås det ønskede. ■

Lineære ligningssystemer og Gauss-elimination

Lineære ligningssystemer er ligningssystemer på formen

$$\begin{aligned} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \dots + a_{1n}x_n &= b_1 \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \dots + a_{2n}x_n &= b_2 \\ &\vdots \\ a_{m1}x_1 + a_{m2}x_2 + \dots + a_{mn}x_n &= b_m, \end{aligned}$$

hvor alle a_{ij} og b_i er kendte tal, og x_1, \dots, x_n er ubekendte. Vi ser, at n er antallet af ubekendte, og m er antallet af ligninger. Fra grundskolen og gymnasiet er vi vant til at løse to ligninger med to ubekendte. F.eks. kunne vi have ligningssystemet

$$\begin{aligned} 3x - 4y &= 6 \\ x + 5y &= 2, \end{aligned}$$

og vi er interesserende i at finde alle de reelle tal x og y , som løser ligningssystemet. Den klassiske metode er at først isolere den ene variabel, f.eks. x , i en af ligningerne:

$$x + 5y = 2 \Rightarrow x = 2 - 5y$$

Herefter kan vi indsætte dette udtryk for x i den øverste ligning:

$$3x - 4y = 6 \Rightarrow 3(2 - 5y) - 4y = 6 \Rightarrow 6 - 15y - 4y = 6 \Rightarrow -19y = 0$$

Altså fås, at $y = 0$. Vi ser fra udtrykket $x = 2 - 5y$, at $x = 2$. Den eneste løsning til ligningssystemet er da $(x, y) = (2, 0)$. Formålet med dette afsnit er at indføre en mere praktisk metode til at løse denne slags ligningssystemer. Denne metode kan bruges på lineære ligningssystemer af enhver størrelse og er også standardmetoden i meget software. Inden vi kan indføre den nye metode, skal vi have nogle basale egenskaber/observationer på plads i forhold til lineære ligningssystemer. Fra nu af antages alle koefficienter og konstanter at være reelle tal.

Lemma 1.4.21. *Givet et lineært ligningssystem*

$$\begin{aligned} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \dots + a_{1n}x_n &= b_1 \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \dots + a_{2n}x_n &= b_2 \\ &\vdots \\ a_{m1}x_1 + a_{m2}x_2 + \dots + a_{mn}x_n &= b_m \end{aligned}$$

med n variable (kaldet x_1, x_2, \dots, x_n) og m ligninger, hvor alle koefficienter a_{ij} og b_i er reelle tal, da vil følgende operationer ikke ændre på løsningsmængden for ligningssystemet:

1. *Ombytning af to ligninger.*
2. *At gange en konstant $c \neq 0$ på en ligning.*
3. *At lægge en ligning ganget med en konstant til en anden ligning.*

Bevis: Det er klart, at operation 1 ikke ændrer løsningsmængden, thi rækkefølgen af ligningerne ikke betyder noget for løsningsmængden. Lad $c \neq 0$ være en konstant. Lad os tage ligning i og gange med c :

$$c(a_{i1}x_1 + a_{i2}x_2 + \dots + a_{in}x_n) = cb_i$$

Hvis (x_1, \dots, x_n) løser den oprindelige ligning, ses det, at (x_1, \dots, x_n) også vil løse den nye ligning. Omvendt, hvis (x_1, \dots, x_n) løser ligningen ganget igennem med c , da kan vi gange med c^{-1} på begge sider af lighedstegnet (fordi $c \neq 0$) og få den oprindelige ligning tilbage, og dermed ser vi, at (x_1, \dots, x_n) også løser den oprindelige ligning. Altså ændrer operation 2 heller ikke løsningsmængden. Lad os nu se på operation 3. Lad A_i betegne ligning i og A_j ligning j . Ser vi på ligningen $A_i + cA_j$, kan vi få den oprindelige ligning tilbage ved blot at trække cA_j fra $A_i + cA_j$. Dermed ses på samme måde som med operation 2, at løsningsmængden forbliver uændret. ■

Bemærkning 1.4.22. Operationerne ovenover har den egenskab, at man altid kan gå et skridt tilbage og altså ændre ligningssystemet tilbage til det, man startede med. Derfor tillader vi ikke at gange igennem med 0, da vi ikke har nogen mulighed for at sige, hvad den oprindelige ligning var før.

Eksempel 1.4.23. Lad os som eksempel se på ligningssystemet

$$\begin{aligned} 3x - 4y &= 6 \\ x + 5y &= 2 \end{aligned}$$

fra før. Vi kan gange den nederste ligning med 3:

$$\begin{aligned} 3x - 4y &= 6 \\ 3x + 15y &= 6 \end{aligned}$$

Vi kan nu trække den øverste ligning fra den nederste (det samme som at lægge -1 gange den øverste ligning til den nederste):

$$\begin{aligned} 3x - 4y &= 6 \\ 19y &= 0 \end{aligned}$$

Dividerer vi den nederste ligning med 19 (det samme som at gange med $1/19$) får vi

$$\begin{aligned} 3x - 4y &= 6 \\ y &= 0 \end{aligned}$$

Lad os lægge 4 gange den nederste ligning til den øverste:

$$3x = 6$$

$$y = 0$$

Dividerer vi den øverste ligning med 3 får vi

$$x = 2,$$

$$y = 0.$$

Dette stemmer overens med svaret fra tidligere. \circ

Vi bemærker en vigtig ting omkring lineære ligningssystemer. Vi behøver ikke at opskrive alle de ubekendte hver gang. Vi skal kun kende koefficienterne a_{ij} og b_i . Disse kan på passende vis udgøre en matrix på følgende måde.

Definition 1.4.24. Til et lineært ligningssystem

$$\begin{aligned} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \dots + a_{1n}x_n &= b_1 \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \dots + a_{2n}x_n &= b_2 \\ &\vdots \\ a_{m1}x_1 + a_{m2}x_2 + \dots + a_{mn}x_n &= b_m \end{aligned}$$

knytter vi *totalmatricen*

$$(A | b) = \left(\begin{array}{cccc|c} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} & b_1 \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} & b_2 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ a_{m1} & a_{2m} & \cdots & a_{mn} & b_m \end{array} \right)$$

hvor det er indforstået, at

$$A = \left(\begin{array}{cccc} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{m1} & a_{2m} & \cdots & a_{mn} \end{array} \right) \quad \text{og} \quad b = \left(\begin{array}{c} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_m \end{array} \right).$$

Eksempel 1.4.25. Til ligningssystemet

$$\begin{aligned} 3x - 4y &= 6 \\ x + 5y &= 2 \end{aligned}$$

har vi totalmatricen

$$\left(\begin{array}{cc|c} 3 & -4 & 6 \\ 1 & 5 & 2 \end{array} \right).$$

Tricket er simpelthen blot at aflæse koefficienterne foran de ubekendte. \circ

Før vi kan benytte matricer i ligningsløsning, skal vi have en lidt teknisk definition på plads. Det kan anbefales at læse de efterfølgende eksempler først for at få en fornemmelse for begrebet herunder.

Definition 1.4.26. En $m \times n$ -matrix

$$A = \left(\begin{array}{ccc} a_{11} & \cdots & a_{1n} \\ \vdots & & \vdots \\ a_{m1} & \cdots & a_{mn} \end{array} \right)$$

siges at være på *reduceret echelonform* hvis der eksisterer et $r \geq 0$ og indekser

$$1 \leq j_1 < \dots < j_r \leq n,$$

sådan at:

KAPITEL 1. MATEMATISKE FORUDSÆTNINGER

- For alle $1 \leq s \leq r$ gælder

$$a_{ij_s} = \begin{cases} 1, & \text{hvis } i = s \\ 0, & \text{hvis } i \neq s \end{cases}$$

- For alle $1 \leq j < j_s$ gælder at $a_{sj} = 0$.
- For alle $r < i \leq m$ og $1 \leq j \leq n$ gælder $a_{ij} = 0$.

Hvad står der i ovenstående definition? Der står, at en matrix A er på reduceret echelonform, hvis de første rækker alle indledes med et 1-tal, hvor der står nuller over og under disse. Derudover skal matricen have en særlig trappeform. Nogle eksempler illustrerer konceptet.

Eksempel 1.4.27. De to matricer

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 3 & 0 & 5 \\ 0 & 1 & -2 & 0 & 8 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & -10 \end{pmatrix} \quad \text{og} \quad B = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 3 \\ 0 & 0 & 1 & -9 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

er på reduceret echelonform. \circ

Eksempel 1.4.28. De to matricer

$$A = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 3 \\ 1 & 0 & 2 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad \text{og} \quad B = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 3 \\ 0 & 0 & \frac{1}{2} & -9 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

er ikke på reduceret echelonform. B siges dog at være på *echelonform*. \circ

Vi introducerer nu tre operationer for vores matricer, som tillader os at omdanne enhver matrix til en matrix på reduceret echelonform.

Definition 1.4.29. For en matrix kan vi foretage tre typer af operationer:

- Ombytning af to rækker.
- Multiplikation af en række med en konstant forskellig fra nul.
- At lægge en række ganget en konstant til en anden række.

Bemærk ligheden med de tre operationer introduceret for ligningssystemer. Med disse tre operationer kan vi omdanne en matrix til en på reduceret echelonform. Metoden kaldes *Gauss-elimination*. Vi gennemgår to eksempler.

Eksempel 1.4.30. Lad os omdanne matricen

$$\begin{pmatrix} 6 & 2 \\ 3 & 4 \end{pmatrix}$$

til en matrix på reduceret echelonform. Vi starter med at trække to gange række 2 fra række 1,

$$\begin{pmatrix} 6 & 2 \\ 3 & 4 \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} 0 & -6 \\ 3 & 4 \end{pmatrix}.$$

Vi dividerer første række med -6 ,

$$\begin{pmatrix} 0 & -6 \\ 3 & 4 \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 3 & 4 \end{pmatrix}$$

og trækker derefter fire gange første række fra anden række,

$$\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 3 & 4 \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Dividér nu anden række med tre og ombyt de to rækker. Da fås det endelige svar

$$\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 3 & 0 \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

○

Eksempel 1.4.31. Lad

$$A = \begin{pmatrix} 3 & 2 & 0 & -2 \\ 6 & -3 & 0 & 0 \\ -3 & -5 & 2 & -1 \end{pmatrix}$$

Først tager vi række et og lægger den til række tre:

$$\begin{pmatrix} 3 & 2 & 0 & -2 \\ 6 & -3 & 0 & 0 \\ -3 & -5 & 2 & -1 \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} 3 & 2 & 0 & -2 \\ 6 & -3 & 0 & 0 \\ 0 & -3 & 2 & -3 \end{pmatrix}$$

Dernæst tager vi række et, ganger den med -2 og lægger den til række to:

$$\begin{pmatrix} 3 & 2 & 0 & -2 \\ 6 & -3 & 0 & 0 \\ 0 & -3 & 2 & -3 \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} 3 & 2 & 0 & -2 \\ 0 & -7 & 0 & 4 \\ 0 & -3 & 2 & -3 \end{pmatrix}$$

Vi ganger række to igennem med $-\frac{1}{7}$ og række tre igennem med $-\frac{1}{3}$:

$$\begin{pmatrix} 3 & 2 & 0 & -2 \\ 0 & -7 & 0 & 4 \\ 0 & -3 & 2 & -3 \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} 3 & 2 & 0 & -2 \\ 0 & 1 & 0 & -\frac{4}{7} \\ 0 & 1 & -\frac{2}{3} & 1 \end{pmatrix}$$

Vi lægger række to gange -1 til række tre og række to gange -2 til række et:

$$\begin{pmatrix} 3 & 2 & 0 & -2 \\ 0 & 1 & 0 & -\frac{4}{7} \\ 0 & 1 & -\frac{2}{3} & 1 \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} 3 & 0 & 0 & -2 + \frac{8}{7} \\ 0 & 1 & 0 & -\frac{4}{7} \\ 0 & 0 & -\frac{2}{3} & \frac{11}{7} \end{pmatrix}$$

Vi ganger række et med en tredjedel og række tre med $-\frac{3}{2}$:

$$\begin{pmatrix} 3 & 0 & 0 & -2 + \frac{8}{7} \\ 0 & 1 & 0 & -\frac{4}{7} \\ 0 & 0 & -\frac{2}{3} & \frac{11}{7} \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & -\frac{2}{3} + \frac{8}{21} \\ 0 & 1 & 0 & -\frac{4}{7} \\ 0 & 0 & 1 & -\frac{33}{14} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & -\frac{2}{7} \\ 0 & 1 & 0 & -\frac{4}{7} \\ 0 & 0 & 1 & -\frac{33}{14} \end{pmatrix}$$

Hermed er vores matrix omskrevet til en matrix på reduceret echelonform. ○

Lad os nu kombinere vores forståelse for at omdanne matricer til reduceret echelonform med ligningsløsning. Vi har følgende procedure til at løse et givet ligningssystem.

1. Opskriv totalmatricen for ligningssystemet.
2. Omdan totalmatricen til en matrix på reduceret echelonform.
3. Omskriv den reducerede totalmatrix til et ligningssystem og aflæs herfra løsnin-

gerne.

Eksempel 1.4.32. Vi betragter atter ligningssystemet

$$\begin{aligned} 3x - 4y &= 6 \\ x + 5y &= 2. \end{aligned}$$

Vi aflæste totalmatricen til at være

$$\left(\begin{array}{cc|c} 3 & -4 & 6 \\ 1 & 5 & 2 \end{array} \right).$$

KAPITEL 1. MATEMATISKE FORUDSÆTNINGER

Vi reducerer denne matrix til en matrix på reduceret echelonform. Først lægger vi -3 gange række to til række et:

$$\left(\begin{array}{cc|c} 3 & -4 & 6 \\ 1 & 5 & 2 \end{array} \right) \rightarrow \left(\begin{array}{cc|c} 0 & -19 & 0 \\ 1 & 5 & 2 \end{array} \right)$$

Da kan vi gange række et med $-\frac{1}{19}$:

$$\left(\begin{array}{cc|c} 0 & -19 & 0 \\ 1 & 5 & 2 \end{array} \right) \rightarrow \left(\begin{array}{cc|c} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 5 & 2 \end{array} \right)$$

Vi lægger -5 gange række et til række to:

$$\left(\begin{array}{cc|c} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 5 & 2 \end{array} \right) \rightarrow \left(\begin{array}{cc|c} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 2 \end{array} \right)$$

Til slut kan vi ombytte de to rækker:

$$\left(\begin{array}{cc|c} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 2 \end{array} \right) \rightarrow \left(\begin{array}{cc|c} 1 & 0 & 2 \\ 0 & 1 & 0 \end{array} \right)$$

Dette er en matrix på reduceret echelonform, og det tilsvarende ligningssystem er:

$$\begin{aligned} 1x + 0y &= 2 \\ 0x + 1y &= 0 \end{aligned}$$

som trivielt har den unikke løsning $x = 2$ og $y = 0$. ○

Det er ikke nødvendigvis sandt, at et ligningssystem har en løsning. Eller at en eventuel løsning er unik. Vi tager et eksempel på hver af de to tilfælde herunder.

Eksempel 1.4.33. Betragt ligningssystemet

$$\begin{aligned} x + 2y &= 3 \\ 4x + 8y &= 11. \end{aligned}$$

Totalmatricen for systemet er

$$\left(\begin{array}{cc|c} 1 & 2 & 3 \\ 4 & 8 & 11 \end{array} \right).$$

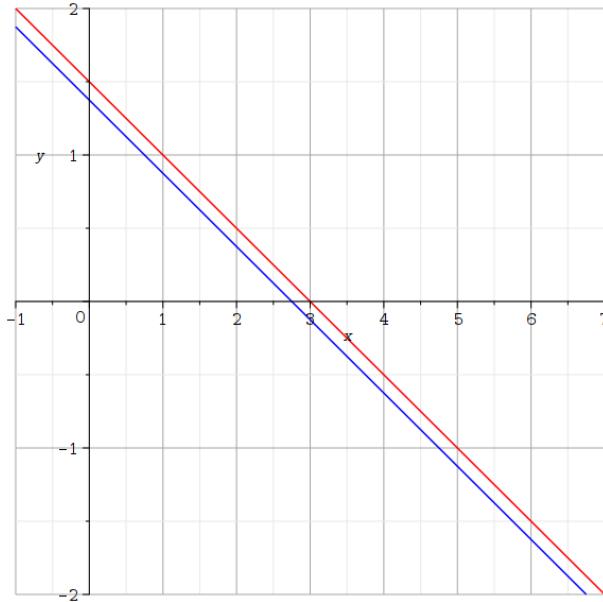
Lad os reducere denne matrix. Læg -4 gange række et til række to:

$$\left(\begin{array}{cc|c} 1 & 2 & 3 \\ 4 & 8 & 11 \end{array} \right) \rightarrow \left(\begin{array}{cc|c} 1 & 2 & 3 \\ 0 & 0 & -1 \end{array} \right)$$

Læg tre gange række to til række 1 og gang række to med -1 :

$$\left(\begin{array}{cc|c} 1 & 2 & 3 \\ 0 & 0 & -1 \end{array} \right) \rightarrow \left(\begin{array}{cc|c} 1 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{array} \right)$$

Men hvilket ligningssystem er dette? Den nederste ligning siger $0 = 1$. Dette er noget vås! Ergo kan det oprindelige ligningssystem ingen løsning have. Hvis du ikke er overbevist af denne nye metode, kan du prøve at løse ligningerne på klassisk vis og se, at det går galt. Man kan også se det geometrisk. De to ligninger udgør parallelle linjer i planet, og parallelle linjer skærer ikke, så der findes ingen løsninger. Se figuren herunder:



Figur 1.10: De to ligninger fra Eksempel 1.4.33 tegnet ind.

○

Eksempel 1.4.34. Betragt ligningssystemet

$$2x + y + 7z - 3w = 0$$

$$5x - y + 4z + 4w = -6$$

$$7x + 11z + w = -6,$$

som har totalmatrix

$$\left(\begin{array}{cccc|c} 2 & 1 & 7 & -3 & 0 \\ 5 & -1 & 4 & 4 & -6 \\ 7 & 0 & 11 & 1 & -6 \end{array} \right)$$

Omdanner man denne matrix til reduceret echelonform fås matricen

$$\left(\begin{array}{cccc|c} 1 & 0 & \frac{11}{7} & \frac{1}{7} & -\frac{6}{7} \\ 0 & 1 & \frac{27}{7} & -\frac{23}{7} & \frac{12}{7} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{array} \right),$$

som har tilhørende ligningssystem

$$x + \frac{11}{7}z + \frac{1}{7}w = -\frac{6}{7}$$

$$y + \frac{27}{7}z - \frac{23}{7}w = \frac{12}{7}.$$

Hvordan opskriver vi løsningerne hertil? Vi har flere ligninger end variable, så der kommer til at være uendelig mange løsninger. Disse løsninger kan parametrizeses som følger. Vi har fire variable og to ligninger. Dermed skal der bruges to parametre. Lad os vælge $z = t$ og $w = s$ som vores to parametre. Isolerer vi x og y i ligningerne, får vi:

$$x = -\frac{11}{7}t - \frac{1}{7}s - \frac{6}{7}$$

$$y = -\frac{27}{7}t + \frac{23}{7}s + \frac{12}{7}.$$

hvor $t, s \in \mathbb{R}$. Dvs. alle løsninger til ligningssystemet er vektorer på formen

$$(x, y, z, w) = \left(-\frac{11}{7}t - \frac{1}{7}s - \frac{6}{7}, -\frac{27}{7}t + \frac{23}{7}s + \frac{12}{7}, t, s \right), \quad \text{hvor } t, s \in \mathbb{R}$$

○

Invertering af matricer

Vi har tidligere set, hvordan man bestemmer inverser af 2×2 -matricer, nemlig Sætning 1.4.18. Vi skal nu se på, hvordan man bestemmer inverser af generelle $n \times n$ -matricer. Vi præsenterer følgende sætning uden bevis.

Sætning 1.4.35. En $n \times n$ -matrix A er invertibel hvis og kun hvis den reducerede echelonform af A er lig $n \times n$ -identitetsmatricen I . Den inverse kan i så fald bestemmes med følgende procedure:

1. Opstil matricen $(A | I)$.
2. Omdan $(A | I)$ til en matrix på reduceret echelonform $(B | C)$.
3. A^{-1} er da lig B .

Eksempel 1.4.36. Vi betragter igen matricen

$$A = \begin{pmatrix} 2 & 3 \\ 1 & -4 \end{pmatrix}.$$

Vi betragter da $(A | I)$ og omdanner denne til reduceret echelonform som følger.

$$\begin{array}{c} \left(\begin{array}{cc|cc} 2 & 3 & 1 & 0 \\ 1 & -4 & 0 & 1 \end{array} \right) \rightarrow \left(\begin{array}{cc|cc} 0 & 11 & 1 & -2 \\ 1 & -4 & 0 & 1 \end{array} \right) \rightarrow \left(\begin{array}{cc|cc} 0 & 1 & 1/11 & -2/11 \\ 1 & -4 & 0 & 1 \end{array} \right) \rightarrow \\ \left(\begin{array}{cc|cc} 0 & 1 & 1/11 & -2/11 \\ 1 & 0 & 4/11 & 3/11 \end{array} \right) \rightarrow \left(\begin{array}{cc|cc} 1 & 0 & 4/11 & 3/11 \\ 0 & 1 & 1/11 & -2/11 \end{array} \right). \end{array}$$

Vi aflæser herfra, at

$$A^{-1} = \frac{1}{11} \begin{pmatrix} 4 & 3 \\ 1 & -2 \end{pmatrix}.$$

Dette stemmer overens med vores svar fra tidligere. \circ

Eksempel 1.4.37. Lad os se på et lidt større eksempel. Vi ønsker at bestemme den inverse (hvis denne findes) til

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 0 & -3 \\ 0 & 3 & 3 \\ 1 & 2 & 4 \end{pmatrix}.$$

Vi opstiller totalmatricen $(A | I)$ og finder den reducerede echelonform af denne.

$$\begin{array}{c} \left(\begin{array}{ccc|ccc} 1 & 0 & -3 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 3 & 3 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & 2 & 4 & 0 & 0 & 1 \end{array} \right) \rightarrow \left(\begin{array}{ccc|ccc} 1 & 0 & -3 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 & 1/3 & 0 \\ 0 & 2 & 7 & -1 & 0 & 1 \end{array} \right) \\ \rightarrow \left(\begin{array}{ccc|ccc} 1 & 0 & -3 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 & 1/3 & 0 \\ 0 & 0 & 5 & -1 & -2/3 & 1 \end{array} \right) \\ \rightarrow \left(\begin{array}{ccc|ccc} 1 & 0 & -3 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 & 1/3 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & -1/5 & -2/15 & 1/5 \end{array} \right) \\ \rightarrow \left(\begin{array}{ccc|ccc} 1 & 0 & 0 & 2/5 & -2/5 & 3/5 \\ 0 & 1 & 0 & 1/5 & 7/15 & -1/5 \\ 0 & 0 & 1 & -1/5 & -2/15 & 1/5 \end{array} \right). \end{array}$$

Altså er A invertibel med invers

$$A^{-1} = \begin{pmatrix} 2/5 & -2/5 & 3/5 \\ 1/5 & 7/15 & -1/5 \\ -1/5 & -2/15 & 1/5 \end{pmatrix}.$$

\circ

Determinanter af større matricer

Vi husker fra tidligere, at determinanten af en 2×2 -matrix er givet ved

$$\det \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} = ad - bc.$$

Vi vil i dette korte afsnit beskrive metoder til at beregne determinanten af større kvadratiske matricer. Vi undlader eksplisit at definere determinanten for generelle $n \times n$ -matricer, da dette er en ikke-triviel opgave.

Sætning 1.4.38 (Laplace-udvikling). *Betrægt en $n \times n$ -matrix*

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix}.$$

Vi kan da beregne $\det A$ ved at udvikle langs søjle i på følgende vis. Lad for $j = 1, \dots, n$ A_{ji} betegne $(n-1) \times (n-1)$ -matricen, der er lig A , men hvor række j og søjle i er blevet fjernet. Da er

$$\det A = (-1)^{1+i} a_{1i} \det A_{1i} + \cdots + (-1)^{n+i} a_{ni} \det A_{ni},$$

hvor $\det A_{ji}$ igen kan beregnes på samme måde. Man fortsætter denne procedure, indtil en af undermatricerne bliver af dimension 2×2 , hvor man så bruger formlen for en 2×2 -matrix.

Bemærkning 1.4.39. Formlen kan godt virke mere skræmmende, end den egentlig er grundet udtrykkene $(-1)^{i+j}$. Det er markant nemmere at huske fortegnsmønstrene

$$\begin{pmatrix} + & - & + \\ - & + & - \\ + & - & + \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} + & - & + & - \\ - & + & - & + \\ + & - & + & - \\ - & + & - & + \end{pmatrix} \quad \text{osv.}$$

Bemærkning 1.4.40. Man må helt selv vælge, hvilken søjle, man udvikler langs. Og faktisk er man ikke engang tvunget til at vælge en søjle, man får også det korrekte svar ved at udvikle langs en vilkårlig række på samme vis.

Metoden forstår bedst gennem eksempler. Vi starter med 3×3 -eksempler, og derefter kaster vi os ud i at beregne determinanten for en 4×4 -matrix.

Eksempel 1.4.41. Lad I betegne 3×3 -identitetsmatricen. Da har vi

$$\det I = 1 \cdot \det \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = 1 \cdot 1 = 1.$$

Med præcist samme fremgangsmåde er det nemt at se, at identitetsmatricen altid har determinant 1 uanset dimension. \circ

Eksempel 1.4.42. Betragt

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 4 & 3 \\ -2 & 0 & 5 \\ 6 & 2 & -1 \end{pmatrix}.$$

Vi skal først vælge en søjle at udvikle ud fra. Vi vælger søjle to, da der er et nul (generelt er det en god strategi at vælge søjlen med flest nuller, hvis sådan en findes). I dette tilfælde er (se ovenstående sætning for definitionen af A_{ij})

$$A_{12} = \begin{pmatrix} -2 & 5 \\ 6 & -1 \end{pmatrix}, \quad A_{22} = \begin{pmatrix} 1 & 3 \\ 6 & -1 \end{pmatrix}, \quad A_{32} = \begin{pmatrix} 1 & 3 \\ -2 & 5 \end{pmatrix}.$$

KAPITEL 1. MATEMATISKE FORUDSÆTNINGER

Dermed er

$$\begin{aligned}\det A &= -4 \cdot \det \begin{pmatrix} -2 & 5 \\ 6 & -1 \end{pmatrix} + 0 \cdot \det \begin{pmatrix} 1 & 3 \\ 6 & -1 \end{pmatrix} - 2 \cdot \begin{pmatrix} 1 & 3 \\ -2 & 5 \end{pmatrix} \\ &= -4 \cdot (-28) - 0 - 2 \cdot 11 = 90.\end{aligned}$$

○

Eksempel 1.4.43. Lad os illustrere med en 4×4 -matrix. Lad

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 3 & -2 & 5 \\ 0 & 4 & 0 & -1 \\ 3 & -1 & 1 & 1 \\ 0 & 4 & 2 & -7 \end{pmatrix}.$$

Vi vælger at udvikle langs den anden række, da der er to nuller. Vi ser ved at bruge fortegnsmønstrene ovenover, at

$$\det A = 4 \cdot \det \begin{pmatrix} 1 & -2 & 5 \\ 3 & 1 & 1 \\ 0 & 2 & -7 \end{pmatrix} + (-1) \cdot \det \begin{pmatrix} 1 & 3 & -2 \\ 3 & -1 & 1 \\ 0 & 4 & 2 \end{pmatrix}.$$

Vi skal dermed beregne determinanten af to 3×3 -matricer. Vi benytter igen Laplaceudvikling! Vi beregner determinanten af den første matrix ved at udvikle langs den første søjle som følger.

$$\det \begin{pmatrix} 1 & -2 & 5 \\ 3 & 1 & 1 \\ 0 & 2 & -7 \end{pmatrix} = 1 \cdot \det \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 2 & -7 \end{pmatrix} - 3 \cdot \begin{pmatrix} -2 & 5 \\ 2 & -7 \end{pmatrix} = 1 \cdot (-9) - 3 \cdot 4 = -21.$$

Ligeledes ses \det , at

$$\det \begin{pmatrix} 1 & 3 & -2 \\ 3 & -1 & 1 \\ 0 & 4 & 2 \end{pmatrix} = -48.$$

Dermed er

$$\det A = 4 \cdot (-21) + (-1) \cdot (-48) = -36.$$

○

Det burde allerede nu være klart, at Laplace-udvikling ikke er en smart metode for store matricer. Allerede for 4×4 -matricer skal man holde tungen lige i munden, og for 5×5 og derover bliver det næsten umuligt at undgå regnfejl. Det er også en utrolig langsom algoritme grundet den rekursive natur. Faktisk er det ikke svært at se, at denne metode kræver i størrelsesordenen $n!$ beregninger for en $n \times n$ -matrix, hvilket gør den uegnet selv for en stor computer. Heldigvis har determinanten et væld af nyttige egenskaber, man kan bruge til at udregne den mere effektivt.

Sætning 1.4.44. *Lad A være en $n \times n$ -matrix, og lad A' være matricen lig A , bortset fra at en af rækkerne har fået lagt en konstant gange en anden række i A til sig. Da er $\det A = \det A'$.*

Eksempel 1.4.45. Lad igen

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 4 & 3 \\ -2 & 0 & 5 \\ 6 & 2 & -1 \end{pmatrix}.$$

Ved at bruge sætningen ovenover, har vi

$$\det A = \det \begin{pmatrix} 1 & 4 & 3 \\ 0 & 8 & 11 \\ 0 & -22 & -19 \end{pmatrix} = \det \begin{pmatrix} 1 & 4 & 3 \\ 0 & 8 & 11 \\ 0 & 2 & 14 \end{pmatrix}.$$

Vi vælger at udvikle langs første søjle og får

$$\det A = 1 \cdot \det \begin{pmatrix} 8 & 11 \\ 2 & 14 \end{pmatrix} = 112 - 22 = 90.$$

Dette stemmer med resultatet fra før. ○

Med denne metode kan man implementere forholdsvis hurtige algoritmer til at beregne determinanter af selv ret store matricer.

Egenværdier og diagonalisering

Diagonalisering er en særdeles praktisk metode i lineær algebra til udregninger. Rigtig ofte er vi interesserede i at beregne potenser af en matrix A . Men som I nok har erfaret, er det langsmmeligt at beregne matrix-produkter. Selv for en computer er det en langsmmeligt proces, specielt hvis man har en forholdsvis stor matrix, og potensen er meget høj. Dog er der en type matrix, der ikke er svær at udregne potenser af, nemlig *diagonalmatricer*. Dette er matricer på formen

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & a_{22} & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & 0 \\ 0 & 0 & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix}.$$

Her er det nemt at beregne A^k , idet

$$A^k = \begin{pmatrix} a_{11}^k & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & a_{22}^k & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & 0 \\ 0 & 0 & \cdots & a_{nn}^k \end{pmatrix}$$

og potenser af tal er hurtige at beregne, i hvert fald for en computer. Kunne det ikke være rart, hvis vi kunne tage en matrix og skrive den på en form, hvor der indgår en diagonalmatrix? Det er dette, diagonalisering handler om. For at fastlægge en metode er vi dog nødt til at tage nogle omveje. Vi starter med at definere egenværdier og egenvektorer.

Definition 1.4.46. $\lambda \in \mathbb{R}$ kaldes en *egenværdi* for matricen A og $v \neq 0$ en *egenvektor* for λ , hvis der gælder

$$Av = \lambda v.$$

En egenvektor er en vektor, som matricen A blot skalerer. Skaleringsfaktoren er den tilhørende egenværdi. Inden vi giver eksempler, så lad os se på ligningen

$$Av = \lambda v.$$

Vi ved, at $v = I_n v$. Dermed kan vi skrive

$$0 = Av - \lambda I_n v = (A - \lambda I_n)v.$$

Det er klart, at $v = 0$ er en løsning, men i definitionen ovenover har vi udeladt dette tilfælde. Dette skyldes, at definitionen er tom/uinteressant, hvis vi tillader 0 at være en egenvektor. Med andre ord antager vi, at $v \neq 0$. Vi har nu et homogent lineært ligningssystem

$$(A - \lambda I_n)v = 0,$$

og vi ved, hvordan vi skal løse sådan et. Bemærk, at $A - \lambda I_n$ ikke kan være invertibel. Hvis $(A - \lambda I_n)^{-1}$ eksisterer, kan vi gange begge sider af ovenstående ligning og få $v = 0$, hvilket ikke er tilfældet. Fra forrige afsnit ved vi da, at determinanten af $A - \lambda I_n$ skal være 0. Dette leder os til følgende definition.

KAPITEL 1. MATEMATISKE FORUDSÆTNINGER

Definition 1.4.47. For en matrix $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ defineres det *karakteristiske polynomium* til at være

$$p(t) = \det(A - tI_n).$$

Fra definitionen og diskussionen ovenover har vi følgende resultat.

Sætning 1.4.48. λ er en egenværdi for matricen A hvis og kun hvis λ er en rod i det karakteristiske polynomium $p(t)$ for A (dvs. hvis $p(\lambda) = 0$).

Eksempel 1.4.49. Betragt matricen

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

Det karakteristiske polynomium er

$$\begin{aligned} p(t) &= \det(A - tI_2) = \det \begin{pmatrix} 2-t & 0 \\ -1 & 1-t \end{pmatrix} \\ &= (2-t)(1-t) - (-1) \cdot 0 = (2-t)(1-t). \end{aligned}$$

Rødderne ses at være $\lambda_1 = 2$ og $\lambda_2 = 1$. Lad os nu bestemme egenvektorerne. Vi skal finde egenvektorer for de to egenværdier for sig, og vi begynder med λ_1 (\rightarrow betyder her, at vi omskriver matricen til reduceret rækkeechelonform):

$$\begin{pmatrix} 2-\lambda_1 & 0 \\ -1 & 1-\lambda_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ -1 & -1 \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Vi løser nu

$$\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x+y \\ 0 \end{pmatrix}$$

og vi ser, at $x = -y$. Vælger vi $x = 1$, har vi egenvektoren $(1, -1)$ hørende til λ_1 . Vi gentager nu proceduren for λ_2 :

$$\begin{pmatrix} 2-\lambda_2 & 0 \\ -1 & 1-\lambda_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Vi løser

$$\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x \\ 0 \end{pmatrix}$$

og får $x = 0$. y kan være hvad som helst, så vi vælger $y = 1$. Dermed er $(0, 1)$ en egenvektor til λ_2 . For at konkludere, så har vi fundet egenværdierne 2 og 1 med tilhørende egenvektorer $(1, -1)$ og $(0, 1)$. Vi kan verificere dette:

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

○

En sidste bemærkning, inden vi fortsætter. I ovenstående da vi løste vores ligningssystemer, traf vi bare et valg. F.eks. sagde vi, at vi valgte $x = 1$. Som den vakse læser nok har opdaget, så var der uendelig mange løsninger i begge tilfælde. Disse andre løsninger svarer blot til skaleringer af vores valgte egenvektor. Generelt, hvis v er en egenvektor for matricen A , da er $a \cdot v$ også en egenvektor for A for alle $a \in \mathbb{R} \setminus \{0\}$.

Eksempel 1.4.50. Lad os tage endnu et eksempel med en lidt større matrix. Lad

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

Vi beregner det karakteristiske polynomium:

$$\begin{aligned} p(t) &= \det(A - tI_3) = \det \begin{pmatrix} 0-t & -1 & -1 \\ 1 & 2-t & 1 \\ 1 & 1 & 2-t \end{pmatrix} \\ &= -t \cdot \det \begin{pmatrix} 2-t & 1 \\ 1 & 2-t \end{pmatrix} - 1 \cdot \det \begin{pmatrix} -1 & -1 \\ 1 & 2-t \end{pmatrix} \\ &\quad + 1 \cdot \det \begin{pmatrix} -1 & -1 \\ 2-t & 1 \end{pmatrix} \\ &= -t((2-t)^2 - 1) - ((-1)(2-t) - 1(-1)) \\ &\quad + (-1)1 - (2-t)(-1) \\ &= -t(2-t)^2 + t + (2-t) - 1 - 1 + (2-t) \\ &= -t(2-t)^2 + (2-t) + (2-t) - (2-t) \\ &= -t(2-t)^2 + (2-t) \\ &= (2-t)(-t(2-t) + 1) \\ &= (2-t)(t^2 + 1 - 2t) \\ &= -(t-1)^2(t-2) \end{aligned}$$

Vi ser, at rødderne er $\lambda_1 = 1$ og $\lambda_2 = 2$. Vi bemærker desuden, at λ_1 er en dobbeltrod, idet faktoren $(t-1)$ i polynomiet er sat i anden potens. Vi bestemmer nu egenvektorerne.

Vi starter med λ_1 :

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} 0-\lambda_1 & -1 & -1 \\ 1 & 2-\lambda_1 & 1 \\ 1 & 1 & 2-\lambda_1 \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} -1 & -1 & -1 \\ 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \end{pmatrix} \\ &\rightarrow \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

Vi løser nu ligningssystemet

$$\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x+y+z \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix},$$

hvilket giver $x+y+z = 0$, så der er to frie variable. Vælg $y = 0$, da er $x = -z$, og vi får en løsning givet ved vektoren $v_1 = (1, 0, -1)$. Vælges $z = 0$ fås en løsning til $v_2 = (1, -1, 0)$. Her benytter vi et smart trick. Antal egenvektorer til en given egenværdi λ kan maksimalt være lig potensen af faktoren $(t - \lambda)$ i det karakteristiske polynomium. Dermed kan vi ikke finde nye egenvektorer til λ_1 , som ikke kan skrives som en linearkombination af v_1 og v_2 . Vi finder nu egenvektorer til λ_2 . Vi har

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} 0-\lambda_2 & -1 & -1 \\ 1 & 2-\lambda_2 & 1 \\ 1 & 1 & 2-\lambda_2 \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} -2 & -1 & -1 \\ 1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 0 \end{pmatrix} \\ &\rightarrow \begin{pmatrix} 0 & -1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & -1 \end{pmatrix} \\ &\rightarrow \begin{pmatrix} 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & -1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

og dermed ligningssystemet

$$\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & -1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x+z \\ y-z \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Vi har da $x+z=0$ og $y-z=0$. Altså er $y=z=-x$, og vælger vi $x=1$, får vi løsningen $v_3=(1, -1, -1)$. For at opsummere, vi har fundet egenværdierne $\lambda_1=1$ og $\lambda_2=2$. Til den første egenværdi har vi de to egenvektorer $v_1=(1, 0, -1)$ og $v_2=(1, -1, 0)$, mens den anden egenværdi har egenvektoren $v_3=(1, -1, -1)$. \circ

Lad os opsummere nogle smarte tricks, vi har benyttet i følgende sætning.

Sætning 1.4.51. *Lad $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$. Da gælder:*

1. *A kan maksimalt have n forskellige egenværdier.*
2. *A kan maksimalt have n forskellige egenvektorer.*
3. *En given egenværdi λ for A kan maksimalt have lige så mange tilhørende egenvektorer som potensen af $(t - \lambda)$ i det karakteristiske polynomium.*

Bevis. Første punkt følger af algebraens fundamentalsætning, som siger, at et polynomium af grad n maksimalt kan have n forskellige rødder. Resten af beviset udelades. Det andet punkt er sætning 5.1.8 i [1], og punkt tre er sætning 5.3.7 i [1]. \blacksquare

Vi har nu fået en fornemmelse for egenværdier og egenvektorer, og vi ved, hvordan de udregnes. Vi kan nu vende tilbage til formålet med denne sektion, nemlig diagonalisering.

Definition 1.4.52. En matrix $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ kaldes *diagonaliserbar*, hvis der eksisterer en *diagonalmatrix* $D \in \mathbb{R}^{n \times n}$ og en invertibel matrix $B \in \mathbb{R}^{n \times n}$, så $A = BDB^{-1}$.

Antag, at A er diagonaliserbar, og at vi ønsker at bestemme A^k for en potens $k \in \mathbb{N}$. Skriv $A = BDB^{-1}$ med matricer B og D som i definitionen ovenover. Da har vi

$$\begin{aligned} A^k &= (BDB^{-1})(BDB^{-1}) \cdots (BDB^{-1}) \\ &= BD(B^{-1}B)D(B^{-1}B)D \cdots (B^{-1}B)DB^{-1} \\ &= BD^k B^{-1}, \end{aligned}$$

så vi har reduceret et problem med at lave k matrixmultiplikationer til et problem, hvor vi skal lave to. Dette er langt mere effektivt i praksis. Vi mangler blot at redegøre for fremgangsmåden til at bestemme B . Følgende sætning giver svaret:

Sætning 1.4.53. *Antag, at $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ har egenværdier $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n$ (ikke nødvendigvis forskellige) med tilhørende egenvektorer v_1, v_2, \dots, v_n (hvoraf nogle kan tilhøre samme egenværdier). Med*

$$B = (v_1 \ v_2 \ \cdots \ v_n) \quad \text{og} \quad D = \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \lambda_2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \cdots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & \lambda_n \end{pmatrix}$$

er $A = BDB^{-1}$.

Bevis. Lad os beregne AB med B givet som i sætningen:

$$\begin{aligned} AB &= A(v_1 \ v_2 \ \cdots \ v_n) = (Av_1 \ Av_2 \ \cdots \ Av_n) \\ &= (\lambda_1 v_1 \ \lambda_2 v_2 \ \cdots \ \lambda_n v_n) \\ &= (v_1 \ v_2 \ \cdots \ v_n) \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \lambda_2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \cdots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & \lambda_n \end{pmatrix} \\ &= BD \end{aligned}$$

Såfremt egenvektorerne vælges på passende vis (vi kommer ikke ind på detaljerne her i forløbet), er B invertibel. Ganger vi med B^{-1} på højre side på hver side af lighedstegnet, får vi $A = BDB^{-1}$ som ønsket. ■

Vi har nu en komplet procedure til at diagonalisere.

Vi har en matrix $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$. For at diagonalisere A , følger vi følgende fremgangsmåde.

1. Beregn egenværdierne $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n$ for A . Husk, at de ikke behøver at være forskellige.
2. Bestem egenvektorerne for A , v_1, v_2, \dots, v_m .
3. Hvis der ikke er n forskellige egenvektorer, kan vi ikke diagonalisere A , og processen stopper.
4. Lad $B = (v_1 \ v_2 \ \cdots \ v_n)$, og lad D være diagonalmatricen med egenværdierne $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n$ som indgange i diagonalen.
5. Diagonaliseringen af A er $A = BDB^{-1}$.

Eksempel 1.4.54. Lad os tage et eksempel på denne fremgangsmåde. Vi bruger matricen

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

fra før. Vi fandt egenværdierne $\lambda_1 = 2$ og $\lambda_2 = 1$ med tilhørende egenvektorer $(1, -1)$ og $(0, 1)$. Da har vi

$$B = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ -1 & 1 \end{pmatrix}, \quad D = \begin{pmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Lad os verificere, at $A = BDB^{-1}$:

$$\begin{aligned} BDB^{-1} &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ -1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ -1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2 & 0 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 & 0 \\ -1 & 1 \end{pmatrix} = A \end{aligned}$$

Bemærk, at rækkefølgen af egenværdierne i D skal stemme overens med rækkefølgen af egenvektorerne i B . Det skal forstås sådan, at hvis λ vælges til at være egenværdi nummer 1, skal en tilhørende egenvektor udgøre den første søjle i B . Lad os for fuldstændigheds skyld tage det andet eksempel med matricen

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

Da er

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

Det overlades til den ivrige læser at verificere dette ved at tage de to matrix-produkter.

○

Sporet, determinanten og egenværdier

Der viser sig at være en pån sammenhæng mellem egenværdierne og determinanten af en matrix.

Sætning 1.4.55. *Lad A være en $n \times n$ -matrix med n egenværdier $\lambda_1, \dots, \lambda_n$ (ikke nødvendigvis forskellige). Da er determinanten for A lig produktet af egenværdierne,*

$$\det A = \lambda_1 \cdots \lambda_n.$$

Bevis. Vi giver et bevis baseret direkte på definitionen. Man kan også lave et elegant bevis i tilfældet, hvor A er diagonalisérbar (se opgaverne). Vi ved, at egenværdierne er givet ved rødderne i det karakteristiske polynomium, og dermed kan dette faktoriseres som

$$p(t) = a(t - \lambda_1) \cdots (t - \lambda_n),$$

hvor a er et tal, som også er den førende koefficient i det karakteristiske polynomium (dvs. koefficienten foran t^n). Ved at udvikle langs diagonalen i matricen $A - tI_n$ er det ikke svært at overbevise sig selv om, at $a = (-1)^n$. Dermed kan vi skrive

$$p(t) = (-1)^n(t - \lambda_1) \cdots (t - \lambda_n) = (\lambda_1 - t) \cdots (\lambda_n - t).$$

Dermed er $\det A = p(0) = \lambda_1 \cdots \lambda_n$ som ønsket. ■

Eksempel 1.4.56. Betragt matricen

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

fra Eksempel 1.4.50. I eksemplet så vi, at egenværdierne var givet ved $\lambda_1 = 1$ og $\lambda_2 = 2$. Dog var der to egenvektorer knyttet til λ_1 , så sætningen ovenover siger, at $\det A = 1^2 \cdot 2 = 2$. Vi kan tjekke dette ved at beregne determinanten med Laplace-udvikling som normalt:

$$\begin{aligned} \det A &= 0 \cdot \det \begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 2 \end{pmatrix} - 1 \cdot \det \begin{pmatrix} -1 & -1 \\ 1 & 2 \end{pmatrix} + 1 \cdot \det \begin{pmatrix} -1 & -1 \\ 2 & 1 \end{pmatrix} \\ &= 0 - (-2 + 1) + (-1 + 2) = 1 + 1 = 2. \end{aligned}$$

Svarene stemmer overens, som de burde. ○

Egenværdierne for en matrix har også en pån sammenhæng med et andet begreb, nemlig *sporet*.

Definition 1.4.57. For en $n \times n$ -matrix A kaldes summen af diagonalindgangene for sporet af A og betegnes $\text{Tr}(A)$.

Navnet "Tr" kommer af det engelske *trace*. Følgende sætning (som vi giver uden bevis) giver en pån sammenhæng mellem egenværdierne og sporet.

Sætning 1.4.58. *Lad A være en $n \times n$ -matrix med n egenværdier $\lambda_1, \dots, \lambda_n$ (ikke nødvendigvis forskellige). Da er sporet af A lig summen af A 's egenværdier,*

$$\text{Tr}(A) = \lambda_1 + \cdots + \lambda_n.$$

Eksempel 1.4.59. Betragt atter

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

Vi ser, at $\text{Tr}(A) = 4$. Vi så, at egenværdierne var 1, 1 og 2, idet 1 har to tilhørende egenvektorer. Og det passer, at $4 = 1 + 1 + 2$. ○

Transponering og symmetriske matricer

Definition 1.4.60. Lad $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$. Den transponerede matrix $A^T \in \mathbb{R}^{n \times m}$ er matricen, hvis i 'te søjle er lig den i 'te række i A .

Lidt løst kan man sige, at A^T fås ved at bytte rundt på rækker og søjler i A . Lad os tage et eksempel. Se på

$$A = \begin{pmatrix} 1 & -3 & 2 \\ 0 & 1 & -4 \end{pmatrix}.$$

Da vil

$$A^T = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ -3 & 1 \\ 2 & -4 \end{pmatrix}.$$

Bemærk, at matrixprodukterne AA^T og A^TA altid findes. $AA^T \in \mathbb{R}^{m \times m}$, og $A^TA \in \mathbb{R}^{n \times n}$, så AA^T og A^TA er ovenikøbet kvadratiske. Dog har de ikke samme dimension, medmindre A er kvadratisk (dvs. $m = n$). Vi har faktisk allerede set transponering. Bemærk, at prikproduktet af to vektorer v_1 og v_2 i \mathbb{R}^n kan skrives som

$$v_1 \cdot v_2 = v_1^T v_2,$$

hvor højresiden er et matrixprodukt. Vi har nogle regneregler for transponering, der er nyttige at have i baghovedet.

Sætning 1.4.61. Vi har følgende egenskaber/regneregler for transponering

1. For enhver matrix A gælder $(A^T)^T = A$.
2. For matricer A og B af samme dimensioner gælder $(A + B)^T = A^T + B^T$.
3. Lad $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ og $B \in \mathbb{R}^{n \times p}$. Da er $(AB)^T = B^T A^T$ (bemærk, at rækkefølgen vender).
4. $\det A^T = \det A$ for enhver kvadratisk matrix A .
5. $(A^T)^{-1} = (A^{-1})^T$.

For en matrix A , se igen på den kvadratiske matrix AA^T . Ved at bruge regnereglerne ovenover har vi

$$(AA^T)^T = (A^T)^T A^T = AA^T.$$

Altså sker der ingenting, når vi transponerer AA^T . Det samme sker for A^TA , som læseren kan verificere. En matrix B med egenskaben $B^T = B$ fortjener sit eget navn. Bemærk, at dette kun kan lade sigøre for kvadratiske B .

Definition 1.4.62. En matrix A kaldes *symmetrisk*, hvis $A^T = A$.

I_n er et oplagt eksempel på en symmetrisk matrix. Andre eksempler kunne være

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 2 & 3 \end{pmatrix}, \quad B = \begin{pmatrix} 1 & -5 & 0 \\ -5 & 7 & 4 \\ 0 & 4 & -11 \end{pmatrix}.$$

Vi bemærker, at navnet symmetrisk giver mening, da matricen ser ens ud både over og under diagonalen.

Inden vi afslutter afsnittet om lineær algebra, vil vi nævne, at den fulde historie bag egenværdier, egenvektorer og diagonalisering kan findes i [1] og [2]. Sidstnævnte har en mere pædagogisk gennemgang i forhold til det teoretiske aspekt af lineær algebra og kan klart anbefales til enhver, der ønsker en god forståelse for feltet.

Opgaver

- **Opgave 1.4.1:**

Lad

$$v_1 = \begin{pmatrix} -3 \\ 5 \end{pmatrix} \quad \text{og} \quad v_2 = \begin{pmatrix} 2 \\ 3 \end{pmatrix}.$$

- 1) Beregn $v_1 + v_2$ og $v_1 - v_2$.
- 2) Tegn $v_1, v_2, v_1 + v_2$ og $v_1 - v_2$ ind i et plan.

- **Opgave 1.4.2:**

Lad

$$A = \begin{pmatrix} 5 & 1 \\ 2 & 0 \end{pmatrix}, \quad B = \begin{pmatrix} 0 & 3 \\ -1 & -5 \end{pmatrix}, \quad v_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \quad \text{og} \quad v_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ -7 \end{pmatrix}.$$

Beregn Av_1, Av_2, Bv_1 og Bv_2 .

- **Opgave 1.4.3:**

Lad

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 7 & -2 \\ 0 & 0 & -3 \\ -1 & 4 & 6 \end{pmatrix} \quad \text{og} \quad v = \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ 3 \end{pmatrix}.$$

Beregn Av .

- **Opgave 1.4.4: Skaleringsmatricer**

Lad $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ være givet ved

$$A = \begin{pmatrix} a & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & a & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & a \end{pmatrix}.$$

Sådan en matrix kaldes en *skaleringsmatrix*. Vi ser på tilfældet $n = 2$ og definerer

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

Lad $v = (1, 1)$.

- 1) Beregn Av og Bv .

2) Tegn v, Av og Bv i et koordinatsystem. Forklar, hvad matricerne A og B gør.

- **Opgave 1.4.5: Rotationsmatricer**

Lad $R(\theta) \in \mathbb{R}^{2 \times 2}$ være givet ved

$$R(\theta) = \begin{pmatrix} \cos(\theta) & -\sin(\theta) \\ \sin(\theta) & \cos(\theta) \end{pmatrix}.$$

Sådan en matrix kaldes en *rotationsmatrix*.

- 1) Lad $e_1 = (1, 0)$ og $e_2 = (0, 1)$. Beregn $R(\theta)e_1$ og $R(\theta)e_2$. Tegn $e_1, e_2, R(\theta)e_1$ og $R(\theta)e_2$ i et koordinatsystem.

2) Lad nu $v = (x_1, x_2)$ være en generel vektor. Forklar, hvad $R(\theta)$ gør ved vektoren v . Det er en rigtig god idé at lave en illustration.

- **Opgave 1.4.6:**

Lad $A \in \mathbb{R}^{2 \times 2}$, $B \in \mathbb{R}^{2,5}$ og $C \in \mathbb{R}^{5,2}$. Hvilke af følgende udtryk er veldefinerede?

- AB

- BA
- BC
- CB
- $BC + A$
- $CB + A$
- $AB + C$
- ABC
- CAB

•• Opgave 1.4.7:Beregn AB for:

1)

$$A = \begin{pmatrix} 2 & -1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad B = \begin{pmatrix} 4 & 6 \\ 3 & 11 \end{pmatrix}$$

2)

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 2 & 0 \\ 3 & 5 \end{pmatrix}, \quad B = \begin{pmatrix} 7 & 1 & 0 \\ 0 & -2 & -8 \end{pmatrix}$$

3)

$$A = \begin{pmatrix} 1 \\ 4 \\ 0 \\ 2 \end{pmatrix}, \quad B = (-2 \quad 3 \quad -5 \quad -1)$$

4)

$$A = (1 \quad 1 \quad 1 \quad 1 \quad 1), \quad B = \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ 3 \\ 4 \\ 5 \end{pmatrix}$$

••• Opgave 1.4.8: Prikproduktet

I denne opgave skal vi undersøge prikproduktet lidt nærmere.

1) Udregn prikprodukterne af følgende vektorer med hinanden (i alt seks prikprodukter):

$$v_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad v_2 = \begin{pmatrix} 3 \\ -5 \end{pmatrix}, \quad v_3 = \begin{pmatrix} 0 \\ 4 \end{pmatrix}, \quad v_4 = \begin{pmatrix} 10 \\ 6 \end{pmatrix}$$

Vi siger, at to vektorer er *ortogonale*, hvis deres prikprodukt er 0.

2) Hvilke af ovenstående vektorer er ortogonale med hinanden?

3) Tegn v_1, v_2, v_3 og v_4 i et koordinatsystem. Hvad betyder det geometrisk, at vektorer er ortogonale?4) Lad nu $v = (x_1, x_2)$ være en vilkårlig vektor. Da defineres *tværvektoren* \hat{v} som $\hat{v} = (-x_2, x_1)$ (udtales "v hat"). Hvordan ser vektoren \hat{v} ud i forhold til v ? Tegn! Vis, at v og \hat{v} er ortogonale.

KAPITEL 1. MATEMATISKE FORUDSÆTNINGER

5) Lad nu $v = (x_1, x_2, \dots, x_n) \in \mathbb{R}^n$. Hvad er længden af vektoren v ? Vink: Brug Pythagoras. I er velkomne til at nøjes med at vise det for $n = 2$.

6) Hvordan er længden af en vektor og prikproduktet relateret?

•• **Opgave 1.4.9:**

Beregn AB for:

1)

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 3 \\ 3 & -2 & 5 \end{pmatrix}, \quad B = \begin{pmatrix} 0 & 4 & 1 \\ -1 & 2 & 2 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

2)

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

3)

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 2 \\ 0 & 3 & 2 \\ 2 & 2 & 5 \end{pmatrix}, \quad B = \begin{pmatrix} 5 & 7 & -8 \\ 0 & 0 & 1 \\ -3 & 4 & 10 \end{pmatrix}$$

4)

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 2 & 3 \\ -1 & -1 & 0 & 2 \\ 0 & -3 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad B = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -3 & 2 \\ 8 & 0 \\ 0 & 7 \end{pmatrix}$$

••• **Opgave 1.4.10:**

I denne opgave beviser vi punkt 2. af sætning 1.4.15. Lad $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$.

1) Lad $v \in \mathbb{R}^n$. Bevis, at $I_nv = v$.

2) Brug forrige delopgave til at bevise $I_n A = A$.

3) Bevis, at $A I_n = A$.

• **Opgave 1.4.11:**

Bestem determinanterne af følgende matricer:

1)

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

2)

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

3)

$$\begin{pmatrix} 4 & 7 \\ 0 & 17 \end{pmatrix}$$

4)

$$\begin{pmatrix} 2 & 4 \\ 6 & 12 \end{pmatrix}$$

•• Opgave 1.4.12:Bestem A^{-1} af følgende matricer:

1)

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

2)

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

3)

$$\begin{pmatrix} 4 & 3 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

4)

$$\begin{pmatrix} -2 & 8 \\ 2 & 4 \end{pmatrix}$$

•• Opgave 1.4.13:

Omskriv ligningssystemet

$$4x - 3y = 0$$

$$2x + 6y = 2$$

til formen

$$A \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 2 \end{pmatrix}$$

og løs ligningssystemet ved at bruge matrixberegninger.

•• Opgave 1.4.14:

Bevis Sætning 1.4.18.

•• Opgave 1.4.15:

Omskriv ligningssystemet

$$x + y = 3$$

$$5x + 10y = 20$$

til formen

$$A \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 2 \end{pmatrix}$$

og løs ligningssystemet ved at bruge matrixberegninger.

• Opgave 1.4.16:

Omskriv følgende matricer til matricer på reduceret echelonform:

$$A = \begin{pmatrix} 4 & 5 \\ -1 & 2 \end{pmatrix}, \quad B = \begin{pmatrix} -3 & 7 \\ -6 & 14 \end{pmatrix}, \quad C = \begin{pmatrix} 1 & 7 \\ -11 & 0 \end{pmatrix}$$

•• Opgave 1.4.17:

Omskriv følgende matricer til matricer på reduceret echelonform:

1)

$$A = \begin{pmatrix} -3 & -6 & -9 \\ 4 & 2 & 10 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

2)

$$B = \begin{pmatrix} 2 & -4 & 7 \\ 0 & 3 & 14 \\ 1 & 1 & 1 \end{pmatrix}$$

3)

$$C = \begin{pmatrix} -2 & -4 & 7 \\ 0 & 3 & 14 \\ 2 & 10 & 21 \end{pmatrix}$$

• **Opgave 1.4.18:**

Omskriv følgende matrix til en matrix på reduceret echelonform:

$$\begin{pmatrix} 9 & 2 & 0 \\ 1 & -2 & -5 \\ 4 & -3 & 11 \\ 5 & -3 & 2 \end{pmatrix}$$

• **Opgave 1.4.19:**

Betrægt ligningssystemet

$$\begin{aligned} 5x + 2y &= 5 \\ 4x - 3y &= 0 \end{aligned}$$

1) Opskriv totalmatricen for ligningssystemet.

2) Reducér totalmatricen, så den kommer på reduceret echelonform.

3) Opskriv løsningerne til ligningssystemet eller argumentér for, at de ikke findes.

• **Opgave 1.4.20:**

Betrægt ligningssystemet

$$\begin{aligned} 5x + 3y &= 5 \\ 15x + 9y &= 0 \end{aligned}$$

1) Opskriv totalmatricen for ligningssystemet.

2) Reducér totalmatricen, så den kommer på reduceret echelonform.

3) Opskriv løsningerne til ligningssystemet eller argumentér for, at de ikke findes.

• **Opgave 1.4.21:**

Betrægt ligningssystemet

$$\begin{aligned} -x + 9y &= -13 \\ 2x - 3y &= 8 \end{aligned}$$

1) Opskriv totalmatricen for ligningssystemet.

2) Reducér totalmatricen, så den kommer på reduceret echelonform.

3) Opskriv løsningerne til ligningssystemet eller argumentér for, at de ikke findes.

• **Opgave 1.4.22:**

Betrægt ligningssystemet

$$\begin{aligned} 5x + 2y &= 5 \\ 15x + 6y &= 15 \end{aligned}$$

- 1) Opskriv totalmatricen for ligningssystemet.
- 2) Reducér totalmatricen, så den kommer på reduceret echelonform.
- 3) Opskriv løsningerne til ligningssystemet, eller argumentér for, at de ikke findes.

••• Opgave 1.4.23:

Betrægt ligningssystemet

$$\begin{aligned} ax + by &= 0 \\ cx + dy &= 0 \end{aligned}$$

hvor $a, b, c, d \in \mathbb{R}$. Vis, at $(x, y) = (0, 0)$ er den eneste løsning til ligningssystemet hvis og kun hvis $ad - bc \neq 0$, dvs. hvis og kun hvis

$$\det \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}$$

•• Opgave 1.4.24:

Betrægt ligningssystemet

$$\begin{aligned} x + y + 3z &= 0 \\ -2x - 4y + 6z &= 0 \\ 5y + 10z &= 0 \end{aligned}$$

- 1) Opskriv totalmatricen for ligningssystemet.
- 2) Reducér totalmatricen til en matrix på reduceret echelonform.
- 3) Løs ligningssystemet.

•• Opgave 1.4.25:

Betrægt ligningssystemet

$$\begin{aligned} 2x + 14y + 14z &= 0 \\ -2x - 4y + 6z &= 0 \\ 5y + 10z &= 0 \end{aligned}$$

- 1) Opskriv totalmatricen for ligningssystemet.
- 2) Reducér totalmatricen til en matrix på reduceret echelonform.
- 3) Løs ligningssystemet.

•• Opgave 1.4.26:

Betrægt ligningssystemet

$$\begin{aligned} -5x + y + 3z &= 0 \\ -15x - 5y + 20z &= 0 \\ 5x + 10z &= 0 \end{aligned}$$

- 1) Opskriv totalmatricen for ligningssystemet.
- 2) Reducér totalmatricen til en matrix på reduceret echelonform.
- 3) Løs ligningssystemet.

•• Opgave 1.4.27:

Betrægt ligningssystemet

$$\begin{aligned} x + y + 3z + w &= 0 \\ -2x - 4y + 6z - 3w &= 0 \\ x + 2z &= 0 \end{aligned}$$

KAPITEL 1. MATEMATISKE FORUDSÆTNINGER

- 1) Opskriv totalmatricen for ligningssystemet.
- 2) Reducér totalmatricen til en matrix på reduceret echelonform.
- 3) Løs ligningssystemet.

•• Opgave 1.4.28:
Betragt ligningssystemet

$$\begin{aligned} 6x + 3y + 15z &= 0 \\ -2x - 4z &= 0 \\ x + 2z &= 2 \end{aligned}$$

- 1) Opskriv totalmatricen for ligningssystemet.
- 2) Reducér totalmatricen til en matrix på reduceret echelonform.
- 3) Løs ligningssystemet.

••• Opgave 1.4.29:
Løs følgende ligningssystem i de fem variable x_1, x_2, x_3, x_4, x_5 :

$$\begin{aligned} 4x_1 - 2x_2 + x_4 + 5x_5 &= 0 \\ 4x_2 - 8x_3 + 12x_4 - 2x_5 &= 0 \\ 5x_3 + 15x_4 - 10x_5 &= 0 \end{aligned}$$

••• Opgave 1.4.30:
Løs følgende ligning i de fem variable x_1, x_2, x_3, x_4, x_5 :

$$x_1 + 6x_2 - 10x_3 - 7x_4 + 12x_5 = -11$$

•• Opgave 1.4.31:
Bestem den inverse af følgende matricer.

1)

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 3 & 2 \\ 1 & 5 & 4 \end{pmatrix}$$

2)

$$B = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 0 & 2 & 3 \\ -1 & -1 & -2 \end{pmatrix}$$

3)

$$C = \begin{pmatrix} 0 & 3 & 0 \\ 0 & 2 & 7 \\ -1 & 2 & -2 \end{pmatrix}$$

•• Opgave 1.4.32:
Bestem determinanten af følgende matricer gennem Laplace-udvikling.

1)

$$A = \begin{pmatrix} 1 & -4 & 5 \\ 0 & 7 & 2 \\ -3 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

2)

$$B = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \end{pmatrix}$$

3)

$$C = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ -2 & 0 & 0 \\ 5 & 7 & -8 \end{pmatrix}$$

••• Opgave 1.4.33:

Beregn determinanten af matricen

$$A = \begin{pmatrix} -3 & 0 & 5 & 8 \\ 0 & 2 & 1 & -3 \\ 4 & 0 & -2 & 5 \\ 7 & -3 & 1 & 1 \end{pmatrix}.$$

• Opgave 1.4.34:Betragt matricen A givet ved

$$A = \begin{pmatrix} 4 & 4 \\ 0 & 2 \end{pmatrix}.$$

1) Beregn egenværdierne for A .2) Find egenvektorerne for A .3) Argumentér for, hvorfor A er diagonaliserbar. Find en invertibel matrix B og en diagonalmatrix D , så $A = BDB^{-1}$.**• Opgave 1.4.35:**Betragt matricen A givet ved

$$A = \begin{pmatrix} 3 & 3 \\ 3 & 3 \end{pmatrix}.$$

1) Beregn egenværdierne for A .2) Find egenvektorerne for A .3) Argumentér for, hvorfor A er diagonaliserbar. Find en invertibel matrix B og en diagonalmatrix D , så $A = BDB^{-1}$.**•• Opgave 1.4.36:**Betragt matricen A givet ved

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 5 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}.$$

1) Beregn egenværdierne for A .2) Find egenvektorerne for A .3) Argumentér for, hvorfor A er diagonaliserbar. Find en invertibel matrix B og en diagonalmatrix D , så $A = BDB^{-1}$.**••• Opgave 1.4.37:**Lad matricen A være givet ved

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 0 & -1 \\ 0 & 4 & 2 \\ 0 & 2 & 0 \end{pmatrix}$$

- 1) Beregn egenværdierne for A .
- 2) Find egenvektorerne for A .
- 3) Argumentér for, hvorfor A er diagonaliserbar. Find en invertibel matrix B og en diagonalmatrix D , så $A = BDB^{-1}$.

•• **Opgave 1.4.38:**

Bestem egenværdier og egenvektorer for:

- 1) Identitetsmatricen I_n .
- 2) Nulmatricen $O \in \mathbb{R}^{n \times n}$.

•• **Opgave 1.4.39:**

Lad $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ være en matrix med en egenværdi λ og tilhørende egenvektor v . Vis, at λ^k er en egenværdi for A^k med tilhørende egenvektor v .

•• **Opgave 1.4.40:**

Lad $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ være en invertibel matrix med egenværdi $\lambda \neq 0$ og tilhørende egenvektor v . Vis, at $1/\lambda$ er en egenværdi for A^{-1} med tilhørende egenvektor v .

•• **Opgave 1.4.41:**

Lad A være en matrix med en egenværdi λ med tilhørende egenvektorer v_1 og v_2 . Vis, at

$$av_1 + bv_2$$

er en egenvektor for A til egenværdien λ for alle $a, b \in \mathbb{R}$.

•• **Opgave 1.4.42:**

Antag, at A er en invertibel matrix. Vis, at 0 ikke kan være en egenværdi for A .

•• **Opgave 1.4.43:**

Antag, at A har nok egenvektorer til at kunne diagonaliseres, og at 0 ikke er en egenværdi for A . Bevis, at A er invertibel. Vink: Brug resultatet af næste opgave.

•• **Opgave 1.4.44: Determinanter og egenværdier**

Antag, at A har nok egenvektorer til at kunne diagonaliseres. Giv et alternativt bevis for, at det A er lig produktet af A 's egenværdier. Vink: Husk, at determinanten opfylder $\det(AB) = \det A \det B$, og at $\det(A^{-1}) = 1/\det A$.

•• **Opgave 1.4.45:**

Udregn sporet af følgende matricer og verificér, at sporet er lig summen af deres egenværdier.

1)

$$A = \begin{pmatrix} 3 & 2 \\ -1 & 1 \end{pmatrix}$$

2)

$$B = \begin{pmatrix} 5 & -1 \\ 0 & 3 \end{pmatrix}$$

•• **Opgave 1.4.46:**

Lad

$$A = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}.$$

Vis, at det karakteristiske polynomium er givet ved

$$p(t) = t^2 - t\text{Tr}(A) + \det A.$$

• **Opgave 1.4.47:**

Bestem den transponerede af følgende matricer

1)

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$

2)

$$B = \begin{pmatrix} 7 & -1 & -3 \\ 9 & 0 & 2 \end{pmatrix}$$

3)

$$C = \begin{pmatrix} 10 \\ 4 \\ 8 \end{pmatrix}$$

•• **Opgave 1.4.48:**

Betrægt matricen

$$Q = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix}.$$

Bestem Q^T . Vis herefter ved udregning, at $QQ^T = I_3$ og $Q^TQ = I_3$. En matrix, hvis inverse er lig den transponerede, kaldes *ortogonal*.

••• **Opgave 1.4.49: Kvadratiske former**

En funktion $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ kaldes en *kvadratisk form*, hvis f kan skrives på formen

$$f(x_1, x_2, \dots, x_n) = (x_1 \ x_2 \ \cdots \ x_n) A \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix}$$

for en matrix $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$.

1) Argumentér for, at en kvadratisk form faktisk er en funktion med værdier i \mathbb{R} .

2) Betragt $f : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$ givet ved

$$f(x, y) = (x \ y) \begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}.$$

Skriv funktionen f ud eksplisit.

3) Betragt funktionen $f : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$ givet ved $f(x, y) = x^2 + y^2$. Vis, at f er en kvadratisk form.

••• **Opgave 1.4.50: Nilpotente matricer**

En matrix $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ kaldes *nilpotent*, hvis der findes et $k \in \mathbb{N}$, så $A^k = O$. Sagt med ord, så er en tilstrækkelig høj potens af A lig nulmatricen.

1) Find et eksempel på en nilpotent 2×2 -matrix, der ikke er nulmatricen.

2) Find et eksempel på en nilpotent 3×3 -matrix, der ikke er nulmatricen.

3) Vis, at hvis $A \in \mathbb{R}^{2 \times 2}$ er nilpotent, da er $\det A = 0$. Vink: husk at determinanten er multiplikativ.

4) Antag, at A er nilpotent med $A^k = 0$. Bevis, at $I_n - A$ er invertibel ved at bestemme den inverse matrix. Vink: Se på $I_n + A + A^2 + \dots + A^{k-1}$.

••• **Opgave 1.4.51: Idempotente matricer**

En matrix $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ kaldes *idempotent*, hvis $A^2 = A$.

- 1) Bevis, at I_n er idempotent.
- 2) Bevis, at hvis A er idempotent, er $A^k = A$ for alle $k \in \mathbb{N}$.
- 3) Vis, at hvis A er idempotent, så er $I - A$ også idempotent.
- 4) Find et eksempel på en idempotent 2×2 -matrix, som ikke er I_2 eller nulmatricen.
- 5) Find et eksempel på en idempotent 3×3 -matrix, som ikke er I_3 eller nulmatricen.
- 6) Hvilke værdier kan det A antage, hvis $A \in \mathbb{R}^{2 \times 2}$ er en idempotent matrix?

•• **Opgave 1.4.52: Triangulære matricer**

Betrægt matricer $L, U \in \mathbb{R}^{n \times n}$ på formen

$$L = \begin{pmatrix} l_{11} & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ l_{21} & l_{22} & 0 & \cdots & 0 \\ l_{31} & l_{32} & l_{33} & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \cdots & \vdots \\ l_{n1} & l_{n2} & l_{n3} & \cdots & l_{nn} \end{pmatrix}, \quad U = \begin{pmatrix} u_{11} & u_{12} & u_{13} & \cdots & u_{1n} \\ 0 & u_{22} & u_{23} & \cdots & u_{2n} \\ 0 & 0 & u_{33} & \cdots & u_{3n} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \cdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & u_{nn} \end{pmatrix}.$$

L kaldes *nedre triangulær*, og U kaldes *øvre triangulær*. I opgaven er I mere end velkomme til kun at arbejde med 2×2 - eller 3×3 -matricer, når I skal bevise ting.

- 1) Vis, at produktet af to nedre triangulære matricer igen er en nedre triangulær matrix.
- 2) Vis, at produktet af to øvre triangulære matricer igen er en øvre triangulær matrix.

•• **Opgave 1.4.53: LU-faktorisering**

Givet en matrix A kan man under visse betingelser lave en såkaldt *LU-faktorisering* af A . En *LU-faktorisering* af A er en opskrivning $A = LU$, hvor L er nedre triangulær, og U er øvre triangulær. Hvis alle diagonalindgangene i L vælges til at være 1, kaldes faktoriseringen Doolittle's faktorisering. Vælges alle diagonalindgangene i U til at være 1, kaldes faktoriseringen Crout's faktorisering.

- 1) Lad

$$A = \begin{pmatrix} 2 & -1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix}.$$

Find Doolittle-faktoriseringen og Crout-faktoriseringen for A .

- 2) Lad

$$A = \begin{pmatrix} 4 & 1 \\ 1 & 4 \end{pmatrix}.$$

Find Doolittle-faktoriseringen og Crout-faktoriseringen for A .

1.5 Funktioner i flere variable

Indtil nu har vi kun betragtet funktioner af én variabel, som tager værdier i de reelle tal, altså funktioner såsom $f(x) = x$, $f(x) = x^2$, \log og e^x med videre. I rigtig mange sammenhænge giver det dog mening, at en funktion kan tage flere variable som input og/eller give et output i flere dimensioner. Inden vi begiver os ud i en række eksempler på funktioner i flere variable, giver det mening at indføre lidt notation.

Definition 1.5.1. Hvis A er definitionsmængden/domænet for en funktion f , og B er en mængde, hvor f tager sine værdier, skriver vi $f : A \rightarrow B$. B kaldes *codomænet* for f .

Eksempel 1.5.2. Vi kan definere en funktion ved $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$, $f(x) = x$. Her kunne vi også restringere definitionsmængden til f.eks. kun at være positive tal, $f : [0, \infty) \rightarrow \mathbb{R}$. I dette tilfælde giver det strengt taget ikke matematisk mening at tale om f.eks. $f(-1)$, også selvom det er klart, hvordan funktionen skal defineres i -1 . \circ

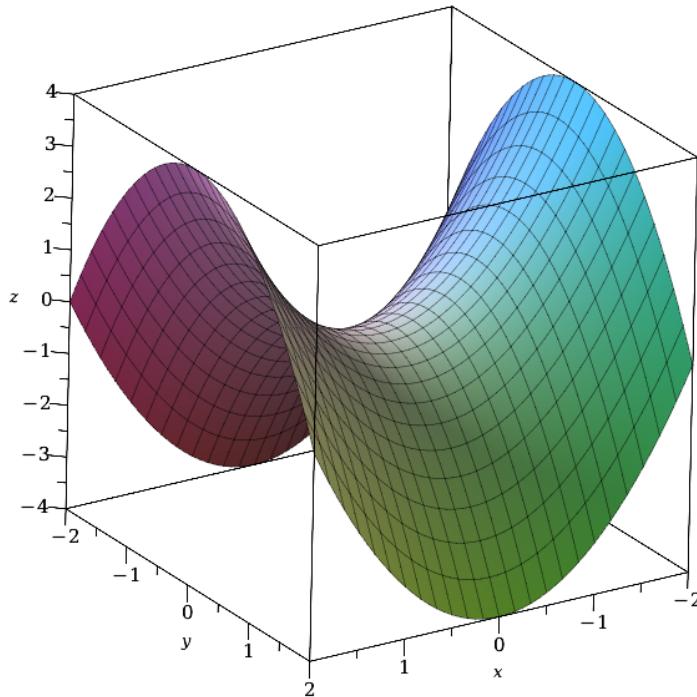
Eksempel 1.5.3. "Funktionen" $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ givet ved $f(x) = 1/x$ er ikke defineret. Årsagen er, at $f(0) = 1/0$ ikke er et reelt tal! Dog giver det mening at tale om $f : (0, \infty) \rightarrow \mathbb{R}$ eller $f : \mathbb{R} \setminus \{0\} \rightarrow \mathbb{R}$, hvor $\mathbb{R} \setminus \{0\}$ betyder alle reelle tal uden 0. \circ

Eksempel 1.5.4. Funktionen $f : \mathbb{R} \rightarrow (0, \infty)$ givet ved $f(x) = 2x$ er ikke veldefineret. Årsagen er, at f.eks. $f(-1) = -2$ ikke ligger i $(0, \infty)$. Dog forsvinder problemet, hvis vi i stedet definerer $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$.

Funktioner af flere variable

Lad os starte med at se på funktioner på formen $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$, altså funktioner af n variable, som tager reelle værdier.

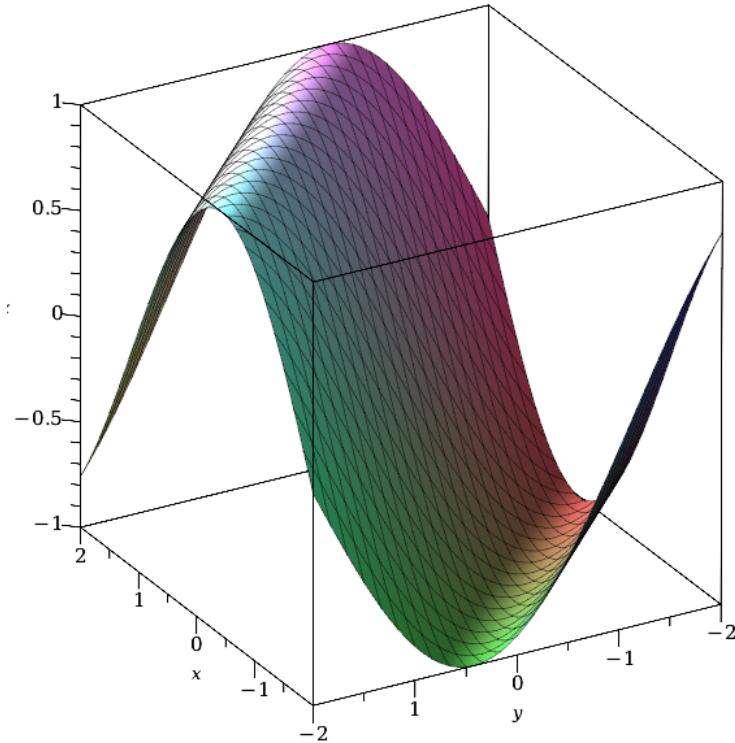
Eksempel 1.5.5. Lad $f : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$ være givet ved $f(x, y) = x^2 - y^2$. Funktioner af to variable som denne kan faktisk illustreres som et plot i tre dimensioner. Generelt gøres dette ved at introducere en tredje akse, nemlig z -aksen, og ved at lade $z = f(x, y)$.



Figur 1.11: Graf for funktionen $f(x, y) = x^2 - y^2$.

◦

Eksempel 1.5.6. Et andet eksempel på en funktion af flere variable er $f(x, y) = \sin(x + y)$. Tegnet som et plot i tre dimensioner får vi følgende.



Figur 1.12: Graf for funktionen $f(x, y) = \sin(x + y)$.

◦

Eksempel 1.5.7. En funktion såsom $f : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}$, $f(x, y, z) = x^2 + xy - zy^2$ kan ikke illustreres som de to forrige funktioner, da vores hjerne ikke er i stand til at visualisere fire dimensioner. ◦

Vektorfunktioner

Vi udvider nu til tilfældet, hvor vores funktioner kan tage værdier i flere dimensioner end én. Et vigtigt eksempel er såkaldte *parametriserede kurver*, også kaldet *vektorfunktioner*.

Definition 1.5.8. En *vektorfunktion* (også kaldet en *parameterfremstilling* eller en *parametriseret kurve*) er en funktion $r : I \rightarrow \mathbb{R}^n$, hvor I er et interval i \mathbb{R} (eller lig hele \mathbb{R}), altså en funktion på formen

$$r(t) = \begin{pmatrix} x_1(t) \\ x_2(t) \\ \vdots \\ x_n(t) \end{pmatrix}.$$

Funktionerne x_i kaldes *koordinatfunktionerne* hørende til r . Inputtet t kaldes til tider for *parameteren*.

Man kan tænke på en vektorfunktion som en måde at beskrive ét-dimensionelle figurer. Ét-dimensionelle netop fordi inputtet er ét-dimensionelt (et reelt tal). Samtidig kan vektorfunktioner beskrive nogle figurer, der ikke kan beskrives med funktioner, som I er

vant til. Vi kommer til at se nogle eksempler om lidt.

Det er typisk at tænke på parameteren t som tiden og outputtet $(x_1(t), x_2(t), \dots, x_n(t))$ som positionen til tiden t .

Eksempel 1.5.9. Lad

$$a = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_n \end{pmatrix} \quad \text{og} \quad b = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix}$$

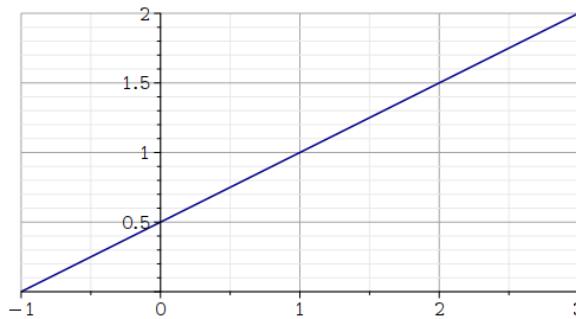
være givne vektorer i \mathbb{R}^n . Da beskriver vektorfunktionen

$$r(t) = a + bt = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_n \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} b_1 t \\ b_2 t \\ \vdots \\ b_n t \end{pmatrix}$$

en ret linje gennem a med retningen b . Lad os gøre det mere konkret. Betragt

$$r(t) = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 1 \\ \frac{1}{2} \end{pmatrix} t.$$

Denne vektorfunktion kan vi tegne således:



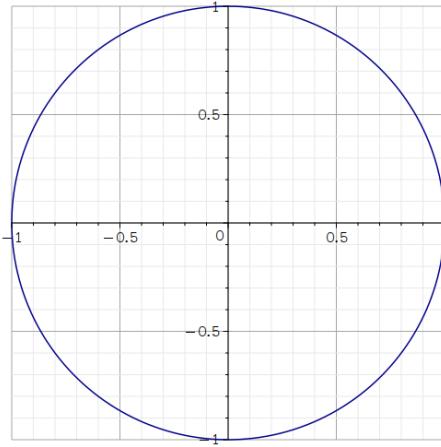
Figur 1.13: En ret linje.

○

Eksempel 1.5.10. Lad os nu betragte en cirkel. Det er velkendt, at vi ikke kan beskrive cirklen med en funktion, fordi vi så skulle ramme flere y -værdier med én x -værdi. Dog kan vi nemt beskrive cirklen med en vektorfunktion. Husk, at et koordinat på enheds-cirklen kan skrives som $(\cos(t), \sin(t))$, hvor t løber gennem $[0, 2\pi]$. Dermed beskriver vektorfunktionen

$$r(t) = \begin{pmatrix} \cos(t) \\ \sin(t) \end{pmatrix}$$

enhedscirklen:



Figur 1.14: Enhedscirklen.

Helt generelt kan cirklen med radius r beskrives med vektorfunktionen

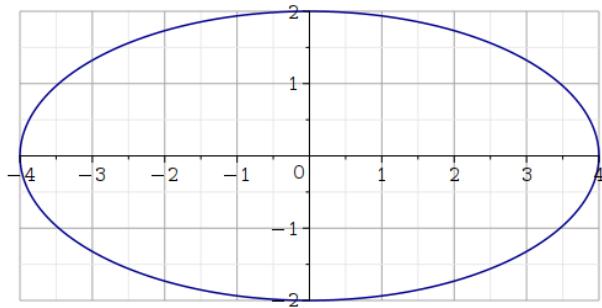
$$r(t) = \begin{pmatrix} r \cos(t) \\ r \sin(t) \end{pmatrix}.$$

○

Eksempel 1.5.11. Ligesom med en cirkel kan ellipsen beskrives med en vektorfunktion. En ellipse har parametriseringen

$$r(t) = \begin{pmatrix} a \cos(t) \\ b \sin(t) \end{pmatrix}$$

for nogle positive tal a og b . Ellipsen vil skære x -aksen i $-a$ og a , mens y -aksen skæres i $-b$ og b . Et eksempel med $a = 4$ og $b = 2$ ses illustreret herunder:



Figur 1.15: Ellipsen med $a = 4$ og $b = 2$.

○

Eksempel 1.5.12. Alle grafer for funktioner kan beskrives med en vektorfunktion. Lad f være en funktion. Da vil vektorfunktionen

$$r(t) = \begin{pmatrix} t \\ f(t) \end{pmatrix}$$

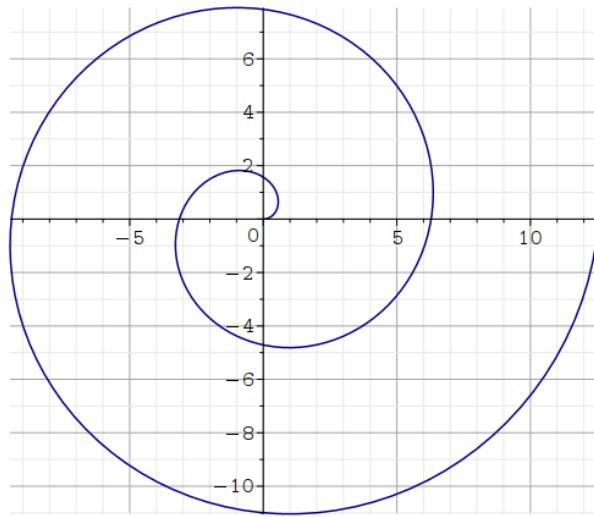
beskrive grafen for f .

○

Eksempel 1.5.13. Archimedes' spiral kan beskrives med vektorfunktionen

$$r(t) = \begin{pmatrix} t \cos(t) \\ t \sin(t) \end{pmatrix}, \quad t \geq 0.$$

Herunder er grafen illustreret, hvor t løber fra 0 til 4π :



Figur 1.16: Archimedes' spiral.

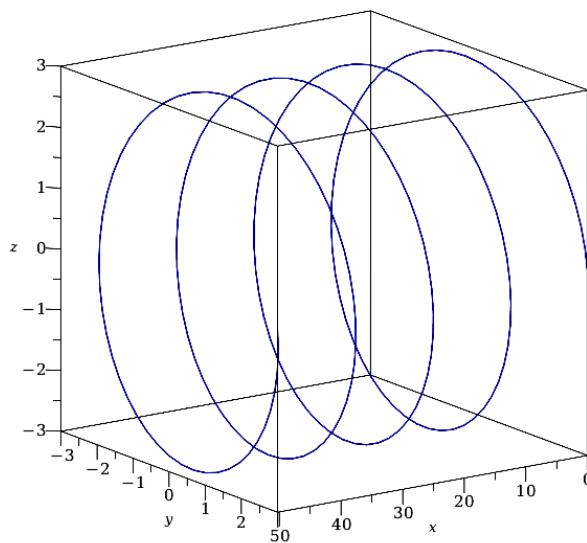
○

Lad os betragte et eksempel i tre dimensioner.

Eksempel 1.5.14. Betragt vektorfunktionen

$$\mathbf{r}(t) = \begin{pmatrix} \lambda t \\ r \cos(\omega t) \\ r \sin(\omega t) \end{pmatrix},$$

hvor λ (lille lambda) og ω (lille omega) er konstanter forskellige fra nul, mens $r > 0$ også er en konstant. Denne vektorfunktion beskriver en helix. λ angiver, hvor hurtigt spiralen bevæger sig i x -aksens retning. ω angiver vinkelhastigheden, dvs. hvor "tæt" fjederen ser ud. r er radius af cirklen. Herunder er helixen med $\lambda = 2$, $\omega = 1$ og $r = 3$ illustreret.



Figur 1.17: En helix.

○

Funktioner i vilkårlige dimensioner

Lad os se nogle eksempler på funktioner på formen $f : A \rightarrow \mathbb{R}^n$, hvor A er en delmængde af \mathbb{R}^m . Dette er funktioner, som tager m variable som input og giver vektorer af dimension n som output.

Eksempel 1.5.15. Lad $f : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}^3$ være givet ved

$$f(x, y) = \begin{pmatrix} \cos(x) \\ \sin(y) \\ x^2 + y^2 \end{pmatrix}$$

Sådan en funktion har vi ikke noget håb om at illustrere, da der er for mange dimensioner i spil. \circ

Eksempel 1.5.16. Lad os sige, at vi har tre aktier med dagspriserne S_1, S_2 og S_3 . Vi kan købe et forskelligt antal af de tre aktier. Lad h_1, h_2 og h_3 betegne antallet af hhv. aktie 1, 2 og 3 i vores portefølje. Vi kan lave forskellige funktioner ud fra disse størrelser. F.eks. $V : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}$ givet ved værdien af vores portefølje,

$$V(S_1, S_2, S_3, h_1, h_2, h_3) = h_1 S_1 + h_2 S_2 + h_3 S_3$$

eller $F : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}^2$ givet ved forskellen mellem aktie 2 og 3 ift. den første,

$$F(S_1, S_2, S_3) = \begin{pmatrix} S_2 - S_1 \\ S_3 - S_1 \end{pmatrix}$$

\circ

Differentialregning i flere dimensioner

Ligesom vi kan bestemme den afledte af en funktion $f : I \rightarrow \mathbb{R}$, hvor I er en delmængde af \mathbb{R} , kan vi gøre det for funktioner i flere dimensioner. Vi skal blot være præcise med, hvad den afledte skal betyde. Vi starter med den generelle definition og tager en lang række eksempler efterfølgende. Vi skal dog først have begrebet *partielt afledt* på plads.

Definition 1.5.17. Betragt en funktion $f : A \rightarrow \mathbb{R}$ (bemærk, én dimension for værdimængden), hvor A er en delmængde af \mathbb{R}^m . Da definerer vi den *partielt afledte* af f mht. x_i som den funktion, man får ved at differentiere f mht. x_i og betragte alle andre variable som konstante. Vi betegner denne partielle afledte med

$$\frac{\partial f}{\partial x_i}(x_1, \dots, x_m).$$

Eksempel 1.5.18. Betragt $f : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$ givet ved $f(x, y) = xy$. Skal vi beregne den partielle afledte mht. x , skal vi differentiere $f(x, y)$ mht. x , hvor y betragtes som konstant. Dermed fås

$$\frac{\partial f}{\partial x}(x, y) = 2xy.$$

Med samme fremgangsmåde har vi

$$\frac{\partial f}{\partial y}(x, y) = x^2.$$

\circ

Vi behøver ikke at stoppe efter at have differentieret én gang. Vi kan i princippet fortsætte med at differentiere efter forskellige variable, så meget vi har lyst til det.

Definition 1.5.19. Lad $f : A \rightarrow \mathbb{R}$, hvor A er en delmængde af \mathbb{R}^m . De partielle afledte mht. x_j af den partielle afledte mht. x_i betegnes

$$\frac{\partial^2 f}{\partial x_j \partial x_i}(x_1, \dots, x_m).$$

Sådan en afledt kaldes en partielt afledte af *anden orden*. Helt analogt defineres partielle afledte af højere orden.

Bemærkning 1.5.20. Vi skriver som regel

$$\frac{\partial^2 f}{\partial x^2}(x_1, \dots, x_m)$$

i stedet for

$$\frac{\partial^2 f}{\partial x \partial x}(x_1, \dots, x_m).$$

Eksempel 1.5.21. Betragt $f : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}$ givet ved $f(x, y, z) = xyz^2$. Vi beregner

$$\frac{\partial f}{\partial x}(x, y, z) = yz^2, \quad \frac{\partial f}{\partial y}(x, y, z) = xz^2, \quad \frac{\partial f}{\partial z}(x, y, z) = 2xyz.$$

Vi kan også regne nogle højereordens afledte,

$$\frac{\partial^2 f}{\partial x \partial y}(x, y, z) = z^2, \quad \frac{\partial^2 f}{\partial x \partial z}(x, y, z) = 2yz, \quad \frac{\partial^2 f}{\partial y \partial z}(x, y, z) = 0.$$

Vi bemærker også, at

$$\frac{\partial^2 f}{\partial y \partial x}(x, y, z) = \frac{\partial^2 f}{\partial x \partial y}(x, y, z) \quad \text{og} \quad \frac{\partial^2 f}{\partial z \partial x}(x, y, z) = \frac{\partial^2 f}{\partial x \partial z}(x, y, z).$$

Dette er et meget generelt fænomen. Man kan bevise, at hvis en funktion af flere variable er k gange differentiabel (et begreb, vi strengt taget ikke har defineret) med kontinuert k 'te afledt, da vil man altid opleve, at de blandede partielle afledte af k 'te orden ikke afhænger af rækkefølgen af variable, man differentierer efter. Resultatet kaldes *Clairauts sætning*. \circ

Vi er nu klar til at definere "den afledte" for en funktion i vilkårligt mange dimensioner.

Definition 1.5.22. Betragt en funktion $f : A \rightarrow \mathbb{R}^n$, hvor A er en delmængde af \mathbb{R}^m . Skriver vi f på formen

$$f(x_1, \dots, x_m) = \begin{pmatrix} f_1(x_1, \dots, x_m) \\ f_2(x_1, \dots, x_m) \\ \vdots \\ f_n(x_1, \dots, x_m) \end{pmatrix},$$

definerer vi *funktionalmatricen* ved $n \times m$ -matricen (vi undlader for overskuelighedens skyld at skrive variablene i funktionerne)

$$Df(x_1, \dots, x_m) = \begin{pmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial x_1} & \frac{\partial f_1}{\partial x_2} & \dots & \frac{\partial f_1}{\partial x_m} \\ \frac{\partial f_2}{\partial x_1} & \frac{\partial f_2}{\partial x_2} & \dots & \frac{\partial f_2}{\partial x_m} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \frac{\partial f_n}{\partial x_1} & \frac{\partial f_n}{\partial x_2} & \dots & \frac{\partial f_n}{\partial x_m} \end{pmatrix}.$$

Altså svarer række i til koordinatfunktion i , mens sågle j svarer til variabel x_j .

Bemærkning 1.5.23. Det er også typisk at kalde funktionalmatricen for *Jacobimatriksen*.

Eksempel 1.5.24. Lad os betragte funktionen

$$f(x, y) = \begin{pmatrix} x + y \\ \cos(y) \end{pmatrix}.$$

Vi ser, at funktionalmatricen er givet ved

$$Df(x, y) = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 0 & -\sin(y) \end{pmatrix}.$$

○

Den generelle funktionalmatrix har ikke en brugbar fortolkning. Dette er dog heldigvis tilfældet i en række vigtige specialtilfælde. Lad os starte med at betragte tilfældet med en vektorfunktion.

Definition 1.5.25. Lad

$$r(t) = \begin{pmatrix} x_1(t) \\ x_2(t) \\ \vdots \\ x_n(t) \end{pmatrix}$$

være en differentielabel vektorfunktion (alle koordinatfunktionerne er differentiable). Da kan vi for funktionalmatricen skrive

$$r'(t) = \begin{pmatrix} x'_1(t) \\ x'_2(t) \\ \vdots \\ x'_n(t) \end{pmatrix},$$

og vi kalder denne for *hastighedsvektoren* tilhørende $r(t)$. Længden af $r'(t)$, $\|r'(t)\|$, kaldes *farten* til tiden t .

Som vi tidligere kom ind på, kan $r(t)$ fortolkes som positionen til tiden t . Dermed kan $r'(t)$ fortolkes som hastigheden til tiden t . Farten er længden af hastighedsvektoren og er altså ikke en vektorfunktion, men derimod en funktion i klassisk forstand.

Eksempel 1.5.26. Betragt cirklen med radius r ,

$$r(t) = \begin{pmatrix} r \cos(t) \\ r \sin(t) \end{pmatrix}.$$

Da er

$$r'(t) = \begin{pmatrix} r \cos'(t) \\ r \sin'(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -r \sin(t) \\ r \cos(t) \end{pmatrix}.$$

Farten er

$$\|r'(t)\| = \sqrt{(-r \sin(t))^2 + (r \cos(t))^2} = \sqrt{r^2} = r,$$

hvor vi i en mellemregning har benyttet relationen $\cos(t)^2 + \sin(t)^2 = 1$. ○

Lad os betragte det andet vigtige specialtilfælde, hvor $f : A \rightarrow \mathbb{R}$ er en funktion af flere variable ind i de reelle tal. Da er funktionalmatricen tæt relateret til en anden vigtig størrelse, nemlig gradienten.

Definition 1.5.27. For en funktion $f : A \rightarrow \mathbb{R}$, hvor A er en delmængde af \mathbb{R}^n , definerer vi *gradienten* af f til

$$\nabla f(x_1, \dots, x_n) = \begin{pmatrix} \frac{\partial f}{\partial x_1} \\ \frac{\partial f}{\partial x_2} \\ \vdots \\ \frac{\partial f}{\partial x_n} \end{pmatrix}$$

Her ∇ det græske bogstav "nabla".

Bemærk, at funktionalmatricen for en funktion på formen $f : A \rightarrow \mathbb{R}$ næsten er lig gradienten. Forskellen er, at gradienten er en søjlevektor, dvs. gradienten for f er lig funktionalmatricen transponeret, $Df = (\nabla f)^T$.

Eksempel 1.5.28. Betragt funktionen $f(x, y, z) = xyz + e^x \cos(y)$. Da er gradienten lig

$$\nabla f(x, y, z) = \begin{pmatrix} yz + e^x \cos(y) \\ xz - e^x \sin(y) \\ xy \end{pmatrix}.$$

○

Gradienten er helt essentiel, når vi skal bestemme metoder til at finde maksima og minima for funktioner af flere variable, et emne vi nu skal studere.

Kort om maksima og minima for funktioner af flere variable

Når man taler om maksima og minima for funktioner, giver det kun mening at tale om funktioner med værdier i \mathbb{R} , og vi restrikerer derfor til situationen $f : A \rightarrow \mathbb{R}$, hvor A er en delmængde af \mathbb{R}^n . Vi skal se, at gradienten kommer til at betyde en stor rolle i det følgende. Lad os først få fastlagt, hvad der præcist menes med et maksimum eller et minimum.

Definition 1.5.29. Vi siger, at en funktion $f : A \rightarrow \mathbb{R}$ har et *lokalt maksimum* i $a \in A$, hvis der findes en radius $r > 0$, sådan at $f(a) \geq f(x)$ for alle x med afstand mindre end r fra a , $\|x - a\| < r$. Ligeledes siger a at være et lokalt minimum, hvis der findes en radius $r > 0$, sådan at $f(a) \leq f(x)$ for alle x med $\|x - a\| < r$.

Vi kan allerede nu opstille vores første resultat. For en mængde A kaldes a et *randpunkt* for A , hvis det for alle $r > 0$ gælder, at området bestående af de x med $\|x - a\| < r$ vil indeholder mindst ét punkt både fra A og ikke fra A .

Sætning 1.5.30. *Lad $f : A \rightarrow \mathbb{R}$ være en funktion, som har enten et lokalt maksimum eller minimum i $a \in A$. Da gælder en af tre betingelser:*

- (i) a er et randpunkt for A ,
- (ii) gradienten ∇f eksisterer ikke i a eller
- (iii) $\nabla f(a) = 0$.

Bevis. Hvis a er et randpunkt eller ∇f ikke eksisterer i a , da er vi færdige. Antag derfor, at $\nabla f(a)$ findes, og at a er et indre punkt for A (dvs. ikke et randpunkt). Lad os for modstrid antage, at $\nabla f(a) \neq 0$. Da vil mindst én af de partielle afledte for f være forskellig fra nul i a . Lad os sige, at

$$\frac{\partial f}{\partial x_i}(a) \neq 0.$$

Se på funktionen $g(x_i) = f(a_1, \dots, a_{i-1}, x_i, a_{i+1}, \dots, a_n)$, altså hvor vi lader den i 'te variabel løbe i f , mens de andre fastholdes til værdierne i a . Idet a er et lokalt maksimum eller minimum for f , må a_i være et lokalt maksimum eller minimum for g , dvs. $g'(a_i) = 0$ fra teorien om maksima og minima i én dimension. Men

$$g'(a_i) = \frac{\partial f}{\partial x_i}(a) \neq 0,$$

hvilket er en modstrid. Vi konkluderer, at $\nabla f(a) = 0$ som ønsket. ■

For mange funktioner gælder det, at gradienten findes overalt, og så vil tilfælde (ii) ovenover ikke være relevant. Det er også typisk, at en funktion er defineret på hele \mathbb{R}^n , som ikke har nogle randpunkter, og i det tilfælde skal vi altså kun lede efter a , hvor $\nabla f(a) = 0$ for at finde ekstremumspunkter. Men så kommer det naturlige spørgsmål. Er det et maksimum eller et minimum, vi har fundet? Eller noget helt tredje? Sætningen ovenover fortæller os intet i den henseende. Altså skal vi på jagt efter nogle betingelser, der kan fortælle os om typen af punkt, vi har fundet. Lad os starte med at huske fra én dimension, at den andenafledte kommer til hjælp her. Hvis $f'(a) = 0$, da vil $f''(a) < 0$ betyde, at a er et lokalt maksimum, mens $f''(a) > 0$ giver, at a er et lokalt minimum. Der findes et lignende resultat for funktioner af flere variable, men det kræver flere begreber fra lineær algebra, end vi har adgang til, så vi nøjes med at præsentere teorien for tilfældet, hvor f er en funktion af to variable.

Definition 1.5.31. For en funktion $f : A \rightarrow \mathbb{R}$, hvor A er en delmængde af \mathbb{R}^2 , og de andenordens partielle afledte eksisterer, definerer vi *Hessematricen* til

$$Hf(x, y) = \begin{pmatrix} \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} & \frac{\partial^2 f}{\partial x \partial y} \\ \frac{\partial^2 f}{\partial x \partial y} & \frac{\partial^2 f}{\partial y^2} \end{pmatrix}.$$

Sætning 1.5.32 (ABC-kriteriet). *Lad $f : A \rightarrow \mathbb{R}$ med A en delmængde af \mathbb{R}^2 være en funktion. Antag, at $a = (a_1, a_2)$ opfylder $\nabla f(a) = 0$. Skriv Hessematricen i a for f på formen*

$$Hf(a) = \begin{pmatrix} A & B \\ B & C \end{pmatrix}.$$

Lad $D = \det Hf(a) = AC - B^2$. Da har vi følgende.

- (i) Hvis $D < 0$, så er a et såkaldt saddelpunkt, så hverken et lokalt minimum eller maksimum.
- (ii) Hvis $D > 0$ og $A > 0$, så er a et lokalt minimum.
- (iii) Hvis $D > 0$ og $A < 0$, så er a et lokalt maksimum.

Hvis $D = 0$, giver testen ingen konklusion.

Eksempel 1.5.33. Betragt funktionen $f(x, y) = 3xy - 3x + 9y$ defineret på hele \mathbb{R}^2 . Vi starter med at beregne gradienten

$$\nabla f(x, y) = \begin{pmatrix} 3y - 3 \\ 3x + 9 \end{pmatrix},$$

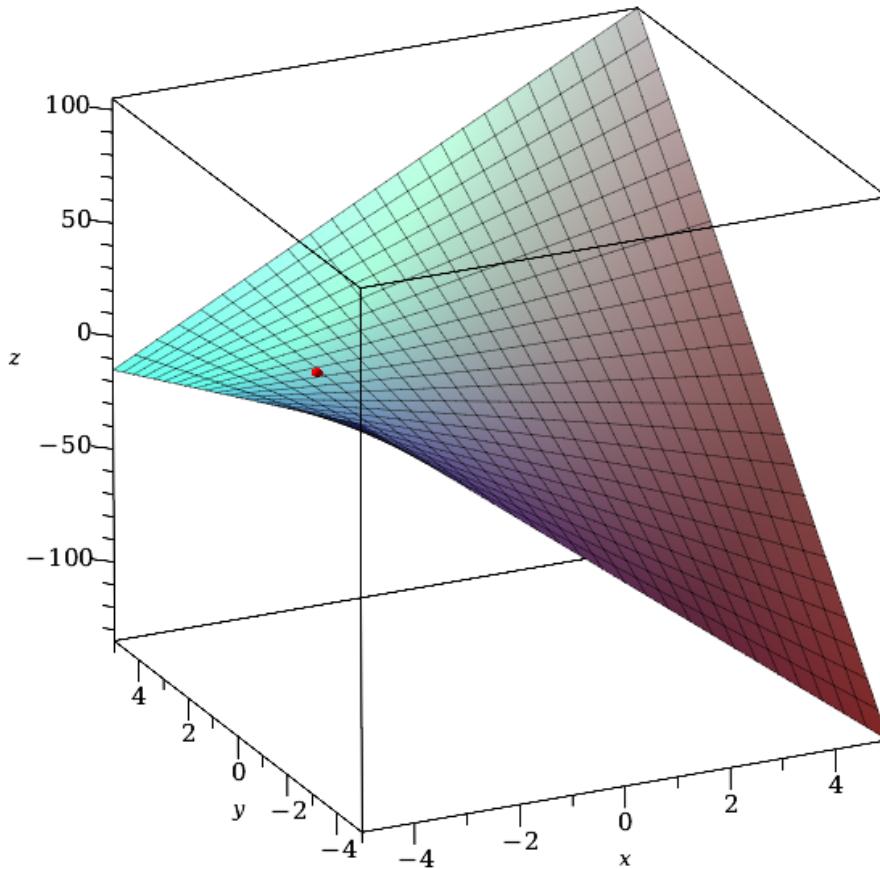
og vi ser, at $a = (-3, 1)$ er det eneste punkt med $\nabla f(a) = 0$. Gradienten eksisterer overalt, og der er ingen randpunkter i \mathbb{R}^2 , så a er det eneste potentielle minimum eller maksimum for f . Hessematricen for f er

$$Hf(x, y) = \begin{pmatrix} 0 & 3 \\ 3 & 0 \end{pmatrix}.$$

Determinanten er $D = 0^2 - 3^2 = -9$, så a er et saddelpunkt. Hvordan ser dette ud visuelt? Herunder er f illustreret sammen med punktet a . Det ses, at i punktet a går funktionen både op og ned alt efter retningen, man nærmer sig a . Dette kendetegner et saddelpunkt. \circ

Eksempel 1.5.34. Betragt funktionen $f(x, y) = 3x^2 + 6x + 6y^2$. Hvilke maksima og minima (hvis nogen) har f ? Vi bestemmer gradienten til

$$\nabla f(x, y) = \begin{pmatrix} 6x + 6 \\ 12y \end{pmatrix}.$$



Figur 1.18: Grafen for funktionen $f(x, y) = 3xy - 3x + 9y$ med saddelpunktet $a = (-3, 1)$ tegnet ind.

Vi ser, at $a = (-1, 0)$ er det eneste punkt, som opfylder $\nabla f(a) = 0$. Hessematrixen er

$$Hf(x, y) = \begin{pmatrix} 6 & 0 \\ 0 & 12 \end{pmatrix},$$

og $D = 6 \cdot 12 - 0^2 = 72 > 0$. Samtidig er $A > 0$, så a er et lokalt minimum. Dette er også tydeligt, hvis man illustrerer grafen for f .

○

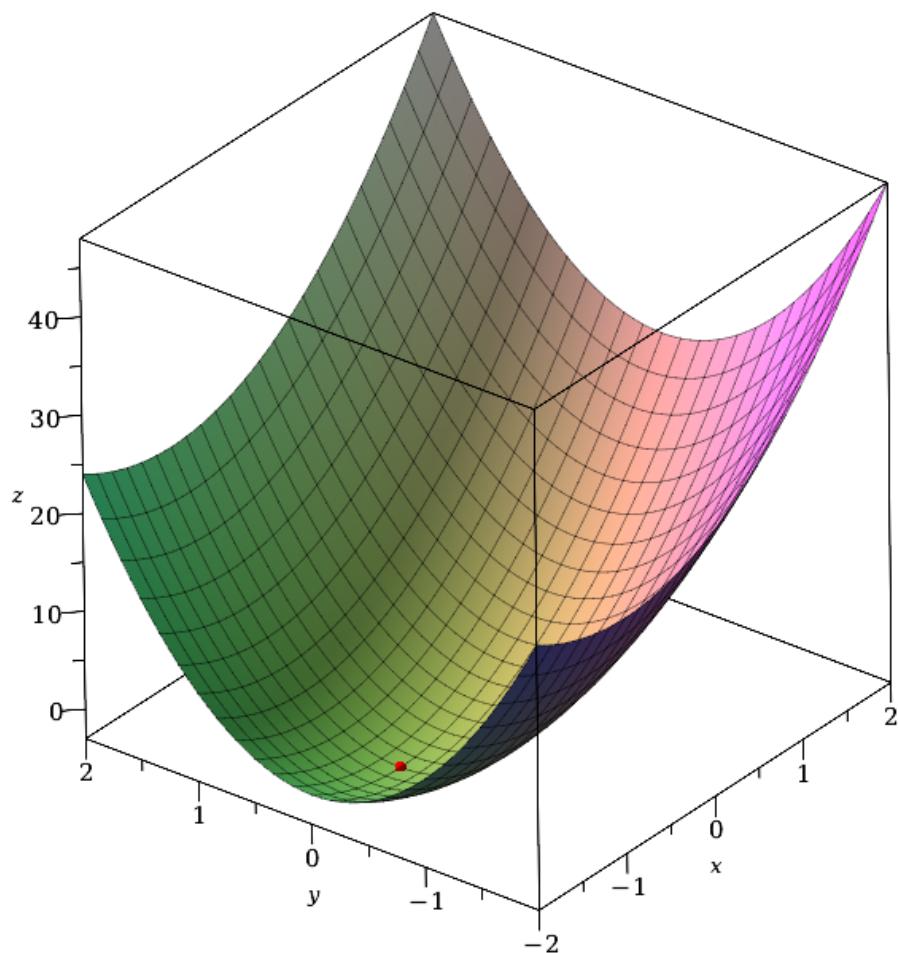
Vi afslutter kapitlet om funktioner i flere variable med at tale om en anden type koordinatsystem.

Polære koordinater

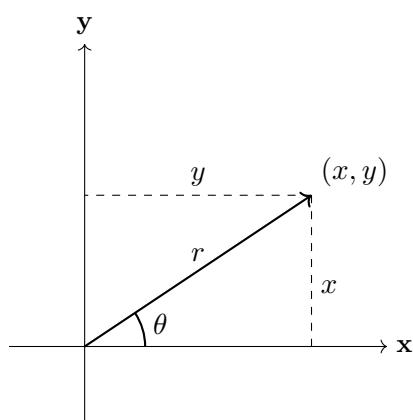
Når vi skal angive et punkt i et todimensionelt koordinatsystem, plejer vi blot at angive værdien langs førsteaksen og værdien langs andenaksen (x - og y -værdien om man vil). Det samme gør vi i flere dimensioner. Dog er dette ikke den eneste måde at angive koordinater på, men blot én af mange. x - og y -koordinaterne for et punkt betegnes de *kartetiske koordinater*. Vi skal i dette korte afsnit beskæftige os med en anderledes type koordinater, nemlig *polære koordinater*. For at beskrive et punkt er det faktisk kun nødvendigt at kende to ting, nemlig længden og vinklen, som det er illustreret i figuren herunder.

Givet kartetiske koordinater (x, y) , er deres længde givet ved $r = \sqrt{x^2 + y^2}$, og vinklen θ er relateret til x og y gennem

$$x = r \cos(\theta) \quad \text{og} \quad y = r \sin(\theta).$$



Figur 1.19: Grafen for funktionen $f(x, y) = 3x^2 + 6x + 6y^2$ med det lokale minimumspunkt $a = (-1, 0)$ tegnet ind.



Figur 1.20: Illustration af polære koordinater.

Resten af forståelsen kommer gennem eksempler.

Eksempel 1.5.35. Betragt punktet $(-6, 2\sqrt{3})$. Afstanden fra origo beregnes til

$$r = \sqrt{6^2 + (2\sqrt{3})^2} = \sqrt{36 + 12} = \sqrt{48} = 4\sqrt{3}.$$

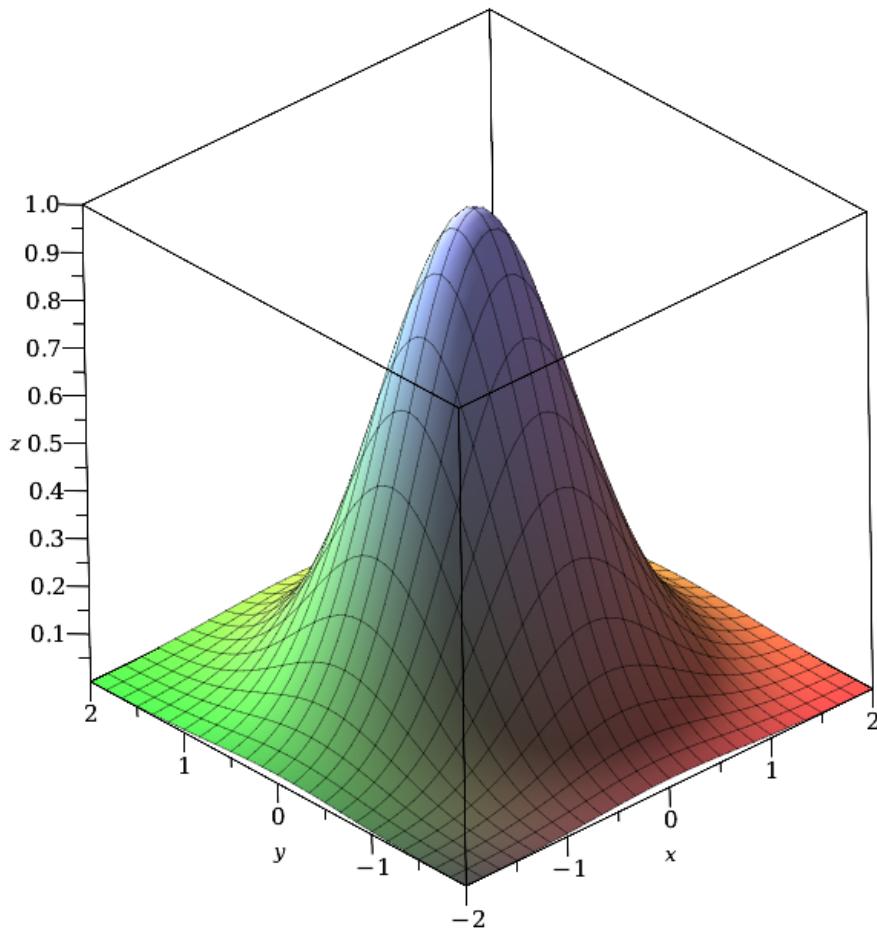
For at bestemme θ , kan vi f.eks. benytte relationen $2\sqrt{3} = r \sin(\theta) = 4\sqrt{3} \sin(\theta)$, hvilket giver os $\sin(\theta) = 1/2$. Der er to vinkler θ , som opfylder denne relation, nemlig $\theta = \pi/6$ og $\theta = 5\pi/6$. Hvilken af de to er den rigtige? Den nemme løsning er at indse, at punktet $(-6, 2\sqrt{3})$ ligger i anden kvadrant, og dermed skal svaret være $\theta = 5\pi/6$. Alternativt ved vi, at relationen $-6 = 4\sqrt{3} \cos(\theta)$ skal være overholdt, og dette er ikke opfyldt for $\theta = \pi/6$. Under alle omstændigheder kan vi konkludere, at de polære koordinater for punktet er $r = 4\sqrt{3}$ og $\theta = 5\pi/6$. \circ

Nogle funktioner bliver pænere og nemmere at fortolke, hvis man omskriver dem til polære koordinater. Givet en funktion $f(x, y)$, da er f i polære koordinater givet som $g(r, \theta) = f(r \cos(\theta), r \sin(\theta))$.

Eksempel 1.5.36. Betragt funktionen $f(x, y) = e^{-(x^2+y^2)}$. I polære koordinater bliver denne funktion

$$g(r, \theta) = e^{-(r^2 \cos(\theta)^2 + r^2 \sin(\theta)^2)} = e^{-r^2(\cos(\theta)^2 + \sin(\theta)^2)} = e^{-r^2}.$$

Dette fortæller os faktisk en del. Idet $g(r, \theta)$ ikke afhænger af θ , er f såkaldt *rotationsinvariant*. Det betyder, at f er symmetrisk omkring origo, hvilket let ses på en illustration. \circ



Figur 1.21: Grafen for funktionen $f(x, y) = e^{-(x^2+y^2)}$.

Opgaver

- **Opgave 1.5.1:**

Illustrér følgende vektorfunktioner i et koordinatsystem:

1)

$$r(t) = \begin{pmatrix} 2 \\ 0 \\ 3t \end{pmatrix}.$$

2)

$$r(t) = \begin{pmatrix} 2 \cos(t) \\ 2 \sin(t) \end{pmatrix}.$$

3)

$$r(t) = \begin{pmatrix} 6 \cos(t) \\ 3 \sin(t) \end{pmatrix}.$$

- **Opgave 1.5.2:**

Betrægt Archimedes' spiral fra eksempel 1.5.13:

$$r(t) = \begin{pmatrix} t \cos(t) \\ t \sin(t) \end{pmatrix}, \quad t \geq 0.$$

For hvilke t -værdier skærer kurven x -aksen? For hvilke t -værdier skærer kurven y -aksen?

•• Opgave 1.5.3:

Udregn de partielle afledte

$$\frac{\partial f}{\partial x}(x, y) \quad \text{og} \quad \frac{\partial f}{\partial y}(x, y)$$

for følgende funktioner.

- 1) $f(x, y) = x^2 + 4xy^4$.
- 2) $f(x, y) = \cos(x^2y)$.
- 3) $f(x, y) = \sin(x)\cos(y) + 2e^x$.

•• Opgave 1.5.4:Betragt funktionen $f(x, y) = \cos(xy)$. Udregn alle partielle afledte af anden orden,

$$\frac{\partial^2 f}{\partial x^2}(x, y), \quad \frac{\partial^2 f}{\partial y^2}(x, y) \quad \text{og} \quad \frac{\partial^2 f}{\partial x \partial y}(x, y).$$

•• Opgave 1.5.5:Betragt funktionen $f(x, y, z) = \cos(xyz) + e^y z^2$. Beregn

$$\frac{\partial f}{\partial x}(x, y, z), \quad \frac{\partial f}{\partial y}(x, y, z) \quad \text{og} \quad \frac{\partial f}{\partial z}(x, y, z).$$

Udregn herefter

$$\frac{\partial^3 f}{\partial x \partial y \partial z}(x, y, z).$$

•• Opgave 1.5.6:

Betragt funktionen

$$f(x, y) = \begin{pmatrix} x \cos(y) \\ e^{x+y} \end{pmatrix}.$$

Beregn funktionalmatricen for f .**• Opgave 1.5.7:**

Betragt vektorfunktionen

$$r(t) = \begin{pmatrix} t^2 \\ e^t \end{pmatrix}.$$

Bestem hastighedsvektoren og farten af $r(t)$.**•• Opgave 1.5.8:**

Bestem hastighedsvektoren og farten af Archimedes' spiral

$$r(t) = \begin{pmatrix} t \cos(t) \\ t \sin(t) \end{pmatrix}, \quad t \geq 0.$$

•• Opgave 1.5.9:Betragt en linje $r(t) = a + bt$, hvor a og b er vektorer i \mathbb{R}^n . Bestem hastighedsvektoren og farten for denne vektorfunktion.**•• Opgave 1.5.10:**Betragt funktionen $f(x, y) = \cos(x)\cos(y^2)$. Beregn gradienten $\nabla f(x, y)$.**•• Opgave 1.5.11:**

Betragt helixen

$$r(t) = \begin{pmatrix} \lambda t \\ r \cos(\omega t) \\ r \sin(\omega t) \end{pmatrix}$$

KAPITEL 1. MATEMATISKE FORUDSÆTNINGER

for $\lambda, \omega \neq 0$ og $r > 0$. Bestem hastighedsvektoren og farten af $r(t)$.

•• **Opgave 1.5.12:**

Betrægt funktionen $f(x, y) = 4xy^2 - 2x$.

- 1) Beregn gradienten $\nabla f(x, y)$.
- 2) Bestem de punkter, hvor gradienten er nul.
- 3) Beregn Hessematrixen i punkterne og afgør for hver af dem med ABC-kriteriet, om de er saddelpunkter, lokale minima eller maksima.

••• **Opgave 1.5.13:**

Betrægt funktionen $f(x, y) = e^{x^2+3y^2}$.

- 1) Beregn gradienten $\nabla f(x, y)$.
- 2) Bestem de punkter, hvor gradienten er nul.
- 3) Beregn Hessematrixen i punkterne og afgør for hver af dem med ABC-kriteriet, om de er saddelpunkter, lokale minima eller maksima.

1.6 Taylor-approksimationer

Introduktion til Taylorpolynomier og eksempler

Vi skal nu samle alt vores forståelse for differential- og integralregning og studere en af de mest brugbare værktøjer i analyse, nemlig Taylorpolynomier. Men lad os først gøre os en hel banal observation omkring polynomier, altså funktioner på formen

$$f(x) = a_n x^n + a_{n-1} x^{n-1} + \cdots + a_1 x + a_0,$$

hvor $a_0, \dots, a_n \in \mathbb{R}$ er faste tal. Det smarte ved polynomier er, at de er nemme for computere at regne på, i hvert fald så længe computeren kan udføre basal aritmetik. Det samme kan man ikke sige om funktioner såsom e^x , $\log(x)$, $\cos(x)$, $\sin(x)$ og a^x (når a ikke er et heltal). Hvordan ville du selv regne $e^{3.124}$ i hånden f.eks.? Den gode løsning er at lave polynomiums-approksimationer til disse funktioner, som er meget præcise omkring det punkt, man er interesseret i.

Definition 1.6.1. Lad $f : I \rightarrow \mathbb{R}$ være en funktion defineret på et interval I i \mathbb{R} . Hvis f er n gange differentiabel, definerer vi *Taylorpolynomiet* for f af grad n i punktet $a \in I$ til

$$P_n(x) = f(a) + \frac{f'(a)}{1!}(x-a) + \frac{f''(a)}{2!}(x-a)^2 + \cdots + \frac{f^{(n)}(a)}{n!}(x-a)^n,$$

hvor $f^{(n)}$ betyder den n 'te afledte af f . a omtales som *udviklingspunktet* for Taylorpolynomiet.

Eksempel 1.6.2. Lad os beregne Taylorpolynomiet for cosinus omkring nul. Vi har

$$\cos'(x) = -\sin(x), \quad \cos''(x) = -\cos(x), \quad \cos'''(x) = \sin(x) \quad \text{og} \quad \cos^{(4)}(x) = \cos(x),$$

så de afledte opfører sig cyklisk. Vi ser også, at

$$\cos(0) = 1, \quad \cos'(0) = 0, \quad \cos''(0) = -1, \quad \cos'''(0) = 0 \quad \text{og} \quad \cos^{(4)}(0) = 1,$$

og dette mønster gentager sig. Altså bliver Taylorpolynomiet for cos af grad $2n$ omkring 0 lig

$$P_{2n}(x) = 1 - \frac{x^2}{2} + \frac{x^4}{24} + \cdots + \frac{(-1)^n x^{2n}}{(2n)!}.$$

Vi bemærker, at Taylorpolynomiet kun indeholder lige potenser af x . På nedenstående figur har vi illustreret Taylorpolynomier af forskellige ordener omkring nul sammen med cos. Vi ser, at præcisionen er god omkring nul, og derefter bliver aftager præcisionen hurtigt. Specielt kan vi se, at den cykliske opførsel ikke bliver fanget af Taylorpolynomierne.
○

Eksempel 1.6.3. Vi kan ligeledes bestemme Taylorpolynomiet for sinus omkring nul. Vi har igen en cyklisk opførsel for de afledte,

$$\sin'(x) = \cos(x), \quad \sin''(x) = -\sin(x), \quad \sin'''(x) = -\cos(x), \quad \sin^{(4)}(x) = \sin(x),$$

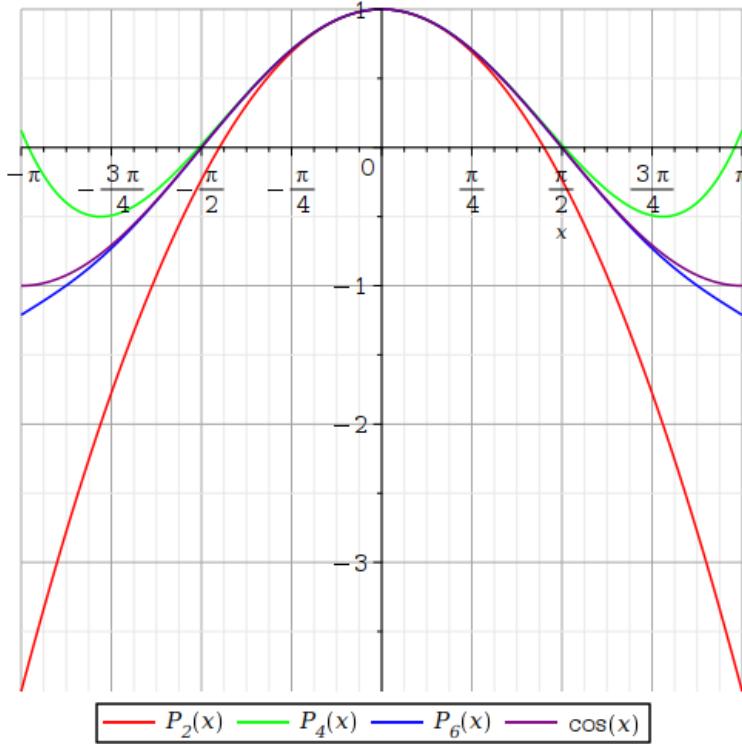
og dermed

$$\sin(0) = 0, \quad \sin'(0) = 1, \quad \sin''(0) = 0, \quad \sin'''(0) = -1 \quad \text{og} \quad \sin^{(4)}(0) = 0,$$

som naturligvis gentages for højere ordens afledte. Dermed er Taylorpolynomiet af grad $2n+1$ omkring 0 givet ved

$$P_{2n+1}(x) = x - \frac{x^3}{6} + \frac{x^5}{120} + \cdots + \frac{(-1)^n x^{2n+1}}{(2n+1)!}.$$

Herunder er sin illustreret sammen med nogle Taylorapproksimationer. Tendenserne ses at være det samme som for cosinus.
○



Figur 1.22: \cos tegnet ind med nogle Taylorpolynomier af forskellige ordener omkring nul.

Eksempel 1.6.4. Nok den nemmeste funktion at arbejde med i forhold til Taylorpolynomier, er eksponentialfunktionen, idet $\exp'(x) = \exp(x)$. I $x = 0$ har vi $e^0 = 1$, og dermed er Taylorpolynomiet af grad n omkring 0 givet ved

$$P_n(x) = 1 + x + \frac{x^2}{2} + \frac{x^3}{6} + \cdots + \frac{x^n}{n!}.$$

Som før kan vi illustrere eksponentialfunktionen sammen med nogle Taylorpolynomier omkring nul ○

Eksempel 1.6.5. Betragt nu funktionen $f(x) = \log(1 + x)$ for $x > -1$. Vi har

$$f'(x) = \frac{1}{1+x}, \quad f''(x) = -\frac{1}{(1+x)^2}, \quad f'''(x) = \frac{2}{(1+x)^3}, \quad f^{(4)}(x) = -\frac{6}{(1+x)^4},$$

og det ses herfra, at for $n \geq 1$ er

$$f^{(n)}(x) = \frac{(-1)^{n-1}(n-1)!}{(1+x)^n}.$$

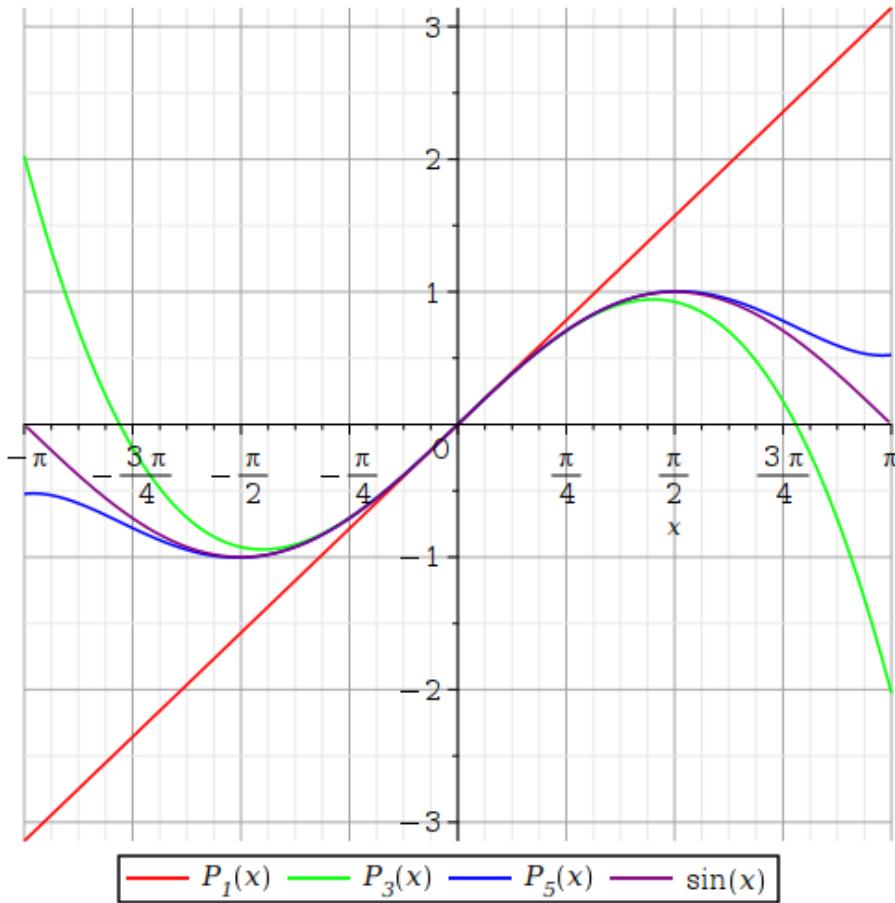
Formelt kan man bevise dette ved såkaldt *induktion*, men det går vi ikke i detaljer med her. Taylorpolynomiet omkring 0 af grad n ses da at være

$$P_n(x) = x - \frac{x^2}{2} + \cdots + \frac{(-1)^{n-1}x^n}{n}.$$

Herunder er funktionen illustreret sammen med en række Taylorpolynomier. ○

Egenskaber for Taylorpolynomier

Nu har vi set en række eksempler på Taylorpolynomier, og ud fra de her eksempler har vi empirisk evidens for, hvorfor Taylorpolynomier er en god approksimation. Mere teoretisk evidens er i følgende proposition.



Figur 1.23: \sin tegnet ind med nogle Taylorpolynomier af forskellige ordener omkring nul.

Proposition 1.6.6. *Lad $f : I \rightarrow \mathbb{R}$ være en funktion, hvor I er et interval i \mathbb{R} . Antag, at f er n gange differentiabel. Da opfylder Taylorpolynomiet for f omkring a af grad n , at alle afledte i a op til grad n stemmer overens med dem for f .*

Bevis. Lad

$$P_n(x) = f(a) + \frac{f'(a)}{1!}(x-a) + \frac{f''(a)}{2!}(x-a)^2 + \cdots + \frac{f^{(n)}(a)}{n!}(x-a)^n$$

betegne Taylorpolynomiet af grad n for f i a . Differentier vi, fås (bemærk, at a er konstant)

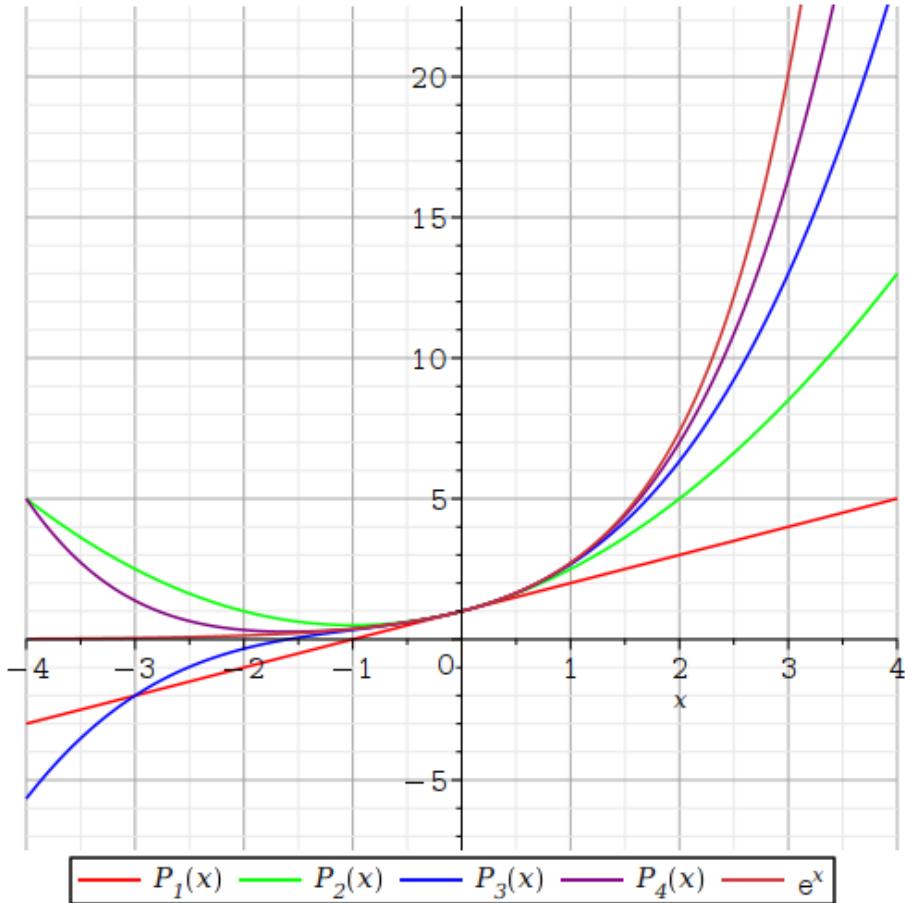
$$P'_n(x) = f'(a) + f''(a)(x-a) + \cdots + \frac{f^{(n)}(a)}{n!}n(x-a)^{n-1},$$

og vi ser, at $P'_n(a) = f'(a)$. Differentierer vi én gang mere, får vi

$$P''_n(x) = f''(a) + f'''(a)(x-a) + \cdots + \frac{f^{(n)}(a)}{n!}n(n-1)(x-a)^{n-2},$$

hvorfaf det fås, at $P''_n(a) = f''(a)$. Det er klart, at dette mønster fortsætter, sådan at vi har $P_n^{(i)}(a) = f^{(i)}(a)$ for alle $i = 1, \dots, n$ som ønsket. ■

Man kan også overbevise sig selv om, at Taylorpolynomiet er det unikke polynomium med ovenstående egenskab. Dette fortæller os, at P_n ligner f omkring a i en ret præcis forstand. Funktionsværdien stemmer overens, $P_n(a) = f(a)$, ændringen i a stemmer overens, ændringen i ændringen stemmer overens og så videre. Det næste værktøj er et uvurderligt redskab, når man skal analysere funktioner ud fra dets Taylorpolynomium.



Figur 1.24: \exp tegnet ind med nogle Taylorpolynomier af forskellige ordener.

Sætning 1.6.7 (Taylors formel med restled). *Lad $f : I \rightarrow \mathbb{R}$ være n gange differentielabel, og lad $a, x \in I$ med $a \neq x$. Da findes et tal ξ mellem a og x , sådan at*

$$f(x) = P_{n-1}(x) + \frac{f^{(n)}(\xi)}{n!}(x-a)^n.$$

Beviset for dette resultat bygger på en række resultater i matematisk analyse og er derfor udeladt. Resultatet fortæller os, at vi faktisk kan approksimere $f(x)$ perfekt ved at vælge et passende ξ mellem x og udviklingspunktet a . En advarsel er dog på sin plads. Hverken sætningen eller beviset fortæller os, hvordan vi finder ξ , og resultatet er derfor af teoretisk natur. Ikke desto mindre er det utrolig brugbart i forhold til at begrænse fejlen, man får ved at approksimere $f(x)$ med Taylorpolynomiet omkring a . Størrelsen

$$\frac{f^{(n)}(\xi)}{n!}(x-a)^n$$

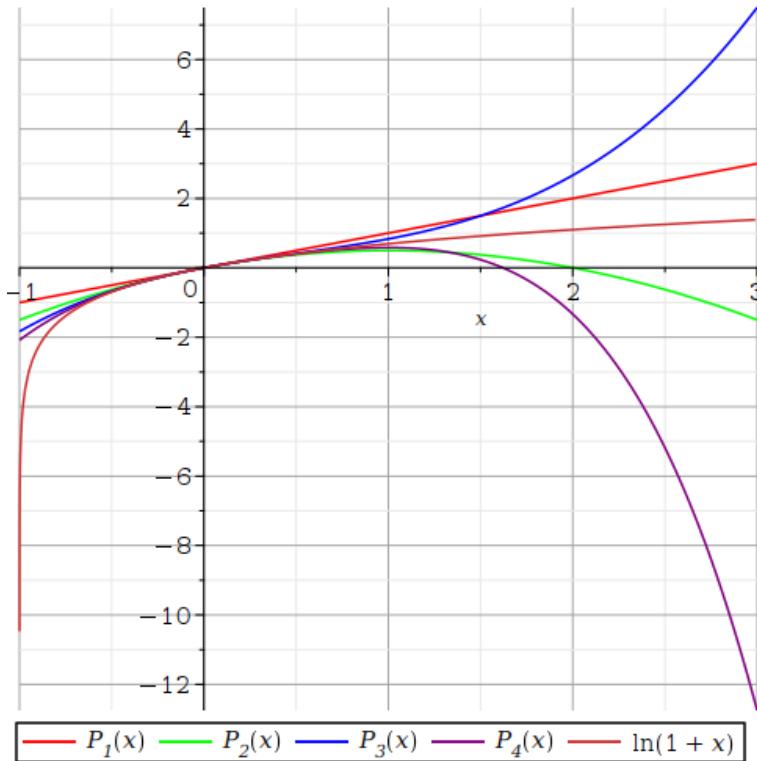
kaldes *restleddet* og er central i at estimere fejl. Lad os tage to eksempler.

Eksempel 1.6.8. Lad os approksimere e ved at bruge Taylorrækken for e^x omkring 0. Ved at bruge Taylors formel med restled, får vi for $n \in \mathbb{N}$, at

$$e - P_n(1) = \frac{e^\xi}{n!} 1^n = \frac{e^\xi}{n!},$$

hvor $\xi \in (0, 1)$. e^x er en voksende funktion, og dermed har vi $e^\xi \leq e$. Fra Korollar D.10 har vi $e \leq 4$, og dermed får vi begrænsningen

$$e - P_n(1) \leq \frac{4}{n!} \quad \text{og dermed} \quad e \leq P_n(1) + \frac{4}{n!}.$$



Figur 1.25: Funktionen $f(x) = \log(1 + x)$ tegnet ind med nogle Taylorpolynomier af forskellige ordener.

Samtidig har vi fra før, at $e - P_n(1) \geq 0$, hvilket giver

$$P_n(1) \leq e \leq P_n(1) + \frac{4}{n!},$$

og dermed kan vi approksimere e , så godt vi har lyst til, hvis blot vi gør n større. For $n = 4$ fås

$$2.70833 \leq e \leq 2.875,$$

mens vi for $n = 8$ får

$$2.7182788 \leq e \leq 2.7183780.$$

I Maple fås $e = 2.718281828$ med ni decimaler. ○

Eksempel 1.6.9. Vi ønsker at approksimere $\cos(1)$ ved at benytte Taylorpolynomiet omkring 0, som vi bestemte tidligere. Fra Taylors formel med restled har vi for $n \in \mathbb{N}$, at

$$|\cos(1) - P_{2n}(1)| = \left| \frac{\cos^{(2n+1)}(\xi)}{(2n+1)!} 1^{2n+1} \right|$$

for et passende $\xi \in (0, 1)$. Men vi ved, at cosinus og alle dens afledte er begrænset af 1 numerisk, og dermed har vi

$$|\cos(1) - P_{2n}(1)| \leq \frac{1}{(2n+1)!}$$

F.eks. for $n = 2$, svarende til at vi approksimerer med et Taylorpolynomium af grad 4, da bliver fejlen mindre end eller lig

$$\frac{1}{(2 \cdot 2 + 1)!} = \frac{1}{5!} = \frac{1}{120} \approx 0.00833.$$

KAPITEL 1. MATEMATISKE FORUDSÆTNINGER

Hvis vi i stedet valgte $n = 4$, svarende til et Taylorpolynomium af grad 8, ville få en fejl opadbegrænset af

$$\frac{1}{(2 \cdot 4 + 1)!} = \frac{1}{9!} = \frac{1}{362880} \approx 2,7557 \cdot 10^{-6},$$

altså i størrelsesordenen af en milliontedel. I Maple kan vi beregne den numeriske forskel $|\cos(1) - P_8(1)|$ til

$$|\cos(1) - P_8(1)| = 2.735 \cdot 10^{-7},$$

hvilket viser, at vores begrænsning på fejlen faktisk er forholdsvis pessimistisk. Mere præcist er den omrent en faktor 10 for stor. ○

Opgaver

•• **Opgave 1.6.1:**

Betragt funktionen

$$f(x) = \frac{1}{2-x}, \quad x \in (-\infty, 2).$$

- 1) Bestem et udtryk for den n 'te afdelte

$$f^{(n)}(x).$$

- 2) Bestem Taylorpolynomiet af orden n i punktet $a = 0$ for f .

•• **Opgave 1.6.2:**

Betragt hyperbolsk cosinus og sinus givet ved hhv.

$$\cosh(x) = \frac{e^x + e^{-x}}{2} \quad \text{og} \quad \sinh(x) = \frac{e^x - e^{-x}}{2}.$$

- 1) Vis, at $\cosh'(x) = \sinh(x)$ og $\sinh'(x) = \cosh(x)$.

- 2) Bestem Taylorpolynomiet af orden n omkring $a = 0$ for både \cosh og \sinh .

•• **Opgave 1.6.3:**

Betragt polynomiet $f(x) = ax^2 + bx + c$. Bestem Taylorpolynomiet for f af alle ordener. Hvad observerer du? Hvad tror du, der sker, hvis man bestemmer Taylorpolynomiet af alle ordener for et generelt polynomium

$$f(x) = a_n x^n + \cdots + a_1 x + a_0.$$

••• **Opgave 1.6.4:**

Betragt funktionen

$$f(x) = \log(1 + \sin(x)), \quad |x| < \frac{\pi}{2}.$$

Find ved hjælp af Taylors formel med restled et polynomium, hvis afvigelse fra $f(x)$ på intervallet $[0, 1/10]$ er mindre end $1/100$.

1.7 Komplekse tal

Grundlæggende definitioner

I grundskolen og gymnasiet holder man sig typisk indenfor de reelle tal \mathbb{R} . Dette viser sig dog at være alt for restriktiv en talmængde til mange formål. Vi starter med definitionen af de komplekse tal og gennemgår derefter de basale regneregler.

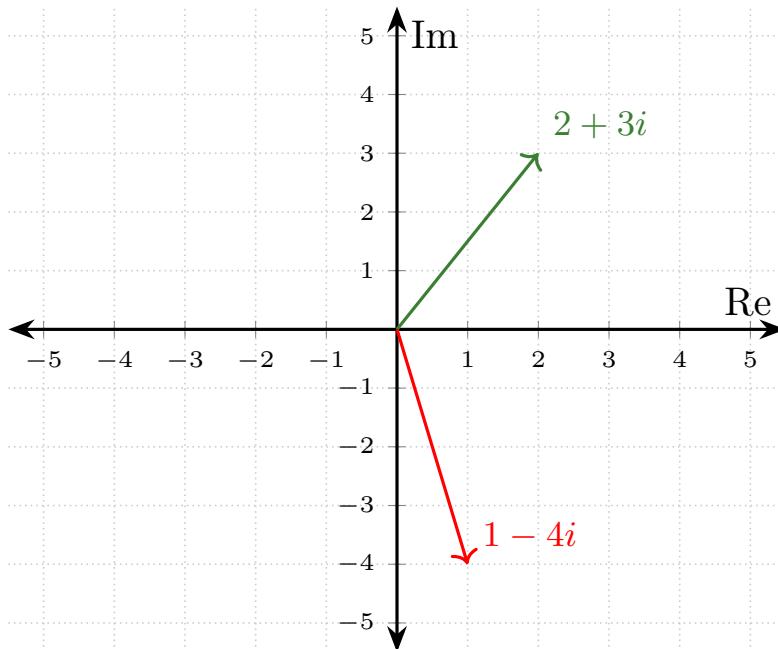
Definition 1.7.1. De *komplekse tal* \mathbb{C} er mængden af tal givet ved

$$\mathbb{C} = \{a + bi \mid a, b \in \mathbb{R}, i^2 = -1\}.$$

For et komplekst tal $z = a + bi$, betegner a *realdelen* for z og betegnes $\text{Re}(z)$, mens b kaldes *imaginær delen* og betegnes $\text{Im}(z)$.

Første gang man ser denne definition, bør man spørge sig selv, hvad i overhovedet er. Svaret er i principippet enkelt. i er en størrelse, som opfylder $i^2 = -1$, altså en kvadratrod af -1 (man skriver også til tider $i = \sqrt{-1}$). Og det er helt fint blot at acceptere denne definition. Med denne regel på plads kan man foretage sig al aritmetik med komplekse tal. Vi illustrerer først med eksempler, og derefter opskriver vi de centrale regneregler som et resultat.

Eksempel 1.7.2. Betragt de to komplekse tal $2 + 3i$ og $1 - 4i$. Disse kan illustreres i det såkaldte *komplekse plan* som herunder.



Figur 1.26: Det komplekse plan med tallene $2 + 3i$ og $1 - 4i$ indtegnet.

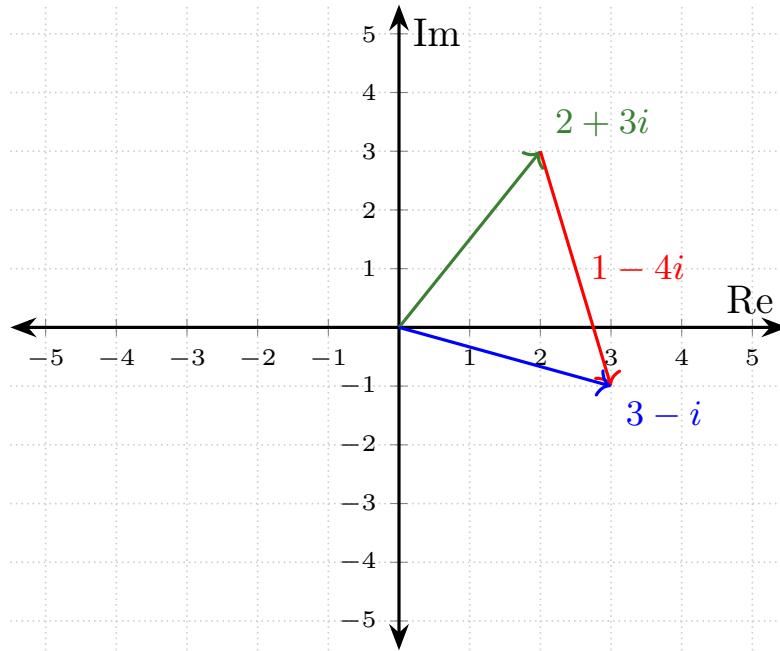
Det er typisk at illustrere komplekse tal på samme måde som vektorer i planet. Den eneste forskel er navngivningen af akserne. Førsteaksen hedder nu Re , som står for den reelle akse, mens Im betegner den imaginære akse. Vi kan lægge vores to tal sammen,

$$(2 + 3i) + (1 - 4i) = 3 - i,$$

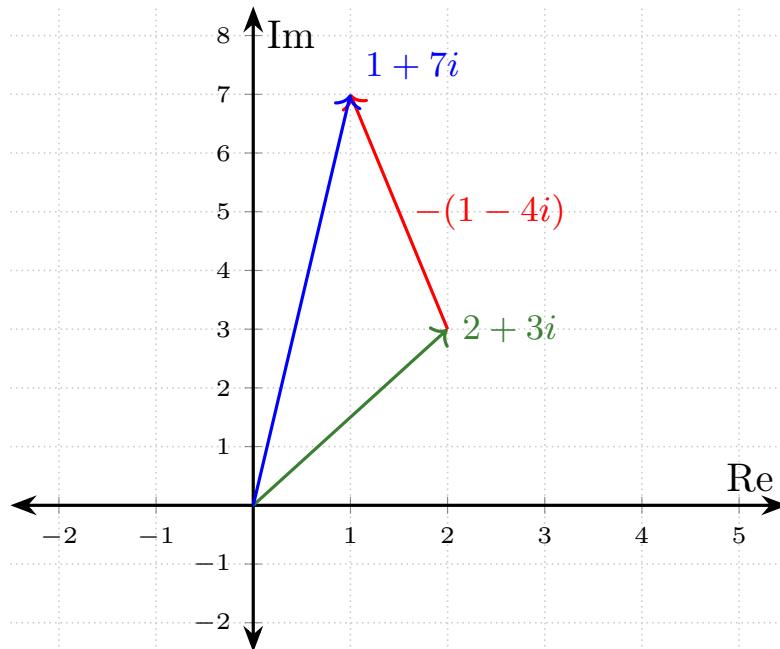
og vi kan trække dem fra hinanden,

$$(2 + 3i) - (1 - 4i) = (2 + 3i) - 1 + 4i = 1 + 7i.$$

Addition af komplekse tal kan illustreres ved at lægge pilene i forlængelse af hinanden i det komplekse plan.

Figur 1.27: Addition af de to komplekse tal $2 + 3i$ og $1 - 4i$.

Ligeledes kan subtraktion illustreres ved først at spejle det komplekse tal, der skal trækkes fra, og derefter lægge pilene i forlængelse af hinanden.

Figur 1.28: Subtraktion af de to komplekse tal $2 + 3i$ og $1 - 4i$.

Når vi skal gange de to tal sammen, benytter vi almindelige parantesregneregler, hvor i behandles som en variabel,

$$(2 + 3i)(1 - 4i) = 2 - 8i + 3i - 12i^2 = 2 - 5i - 12i^2.$$

Herefter husker vi, at $i^2 = -1$, hvilket giver det endelige resultat

$$(2 + 3i)(1 - 4i) = 2 - 5i + 12 = 14 - 5i.$$

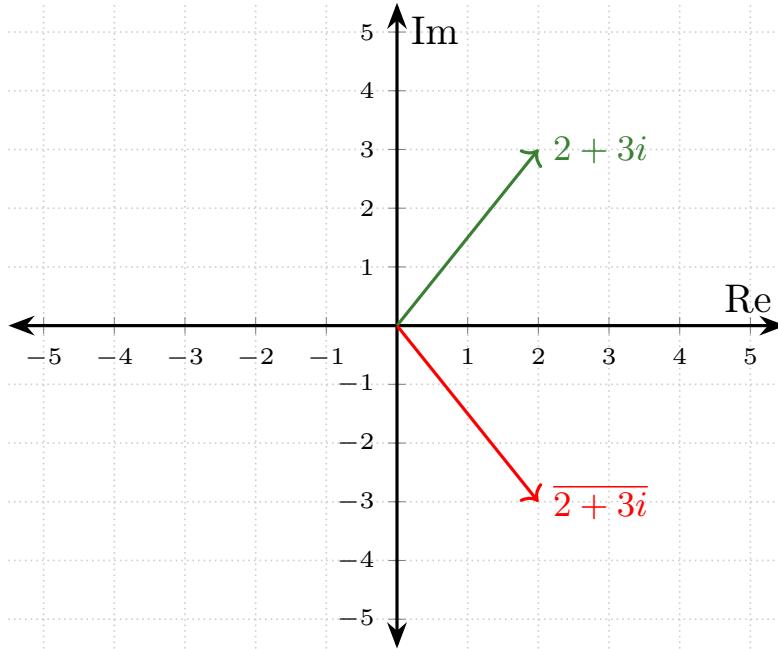
KAPITEL 1. MATEMATISKE FORUDSÆTNINGER

Der findes også en geometrisk fortolkning af multiplikation med komplekse tal, men det er mindre ligetil end for addition og subtraktion og kræver introduktionen af andre måder at skrive komplekse tal på (som vi vender tilbage til), og vi udelader det derfor her.

Kan man dividere med komplekse tal? Svaret er ja, og vi skal snart se hvordan. Det giver dog mening først at introducere et begreb mere, nemlig konjugation.

Definition 1.7.3. For et komplekst tal $z = a + bi$, kaldes $\bar{z} = a - bi$ for den *konjugerede* til z .

Eksempel 1.7.4. Den konjugerede af $z = 2 + 3i$ er $\bar{z} = 2 - 3i$. I det komplekse plan illustreres konjugation som en spejling i den reelle akse.



Figur 1.29: Tallet $2 + 3i$ og dens konjugerede.

Det er ikke svært at overbevise sig selv om, at længden af tallet $z = a + bi$ i det komplekse plan er givet ved $\sqrt{a^2 + b^2}$. Det er nemlig blot at benytte Pythagoras. Dog er denne størrelse tilpas vigtig til at få sit eget navn.

Definition 1.7.5. For et komplekst tal $z = a + bi$ betegner $|z| = \sqrt{a^2 + b^2}$ længden af z i det komplekse plan. $|z|$ kaldes *modulus* af z .

Følgende smarte hjælperesultat overlades det til jer at vise.

Lemma 1.7.6. For et komplekst tal $z = a + bi$ gælder $|z|^2 = z\bar{z} = a^2 + b^2$.

Eksempel 1.7.7. Lad os foretage division af $2 + 3i$ med $1 - 4i$. Det viser sig at være smart at forlænge brøken med den konjugerede af $1 - 4i$, hvilket giver svaret

$$\begin{aligned}\frac{2 + 3i}{1 - 4i} &= \frac{(2 + 3i)(1 + 4i)}{(1 - 4i)(1 + 4i)} = \frac{2 + 8i + 3i + 12i^2}{1^2 + 4^2} \\ &= \frac{2 + 11i - 12}{17} = \frac{-10}{17} + \frac{11}{17}i.\end{aligned}$$

Med alle ovenstående regneregler i tankerne, kan vi opsummere regnereglerne i følgende resultat. Beviset overlades til jer.

Proposition 1.7.8. *Lad $z = a + bi$ og $w = c + di$ være to komplekse tal. Da har vi*

1. $z + w = (a + c) + (b + d)i$,
2. $z - w = (a - c) + (b - d)i$,
3. $zw = (ac - bd) + (ad + bc)i$ og
- 4.

$$\frac{z}{w} = \frac{z\bar{w}}{|w|^2} = \frac{((ac + bd) + (-ad + bc)i)}{c^2 + d^2}.$$

Selvom det er smart at have regneregler, er vores anbefaling til jer ikke, at I husker de ovenstående regler udenad. Til addition, subtraktion og multiplikation er det kun nødvendigt at huske reglen $i^2 = -1$, mens alle andre regnerier forløber som med almindelige tal. For division skal man blot huske at forlænge brøken med nævnerens konjugerede. Konjugation bruges dog til mere end blot division, og det er værd at opskrive nogle regneregler. De er samlet i følgende resultat.

Lemma 1.7.9. *For to komplekse tal z og w har vi følgende regneregler.*

1. $\overline{z + w} = \bar{z} + \bar{w}$.
2. $\overline{z - w} = \bar{z} - \bar{w}$.
3. $\overline{zw} = \bar{z} \cdot \bar{w}$.
- 4.

$$\overline{\frac{z}{w}} = \overline{\left(\frac{z}{w}\right)}, \quad w \neq 0.$$

Bevis. Punkt 1, 2 og 4 overlades det til jer at vise. Vi viser punkt 3 for at fremhæve bevismetoden, som er ren beregning. Lad $z = a + bi$ og $w = c + di$. Ved at bruge Proposition 1.7.8 ovenover, har vi

$$\overline{zw} = \overline{(ac - bd) + (ad + bc)i} = (ac - bd) - (ad + bc)i,$$

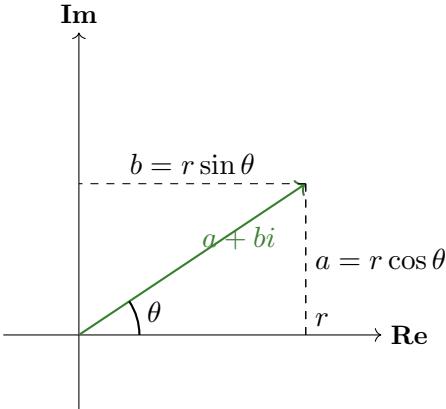
mens

$$\begin{aligned} \bar{z} \cdot \bar{w} &= (a - bi)(c - di) = ac - adi - bci + bdi^2 \\ &= (ac - bd) - (ad + bc)i, \end{aligned}$$

og vi ser, at disse to udtryk stemmer overens. ■

Polarform af komplekse tal

I har måske hørt, at en vektor i stedet for koordinater kan beskrives som en størrelse med længde og retning. Det samme gælder (ikke overraskende) for komplekse tal, og vi skal nu gøre dette præcist. Betragt et komplekst tal $z = a + bi$. Lad $r = |z|$ betegne modulus. Hvis θ (det græske bogstav "theta") betegner vinklen for vektoren (a, b) i planet, kan vi skrive $a = r \cos(\theta)$ og $b = r \sin(\theta)$, som illustreret i figuren herunder.



Figur 1.30: Illustration af relationen mellem a, b, θ og r .

Vi lader dette være en definition.

Definition 1.7.10. Hvis det komplekse tal z er skrevet på formen

$$z = r \cos(\theta) + i r \sin(\theta),$$

da siger vi, at z er på *polarform*. Vi kalder r modulus og θ for *argumentet* til z .

Lad os tage nogle eksempler på, hvordan man går frem og tilbage mellem polarform og klassisk form ($z = a + bi$). Det kan være en rigtig god idé at slå op i appendixset omkring trigonometriske funktioner, hvis værdierne for cosinus og sinus ikke sidder helt på rygraden.

Eksempel 1.7.11. Lad $z = 1 + i$. Vi regner $r = \sqrt{1^2 + 1^2} = \sqrt{2}$. Ved at tegne z i det komplekse plan, ser vi, at $\theta = \pi/4$ svarende til 45 grader. Hvis i stedet $z = 1 - i$, ville vi igen have $r = \sqrt{2}$, men θ ville nu være $-\pi/4$ (eller ækvivalent, $7\pi/4$). \circ

Eksempel 1.7.12. Lad $z = -3 + 2i$. Vi bestemmer modulus og argument for z . Vi regner hurtigt, at $r = \sqrt{(-3)^2 + 2^2} = \sqrt{13}$. Vi har da

$$\theta = \arccos\left(\frac{-3}{\sqrt{13}}\right) \quad \text{og} \quad \theta = \arcsin\left(\frac{2}{\sqrt{13}}\right).$$

Her skal man passe på! Hvis man naivt taster ind i sin lommeregner ud fra disse udtryk, kan man f.eks. få (husk at vi altid regner i radianer)

$$\arccos\left(\frac{-3}{\sqrt{13}}\right) \approx 2,554$$

og

$$\arcsin\left(\frac{2}{\sqrt{13}}\right) \approx 0.588.$$

Hvorfor stemmer disse tal ikke overens? Det skyldes, at hverken arcsin eller arccos er "rigtige" inverser. F.eks. er $\cos(x) = \cos(-x)$ for alle x , så man skal være påpasselig med den værdi, man vælger. Hvis vi tegner $-3 + 2i$ ind i det komplekse plan, kan vi se, at vi befinder os i anden kvadrant, hvor vinklen er mellem $\pi/2$ og π . Dermed må $\theta \approx 2.554$ være korrekt. \circ

Polarformen af komplekse tal kan virke lidt overflødig. Er formen $z = a + bi$ ikke altid nemmere at regne på? Ift. addition og subtraktion, helt sikkert. Dog viser det sig, at polarformen (og eksponentialformen, som introduceres om et øjeblik) har brugbare egenskaber ift. multiplikation med komplekse tal.

Proposition 1.7.13. *Lad $z = a + bi$ og $w = c + di$ være komplekse tal. Antag, at z har modulus r_1 og argument θ_1 , mens w har modulus r_2 og argument θ_2 . Da har zw modulus r_1r_2 og argument $\theta_1 + \theta_2$.*

Bevis. Vi har $z = r_1 \cos(\theta_1) + ir_1 \sin(\theta_1)$ og $w = r_2 \cos(\theta_2) + ir_2 \sin(\theta_2)$. Ganger vi disse sammen, får vi

$$\begin{aligned} zw &= r_1r_2 \cos(\theta_1) \cos(\theta_2) + i^2 r_1r_2 \sin(\theta_1) \sin(\theta_2) \\ &\quad + ir_1r_2 \cos(\theta_1) \sin(\theta_2) + ir_1r_2 \cos(\theta_2) \sin(\theta_1) \\ &= r_1r_2 (\cos(\theta_1) \cos(\theta_2) - \sin(\theta_1) \sin(\theta_2)) \\ &\quad + ir_1r_2 (\cos(\theta_1) \sin(\theta_2) + \cos(\theta_2) \sin(\theta_1)). \end{aligned}$$

Dette ser kompliceret ud, men vi bruger nu additionsformlerne, Lemma C.3, til at simplicere ovenstående til

$$zw = r_1r_2 \cos(\theta_1 + \theta_2) + ir_1r_2 \sin(\theta_1 + \theta_2),$$

og dette udtryk fortæller os præcist det, som vi ønsker. ■

En anden måde at skrive komplekse tal på er eksponentialformen, som vi nu skal introducere.

Eksponentialform af komplekse tal

For at kunne introducere eksponentialformen af komplekse tal, er vi nødt til at definere e^z , når z er et komplekst tal.

Definition 1.7.14. For et komplekst tal $z = a + bi$ definerer vi

$$e^z = e^a (\cos(b) + i \sin(b)),$$

altså det komplekse tal med modulus e^a og argument b .

Vi bemærker som det første, at denne definition stemmer overens med e^z , hvis z er et reelt tal ($b = 0$). Følgende eksempel kaldes til tider for *Eulers identitet* efter en af matematikkens største bidragsydere, Leonhard Euler.

Eksempel 1.7.15. Lad os beregne $e^{i\pi}$. Per definition har vi

$$e^{i\pi} = e^0 (\cos(\pi) + i \sin(\pi)) = 1 \cdot (-1 + i \cdot 0) = -1.$$

○

Vi husker, at for reelle tal har vi funktionalligningen $e^{x+y} = e^x e^y$. Denne kan udvides til de komplekse tal også.

Proposition 1.7.16. *For komplekse tal z og w har vi*

$$e^{z+w} = e^z e^w.$$

Bevis. Vi har

$$e^{z+w} = e^{(a+c)+(b+d)i} = e^{a+c} (\cos(b+d) + i \sin(b+d)),$$

så e^{z+w} har modulus $e^{a+c} = e^a e^c$ og argument $b+d$. Idet e^z har modulus e^a og argument b , mens e^w har modulus e^c og argument d , følger resultatet af Proposition 1.7.13. ■

Følgende interessante konsekvens er værd at fremhæve.

Korollar 1.7.17 (De Moivres formel). *For alle naturlige tal n er*

$$(\cos(\theta) + i \sin(\theta))^n = \cos(n\theta) + i \sin(n\theta).$$

KAPITEL 1. MATEMATISKE FORUDSÆTNINGER

Bevis. Vi har $\cos(\theta) + i \sin(\theta) = e^\theta$, så

$$\begin{aligned} (\cos(\theta) + i \sin(\theta))^n &= (e^\theta)^n = e^{n\theta} \\ &= \cos(n\theta) + i \sin(n\theta), \end{aligned}$$

hvor vi i andet lighedstegn benyttede propositionen lige ovenover. ■

Vi har nu tilstrækkelig forståelse for den komplekse eksponentialfunktion til at lave følgende definition.

Definition 1.7.18. Hvis et komplekst tal z er på formen

$$z = r e^{i\theta},$$

hvor $r \geq 0$ og $\theta \in \mathbb{R}$, da siger vi, at z er på *eksponentialform*.

Bemærk, at idet $e^{i\theta}$ har modulus 1 og argument θ , da må z have modulus r og argument θ jævnfør Proposition 1.7.13. Dermed er fremgangsmåden til at skrive z på eksponentialform den samme som at skrive z på polarform. Ikke desto mindre tager vi nogle eksempler, også for at understrege, hvordan polar- eller eksponentialform kan være smart ift. udregninger.

Eksempel 1.7.19. Betragt $z = -4 - 4i$. Vi har $r = \sqrt{(-4)^2 + (-4)^2} = \sqrt{32} = 4\sqrt{2}$ og $\cos(\theta) = -4/(4\sqrt{2}) = -1/\sqrt{2}$. Ved at se på enhedscirklen, kan vi se, at θ skal være enten $3\pi/4$ eller $5\pi/4$. Idet z befinner sig i tredje kvadrant, må det rigtige svar være $\theta = 5\pi/4$. Dermed er

$$z = 4\sqrt{2}e^{i5\pi/4}.$$

○

Eksempel 1.7.20. Eksponentialformen kan til tider være smart ift. at beregne store potenser. Lad os som eksempel se på $(1 + \sqrt{3}i)^{103}$. Lad $z = 1 + \sqrt{3}i$. Vi ser, at $|z| = \sqrt{1^2 + \sqrt{3}^2} = \sqrt{4} = 2$. Dermed er modulus for $(1 + \sqrt{3}i)^{103}$ lig 2^{103} . Hvad med argumentet? Argumentet θ for z opfylder $\cos(\theta) = 1/2$, hvilket giver $\theta = \pi/3$ (hvorfor?). Dermed er argumentet for $(1 + \sqrt{3}i)^{103}$ lig $103 \cdot \pi/3$. Vi kan faktisk gøre dette endnu simplere. Et argument er stadig gyldigt, hvis vi trækker 2π fra eller lægger 2π til. Altså kan vi vælge argumentet

$$\frac{103\pi}{3} - 34\pi = \frac{103\pi}{3} - \frac{102\pi}{3} = \frac{\pi}{3}$$

for $(1 + \sqrt{3}i)^{103}$. Vi konkluderer, at

$$(1 + \sqrt{3}i)^{103} = 2^{103}e^{i\pi/3}.$$

○

Dette afslutter vores behandling af komplekse tal. Flere eksempler, opgaver og forklaringer kan findes i kapitel 3 af [3].

Opgaver

- **Opgave 1.7.1:**

Beregn følgende.

- 1) $(1 + 3i) + (7 + 2i)$.
- 2) $(2 - 4i) + (-3 + 9i)$.
- 3) $17 + (3 - 8i)$.
- 4) $(10 - 7i) - 6i$.
- 5) $(5 - 7i) - (12 + i)$.
- 6) $(5 + 6i) - (1 + 3i)$.

- **Opgave 1.7.2:**

Udregn følgende.

- 1) $(1 + 2i)(3 + i)$.
- 2) $(1 + 4i)(2 - 3i)$.
- 3) $(5 - i)(6 + 2i)$.
- 4) $(3 - i)(7 + 7i)(2 + i)$.

- **Opgave 1.7.3:**

Udregn følgende.

- 1) $\frac{1+i}{1-i}$.
- 2) $\frac{2-i}{3+2i}$.
- 3) $\frac{2+3i}{5+6i}$.
- 4) $\frac{4-4i}{2i}$.

- **Opgave 1.7.4:**

Udregn følgende. Hvis I har lyst, er det tilladt at benytte Lemma 1.7.9.

- 1) $\overline{5 + 6i}$.
- 2) $\overline{2 - 3i}$.
- 3) $\overline{(5 + 6i)(2 - 3i)}$.
- 4) $\overline{\left(\frac{5+6i}{2-3i}\right)}$.

- **Opgave 1.7.5:**

Lad $z = a + bi \neq 0$. Bevis, at

$$z^{-1} = \frac{a}{a^2 + b^2} - i \frac{b}{a^2 + b^2}.$$

- **Opgave 1.7.6:**

Bevis Proposition 1.7.8.

- **Opgave 1.7.7:**

Bevis punkt 1, 2 og 4 i 1.7.9.

- **Opgave 1.7.8:**

Find modulus og argumentet til følgende komplekse tal.

- 1) $3 + i$.
- 2) $-1 + i$.
- 3) $2 + 5i$.

KAPITEL 1. MATEMATISKE FORUDSÆTNINGER

•• **Opgave 1.7.9:**

Skriv alle tallene i forrige opgave på både polarform og eksponentialform.

•• **Opgave 1.7.10:**

Udregn følgende komplekse tal (det er i orden at skrive dem på eksponentialform uden at beregne diverse potenser eksplisit).

- 1) $(1+i)^{172}$.
- 2) $(\sqrt{3}-i)^{180}$.

•• **Opgave 1.7.11:**

Lad $z = 2e^{i\pi/2}$ og $w = 4e^{i\pi/4}$.

- 1) Beregn zw .
- 2) Beregn z/w .
- 3) Skriv både z og w på almindelig form, dvs. på formen $a+bi$.

Kapitel 2

Introduktion til Python programmering

2.1 Motivation

Programmering er et fantastisk værktøj når du arbejder med matematik. Hvis du har arbejdet med programmer som Excel, Maple, eller lignende, så har du allerede fået en lille smagsprøve af, hvordan en computer kan hjælpe med at bringe matematisk teori ud i praksis. Selvom disse typer programmer hver udfører sine roller strålende, så er det ofte tilfældet at du gerne vil udføre en meget specifik opgave, som programmet ikke er fleksibelt nok til at udføre.

Med programmering i dit arsenal får du fuld kontrol over hele processen i din modellering. Et godt sted at starte, er at bruge *Python*, som både er ét af de mest udbredte programmeringssprog, men også ét af de letteste at lære. Når du er færdig med dette forløb, vil du kunne bruge Python til at implementere matematiske modeller, men du vil også have grundstenene for lære alverdens andre programmering-relaterede discipliner - og ikke nødvendigvis i Python.

Selvom Python kan bruges til mange forskellige ting, specielt indenfor datavidenskab, så er det overordnede mål ved dette programmeringsforløb at give dig forudsætningerne til at kunne arbejde med modelleringsprojekterne senere, som højest sandsynligt (afhængigt af projektet) vil inkludere numerisk løsning af differentialligninger.

2.2 Setup

For at komme i gang med at programmere i Python, skal vi bruge Python's software. Den traditionelle metode kræver at du downloader og installerer det fra Python's officielle hjemmeside, men dette skaber ofte problemer. I stedet bruger vi Anaconda, som er et program, der samler en masse nyttige data science værktøjer ét sted, og er samtidig meget lettere at få op at køre.

Installering af Anaconda

Download Anaconda fra deres hjemmeside: "[anaconda.com/download/success](https://www.anaconda.com/download/success)"
Når du installerer det, kan du nøjes med default indstillingerne. Herefter vil du have adgang til programmerne: "Anaconda Navigator" og "Anaconda Prompt". Anaconda prompten kan virke skræmmende for de fleste, så selvom vi bruger denne over GUI-versionen (Anaconda navigator), så bruger vi den kun minimalt.

Nu hvor Anaconda (og dermed Python) er installeret, kan vi gå videre til installationen af din text-editor, eller en "IDE" (*Integrated Developer Environment*).

Installering af IDE

Vi har installeret Python's software, hvilket gør, at computeren nu kan fortolke vores program. Et program er blot en tekst fil, som følger et bestemt programmeringssprogs syntaks, og indikeres af det respektive sprogs fil-udvidelse. Når vi kalder en fil noget med ".py" kan Python softwaret altså fortolke og køre det som en Python-fil

Da Python-scripts bare er en række tekst, kan man teknisk sest nøjes med at bruge simple programmer som notepad/notesblok til at redigere dem. Men for at gøre livet lettere for os, bruger vi IDE'en i stedet.

Vi anbefaler at bruge den meget udbredte **Visual Studio Code** (VS Code), som kan downloades fra nettet. Når denne er downloadet og installeret, skal du lave en folder på din PC, der skal fungere som dit *workspace*, hvor du har data og Python-scripts i. Åbn så denne folder i VS Code.

Test af VS Code setup

1. Lav en ny fil og kald den "test.py"
2. Indsæt følgende i filen: `print("Hello World!")` (bare fordi)
3. Klik på "kør"-knappen oppe i højre hjørne (trekant-ikon)
4. Inspicér terminal outputtet. Der vil stå "Hello World!"

Test af Jupyter Notebook setup

I stedet for at lave og køre hele Python scripts, kan man også køre Python interaktivt ved fx. brug af en *Jupyter Notebook* (.ipynb). Dette er en variant af Python, som lader én køre enkelte blokke af kode ad gangen.

1. I VS Code, find "Extensions" knappen i venstre hotbar
2. Søg efter "Jupyter" (af Microsoft)
3. Installér denne
4. Opret en ny fil: "test.ipynb"
5. Inde i en kode-celle skriv `print("Hello World!")`
6. Kør cellen (ctrl-enter) eller på "Kør" knappen på venstre side af cellen

2.3 Basis Python

VIGTIG: For at gøre det muligt at kopiere koden fra bogen, findes de i digital format her:

bit.ly/unf_python

Debugging reference

Hurtigt budskab inden vi går igang: Du undgår nok ikke at skrive kode med fejl i, men Python er til gengæld super god til at give feedback på hvad fejlen er.
De mest almindelig fejl er af typerne:

1. **SyntaxError** - Syntaksen / kode-grammatikken er forkert
2. **NameError** - Når man bruger variable eller funktioner som ikke findes (fx hvis de er stavet forkert)
3. **TypeError** - Forkert operation til datatype/datastruktur
4. **ValueError** - Rigtig type, men upassende værdi
5. **AttributeError** - Objekt har ikke den forventede "attribute" eller "metode". Fx hvis du skriver noget efterfuldt af `.(<noget>)`
6. **IndexError** - String/liste indeks passer ikke
7. **KeyError** - Key findes ikke i dictionariet
8. **IndentationError** - Det er vigtigt at "indhakke" sin kode rigtigt

Hvis et program fejler, kan du forvente en fejlbesked som denne: Her vises både hvilken

```
Traceback (most recent call last):
  File "/home/mp/Desktop/test/test.py", line 1, in <module>
    a = 5+b
NameError: name 'b' is not defined
```

Figur 2.1: **NameError** pga. ikke-defineret variabel *b*

linje i scriptet som foreårsager fejl, samt hvad fejlen er.

Kommentarer

I de følgende kodeeksempler vil der til tider stå noget med grønt skrift. Dette er for at indikerer en *kommentar* i koden. Disse laves ved at skrive `#` efterfulgt af selve kommentaren. Disse påvirker ikke koden, men de gør koden lettere at læse.

Variable og datatyper

I kender variable fra algebra undervisning. Idéen er at man har et udtryk, defineret af tegn/bogstaver, som repræsenterer en værdi. Når vi skal processere digital information (aka. data), kan dette ikke gøres uden at have variable.

Variable kan defineres på flere måder:

```
# Statisk i kode:
x = 1

# Afhængigt af andre variable:
z = x + y

# Hentet "udefra" (mere om det senere):
df = pd.read_csv("datafile.csv")
```

KAPITEL 2. INTRODUKTION TIL PYTHON PROGRAMMERING

Hvis du ikke har erfaring med programmering, har du måske kun defineret variable som værende tal, men de kan ligeså vel have andre typer. De mest udbredte "datatyper" er som følger (se kommentarerne ved den associerede kode)

```
# Heltal (integers)
x = 12
y = x + 3 # 15
y = y / 4 # 3.75 (ikke heltal længere)

# Decimaltal (floats)
x = 12.0
y = x + 3.4 # 15.4
z = y * 2 # 30.8

# Tekst (strings)
s1 = "UNF"
s2 = "sejt"
s3 = s1 + " er" + s2 + "!" # "UNF er sejt!"

# Boolsk logik (boolean)
earth_is_flat = False
earth_is_round = not earth_is_flat # True
```

Ændring og inspicering af en variabels datatype:

```
# Initialisér "float"
x = 42.0
print(x) # 42.0
print(type(x)) # float

# Konvertér til "integer"
x = int(x)
print(x) # 42
print(type(x)) # int

# Konvertér til "string"
x = str(x)
print(x) # "42"
print(type(x)) # str
```

Bodils Banan-Butik

Bodil sælger bananer, men er (overraskende nok) for fattig til at investere i en revisor. Hjælp Bodil med at udregne hvor meget hun tjener i sin banan-biks.

(Udfyld '...')

```
banan_pris      = 2
bananer_solgt   = 153
omsætning       = ...
output_str       = "Bodil har solgt for" + ... + "kr. bananer"

print(output_str)
```

Datastrukturer

I praksis arbejder man med mange værdier, men det bliver for uoverskueligt at definere alle tal som enkelte variable.

```
# Skrald
a = 3
b = 1
c = 4
d = 1
e = 5
...
```

```
# Sejt
L = [3, 1, 4, 1, 5, 9, 2, 6]
```

For at gøre denne process mere fleksibel bruger man *datastrukturer* som er forskellige måder at samle mange værdier på.

Lister: Simpel samling af vilkårlige værdier

```
L = ["jan", "feb", "mar", "apr", "may", "jun", "jul", "aug", "sep", "oct", "nov", "dec"]
første_måned = L[0]      # notér 0-indekseringen
sidste_måned = L[-1]
efterår = L[8:11]
antal_måneder = len(L)
```

```
L = ["pear", "banana"]
L.append("apple") # tilføj element længst til højre
L[0] = "orange"   # overskriv element på position 0
```

Dictionaries: Givet en **key**, fås en **value** (ligesom en ordbog, som tager et ord som input, og giver den respektive oversættelse ud som output)

```
d = {
    "jan" : 31,
    "feb" : [28, 29],
    "mar" : 31
}
dage_i_januar = d["jan"]
dage_i_februar = d["jan"]

# tilføj ny måned: d[key] = value
d["apr"] = 30
```

Strings kan fortolkes som lister af *tegn* (også kaldet **char** i andre programmeringssprog)

```
pangram = "The quick brown fox jumps over the lazy dog"
first = pangram[0]
color = pangram[10:15]
```

Kenneths Karakterer

Kenneth fik ikke særlig gode karakterer i matematik, men han var vild nok til at programmere. Gør Kenneth stolt, og udregn Kenneths karaktergennemsnit. Dette skal gøres med hhv. liste- og dictionary-repræsentation af karakterene.

```
skole_fag = ["biologi", "matematik", "programmering"]
karakterer = [7, -3, 12]

gennemsnit = ...
print("Kenneths gennemsnit er", gennemsnit)

karakterer = {
    "biologi" : 7,
    "matematik" : -3,
    "programmering" : 12
}

gennemsnit = ...
print("Kenneths gennemsnit er", gennemsnit)
```

Reflekter over hvornår man vil bruge den éne datastruktur over den anden.

Logik og betingelser

Vi så tidligere på "boolean"-variablen. Denne kan vi skaffe ved at sammenligne 2 værdier med hindanden:

```
# Lighed: ==
b1 = 4 == 5
print(b1) # False
```

NOTE: `=` betyder, at vi *definerer* eller *opdaterer* en variabel, mens `==` er til sammenligninger.

```
# Ulighed
5 > 4 # >
5 >= 4 # ≥
4 < 5 # <
4 <= 5 # ≤
4 != 5 # ≠
```

```
b = "4" == str(4)
print(b)          # True
print(type(b)) # bool
```

Det er muligt at eksekvere forskellige stykker kode, baseret på logiske variable

```
temperatur = ...
# hvis ... er sandt (True):
if temperatur >= 25:
    print("Puha, det er varmt")
# ellers præv...
elif temperatur < 25 and temperatur >= 15:
    print("Meget dejligt")
# hvis intet af ovenstående er sandt:
else:
    print("Puha, det er koldt")
```

Man kan også kombinere boolske variable

```
a = True
b = False
c = a and b # Er begge udtryk sande?
d = a or b # Er mindst ét af udtrykkende sande?

print(c) # False
print(d) # True
```

Elias' Eliksirer

Elias er lærling hos en alkymist og har ansvaret for at blande eliksirer sikkert. Hver eliksir har tre egenskaber: temperatur, pH, og boble-frekvens. Ud fra disse skal du vurdere, om eliksiren er sikker, ustabil, ekspløsiv, eller en fiasko.

Reglerne er:

1. Hvis temperaturen er over 100°C eller pH < 2 eller pH > 12, er eliksiren ekspløsiv.
2. Hvis temperaturen er mellem 60 og 100°C (inkl.) og boblehastigheden er over 20, er den ustabil.
3. Hvis temperaturen er mellem 30 og 60°C og pH mellem 6 og 8, og boble-hastigheden er under 10, er den sikker.
4. Ellers er det en fiasko.

```
# Eksperimentér med forskellige egenskaber/parametarer
temperatur = ... # grader Celcius
ph = ...
boblefrekvens = ... # bobler i sekundet

if ... :
    print("Eliksiren er EKSPLOSIV! Sæg dækning!")
elif ... :
    print("Eliksiren er USTABIL. Vær forsiktig.")
elif ... :
    print("Eliksiren er SIKKER. Godt arbejde!")
else:
    print("Eliksiren MISLYKKEDES. Prøv en ny opskrift.")
```

Løkkere (loops)

Vi er vandt til at indeksere enkelte elementer i en liste eller lignende

```
L = [4,6,3]
første = L[0] # 4
melleml = L[1] # 6
sidste = L[2] # 3
liste_sum = første + melleml + sidste # 13
```

Men hvad nu hvis der er mange elementer i en liste? Ideelt skal der ikke tilføjes flere linjer kode, bare fordi datastrukturen indeholder mange elementer:

```
L = [1,6,4,2,5,7,9,7,5,3,5,6,8,6,4,3,2,4,6,7,7,2,5,3,0,9,6,8,6,2,3,4]
```

For at udregne en sum kan man iterere gennem listen ved brug af (for-) loops, så vi ikke skal gemme alle værdier i sin egen unikke variabel :

```
liste_sum = 0
for l in L:
    liste_sum += l
print(liste_sum)
```

Strukturen for et for-loop:

```
for <element> in <iterator>:
    ...
```

Hvor <element> er det nuværende element, vi er nået til, og <iterator> er hvad end vi vil iterere over. <element> kan have et vilkårligt variabelnavn. Det er meget normalt at bruge *i*

For at loope igennem noget 5 gange, kan man bruge følgende:

```
# 5 gentagelser
for i in range(5):
```

KAPITEL 2. INTRODUKTION TIL PYTHON PROGRAMMERING

```
    print(i)
# output:
# 0
# 1
# 2
# 3
# 4
```

Eller som vi så med det tidligere eksempel; at iterere igennem en liste:

```
# Gå igennem liste
L = ["a", "b", "c"]
for item in L:
    print(item)
# output:
# a
# b
# c
```

Alternativt kan man bruge `enumerate` for både at få indeks og elementet!

```
L = ["a", "b", "c"]
for index, item in enumerate(L):
    print(index, item)
# output:
# 0, a
# 1, b
# 2, c
```

Rikkes Restaurant Reviews

Rikke har en liste af review-scores fra forskellige restauranter, og de skal gerne kategoriseres i hhv. "God", "Ok" og "Dårlig", baseret på scoren. Givet denne liste, print *butikken*, *scoren* og *kategorien*.

Eksempel: "*Sussis Sushi*", *4.6*, "*God*"

```
restauranter = ["Annas Appelsinhus", "Bentes Bageri", "Carlas Café",
                 "Dennis Diner", "Eriks Egnsretter", "Flemmings Fiskebar", "
                 Gunnars Grill", "Henrik's Hytte", "Idas Isbar", "Jørgens
                 Jerngryde", "Karstens Kro", "Larsens Lækkerier", "Mariannes Mæ
                 llekro", "Ninas Nudelhus", "Oles Ostebiks", "Pers Pandekager", "
                 Quints Quinoa", "Rikkes Røgede Retter", "Sørens Sild", "Toves
                 Tapas", "Ulf's Udskænkning", "Viggas Vinbar", "Willys Wok", "
                 Xenias Xylofonbar", "Yvonnes Yoghurtkro", "Zorros Zoneterapi og
                 Zuppe"]

scores = [1.0, 1.5, 2.0, 2.5, 3.0, 3.5, 4.0, 4.5, 5.0, 1.2, 1.7,
          2.3, 2.8, 3.4, 3.9, 4.4, 4.9, 1.1, 1.6, 2.1, 2.6, 3.2, 3.7, 4.2,
          4.7, 5.0]

for ... in ... :
    ...
```

Funktioner

Som vi opdagede i sidste afsnit (om loops), vil vi gerne undgå at skrive for meget repetitivt kode. For-loops gør, at vores kode ikke bliver større, selv når data-mængden øges.

En anden vinkel er, at vi vil undgå at skrive det samme kode flere gange, for at undgå at skulle rette flere steder (samtid for at gøre kode mere overskueligt).

Ligesom i matematik, defineres en funktion som, at man giver et input (x) og får et output (y): $f(x) = y$

I Python kan et funktion have denne form:

```
def <funktions-navn>(<input1>, <input2>, ...):
    mellemregninger = ...
    output1 = ...
    output2 = ...
    return output1, output2, ...
```

Funktioner kan tage vilkårlige datatyper og datastrukturer som input!

Lad os lave en simpel funktion. Betragt en lige linje, som er beskrevet som den lineære funktion: $f(x) = ax + b$. Ved faste a og b kan vi finde f(x) vha. følgende funktion

```
def f(x):
    a = 2    # hældning
    b = 5    # skæring i y-akse
    return a*x+b

print(f(5))  # 15
```

Det kan virke arbitràrt med simple funktioner som denne. Men forestil dig at du skal udregne et længere udtryk flere gange. Fx at finde rødderne i adskillige andengradspolynomier af formen:

$$x = \frac{-b \pm \sqrt{b^2 - 4ac}}{2a}$$

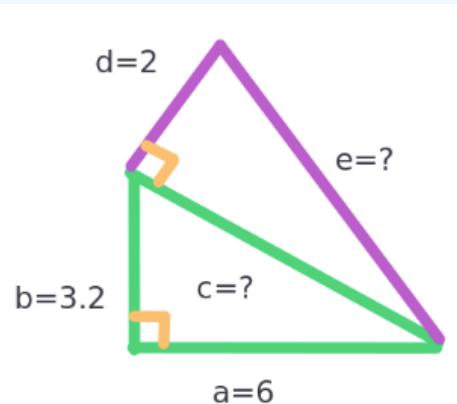
```
def root(a,b,c):
    D = (b**2 - 4*a*c)**(1/2)  # hvor "<<" betyder oplæftet i
    solution1 = (-b + D) / (2*a)
    solution2 = (-b - D) / (2*a)
    return solution1, solution2

print(root(3,6,1))
print(root(4,7,-2))
print(root(2,3,0))
```

Peters Pythagoras Projekt

Peter spilder ikke tid, for han er super effektiv! Han har fået til opgave at udregne c og e i følgende figur. Han har identificeret, at han skal bruge Pythagoras formel 2 gange, men han nægter at skulle skrive formlen op mere end én gang. Kan du hjælpe Peter?

Pythagoras formel: $C = \sqrt{A^2 + B^2}$



```
a = 6
b = 3.2
d = 2

def pythagoras(X,Y):
    Z = ...
    return Z

c = ...
e = ...

print(c)
print(e)
```

Biblioteker / pakker

For at få størst udbytte af Python, kan det stærkt anbefales at genbruge funktioner, som andre mennesker har skrevet.

Kode-biblioteker eller bare "pakker" tillader dette, ved blot at importere dem. Disse funktioner er gemt (cirka) samme sted som din Python-installation. Nogle biblioteker såsom "math" findes allerede, mens andre skal hentes fra nettet, såsom NumPy. (Anaconda installerer allerede nogle pakker fra internettet under opsætning)

Du kan sagtens køre følgende:

```
import math

pi = math.pi
print(pi)
print(math.sin(pi))
```

Men det er nok sværere at køre dette nedenstående da det vil kræve en ekstern pakke.

```
from bs4 import BeautifulSoup
soup = BeautifulSoup("<p>Some <b>simple</b> <i>HTML</i></p>")
print(soup.prettify())
```

(Vi er ikke super interesserede i selve pakken, men mere i, hvordan man installerer pakker generelt)

For at installere en pakke:

- Navigér til din anaconda-terminal
- Der vil nok stå noget i retning af: `(base) C:\Users\me>`
- `base` refererer til vores default kollektion af pakker, som vi ønsker at tilføje til
- Det er typisk at skrive på følgende form: `pip install <pakke>`. For at få fat i bs4-pakken skriver vi blot: `pip install bs4`. (For andre pakker skal man finde navnet på deres respektive hjemmeside eller lignende)
- Her vil du nok møde følgende: `Proceed ([y]/n)?`
- Hvortil du bare skriver `y`, efterfulgt af en `<enter>`-knap

2.4 Visualisering

Når vi arbejder med matematik, kan det ofte være relevant at visualisere grafer. Dette kan vi selvfølgelig også gøre gennem kode.

Der findes mange forskellige biblioteker til at gøre dette i Python, men `matplotlib`-pakken er klart den mest populære. For at installere:

```
pip install matplotlib
```

Formlen for at vise et simpelt linje-plot er:

```
X = [0,1,2,3,4]
Y = [0,1,4,9,16]
plt.plot(X,Y)
plt.show()
```

Prøv at plotte noget selv:

```
import matplotlib.pyplot as plt
X = ...
Y = ...
plt.plot(X,Y)
plt.show()
```

Der findes selvfølgelig mange flere plot-typer, men disse får vi formentlig ikke brug for i dette forløb.

"Jeg ved ikke hvordan man bruger den her pakke" ... "Jeg kan ikke huske syntaksen til <blank>"

Det er vigtigt at forstå, at ingen mennesker kan huske hvordan alt kode skal sættes op. Derfor er det vigtigere at man ved, hvordan man hurtigt finder ud af det.

Det giver god mening at bruge AI-værktøjer som ChatGPT til at hjælpe med læring, men det kan også hurtigt hæmme indlæringsprocessen. Dette er vi ikke interesserede i til dette programmerings-forløb. I stedet vil vi introducere de "old school" metoder:

- **Google søgning.** Fx: "`matplotlib plot function`". Her vil du måske blive ført direkte til dokumentationen, eller måske til en anden kilde som forklarer det godt (du ved nok godt hvordan Google fungerer)
- **Avanceret: Officiel dokumentation.** Fx: matplotlib.org/stable/api
- **Spørg om hjælp.** Det skader aldrig :)

Lines Linjer

Line har lige lært at lave seje linjer i matplotlib, men synes at default udseendet er lidt kedeligt. Prøv at finde ud af hvordan Line kan gøre hendes graf 'fabulous'!

Nogle idéer kunne være at implementere:

- Linjefarve
- Figurtitel
- Akse-titel
- Linjebeskrivelser (engelsk fagterm: **legend**)

```
import matplotlib.pyplot as plt

X = [0,1,2,3,4,5,6,7,8,9]
Y1 = [2,4,6,10,9,8,7,3,3,2]
Y2 = [10,9,8,7,6,5,6,7,8,9]

plt.plot(X,Y1)
plt.plot(X,Y2)

plt.show()
```

2.5 Matematiske funktioner og operationer

Nu hvor vi har dækket det mest basale i Python, kan vi begynde at rette vores fokus på det mere matematiske. Men først har vi behov for en gennemgang af de forskellige typiske matematiske funktioner:

Simple matematiske funktioner

Plus / Minus / Multiplikation / Division:

```
a + b
a - b
a * b
a / b
```

Potenser x^a

```
x**a
x**(1/2) # kvadratrod
```

OG IKKE:

```
x^a
```

NumPy

Importér NumPy

```
import numpy as np
```

Eksponentielfunktionen: e^x

```
np.exp(x)
```

Logaritmer: $\ln(x)$, $\log_2(x)$, $\log_{10}(x)$

```
np.log(x) # naturlig logaritme
np.log2(x) # logaritme base 2
np.log10(x) # logaritme base 10
```

Trigonometriske funktioner: $\sin(x)$, $\cos(x)$, $\tan(x)$

```
np.sin(x)
np.cos(x)
np.tan(x)
```

Samt deres inverse

```
np.arcsin(x)
np.arccos(x)
np.arctan(x)
```

Kvadratrod \sqrt{x}

```
np.sqrt(x)
```

Absolut værdi: $|x|$

```
np.abs(x)
```

NOTE: Generelt gælder det for NumPy funktioner, at hvis `x` er en vektor (liste), så evalueres funktionen på hvert element:

```
np.sqrt(4)      # output: 2
np.sqrt([4,9,144]) # output: [2,3,12]
```

Funktioner af lister

Nogle funktioner forventer input i liste-format. Det er dog altid muligt at lave et liste med længen 1, hvis nødvendigt. Maximum og minimum: $\max(x)$, $\min(x)$

```
x = [1,2,3]
np.min(x)    # output: 1
np.max(x)    # output: 3
```

Summation: $\sum x$

```
x = [1,2,3]
np.sum(x)   # output: 6
```

Definér egne funktioner

Som vi så før, kan vi også definere vores egne funktioner, fx: $f(x) = 5x^2 + 3x - 7$

```
def f(x):
    return 5*x**2 + 3*x - 7

x = 5
print(f(x))    # output: 133
```

Numerisk fortolkning

Funktionen fra før, $f(x)$ kan evalueres for uendelig mange forskellige x , men i praksis *diskretiserer* vi intervallet, som vi er interesseret i at undersøge. Man kan eksempelvis evaluere funktionen for 100 ligeligt fordelte x 'er i intervallet -5 til 5 :

```
x = np.linspace(-5,5,100) # output: numpy array med 100 ligeligt fordelte
                           # værdier mellem -5 og 5
y = f(x)
```

Plotter vi dette, ser resultatet stadig kontinuert ud:

```
import numpy as np
from matplotlib import pyplot as plt

def f(x):
    return 5*x**2 + 3*x - 7

x = np.linspace(-5,5,100)
y = f(x)

plt.plot(x,y)
plt.show()
```

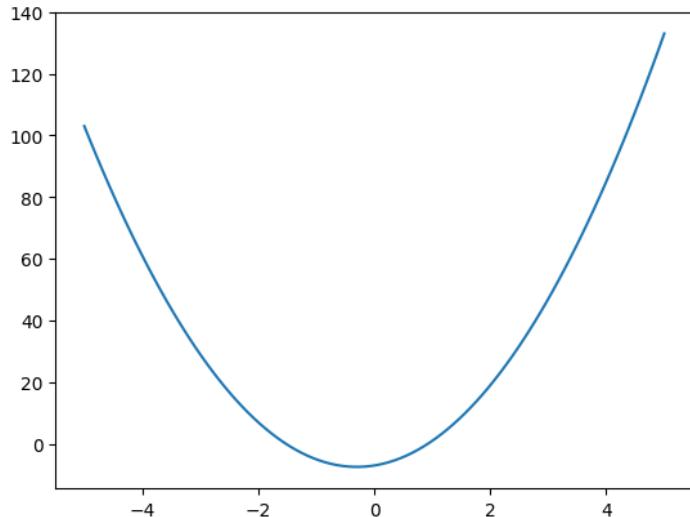
Vulkanaktivitet på Vesuv

Vulkanen Vesuv er gået i udbrud, men det synes vi er super nice, for så kan vi prøve at opstille en model af mængden af resulterende rystelser før og efter udbruddet:

I intervallet 5 "tidsenheder" før og efter udbruddet ($x \in [-5,5]$) kan vi definere en funktion af mængden af rystelser:

$$f(x) = \sin(e^x) + \sqrt{|x|} - \frac{x^2}{10}$$

Plot funktionen, og tilføj titel og aksebeskrivelser.



Figur 2.2: Andengradspolynomie evalueret på 100 punkter

2.6 Linear algebra

Vektorer

Vektorer kan opstilles som lister af værdier, og kan repræsenteres som fx. punkter i et koordinatsystem.

$$\mathbf{v} = \begin{bmatrix} v_1 \\ v_2 \\ v_3 \end{bmatrix} \quad (2.1)$$

I Python kan dette repræsenteres som en liste:

```
v = [v1, v2, v3] # hvor v1, v2 og v3 er definerede variable
```

Desværre tillader python-liste ikke direkte at man kan udføre vektor-operationer:

```
v + v  
# output: [v1,v2,v3,v1,v2,v3]
```

I stedet kan vi udnytte NumPy-pakken til at repræsentere en liste som et "array", der fungerer som en vektor:

```
v = [v1,v2,v3]  
arr = np.array(v)
```

Eksempel:

```
arr = np.array([1,2,3])  
arr + arr  
# output: [2,4,6]
```

Matricer (matrix'er)

I Python kan man lave lister, hvor hvert element er en liste; en såkaldt 2D-liste.

```
list2D = [[1,2,3],[4,5,6],[7,8,9]]
```

Med NumPy kan man lave arrays med arrays i. Dette svarer til at man "wrapper" en 2D-liste med `np.array()`:

```
matrix = np.array(list2D)
```

$$\mathbf{M} = \begin{bmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 4 & 5 & 6 \\ 7 & 8 & 9 \end{bmatrix} \quad (2.2)$$

Operationer

Antag følgende vektor og matrix:

```
v = np.array([3,5])
M = np.array([[1,2],[3,4],[5,6]])
```

$$\mathbf{v} = \begin{bmatrix} 3 \\ 5 \end{bmatrix} \quad \mathbf{M} = \begin{bmatrix} 1 & 2 \\ 3 & 4 \\ 5 & 6 \end{bmatrix} \quad (2.3)$$

1. Skalar multiplikation (elementvis)

```
v * 2
M * 2
```

$$\begin{bmatrix} 3 \\ 5 \end{bmatrix} \cdot 2 = \begin{bmatrix} 6 \\ 10 \end{bmatrix} \quad (2.4)$$

$$\begin{bmatrix} 1 & 2 \\ 3 & 4 \\ 5 & 6 \end{bmatrix} \cdot 2 = \begin{bmatrix} 2 & 4 \\ 6 & 8 \\ 10 & 12 \end{bmatrix} \quad (2.5)$$

2. Addition & subtraktion (elementvis)

```
v + 2*v - v
M + 2*M - M
```

$$\begin{bmatrix} 3 \\ 5 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 6 \\ 10 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} 3 \\ 5 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 3 \\ 5 \end{bmatrix} \quad (2.6)$$

$$\begin{bmatrix} 1 & 2 \\ 3 & 4 \\ 5 & 6 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 2 & 4 \\ 6 & 8 \\ 10 & 12 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} 1 & 2 \\ 3 & 4 \\ 5 & 6 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 2 \\ 3 & 4 \\ 5 & 6 \end{bmatrix} \quad (2.7)$$

3. Transponering

```
v.T
M.T
```

$$\begin{bmatrix} 3 \\ 5 \end{bmatrix}^T = [3 \ 5] \quad (2.8)$$

$$\begin{bmatrix} 1 & 2 \\ 3 & 4 \\ 5 & 6 \end{bmatrix}^T = \begin{bmatrix} 1 & 3 & 5 \\ 2 & 4 & 6 \end{bmatrix} \quad (2.9)$$

4. Prik-produkt

```
M @ M.T
M @ v
# eller
np.dot(M, M.T)
np.dot(M, v)
```

$$\begin{bmatrix} 1 & 2 \\ 3 & 4 \\ 5 & 6 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 3 & 5 \\ 2 & 4 & 6 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \cdot 1 + 2 \cdot 2 & 1 \cdot 3 + 2 \cdot 4 & 1 \cdot 5 + 2 \cdot 6 \\ 3 \cdot 1 + 4 \cdot 2 & 3 \cdot 3 + 4 \cdot 4 & 3 \cdot 5 + 4 \cdot 6 \\ 5 \cdot 1 + 6 \cdot 2 & 5 \cdot 3 + 6 \cdot 4 & 5 \cdot 5 + 6 \cdot 6 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 5 & 11 & 17 \\ 11 & 25 & 39 \\ 17 & 39 & 61 \end{bmatrix} \quad (2.10)$$

$$\begin{bmatrix} 1 & 2 \\ 3 & 4 \\ 5 & 6 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 3 \\ 5 \end{bmatrix} = [1 \cdot 3 + 2 \cdot 5 \ 3 \cdot 3 + 4 \cdot 5 \ 5 \cdot 3 + 6 \cdot 5] = [13 \ 29 \ 45] \quad (2.11)$$

Størrelser og indeksering

Vi har allerede lært hvordan man håndterer lister, men siden NumPy arrays ofte defineres som matricer, skal vi også kende til den relevante syntaks. Størrelsen af en matrix/array findes ved at bruge `.shape`

```
M = np.array([[1,2],[3,4],[5,6]])
M.shape() # output: (3,2)
```

Størrelsen `(3,2)` betyder at der er 3 rækker og 2 kolonner. Når man arbejder med matricer, refererer første indeks altid til rækken, og anden indeks til kolonnen. Dette gælder også når vi skal have fat i elementer fra en matrix:

```
M[1,0] # output: 3      (anden række , første kolonne)
M[0,:] # output: [1,2]  (første række , alle kolonner)
M[:,0] # output: [1,3,5] (alle rækker , første kolonne)
M[1:3,:] # output: [[3,4],[5,6]]  (anden til tredje række , alle kolonner
    )
```

Betinget filtrering (bit masks)

Vi har lige kigget på hvordan man kan få enkelte elementer, eller endda rækker af elementer i et NumPy array. I mange tilfælde er vi dog interesserede i en alternativ tilgang til at få en delmængde af arrayet, nemlig gennem en filtrering af værdierne.

Lad os sige at vi er interesserde i alle positive værdier i en liste af unikke værdier:

$$[-5,3, -7,4,1,0,2, -2] \rightarrow \{1,2,3,4\}$$

Her vil man definere en *maske* som definerer om hvert enkelt værdi overholder kriteriet at være positiv (> 0), eller ej. Masken består af binære værdier (fx 0/1) for at indikere om kriteriet er overholdt eller ej:

$$[0,1,0,1,1,0,1,0]$$

Herefter beholder vi kun værdierne, hvor masken er "1" eller "sand".

Lad os gøre det i kode nu:

```
s = np.array([-5,3,-7,4,1,0,2,-2])
mask = s > 0 # output: [F, T, F, T, T, F, T, F]
new = s[mask] # output: [3,4,1,2]
```

Vi ved fra afsnittet om logik og betingelser [2.3] at outputtet af en (u)lighed enten giver en sand eller falsk værdi. Læg også mærke til at vi nu bruger et helt array til at indeksere, i stedet for enkelte tal, ligesom før.

Vi kan også definere mere avancerede masker, ved at kombinere flere betingelser. For at bruge flere betingelser skal vi gøre brug af "og (&)", "eller (|)", og "ikke (~)". Prøv at forstå hvad følgende masker filtrerer på:

```
mask_A = (s < 4) & (s > -4) & ~(s == 0)
mask_B = (s == 3) | (s == 4)
```

Avancerede udregninger

1. Invertering

Matricer kan fortolkes som en transformation. Den inverse transformation beskrives ved den *inverterede* matrix.

```
M = np.array([[1,2],[3,4]])
np.linalg.inv(M)
```

$$M^{-1} = \begin{bmatrix} 1 & 2 \\ 3 & 4 \end{bmatrix}^{-1} = \begin{bmatrix} -2 & 1 \\ 1.5 & -0.5 \end{bmatrix} \quad (2.12)$$

2. Determinant

En matrix kan ses som en samling af vektorer. Ligesom at 2 vektorer kan forme et parallelogram, som har et vist areal, kan 3 vektorer forme et *parallelepipedum* med et vist volumen. Konceptet kan skaleres til et N-dimensionelt *parallelotop*, også med et bestemt (hyper)volumen. Determinanten beskriver hvordan en matrix transformerer rummet i form af, hvordan areal/volumen bliver påvirket.

```
M = np.array([[1,2],[3,4]])
np.linalg.det(M)
```

$$\text{Det}(M) = \text{Det}\left(\begin{bmatrix} 1 & 2 \\ 3 & 4 \end{bmatrix}\right) = -2 \quad (2.13)$$

3. Egenværdier og Egenvektorer

Når man transformerer en vektor ved at *prikke den* med en (transformations)matrix, vil vektoren deformeres, således at den følger den funktion, som matricen underlæggende repræsenterer. I nogle tilfælde vil det dog være muligt at fremvise nogle vektorer som under denne transformation ikke ændrer retning - men kun størrelse. Disse vektorer kaldes *egenvektorer*, hvor størrelsесændringen er defineret som *egenværdien*. Vi ignorerer igen selve udregningen; men formen af *egenværdi-dekompositionen* (som det kaldes) kan beskrives på følgende måde:

$$M = \begin{bmatrix} 1 & 2 \\ 3 & 4 \end{bmatrix} = V\Lambda V^{-1} \quad (2.14)$$

Hvor V indeholder egenvektorerne som kolonner, og Λ indeholder egenværdierne i diagonalen

```
M = np.array([[1,2],[3,4]])
eigenvalues, eigenvectors = np.linalg.eig(M)

eigenvalues # output: [-0.37, 5.37]
eigenvectors # output: [[[-0.82, -0.42],
#                      [ 0.57, -0.91]]]
```

Bare en NumPy opgave

Definér v og M med NumPy notation:

$$v = \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \\ 3 \end{bmatrix} M = \begin{bmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 4 & 5 & 6 \\ 7 & 8 & 9 \end{bmatrix}$$

Udregn dernæst følgende udtryk, og print dens `.shape`:

$$(vM^{-1} + 2v)M^T$$

Fillips Filtrering af Film-reviews

Fillip har et datasæt med film og deres respektive ratings (10-stjerne skala). Fillip elsker *rigtig* gode film (8-10), men finder også glæde i at se dårlige film (<4). Til gengæld gider han ikke se 1-stjernet film, da de er så ulideligt dårlige, at det ikke engang er sjovt.

Hjælp Fillip med at lave en bit-maske, som kan opfylde ovenstående krav. Test din maske på følgende liste:

```
s = np.array([1,2,3,4,5,6,7,8,9,10])
```

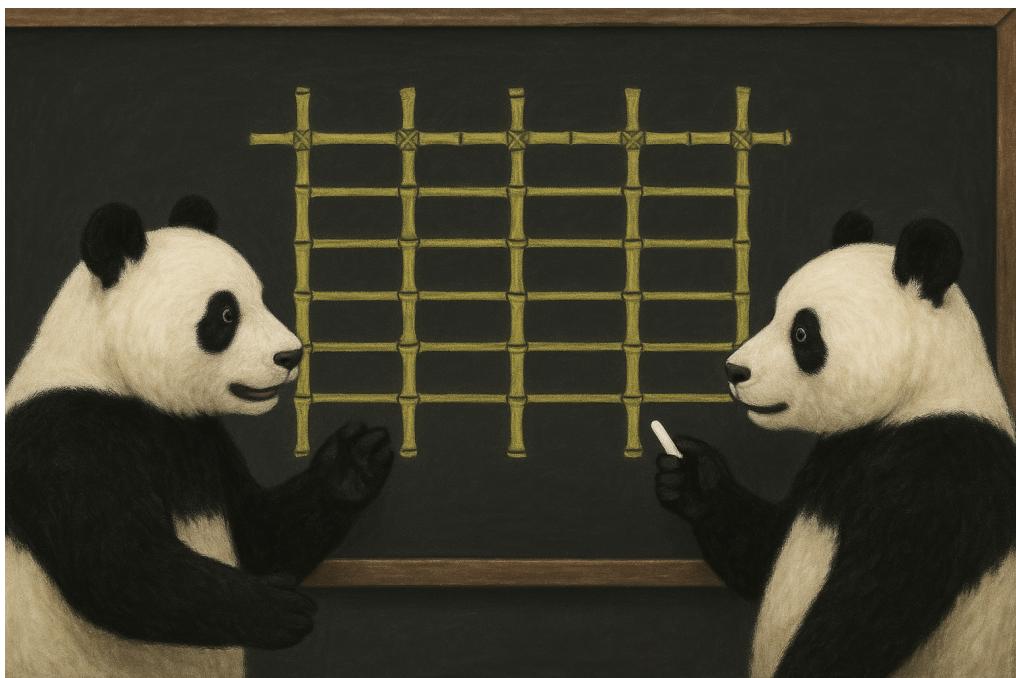
2.7 Datafiler

Tilbage i afsnittet om variable (2.3) introducerede vi idéen om at indlæse data fra en CSV-fil ind i en variabel. CSV (Comma-Separated Values [.csv]) er blandt de mest populære formater når man arbejder med større mængder *tabulært* data (tænk på en Excel-fil, eller bare en tabel).

I Python processeres CSV-filer som regel gennem `pandas`-pakken, som kan installeres med `pip install pandas`, og kan importeres i koden som følger:

```
import pandas as pd
```

"`as pd`" betyder bare at vi forkorter `pandas` reference-navnet til "`pd`" frem for "`pandas`".



Følgende tabel-data kan skrives som en csv-fil. Gem denne fil ned i dit workspace; så bruger vi den senere (link til filen findes i vores kode snippets arkiv).

	Navn	Højde	Alder	Profession	Antal søskende	Har allergener
1	Anton	1.78	20	Studerende	3	Nej
2	Beatrice	1.68	34	Advokat	1	Ja
3	Chili Klaus	N/A	60	Entertainer	N/A	N/A

Nogle gange gør man brug af Python filer (.py), men her giver det mere mening at udnytte Jupyter Notebook formatet (.ipynb), specielt fordi man let kan visualisere tabeller. Det er let at inspicere en tabel i en Jupyter Notebook celle:

```
import pandas as pd
df = pd.read_csv("file.csv")
```

Her læser man tabellen ind som et `dataframe objekt`. Dette gør det lettere at arbejde med end et simpelt NumPy array, fx pga at hver kolonne er identificeret af et kolonne-navn.

Det er selvfølgelig også muligt at gemme sine egne tabeller som en csv-fil. Hvis du har en 2D liste eller array, kan du konvertere dette til en `dataframe`, hvorfra du kan gemme den:

```
s = np.array([[160,70],
             [185,25],
             [210,16]])
df = pd.DataFrame(s, columns=["navn","højde"])
df.to_csv("table.csv")
```

Det er ikke meningen at vi skal bruge meget tid på dette, så her har vi de vigtigste pointer:

`df["Navn"]` giver os et kolonne-objekt, som er et slags NumPy-array med extra features, bestående af all værdierne i "Navn"-kolonnen. Man kan til hvert en tid konvertere disse Pandas ting til NumPy ved at bruge `.values`:

```
array_all = df.values
array_navn = df["Navn"].values
```

Hvis man holder sig mere tro til Pandas-syntaksen, kan man bruge `.iloc[RÆKKER, KOLONNER]` til at indeksere direkte på et dataframe, i stedet for først at konvertere til et NumPy array:

```
array_subset = df.iloc[ :2 , -3: ] # første 2 rækker, sidste 3 kolonner
array_subset = df.iloc[ -1 ,  2  ] # sidste række , kolonne indeks 2 (Alder)
```

Hanne fra HR

Hanne fra din virksomheds HR-afdeling vil gerne inspicere listen af medarbejdere, men Excel virker af mystiske grunde ikke. I har adgang til en csv-fil af medarbejderne, så i vælger at åbne den igennem Python.

Indlæs csv-filen som et Pandas dataframe, og inspicér den. Så bliver Hanne glad.

Jupyter Notebooks har den dejlige feature, at finde du skriver `df` i slutningen af en celle, så vises tabellen med pæn formatering, hvor `print(df)` kan være grimt. Alternativt, så brug `display(df)`

2.8 Numeriske algoritmer

Vi er nu færdige med de lav-praktiske ting om Python som programmeringssprog, og vi vil nu prøve at implementere noget teori. Dette afsnit handler om *numeriske algoritmer* - altså hvordan vi uden analytiske (eller "symbolske") udtryk, stadig kan approksimere os frem til en løsning.

Udfordringen med den klassiske *analytiske* tilgang til matematik er, at vi ikke altid har "pæne" udtryk (ofte kaldet "Closed-form expressions"). Eksempelvis har alle integraler en løsning, men det er ikke sikkert at den kan findes systematisk. Ligeledes med differentialligninger. Heldigvis kan vi i mange tilfælde nøjes med et tal, fremfor et helt funktionsudtryk. Så længe vi kan få et tal, som svarer til et evalueret funktionsudtryk, behøver vi ikke kende den "underliggende" funktion præcist.

Afsnittet her vil fokusere på fordelene ved numeriske algoritmer, men det er også vigtigt at forstå hvad de ikke kan, således at vi kan overveje, hvornår vi bruger hvad. 1) En computer kan kun repræsentere tal til en hvis præcision, hvilket betyder at fejl kan akkumulere sig over tid. 2) En computer skal stadig kunne løse problemet i en fornuftig tidshorisont, og ikke bruge 100 år på at "brute-force" en løsning. Numeriske algoritmer kan ikke blindt løse alle éns problemer. Viden om både matematik og computere er fordelagtigt at besidde, for at man kan få mest udbytte af forskellige numeriske algoritmer.

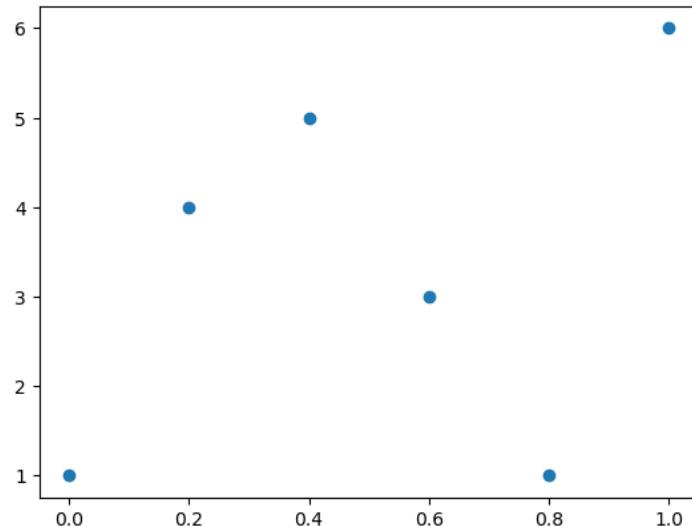
Vi introducerer nogle forskellige typer problemer, men det vigtigste er bare at forstå idéen med numeriske algoritmer generelt, da det vil hjælpe med forståelsen om numerisk løsning til differentialligninger i næste afsnit.

Interpolering

Når vi laver en matematisk model ud fra observeret data, så er målet at finde en underliggende beskrivelse af alt data som vi kan forestille os. Har vi 2 datapunkter, vil vi antage værdierne indimellem. Når man antager værdier *imellem* punkter, kaldes det at *interpolere*. Antager man værdier *uden for* det kendte data, kaldes det at *ekstrapolere*.

Antag følgende data:

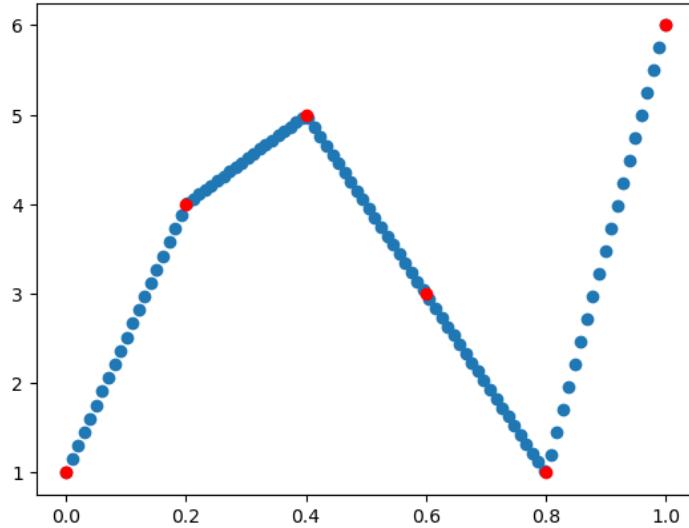
```
x = np.linspace(0,1,6)
y = np.array([1,4,5,3,1,6])
```



Hvis man interpolerer *lineært*, så antager man at alle værdier mellem 2 nabopunkter kan forbindes med en lige linje. Skulle man gætte på en værdi til $f(0.1)$, ville et naturligt gæt være $1 + (4 - 1)/2 = 2.5$

NumPy har en funktion `np.interp()` som genererer punkter ved at bruge lineær interpolering.

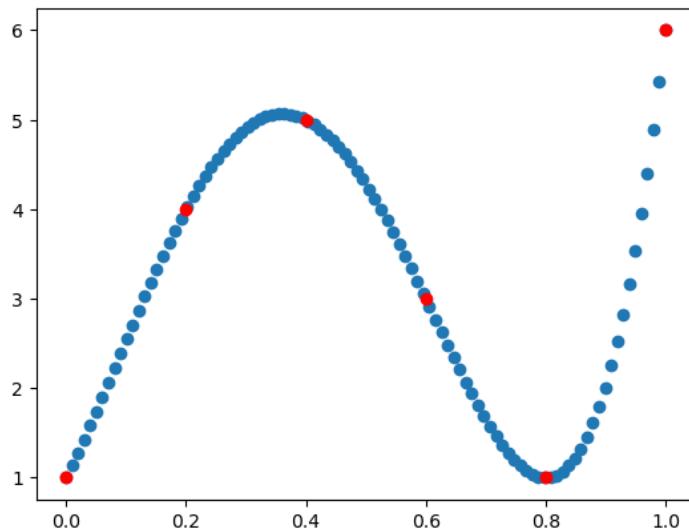
```
evalx = np.linspace(0,1,100)
linear = np.interp(evalx, x, y)
plt.scatter(evalx, linear)
plt.scatter(x, y, c='red')
```



Kan du gennemskue hvorfor 'spacingen' at punkter ser ud som den gør?

Hvis man ikke er tilfreds med disse resultater, kan vi prøve at gøre os nogle antagelser om data, fx at funktionen er glat. Med *polynomisk* interpolering kan få pånere resultater:

```
evalx = np.linspace(0,1,100)
coeffs = np.polyfit(x, y, deg=5)    # koefficienter til polynomie
poly = np.polyval(coeffs, evalx)
plt.scatter(evalx, poly)
```



Et 5. grads-polynomie ser ud til at være et rigtig godt fit. *Er dette for godt til at være sandt?*

Disclaimer: Når vi laver interpoleringen, så antager vi at alle de originale punkter beholder samme værdi. Men `polyfit` funktionen laver faktisk kun rigtig interpolering hvis graden er mindst ligeså stor som antal datapunkter (minus 1). I tilfælde af at en lavere grad bruges, kan vi ikke garantere at polynomiet går igennem alle punkter. Så fremover når vi laver et polynomisk "fit" med for få grader, så svarer det mere til en polynomisk regressions-model, frem for interpolering.

I flere praktiske tilfælde kan et lavt-antals-polynomie dog være en god approksimation af den underliggende funktion hvorfra data kommer af. Men hvis vi havde observeret 15 punkter, tror du så at et 14.-grads-polynomie vil repræsentere data rigtigt, selvom polynomiet går gennem alle vores observerede punkter? Det var et lille sidespor.

Differentiering

Den afledte af en funktion $f(x)$ svarer blot til hældningen i hvert x . De analytiske udtryk for afledte funktioner kommer af at man antager hældningen mellem 2 nabo-punkter x_1 og x_2 , og mindske afstanden mellem disse uendelig meget. I stedet for at mindske denne afstand *uendelig* meget, så nøjes vi med at mindske den *ret* meget, for at approksimere samme resultat. Hvis vi er interesserede i den afledte af "hele funktionen" så at sige, så er vi nødsaget til at evaluere en masse punkter i input-intervallet enkeltvis.

Ved at bruge "forward difference" metoden, anses hældningen i et punkt x_1 som hældningen mellem x_1 og nabo-punkter x_2 , hvor h er afstanden mellem x_2 og x_1 :

$$f'(x) \approx \frac{f(x+h) - f(x)}{h}$$

(Generel formel for hældning):

$$\alpha = \frac{y_2 - y_1}{x_2 - x_1}$$

```
# Definer interval
N = 10
x = np.linspace(0,10,N)
h = (x.max() - x.min()) / N

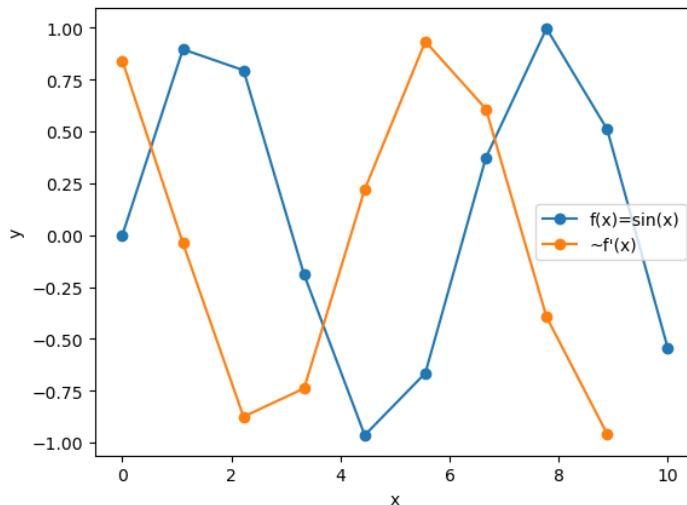
# Definer funktion: f(x)=sin(x)
def f(x):
    return np.sin(x)

# Definer approksimeret afledte
def f_d(x):
    return (f(x+h) - f(x)) / h

# Udregn afledte over hele intervallet
diffs = []
for i in range(N-1):
    diffs.append(f_d(x[i]))
diffs.append(np.nan)

# Plot
plt.plot(x, f(x) , marker='o', label='f(x)=sin(x)')
plt.plot(x, diffs, marker='o', label="~f'(x)")
plt.legend()
```

Hvorfor har vi ikke udregnet nogen værdi for $x = 10$?



Central Difference

Vi har nu brugt "forward difference", hvor man udnytter det næste punkt til at udregne hældningen. Det omvendte kan også gøre sig gældende - "backward difference". Det er dog mest korrekt at udnytte begge retninger, så derfor bruger vi "central difference":

$$f'(x) \approx \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h}$$

Implementér denne!

Indtil videre har vi haft mulighed for at evaluere $f(x)$ for et vilkårligt x , da vi kendte funktionsudtrykket. I mange tilfælde har vi dog kun et begrænset antal *stikprøver* (samples), hvor vi kun kender den rigtige værdi for disse punkter. Så med mindre at vi opstiller en model først, så kan vi bruge *interpolering*, således at vi kan evaluere den afledte i hele det kendte interval! Lad os kigge på et nyt eksempel:

```
x = [-1.5, -0.77, -0.5, 0.15, 0.66, 0.82, 1.24, 1.5, 2.08, 2.6, 2.7]
y = [2.86, 1.34, 1.23, 1.05, 1.5, 1.19, 2.64, 3.48, 5.1, 7.18, 9.57]
```

Lineær Interpolation vs. Polynomisk Fit

Givet den nye data, prøv at plotte punkterne, hvor du har brugt både lineær og polynomisk interpolering. Hvor mange grader har du brugt til dit polynomie, og hvorfor?

For convenience, så kald gerne resultatet af den polynomiske interpolering for poly

Nu kan vi endelig udregne den afledte af vores polymomiske model af data. Følgende kode ligner meget det fra før, men i stedet for at evaluere $f(x)$ og $f(x+h)$ direkte, så gør vi det implicit, ved at evaluere på $f(x_i)$ og $f(x_{i+1})$

```
def f(i):
    return poly[i]

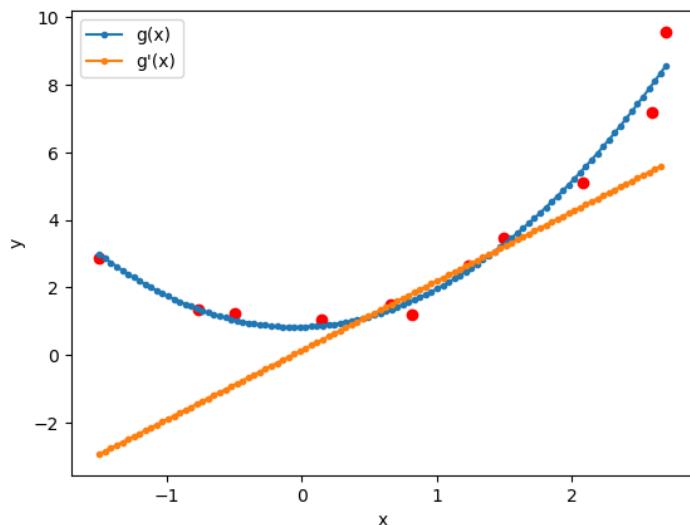
def f_d(i1, i2):
    x1 = evalx[i1]
    x2 = evalx[i2]
    h = x2 - x1
    return (f(i2) - f(i1)) / h
```

```

diffs = []
N = len(evalx)
for i in range(N-1):
    diffs.append(f_d(i,i+1))
diffs.append(np.nan)

```

Med et 2.-grads polynomisk fit, ser resultatet ud således:



Integration

Ligesom med differentiering, så udledes de analytiske udtryk for integration af funktioner ved at man antager at afstanden mellem to "x'er" er uendelig lille. Og igen, så prøver man blot at mindske afstanden *ret* meget, når det er numerisk. En simpel numerisk approximation af integralet, er *Trapez-metoden*, som antager lineær interpolering mellem vores kendte punkter:

$$\int_a^b f(x)dx \approx \frac{1}{2} \sum_{i=0}^{n-1} (x_{i+1} - x_i)(f(x_i) + f(x_{i+1}))$$

Givet listerne x og y , er det meget simpelt at udregne. NumPy har en funktion `np.trapz(y,x)` som gør nøjagtigt dette:

```

def trapez(x, y):
    N = len(x)
    area = 0
    for i in range(N-1):
        h = x[i+1] - x[i]
        area += (y[i] + y[i+1]) * h
    return area / 2

print(trapez(x, y))
print(np.trapz(y, x))

```

Trapez metode på forskellige kurver

De følgende kurvet er for hhv. lineær og polynomisk interpolering af data. Der er tydeligvis forskel på kurverne, selvom de begge er baserede på samme data. Hvor stor er forskellen på arealet under de to kurver? ("Use the Trapez method, Luke")

Trapez-metoden er meget simpel, men der findes andre simple metoder, som giver bedre resultater. Heraf er *Simpsons regel*:

Simpsons regel (Composite Simpson's rule)

Integralet approksimeres som en vægtet sum af alle funktionsværdier, hvor alle *ulige* funktionsværdier ganges med 4, og alle *lige* funktionsværdier ganges med 2. Dog skal første og sidste funktionsværdi ganges med 1 i stedet for.

$$\int_a^b f(x)dx \approx \frac{h}{3} [f_0 + 4f_1 + 2f_2 + 4f_3 + 2f_4 + \dots + 2f_{n-2} + 4f_{n-1} + f_n]$$

Denne regel er dog begrænset til funktioner, hvor værdierne (x) er ligeligt fordelt i intervallet. Derfor er vi igen nødsaget til at bruge interpolering for at sikre os, at x er ligeligt fordelt

Færdiggør følgende funktion

```
def simpson(x, y):
    N = len(x)
    area = 0
    h = ...
    for i in range(0, N-1, 2): # kun *lige* indekser
        ...
        for i in range(1, N, 2): # kun *ulige* indekser
            ...
            ...
    return area

print(simpson(evalx, ...))
```

Find rødder numerisk

Det er super vigtigt at kunne finde rødder af funktioner, specielt da dette vil tillade os at finde rødder til afledte funktioner, og dermed finde minimum og maksimum punkter. Dette er grundstenen for parameteroptimering - at finde det *globale* optima. For simple problemer kan en computer nøjes med at evaluere en masse punkter i et ønsket interval, med en hvis præcision, og dermed udvælge værdien tættest på 0 (eller max/min). Det bliver dog et problem i følgende tilfælde:

1. Hvis vores data har mange dimensioner. Antallet af mulige punkter stiger nemlig eksponentielt
2. Hvis vores funktion er meget kompliceret at udregne
3. Eller begge!

Vi vil dog nøjes med at kigge på simple eksempler for at opbygge forståelsen.

Optimering i 1 dimension

Det klassiske eksempel på en algoritme til at finde rødder, er *Newton-Raphson's metode*:

$$x_{n+1} = x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)}$$

Givet et punkt x_n , samt funktion $f(x_n)$, kan man tilnærme sig roden. I punktet x_n kan man lave en tangent på funktionen, som vil skære x-aksen et sted. Vores nye kandidat x_{n+1} er dér hvor tangenten skærer x-aksen.

Dette kræver selvfølgelig at man kender den afledte af funktionen. Vi kan approksimere denne, med lad os bare regne den manuelt for at gøre ting lidt simplere.

```

# f(x) = x^2 - 1
def f(x):
    return x**2 - 1
# f'(x) = 2*x
def f_d(x):
    return 2*x

# Definér f(x) i intervallet [0,3]
x = np.linspace(-2, 3, 100)
y = f(x)

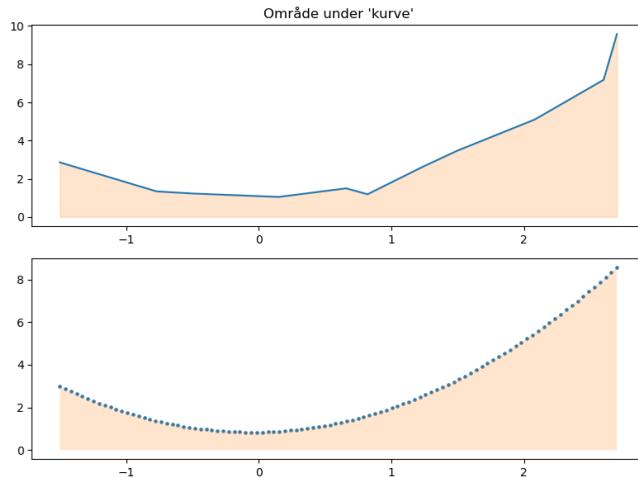
# Start-gæt
xg = 2.5

# Newton-Raphson trin:
xgs = [xg]
T = 5
for _ in range(T):
    xg -= f(xg)/f_d(xg)
    xgs.append(xg)

# Plot
plt.plot(x, y)
plt.scatter(xgs, f(np.array(xgs)), c='red', alpha=0.4)
plt.axhline(0, color='black', lw=0.5)
plt.xlabel('x')
plt.ylabel('f(x)')
plt.show()

```

Med et start-gæt på $x = 2.5$ viser tegningen hvordan de følgende bud på x tilnærmer sig en rod:



NR for tredjegradspolynomium

Implementér Newton-Raphson for funktionen: $f(x) = 2x^3 - 3x^2 - 3x + 2$

Find alle løsninger (du kan køre algoritmen flere gange, med forskellige start-gæt)

Hvad sker der hvis dit start-gæt er -0.4 ? Prøv at forklar dette.

De interessante applikationer af at finde rødder er som tidligere nævnt, at man kan finde rødderne til en afledt funktion, for at finde et lokalt (men helst globalt) optima.

NR til optimering

Implementér Newton-Raphson for den afledte af funktionen: $f(x) = 2x^3 - 3x^2 - 3x + 2$, for at finde lokale maksima og minima.

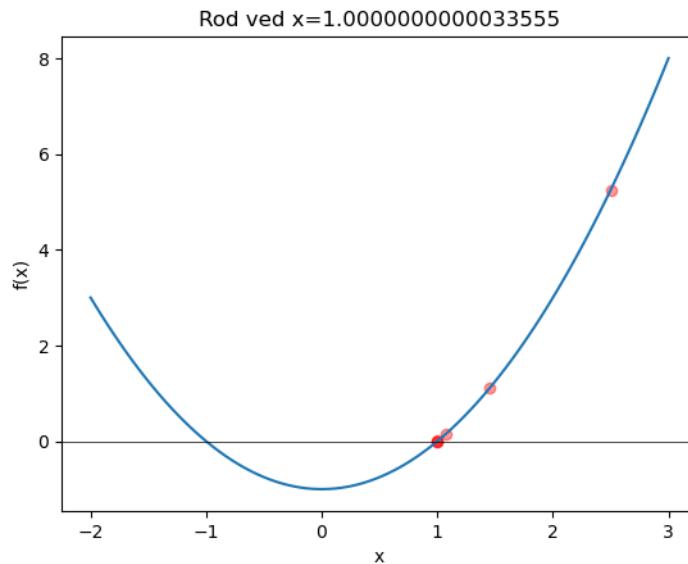
Det kan hjælpe at definere $f''(x)$ / `def f_dd(x)`

Optimering i flere dimensioner

Det er næppe nødvendigt at bruge specielle numeriske algoritmer til at finde roden af en 1-dimensionel funktion. Til gengæld kan det være et sværere problem, hvis vi arbejder med flere dimensioner. Dette er ikke "pensum" for programmerings-forløbet, så vi nøjes med at give en teaser:

Først og fremmest, så virker Newton-Raphson teknisk set i mange dimensioner - det kræver dog at man udregner *Jacobi-matricen*, som svarer til en samling af alle partielt afledte funktioner. I nogle varianter bruges *Hessian'en*, som er den *andenordens* partielt afledte version af Jacobien. Da disse er meget upraktisk at udregne, så bruger man som regel andre metoder.

Vi har lært at man sagtens kan *approksimere* den afledte af en funktion (selv hvis man ikke kender det "ægte" funktionsudtryk). I de udbredte *Quasi-Newton* metoder, approksimeres denne "Hessian" numerisk. Mens "Quasi-Newton" er en klasse af metoder, så er *BFGS* en bestemt algoritme som ofte bruges til optimering. Her er et eksempel i 2D:



Den vigtige del af koden er:

```
from scipy.optimize import minimize
def f(x):
    return (1 - x[0])**2 + 100 * (x[1] - x[0]**2)**2
x0 = np.array([-1, -1])
res = minimize(f, x0, method='BFGS')
```

hvor resten findes i kode-arkivet

2.9 Differentialligninger

Vi er nu nået til det endelige afsnit i intro programmerings-forløbet, hvor vi kommer til at bruge elementer fra alle afsnittene. Hvis du har styr på dette afsnit, så er du godt klædt på til at udføre programmeringsdelen af de kommende projekter!

Der findes mange varianter af differentialligninger, men vi vil umiddelbart fokusere på *første-ordens ordinære differentialligninger* (first-order ODEs). "Ordinær" fordi vi kun løser mht. 1 ukendt variabel, og "første-ordens" fordi ligningen kun indeholder funktioner som er første-ordens afledet. Vi vil også tage et kig på hvad man gøre når man har flere differentialligninger, hvor de afledte er afhængige af hinanden - også kaldet *koblede differentialligninger*, eller et *differentialligning-system*.

Målet ved at løse differentialligninger er **ikke** at komme frem til et funktionsudtryk, men i stedet at approksimere nok funktionsværdier i et ønsket interval, således at det er ligeså godt som hvis vi brugte den "originale" funktion.

ODE Algoritmer

I dette afsnit bruger opskriver vi en første-ordens differentialligning på følgende form:

$$y'(t) = \frac{dy}{dt} = f(t, y)$$

Vi vil starte ud med at introducere *Taylor approksimationer* (eller *Taylor serier*). En sådan approksimation lader os udregne den næste funktionsværdi $y(t + h)$, kun givet $y(0)$ og $y'(0)$.

Følgende udtryk er en *tredje-ordens* Taylor approksimation:

$$y(t + h) \approx y(t) + hy'(t) + \frac{h^2}{2!}y''(t) + \frac{h^3}{3!}y'''(t)$$

Approksimationen kan dog forbedres ved at inkludere flere led, hvoraf højere ordener af den afledte er indblandet. Problemet er, at i praksis skal vi så udregne mange-ordeners afledte, hvilket er bøvlet. Desuden, selv hvis vi blot approksimerer den n'te-ordens afdelte numerisk, kan vi risikere akkumulerende usikkerheder i præcision.

Det simpleste tilfælde af Taylor approksimationen er en første-ordens approksimation, bedre kendt som *Euler's metode*.

$$y(t + h) \approx y(t) + hy'(t)$$

Nu hvor vi arbejder med første-ordens differentialligninger har vi altid direkte adgang til en første-ordens afledt funktion.

Lad os bruge følgende differentialligning:

$$y'(t) = y(t) - t^2 + 1$$

hvor vi ser en implementering i Python:

```
# y'(t) = y(t) - t^2 + 1
def f(t, y):
    return y - t**2 + 1

# Euler
def euler(f, t, y, h):
    y_next = y + h*f(t,y)
    return y_next

# Startbetingelse
y0 = 0.5

# Diskretisering
t0, tT = -1, 1
```

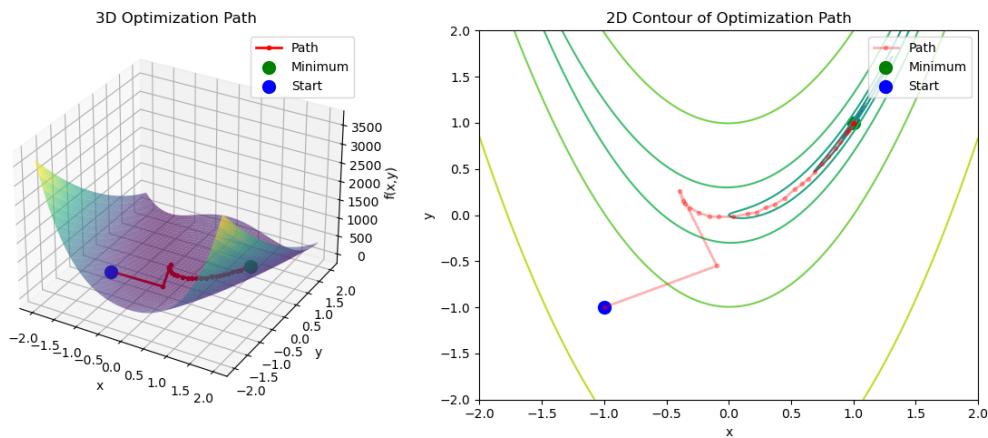
```

N = 10
h = (tT - t0) / N
ts = np.linspace(t0, tT, N+1)

# Kør algoritme
y = y0
ys = [y0]
for i in range(N):
    y = euler(f, ts[i], y, h)
    ys.append(y)

# Plot
plt.plot(ts, ys, 'o-', label='Taylor')
plt.grid(True)
plt.show()

```



Eulers metode og akkumulerende usikkerheder

Implementér Eulers metode for følgende funktion: $y'(t) = y(t) \cdot (0.1 + \sin(t))$ i intervallet, $t \in [1,100]$

Prøv at eksperimentér med mængden af diskretiserings-trin (N). Hvad kan du konkludere?

Anden-ordens Taylor approksimation

Implementér Taylor-approksimation af *anden* orden, af differentialligningen fra før: $y'(t) = y(t) - t^2 + 1$ i intervallet, $t \in [-1,1]$

HINT: Definér endnu en funktion `def df(t,y)` som returnerer den anden-ordens afledte, $y''(t)$, og brug denne til at udregne Taylor-approksimationen

Sammenligne resultatet med Euler approksimationen fra eksemplet tidligere (med samme diskretiserings-trin og start-betingelser). Hvor mange diskretiseringstrin (N_{euler}) kræver det for Eulers metode at opnå cirka samme nøjagtighed som Taylor med $N_{taylor} = 10$

SymPy

Hvis du gerne kunne være interesseret i at arbejde mere med analytisk matematik i Python, så findes pakken `SymPy`. Vi tager et hurtigt kig hvordan den kunne hjælpe os med at udregne symbolske udtryk af afledte funktioner:

```
from sympy import symbols, Function, diff, pprint, Eq
```

```
# Deklerér symboler
t = symbols('t')
y = Function('y')(t)

# Definér højre-side af ODE
f = y - t**2 + 1

# Udregn første-afledt
y1 = diff(f, t) # dy/dt
pprint(y1)
```

Med mere formattering, samt flere eksempler:

```
# Første afledte
y1 = f
pprint(Eq(diff(y,t), y1))

# Anden afledte
y2 = diff(f, t)
pprint(Eq(diff(y,t,2), y2))

# Tredje afledte
y3 = diff(y2, t)
pprint(Eq(diff(y,t,3), y3))
```

Runge-Kutta

Taylor approksimation har et stærkt teoretisk fundament som gør det til et solidt valg af metode til at løse differentialligninger. På trods af dette, så bliver denne ofte overtrumfet af de såkaldte *Runge-Kutta* metoder. Specielt "Runge-Kutta 4" er nok den mest udbredte grundet dens gode balance mellem præcision og effektivitet. Det bedste er, man kan nøjes med en første-ordens afledt, som vi jo allerede kender:

$$y(t+h) \approx y(t) + \frac{6}{h}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4)$$

hvor

$$k_1 = f(t, y) \quad (2.15)$$

$$k_2 = f\left(t + \frac{h}{2}, y + \frac{h}{2}k_1\right) \quad (2.16)$$

$$k_3 = f\left(t + \frac{h}{2}, y + \frac{h}{2}k_2\right) \quad (2.17)$$

$$k_4 = f(t + h, y + hk_3) \quad (2.18)$$

Runge-Kutta 4

Implementér RK4 og sammenlign med de andre metoder:

```
def rk4_step(f, t, y, h):
    k1 = f(t, y)
    k2 = ...
    k3 = ...
    k4 = ...
    y_next = y + ...
    return y_next
```

Indtil videre har vi implementeret lidt forskellige algoritmer til simple differentialligninger, men i praksis bliver differentialligningerne mere komplekse, og de bedste metoder bliver sværere at implementere. Derfor findes der *selvfølgelig* pakker til at løse differentialligninger af forskellige slags. Gennem **SciPy**-pakken kan vi fx løse vores ODE. Funktionen **solve_ivp**, bruges til differentialligninger med en *startbetingelse* (*initial*

value problems), i modsætning til fx. *boundary value problems*, hvor vi har betingelser for både start- og slutværdi.

Følgende kode-snippet løser vores differentialligning for 3 forskellige startbetingelser, $y_0 = [1,2,3]$, og bruger en algoritme fra Runge-Kutta familien:

```
# Startbetingelser
y0s = [1,2,3]

# Solver-funktion
sol = solve_ivp(
    f,
    t_span = (ts[0],ts[-1]),
    y0 = y0s,
    method = 'RK45', # Closest built-in method
    t_eval = ts,      # Evaluate at fixed points
    max_step= h       # Forces fixed-step-like behavior
)

# Kør ODE solver og plot
N = len(y0s)
for n in range(N):
    plt.plot(sol.t, sol.y[n], 'o-')
plt.xlabel('t')
plt.ylabel('y')
plt.grid(True)
plt.show()
```

Det hjælper på forståelsen at implementere algoritmer fra bunden, men forvent dog at indbyggede "solvers" er standarden, både til projekterne, men også i den virkelige verden.

Koblede differentialligninger

Vi har indtil videre kigget på løsning af enkelte differentialligninger, men det er også meget muligt, at du vil opleve *systemer* af differentialligninger - altså hvor flere differentialligninger skal løses, og hvor der er afhængighed mellem dem. Disse kan også kaldes *koblede* differentialligninger. Det er heldigvis super simpelt at udvide enkelte differentialligninger til et system.

Lad os bruge følgende system:

$$\begin{cases} y'_1 = y_2 \\ y'_2 = -y_1 + \cos(t) \end{cases}$$

Den eneste ændring vi behøver at lave, er at definere en ny funktion, `def f(t,y)`, hvor `y` nu er en liste af parametre, som vi naturligvis skal have startbetingelser for:

```
def f(t, y):
    dy1 = y[1]
    dy2 = -y[0] + np.cos(t)
    return np.array([dy1, dy2])

y0 = np.array([0.0, 1.0]) # y1 = 0, y2 = 1
t0, tT = 0, 10
```

Da `ys` nu er en liste af 2-værdi NumPy arrays, kan man plotte det ved at konvertere det hele til et 2D NumPy array, og plotte hver kolonne (parameter) separat:

```
ys = np.array(ys)

plt.plot(ts, ys[:, 0])
plt.plot(ts, ys[:, 1])
```

RK4 til koblede differentialligninger

Implementér RK4 løsning til differentialligningsystemet (*uden* SciPy)

Du er også velkommen til at prøve at gøre dette med SciPy bagefter

Lad kurverne leve for evigt!

Gem de genererede kurver i en csv-fil med Pandas. Den skal bestå af 2 kolonner, én for hver parameter. Hver række svarer til en tid, t .

Kapitel 3

Differentialligninger og numeriske metoder

I dette kapitel går vi endelig i gang med det centrale emne, nemlig differentialligninger. Vi starter med en teoretisk gennemgang af den basale teori. Vi skal blive komfortable med nogle klasser af differentialligninger, man kan løse *analytisk*, dvs. eksakt med håndkraft. Derefter tager vi hul på anden halvdel af kapitlet, nemlig numeriske løsninger af differentialligninger, altså hvor man får computeren til at approksimere løsninger. Her skal vi for alvor bruge den programmering, vi har lært tidligere.

3.1 Introduktion - hvad er differentialligninger?

I sædvanlige ligninger er vi vant til, at løsninger er tal. Har vi f.eks. ligningen

$$x = 3x + 4$$

kan vi løse den ved først at trække $3x$ fra på begge sider og få $-2x = 4$. Dividerer vi med -2 på begge sider, har vi $x = -2$. Ligeledes kan ligningen

$$x^2 + 4x - 3 = 0$$

løses ved hjælp af formlen til løsning af andengradsligninger. Alt dette burde være velkendt. En differentialligning er anderledes. Her er løsningerne ikke tal, men funktioner. En differentialligning er en ligning i en funktion y , som afhænger af en variabel x , og hvor y og dens afledte indgår. Formålet med differentialligninger er at bestemme en funktion y , som løser ligningen for alle x . Et simpelt eksempel kunne være

$$y'(x) = 2x.$$

Her giver integralregning os løsningen. Integrerer vi begge sider med hensyn til x , får vi

$$\int y'(x)dx = \int 2xdx,$$

og dermed fås

$$y(x) = x^2 + c$$

for en konstant c . c kan være hvad som helst, og dermed findes uendelig mange løsninger til differentialligningen. Løsningen ovenover kaldes den *fuldstændige* løsning. Hvis vi indfører kravet $y(0) = 0$, får vi $c = 0$, så med denne ekstra betingelse har vi kun én løsning. Løsningen $y(x) = x^2$ kaldes en *partikulær* løsning. En betingelse $y(a) = b$ kaldes en *startbetningelse* eller en *randbetningelse* alt efter konteksten for problemet.

Er man i tvivl om, hvorvidt ens fundne løsning til en differentialligning faktisk er en løsning, kan man altid indsætte løsningen i differentialligningen og tjekke, at ligningen

KAPITEL 3. DIFFERENTIALLIGNINGER OG NUMERISKE METODER

stemmer. Vi kalder dette at *gøre prøve*. Lad os f.eks. indsætte $y(x) = x^2 + 3$ i ligningen ovenover. Da $y'(x) = 2x$, ser vi, at y er en løsning. Havde vi indsat $y(x) = x^3$ i stedet, havde vi fået $y'(x) = 3x^2 \neq 2x$, så dette y er ikke en løsning. Lad os tage et eksempel til på en differentialligning:

$$y'(x) = 3y(x), \quad y(0) = 2.$$

Vi leder her efter en funktion, som er lig sin afledte ganget med en konstant. Vi ved, at $y(x) = e^x$ opfylder $y'(x) = y(x)$ for alle valg af c . Kædereglen giver, at $y(x) = e^{3x}$ opfylder $y'(x) = 3e^{3x} = 3y(x)$. Så $y(x) = e^{3x}$ opfylder selve differentialligningen, men opfylder den randbetingelsen? Vi har $y(0) = e^{3 \cdot 0} = 1$. Så vi skal nok modificere funktionen en smule. Lad $y(x) = ce^{3x}$ for en konstant c . Da er

$$y'(x) = 3ce^{3x} = 3y(x)$$

og $y(0) = ce^{3 \cdot 0} = c$. Så vælg $c = 2$. Vi ser da, at $y(x) = 2e^{3x}$ er løsningen til differentialligningen, som også opfylder randbetingelsen. Differentialligningen ovenover er et specialtilfælde af en mere generel form for differentialligninger, nemlig førsteordens differentialligninger på formen

$$y'(x) + a(x)y(x) = b(x).$$

Vi skal se, hvordan sådan nogle differentialligninger løses om ikke så længe. Denne slags ligninger dukker op i mange sammenhænge. For at gøre det lettere for jer at slå resultater op til brug i opgaverne, har vi samlet en tabel over funktioner med deres afledte og stamfunktioner herunder.

$\int f(x)dx$	$f(x)$	$f'(x)$	Note
$ax + c$	a	0	
$\frac{x^{n+1}}{n+1} + c$	x^n	nx^{n-1}	$n \neq -1, 0$
$x \ln(x) - x + c$	$\ln(x)$	$1/x$	
$\ln(x) + c$	$1/x$	$-1/x^2$	
$e^x + c$	e^x	e^x	
$\sin(x) + c$	$\cos(x)$	$-\sin(x)$	
$-\cos(x) + c$	$\sin(x)$	$\cos(x)$	

Derudover genkalder vi os følgende regler for stamfunktioner.

Sætning 3.1.1 (Substitution). *For differentiable funktioner f og g gælder*

$$\int f(g(x))g'(x)dx = \int f(y)dy.$$

Sætning 3.1.2 (Partiel integration). *Lad f og g være kontinuerte med stamfunktioner F og G . Da gælder*

$$\int F(x)g(x)dx = F(x)G(x) - \int f(x)G(x)dx.$$

Opgaver

- **Opgave 3.1.1:**

Løs følgende differentialligninger:

- 1) $y'(x) = 3x^2$, $y(0) = 2$.
- 2) $5y'(x) = x^2 + x$, $y(0) = 1$.
- 3) $y'(x) = -1/x^2$, $y(1) = -1$.

3.1. INTRODUKTION - HVAD ER DIFFERENTIALLIGNINGER?

•• **Opgave 3.1.2:**

Løs følgende differentialligninger:

1) $y'(x) = 10y(x).$

2) $y'(x) = x^n.$

3.2 Separation af variable

I denne sektion skal vi studere en teknik, som kan benyttes til at løse særlige former for differentialligninger. Vi lægger ud med at bevise, at teknikken virker, og derefter giver vi en huskeregel, som gør den nem at bruge i praksis. Antag, at vi har en differentialligning på formen

$$f(y(x))y'(x) = g(x)$$

for nogle kontinuerte funktioner f og g . Da kan vi integrere begge sider med hensyn til hver sin variabel som følger:

$$\int f(y(x))y'(x)dx = \int g(x)dx.$$

Benytter vi substitution for stamfunktioner fås

$$\int f(y)dy = \int g(x)dx.$$

Det smarte er, at $y'(x)$ forsvinder, når vi gør dette. Teknikken viser sig at være smart i mange sammenhænge, men den kræver nogle eksempler at forstå. Inden vi kaster os ud i et eksempel, genkalder vi, at man for $y'(x)$ også kan skrive

$$y'(x) = \frac{dy}{dx}.$$

Eksempel 3.2.1. Lad os betragte differentialligningen

$$y(x)^2y'(x) = 2x.$$

Vi ser, at den har den ønskede form (her er $f(x) = x^2$ og $g(x) = 2x$). Vi omskriver ligningen

$$y(x)^2 \frac{dy}{dx} = 2x.$$

og leger, at dy/dx er en brøk, så vi kan gange med dx på begge sider og få

$$y(x)^2 dy = 2x dx,$$

hvorefter vi indsætter integraltegn:

$$\int y(x)^2 dy = \int 2x dx.$$

Vi ved, at en stamfunktion til y^2 er $y^3/3$, og at højresiden er $x^2 + c$ (det er nok at indsætte en integrationskonstant på én side af lighedstegnet), så vi får

$$\frac{y(x)^3}{3} = x^2 + c$$

dvs.

$$y(x)^3 = 3x^2 + 3c.$$

Lad $C = 3c$. Tager vi kubikroden på begge sider, får vi

$$y(x) = \sqrt[3]{3x^2 + C}.$$

Den her løsning havde vi nok ikke umiddelbart gættet os frem til! ○

Det skal her nævnes, at vores trick med at behandle dy/dx som en brøk ikke er matematisk stringent, men blot en huskeregel. Det er udledningen i starten af sektionen, som garanterer, at metoden er korrekt.

Eksempel 3.2.2. Lad os tage endnu et eksempel, inden vi springer til opgaverne. Betragt differentialligningen

$$\frac{1}{y(x)} = \frac{x - 7x^2}{y'(x)}.$$

Vi starter med at omskrive ligningen ved at gange med $y'(x)$ på begge sider

$$\frac{y'(x)}{y(x)} = x - 7x^2,$$

og vi ser, at differentialligningen har den rigtige form til, at vi kan benytte separation af variable. Vi har

$$\frac{1}{y(x)} \frac{dy}{dx} = x - 7x^2,$$

og dermed

$$\frac{1}{y(x)} dy = (x - 7x^2) dx,$$

som vi kan integrere på begge sider:

$$\int \frac{1}{y(x)} dy = \int x - 7x^2 dx.$$

Højresiden integrerer til:

$$\frac{x^2}{2} - \frac{7}{3}x^3 + c,$$

og venstresiden integrerer til $\ln(y(x))$. Fortsætter vi beregningen fra før, får vi

$$\ln(y(x)) = \frac{x^2}{2} - \frac{7}{3}x^3 + c.$$

For at isolerere $y(x)$ skal vi blot tage eksponentialfunktionen på begge sider og få svaret

$$y(x) = e^{\frac{x^2}{2} - \frac{7}{3}x^3 + c}$$

for en vilkårlig konstant c . Lader vi $C = e^c$, kan resultatet alternativt skrives som

$$y(x) = Ce^{\frac{x^2}{2} - \frac{7}{3}x^3},$$

hvor C er en positiv konstant. ○

Opgaver

- **Opgave 3.2.1:**

Løs følgende differentialligning:

$$5y(x)y'(x) = 1.$$

- **Opgave 3.2.2:**

Løs følgende differentialligning:

$$-\frac{y'(x)}{y(x)^2} = e^x.$$

- **Opgave 3.2.3:**

Løs følgende differentialligning:

$$\frac{1}{y(x)} = \frac{5x^8}{y'(x)}.$$

- **Opgave 3.2.4:**

Løs følgende differentialligning:

$$y(x)y'(x) = \ln(x).$$

- **Opgave 3.2.5:**

Løs følgende differentialligning:

$$y(x)^3y'(x) = e^x + x.$$

- **Opgave 3.2.6:**

Løs følgende differentialligning:

$$\frac{x \cdot e^x}{y'(x)} - y(x) = 0.$$

- **Opgave 3.2.7:**

Løs følgende differentialligning:

$$\cos(y(x))y'(x) = 6x^4.$$

- **Opgave 3.2.8:**

Løs følgende differentialligning:

$$y'(x) = y(x)^4 \cdot x^4.$$

- **Opgave 3.2.9:**

Løs følgende differentialligning:

$$\frac{x \ln(x)}{\sin(y(x))} - y'(x) = 0.$$

•• Opgave 3.2.10:

Løs følgende differentialligning:

$$y''(x) = y'(x)^2.$$

Vink: Løs først for $y'(x)$ og derefter for $y(x)$.**•• Opgave 3.2.11:**

Løs følgende differentialligning:

$$\cos(y) \sin(y) = \frac{3x + 5}{y'(x)}.$$

•• Opgave 3.2.12:

Løs følgende differentialligning:

$$e^{-y(x)} y'(x) = 2x \cos(x^2).$$

••• Opgave 3.2.13: Populationstilvækst

Vi skal her se på en simpel populationsmodel. Lad $P(t)$ betegne befolkningen til tid t . Da antager vi, at P opfylder differentialligningen

$$P'(t) = kP(t) \left(1 - \frac{P(t)}{K}\right)$$

hvor K er den maksimale befolkning, omgivelserne kan understøtte. k er vækstfaktoren. Jo højere k , jo højere vækst. Løs differentialligningen for P . Vink: du kan benytte omskrivningen

$$\frac{1}{P(t) \left(1 - \frac{P(t)}{K}\right)} = \frac{K}{P(t)(K - P(t))} = \frac{1}{P(t)} + \frac{1}{K - P(t)}.$$

3.3 Førsteordens lineære differentialligninger

En *førsteordens* differentialligning er en differentialligning, hvor kun $y(x)$ og dens førsteafledte $y'(x)$ kan indgå. Vi har set adskillige eksempler i opgaverne. Et ikke-eksempel er

$$y''(x) + 3xy'(x) = x^2,$$

thi den andenaafledte $y''(x)$ indgår. *Lineær* refererer til, at der ikke indgår højere potenser af $y(x)$ end 1. En førsteordens lineær differentialligning er altså en differentialligning på formen

$$y'(x) + f(x)y(x) = g(x)$$

for funktioner f og g . Vi har en fuldstændig løsningsformel til denne slags differentialligninger, som følgende sætning giver.

Sætning 3.3.1 (Panserformlen). *Lad f og g være kontinuerte funktioner og F en stamfunktion til f . Da er den fuldstændige løsning til differentialligningen*

$$y'(x) + f(x)y(x) = g(x)$$

givet ved

$$y(x) = e^{-F(x)} \left(\int e^{F(x)} g(x) dx + c \right)$$

for en konstant c .

Bevis. Vi starter med at tage ligningen

$$y'(x) + f(x)y(x) = g(x)$$

og gange igennem med $e^{F(x)}$:

$$e^{F(x)} y'(x) + e^{F(x)} f(x)y(x) = e^{F(x)} g(x).$$

Venstresiden er noget, vi kan genkende. Ved at bruge produktreglen fås

$$\frac{d}{dx} \left(e^{F(x)} y(x) \right) = e^{F(x)} F'(x) y(x) + e^{F(x)} y'(x) = e^{F(x)} f(x) y(x) + e^{F(x)} y'(x).$$

Vender vi tilbage til ligningen fra før, får vi

$$\frac{d}{dx} \left(e^{F(x)} y(x) \right) = e^{F(x)} g(x).$$

Integratorer vi begge sider, får vi

$$e^{F(x)} y(x) + c' = \int e^{F(x)} g(x) dx,$$

for en konstant c' . Ganges ligningen igennem med $e^{-F(x)}$ fås

$$y(x) + c' e^{-F(x)} = e^{-F(x)} \int e^{F(x)} g(x) dx.$$

Vi lader $c = -c'$ og får

$$y(x) - ce^{-F(x)} = e^{-F(x)} \int e^{F(x)} g(x) dx.$$

Vi lægger $ce^{-F(x)}$ til på begge sider og sætter $e^{-F(x)}$ ud foran en parantes, hvilket giver

$$y(x) = e^{-F(x)} \int e^{F(x)} g(x) dx + ce^{-F(x)} = e^{-F(x)} \left(\int e^{F(x)} g(x) dx + c \right),$$

og beviset er færdigt. ■

Lad os tage nogle eksempler.

Eksempel 3.3.2. Betragt differentialligningen

$$y'(x) + 3xy(x) = x.$$

Vi genkender straks dette som en førsteordens lineær differentialligning. Her er $f(x) = 3x$ og $g(x) = x$. En stamfunktion til f er $F(x) = 3x^2/2$. Panserformlen giver

$$\begin{aligned} y(x) &= e^{-\frac{3x^2}{2}} \left(\int e^{\frac{3x^2}{2}} x dx + c \right) \\ &= e^{-\frac{3x^2}{2}} \left(\frac{1}{3} \int e^{\frac{3x^2}{2}} 3x dx + c \right). \end{aligned}$$

Her kan vi benytte substitution til at udregne det ubestemte integral. Lad $u(x) = 3x^2/2$, da er $u'(x) = 3x$, så vi får

$$\begin{aligned} y(x) &= e^{-\frac{3x^2}{2}} \left(\frac{1}{3} \int e^u du + c \right) = e^{-\frac{3x^2}{2}} \left(\frac{1}{3} e^u + c \right) \\ &= e^{-\frac{3x^2}{2}} \left(\frac{1}{3} e^{\frac{3x^2}{2}} + c \right) = \frac{1}{3} + ce^{-\frac{3x^2}{2}}. \end{aligned}$$

Hvad hvis vi havde en startbetingelse? Hvis f.eks. $y(0) = 0$, da har vi

$$0 = \frac{1}{3} + ce^{-\frac{3 \cdot 0^2}{2}} = \frac{1}{3} + c,$$

så $c = -1/3$. Dermed bliver den partikulære løsning til ligningen med randbetingelsen $y(0) = 0$ lig

$$y(x) = \frac{1}{3} - \frac{1}{3}e^{-\frac{3x^2}{2}}.$$

○

Eksempel 3.3.3. Det er ikke altid, at man kan skrive en eksplisit løsning op til en differentialligning. Havde vi modificeret den forrige differentialligning til

$$y'(x) + 3xy(x) = 1,$$

havde vi ikke kunne nedskrive løsningen eksplisit, thi funktionen

$$e^{\frac{3x^2}{2}}$$

ikke har en eksplisit stamfunktion. Dette skal forstås som, at den ikke kan nedskrives som et konkret udtryk. Man er nødt til at nøjes med det lidt utilfredsstillende udtryk

$$\int e^{\frac{3x^2}{2}} dx.$$

Ikke desto mindre eksisterer stamfunktionen, og der findes numeriske metoder til at regne med den. Disse vil være implementeret i CAS-programmer som f.eks. Maple. ○

Ligesom vi har set før med separation af variable, kan det til tider være nødvendigt at omskrive lidt på en differentialligning for at se, at den er en førsteordens lineær differentialligning. Et eksempel er herunder.

Eksempel 3.3.4. Betragt differentialligningen

$$\frac{y'(x)}{\sin(x)} = 1 - y(x).$$

KAPITEL 3. DIFFERENTIALLIGNINGER OG NUMERISKE METODER

Vi starter med at lægge $y(x)$ til på begge sider. Da får vi

$$\frac{y'(x)}{\sin(x)} + y(x) = 1.$$

Vi kan herefter gange igennem med $\sin(x)$ og få

$$y'(x) + y(x)\sin(x) = \sin(x).$$

Nu kan vi løse for $y(x)$ med panserformlen. En stamfunktion til \sin er $-\cos$. Vi har da

$$y(x) = e^{\cos(x)} \left(\int e^{-\cos(x)} \sin(x) dx + c \right),$$

og integralet løses let med substitutionen $u(x) = -\cos(x)$, så svaret bliver

$$y(x) = e^{\cos(x)} \left(\int e^u du + c \right) = e^{\cos(x)} \left(e^{-\cos(x)} + c \right) = 1 + ce^{\cos(x)}.$$

○

I mange tilfælde er det interessant at løse lineære førsteordens differentialligninger med randbetingelser. Følgende sætning giver løsningen til den slags problemer. Beviset er fra [3].

Sætning 3.3.5 (Panserformlen med randbetingelse). *Lad f og g være kontinuerte funktioner og a og b reelle tal. Da eksisterer der enunik løsning til differentialligningen*

$$y'(x) + f(x)y(x) = g(x),$$

sådan at $y(a) = b$. Løsningen er givet ved

$$y(x) = e^{- \int_a^x f(t) dt} \left(\int_a^x g(t) e^{\int_a^t f(s) ds} dt + b \right).$$

Bevis. For at vise, at det givne udtryk virkelig er en løsning, kan man naturligvis gøre prøve. Det er dog lettere blot at henvise til panserformlen, hvori vi viste, at $y(x)$ virkelig er en løsning. Vi skal blot bemærke, at

$$\int_a^x f(t) dt \quad \text{og at} \quad \int_a^x g(t) e^{\int_a^t f(s) ds} dt$$

er stamfunktioner til hhv. $f(x)$ og $g(x)e^{\int_a^x f(s) ds}$. Vi skal dog også tjekke, at randbetingelsen $y(a) = b$ er opfyldt. Vi ved, at hvis et bestemt integral har ens grænser, er integralet 0, så vi får

$$y(a) = e^{- \int_a^a f(t) dt} \left(\int_a^a g(t) e^{\int_a^t f(s) ds} dt + b \right) = e^0 (0 + b) = b.$$

Vi mangler nu kun at bevise unikhed af løsningen. Vælg en stamfunktion F til f og definér de to løsninger

$$\begin{aligned} y_1(x) &= e^{-F(x)} \left(\int e^{F(x)} g(x) dx + c_1 \right) \\ y_2(x) &= e^{-F(x)} \left(\int e^{F(x)} g(x) dx + c_2 \right), \end{aligned}$$

og antag, at de begge opfylder randbetingelsen. Vi skal vise, at de to funktioner er ens. Vi har

$$y_1(x) - y_2(x) = e^{-F(x)} (c_1 - c_2)$$

og dermed for $x = a$:

$$y_1(a) - y_2(a) = e^{F(a)} (c_1 - c_2).$$

Venstresiden er lig $b - b = 0$, og $e^{F(a)} \neq 0$, så $c_1 - c_2 = 0$. Med andre ord er $c_1 = c_2$, og de to løsninger er ens. ■

3.3. FØRSTEORDENS LINEÆRE DIFFERENTIALLIGNINGER

Vi skal i sidste afsnit se nogle interessante virkelig eksempler på lineære førsteordens differentialligninger med randbetingelser. Lad os dog tage et enkelt eksempel inden opgaverne.

Eksempel 3.3.6. Betragt

$$y'(x) - 3y(x) = e^{2x}, \quad y(0) = 0.$$

Vi genkender straks dette som en differentialligning af den ønskede form, så vi indsætter i panserformlen med randbetingelser:

$$\begin{aligned} y(x) &= e^{-\int_0^x -3dt} \left(\int_0^x e^{2t} e^{\int_0^t -3ds} dt + 0 \right) = e^{3x} \int_0^x e^{2t-3t} dt \\ &= e^{3x} \int_0^x e^{-t} dt = e^{3x} [-e^{-t}]_0^x = e^{3x}(1 - e^{-x}). \end{aligned}$$

○

En anvendelse: Pension

Den grundlæggende problemstilling i pension og livsforsikring er at sikre, at virksomheden har nok penge i reserve til at udbetale et aftalt beløb til kunden på et defineret tidspunkt. Lad os her fokusere på pension. Et pensionsprodukt kan se ud på flere måder, men en typisk pensionsaftale siger, at kunden skal betale en løbende *præmie* (typisk hver måned) indtil et fastdefineret tidspunkt m , nemlig tidspunktet for pensionering. m kunne f.eks. være 70 år (nok senere for mange unge mennesker i dag). Efter tidspunkt m betaler pensionsselskabet til kunden. En *kapitalpension* udbetales ét beløb på tidspunkt m , og så må kunden selv sørge for at bruge pengene fornuftigt indtil død. De fleste vælger dog en såkaldt *ratepension*, hvor selskabet hver måned udbetaaler et beløb til kunden indtil et tidspunkt $n > m$, hvor kontrakten udløber.

Lad os få matematikken på plads. Det skal her nævnes, at vi arbejder med en meget simpel model, hvor man kun kan være i arbejde eller på pension. F.eks. tager modellen ikke højde for andre tilstande såsom perioder med invaliditet eller arbejdsløshed. Vi har følgende størrelser i spil:

$$V(t), \pi(t), b(t), \mu_x(t), r(t).$$

Lad os forklare disse størrelser hver for sig.

- $V(t)$ betegner *reserven* til tid t . Reserven er nutidsværdien af det samlede forventede fremtidige beløb til kunden.
- $\pi(t)$ betegner *præmieraten* til tid t . Præmien er den kontinuerlige indbetaling fra kunden til selskabet.
- $b(t)$ betegner *ydelsesraten* fra selskabet til kunden til tid t , dvs. forpligtelsen fra selskabet overfor kunden. Den kan være kontinuert, men den kan også indeholde såkaldte *klumpbetalinger*, dvs. en sum, der udbetales på specifikke tidspunkter.
- $\mu_x(t)$ (μ er det græske bogstav my) betegner *dødelighedsintensiteten* for en x -årig person til tid t . Fortolkningen er som følger: Antag, at en x -årig person er i live til tid t . Da er sandsynligheden for at dø i tidsrummet $(t, t+dt]$ approksimativt lig $\mu_x(t)dt$, hvis dt er meget lille.
- $r(t)$ er den *korte rente* til tid t . Renten skal forstås i generel forstand, nemlig som et sammensurium af afkast på investeringer, fortjeneste på køb af salg og aktiver (aktier, ejendomme etc.) med mere. Den faktiske rente $i(t)$ i procent er relateret til $r(t)$ gennem

$$i(t) = e^{\int_0^t r(s)ds} - 1.$$

KAPITEL 3. DIFFERENTIALLIGNINGER OG NUMERISKE METODER

Spørgsmålet for pensionskasser er naturligvis, hvad reserven $V(t)$ skal være på et givent tidspunkt t . Dette er ikke en simpel problemstilling! Vi ved jo ikke, hvad renten er i fremtiden. Det er umuligt at forudsige afkast fra udlejning af ejendomme, dividender fra aktier, aktiekurser osv. Ikke desto mindre har vi værkøjer, som tillader os at opskrive udtryk for reserven, hvilket er formålet med denne sektion. Vores hovedværktøj er *Thieles differentialligning*¹ givet ved

$$V'(t) = \pi(t) - b(t)\mu_x(t) + (r(t) + \mu_x(t))V(t).$$

Lad os tænke over, hvorfor differentialligningen ser ud, som den gør. Ligningen beskriver ændringen i reserven til tidspunkt t . Til tidspunktet t indbetales $\pi(t)$. Der udbetales også $b(t)$ til kunden, hvis kunden stadig er i live, hvilket er fortolkningen af leddet $-b(t)\mu_x(t)$. Sidste led $(r(t) + \mu_x(t))V(t)$ beskriver en tilvækst af reserven afhængig af reservens nuværende størrelse. $r(t)V(t)$ er rentetilvæksten, og $\mu_x(t)V(t)$ er tilvæksten på reserven, der kommer af, at andre forsikrede kan dø og efterlader deres opsparing til fællesskabet. Har vi en randbetingelse? Ja, fordi til tidspunktet n (ved udløb) skylder selskabet kun $b(n)$ til kunden, hvor $b(n)$ betegner en klumpbetaling til tid n . Vi omskriver differentialligningen til

$$V'(t) - (r(t) + \mu_x(t))V(t) = \pi(t) - b(t)\mu_x(t), \quad V(n) = b(n),$$

og denne kan løses med panserformlen med randbetingelse:

$$\begin{aligned} V(t) &= e^{-\int_n^t (r(s) + \mu_x(s))ds} \left(\int_n^t (\pi(s) - b(s)\mu_x(s))e^{\int_s^n (r(u) + \mu_x(u))du} ds + b(n) \right) \\ &= e^{\int_n^t r(s) + \mu_x(s)ds} \int_t^n (b(s)\mu_x(s) - \pi(s))e^{\int_s^n r(u) + \mu_x(u)du} ds + b(n)e^{\int_n^t r(s) + \mu_x(s)ds} \\ &= \int_t^n (b(s)\mu_x(s) - \pi(s))e^{-\int_t^s r(u) + \mu_x(u)du} ds + b(n)e^{-\int_t^n r(s) + \mu_x(s)ds}. \end{aligned}$$

Lad os for tolke dette udtryk, som kaldes et *prospektivt reserveudtryk*. En højere præmiebetaling giver en mindre reserve, hvilket giver mening, da vi skal reservere færre penge, hvis vi ved, at der kommer højere indbetalinger. Ligefedes skal reserven være større, hvis vi skal betale mere til kunden, altså at $b(t)$ bliver større. Udtrykket

$$e^{-\int_t^s r(u) + \mu_x(u)du}$$

kaldes en *diskonteringsfaktor* fra t til s . Den er lig den faktor, en sum penge er værd til tidspunkt s sammenlignet med tidspunktet t . Som tiden t bevæger sig frem mod udløbstidspunktet n , vil vi skulle tilbagediskontere med en lavere faktor grundet rentetilvæksten og dødelighedstilvæksten (i hvert fald i et økonomisk scenarie med positiv rente). Det sidste led

$$b(n)e^{-\int_t^n r(s) + \mu_x(s)ds}$$

fortæller, at vi skal reservere $b(n)$ med den værdi, $b(n)$ har til tidspunktet t . Lad os tage to eksempler, hvor vi benytter teorien.

Eksempel 3.3.7 (Ren oplevelsesforsikring). Betragt en kontrakt, der udbetaler 1 til kunden til tid n , såfremt kunden stadig lever til tid n . Sådan en kontrakt kaldes en *ren oplevelsesforsikring*. 1 kan her betyder 1 million, 100.000 eller hvad, man end ønsker. Vi antager, at kunden indbetaaler en løbende konstant præmie π indtil tid n . Vi har $b(n) = 1$ og $b(t) = 0$ for alle $t < n$. Formlen for reserven giver da

$$\begin{aligned} V(t) &= \int_t^n -\pi e^{-\int_t^s r(u) + \mu_x(u)du} ds + e^{-\int_t^n r(s) + \mu_x(s)ds} \\ &= -\pi \int_t^n e^{-\int_t^s r(u) + \mu_x(u)du} ds + e^{-\int_t^n r(s) + \mu_x(s)ds}. \end{aligned}$$

¹Efter Thorvald Nicolai Thiele, en dansk statistiker, matematiker og professor i astronomi, se [4].

3.3. FØRSTEORDENS LINEÆRE DIFFERENTIALLIGNINGER

Et godt spørgsmål er, hvad præmien π skal være. *Ækvivalensprincippet* dikterer, at den forventede værdi af præmier og den forventede værdi af ydelses skal være ens. Dette sikrer, at ingen vinder på arrangementet. Matematisk betyder ækvivalensprincippet, at $V(0) = 0$ i det her tilfælde. Vi har da

$$0 = V(0) = -\pi \int_0^n e^{-\int_0^s r(u) + \mu_x(u) du} ds + e^{-\int_0^n r(s) + \mu_x(s) ds},$$

og denne løses let for π :

$$\pi = \frac{e^{-\int_0^n r(s) + \mu_x(s) ds}}{\int_0^n e^{-\int_0^s r(u) + \mu_x(u) du} ds}.$$

○

Eksempel 3.3.8 (Ratepension). Vi har en kontrakt som følger: Fra tid 0 til m indbetalere kunden en konstant præmie π , og fra tid m til n betaler selskabet ydelsen b til kunden, så længe vedkommende er i live. Der er ingen klumpbetalinger, så $V(n) = 0$, da vi intet skylder kunden til tid n . Vi har altså $b(t) = 0$ for $0 \leq t \leq m$ og $b(t) = b$ for $m < t \leq n$. På samme måde har vi $\pi(t) = \pi$ for $0 \leq t \leq m$ og $\pi(t) = 0$ for $m < t \leq n$. På et tidspunkt $t < m$ ser reserven altså således ud:

$$\begin{aligned} V(t) &= \int_t^m -\pi e^{-\int_t^s r(u) + \mu_x(u) du} ds + \int_m^n b \mu_x(s) e^{-\int_t^s r(u) + \mu_x(u) du} \\ &= -\pi \int_t^m e^{-\int_t^s r(u) + \mu_x(u) du} ds + b \int_m^n \mu_x(s) e^{-\int_t^s r(u) + \mu_x(u) du}. \end{aligned}$$

For $m < t \leq n$ er reserven

$$b \int_t^n \mu_x(s) e^{-\int_t^s r(u) + \mu_x(u) du}.$$

For at opnå en fair kontrakt for både selskab og kunde, giver ækvivalensprincippet, at $V(0) = 0$. Prøv at løse for hhv. π og b under denne betingelse.

○

Opgaver**•• Opgave 3.3.1:**

Løs følgende differentialligning:

$$y'(x) + 2x^2y(x) = x^2.$$

•• Opgave 3.3.2:

Løs følgende differentialligning:

$$y'(x) + \frac{y(x)}{x} = \ln(x).$$

•• Opgave 3.3.3:

Løs følgende differentialligning:

$$y'(x)x^2 + y(x) = 1$$

•• Opgave 3.3.4:

Løs følgende differentialligning:

$$xy'(x) + y(x) - e^x = 0.$$

•• Opgave 3.3.5:

Løs følgende differentialligning med randbetingelse

$$y'(x) + 2e^x y(x) = e^x, \quad y(1) = e.$$

•• Opgave 3.3.6:

Løs følgende differentialligning med randbetingelse

$$e^{-2x}y'(x) + e^{2x}y(x) = e^{2x}, \quad y(0) = 2.$$

•• Opgave 3.3.7:

Løs følgende differentialligning med randbetingelse

$$5xy'(x) + 10x^2y(x) = 15x^2, \quad y(0) = 0.$$

3.4. ANDENORDENS HOMOGENE DIFFERENTIALLIGNINGER MED KONSTANTE KOEFFICIENTER

3.4 Andenordens homogene differentialligninger med konstante koefficienter

Indtil videre har vi (stort set) kun betragtet førsteordens differentialligninger. Vi skal nu se på nogle simple eksempler på andenordens differentialligninger, hvor altså også den andenafledte kan indgå. Helt specifikt kommer vi i dette afsnit til at arbejde med differentialligninger på formen

$$y''(x) + py'(x) + qy(x) = 0,$$

hvor p og q er kendte konstanter. Hvordan løses sådan en ligning? Lad os starte med at tage et skridt tilbage og betragte en førsteordens ligning på formen

$$y'(x) + qy(x) = 0.$$

Ved at benytte pansenformlen ($f(x) = q$ og $g(x) = 0$), får vi den fuldstændige løsning

$$y(x) = e^{-qx} \left(\int e^{qx} \cdot 0 dx + c \right) = ce^{-qx},$$

hvilket i øvrigt også kan indsættes ved blot at gætte sig frem. Lad os for sjovs skyld prøve at indsætte $y(x) = e^{rx}$ i differentialligningen

$$y''(x) + py'(x) + qy(x) = 0.$$

Da får vi fra $y'(x) = re^{rx}$ og $y''(x) = r^2e^{rx}$ (brug kæderegralen!), at

$$0 = r^2e^{rx} + pre^{rx} + qe^{rx} = e^{rx}(r^2 + pr + q).$$

Idet eksponentialfunktionen aldrig er nul, skal vi have $r^2 + pr + q = 0$. Lader vi r opfylde denne ligning, har vi altså fundet en løsning givet ved e^{rx} . Dette motiverer følgende definition.

Definition 3.4.1. For en andenordens homogen differentialligning med konstante koeficienter

$$y''(x) + py'(x) + qy(x) = 0,$$

kaldes andengradspolynomiet $r^2 + pr + q$ for det *karakteristiske polynomium* for differentialligningen.

Vi har netop set, at e^{rx} er en løsning til $y''(x) + py(x) + q = 0$, så længe, at r er en løsning til $r^2 + pr + q = 0$, dvs. r er en rod i det karakteristiske polynomium. Det følgende resultat viser, at e^{rx} ikke er den eneste løsning.

Sætning 3.4.2. *Antag, at både $y_1(x)$ og $y_2(x)$ er løsninger til*

$$y''(x) + py'(x) + qy(x) = 0.$$

Da er $cy_1(x) + dy_2(x)$ også en løsning til differentialligningen for alle konstanter c, d .

Bevis. Vi gør prøve og indsætter $cy_1(x) + dy_2(x)$ i differentialligningen:

$$\begin{aligned} & (cy_1(x) + dy_2(x))'' + p(cy_1(x) + dy_2(x))' + q(cy_1(x) + dy_2(x)) = \\ & cy_1''(x) + dy_2''(x) + pcy_1'(x) + pdy_2'(x) + qcy_1(x) + qdy_2(x) = \\ & c(y_1''(x) + py_1'(x) + qy_1(x)) + d(y_2''(x) + py_2'(x) + qy_2(x)) = \\ & c \cdot 0 + d \cdot 0 = 0. \end{aligned}$$

Dette viser, at $cy_1(x) + dy_2(x)$ er en løsning som ønsket. ■

Eksempel 3.4.3. Betragt differentialligningen

$$y''(x) - 5y'(x) + 6y(x) = 0.$$

Vi ser, at det karakteristiske polynomium er $r^2 - 5r + 6$. Ved faktorisering eller ved brug af løsningsformlen for andengradsligninger ser vi, at $r = 2$ og $r = 3$ er løsningerne. Dermed er

$$y(x) = ce^{2x} + de^{3x}$$

en løsning til ligningen for alle valg af konstanter c og d . ○

Vi ved nu, hvordan vi kan finde løsninger til differentialligninger på formen $y''(x) + py'(x) + qy(x) = 0$, nemlig ved $ce^{r_1 x} + de^{r_2 x}$, hvor r_1 og r_2 er rødder i det karakteristiske polynomium. Spørgsmålet er, om dette udgør alle løsninger. Det viser sig, at svaret er ja i tilfældet $r_1 \neq r_2$, altså i det tilfælde, hvor det karakteristiske polynomium har to forskellige rødder.

Sætning 3.4.4. *Antag, at det karakteristiske polynomium til differentialligningen*

$$y''(x) + py'(x) + qy(x) = 0$$

har to forskellige reelle rødder r_1 og r_2 . Da er alle løsninger på formen

$$ce^{r_1 x} + de^{r_2 x}.$$

Bevis. Se [3] sætning 10.5.3. ■

Tilfældet hvor det karakteristiske polynomium har én rod er lidt anderledes. Antag, at r_1 er den eneste rod i det karakteristiske polynomium $r^2 + rp + q$ for $y''(x) + py'(x) + qy(x) = 0$. Da har vi per faktorisering af andengradspolynomier, at

$$r^2 + pr + q = (r - r_1)^2 = r^2 - 2r_1r + r_1^2.$$

Dermed må $p = -2r_1$ og $q = r_1^2$. Indsætter vi i differentialligningen fås

$$0 = y''(x) + py'(x) + qy(x) = y''(x) - 2r_1y'(x) + r_1^2y(x).$$

Vi får den gode idé at undersøge $y(x) = xe^{r_1 x}$. Med produktreglen og kædereglen fås

$$y'(x) = e^{r_1 x} + r_1 xe^{r_1 x}, \quad y''(x) = 2r_1 e^{r_1 x} + r_1^2 xe^{r_1 x}.$$

Vi sætter ind i differentialligningen og får

$$y''(x) - 2r_1y'(x) + r_1^2y(x) = 2r_1e^{r_1 x} + r_1^2xe^{r_1 x} - 2r_1(e^{r_1 x} + r_1 xe^{r_1 x}) + r_1^2xe^{r_1 x} = 0,$$

hvilket viser, at $y(x) = xe^{r_1 x}$ er en løsning. Det følger fra Sætning 3.4.2, at i tilfældet med én rod, da er

$$ce^{r_1 x} + dxe^{r_1 x}$$

en løsning for alle valg af konstanter c og d . Følgende sætning siger, at alle løsninger har denne form.

Sætning 3.4.5. *Antag, at det karakteristiske polynomium til differentialligningen*

$$y''(x) + py'(x) + qy(x) = 0$$

har netop én reel rod r_1 . Da er alle løsninger på formen

$$ce^{r_1 x} + dxe^{r_1 x}.$$

Bevis. Se [3] sætning 10.5.8. ■

3.4. ANDENORDENS HOMOGENE DIFFERENTIALLIGNINGER MED KONSTANTE KOEFFICIENTER

Eksempel 3.4.6. Betragt differentialligningen

$$y''(x) - 6y'(x) + 9y(x) = 0.$$

Det karakteristiske polynomium er $r^2 - 6r + 9$. Vi ser, at $r = 3$ er den eneste rod i polynomiet, så alle løsninger er på formen

$$ce^{3x} + dxe^{3x}$$

for passende konstanter c og d . ○

Eksempel 3.4.7. Betragt differentialligningen

$$2y''(x) + 8y(x) = 10y'(x).$$

Umiddelbart ser det ikke ud til, at denne ligning har den rigtige form til, at vi kan benytte ovenstående resultater. Men med de rigtige omskrivninger, kan vi alligevel få det til at lykkedes. Vi starter med at dele ligningen med 2 på begge sider,

$$y''(x) + 4y(x) = 5y'(x).$$

Træk nu $5y'(x)$ fra på begge sider. Da har vi

$$y''(x) - 5y'(x) + 4y(x) = 0,$$

som vi jo ved, hvordan vi skal løse. Det karakteristiske polynomium er $r^2 - 5r + 4$, og vi ser, at rødderne er $r = 1$ og $r = 4$. Dermed er alle løsningerne til differentialligningen givet ved

$$ce^x + de^{4x}. ○$$

Vi mangler nu kun at diskutere ét tilfælde, nemlig hvor det karakteristiske polynomium har to ikke-reelle rødder.

Sætning 3.4.8. *Antag, at det karakteristiske polynomium til differentialligningen*

$$y''(x) + py'(x) + qy(x) = 0$$

har to komplekse rødder $r_1 = a + bi$ og $r_2 = a - bi$. Da er alle løsninger på formen

$$e^{ax}(c \cos(bx) + d \sin(bx)).$$

Eksempel 3.4.9. Betragt differentialligningen

$$y''(x) + 2y'(x) + 4y(x) = 0.$$

Det karakteristiske polynomium er $r^2 + 2r + 4$, og rødderne er givet ved

$$r = \frac{-2 \pm \sqrt{2^2 - 4 \cdot 1 \cdot 4}}{2} = \frac{-2 \pm 2\sqrt{1 - 4}}{2} = -1 \pm i\sqrt{3}.$$

Dermed er samtlige løsninger til differentialligningen givet ved

$$e^{-x}(c \cos(\sqrt{3}x) + d \sin(\sqrt{3}x)),$$

hvor c og d kan være arbitrale reelle tal. ○

Lad os opsummere. Givet en differentialligning på formen

$$y''(x) + py'(x) + qy(x) = 0,$$

findes alle løsninger med følgende procedure:

KAPITEL 3. DIFFERENTIALLIGNINGER OG NUMERISKE METODER

- Bestem rødderne i det karakteristiske polynomium $r^2 + pr + q$. Nogle gange er det muligt at gætte sig frem med f.eks. faktorisering, men ellers kan man altid benytte løsningsformlen

$$r = \frac{-p \pm \sqrt{p^2 - 4q}}{2}.$$

- Hvis det karakteristiske polynomium har netop én rod r_1 , da er alle løsninger til differentialligningen givet ved

$$ce^{r_1 x} + dxe^{r_1 x}.$$

Hvis det karakteristiske polynomium har to forskellige reelle rødder r_1 og r_2 , da er alle løsninger til differentialligningen givet ved

$$ce^{r_1 x} + de^{r_2 x}.$$

I begge tilfælde kan c og d være arbitraære konstanter. Hvis det karakteristiske polynomium har to komplekse rødder $r_1 = a + bi$ og $r_2 = a - bi$, da er alle løsninger givet ved

$$e^{ax}(c \cos(bx) + d \sin(bx)).$$

3.4. ANDENORDENS HOMOGENE DIFFERENTIALLIGNINGER MED KONSTANTE KOEFFICIENTER

Opgaver

- **Opgave 3.4.1:**

Løs følgende differentialligning:

$$y''(x) - 3y'(x) + 2y(x) = 0.$$

- **Opgave 3.4.2:**

Løs følgende differentialligning:

$$y''(x) - 4y'(x) + 3y(x) = 0.$$

- **Opgave 3.4.3:**

Løs følgende differentialligning:

$$y''(x) - 6y'(x) + 9y(x) = 0.$$

- **Opgave 3.4.4:**

Løs følgende differentialligning:

$$2y''(x) - 16y'(x) + 32y(x) = 0.$$

- **Opgave 3.4.5:**

Løs følgende differentialligning:

$$y''(x) + 6y'(x) + 9y(x) = 0.$$

- **Opgave 3.4.6:**

Løs følgende differentialligning:

$$y''(x) + 16y'(x) = 0.$$

- **Opgave 3.4.7:**

Løs følgende differentialligning:

$$3y''(x) - 21y'(x) = -36y(x).$$

- **Opgave 3.4.8:**

Løs følgende differentialligning:

$$y''(x) + 4y'(x) + 5y(x) = 0.$$

- **Opgave 3.4.9:**

Løs følgende differentialligning:

$$y''(x) + 3y(x) = 3y'(x).$$

•• Opgave 3.4.10:

Løs følgende differentialligning:

$$2y''(x) + 8y'(x) + 16y(x) = 0.$$

••• Opgave 3.4.11:

I denne opgave skal vi se et eksempel på en partikulær løsning til en andenordens homogen differentialligning.

1) Løs differentialligningen

$$y''(x) - 5y'(x) + 4y(x) = 0.$$

2) Find den partikulære løsning, der opfylder $y(0) = 2$ og $y'(0) = -4$. Vink: Du kommer til at skulle løse to ligninger med to ubekendte.

3.5 Introduktion til numeriske metoder

Vi tager nu hul på anden halvdel af kapitlet om differentialligninger, nemlig numeriske løsningsmetoder. Idet differentialligninger er så udbredt et matematisk værktøj i praksis, eksisterer der et utsal af metoder til at løse dem numerisk. Vi skal i dette kapitel kun tale om de mest udbredte. Før vi kan det, skal vi have lidt terminologi på plads.

Kort om størrelsesordnere

I præsentationen af algoritmerne herunder får vi brug for at tale om størrelsesordnere fra en matematisk vinkel.

Definition 3.5.1. Vi betragter en grænseovergang $x \rightarrow a$, hvor $a \in \mathbb{R}$. Lad f og g være to funktioner.

1. Vi siger, at $f = O(g)$ for $x \rightarrow a$, såfremt der eksisterer konstanter $K > 0$ og $\varepsilon > 0$, sådan at $f(x) \leq K g(x)$ for alle x med $|x - a| < \varepsilon$.
2. Vi siger, at $f = o(g)$ for $x \rightarrow a$, såfremt

$$\lim_{x \rightarrow a} \frac{f(x)}{g(x)} = 0.$$

Betrægt nu tilfældet $a = \infty$.

1. Vi siger, at $f(x) = O(g(x))$ for $x \rightarrow \infty$, såfremt der eksisterer konstanter $K > 0$ og x_0 , sådan at $f(x) \leq K g(x)$ for $x \geq x_0$.
2. Vi siger, at $f(x) = o(g(x))$ for $x \rightarrow \infty$, såfremt

$$\lim_{x \rightarrow \infty} \frac{f(x)}{g(x)} = 0.$$

Vi udtaler $f(x) = O(g(x))$ som "f er store O af g", og $f(x) = o(g(x))$ som "f er lille o af g".

Bemærkning 3.5.2. Man kan ligeledes definere store og lille O-notation for tilfældet $x \rightarrow \infty$ på analog vis som for tilfældet $x \rightarrow \infty$.

Man kan tænke på $f(x) = O(g(x))$ som, at g er "mindst så stor som f " i den givne grænseovergang, mens $f(x) = o(g(x))$ betyder, at g er strengt større end f i grænsen. Derfor bør følgende resultat ikke være overraskende.

Lemma 3.5.3. *Lad $f(x) = o(g(x))$ i en grænseovergang $x \rightarrow a$ (hvor $a = \pm\infty$ er en mulighed). Da gælder også $f(x) = O(g(x))$.*

Bevis. Per antagelse har vi

$$\lim_{x \rightarrow a} \frac{f(x)}{g(x)} = 0.$$

I tilfældet $a \in \mathbb{R}$, må vi altså have, at for enhver positiv konstant K , skal $f(x)/g(x) \leq K$ for $|x - a| < \varepsilon$ for et passende $\varepsilon > 0$. Dette medfører det ønskede ved at gange med $f(x)$ på begge sider. Et fuldstændigt analogt argument virker for tilfældet $a = \pm\infty$. ■

Eksempel 3.5.4. Betragt funktionen $f(x) = x^2 + 3x + 2$ i grænsen $x \rightarrow \infty$. Vi hævder, at $f(x) = O(x^2)$. Vi skal undersøge uligheden $f(x) \leq Kx^2$, hvilket omskrives til

$$x^2 + 3x + 2 \leq Kx^2 \Leftrightarrow 1 + \frac{3}{x} + \frac{2}{x^2} \leq K.$$

Vælg nu $x_0 = 1$. For $x \geq x_0$, har vi da

$$1 + \frac{3}{x} + \frac{2}{x^2} \leq 1 + 3 + 2 = 6,$$

og altså er $K = 6$ et gyldigt valg. Dermed er definitionen ovenover opfyldt for parret $x_0 = 1$ og $K = 6$. Faktisk fungerer samme par til at vise $f(x) = O(x^3)$ eller $f(x) = O(x^4)$ for den sags skyld. Dog er disse resultater mindre informative end $f(x) = O(x^2)$. Gælder der også $f(x) = o(g(x))$? Vi har

$$\lim_{x \rightarrow \infty} \frac{f(x)}{x^2} = \lim_{x \rightarrow \infty} \left(1 + \frac{3}{x} + \frac{2}{x^2} \right) = 1 \neq 0.$$

Altså kan vi konkludere, at vi *ikke* har $f(x) = o(x^2)$. ○

Ovenstående eksempel viser, at $f(x) = o(g(x))$ er et strengt stærkere udsagn end $f(x) = O(g(x))$.

Eksempel 3.5.5. Betragt nu $f(x) = x$ og $g(x) = x^2$ og grænsen $x \rightarrow 0$. Idet

$$\lim_{x \rightarrow 0} \frac{g(x)}{f(x)} = \lim_{x \rightarrow 0} x = 0,$$

må $x^2 = o(x)$ for $x \rightarrow 0$. Hvis vi i stedet havde $x \rightarrow \infty$, ville det omvendte være tilfældet, $x = o(x^2)$. Altså har grænseovergangen stor betydning for korrektheden af o - og O -påstande. ○

Eksempel 3.5.6. Lad $f(x) = \log(x)$ og $g(x) = x^a$, hvor $a > 0$. Betragt $x \rightarrow \infty$. Da har vi per L'Hospitals regel

$$\lim_{x \rightarrow \infty} \frac{f(x)}{g(x)} = \lim_{x \rightarrow \infty} \frac{1/x}{ax^{a-1}} = \lim_{x \rightarrow \infty} \frac{1}{ax^a} = 0.$$

Dermed er $\log(x) = o(x^a)$ for alle $a > 0$, når $x \rightarrow \infty$. ○

Eksempel 3.5.7. Vi viser, at $x + 2 \neq O(x)$ i grænsen $x \rightarrow 0$. Antag for modstrid, at der eksisterer $\varepsilon > 0$ og $K > 0$, sådan at $x + 2 \leq Kx$ for $|x| < \varepsilon$. Vi har da for $|x| < \varepsilon$ og $x \neq 0$, at

$$1 + \frac{2}{x} \leq K.$$

Men ved at gøre x tilstrækkelig lille, kan vi gøre venstresiden arbitraert stor. For at være helt præcis, vi skal isolere x i udtrykket

$$1 + \frac{2}{x} > K.$$

Vi har altså (vi kan antage $x > 0$ og $K > 1$)

$$\frac{2}{x} > K - 1 \quad \Leftrightarrow \quad \frac{x}{2} < \frac{1}{K-1} \quad \Leftrightarrow \quad x < \frac{2}{K-1}.$$

Dvs. vi skal blot vælge $x < 2/(K-1)$, før udsagnet bliver forkert. Altså kan vi konkludere, at $x + 2 \neq O(x)$ i grænsen $x \rightarrow 0$. ○

Hvad er en numerisk metode?

Indtil videre har vi i dette kapitel samt i kapitlet om matematiske forudsætninger kun set på *analytiske* løsninger. En analytisk løsning er en eksakt teoretisk løsning. F.eks. kan differentialligningen

$$f'(x) = 3f(x)$$

løses analytisk, idet vi kan skrive en løsning eksplisit, f.eks. $f(x) = e^{3x}$. Ligeledes kan integralet

$$\int_0^3 e^x dx$$

løses analytisk (svaret er $e^3 - e^0 = e^3 - 1$). Ser vi til gengæld på integralet

$$\int_0^3 e^{x^2} dx,$$

er det ikke længere tilfældet. Ikke desto mindre eksisterer integralet. Så hvordan skal vi regne det ud? Svaret er *numeriske metoder*.

En numerisk metode er en fremgangsmåde, der giver et approksimativt svar til et matematisk problem. Som vi så lige før, kan det faktisk være nødvendigt at regne visse størrelser ud numerisk. Tænk f.eks. på et udtryk som $\cos(1,415)$. Skal vi beregne denne størrelse, er vi nødt til at ty til numeriske løsninger. F.eks. kan vi bruge Taylorpolynomiet for \cos omkring nul,

$$\cos(x) \approx 1 - \frac{x^2}{2} + \frac{x^4}{24} - \frac{x^6}{720} + \cdots + \frac{(-1)^N x^{2N}}{(2N)!},$$

hvor N er valgt tilpas stort. Det er klart, at approksimationen burde blive mere præcis, hvis vi tager flere led med. Vi kan faktisk gøre dette matematisk stringent med o -notation. Vi kan f.eks. skrive

$$\cos(x) = 1 - \frac{x^2}{2} + o(x^3), \quad x \rightarrow 0,$$

og vi siger her, at *fejlledet* er af orden x^3 for $x \rightarrow 0$. Jo højere potens af fejlledet, jo bedre, da vi jo betragter grænsen $x \rightarrow 0$. Jargonen inden for numerisk analyse tager vi hen ad vejen, som vi ser konkrete eksempler på metoder.

Kort opsummeret kan man sige, at analytiske metoder er metoder, som (i teorien med lang nok tid og knofedt) kan udføres i hånden og som giver eksakte svar, mens numeriske metoder giver approksimative løsninger ved hjælp af en computer eller lommeregner.

Numerisk differentiation

En af de simpleste og vigtigste discipliner i numerisk analyse er at kunne approksimere afledte i et bestemt punkt. Lad f være en funktion. Husk, at definitionen af den afledte i x er

$$f'(x) = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{f(x+h) - f(x)}{h}.$$

Så for et h tilpas tæt på nul, har vi approksimationen

$$f'(x) \approx \frac{f(x+h) - f(x)}{h}. \quad (3.1)$$

Ved hjælp af Taylors formel kan vi give et estimat på fejlen. Bruger vi Taylors formel med restled, Sætning 1.6.7, omkring x har vi

$$f(x+h) = f(x) + f'(x)h + \frac{f''(\xi)}{2}h^2$$

for et passende ξ mellem x og $x+h$. Denne opskrivning er naturligvis kun gældende, hvis f er to gange differentiabel. Vi kan omarrangere i ligningen og få

$$f'(x) = \frac{f(x+h) - f(x)}{h} - \frac{h}{2}f''(\xi).$$

Vi ser dermed, at fejlledet $-hf''(\xi)/2$ er af størrelsesorden $O(h)$. Dette fejlled kaldes også *trunkeringsfejlen*, idet den opstår gennem trunkering af en Taylorrekke. En fejl af orden $O(h)$ er i mange henseender for stor. Kan vi gøre det bedre? Sagtens! Et trick er at bruge

Taylorpolynomiet for f på en smartere måde. Antag, at f er tre gange differentiabel. Da kan vi bruge Taylors formel med restled på følgende vis:

$$\begin{aligned} f(x+h) &= f(x) + f'(x)h + \frac{f''(x)}{2}h^2 + f'''(\xi_1)\frac{h^3}{6}, \\ f(x-h) &= f(x) - f'(x)h + \frac{f''(x)}{2}h^2 - f'''(\xi_2)\frac{h^3}{6}, \end{aligned}$$

hvor ξ_1 ligger mellem x og $x+h$, mens ξ_2 ligger mellem x og $x-h$. Det smarte i dette er, at hvis vi trækker de to udtryk fra hinanden, deler med $2h$ og omarrangerer, får vi

$$f'(x) = \frac{1}{2h}(f(x+h) - f(x-h)) - \frac{h^2}{12}(f'''(\xi_1) + f'''(\xi_2)),$$

hvilket viser, at approksimationen

$$f'(x) = \frac{1}{2h}(f(x+h) - f(x-h)) \quad (3.2)$$

har en trunkeringsfejl af orden $O(h^2)$, hvilket er markant bedre end $O(h)$. Man kan bruge Taylors formel med restled på lignende vis til at vise

$$f''(x) = \frac{1}{h^2}(f(x+h) - f(x-h)) - \frac{h^2}{12}f^{(4)}(\xi)$$

for et $\xi \in (x-h, x+h)$, hvilket viser, at approksimationen for den andenafledte i x givet ved

$$f''(x) \approx \frac{1}{h^2}(f(x+h) - f(x-h))$$

har en trunkeringsfejl af orden $O(h^2)$.

Eksempel 3.5.8. Lad os beregne den afledte af sin i $x = 1$. Vi benytter både den først beskrevne metode samt den bedre metode ovenover. For $h = 0.1$ kunne det se sådan ud i Python:

```
import numpy as np
h = 0.1

# simpel metode
print("h=0.1:", (np.sin(1 + h) - np.sin(1))/h)

# forbedret metode
print("h=0.1:", (np.sin(1 + h) - np.sin(1 - h))/(2*h))
```

I nedenstående tabel har vi beregnet approksimationen for fire forskellige værdier af h .

Tabel 3.1: Tabel over numeriske approksimationer af den afledte af $\sin(x)$ i $x = 1$.

h	Simpel metode	Forbedret metode
0.1	0.4973637525353891	0.53940225216976
0.01	0.536085981011869	0.5402933008747335
0.001	0.5398814803603269	0.5403022158176896
0.0001	0.5402602314186211	0.5403023049677103

Sammenlign med den "sande" værdi på 0.5403023058681398. Vi ser, at den forbedrede metode med $h = 0.0001$ først afviger fra denne værdi på niende decimal, og at for selv den "store" værdi $h = 0.1$, er approksimationen meget præcis.

○

Kan vi opnå yderligere præcision end et fejled af orden $O(h^2)$. Svaret er ja, og idéen er sådan set simpel. Den følgende teknik kaldes *Richardson-ekstrapolation*. Vi antager, at f er k gange differentielabel og skriver

$$f(x+h) \approx f(x) + f'(x)h + \frac{f''(x)}{2}h^2 + \frac{f'''(x)}{6}h^3 + \cdots + \frac{f^{(k)}(x)}{k!}h^k,$$

$$f(x-h) \approx f(x) - f'(x)h + \frac{f''(x)}{h^2} - \frac{f'''(x)}{6}h^3 + \cdots + (-1)^k \frac{f^{(k)}(x)}{k!}h^k.$$

På samme måde som tidligere ser vi, at hvis vi trækker det andet udtryk fra det første, vil alle led med lige potenser af h gå ud, så vi får

$$f(x+h) - f(x-h) \approx 2f'(x)h + \frac{2}{3!}f'''(x)h^3 + \frac{2}{5!}f^{(5)}(x)h^5 + \cdots$$

og dermed fås

$$f'(x) \approx \frac{1}{2h}(f(x+h) - f(x-h)) - \left(\frac{1}{3!}h^2f'''(x) + \frac{1}{5!}h^4f^{(5)}(x) + \frac{1}{7!}h^6f^{(7)}(x) + \cdots\right).$$

Lad nu for overskuelighedens skyld $\varphi(h) = (f(x+h) - f(x-h))/2h$ betegne vores approksimation til $f'(x)$, og lad os skrive

$$f'(x) \approx \varphi(h) + a_2h^2 + a_4h^4 + a_6h^6 + \cdots$$

for $a_2 = -f'''(x)/3!$, $a_4 = f^{(5)}(x)/5!$ osv. Som set tidligere er trunkeringsfejlen af orden $O(h^2)$. Vi ser, at det dominerende led er a_2h^2 , og vi søger at eliminere dette. Det er her, at Richardson-ekstrapolation kommer ind i billedet. Start med at skrive ovenstående udtryk ud for $h/2$ i stedet for h :

$$f'(x) \approx \varphi(h/2) + a_2h^2/4 + a_4h^4/16 + a_6h^6/64 + \cdots$$

Vi ser da, at

$$4f'(x) \approx 4\varphi(h/2) + a_2h^2 + a_4h^4/4 + a_6h^6/16 + \cdots,$$

og vi kan nu eliminere a_2h^2 med følgende snedige subtraktion:

$$3f'(x) = 4f'(x) - f'(x) \approx 4\varphi(h/2) - \varphi(h) - 3a_4h^4/4 - 15a_6h^6/16 - \cdots$$

Dermed har approksimationen

$$f'(x) \approx \frac{4}{3}\varphi(h/2) - \frac{1}{3}\varphi(h)$$

en trunkeringsfejl af orden $O(h^4)$. En substantiel forbedring fra $O(h^2)$. Dette kalder vi en Richardson-ekstrapolation af første orden. Vi kan i principippet fortsætte denne procedure så mange gange, vi vil og lave Richardson-ekstrapulationer af højere og højere orden. Lader vi

$$\psi(h) = \frac{4}{3}\varphi(h/2) - \frac{1}{3}\varphi(h)$$

være vores approksimation til $f'(x)$ med Richardson-ekstrapolation af første orden, da overlader vi det til læseren at verificere, at anden-ordens Richardson-ekstrapulationen bliver

$$f'(x) \approx \frac{16}{15}\psi(h/2) - \frac{1}{15}\psi(h)$$

med en trunkeringsfejl af orden $O(h^6)$.

Interpolation

Inden vi springer videre til det næste centrale emne, nemlig numerisk integration, så tager vi en kort omvej og præsenterer nogle metoder til *interpolation*. Dette gør præsentationen af numerisk integration meget mere elegant. At *interpolere* betyder lidt løst at "gå gennem punkter". Polynomiel interpolation, som vi her skal fokusere på, betyder altså bestemmelse af et polynomium, som går gennem en række fastlagte punkter.

Definition 3.5.9. Lad $(x_0, y_0), \dots, (x_n, y_n)$ være $n + 1$ punkter i \mathbb{R}^2 , således at x_i 'erne er parvist forskellige. Da siger vi, at polynomiet p interpolerer de $n + 1$ punkter, hvis

$$p(x_i) = y_i, \quad i = 0, \dots, n.$$

Hvordan bestemmer vi et interpolerende polynomium? Tricket er at simplificere problemet.

Definition 3.5.10. Lad $(x_0, y_0), \dots, (x_n, y_n)$ være $n + 1$ punkter i \mathbb{R}^2 . Lad

$$p_i(x) = \prod_{j:j \neq i} (x - x_j).$$

Da definerer vi *kardinalpolynomiet* l_i ved

$$l_i(x) = \frac{p_i(x)}{p_i(x_i)}.$$

p_i er altså polynomiet givet som produktet af alle faktorerne $(x - x_j)$ bortset fra $x - x_i$. Vi ser, at $p_i(x_j) = 0$ for alle $j \neq i$, idet én af faktorerne vil være lig $x_j - x_j = 0$. Vi bemærker også, at p_i har grad n , da vi har n faktorer i produktet, alle af grad 1. Det følger, at kardinalpolynomierne opfylder $l_i(x_j) = 0$ for alle $j \neq i$, mens

$$l_i(x_i) = \frac{\prod_{j:j \neq i} (x_i - x_j)}{\prod_{j:j \neq i} (x_i - x_j)} = 1.$$

Bemærk, at vi aldrig deler med nul, idet alle x 'erne er antaget at være forskellige. Hvis vi nu lader p være givet ved

$$p(x) = \sum_{j=0}^n y_j l_j(x)$$

har vi bestemt et polynomium, som opfylder $p(x_i) = y_i$ for alle i , altså et interpolerende polynomium.

Definition 3.5.11 (Lagrangeformen af det interpolerende polynomium). Polynomiet p defineret lige ovenover kaldes Lagrangeformen af et interpolerende polynomium for punkterne $(x_0, y_0), \dots, (x_n, y_n)$.

Lagrangeformen af et interpolerende polynomium giver en simpel metode til at konstruere interpolerende polynomier. Specielt har vi vist, at der altid eksisterer et interpolerende polynomium. Er dette polynomium også unikt? Svaret er ja, og en elegant måde at indse dette er gennem lineær algebra med den såkaldte *Vandermonde*-metode.

Lagrange-polynomiet brugte kardinalpolynomierne l_i som en slags byggeklodser. Hvad med at bruge $1, x, \dots, x^n$ i stedet? Vi skal dermed finde et polynomium

$$p(x) = a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + \dots + a_n x^n,$$

så $p(x_i) = y_i$ for alle i . Vi kan skrive dette som et ligningssystem, nemlig

$$\begin{pmatrix} 1 & x_0 & x_0^2 & \dots & x_0^n \\ 1 & x_1 & x_1^2 & \dots & x_1^n \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ 1 & x_n & x_n^2 & \dots & x_n^n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \\ \vdots \\ a_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} y_0 \\ y_1 \\ \vdots \\ y_n \end{pmatrix},$$

hvor koefficientmatricen kaldes *Vandermondematricen*.

Proposition 3.5.12 (Interpolationssætningen). *Givet punkter $(x_0, y_0), \dots, (x_n, y_n)$, hvor x_i erne er parvist forskellige, da eksisterer der et entydigt polynomium p af grad n , sådan at $p(x_i) = y_i$ for alle $i = 0, \dots, n$.*

Bevis. Betragt konstruktionen med Vandermondematricen ovenover. Hvis vi kan vise, at denne matrix er såkaldt ikke-singulær, dvs. hvis vi kan vise, at

$$a_0 \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ \vdots \\ 1 \end{pmatrix} + a_1 \begin{pmatrix} x_0 \\ x_1 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} + \cdots + a_n \begin{pmatrix} x_0^n \\ x_1^n \\ \vdots \\ x_n^n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}$$

medfører $a_0 = a_1 = \cdots = a_n = 0$, da er vi færdige. Dette betyder nemlig, at der findes en entydig løsning til ligningssystemet og dermed også et unikt interpolerende polynomium. Hvis der eksisterede en ikke-nul løsning $(a_0, \dots, a_n) \neq 0$ til ovenstående ligningssystem, da ville vi have et ikke-nul polynomium af grad højest n med $n+1$ rødder (nemlig x_0, \dots, x_n). Dette er i modstrid med algebraens fundamentalsætning, og dermed kan det ønskede konkluderes. ■

Eksempel 3.5.13. Betragt de tre punkter $(1, 0), (4, 2), (5, 1)$. Vi ønsker at bestemme det interpolerende polynomium p af grad 2. Vi starter med at benytte Lagranges metode. Vi ser, at kardinalpolynomierne er

$$\begin{aligned} l_1(x) &= \frac{(x-4)(x-5)}{(1-4)(1-5)} = \frac{x^2 - 9x + 20}{12}, \\ l_2(x) &= \frac{(x-1)(x-5)}{(4-1)(4-5)} = \frac{x^2 - 6x + 5}{-3}, \\ l_3(x) &= \frac{(x-1)(x-4)}{(5-1)(5-4)} = \frac{x^2 - 5x + 4}{4}, \end{aligned}$$

hvilket giver det endelige interpolerende polynomium

$$\begin{aligned} p(x) &= 0 \cdot l_1(x) + 2 \cdot l_2(x) + 1 \cdot l_3(x) \\ &= -\frac{2}{3}x^2 + 4x - \frac{10}{3} + \frac{1}{4}x^2 - \frac{5}{4}x + 1 \\ &= -\frac{5}{12}x^2 + \frac{11}{4}x - \frac{7}{3}. \end{aligned}$$

Vi bestemmer nu polynomiet med Vandermondemetoden. Ligningssystemet bliver

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1 & 4 & 16 \\ 1 & 5 & 25 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \\ a_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 2 \\ 1 \end{pmatrix},$$

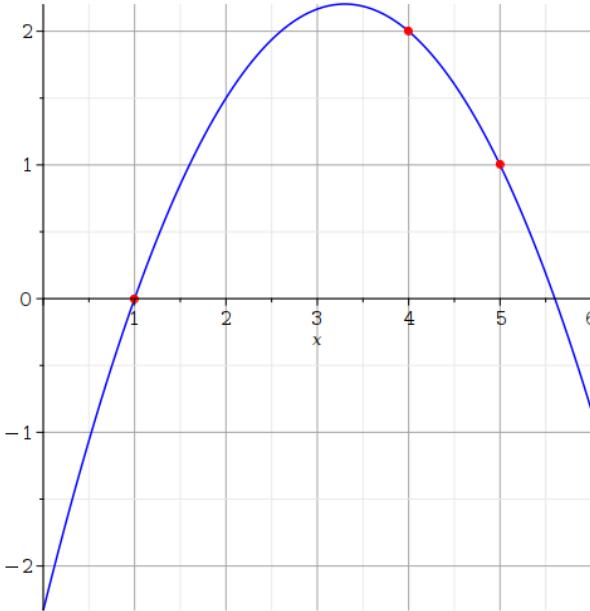
og vi løser dette med en totalmatrix, som vi sætter på reduceret echelonform:

$$\begin{aligned} \left(\begin{array}{ccc|c} 1 & 1 & 1 & 0 \\ 1 & 4 & 16 & 2 \\ 1 & 5 & 25 & 1 \end{array} \right) &\rightarrow \left(\begin{array}{ccc|c} 1 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 3 & 15 & 2 \\ 0 & 4 & 24 & 1 \end{array} \right) \rightarrow \left(\begin{array}{ccc|c} 1 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 5 & 2/3 \\ 0 & 1 & 6 & 1/4 \end{array} \right) \\ &\rightarrow \left(\begin{array}{ccc|c} 1 & 0 & -4 & -2/3 \\ 0 & 1 & 5 & 2/3 \\ 0 & 0 & 1 & -5/12 \end{array} \right) \rightarrow \left(\begin{array}{ccc|c} 1 & 0 & 0 & -7/3 \\ 0 & 1 & 0 & 11/4 \\ 0 & 0 & 1 & -5/12 \end{array} \right), \end{aligned}$$

hvilket giver løsningen $a_0 = -7/3, a_1 = 11/4$ og $a_2 = -5/12$ og dermed løsningen

$$p(x) = -\frac{5}{12}x^2 + \frac{11}{4}x - \frac{7}{3}.$$

Dette stemmer overens med det forrige resultat, ligesom det burde. Polynomiet kan herunder ses tegnet ind sammen med de tre punkter.



Figur 3.1: Punkterne $(1, 0)$, $(4, 2)$, $(5, 1)$ tegnet ind sammen med det interpolerende polynomium.

○

Hvilken metode er bedst? Hvis punkterne er fastlagt, og ingen nye punkter skal tilføjes, så er Lagrange overlegen. Dog er Vandermonde-metoden nem at implementere, hvis man blot har få værkøjer på plads, og den numeriske løsning af ligningssystemet kan gøres meget effektivt. Dog har Vandermondemetoden ulemper, at matricen ofte er såkaldt dårligt *konditioneret*, hvilket er jargon for, at matricen kan være specifiseret på en måde, som gør numerisk upræcision problematisk. Begge metoder lider under, at alle beregninger skal gøres forfra, hvis blot man tilføjer ét punkt mere. Der findes en tredje metode, som bedre håndterer denne situation kaldet *Newton's metode*, som vi dog ikke kommer ind på her.

Numerisk integration

Numerisk integration omhandler kort fortalt om at estimere bestemte integraler. Dette kan som tidligere nævnt ofte være nødvendigt, da vi ikke altid kan opskrive en stamfunktion eksplisit. Her viser interpolation sig at være nyttigt.

Numerisk integration baseret på interpolation

Lad $f(x)$ være en givet funktion og a, b to punkter. Det er oplagt at estimere integralet af $f(x)$ over $[a, b]$ ved først at approksimere f med en anden funktion g , som vi ved, hvordan vi skal integrere. Da er en approksimation givet ved

$$\int_a^b f(x)dx \approx \int_a^b g(x)dx.$$

Vi kan tage udgangspunkt i at vælge en række knudepunkter x_0, x_1, \dots, x_n i $[a, b]$ og lade g være lig det interpolerende polynomium p for $(x_0, f(x_0)), \dots, (x_n, f(x_n))$. Skriver vi p på Lagrangeform

$$p(x) = \sum_{i=0}^n f(x_i)l_i(x)$$

med l_i kardinalpolynomierne fra før, har vi

$$\int_a^b f(x)dx \approx \sum_{i=1}^n f(x_i) \int_a^b l_i(x)dx.$$

Hvis afstanden mellem alle knudepunkterne er den samme, $x_{i+1} - x_i = h$ for alle i , kaldes ovenstående approksimation en *Newton–Cotes-formel*. Denne approksimation bruges sjældent i ovenstående form. Det er mere typisk at anvende specialtilfælde, som vi nu skal studere.

Trapez-reglen

Lad os betragte det simpleste specialtilfælde af Newton–Cotes-formlen ovenover. Lad os sige, at vi vælger to knudepunkter, nemlig $x_0 = a$ og $x_1 = b$. Da bliver kardinalpolynomierne

$$l_0(x) = \frac{b-x}{b-a} \quad \text{og} \quad l_1(x) = \frac{x-a}{b-a},$$

og dermed er

$$\int_a^b l_0(x)dx = \frac{1}{b-a} \int_a^b b-x dx = \frac{1}{b-a} \left[bx - \frac{1}{2}x^2 \right]_a^b = \frac{(b-a)^2}{2(b-a)} = \frac{b-a}{2},$$

og med tilsvarende beregning fås

$$\int_a^b l_1(x)dx = \frac{b-a}{2}.$$

Newton–Cotes-approksimationen bliver altså

$$\int_a^b f(x)dx \approx \frac{b-a}{2}(f(a) + f(b)).$$

Ved at omskrive højresiden som

$$\frac{b-a}{2}(f(a) + f(b)) = \frac{b-a}{2}(2f(a) + f(b) - f(a)) = (b-a)f(a) + \frac{f(b) - f(a)}{b-a},$$

kan vi se, at dette er arealet af trapezen udspændt af $a, b, f(a)$ og $f(b)$. Dermed kaldes denne approksimation for *Trapezmetoden/Trapezreglen*. Det er naturligvis ikke smart at vælge kun to knudepunkter, specielt ikke hvis intervallet $[a, b]$ er bredt. Lad os sige, at vi i stedet vælger knudepunkterne $a = x_0, x_1, \dots, x_n = b$. Ved at bruge Trapezmetoden på hvert delinterval $[x_i, x_{i+1}]$ får vi approksimationen

$$\int_a^b f(x)dx = \sum_{i=0}^{n-1} \int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x)dx \approx \frac{1}{2} \sum_{i=0}^{n-1} (x_{i+1} - x_i)(f(x_i) + f(x_{i+1})).$$

Det er typisk i praksis at vælge en uniform inddeling, dvs. $x_i = a + ih$, hvor $h = (b-a)/n$. Ved at forøge n gør vi automatisk inddelingen finere, og vi opnår dermed bedre approksimationer. I dette tilfælde bliver Trapezreglen til

$$\int_a^b f(x)dx \approx \frac{h}{2} \left(f(a) + 2 \sum_{i=1}^{n-1} f(a + ih) + f(b) \right)$$

Eksempel 3.5.14. Betragt integralet

$$\int_0^1 e^{x^2} dx,$$

som vi ikke er i stand til at løse analytisk. Lad os benytte Trapezmetoden. Følgende Pythonscript definerer vores integrand samt Trapezmetoden.

```

import numpy as np

def f(x):
    return np.exp(x**x)

def Trapez(n):
    h = 1/n
    res = f(0) + f(1)
    for i in range(n):
        res = res + 2*f((i + 1)*h)
    res = h * res/2
    return res

```

Funktionen tager antal punkter n som input, og n er relateret til h via $h = 1/n$. Vi regner nu integralet for forskellige værdier af n . Resultaterne er i tabellen herunder.

Tabel 3.2: Tabel over numeriske approksimationer af integralet af e^{x^2} over $[0, 1]$.

n	Approksimation
10	1.7390028755847031
10^2	1.4898798681338625
10^3	1.465370480782536
10^4	1.462923578620497
10^5	1.4626789287707824
10^6	1.462654464189444

Ifølge Maple er den "sande" værdi givet ved 1.462651746. ○

Eksempel 3.5.15. Betragt integralet

$$\int_0^\pi \cos(x)dx.$$

Vi kan sagtens udregne dette integral til

$$\int_0^\pi \cos(x)dx = [\sin(x)]_0^\pi = 0 - 0 = 0.$$

Hvilke resultater opnår vi med Trapezreglen? Vi kan igen benytte Trapezmetoden og få nedenstående tabel.

Tabel 3.3: Tabel over numeriske approksimationer af integralet af $\cos(x)$ over $[0, \pi]$.

n	Approksimation
10	-0.3141592653589791
10^2	-0.03141592653589807
10^3	-0.003141592653589549

Kører man Pythonkoden (som er næsten identisk med den i forrige eksempel), kan man se, at der blot kommer et nul mere på, hver gang man sætter et nul på n . Altså kan Trapezmetoden blive arbitrært præcis.

○

Til slut vil vi nævne, at fejlen ved at benytte Trapezformlen er $O(h^2)$, hvor $h = (b - a)/n$. At vise dette kræver flere værktøjer fra matematisk analyse, end vi har præsenteret her. Vi vil i stedet kort diskutere, hvordan denne fejl kan reduceres gennem Richardson-ekstrapolation. Lad

$$I(h) = \frac{h}{2} \left(f(a) + 2 \sum_{i=1}^{n-1} f(a + ih) + f(b) \right)$$

3.5. INTRODUKTION TIL NUMERISKE METODER

betegne Trapezapproksimationen. Idet fejlen er $O(h^2)$, har vi

$$\begin{aligned}\int_a^b f(x)dx &= I(h) + k_1 h^2 + \dots \\ \int_a^b f(x)dx &= I(h/2) + k_1 (h/2)^2 + \dots,\end{aligned}$$

hvor k_1 er en konstant. Dermed har vi

$$3 \int_a^b f(x)dx = 4 \int_a^b f(x)dx - \int_a^b f(x)dx = 4I(h/2) - I(h) + k_2 h^3 + \dots,$$

og dermed vil approksimationen

$$\varphi(h) = 4I(h/2) - I(h)$$

have en trunkeringsfejl af orden $O(h^3)$. Man kan naturligvis fortsætte og blive ved med at opnå forbedringer.

Opgaver

- **Opgave 3.5.1:**

Betrægt grænseovergangen $x \rightarrow \infty$. Vis følgende.

- 1) $x = o(e^x)$.
- 2) $x \log(x) = o(x^2)$.
- 3) $\log(x)^2 = o(x)$.

Vink: L'Hospitals regel kan være nyttig.

- **Opgave 3.5.2:**

Betrægt grænseovergangen $x \rightarrow \infty$. Afgør, om følgende udsagn er sande eller falske. Vis ved beregning eller et argument, at dit svar er korrekt.

- 1) $x^3 = o(x^5)$.
- 2) $x = O(x)$.
- 3) $x = O(\sqrt{x})$.
- 4) $\sin(x) = O(x)$.
- 5) $f(x) = O(g(x))$ er ækvivalent med $f(x) = O(kg(x))$, hvor k er en konstant.
- 6) Lad $h(x) \geq 5$ for alle x . Da gælder $x = o(h(x)x)$ altid.

- **Opgave 3.5.3:**

Betrægt grænseovergangen $x \rightarrow 0$. Afgør, om følgende udsagn er sande eller falske. Vis ved beregning eller et argument, at dit svar er korrekt.

- 1) $x = o(x^2)$.
- 2) $x = o(e^x)$.
- 3) $x + 1 = O(x)$
- 4) $\log(x) = o(x)$.
- 5) $x \sin(x) = o(x)$.
- 6) $x \cos(x) = o(x)$.

- **Opgave 3.5.4:**

Gælder der, at $x = O(x \cos(x))$ for $x \rightarrow \infty$? Argumentér for dit svar. Hvad med udsagnet $x = O(x^2 \cos(x))$ i samme grænseovergang?

- **Opgave 3.5.5:**

Diskutér med sidemakkeren, hvad forskellen er på analytiske metoder og numeriske metoder.

- **Opgave 3.5.6:**

Kan du finde en type funktion f , hvor approksimationen

$$f'(x) \approx \frac{f(x+h) - f(x)}{h}$$

er eksakt?

- **Opgave 3.5.7:**

I denne opgave skal vi få noget træning i at implementere ovenstående metoder.

- 1) Skriv et program, som tager en funktion f , et punkt x og et tal $h > 0$ som input og giver følgende approksimationer for $f'(x)$:

1. Den simple approksimation i ligning (3.1).
2. Den forbedrede approksimation i ligning (3.2).
3. Richardson-ekstrapolation af første orden.

4. Richardson-ekstrapolation af anden orden.

2) Udvid Eksempel 3.5.8 ved at tilføje to ekstra kolonner med Richardson-ekstrapolation af første og anden orden for den afdelte af $\sin(x)$ i $x = 1$.

3) Betragt nu funktionen $f(x) = x^{\log(x)}$. Kør dit program med dette f , $x = 5$ og $h = 0.1$. Bestem et eksakt udtryk for $f'(x)$ og sammenlign. Giver resultaterne mening ift. teorien? Vink: Til at bestemme $f'(x)$ eksakt kan du bruge

$$x^{\log x} = \exp(\log(x)^2),$$

men du skal naturligvis forstå, hvorfor denne omskrivning er korrekt.

4) Test programmet på flere funktioner, du kan komme på. Du er velkommen til at bruge f.eks. NumPy til at regne "eksakte" værdier for $f'(x)$ til sammenligning.

•• Opgave 3.5.8:

I teksten nævnte vi følgende resultat for en fire gange differentiabel funktion:

$$f''(x) = \frac{1}{h^2}(f(x+h) - f(x-h)) - \frac{h^2}{12}f^{(4)}(\xi)$$

for et passende $\xi \in (x-h, x+h)$. Bevis dette udtryk.

•• Opgave 3.5.9:

Foretag Richardson-ekstrapolation af anden orden for at opnå approksimationen

$$\theta(h) = \frac{16}{15}\psi(h/2) - \frac{1}{15}\psi(h),$$

hvor $\psi(h) = 4\varphi(h/2)/3 - \varphi(h)/3$ og $\varphi(h) = (f(x+h) - f(x-h))/2h$.

••• Opgave 3.5.10:

I denne opgave betragter vi approksimationer til den tredjeafledte af en funktion f .

1) Vis approksimationen

$$f'''(x) \approx \frac{1}{h^3}(f(x+3h) - 3f(x+2h) + 3f(x+h) - f(x)).$$

2) Vis approksimationen

$$f'''(x) \approx \frac{1}{2h^3}(f(x+2h) - 2f(x+h) + 2f(x-h) - f(x-2h)).$$

3) Hvad er ordenen af fejleddene i ovenstående approksimationer? Hvilken metode er mest præcis?

••• Opgave 3.5.11:

I denne opgaver tager vi forrige opgave et skridt videre og betragter approksimationer til den fjerdeafledte af en funktion f .

1) Vis approksimationen

$$f^{(4)}(x) \approx \frac{1}{h^4}(f(x+4h) - 4f(x+3h) + 6f(x+2h) - 4f(x+2h) + f(x)).$$

2) Vis approksimationen

$$f^{(4)}(x) \approx \frac{1}{h^4}(f(x+2h) - 4f(x+h) + 6f(x) - 4f(x-h) + f(x-2h)).$$

3) Hvad er ordenen af fejledene i ovenstående approksimationer? Hvilken metode er mest præcis?

• **Opgave 3.5.12:**

Betræt interpolation med to punkter (x_0, y_0) og (x_1, y_1) med $x_0 \neq x_1$. Hvordan ville du foretage interpolation i dette tilfælde?

•• **Opgave 3.5.13:**

Betræt de tre punkter $(1, 0), (2, 4), (5, 2)$.

1) Foretag interpolation med Lagrangemetoden.

2) Foretag interpolation med Vandermondemetoden.

• **Opgave 3.5.14:**

Lad f være en funktion, $[a, b] = [0, 1]$ og $n = 2$ (antag en uniform inddeling). Vis, at Newton–Cotes-approksimationen bliver

$$\int_0^1 f(x)dx \approx \frac{1}{6}f(0) + \frac{2}{3}f\left(\frac{1}{2}\right) + \frac{1}{6}f(1).$$

•• **Opgave 3.5.15:**

Betræt integralet

$$\int_0^1 \frac{e^{-x}}{1+x} dx.$$

Estimér integralet ved at benytte Trapezformlen med $h = 0.5$ og $h = 0.25$. Her behøver du kun en simpel lommeregner. Sammenlign med det "eksakte" resultat på 0.4634219926.

••• **Opgave 3.5.16:**

I denne opgave skal vi implementere og teste Trapezreglen.

1) Skriv et program, som implementerer Trapez-reglen. Inputtet skal være en funktion f , to punkter a og b samt n (antallet af inddelinger). Outputtet skal være en approksimation til

$$\int_a^b f(x)dx.$$

2) Test dit program på nogle simple velkendte integraler. F.eks.

$$\int_0^1 x dx, \quad \int_0^\pi \cos(x) dx, \quad \int_0^{\log(2)} e^x dx$$

og så videre. Sammenhold med det analytiske resultat og kommentér.

3) Betragt integralet

$$\int_0^\pi \cos(3 \cos(x)) dx.$$

Dette integral kan ikke løses analytisk. Brug dit program til at lave en approksimation. Sammenhold dit svar med et CAS-værktøj såsom Maple eller med en anden numerisk integrator, f.eks. i Python.

•• **Opgave 3.5.17:**

Hvad bliver Newton–Cotes-approksimationen for en funktion f på intervallet $[0, 1]$ med $n = 3$?

3.6 Numerisk løsning af ordinære differentialligninger

Løsning af differentialligninger med numeriske metoder er et stort område af numerisk analyse, og vi kommer kun til at præsentere de mest basale metoder. I denne sektion specialiserer vi yderligere til såkaldte *ordinære* differentialligninger, som også kaldes ODEér (Ordinary Differential Equations). Dette er differentialligninger, hvor funktionen, vi ønsker at løse for, kun afhænger af én variabel. Vi vil først undersøge problemer af typen

$$f'(x) = g(x, f(x)), \quad f(x_0) = a,$$

altså søger vi en partikulær løsning til differentialligningen $f'(x) = g(x, f(x))$. Sådan en løsning er dog ikke givet som en funktion, men en approksimation i form af en række punkter x_0, x_1, \dots, x_n og en række funktionsværdier $f(x_0), f(x_1), \dots, f(x_n)$.

Taylorudvikling og Eulers metode

Den første og simpleste metode, vi præsenterer, bygger på Taylorpolynomier. Vi har (for et fast x)

$$f(x+h) = f(x) + f'(x)h + \frac{f''(x)}{2}h^2 + \frac{f'''(x)}{6}h^3 + \dots,$$

og ved at bruge differentialligningen $f'(x) = g(x, f(x))$ har vi

$$f'(x) = \frac{dg}{dx}(x, f(x)) + \frac{dg}{dx}(x, f(x))f'(x)$$

med kædereglen. Og vi kan i princippet fortsætte, så længe det skal være og regne $f''(x), f'''(x)$ osv. med differentialligningen. Vi kan herudfra løse differentialligningen på et interval $[x_0, x']$ ved at vælge et tilpas stort n og sætte $x_i = x_0 + ih$ for $h = (x' - x_0)/n$. Bemærk, at $x_n = x'$. Lad os sige, at vi har fundet udtryk for til og med den m 'te afledte af f . Vi kan da lave følgende procedure:

1. Sæt $x = x_0, f(x_0) = a$.
2. For hvert $k = 1, \dots, n$, gør følgende:
 - a) Beregn $f'(x) = \frac{dg}{dx}(x, f(x)) + \frac{dg}{dx}(x, f(x))f'(x), f''(x) = \dots$ og så videre til og med $f^{(m)}(x)$.
 - b) Sæt $f(x+h) = f(x) + h(f'(x) + h/2(f''(x) + h/3(f'''(x) + \dots)) \dots)$, hvor mønsteret fortsætter op til den m 'te afledte. Gem værdien $f(x+h)$ som $f(x_k)$.
 - c) Sæt $x = x + h$.
3. Giv nu alle x_k og $f(x_k)$ som output. Disse udgør vores tabel af approksimerede funktionsværdier.

Vælger vi at inkludere m afledte af f (under forudsætning, at f selvfølgelig er differentierbar m gange), får vi et fejled på $O(h^{m+2})$ i beregningen af $f(x)$ for alle k . Dette fremstår måske mere optimistisk, end det egentlig er. Selvom vi ved, hvordan fejlene opfører sig lokalt, så kan vi være uhedlige. Fejlene kan nemlig ophøbe sig "i én retning" og dermed akkumulere i hvert trin. Derfor bør man være skeptisk overfor ens løsninger med denne metode. Ikke desto mindre opfører metoden sig på mange problemer i praksis. Fejlen på $O(h^{m+2})$ i beregningen af $f(x)$ i hvert trin kaldes en *lokal* trunkeringsfejl. Idet vi har i størrelsesordenen af $1/h$ trin i algoritmen, bliver den *globale* trunkeringsfejl af orden $O(h^{m+1})$.

De generelle udtryk bliver hurtigt uoverskelige, så lad os i stedet tage et konkret eksempel.

Eksempel 3.6.1. Betragt differentialligningen

$$f'(x) = \cos(x) + \sin(f(x)) + 2x, \quad f(1) = 2.$$

Vi har da

$$\begin{aligned} f'(x) &= -\sin(x) + \cos(f(x))f'(x) + 2, \\ f''(x) &= -\cos(x) - \sin(f(x))f'(x)^2 + \cos(f(x))f''(x), \\ f'''(x) &= \sin(x) - \cos(f(x))f'(x)^3 + \sin(f(x))f'(x)f''(x), \end{aligned}$$

hvorefter vi ikke gider at regne flere afledte. Lad os sige, at Vi kan herfra løse differentialligningen som følger. Start med at lade $f(1) = 2$ og $x = 2$. Lad os sige, at vi er interesseret i at regne frem til $x = 10$. Vælg nu et stort n og lad $h = (10 - 1)/n$. Vi gør da, for alle $k = 1, \dots, n$ følgende:

1. Sæt $f'(x) = -\sin(x) + \cos(f(x))f'(x) + 2$.
2. Sæt $f''(x) = -\cos(x) - \sin(f(x))f'(x)^2 + \cos(f(x))f''(x)$.
3. Sæt $f'''(x) = \sin(x) - \cos(f(x))f'(x)^3 + \sin(f(x))f'(x)f''(x)$.
4. Sæt $f(x + h) = f(x) + h(f'(x) + h/2(f''(x) + h/3f'''(x)))$. Gem $f(x_k) = f(x + h)$.
5. Sæt $x = x + h$.

Denne procedure giver os x_0, x_1, \dots, x_n samt listen af approksimerede $f(x_0), f(x_1), \dots, f(x_k)$.
○

Vi ser umiddelbart en klar fordel og en klar ulempe ved denne metode. Fordelen er, at vi kan opnå så høj en præcision, vi vil have ved blot at tilføje flere og flere afledte i trin 2 a). Ulempen er naturligvis, at vi skal differentiere f mange gange, og disse udtryk kan blive komplicerede. Dog kan moderne CAS-værktøjer såsom Maple differentiere analytisk, og det er i principippet muligt at overlade differentieringen til computeren.

Når det så er sagt, så er der også en vis overskuelighed i at vælge et lavt antal afledte (eller måske slet ingen), når vi skal beregne $f(x)$. Derudover kræver beregningen af de afledte i hvert trin også tid for computeren, så i sidste ende kan man vælge at gøre h mindre i stedet for at inkludere flere afledte. Det mest populære og simpleste specialtilfælde af ovenstående algoritme er *Eulers metode* givet ved

$$f(x + h) \approx f(x) + hg(x, f(x))$$

svarende til at vælge $m = 0$ afledte. Metoden er simpel og nem at fortolke og implementere. Ulempen er naturligvis, at den globale trunkeringsfejl er $O(h)$, så i praksis skal h vælges meget lille, før man kan være sikker på at opnå tilstrækkelig præcision. Vi nævner også, at man benytte den alternative approksimation til den afledte

$$f'(x) = \frac{f(x + h) - f(x - h)}{2h} + O(h^2)$$

fra tidligere. Dette giver os

$$f(x + h) = f(x - h) + 2hg(x, f(x)) + O(h^3),$$

og dermed bliver den globale trunkeringsfejl fra denne metode $O(h^2)$ i stedet for $O(h)$ som fra Euler-metoden. Den lille pris ved denne forbedring er, at vi ikke kun skal regne $f(x + h)$ ud fra den forrige værdi, men ud fra de to forrige værdier $f(x)$ og $f(x - h)$.

Runge–Kutta-metoder

Runge–Kutta-metoder er mere sofistikerede end de tidligere metoder, vi har præsenteret. Specielt overkommer de den åbenlyse ulempe, at man skal kende højereordens afledte af f for at reducere ordenen af trunkeringsfejlen. Samtidig reducerer de den globale trunkeringsfejl betydeligt. Kombineret med det faktum, at disse metoder er lette at implementere, er Runge–Kutta-metoden af fjerde orden blevet en gylden standard indenfor numeriske metoder til løsning af differentialligninger. Vi starter dog en anelse mere simpelt, nemlig med Runge–Kutta af anden orden.

Andenordens Runge–Kutta

Vi udleder Runge–Kutta af anden orden. For ikke at drukne i notation, laver vi følgende simplificeringer. I stedet for $g(x, f(x))$ skriver vi blot g , og vi undlader i det hele taget at skrive variablene i funktioner. Vi lader i øvrigt

$$g_x := \frac{d}{dx}g(x, u), \quad g_f := \frac{d}{du}g(x, u), \quad g_{xx} := \frac{d}{dx}\frac{d}{dx}g(x, u)$$

osv. betegne de partielle afledte af g . Husk, at vi har differentialligningen $f'(x) = g(x, f(x))$. Vi starter (som altid) med en Taylorudvikling

$$f(x+h) = f(x) + f'(x)h + \frac{f''(x)}{2}h^2 + \frac{f'''(x)}{6}h^3 + \dots,$$

og vi kan eksplisit bestemme de afledte af f ved at benytte differentialligningen og kæderegralen flere gange:

$$\begin{aligned} f'(x) &= g, \\ f''(x) &= g_x + g_f f' = g_x + g_f g, \\ f'''(x) &= g_{xx} + g_x f' + (g_x + g_f g)g_f + g(g_{fx} + g_{ff} g). \end{aligned}$$

Vender vi nu tilbage til Taylorudviklingen fra før, kan vi skrive

$$\begin{aligned} f(x+h) &= f + hg + \frac{1}{2}h^2(g_x + gg_f) + O(h^3) \\ &= f + \frac{1}{2}hg + \frac{1}{2}h(g + hg_x + hgg_f) + O(h^3). \end{aligned}$$

Man kan nu vise ved at bruge Taylors formel i flere variable, at

$$g(x+h, x+hg) = g + hg_x + hgg_f + O(h^2),$$

og dermed har vi

$$f(x+h) = f + \frac{1}{2}hg + \frac{1}{2}hg(x+h, x+hg) + O(h^3).$$

Dermed kan vi skrive

$$f(x+h) = f(x) + \frac{1}{2}(F_1 + F_2),$$

hvor $F_1 = hg(x, f(x))$ og $F_2 = hg(x+h, f(x) + F_1)$. Dette giver vores opdatering af f . Det er denne metode, som går under navnet Runge–Kutta af anden orden, omend den kaldes til tider også *Heuns metode*. Vi kan generalisere denne procedure en smule ved at opdatere f efter reglen

$$f(x+h) \approx f(x) + w_1 hg(x, f(x)) + w_2 hg(x + \alpha h, f(x) + \beta hg(x, f(x)))$$

med restriktionerne

$$w_1 + w_2 = 1, \quad w_2\alpha = \frac{1}{2}, \quad w_2\beta = \frac{1}{2}.$$

Metoden har en lokal trunkeringsfejl på $O(h^3)$, hvilket giver en global trunkeringsfejl på $O(h^2)$ (heraf "anden orden" i navnet). Bemærk, at en løsning er givet ved $w_1 = w_2 = 1/2$ og $\alpha = \beta = 1$, hvilket giver os Heuns metode ovenover.

Fjerdeordens Runge–Kutta

Fjerdeordens Runge–Kutta er langt mere besværlig at udlede, og vi springer det derfor over. Den endelige approksimation er dog ret simpel at opskrive og lyder

$$f(x + h) \approx f(x) + \frac{1}{6}(F_1 + 2F_2 + 2F_3 + F_4),$$

hvor

$$\begin{aligned} F_1 &= hg(x, f(x)), \\ F_2 &= hg(x + h/2, f(x) + F_1/2), \\ F_3 &= hg(x + h/2, f(x) + F_2/2), \\ F_4 &= hg(x + h, f(x) + F_3). \end{aligned}$$

Ligesom andenordens Runge–Kutta har en global trunkeringsfejl på $O(h^2)$, så har fjerdeordens Runge–Kutta en global trunkeringsfejl på $O(h^4)$. Årsagen er, at metoden inkluderer til og med fjerde led i Taylorudviklingen (ligesom vi gjorde det til og med andet led ovenover), hvilket giver en lokal trunkeringsfejl på $O(h^5)$. Denne summeres op over alle trin, som der er $O(1/h)$ af, hvilket forklarer den globale trunkeringsfejl på $O(h^4)$.

Eksempel 3.6.2. Betragt differentialligningen

$$f'(x) = 3x + f(x), \quad f(0) = 1.$$

Vi ønsker at bestemme $f(10)$ med en fjerdeordens Runge–Kutta. Vi ser, at $g(x, y) = 3x + y$. Vores implementering giver følgende tabel.

Tabel 3.4: Tabel med løsningen til $f(10)$ med en fjerdeordens Runge–Kutta.

n	Approksimation
10	84900.91449885479
10^2	88072.1876035049
10^3	88072.86310641449
10^4	88072.863179217

Vi ser, at svaret meget hurtigt stabiliserer sig. Dette er forventeligt, idet fejlen er af orden $O(h^4)$ for $h = 1/n$. Vi undlader bevidst at vise implementeringen af vores Runge–Kutta, da I selv skal gøre det i opgaverne. Kan vi stole på ovenstående resultater? Vi er faktisk så heldige, at vi kan løse denne differentialligning analytisk, idet vi genkender den som en førsteordens lineær differentialligning. Svaret fås med panserformlen til at være

$$f(x) = -3x - 3 + 4e^x.$$

Og dermed er det rigtige svar $f(10) = -33 + 4e^{10} \approx 88072.86316$, som man må sige er ganske tæt på, i hvert fald for $n = 10^3$ og $n = 10^4$. \circ

Afsluttende bemærkninger

Numerisk analyse er et stort felt, og vi har kun skrabet overfladen i dette kapitel. Mange af opgaverne og forklaringerne er fra bogen [5], som også diskuterer mange flere metoder.

Opgaver

• **Opgave 3.6.1:**

Vis, at $f(x) = x^2/4$ løser differentialligningen

$$f'(x) = \sqrt{f(x)}, \quad f(0) = 0.$$

Brug en almindelig lommeregner sammen med Eulermetoden til at approksimere løsningen f og sammenligne nogle af de estimerede funktionsværdier med de korrekte funktionsværdier.

•• **Opgave 3.6.2:**

Brug Eulermetoden med $h = 0.25$ til at bestemme $f(0,1)$, hvor f er løsningen til differentialligningen

$$f'(x) = -xf(x)^2, \quad f(0) = 2.$$

•• **Opgave 3.6.3:**

Betrægt differentialligningen

$$f'(x) = f(x)^2 + f(x)e^x, \quad f(0) = 1.$$

1) Udregn $f'(x)$, $f''(x)$ og $f'''(x)$.

2) Brug nu metoden med Taylorudvikling til at bestemme $f(0.01)$ med ét trin. Brug en almindelig lommeregner.

••• **Opgave 3.6.4:**

I denne opgave implementerer og tester vi Eulermetoden.

1) Skriv et program, som implementerer Eulermetoden. Dit program består af en funktion, der skal tage følgende input:

- To funktioner f og g . f er en funktion af én variabel, mens g er en funktion af to variable.
- Tal x_0, a, x og n , hvor n er antallet af skridt.

Outputtet skal være en vektor af $f(x_k)$ ($x_k = x_0 + kh$, $h = (x - x_0)/n$), som approksimerer f over intervallet $[x_0, x]$, hvor f er løsningen til

$$f'(x) = g(x, f(x)), \quad f(x_0) = a.$$

2) Test dit program med differentialligningen

$$f'(x) = 5f(x), \quad f(0) = 1$$

ved først at løse differentialligningen analytisk. Sammenlign værdierne af f i en række punkter, hvor du bruger både den analytiske og numeriske løsning.

•• **Opgave 3.6.5:**

Betrægt integralet

$$f(x) = - \int_0^x \frac{\log(1-t)}{t} dt.$$

Denne funktion kaldes *dilogaritmefunktionen*.

1) Bestem $f'(x)$ og opstil en differentialligning med randbetegelse for f .

2) Benyt nu Eulermetoden til at approksimere f henover intervallet $[-2, 0]$. Du kan bruge programmet fra Opgave 3.6.4.

3) Lav et plot af funktionen. Sammenlign nogle af dine beregnede værdier for f med et CAS-værktøj såsom Maple (hvis muligt).

•• **Opgave 3.6.6:**

Betrægt det elliptiske integral

$$f(x) = \int_0^x \sqrt{1+t^3} dt.$$

1) Bestem $f'(x)$ og opstil en differentialligning med randbetingelse for f .

2) Benyt nu Eulermetoden til at approksimere f henover intervallet $[0, 5]$. Du kan bruge programmet fra Opgave 3.6.4.

3) Lav et plot af funktionen. Sammenlign nogle af dine beregnede værdier for f med et CAS-værktøj såsom Maple (hvis muligt).

•• **Opgave 3.6.7:**

Betrægt differentialligningen

$$f'(x) = x^2 + f(x)^2 + 2xf(x), \quad f(0) = 7.$$

Løs denne differentialligning over intervallet $[-2, 2]$ med Eulermetoden. Eksperiment med tre værdier af h (eller n) og plot dine tre løsninger. Kommentér.

••• **Opgave 3.6.8:**

I denne opgave skal I implementere og teste fjerdeordens Runge–Kutta-metoden.

1) Skriv et program, som implementerer en fjerdeordens Runge–Kutta. Dit program skal bestå af en funktion, som tager følgende input:

- To funktioner f og g . f er en funktion af én variabel, mens g er en funktion af to variable.
- Tal x_0, a, x og n , hvor n er antallet af skridt.

Outputtet skal være en vektor af $f(x_k)$ ($x_k = x_0 + kh$, $h = (x - x_0)/n$, som approksimerer f over intervallet $[x_0, x]$, hvor f er løsningen til

$$f'(x) = g(x, f(x)), \quad f(x_0) = a.$$

2) Test igen dit program med differentialligningen

$$f'(x) = 5f(x), \quad f(0) = 1.$$

Sammenlign på samme måde som i Opgave 3.6.4.

•• **Opgave 3.6.9:**

Betrægt differentialligningen

$$y'(x) = (2x - 1)y(x), \quad y(0) = 2.$$

1) Løs denne differentialligning analytisk.

2) Sammenlign nu dit svar med approksimationen fra din fjerdeordens Runge–Kutta. Lav gerne et plot og se, at de to svar er tilstrækkeligt tætte på hinanden.

•• **Opgave 3.6.10:**

Lad λ være en parameter og betragt differentialligningen

$$f'(x) = \lambda f(x) + \cos(x) - \lambda \sin(x), \quad f(0) = 0.$$

3.6. NUMERISK LØSNING AF ORDINÆRE DIFFERENTIALLIGNINGER

- 1) Løs differentialligningen analytisk.
- 2) Sammenlign den analytiske løsning med den numeriske fra din fjerdeordens Runge–Kutta. Prøv forskellige værdier af λ . Kommentér på den numeriske præcision for forskellige værdier af λ .

•• **Opgave 3.6.11:**

Bevis, at når en fjerdeordens Runge–Kutta bliver brugt på differentialligningen $f'(x) = \lambda f(x)$, så bliver opdateringstrinnet lig

$$f(x+h) = f(x)(1 + h\lambda + h^2\lambda^2/2 + h^3\lambda^3/6 + h^4\lambda^4/24).$$

••• **Opgave 3.6.12: Tredjeordens Runge–Kutta**

Udled en tredjeordens Runge–Kutta metode givet som følger:

$$f(x+h) \approx f(x) + \frac{1}{9}(2F_1 + 3F_2 + 4F_3),$$

hvor

$$\begin{aligned} F_1 &= hg(x, f(x)), \\ F_2 &= hg(x + h/2, f(x) + F_1/2), \\ F_3 &= hg(x + 3h/4, f(x) + 3F_2/4). \end{aligned}$$

Vink: Du kan genbruge beregningerne fra udledningen af andenordens Runge–Kutta-metoden i teksten.

Kapitel 4

Reaktorlære og reaktionskinetik

4.1 Reaktionskinetik

Reaktionskinetik er læren om, hvor hurtigt en reaktion forløber. I dette afsnit vil vi fokusere på teorien bag gasfasreaktioner.

Ligevægte

En reaktion kan enten være irreversibel eller reversibel. En irreversibel reaktion går kun den ene vej; der dannes kun produkt.



Irreversible reaktioner noteres med en envejspil (\rightarrow).

En reversibel reaktion kan gå begge veje og noteres oftest med \leftrightarrow .



Når en reaktion er reversibel, kan reaktionen forløbe begge veje. Ligevægten opstår, når reaktionerne begge veje forløber lige hurtigt.

$$k_f[A]^a[B]^b = k_b[C]^c[D]^d \Rightarrow K_{eq} = \frac{k_f}{k_b} = \frac{[C]^c[D]^d}{[A]^a[B]^b} \quad (4.1)$$

Hvis reaktionen ikke er i ligevægt, defineres der et K således:

$$K = \frac{[C]^c[D]^d}{[A]^a[B]^b} \quad (4.2)$$

For $K > K_{eq}$, betyder det, at baglænsreaktionen forløber hurtigst og der dermed dannes reaktanter. For $K < K_{eq}$ dannes produkt, idet nævneren er størst, hvilket er ækvivalent med, at forlænsreaktionen er hurtigst.

Ligevægten kan både blive beregnet ud fra koncentration (c) eller tryk (p) for gasfasereaktioner. Her er der følgende sammenhæng:

$$K_c = K_p \left(\frac{p_0}{RT} \right)^\nu, \quad (4.3)$$

hvor ν er ændringen i mol under reaktionen.

Elementar reaktioner

Reaktionen mellem hydrogen og brom til at danne bromsyre følger reaktionsligningen:



KAPITEL 4. REAKTORLÆRE OG REAKTIONS KINETIK

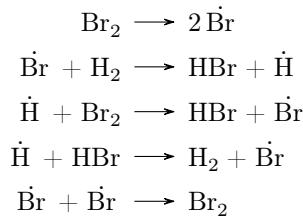
Hvis man så opsætter reaktionshastigheden, ville man måske sige, at den ville se sådan her ud:

$$r_{\text{HBr}} = k \cdot [\text{H}_2] \cdot [\text{Br}] \quad (4.4)$$

Men hvis man eksperimentelt mäter reaktionshastigheden, ender man med en anden ligning:

$$r_{\text{HBr}} = \frac{k \cdot [\text{H}_2][\text{Br}_2]^{\frac{1}{2}}}{1 + k'(\frac{[\text{HBr}]}{[\text{Br}_2]})} \quad (4.5)$$

Den er mere kompliceret, end hvad man lige ville tro. Der er også kommet to reaktionskonstanter i stedet for én. Det er fordi, den første reaktion er en global reaktion og ikke en elementarreaktion. Det vil sige, at det er den reaktion, der sker samlet set. Men i virkeligheden forløber der mange mindre reaktioner. I tilfældet af hydrogen og brom sker der faktisk 5 forskellige reaktioner.



Disse reaktioner kaldes for elementarreaktioner. En reaktion er kun en elementarreaktion, hvis reaktionen beskriver hvad der sker på et atomart plan. Det betyder, at reaktanterne på venstre side rammer ind i hinanden samtidigt og reagerer til produkterne i højre side. Det betyder også, at de fleste elementarreaktioner kun har en eller to reaktanter. Chancen for, at 3 molekyler rammer ind i hinanden samtidigt, er relativt lav. Og det er næsten uhørt, at man finder en elementarreaktion, der har 4 reaktanter. Når man skriver elementarreaktioner, skriver man aldrig reaktionerne som ligevægte, men man skriver dem altid som 2 reaktioner. Én for hver retning reaktionen forløber.

Reaktionshastigheden for en elementarreaktion kan altid beskrives direkte ud fra reaktanterne. Så reaktionshastighederne for elementarreaktionene foroven vil være:

$$\begin{aligned} r_1 &= k_1[\text{Br}_2] \\ r_2 &= k_2[\dot{\text{Br}}][\text{H}_2] \\ r_3 &= k_3[\dot{\text{H}}][\text{Br}_2] \\ r_4 &= k_4[\dot{\text{H}}][\text{HBr}] \\ r_5 &= k_5[\dot{\text{Br}}]^2 \end{aligned}$$

Hvis man skal nå til den rigtige funktion, er man nødt til at samle alle ligningerne.

Gasfasereaktioner

Hvis man vil gå fra elementarreaktionerne til den samlede reaktionshastighed, er man nødt til at kigge på de enkelte molekyler i reaktionerne og ikke på selve reaktionerne. Generelt bliver reaktionsligningerne sat op på følgende måde:

$$\frac{d[A]}{dt} = \sum_{n=1}^N r_f - \sum_{n=1}^N f_b \quad (4.6)$$

Her indgår alle reaktioner, hvor A bliver dannet eller forbrugt. Når A dannes, vil koncentrationen af A øges. Derimod. reaktioner hvor A bliver forbrugt mindskes koncentrationen. Hver enkelt reaktionsudtryk vil være reaktionshastigheden for elementarreaktionen. Hvis vi tager eksemplet med dannelsen af bromsyre, så vil der kunne skrives følgende reaktionsudtryk op.

$$\begin{aligned}\frac{d[Br_2]}{dt} &= -r_1 - r_3 + r_5 = -k_1[Br_2] - k_3[\dot{H}][Br_2] + k_5[\dot{Br}]^2 \\ \frac{d[\dot{Br}]}{dt} &= 2r_1 - r_2 + r_3 + r_4 - 2r_5 = 2k_1[Br_2] - k_2[\dot{Br}][H_2] + k_3[\dot{H}][Br_2] + k_4[\dot{H}][HBr] - 2k_5[\dot{Br}]^2 \\ \frac{d[H_2]}{dt} &= -r_2 + r_4 = -k_2[\dot{Br}][H_2] + k_4[\dot{H}][HBr] \\ \frac{d[\dot{H}]}{dt} &= r_2 - r_3 - r_4 = k_2[\dot{Br}][H_2] - k_3[\dot{H}][Br_2] - k_4[\dot{H}][HBr] \\ \frac{d[HBr]}{dt} &= r_2 + r_3 - r_4 = k_2[\dot{Br}][H_2] + k_3[\dot{H}][Br_2] - k_4[\dot{H}][HBr]\end{aligned}$$

Det kan ses, at differentialligninger for reaktionshastigheden afhænger af hinanden, siden hver delreaktion producerer eller opbruger noget, der påvirker en anden reaktion. Det betyder, at vi bliver nødt til at vide, hvad koncentrationerne er for alle molekylerne, når man starter reaktionen, hvis man vil løse systemet. Man skal også have tungen lige i munden, da de meget hurtigt bliver komplicerede. Derfor vælger man normalt at simplificere systemet ved at approksimere steady-state eller partiell ligevægt for nogle af reaktionerne. Disse approksimationer er normalt kun noget, man gør med intermediaterne i en gasfasereaktion.

Steady-state-approksimationen

Steady-state-approksimationen er en relativt simpel approksimation. Man antager, at koncentrationen for en reaktant er konstant over hele reaktionen. Og siden koncentrationen er konstant, bliver differentieringen nul.

$$\frac{d[A]}{dt} = 0 \quad (4.7)$$

Så har man to ligninger, der beskriver den samme ting, så man sætter dem lig med hinanden, og man kan isolere en af de ukendte.

$$\frac{d[A]}{dt} = \sum_{n=1}^N r_f - \sum_{n=1}^N f_b = 0 \quad (4.8)$$

Som et eksempel antager vi, at koncentrationen af \dot{Br} og \dot{H} er konstante. Vi kommer så til at kunne sige:

$$\begin{aligned}\frac{d[Br]}{dt} &= 2k_1[Br_2] - k_2[\dot{Br}][H_2] + k_3[\dot{H}][Br_2] + k_4[\dot{H}][HBr] - 2k_5[\dot{Br}]^2 = 0 \\ \frac{d[\dot{H}]}{dt} &= k_2[\dot{Br}][H_2] - k_3[\dot{H}][Br_2] - k_4[\dot{H}][HBr] = 0\end{aligned} \quad (4.9)$$

Ud fra dem kan vi nå frem til:

$$\begin{aligned}[\dot{Br}] &= \left(\frac{k_1}{k_5}\right)^{\frac{1}{2}} [Br_2]^{\frac{1}{2}} \\ [\dot{H}] &= \frac{k_2[\dot{Br}][H_2]}{k_3[Br_2] + k_4[HBr]}\end{aligned} \quad (4.10)$$

Prøv selv at komme frem til de samme ligninger. (Hint: prøv at se, hvad der er ens med de to ligninger i ligning (4.9).)

De kan så bruges i andre af vores ligninger. Steady-state-approksimationen kan bruges, hvis reaktionerne, der opbruger intermediatet, er meget hurtigere end reaktionen, der producerer intermediatet.

KAPITEL 4. REAKTORLÆRE OG REAKTIONS KINETIK

Partiel ligevægt

Partiel ligevægt kan antages, når både forlæns- og baglænsreaktionen forløber hurtigt. Her antager man, at en reaktion er i ligevægt og bruger ligevægtsudtrykket til at beskrive et intermediat. Et eksempel kunne være, at der er en reaktion, hvor OH indgår. Radikalet OH kan dannes ud fra den globale reaktion:



Her er ligevægtsudtrykket:

$$K_c = \frac{[\text{OH}]^2}{[\text{H}_2\text{O}][\text{O}_2]^{0.5}} \Rightarrow [\text{OH}] = (K_c[\text{H}_2\text{O}][\text{O}_2]^{0.5})^{0.5} \quad (4.11)$$

Ud fra ligevægtsudtrykket kan der isoleres for $\dot{\text{OH}}$, som dermed kan beskrives ud fra en kendt ligevægtskonstant og målbare molekyler. Udtrykket for $\dot{\text{OH}}$ kan substitueres ind i reaktionshastighedsudtrykket. Et eksempel kunne være:



Her er reaktionshastigheden:

$$\frac{d[\text{H}_2\text{O}_2]}{dt} = k_{\text{H}_2\text{O}_2}[\dot{\text{OH}}]^2 = k_{\text{H}_2\text{O}_2}K_c[\text{H}_2\text{O}][\text{O}_2]^{0.5} \quad (4.12)$$

Endelig ligning

Når man har fået ligninger for intermediaterne, kan man sætte dem ind i ligningerne for produkterne og reaktanterne. Udførslen overlades som en opgave til læseren. Til sidst ender man med 3 ligninger.

$$\begin{aligned} \frac{d[\text{Br}_2]}{dt} &= -\frac{k_3 k_2 (\frac{k_1}{k_5})^{\frac{1}{2}} [\text{Br}_2]^{\frac{3}{2}} [\text{H}_2]}{k_3 [\text{Br}_2] + k_4 [\text{HBr}]} \\ \frac{d[\text{H}_2]}{dt} &= -k_2 (\frac{k_1}{k_5})^{\frac{1}{2}} [\text{Br}_2]^{\frac{1}{2}} [\text{H}_2] + \frac{k_4 k_2 (\frac{k_1}{k_5})^{\frac{1}{2}} [\text{Br}_2]^{\frac{1}{2}} [\text{H}_2][\text{HBr}]}{k_3 [\text{Br}_2] + k_4 [\text{HBr}]} \\ \frac{d[\text{HBr}]}{dt} &= \frac{2k_2 \frac{k_1}{k_5}^{\frac{1}{2}} \cdot [\text{H}_2][\text{Br}_2]^{\frac{1}{2}}}{1 + \frac{k_4}{k_3} \frac{[\text{HBr}]}{[\text{Br}_2]}} \end{aligned} \quad (4.13)$$

Vi er nu gået fra et differentialligningssystem med 5 variable til et system med 3. For at kunne løse det, skal vi bare vide startkoncentrationerne af vores reaktanter og produkt samt reaktionskonstanterne. Startkoncentrationerne er noget, som vi selv bestemmer, når vi kører reaktionen, men reaktionskonstanterne er vi nødt til at estimere eller måle. I de næste par afsnit vil vi tale om forskellige modeller for at kunne beskrive reaktionskonstanterne.

Kollisionsteori

En simpel metode man kan modellere reaktioner med er den såkaldte kollisionsteori. Den går ud fra, at man antager, at atomer og molekyler er hårde kugler og opfører sig som en ideel gas. Det betyder bare, at de ikke interagerer med hinanden. Disse kugler bevæger sig i lige linjer indtil de rammer ind i noget, hvorefter de enten reagerer eller afgiver noget energi i en elastisk kollision. Det svarer lidt til, at man ser det som en meget stort spil billiard. Vi vil gerne vide, hvor mange kollisioner der sker i et vist område. Til denne værdi bruger vi bogstavet Z. Den har enheden $[\text{m}^{-3}\text{s}^{-1}]$

Vi starter med en kasse, der har to typer af molekyler A og B. Til at starte med kan vi sige, at den ene af molekylerne står stille, og den anden bevæger sig. Det er ikke helt

rigtigt, men det kommer vi tilbage til.

Molekylet bevæger sig med en hastighed v , og hvad end der er inde for et vist areal (σ) vil blive ramt af molekylet. Arealet har formlen $\sigma_{AB} = \pi(r_A + r_B)^2$. Det svarer til, at de to atomer lige akkurat rører hinanden, når den flyver forbi. Hvis vi så ganger det sammen med koncentrationen for molekylerne, får vi nu antallet af kollisioner for et vist volumen. Af konvention bruger man N_A . Vi har nu en ligning, der beskriver hvor mange kollisioner, der sker mellem de to molekyler.

$$Z = \sigma_{AB} N_A N_B \cdot V \quad (4.14)$$

Vi har en del måder at måle størrelsen på molekylerne, og vi kan selv bestemme koncentrationen. Men hastigheden er lidt sværere.

Lad os sige, at vi har en kasse, der er fyldt med gas. Lad os så sige, at vi stopper alle molekylerne og så skubber dem så alle har samme hastighed. De vil have den samme hastighed lige indtil de begynder at ramme ind i hinanden igen. Ligesom billiardkugler vil de afgive noget af deres energi til hinanden afhængigt af, hvordan de rammer hinanden og deres relative hastighed. Så deres hastighed begynder at fordele sig. Vi kunne regne energien for alle molekylerne og redegøre for alle mulige kollisioner, men der er heldigvis nogle kluge mennesker i 1800-tallet, der har gjort det for os. Maxwell-Boltzmann fordelingen giver fordelingen af hastigheder for ideelle partikler med en given masse m og temperatur T .

$$f(v) = \frac{m}{2\pi k_B T}^{\frac{3}{2}} 4\pi v^2 e^{-\frac{mv^2}{2k_B T}} \quad (4.15)$$

hvor $k_B T$ er boltzmann konstanten som har værdien: $1.380649 \cdot 10^{23} \frac{\text{J}}{\text{K}}$. Det gode er, at vi faktisk kun har brug for gennemsnitshastigheden som ender med at blive:

$$v_a = \sqrt{\frac{8k_B T}{\pi m}} \quad (4.16)$$

Men det gælder kun, hvis der er et slags molekyler siden der kun er en masse. Hvis man har flere molekyler sammen er man nødt til at bruge en reduceret masse. Den reducerede masse er den effektive inertiske masse for to objekter. Den er vi ret ligeglade med, men det giver de rigtige resultater og tager højde for hvor meget de to partikler vejer. Det regnes med formlen:

$$\mu = \frac{m_A M_B}{M_A + M_B} \quad (4.17)$$

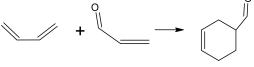
Så har vi en formel for en der giver antallet af kollisioner mellem to molekyler for en given koncentration og temperatur. Men det er ikke nødvendigvis betydende med, at det er antallet af reaktioner der sker. Hvis det var, ville næsten alle reaktioner forløbe meget hurtigere, end de gør i virkeligheden.

En kemisk binding eksisterer, fordi der er mindre energi i systemet med bindingen, end hvis den ikke var der. Som en bold der sidder mellem to bakker. Det vil kræve energi at flytte bolden længere op af bakken. Langt de fleste kemiske reaktioner bryder en binding, og det vil sige, at der kræver en energi at bryde bindingen, for at reaktionen forløber. Vi laver antagelsen, at hvis der er nok energi i molekylerne, der kolliderer, så reagerer de. Energien, der kræves, kaldes for aktiveringsenergien. Vi antager for nu, at alt energien kommer fra den kinetiske energi, der er i molekylerne. Et relativt godt estimat for hvor meget af molekylerne der er over aktiveringsenergien er $e^{-\frac{\varepsilon^*}{kT}}$, hvor ε^* er aktiveringsenergien for en reaktion. Normalt bliver aktiveringsenergien opgivet i energi per mol reaktioner med symbolet E_a . Så ender man med en endelig formel:

$$Z = \sigma_{AB} N_A N_B \cdot \sqrt{\frac{8k_B T}{\pi \mu}} \cdot e^{-\frac{\varepsilon^*}{kT}} \quad (4.18)$$

Men nu er spørgsmålet, hvor god modellen er. Hvis vi ser på nogle reaktioner, ser vi noget interessant.

KAPITEL 4. REAKTORLÆRE OG REAKTIONS KINETIK

Reaktion	T / (K)	$E_a \left[\frac{\text{kJ}}{\text{mol}} \right]$	$r_{exp} \cdot 10^{-11} \left[\frac{\text{m}^3}{\text{mol} \cdot \text{s}} \right]$	$r_{th} \cdot 10^{-11} \left[\frac{\text{m}^3}{\text{mol} \cdot \text{s}} \right]$
$\text{K} + \text{Br}_2 \rightarrow \text{KBr} + \text{Br}$	600	0	10	2.1
$\text{CH}_3 + \text{CH}_3 \rightarrow \text{C}_2\text{H}_6$	300	0	0.24	1.1
$2\text{NOCl} \rightarrow 2\text{NO} + \text{Cl}_2$	470	102	0.094	0.59
	500	83	$1.5 \cdot 10^{-5}$	3.0
$\text{H}_2 + \text{C}_2\text{H}_4 \rightarrow \text{C}_2\text{H}_6$	800	180	$1.24 \cdot 10^{-5}$	7.3

Tabel 4.1: Eksperimentel og teoretisk reaktionshastighed med kollisionsteori for forskellige reaktioner.

Generelt overestimerer kollisionsteori vores reaktionshastigheder. Det er fordi, kollisionsteori ikke tager højde for, at reaktioner tit er sterisk hindret. Det betyder, at molekylerne skal ramme hinanden på den rigtige måde, for at reaktionen sker. Det er jo ikke billiardkugler i virkeligheden. Med større molekyler er estimatet, at de er kugler, heller ikke en god approksimation. Men det forklarer ikke, hvorfor kalium og brom reagerer hurtigere i virkeligheden end ifølge vores teori. Det viser sig faktisk, at der er en statistisk tiltrækning, som gør, at molekylerne rammer ind i hinanden oftere, end vi ville regne med.

Normal siger man, at kollisionsteori er en brugbar start til at finde en reaktionshastighed, hvis man arbejder med små neutrale molekyler. Der plejer den at give et resultat, der normalt er indenfor en realistisk størrelsesorden.

4.2 Heterogen katalyse

En katalysator er defineret som et stof, der indgår i en reaktion uden at blive forbrugt. En heterogen katalysator er katalysator og reaktanter i forskellige faser, oftest er reaktanterne og produkterne i gasfase, og katalysatoren er ofte et metal med evt. support af andre metaloxider. Fordelen ved brug af katalysator er, at aktiveringsenergien for reaktionen mindskes, hvilket vil sige, at reaktionen kan forekomme under mildere betingelser (lavere tryk og/eller temperatur). Derudover kan en katalysator øge selektiviteten af dannelsen af et specifikt produkt, hvis der er flere mulige produkter for en reaktion.

Dimensioner af katalysator

I industrien foregår reaktioner i en reaktor (i størrelsesordenen m). Her tilføjes katalysatorpiller (i størrelsesorden cm). Katalysatorpillerne består af metaller sat i en meget specifik struktur. Hovedparten af katalysatorpilleren er et supportmateriale med selve katalysatorpartiklen fordelt. Dette medfører, at der er afstand mellem de aktive sites, hvor reaktanterne kan binde sig til. Selv den atomare ordning af katalysatoren, der giver de aktive sites er i en størrelsesorden af μm . Reaktionen vil foregå over flere elementarreaktioner på katalysator sites, hvilket giver en totalt lavere aktiveringsenergi for reaktionen.

Binding på katalysatoroverfladen

Reaktionen foregår på overfladen. Det vil sige gasmolekylerne skal bevæge sig hen til overfladen, hvilket kaldes for diffusion. Gasmolekylet binder sig til katalysatoroverfladen, hvilket kaldes adsorption. Reaktionen sker så på overfladen, og produkterne frigives, kaldet desorption.

Associativ adsorption

Kinetikken for adsorption kan beskrives som kollisioner mellem gasmolekylet A og katalysatoroverfladen. Her skal der være et tomt site \star som A kan binde sig til. Dog kan det være at desorptere uden at reagere, hvilket giver en ligevægt.



Her vil summen af antallet af tomme sites θ_* og sites hvor A er bundet til θ_A være 1. Dette kaldes også for en site balance.

$$\theta_* + \theta_A = 1 \quad (4.20)$$

Ændringen i sites med A bundet svarer til adsorptionshastigheden.

$$\frac{d\theta_A}{dt} = p_A k_A^+ \theta_* - k_A^- \theta_A \quad (4.21)$$

Her bruges site-balancen i ligning 4.20 til at beskrive de tomme sites θ_* , så vi kun har én ubekendt.

$$\frac{d\theta_A}{dt} = p_A k_A^+ (1 - \theta_A) - k_A^- \theta_A \quad (4.22)$$

Ved ligevægt forekommer adsorption og desorption lige hurtigt og dermed $\frac{d\theta_A}{dt} = 0$. Ved ligevægt er det muligt at beskrive fraktionen af katalysatorsites, hvor A er bundet til.

$$0 = p_A k_A^+ (1 - \theta_A) - k_A^- \theta_A \Rightarrow \theta_A = \frac{p_A k_A^+}{k_A^- + p_A k_A^+} = \frac{p_A K_A}{1 + p_A K_A} \quad (4.23)$$

Her bruges der, at relationen mellem ligevægtskonstanten for A er forholdet mellem den forlæns- og baglænsreaktionen $K_A = \frac{k_A^+}{k_A^-}$. Ud fra site-balancen er det også muligt at bestemme, hvor mange tomme sites katalysatoren har.

$$\theta_* = 1 - \theta_A = 1 - \frac{p_A K_A}{1 + p_A K_A} = \frac{1}{1 + p_A K_A} \quad (4.24)$$

Dissociativ adsorption

Oftest er et gasmolekyle mere end et atom. Her vil molekylet, der binder sig til katalysatoren, være A_2 . Dermed bliver adsorption ligevægt:



Reaktionen vil være andenordens med hensyn til θ_A .

$$\frac{d\theta_A}{dt} = p_A k_A^+ (1 - \theta_A)^2 - k_A^- \theta_A^2 \quad (4.26)$$

Ligesom før kan der bestemmes et udtryk for, hvor mange sites A binder sig til, og hvor mange der er tomme.

$$\begin{aligned} \theta_A &= \frac{\sqrt{p_{A_2} K_{A_2}}}{1 + \sqrt{p_{A_2} K_{A_2}}} \\ \theta_* &= \frac{1}{1 + \sqrt{p_{A_2} K_{A_2}}} \end{aligned} \quad (4.27)$$

Konkurrence adsorption

Mange reaktioner har flere reaktanter. Dermed vil det kræve, at flere molekyler binder sig til katalysatoren og dernæst reagerer på overfladen. Dette bliver et simpelt eksempel med associativ adsorption for begge molekyler.



A og B binder sig begge til katalysatoren og er dermed i konkurrence om de tomme sites. Det vil sige, at vi har to koblede differentialligninger. Site-balancen vil i dette tilfælde være anderledes end før, da B også kan binde sig til katalysatoren.

$$\theta_* + \theta_A + \theta_B = 1 \quad (4.29)$$

KAPITEL 4. REAKTORLÆRE OG REAKTIONS KINETIK

Reaktionsudtrykkene bliver:

$$\begin{aligned}\frac{d\theta_A}{dt} &= p_A k_A^+ (1 - \theta_A - \theta_B) - k_A^- \theta_A \\ \frac{d\theta_B}{dt} &= p_B k_B^+ (1 - \theta_A - \theta_B) - k_B^- \theta_B\end{aligned}\quad (4.30)$$

Ved ligevægt er der to ligninger med to ubekendte, hvor der kan bestemmes, hvor meget A og B dækker. Derudover kan site-balanceen bruges til at finde udtrykket for de tomme sites.

$$\begin{aligned}\theta_A &= \frac{p_A K_A}{1 + p_A K_A + p_B K_B} \\ \theta_B &= \frac{p_B K_B}{1 + p_A K_A + p_B K_B} \\ \theta_* &= \frac{1}{1 + p_A K_A + p_B K_B}\end{aligned}\quad (4.31)$$

Langmuir-Hinshelwood-kinetik

Når reaktanterne A og B er bundet til katalysatoroverfladen, vil de kunne reagere med hinanden:



Hvis AB er produktet, vil det kunne desorpere fra katalysator overfladen med følgende reaktion.



De enkelte reaktionsudtryk kan opstilles på samme måde som før. Det er vigtigt at lave en site balance først, så du har et udtryk for θ_* .

Løsning af overfladekinetik

Vi tager udgangspunkt i dette simple eksempel i tabel 4.2, hvor vi kombinerer konkurrence-adsorption med Langmuir-Hinshelwood.

Tabel 4.2: Eksempel på elementarreaktioner og site-balance for en simpel reaktion

Net reaktion på katalysatoren	$A + B \rightleftharpoons AB$
Site balance på katalysatoren	$\theta_A + \theta_B + \theta_{AB} + \theta_* = 1$
Elementarreaktioner	Reaktionsudtryk
$A + \star \rightleftharpoons A \star$	$r_1 = p_A k_1^+ \theta_* - k_1^- \theta_A$
$B + \star \rightleftharpoons B \star$	$r_2 = p_B k_2^+ \theta_* - k_2^- \theta_B$
$A \star + B \star \rightleftharpoons AB \star + \star$	$r_3 = k_3^+ \theta_A \theta_B - k_3^- \theta_{AB} \theta_*$
$AB \star \rightleftharpoons AB(g) + \star$	$r_4 = k_4^+ \theta_{AB} - k_4^- p_{AB} \theta_*$

Fuld transient løsning

Den fulde transiente løsning laver ingen simplificeringer af reaktionsudtrykkene. I vores eksempel har vi derfor fire ligninger.

$$\begin{aligned}\frac{d\theta_A}{dt} &= r_1 - r_3 \\ \frac{d\theta_B}{dt} &= r_2 - r_3 \\ \frac{d\theta_{AB}}{dt} &= r_3 - r_4 \\ \theta_* &= 1 - \theta_A - \theta_B - \theta_{AB}\end{aligned}\quad (4.34)$$

De tomme sites kan også beskrives med en differentialligning, hvor alle reaktionerne r_1 , r_2 , r_3 og r_4 indgår.

Steady-state løsning

Hvis alle reaktioner forløber hurtigt og cirka lige hurtigt, kan der antages steady-state for alle reaktioner. I dette tilfælde skal der løses fire ligninger med fire ukendte. Idet vi kun har algebraiske ligninger, vil fraktionen af sites hvor et stof er bundet til konstant.

$$\begin{aligned}\frac{d\theta_A}{dt} &= r_1 - r_3 = 0 \\ \frac{d\theta_B}{dt} &= r_2 - r_3 = 0 \\ \frac{d\theta_{AB}}{dt} &= r_3 - r_4 = 0 \\ \theta_* &= 1 - \theta_A - \theta_B - \theta_{AB}\end{aligned}\tag{4.35}$$

Quasi ligevægt-løsning

En tredje løsningsmodel er quasi-ligevægt, hvor det antages, at kun nogle af elementarreaktionerne er i steady-state. Der antages, at en reaktion forløber langsommere end alle andre. De hurtige reaktioner er næsten i ligevægt eller steady-state, da er forskellen mellem forlæns- og baglænsreaktion næsten det samme. Dog for en langsom reaktion vil forholdet mellem forlæns og baglæns reaktion ikke længere være tæt på 1 og dermed kan der ikke antages ligevægt.

Hvis vi tager udgangspunkt i eksemplet, kunne r_3 være den langsomme reaktion og dermed begrænse den totale hastighed. Det er ud fra antagelsen, at absorption og desorption forløber hurtigt sammenlignet med dannelsen af produktet. Dermed får vi:

$$\begin{aligned}r_1 &\approx 0 \\ r_2 &\approx 0 \\ r_3 &= r_3^+ - r_3^- \\ r_4 &\approx 0\end{aligned}\tag{4.36}$$

Dermed er den globale reaktion:

$$r = r_3 = r_3^+ - r_3^- = k_3^+ \theta_A \theta_B - k_3^- \theta_{AB} \theta_*\tag{4.37}$$

Sites optages af A, B og AB kan bestemmes ud fra reaktionerne i quasi ligevægt.

$$\begin{aligned}r_1 &\approx 0 \Rightarrow p_A k_1^+ \theta_* - k_1^- \theta_A = 0 \Rightarrow \theta_A = p_A K_1 \theta_* \\ r_2 &\approx 0 \Rightarrow p_B k_2^+ \theta_* - k_2^- \theta_B = 0 \Rightarrow \theta_B = p_B K_2 \theta_* \\ r_4 &\approx 0 \Rightarrow k_4^+ \theta_{AB} - p_{AB} k_4^- \theta_* = 0 \Rightarrow \theta_{AB} = p_{AB} K_4^{-1} \theta_*\end{aligned}\tag{4.38}$$

Dermed bliver det globale reaktionsudtryk med noget omskrivning til følgende:

$$r = k_3^+ K_1 K_2 p_A p_B \left(1 - \frac{p_{AB}}{p_A p_B K_1 K_2 K_3 K_4}\right) \theta_*^2 = k_G p_A p_B \left(1 - \frac{p_{AB}}{p_A p_B K_G}\right) \theta_*^2\tag{4.39}$$

θ_* findes ved at opstille en site balance. Den globale ligevægt er K_G , og den globale hastighedskonstant er k_G . Der kan ses, at det globale udtryk afhænger af de individuelle elementarreaktioner.

Det kan forekomme, at en af reaktionerne er irreversibel, hvilket vil sige, at en baglæns reaktionshastighed er nul. Det kunne være, at produktet AB ikke kan adsorperes på katalysatoroverfladen, dermed $k_4^- = 0$. Det vil sige ligevægten for $K_4 \rightarrow 0$. Når der divideres med K_4 i reaktionsudtrykket vil det led også blive 0. Dermed kan reaktionsudtrykket simplificeres til følgende, hvis der er en irreversibel reaktion.

$$r = k_3^+ K_1 K_2 p_A p_B \theta_*^2 = k_G p_A p_B \theta_*^2\tag{4.40}$$

Udtrykket for de tomme sites kan godt blive komplekst, hvis der er mange intermediater. En mulig simplificering er at antage, at det hovedsageligt kun er ét stof, som binder sig til

KAPITEL 4. REAKTORLÆRE OG REAKTIONS KINETIK

katalysatorsitene. Dette kaldes MARI (som på engelsk står for most abundant reaction intermediate). Hvis vi antager, at B bundet til katalysator-overfalden er MARI, vil det sige $\theta_A \approx \theta_{AB} \approx 0$. Det vil sige, at site-balancen kan simplificeres.

$$\theta_* = 1 - \theta_A - \theta_B - \theta_{AB} \approx 1 - \theta_B = \frac{1}{1 + p_B K_2} \quad (4.41)$$

Diffusion

Tidligere har vi set på, hvad der sker på katalysatoroverfladen. Dog skal reaktanterne først hen til overfladen, førend de kan binde sig og reagere. Dette sker ved diffusion af reaktanterne. Diffusion eller transport af masse kan findes ud fra en massebalance.

$$\text{Akumuleret} = \text{Ind} - \text{Ud} - \text{Reageret}$$

Massebalancen afhænger af vores koordinatsystem. Der er tre mulige koordinatsystemer: kartesiske, cylindriske og Sfæriske. Koordinatsystemet afhænger af katalysatorpillens geometri.

Hvis vi starter med den simpleste geometri - en plade, vil der være et kartesiske koordinatsystem med en x, y og z akse. Her vil den fulde massebalance være:

$$c \left(\frac{\partial x_A}{\partial t} + v_x \frac{\partial x_A}{\partial x} + v_y \frac{\partial x_A}{\partial y} + v_z \frac{\partial x_A}{\partial z} \right) = cD_{e,A} \left(\frac{\partial^2 x_A}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 x_A}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 x_A}{\partial z^2} \right) + r_A \quad (4.42)$$

c er den totale koncentration. x_A er molbrøkken af stoffet A. $D_{e,A}$ er den effektive diffusion af A. r_A er en reaktion hvor A indgår. v_x , v_y og v_z er hastigheden for A's bevægelse i x, y og z retningen. Venstre siden af ligningen beskriver ændring af x_A i forhold til tid og transport (konvektion) af x_A i de tre retninger, hvilket tilsammen beskriver akkumulationsleddet. Højre siden beskriver fluxen og er dermed Ind - Ud. Det sidste led på højre siden tager højde for, om A reagerer med katalysatoren.

For cylindriske koordinater bruges der r, θ og z, hvilket giver følgende version af massebalancen.

$$c \left(\frac{\partial x_A}{\partial t} + v_r \frac{\partial x_A}{\partial r} + \frac{v_\theta}{r} \frac{\partial x_A}{\partial \theta} + v_z \frac{\partial x_A}{\partial z} \right) = cD_{e,A} \left(\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial x_A}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 x_A}{\partial \theta^2} + \frac{\partial^2 x_A}{\partial z^2} \right) + r_A \quad (4.43)$$

Massebalancen for en kugleformet katalysator vil være i Sfærisk koordinater, hvor der bruges r, θ og φ .

$$\begin{aligned} c \left(\frac{\partial x_A}{\partial t} + v_r \frac{\partial x_A}{\partial r} + \frac{v_\theta}{r} \frac{\partial x_A}{\partial \theta} + \frac{v_\varphi}{r \sin(\theta)} \frac{\partial x_A}{\partial \varphi} \right) = \\ cD_{e,A} \left(\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial x_A}{\partial r} \right) + \frac{v_\varphi}{r^2 \sin(\theta)} \frac{\partial^2 x_A}{\partial \theta^2} + \frac{1}{r^2 \sin^2(\theta)} \frac{\partial^2 x_A}{\partial \varphi^2} \right) + r_A \end{aligned} \quad (4.44)$$

Vi kan konstatere at kompleksiteten stiger når vi går fra plade- til cylinder- til kugleformet katalysatorpiller. Men samtidig kan der ses massebalancen har samme basis.

I mange tilfælde vil der være steady-state, hvilket vil sige, at molfraktionen af A ikke vil være tidsafhængig. Derudover gælder der for porøse materialer som katalysatorer er der et flow uden for partiklen men det er ikke i katalysatorporerne. Dette bevirker, der ikke er konvektion inde i katalysatorpilleren. Dermed er venstre siden af udtrykket ofte nul. Dette er uafhængig af formen på katalysatoren. Vi antager ofte, der kun forekommer i en retning.

Hvis vi tager plade geometrien, som eksempel, kan vi simplificere udtrykket til følgende. Der er blot antaget alt diffusion er i z retningen. Foruden antager vi A bliver forbrugt i en første ordens reaktion.

$$0 = c D_{e,A} \frac{d^2 c_A}{dz^2} - k c_A \quad (4.45)$$

Udtrykket kan omskrives yderligere, idet $c_A = c x_A$.

$$0 = D_{e,A} \frac{d^2 c_A}{dz^2} - k c_A \quad (4.46)$$

Flux hvor meget A, der bevæger sig gennem en flade pr. tids- og pr. arealenhed. Fluxen er defineret som nedenstående i dette konkrete eksempel. Den kan også være flux i x og y retningen på en plade, hvilket vil være den afledte af x og y henholdsvis.

$$J_A = -D_{e,A} \frac{dc_A}{dz} \quad (4.47)$$

Vi har to begyndelsesværdibetingelser. Den første er ofres koncentrationen i katalysatoren er til tiden nul er den samme som omgivelserne. Den anden er i forhold til fluxen, hvor vi antager en konstant flux i forhold til en symmetri akse.

$$c_A(0) = c_{A0} \quad \frac{dc_A}{dz}|_{z=L} = 0 \quad (4.48)$$

Massebalancen omskrives oftest til en dimensionsløs differentialligning inden den løses. Her indfører vi to dimensionsløse variable: y for koncentration og x for distance.

$$\begin{aligned} y &= \frac{c_A}{c_{A0}} \\ x &= \frac{z}{L} \end{aligned} \quad (4.49)$$

Her er c_{A0} koncentrationen af A på katalysator overfalden og L er længden af katalysatoren i z retningen. Når de dimensionsløse variable substitueres ind i differentialligningen fås:

$$0 = D_{e,A} \frac{d^2 y c_{A0}}{dx^2} \frac{dx}{dz} \frac{dx}{dz} - k y c_{A0} = \frac{D_{e,A} c_{A0}}{L^2} \frac{d^2 y}{dx^2} - k y c_{A0} \quad (4.50)$$

Dette kan omskrives til:

$$0 = \frac{d^2 y}{dx^2} - \varphi^2 y \quad (4.51)$$

Hvor $\varphi^2 = \frac{kL^2}{D_{e,A}}$. Den kvadreret konstant φ kaldes Thiele modulet, som beskriver forholdet mellem diffusions- og reaktionshastighed. Den dimensionsløse differentialligning er mere simple og kan dermed løses til:

$$y(x) = \frac{\cosh(\varphi x)}{\cosh(\varphi)} \quad (4.52)$$

Thiele modulet og dermed løsningen afhænger af geometrien, idet den afhænger stedaflede. Thiele modulet cylindriske og Sfæriske koordinater er:

$$\varphi_s = R \sqrt{\frac{k}{D_{e,A}}} \quad (4.53)$$

Det interessante er ikke kun at finde løsningen, men at bestemme hvor effektiv katalysatoren er til at omdanne vores reaktant A. Her bruges effektivitetsfaktoren, som et mål.

$$\eta = \frac{\text{Observeret reaktionshastighed}}{\text{Reaktionshastighed ved overflade betingelser}} = \frac{r_{A,obs}}{r_{A,s}} \quad (4.54)$$

Hvis vi fortsætter med eksemplet for en plade vil effektivitetsfaktoren være:

$$\eta = \frac{A D_{e,A} \frac{dc_A}{dz}|_{z=L}}{A L r_A} = \frac{b h D_{e,A} \frac{dc_A}{dz}|_{z=L}}{b h L k c_{A,s}} \quad (4.55)$$

KAPITEL 4. REAKTORLÆRE OG REAKTIONS KINETIK

Her vil det endelige resultat være:

$$\eta_p = \frac{\tanh(\varphi)}{\varphi} \quad (4.56)$$

Dog vil effektivitesfaktoren være anderledes for cylinder og kugle. Hertil skal der bemærkes, at Thiele modulet afhænger af geometrien.

$$\begin{aligned}\eta_c &= \frac{1}{\varphi} \frac{I_1(\varphi)}{I_0(\varphi)} \\ \eta_k &= \frac{3}{\varphi} \left(\frac{1}{\tanh(\varphi)} - \frac{1}{\varphi} \right)\end{aligned} \quad (4.57)$$

Alle resultater er løsningen for en første ordens reaktion for A. Dog er det ikke altid tilfældet. Du skal udlede et udtryk for både φ og η for hver specifik case.

Heldigvis findes der en generalisering af udtrykkende, så det ikke er nødvendigt at skulle starte forfra hver gang. Der antages at der er stærk pore diffusionslimitering (det vil sige massetransporten er begrænset af pore diffusion) samt reaktionen er irreversibel.

$$\begin{aligned}\varphi &= \frac{V}{S} \frac{c_s}{\sqrt{2}} \left(\int_0^{c_s} D_{e,Ar}(c) dc \right)^{-1/2} \\ \eta &= \frac{1}{\varphi}\end{aligned} \quad (4.58)$$

Her er $\frac{V}{S}$ forholdet mellem volumen og overfalde. c_s er koncentrationen på overfladen. $r(c)$ er reaktionshastighedsudtrykket, hvor $r(c_s)$ er reaktionsudtrykket evalueret for overfladekoncentrationen c_s .

4.3 Kemisk reaktionsteknik

Når man har større kemisk produktion, består det af flere forskellige dele: transport af reaktanterne, opvarmning, varmeverksler, oprensning og vigtigst af alt reaktoren. Reaktoren er der, hvor reaktionen finder sted, og der hvor producen bliver dannet. Når man designet en kemisk reaktor, handler det om at designe den til, at man får produceret så meget som muligt og så lidt som muligt af biprodukter. For at kunne designe en reaktor, bruger man især viden fra de følgende områder:

1. Termodynamikken, opløselighed i forskellige faser kogepunkter, ligevægtbetingelser.
2. Transportprocesser, hvordan bevæger væsken sig, varmetransport og massetransport.
3. Reaktions kintick, hvordan foreløber reaktionerne sig og hvor hurtigt sker det.

I dette kompendium kommer vi til at antage, at termodynamikken og kinetikken er givet til os, og ud fra det kommer vi til at se på reaktordesign. I dette afsnit kommer vi ikke til at gå meget i dybden i forhold til væsketransporten. For at dykke mere ned i Reaktions teknik anbefalder vi to værker: "Elements of Chemical Reaction Engineering" af H.Scott Folger [6] og "Chemical reaction engineering" af O. levenspiel [7].

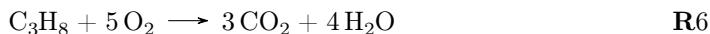
Reaktionshastighed

Reaktionshastigheden er et udtryk for, hvor hurtigt en bestemt mængde af et (eller flere) molekyle(r) omdannes til et (eller flere) andre molekyle(r). En kemisk reaktion er netop defineret ved, at molekyler reagerer med andre molekyler eller sig selv og bliver til nye molekyler.

4.3. KEMISK REAKTIONSTEKNIK

Man bruger reaktionshastigheden til at sige noget om, hvor meget der genereres af et bestemt stof i en reaktion. Reaktionshastighed angiver omdannelsen til et bestemt stof i reaktionen.

Et eksempel kan være forbrænding af propan, som ses i reaktion 6:



I reaktionsteknik giver man hvert stof et bogstav for at gøre notationen nemmere. Reaktionsligning (6) skrives hermed:



hvor A er C_3H_8 , B er O_2 , C er CO_2 og D er H_2O . Fra reaktionsligning 7 kan man aflæse hvor meget, der bliver dannet og forbrugt. Eksempel forbrændes 1 mol/(L · s) A, når 3 mol/(L · s) af C bliver dannet. Reaktionshastigheden er et udtryk for hvor meget, der bliver dannet af et givet stof over tid. Hvis værdien er negativ, bliver stoffet forbrugt og omvendt. Man udtrykker reaktionshastigheden som r_j , hvor j er det givet molekyle. Udtrykket for reaktionshastigheden af et givet stof er afhængigt af koncentrationen af de reaktanter, der forbruges. Et generelt udtryk for reaktionshastigheden i reaktion 7 ses i ligning (4.59). Grunden til, at reaktionshastigheden er negativ, er, at reaktionshastigheden er defineret ud fra, hvor hurtigt et stof dannes. Siden A forbruges, er reaktionshastigheden negativ. I ligning (4.59) er der vist et reaktionshastighed udtryk:

$$r_A = -k \cdot C_A^i \cdot C_B^j \quad (4.59)$$

Reaktionshastighedsudtrykket består af en konstant hastighed ganget med koncentration af molkyler, der optræder i reaktionen. I ligning (4.59) er i og j afhængige af, hvordan reaktion forløber samt hvilke trin, der er hastighedsbestemmende. Hvis i er 1 og j er 2, siger man, at reaktion er en første ordens reaktion med hensyn til C_A og en anden ordens reaktion med hensyn til C_B .

Normalt angiver man reaktioner ved globale reaktioner. Det vil sige reaktioner for det samlede reaktionsforløb. Reaktion 7 er et eksempel på en global reaktion. Når en kemisk reaktion forløber, foregår det via en række små reaktioner, som kaldes for elementarreaktioner. En global reaktion kan skrives som en række elementære reaktioner fra reaktant(erne) til produkt(erne). I elementære reaktioner forløber reaktionen som angivet. Det vil sige, sådanne reaktioner er førsteordensreaktioner både fra reaktant til produkt og omvendt.

Reaktionshastigheden for r_C kan ligesom r_A bestemmes ved hjælp af reaktionsligning (7). Den følgende sammenhæng gælder mellem de forskellige reaktionshastigheder. Dette udledes direkte fra støkiometriken i reaktion (6):

$$\frac{-r_A}{1} = \frac{-r_B}{5} = \frac{r_C}{3} = \frac{r_D}{4} \quad (4.60)$$

Kontinuerlig Kemiske systemer

Når man arbejder med kontinuerte processer, ser man på stofmængde per tid. Man kalder dette for en flowrate. Man ser på flowraten ift. hvert stof. Man betegner flowraten med et F med stoffets navn nedsunket som i ligning (4.61).

$$\text{Flowrate for } j\text{'te stof} = F_j = \frac{n_j}{t} \quad (4.61)$$

Flowraten for stofmængde ift. tiden kan også skrives som en funktion af koncentrationen og volumeflowraten. Dette kan ses i ligning (4.62), hvor v er volumeflowraten, som er det. som fluidet (dvs. væsken eller gasen) fylder per tid.

$$F_A = C_A \cdot v \quad (4.62)$$

Reaktor balancer

Kemiingeniørens grundligning

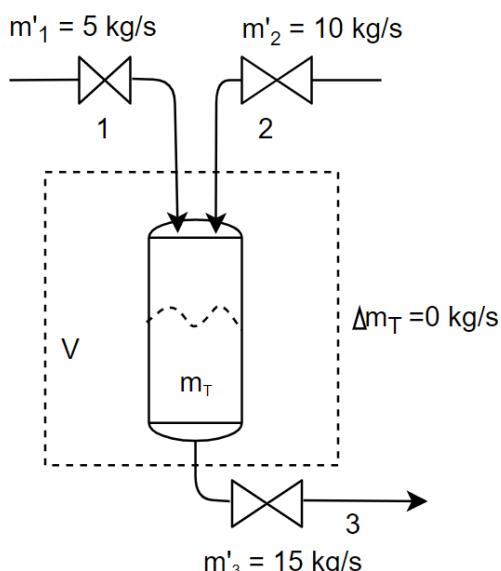
For ethvert kemisk system gælder balanceequationen, som er defineret på følgende måde:

$$IND - UD = AKKUMULERET - PRODUCERET \quad (4.63)$$

Ligning (4.63) er dannet ud fra, at hvis der er mere, der kommer ind, end der kommer ud, så må der blive akkumuleret mere, end der bliver produceret.

- IND er, hvad der kommer fra omgivelser og igennem systemets grænse.
- UD er, hvad der kommer ud af systemet og ud til omgivelserne.
- AKKUMULERET er ændringen af masse/stof inde i systemet.
- PRODUCERET er, hvad der bliver dannet inde i system. Dette er kun tilfældet ved en kemisk reaktion, hvor der bliver dannet nye molekyler eller energi.

Når man opsætter en balance, er det vigtigt, at man har øje for, hvad man opstiller balance over. Balanceequationen gælder nemlig både for energi (Joule), for stofmængde (mol), og for masse (kilogram), men *ikke* for volumen. Så kalder man det for henholdsvis en energibalance, en stofbalance (eller molbalance) og en massebalance.



Figur 4.1: Illustration af eksemplet, hvor der er to strømme ind og én strøm ud. På hver massestrømme er der tilføjet en ventil, der gør, at man kan åben eller lukke for dem. Den stippled linje angiver systemgrænsen. Lavet i draw.io.

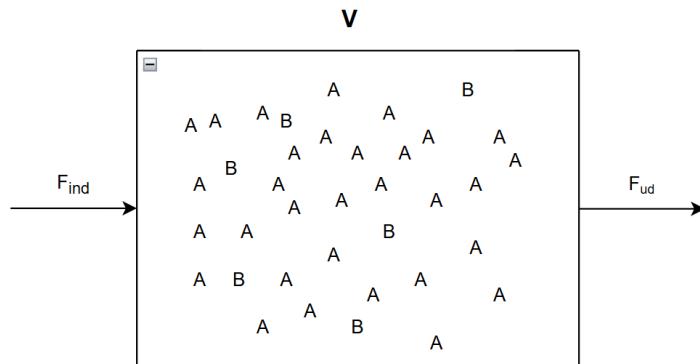
Eksempel. I en kemisk produktion af $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OH}$ fås slutprodukter med en bestemt koncentration efter fortyndning med vand. Dette foregår ved at lede de to strømme kontinuerligt ind i en tank under omrøring, hvorefter det ledes ud i bunden af tanken. Systemet er et åbent system, idet stof transportereres gennem systemet. En illustration af eksemplet kan ses på figur 4.1. Til at starte med bliver tanken fyldt op ved at åbne for ventil 1 og 2. Ventil 3 forbliver lukket. Herefter omrøres. For at analysere opstarten bruges ligning (4.63). Systemgrænsen bliver sat rundt om tanken. I dette tilfælde svarer strøm 1 og strøm 2 til *IND* og strøm 3 svarer til *UD*. Leddet *PRODUCERET* er lig med 0, da der ikke sker nogle reaktioner inde i tanken. Leddet "UD" er også lig med 0, da strøm 3 er lukket. Dette indsættes i ligning (4.63).

$$IND + 0 = 0 + AKKUMULERET \quad (4.64)$$

Hvor meget der bliver akkumuleret afhænger altså kun af, hvor meget der kommer ind.

Balance for en kemisk produktion

I eksemplet før blev grundligningen brugt til at sætte en algebraisk ligning op for et system, men det kan også bruges til at opstille differentialbalance for et system, og det er faktisk sådan, at de fleste modeller i ingeniorkundskab bliver dannet. Man kan opstille en general stofbalance for en kemisk reaktor med én indgang og én udgang.



Figur 4.2: En simplificeret illustration af en reaktor, hvor A reagerer til B inde i reaktoren.

I figur 4.2 er der lavet en lille skitse af en reaktor, hvor der er indgangsstrøm F_{ind} og en udgående strøm F_{ud} , hvor inde i reaktoren sker der en reaktion, hvor A bliver til B. Formålet med reaktoren er at danne et produkt, og i det her tilfælde stoffet B, derfor giver det god mening at opsætte en stofbalance ved at bruge balance ligningen.

$$IND - UD = AKKUMLERET - PRODUCERET \quad (4.65)$$

For at opskrive molbalancen for et vilkårligt kemisk system i en reaktor anvendes ligning (4.63). Det, der kommer IND i systemet er flowraten ved start. Den betegnes som F_{j_0} . Det, der kommer UD , er flowraten ud og givet som F_j . Det der er $PRODUCERET$, er givet som $\int_0^V r_j dV_r$, da det er reaktionshastigheden integreret over det volumen, som reaktion sker i. Leddet angiver, hvor meget der bliver produceret i det givne volumen, V . Det, der er $AKKUMULERET$, beskrives som ændringen af mængden af stof i det givne volumen, V , det vil sige $\frac{dN_j}{dt}$. Når det indsættes i balance ligning fås ligning (4.66).

$$F_{j_0} - F_j = - \int_0^V r_j dV_r + \frac{dN_j}{dt} \quad (4.66)$$

Ud fra ligning (4.66) kan man udlede udtryk for stofbalancer for forskellige typer af reaktorer.

Omdannelse

Formålet med en reaktor er at omdanne reaktanter til produkter. For nemmere at kunne regne på hvor meget, der bliver omdannet af et givet stof, introduceres **omdannelse**, som betegnes med et stort X . Omdannelsen er defineret fra 0 til 1, hvor $X = 0$ betyder, at intet er omdannet, og $X = 1$ betyder, at alt er omdannet (der er fuld omdannelse).

Beskrivelse af reaktortyper – isoterme

I dette afsnit fokuseres der på isoterme reaktorer, hvor temperaturen antages at være konstant gennem processen. For flowreaktorer antages det desuden, at de opererer under

KAPITEL 4. REAKTORLÆRE OG REAKTIONS KINETIK

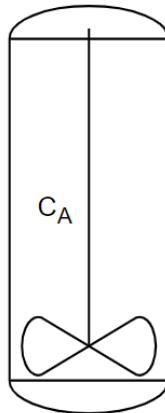
steady-state-forhold. Dette afsnit omhandler således idealiserede reaktorer, der giver et forenklet grundlag for at forstå reaktordesign.

Vi vil gennemgå tre typer reaktorer: batchreaktoren samt to specifikke flowreaktorer, henholdsvis den kontinuerlige omrørte tankreaktor (CSTR) og den plug flow-reaktor (PFR). For disse reaktorer opstilles og analyseres molbalancer, der danner grundlag for reaktorligninger. Disse ligninger kan anvendes til at beregne den nødvendige reaktorstørrelse for at opfylde specifikke proceskrav.

Batchreaktoren

En batchreaktor minder meget om, når man laver syntese i laboratoriet, idet man først blander reaktanterne og solvent sammen i en kolbe og derefter tilføjer varme og starter reaktion. Derefter vil koncentrationen af reaktanterne aftage, hvorved produktkoncentration vokser, indtil ligevægt er nået. I stedet for en glaskolbe er det som regel en stor tank.

Batchreaktorer bliver ofte brugt til små produktioner, hvor mængden, der produceres, er lille. Batchreaktorer er meget almindelige i medicinalindustrien. En simpel skitse af en batchreaktor ses i figur 4.3.



Figur 4.3: En simpel skitse af en cylinderformet batchreaktor, hvor det kan ses, at der ikke er nogle stoffer, der forlader reaktoren. Lavet i draw.io.

En fordel ved batchreaktorer til medicinalproduktion er, at kontaminerede (indeholdende urenheder) medicin let kan forkastes i de tilfælde, hvor det er nødvendigt. Til at udlede et udtryk for batchreaktoren anvendes ligning (4.66). I en batchreaktor er der ikke noget, der forlader reaktoren eller bliver tilføjet, når reaktion starter. Dette gør, at venstre side af ligning (4.66) er lig med nul. Dette reducerer ligning (4.66) til ligning (4.67):

$$0 = - \int_0^V r_j dV_r + \frac{dN_j}{dt} \implies \int_0^V r_j dV_r = \frac{dN_j}{dt} \quad (4.67)$$

Reaktionen i batchreaktoren sker under kraftig omrøring. Derfor antages, at reaktoren er godt blandet. Det vil sige, koncentration det samme overalt i blandingen. Heraf kan r_j behandles som en konstant forhold til volumen og integralet på venstre side i ligning (4.67) kan integreres. Derudover antager man, at volumen er konstant med hensyn til tiden. Dette fører til ligning (4.68) gældende for en batch reaktor med konstant volumen:

$$-r_j = \frac{dN_j}{dt} \frac{1}{V} = \frac{dC_j}{dt} \quad (4.68)$$

Når man ser på en reaktion, vælger man, hvilket stof omdannelsen skal være defineret ud fra. Man vælger typisk det stof, der er den begrænsende faktor. Det vælger man som regel til at være stof A. I en batchreaktor kan man beskrive hvor meget A, der reagerer

ud fra at tage produktet af omdannelsen, X , og startstofmængden i reaktoren N_{A_0} . Stofmængden af A til stede på et givent tidspunkt er forskellen mellem stofmængden ved start og hvor meget A, der har reageret. Dette ses i ligning (4.69).

$$N_A = N_{A_0} - N_{A_0}X = (1 - X)N_{A_0} \quad (4.69)$$

Der differentieres med hensyn tiden, idet man er interesseret i, hvordan omdannelsen ændrer sig over tid. Både N_A og X ændrer sig med tiden.

$$\frac{dN_A}{dt} = \frac{dN_{A_0}}{dt} - \frac{d}{dt}(N_{A_0}X) = -N_{A_0} \frac{dX}{dt} \quad (4.70)$$

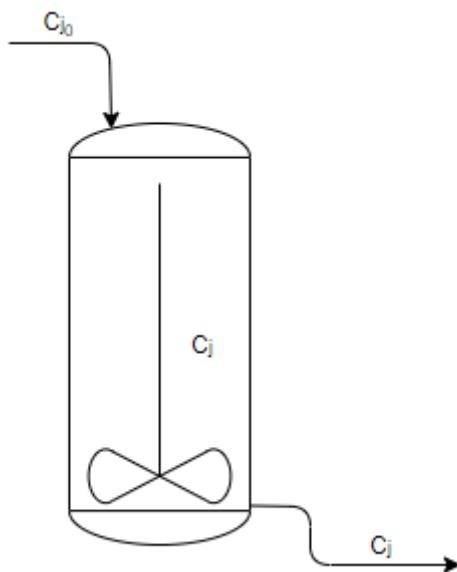
Venstre side i ligning (4.70) substitueres ind i ligning (4.71):

$$-r_A \cdot V = N_{A_0} \frac{dX}{dt} \Rightarrow -r_A = N_{A_0} \cdot \frac{dX}{dt} \frac{1}{V} = C_{A_0} \cdot \frac{dX}{dt} \quad (4.71)$$

Og et generelt udtryk for reaktionshastigheden er fundet for batchreaktoren. Det bør nævnes, at omdannelsesraten ændres fra system til system.

Kontinuert omrørt flowreaktor (CSTR reaktor)

I en kontinuert flowreaktor (CSTR reaktor) går en fødestrøm ind i reaktoren med reaktanter. I reaktoren bliver reaktanterne blandet sammen og reagerer. En konstant strøm går ud af reaktoren, som har samme størrelse som fødestrømmen, der går ind i reaktoren. Hvis udgangsstrømmen var større end fødestrømmen ville reaktoren langsomt blive tømt, og hvis det omvendte gjaldt, ville reaktoren briste på grund af overbelastning. Ved steady state er koncentrationerne af de forskellige stoffer konstante i reaktoren. Heraf følger, at strømmen ud af reaktoren også har en konstant koncentration bestående af de forskellige stoffer. En illustration af dette ses i figur 4.4.



Figur 4.4: En simple skitse af en CSTR reaktor ved steady state. En fødestrøm med koncentration C_{A_0} ledes ind i reaktoren. I reaktoren er der omrøring, og koncentration og volumen er konstant. Lavet i draw.io.

Ved steady state er både koncentration og volumen (væskehøjden) konstant,. Det vil sige, at $\frac{dN_j}{dt} = 0$. Man kan udlede molbalancen for en CSTR reaktor, hvor j angiver det stof, som molbalancen er over, og F_j er flowraten ud af CSTR reaktoren. Ligning (4.66)

kan reduceres til ligning (4.72), når det antages, at CSTR reaktor er ved steady state, ved også at antage reaktor er godt blandet.

$$F_{j_0} - F_j = - \int_0^V r_j dV \implies -r_j = \frac{F_{j_0} - F_j}{V} \quad (4.72)$$

Ligning (4.72) for CSTR kan omskrives til at indeholde omdannelsen. I en CSTR reaktor for referencestof A kan flowraten for A UD , F_A , skrives sammenligneligt med batchreaktoren.

$$F_A = F_{A_0}(1 - X) \quad (4.73)$$

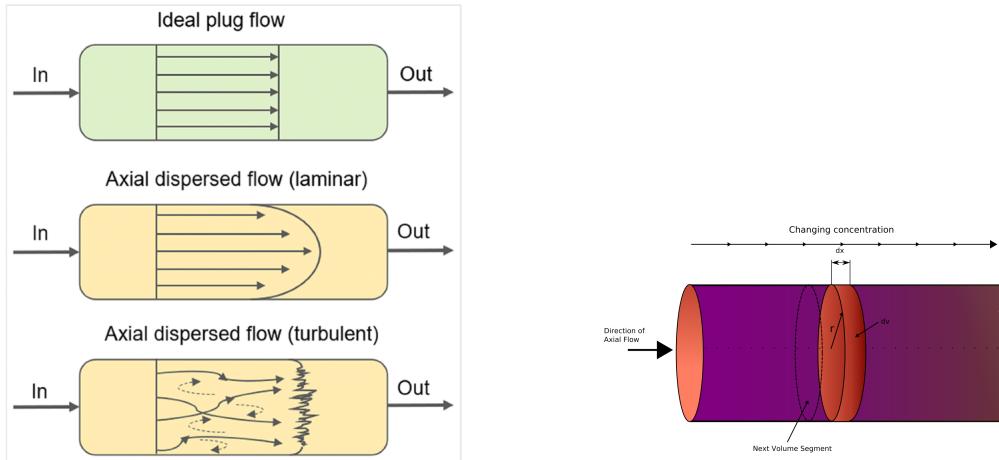
Udtrykket for den udgående flowraten for A, F_A , indsættes i ligning (4.72):

$$-r_A = \frac{F_{A_0} - F_A}{V} = \frac{F_{A_0} - F_{A_0}(1 - X)}{V} = \frac{F_{A_0}X}{V} \quad (4.74)$$

Og heraf er udtrykket for reaktor ligningen for CSTRen fundet .

Turbulent PFR-plugflow reaktor

Turbulent Plugflow reaktor (PFR) er et rør, hvor reaktanter bliver blandet. Væskeflowet holdes højt, således væsken er turbulent og bliver godt blandet. I et plugflow er væskehastigheden uafhængigt af, hvor man er i røret, og man kan derfor se en plugflow reaktor som en masse diske, der bevæger sig gennem røret. Det svarer til, at det er en masse batchreaktorer, der bliver sent gennem røret.



Figur 4.6: Illustration af plugflow og PFR

En plugflow reaktor operer også ved steady state. Det vil sige, der ikke er nogen akkumulation: $\frac{dN_j}{dt} = 0$. Når man opstiller en model for et system, ser man tit på et kontrolvolumen. Et kontrolvolumen er et område, der repræsenterer systemets grænser. Denne kan op- eller nedskaleres. I en plugflow reaktor bliver den molare flowrate større, jo længere i røret, væsken bevæger sig. Når man opsætter modellen, bruger man ligning (4.63) på kontrolvolumen. Her måles den indgående F_j for x , mens det udgående kontrolvolumen kommer målt for F_j ved $x + \Delta x$ (bredden af kontrolvolumenet). *AKKUMULERET* ledet er nul, idet det systemet er stationært (ved steady state). *PRODUCERET* ledet er givet som r_j ganget med kontrolvolumenet, som er $\Delta x \cdot A$, hvor A er tværsnitsarealet, som er konstant igennem røret. Dette leder til ligning (4.75):

$$F_j|_x - F_j|_{x+\Delta x} = -\Delta x \cdot A \cdot r_j \quad (4.75)$$

4.3. KEMISK REAKTIONSTEKNIK

Ved at isolere for r_j får man et udtryk, der svarer til at differentiere F_j med hensyn til x :

$$r_j = \frac{F_j|_{x+\Delta x} - F_j|_x}{\Delta x} \frac{1}{A} \quad (4.76)$$

Ved at lade kontrolvolumenet blive infinitesimalt småt opnås følgende:

$$r_j = \frac{dF_j}{dx} \frac{1}{A} \quad (4.77)$$

Flowraten kan skrives som en funktion af omdannelsen:

$$F_j = F_{j0} - X \cdot F_{j0} = (1 - X)F_{j0} \quad (4.78)$$

Der bliver foretaget et variabel skifte, ved at man differentiere F_j med hensyn til omdannelsen:

$$\frac{dF}{dX} = -F_{j0} \implies dF_j = -dX \cdot F_{j0} \quad (4.79)$$

udtrykket for dF_j kan indsættes i ligning (4.77), hvor dx udskiftes med dV

$$\frac{dX}{dV} F_{j0} = -r_j \quad (4.80)$$

hvor der bruges separation af variable: Det antages, at r_A ikke er afhængig af volumen men kun af X . Der integreres på begge sider fra starten af røret til slutningen af røret. Dette giver reaktorligningen for en plugflow reaktor:

$$\int_0^V dv = \int_0^X \frac{F_{j0}}{-r_j(x)} dx \implies V = \int_0^X \frac{F_{j0}}{-r_j(x)} dx \quad (4.81)$$

Opsumering

Tabel 4.3: Oversigt over formler for isoterme reaktorer, for en given reaktant j og ved konstant temperatur.

Reaktortype	Formel	Beskrivelse
Batchreaktor	$r_j = C_{j0} \cdot \frac{dX}{dt}$	Molbalance i batchreaktor
CSTR	$V = -\frac{F_{j0} X}{r_j}$	Volumen beregnet ved omdannelse
PFR (differential)	$\frac{dX}{dV} = \frac{-r_j}{F_{j0}}$	Differential molbalance
PFR (integreret)	$V = \int_0^X \frac{F_{j0}}{-r_j(x)} dx$	Volumen beregnet ved integration

EKSEMPEL Førsteordensreaktion med konstant v, P og T

I dette eksempel bliver en batchreaktor, en CSTR reaktor og en plugflow sammenlignet med hinanden. I dette eksempel bliver der set på en førsteordensreaktion givet ved følgende reaktion:



I dette eksempel vil der blive regnet hvor store de forskellige reaktorer skal være for at kunne danne 36 mol per min. Reaktionen forløber i væske, densiteten af væsken er konstant, og volumenflowraten er konstant på $0,02 \frac{\text{m}^3}{\text{s}}$

Kinetikken bag forsøget er første ordens forhold til A og udtrykket for reaktions hastigheden er givet i ligning (4.82), hvor k er givet ved $0,04 \frac{1}{\text{s}}$. Startkoncentrationerne for henholdsvis A og B er $C_{A,0} = 0,9 \frac{\text{mol}}{\text{L}}$ og $C_{B,0} = 0$. Hastighedsudtrykket for reaktion 8 opskrives:

$$r_A = -k \cdot C_A \quad (4.82)$$

For denne et overblik over de udtryk, der skal bruges for at regne på reaktoren, laver man det, der hedder en støkiometrisk tabel. Heri noteres det, der kommer ind, ændringer og hvad der kommer ud. Man gør det for hvert stof:

KAPITEL 4. REAKTORLÆRE OG REAKTIONS KINETIK

Tabel 4.4: Støkiometrisk tabel for reaktion 8.

Stof	Ind	Ændring	Ud	Koncentration
A	$F_{A,0} = C_{A,0} \cdot v_0$	$-X \cdot F_{A,0}$	$F_A = (1 - X)F_{A,0}$	$C_A = \frac{F_A}{v_0} = C_{A,0}(1 - X)$
B	0	$\frac{1}{2} \cdot X F_{A,0}$	$F_B = \frac{X}{2} F_{A,0}$	$C_B = \frac{F_B}{v_0}$
Total	$F_{T0} = F_{A,0}$	$-\frac{X}{2} \cdot F_{A,0}$	$F_T = (1 - \frac{X}{2})F_{T0}$	-

I dette tilfælde er der kun A i den indgående strøm ind, hvortil B sættes til 0. Dette bliver noteret i tabel 4.4. I kolonnen "Ændring" noter man derfor, hvordan mængde af A og B ændrer sig forhold til X. dette aflæser man direkte fra reaktionsligning 8. v_0 er volumenflowraten ved indgangen til reaktoren.

CSTR reaktor

For at finde ud af, hvor stor CSTR reaktoren skal være, anvendes reaktorligningen for en CSTR reaktor ligning (4.74), hvor ligning (4.82) substitueres ind:

$$V = \frac{F_{A,0}X}{-r_A} = \frac{C_{A,0}v_0X}{k \cdot C_A} = \frac{C_{A,0}v_0X}{k \cdot C_{A,0}(1 - X)} = \frac{v_0 \cdot X}{k(1 - X)} \implies \tau = \frac{X}{k(1 - X)} \quad (4.83)$$

hvor $\tau = \frac{V}{v_0}$ er **opholdstiden**, som angiver, hvor langt tid et molekyle er om at komme fra indgangen af reaktoren til udgangen. Det er en god varbel til at sammenligne forskellige reaktorer med. Den udgående strøm for stof B, F_B , blev fundet fra støkiometri i reaktion 8 men kan også ses i tabel 4.4. Herfra kan X isoleres og findes:

$$F_B = \frac{X}{2} F_{A,0} \implies X = 2 \frac{F_B}{C_{A,0}v_0} = \frac{2 \cdot 6 \frac{\text{mol}}{\text{s}}}{900 \frac{\text{mol}}{\text{m}^3} 0,02 \frac{\text{m}^3}{\text{s}}} = \frac{2}{3} \quad (4.84)$$

τ findes ved at indsætte værdier i ligning (4.83),

$$\tau_{CSTR} = \frac{\frac{2}{3}}{0,04 \frac{1}{\text{s}} (1 - \frac{2}{3})} = 50 \text{ s} \quad (4.85)$$

$$V_{CSTR} = v_0 \cdot \tau_{CSTR} = 0,02 \frac{\text{m}^3}{\text{s}} \cdot 50 \text{ s} = 1 \text{ m}^3 \quad (4.86)$$

Som ville findes.

PFR-plugflow reaktor

Når man regner på PFR reaktorer, anvendes reaktorligning (4.81) gældende for PFR reaktoren:

$$\tau_{PFR} = \frac{1}{k} \int_0^{\frac{2}{3}} \frac{1}{1 - X} dX = -\ln(1 - X) \frac{1}{k} = \ln\left(\frac{1}{1 - \frac{2}{3}}\right) \cdot \frac{1}{0,04 \frac{1}{\text{s}}} = 25 \text{ s} \ln(3) = 27 \text{ s} \quad (4.87)$$

$$V_{PFR} = v_0 \cdot \tau_{CSTR} = 0,02 \frac{\text{m}^3}{\text{s}} \cdot 27 \text{ s} = 0,54 \text{ m}^3 \quad (4.88)$$

Som ville vises. Sammenlignes ligning (4.88) med ligning (4.86) ses, at PFR skal være væsentligt mindre end en CSTR reaktoren. Sammenlignes ligning (4.87) med ligning (4.85) ses, at opholdstiden er mindre for en PFR reaktor end for en CSTR reaktor. Dette er forventeligt, idet volumenet er mindre, hvormed der er mindre kortere for flowet at bevæge sig.

Batchreaktor

Da der ikke er noget udgående flow i en batchreaktor, undersøges i stedet en batchreaktor under omdannelse. Her anvendes reaktorligning (4.71) gældende for en batchreaktor:

$$-r_A = C_{A,0} \frac{dX}{dt} = k \cdot C_{A,0}(1 - X) \implies \frac{1}{(1 - X)k} dX = dt \quad (4.89)$$

4.3. KEMISK REAKTIONSTEKNIK

Der integreres fra tiden 0 til tiden, hvor at $X = 2/3$.

$$\frac{1}{k} \int_0^{\frac{2}{3}} \frac{1}{1-X} dX = \int_0^{\tau_{batch}} dt \implies \tau_{batch} = 27 \text{ s} \quad (4.90)$$

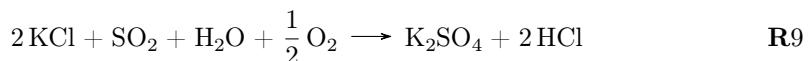
Dette giver samme tid som i en PFR reaktor, hvilket også giver god mening, siden en PFR reaktor svarer til en række batch, der bliver sendt igennem. Ulempen ved batchreaktoren er, at efter første portion skal den rengøres og gøres klar til næste omgang.

4.4 Parallelle og serielle reaktioner

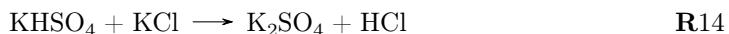
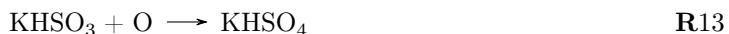
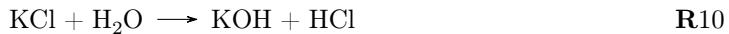
Når man modellerer reaktoren, er det oftest vigtigt at inkludere flere reaktioner. Oftest sker der reaktioner sideløbende med hinanden, og der kan blive dannet ønskede produkter i stedet, og det er derfor, det er vigtigt at tage højde for de andre reaktioner. I virkeligheden foregår der tusindvis af reaktioner parallelt, dog er der væsentligt forskel på, hvor vigtigt de forskellige reaktioner er og hastigheden. Til at modellere reaktoren, bruges der det mindste antal for at gøre modellen mere simpel.

Reaktionsveje

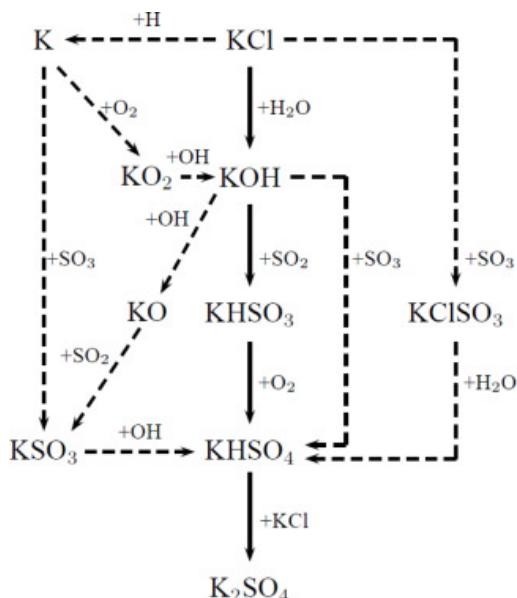
Når man ser på en global reaktion som reaktion **R9**, er det i virkligheden en netreaktion for en eller flere reaktionveje.



En reaktionsvej kan være reaktion **R10** til **R14**, hvor at hvis man lægger reaktionerne sammen, får man **R9**.



En anden rute kunne være at KCl reagerer med SO₃ først, og reaktionsvejen bliver **R15** → **R16** → **R17** → **R14**, når man lægger disse reaktioner sammen, får man også **R9**. Dette er illustreret i figur 4.7.



Figur 4.7: Illustration af flere sideløbende reaktionsveje til dannelsen af K₂SO₄ fra reaktioner med KCl og SO₂. Illustrationen er lånt fra Chanpirak et al [8]

4.4. PARALLELLE OG SERIELLE REAKTIONER

Det vil sige, når man ser på et reaktionshastighedsudtryk for en global reaktion, så er det i virkeligheden et udtryk, der svarer til hurtigste reaktionsveje, og derfor kan udtrykket for reaktionshastigheden for den globale reaktion også Andre sig markant ved tryk- og temperaturændringer, da det påvirker alle delreaktioner hver især og gør, at en anden reaktionsvej bliver dominerende.

4.5 Dynamisk isoterm reaktor

Indtil videre har vi set isotermen reaktor i steady state, det vil sige, at processen ikke er tidsafhængig. Noget, der er interessant at undersøge, er vejen hen til et steady state (stationært punkt). I dette afsnit vil vi se først på CSTR reaktoren og derefter på plug flow-reaktor.

Dynamisk CSTR

For at udlede et udtryk for en dynamisk CSTR reaktor, tager vi udgangspunkt i den grundlæggende reaktorligning (4.66). Der vil igen blive brugt antagelsen om, at inde i selve reaktoren er den godt blandet, det vil sige, at koncentration er ens i hele reaktoren og er kun afhængig af tiden. I dette tilfælde vil der blive tilføjet, at der foregår flere reaktioner, hvor at r_i er reaktionsraten for reaktion nummer i, og hvor at $\nu_{i,j}$ er den støkiometriske koefficient. n er antal af reaktioner, og N er antallet af stoffer.

$$F_{j_0} - F_j = V \sum_{i=1}^n -\nu_{i,j} r_i + \frac{dN_j}{dt}, \forall j \in [0, N] \quad (4.91)$$

$$\frac{dN_j}{dt} \frac{1}{V} = C_{j_0} \cdot \frac{v_0}{V} - C_j \cdot \frac{v}{V} - \sum_{i=1}^n -\nu_{i,j} r_i \quad (4.92)$$

$$\frac{dC_j}{dt} = C_{j_0} \cdot \frac{1}{\tau} - C_j \cdot \frac{v_0 \cdot \hat{v}}{V} - \sum_{i=1}^n -\nu_{i,j} r_i \quad (4.93)$$

$$\frac{dC_j}{d\hat{t}} \frac{1}{\tau} = C_{j_0} \cdot \frac{1}{\tau} - C_j \cdot \hat{v} \frac{1}{\tau} - \sum_{i=1}^n -\nu_{i,j} r_i \quad (4.94)$$

$$\frac{dC_j}{d\hat{t}} = C_{j_0} - C_j \cdot \hat{v} - \tau \sum_{i=1}^n -\nu_{i,j} r_i \quad (4.95)$$

Hvor at $\hat{v} = \frac{v}{v_0}$ og $\tau = \frac{V}{v_0}$ som er opholdstiden i reaktoren. Der introduceres også en dimensionsløs størrelse for koncentration: $Y_j = \frac{C_j}{C_{A,0}}$.

$$\frac{dY_j}{d\hat{t}} C_{A,0} = C_{j_0} - Y_j C_{A,0} \cdot \hat{v} - \tau \sum_{i=1}^n -\nu_{i,j} r_i \quad (4.96)$$

$$\frac{dY_j}{d\hat{t}} = Y_{j,0} - Y_j \cdot \hat{v} - \tau \sum_{i=1}^n -\nu_{i,j} \frac{r_i}{C_{A,0}}, \forall j \in [0, N] \quad (4.97)$$

Hvor at $Y_{j,0} = \frac{C_{j,0}}{C_{A,0}}$

Eksempel Parallelle reaktioner

I en CSTR-reaktor foregår følgende reaktioner i flydende fase:



I dette tilfælde er C den ønske reaktion og D er den uønsket reaktion. Hver af reaktionerne har følgende reaktionshastighedsudtryk:

$$-r_{18} = k_{18} C_A^{0.5} C_B \quad (4.98)$$

$$-r_{19} = k_{19} C_A^1 \quad (4.99)$$

4.5. DYNAMISK ISOTERM REAKTOR

Hvor at de støkiometriske koefficienter kan opsummeres i den følgende matrix.

$$\nu = \begin{bmatrix} | & | \\ \nu_{1,j} & \nu_{2,j} \\ | & | \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 2 \\ 1 & 0 \\ -1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \quad (4.100)$$

Der kan defineres en vektor for reaktionsraten.

$$\mathbf{r} = \frac{\tau}{C_{A,0}} \begin{bmatrix} -r_{13} \\ -r_{14} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{\tau}{C_{A,0}} k_{18} C_A^{0.5} C_B \\ \frac{\tau}{C_{A,0}} k_{19} C_A^1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{\tau C_{A,0}^{1.5}}{C_{A,0}} k_{18} Y_A^{0.5} Y_B \\ \frac{\tau C_{A,0}}{C_{A,0}} k_{19} Y_A^1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \hat{k}_{18} Y_A^{0.5} Y_B \\ \hat{k}_{19} Y_A^1 \end{bmatrix} \quad (4.101)$$

Hvor at $\hat{k}_{18} = C_{A,0}^{0.5} \tau k_{18}$ og $\hat{k}_{19} = k_{19} \tau$. Det antaes at volumeflow er konstant, det vil sige at $v = v_0$. Fra det kan balanceligningen for A,B,C og D opskrives ud fra ligning (4.97).

$$\frac{dY_A}{dt} = Y_{A,0} - Y_A - \tau \sum_{i=1}^n -\nu_{i,1} \frac{r_i}{C_{A,0}} \quad (4.102)$$

$$\frac{dY_B}{dt} = Y_{B,0} - Y_B - \tau \sum_{i=1}^n -\nu_{i,2} \frac{r_i}{C_{A,0}} \quad (4.103)$$

$$\frac{dY_C}{dt} = Y_{C,0} - Y_C - \tau \sum_{i=1}^n -\nu_{i,3} \frac{r_i}{C_{A,0}} \quad (4.104)$$

$$\frac{dY_D}{dt} = Y_{D,0} - Y_D - \tau \sum_{i=1}^n -\nu_{i,4} \frac{r_i}{C_{A,0}} \quad (4.105)$$

Dette kan også opskrives med vektornotation som \mathbf{Y} , det er oftest praktisk, når man skal skrive balancer for systemer med mange reaktioner af stoffer.

$$\frac{d}{dt} \mathbf{Y} = \mathbf{Y}_0 - \mathbf{Y} - \nu \mathbf{r} \quad (4.106)$$

Det antages der i føde størme ikke er noget C eller D, det vil sige $Y_{C,0} = Y_{D,0} = 0$. Når man analyserer systemer, er det oftest interessant at se efter, hvor de ender, det vil sige de stationære punkter. Disse finder man ved at sætte $\frac{d}{dt} \mathbf{Y} = \mathbf{0}$, i det her tilfælde at balancerne for A og B kun afhænger af A og B, fordi der ikke er nogen modsatrettet reaktion. Det vil sige vi kan nøjes med at kun at se på balancen for A og B. $Y_{A,0}$ er lig med en ud fra definition af $Y_{j,0} = \frac{C_{j,0}}{C_{A,0}}$. For at gøre det simpelere

$$0 = 1 - Y_A - (\mathbf{r}_1 + 2\mathbf{r}_2) = 1 - Y_A - \hat{k}_{18} Y_A^{0.5} Y_B - 2\hat{k}_{19} Y_A \quad (4.107)$$

$$0 = Y_{B,0} - Y_B - (\mathbf{r}_1) = Y_{B,0} - Y_B - \hat{k}_{18} Y_A^{0.5} Y_B \quad (4.108)$$

Der isoleres for Y_B i de to balancer dette giver så kaldte nulllinjer som er hvor at $\frac{dY_A}{dt} = 0$ og $\frac{dY_B}{dt} = 0$ henholdsvis.

$$Y_B = \frac{1}{\hat{k}_{18} Y_A^{0.5}} - \frac{Y_A^{0.5}}{\hat{k}_{18}} (1 + 2\hat{k}_{19}) \quad (4.109)$$

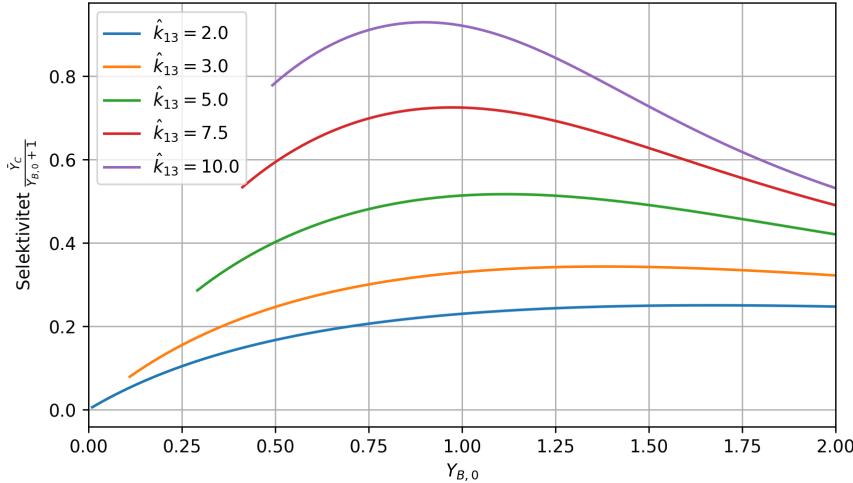
$$Y_B = \frac{Y_{B,0}}{(1 + \hat{k}_{18} Y_A^{0.5})} \quad (4.110)$$

Hvor at steedystaet ligger ved $\frac{Y_{B,0}}{(1 + \hat{k}_{18} Y_A^{0.5})} = \frac{1}{\hat{k}_{18} Y_A^{0.5}} - \frac{Y_A^{0.5}}{\hat{k}_{18}} (1 + 2\hat{k}_{19})$, dette kan løses for dog er det et meget grimt udtryk. I dette eksempel antages det at $\hat{k}_{19} = 3$. Formålet med reactor er at danne C og bruge mindste muligt A og B. Der skal findes den $Y_{B,0}$ der giver den største \hat{Y}_C i forhold til $Y_{A,0}$ og $Y_{B,0}$. $\frac{\hat{Y}_C}{Y_{A,0} + Y_{B,0}} = \frac{1 + \hat{k}_{19}}{1 + \hat{k}_{18}}$. Der bruges

KAPITEL 4. REAKTORLÆRE OG REAKTIONS KINETIK

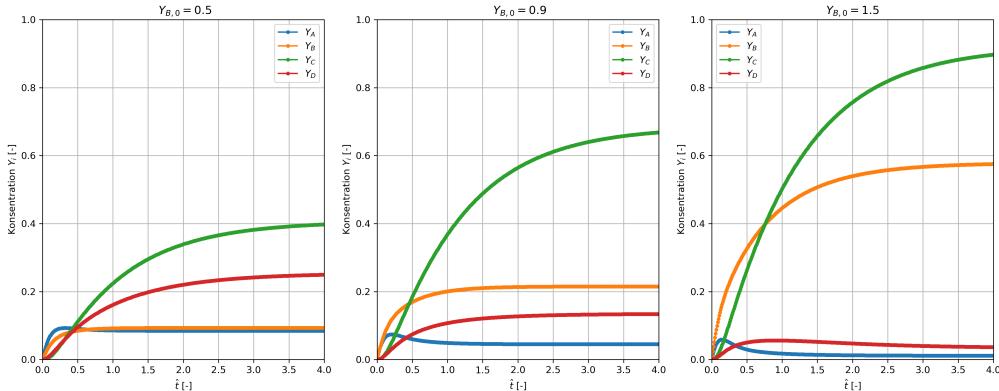
- for at vise at det er ved steady state. Steady state konsentration findes på samme måde som for A og B.

$$\frac{\bar{Y}_C}{1 + Y_{B0}} = \frac{\hat{k}_{18} \bar{Y}_A^{0.5} \bar{Y}_B}{1 + Y_{B0}} \quad (4.111)$$



Figur 4.8: Illustration af selektiviteten af C ved forskellige \hat{k}_{18} værdier og indløb start koncentration af B med konstant $\hat{k}_{19} = 3$

I figur 4.8 kan det ses at toppunktet for selektiviteten bliver forskudt mod laver $Y_{B,0}$ når reaktions hastigheden af reaktion 1 stiger i forhold til den uønsket reaktion. I figur 4.9 er der vist de tidsafhængige løsninger ved tre forskellige $Y_{B,0}$ (0.5, 0.9, 1.5), hvor at $Y_{B,0} = 0.9$ er den optimale.



Figur 4.9: Numeriske løsning til parlene reaktioner med $\hat{k}_{18} = 15$ og $\hat{k}_{19} = 3$.

Når $Y_{B,0}$ er til den lave side bliver der dannet en hel del af D da der ikke er nok B og med en $Y_{B,0} = 1.5$ bliver der dannet mere C, men der er også omkring en tredje del af B bliver splitet. I tilfældet hvor at prisen på B er meget billigere end A, vil det være en fordel at have et stort overskud af B, der der vil blive dannet mest muligt af C. Det smarte ved at bruge vektor notation er at man hurtigt kan løse problemet numerisk. Neden for er der vist koden der er brugt til at løse systemet.

Prøv at implementere samme koden også ændre på de støkiometriske koefficienter.

```
def Reaction_vec(Y, PAR):
    k13=PAR['k13']
```

```

k14=PAR['k14']

r= np.zeros(2)
r[0]=k13*Y[0]**(0.5)*Y[1]
r[1]=k14*Y[0]
return r

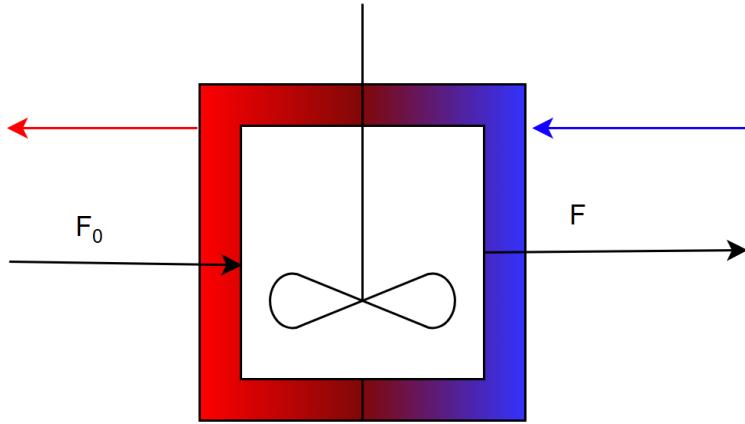
def System_af_reactioner(t,Y,PAR):
    Y0vec=PAR['Y0vec']
    nu_matrix=PAR['nu_matrix']
    r=Reaction_vec(Y,PAR)
    nu_r=np.matmul(nu_matrix, r)

    dYdt=np.zeros_like(Y)
    dYdt [:]=Y0vec-Y-nu_r

    return dYdt

PAR={}
PAR['Y0vec']=np.array([1, 0.9,0,0]) # Inlæb konsentration
PAR['nu_matrix']=np.array([[1, 2], [1, 0],[-1,0],[0,-1]])
PAR['k13']=15
PAR['k14']=3
Y0 = np.array([0,0,0,0]) # Start betingelser
t_span = (0, 10) #Tidsinterval
stof_liste = ['Y_A', 'Y_B', 'Y_C', 'Y_D'] # Navne på stoffer
sol = solve_ivp(System_af_reactioner, t_span, Y0, args=(PAR,), method='DOP853', rtol=1e-8, atol=1e-8, max_step=0.01, dense_output=True)

```



Figur 4.10: Illustration af en vilkårlig flowreaktor, hvor der både er stoftransport ind til reaktoren og varmeudveksling med en varmekappe rundt om reaktoren.

4.6 Energibalancen for reaktoren med en reaktion

Energibalancen for CSTR

I det foregående afsnit kiggede vi på balancekvadren for reaktoren, hvor temperaturen blev holdt konstant. I dette afsnit vil vi opsætte energibalancer for systemet.

Ud fra hvilken disciplin, man kommer fra, er der forskellige præferencer til at opskrive energibalancer. I dette tilfælde vil vi gerne udnytte, at vi kender reaktionskinetikken og derfor bruge hvor meget varme, der bliver frigivet fra reaktionen.

I figur 4.10 er der illustreret en åben reaktor, hvor der både er stofudveksling med omgivelserne og varmeudveksling med en varme kappe rundt om reaktoren.

Der vil nu blive udledt både stof- og energibalancer for systemet. Reaktoren er en flowreaktor, og en af hovedantagelserne er, at alt inde i reaktoren er **godt blandet**, det vil sige, der ikke er nogle koncentrationsgradienter eller tryk gradienter inde i reaktoren. Der opskrives først balancerne for hvert af stofferne inde i reaktoren.

Her anvendes den generelle balancekvadren (4.65).

$$F_{ind,i} - F_{ud,i} = \frac{dn_i}{dt} - (-\nu_i r_A V) \quad (4.112)$$

$$\frac{dn_i}{dt} = F_{ind,i} - F_{ud,i} - \nu_i r_A V \quad (4.113)$$

$$\frac{dC_i}{dt} = \frac{1}{V} (F_{ind,i} - F_{ud,i}) - \nu_i r_A \quad (4.114)$$

$$\frac{dC_i}{dt} = \frac{v_0}{V} \left(C_{ind,i} - \frac{v}{v_0} C_i \right) - \nu_i r_A = \tau \left(C_{ind,i} - \frac{v}{v_0} C_i \right) - \nu_i r_A \quad (4.115)$$

Hvor at $F_{ind,i}$ er den molare strømning (flowrate) ind til reaktoren for det i te stof, ν_i er den støkiometriske koefficient i reaktionen.

Der bliver taget udgangspunkt i termodynamikkens første hovedsætning, hvor ændringen af energi i et lukket system er lig med tilføjelse af varme og det arbejde, der bliver lavet på omgivelserne.

$$\frac{dE_{sys}}{dt} = \dot{Q} - \dot{W} \quad (4.116)$$

Termodynamikkens første lov er vist i linjen (4.116). I et åbent system kan der både blive tilføjet masse, dette kan man skrive som en molstrøm (F) ganget med den molspecifikke enthalpi (H). Man tilføjer det til balancekvadren ved at summere over alle de stoffer der bliver tilføjet.

Dette gør at energibalancen bliver til:

4.6. ENERGIBALANCE FOR REAKTOREN MED EN REAKTION

$$\frac{dE_{sys}}{dt} = \dot{Q} - \dot{W}_s + \sum_{i=1}^N F_{ind,i} H_i(T_{in}) - \sum_{i=1}^N F_{ud,i} H_i(T) \quad (4.117)$$

Hvor at \dot{W}_s er arbejde leveret af omrøring. Det er normal konvention at bruge nul for det der kommer ind i reaktoren, og det der kommer ud har ikke noget superscript, som også er vist i figur 4.10.

Ændringen af den total energi af systemet svarer for reaktoren til ændringen i den indre energi, da det antages, at den potentielle energi fra tyngdekraften er meget lille i forhold til ændringen i den indre energi.

$$\frac{dE_{sys}}{dt} \approx \frac{dU}{dt} \quad (4.118)$$

Den indre energi for systemet er summen af den indre energi af alle stoffer. Fra definitionen af enthalpi kan den indre energi for et stof i omskrives som $U_i = H_i - PV_i$, hvor V_i er det molare volumen for stof i.

$$U_{sys} = \sum_{i=1}^N U_i n_i = \sum_{i=1}^N H_i n_i - P \sum_{i=1}^N V_i = \sum_{i=1}^N H_i n_i - PV \quad (4.119)$$

Den afledte af U_{sys} er opskrevet i den følgende ligning.

$$\frac{dU_{sys}}{dt} = \frac{d}{dt} \left(\sum_{i=1}^N H_i n_i - PV \right) \approx \frac{d}{dt} \left(\sum_{i=1}^N H_i n_i \right) = \sum_{i=1}^N \frac{dH_i}{dt} n_i + \frac{dn_i}{dt} H_i \quad (4.120)$$

Enthalpien for stof i kan skrives som ligning (4.121), hvor at $C_{p,i}$ er den molare varmekapacitet ved konstant tryk for stof i og fra det kan der udledes et udtryk for ændring af enthalpien.

$$H_i(T) = H_i^o(T_{ref}) + \int_{T_{ref}}^T C_{p,i} dT \quad (4.121)$$

$$\frac{dH_i}{dt} = C_{p,i} \frac{dT}{dt} \quad (4.122)$$

Udtrykket for ændringen i enthalpi (ligning (4.122)) indsættes i ligning (4.120), der så indsættes i energibalancen ((4.117)).

$$\sum_{i=1}^N C_{p,i} \frac{dT}{dt} n_i + \frac{dn_i}{dt} H_i = \dot{Q} - \dot{W}_s + \sum_{i=1}^N F_{0,i} H_i(T_0) - \sum_{i=1}^N F_i H_i(T) \quad (4.123)$$

$$\frac{dT}{dt} \sum_{i=1}^N C_{p,i} n_i = \dot{Q} - \dot{W}_s + \sum_{i=1}^N F_{0,i} H_i(T_0) - \sum_{i=1}^N F_i H_i(T) - \sum_{i=1}^N \frac{dn_i}{dt} H_i \quad (4.124)$$

Der indsættes udtrykket for stofbalance $\frac{dn_i}{dt}$ ligning (4.113) i energibalancen (4.124). Udtrykket $\sum_{i=1}^N C_{p,i} n_i$ kan skrives som nC_p hvor C_p er den molare gennemsnitlige varmekapacitet.

$$\frac{dT}{dt} nC_p = \dot{Q} - \dot{W}_s + \sum_{i=1}^N F_{0,i} H_i(T_0) - \sum_{i=1}^N F_i H_i(T) + \sum_{i=1}^N -F_{0,i} H_i(T) + F_i H_i(T) + \nu_i r_A V H_i(T) \quad (4.125)$$

$$\frac{dT}{dt} nC_p = \dot{Q} - \dot{W}_s + \sum_{i=1}^N F_{0,i} (H_i(T_0) - H_i(T)) + r_A V \sum_{i=1}^N \nu_i H_i(T) \quad (4.126)$$

KAPITEL 4. REAKTORLÆRE OG REAKTIONS KINETIK

Reaktionsenthalpien $\Delta H_r(T)$, som er den varme, der bliver frigjort ved hver reaktion, er defineret som $\sum_{i=1}^N \nu_i H_i(T)$. Af praktiske årsager vil man hellere have $-r_A$, det svarer til, hvor meget der bliver brugt, i stedet for hvor meget der bliver dannet.

$$\frac{dT}{dt} nC_p = \dot{Q} - \dot{W}_s + \sum_{i=1}^N F_{0,i} (H_i(T_0) - H_i(T)) - r_A V \cdot (-\Delta H_r) \quad (4.127)$$

$$\frac{dT}{dt} = \frac{\dot{Q} - \dot{W}_s + \sum_{i=1}^N F_{0,i} (H_i(T_0) - H_i(T)) - r_A V \cdot -(\Delta H_r)}{nC_p} \quad (4.128)$$

I ligning (4.130) er der nu blevet udledt et udtryk for energibalancen. Dette udtryk kan bruges til både batch-reaktorer og CSTR-reaktorer.

Det samlede system for en given CSTR/batch-reaktor bliver følgende, hvor at der for molstrøm (F) bliver anvendt $F_A = C_A v_0$.

$$\frac{dC_i}{dt} = \frac{1}{\tau} \left(C_{0,i} - \frac{v}{v_0} C_i \right) - \nu_i r_A, \forall i \in [0, N] \quad (4.129)$$

$$\frac{dT}{dt} = \frac{\frac{1}{V} \dot{Q} - \frac{1}{V} \dot{W}_s + \frac{1}{\tau} \sum_{i=1}^N C_{0,i} (H_i(T_0) - H_i(T)) - r_A(C, T) \cdot -\Delta H_r(T)}{C_{tot} C_p} \quad (4.130)$$

Eksempel

I dette tilfælde vil der blive set på en CSTR-reaktor med 3 stoffer A,B og C og hvor den følgende reaktion foregår.



R20 har følgende reaktionshastighedsudtryk(4.131).

$$-r_A(C_A, T) = k(T) C_A^2 = A \exp \left(-\frac{E_a}{RT} \right) C_A^2 \quad (4.131)$$

Det antages, at trykket er konstant på 5 bar i hele reaktoren.

Ved tiden nul er $C_A, C_B, C_C = C_{A0}, 0,5C_{A0}$. Vi starter med at antage, at det er adiabatisk, det vil sige, der ikke er nogen varmeudveksling. Desuden antager vi, at arbejde fra omrøring kan negligeres.

I indløbsstrømmen er der kun A og C og ikke noget B. Det antages, at der til at starte med er 5 gange så meget C som A. Der opsættes balancere for de tre stoffer og der findes et udtryk for den samlede molstrøm (F_T). Hvor at X bliver defineret som $X = \frac{C_{0,A} - C_A}{C_{0,A}}$.

$$F_A = F_{0,A} (1 - X) \quad (4.132)$$

$$F_B = F_{0,A} \frac{1}{2} X \quad (4.133)$$

$$F_C = F_{0,C} = 5F_{0,A} \quad (4.134)$$

$$F_T = F_A + F_B + F_C = F_{0,A} \left(1 - \frac{X}{2} \right) + F_{0,C} = F_{0,A} \left(6 - \frac{X}{2} \right) \quad (4.135)$$

Den faktiske volumestrøm hastighed (v) afhænger både af hvordan reaktion forløber, men også af temperatur. Et udtryk for hvordan v ændrer sig som en funktion af omdannelse kan findes ud fra det total molflow. Hvordan v afhænger af temperaturen bliver udregnet via idealgasligningen.

4.6. ENERGIBALANCE FOR REAKTOREN MED EN REAKTION

$$\frac{v(T_0)}{v_0} = \frac{F_T}{F_{0,T}} = \frac{6 - \frac{X}{2}}{6} = 1 - \frac{1}{12}X \rightarrow v(T_0, X) = v_0 \left(1 - \frac{1}{12}X\right) \quad (4.136)$$

$$\frac{v(T,0)}{v_0} = \frac{\frac{F_T(0)RT}{P}}{\frac{F_{0,T}RT_0}{P}} = \frac{T}{T_0} \rightarrow v(T,0) = v_0 \frac{T}{T_0} \quad (4.137)$$

$$v(T, X) = v_0 \frac{T}{T_0} \left(1 - \frac{1}{12}X\right) \quad (4.138)$$

Dette indsættes i udtrykkene for stof- og energibalancerne. I dette tilfælde hvor der kun er én reaktion er det nemmere kun at se på, hvordan udvikling af omdannelse (X) af A sker, da både koncentration af B og C kan regnes ud fra X. For at introducere en dimensionsløs temperatur, bruges $\hat{T} = \frac{T}{T_0}$

$$\frac{d}{dC_A} X = \frac{d}{dC_A} \left(\frac{C_{A0} - C_A}{C_{A0}} \right) = -\frac{1}{C_{A0}} \rightarrow -dX C_{A0} = dC_A \quad (4.139)$$

En dimensionsløs tidsenhed introduceres $\hat{t} = \frac{t}{\tau}$, og vi bruger $C_A = C_{A0}(1 - X)$.

$$\frac{dC_A}{dt} = \frac{1}{\tau} \left(C_{A0} - \frac{v_0 \frac{T}{T_0} (1 - \frac{1}{12}X)}{v_0} C_A \right) + r_A \quad (4.140)$$

$$-\frac{dX}{d\hat{t}} \frac{C_{A0}}{\tau} = \frac{1}{\tau} \left(C_{A0} - \hat{T} \left(1 - \frac{1}{12}X\right) C_{A0}(1 - X) \right) - A \exp \left(-\frac{E_a}{RT} \right) C_{A0}^2 (1 - X)^2 \quad (4.141)$$

$$\frac{dX}{d\hat{t}} = - \left(1 - \hat{T} \left(1 - \frac{1}{12}X\right) (1 - X) \right) + \tau A \exp \left(-\frac{E_a}{R\hat{T}T_0} \right) C_{A0} (1 - X)^2 \quad (4.142)$$

I det her tilfælde bliver der antaget, at varmekapaciteten er konstant i forhold til tempeauraen, det er for at gøre eksemplet mindre bøvlet. Derudover antages detm at reationsenthalpien er konstant.

$$\frac{dT}{dt} = \frac{\frac{1}{V}\dot{Q} - \frac{1}{V}\dot{W}_s + \frac{1}{\tau} \sum_{i=1}^N C_{0,i} (H_i(T_0) - H_i(T)) - r_A(\mathbf{C}, T) \cdot -\Delta H_r(T)}{C_{tot} C_p} \quad (4.143)$$

$$\frac{d\hat{T}}{d\hat{t}} \frac{T_0}{\tau} = \frac{\frac{1}{\tau} \sum_{i=1}^N C_{0,i} (C_{p,i}(T_0 - T_{ref}) - C_{p,i}(T - T_{ref})) - r_A(\mathbf{C}, T) \cdot -\Delta H_r(T)}{C_{tot} C_p} \quad (4.144)$$

$$\frac{d\hat{T}}{d\hat{t}} = \frac{\sum_{i=1}^N C_{0,i} (C_{p,i}(1 - \hat{T}))}{C_{tot} C_p} + \tau \frac{-r_A(\mathbf{C}, T) \cdot -\Delta H_r}{C_{tot} C_p T_0} = \frac{(1 - \hat{T}) C_{A0} (C_{p,A} + 5C_{p,B})}{C_{tot} C_p} + \tau \frac{-r_A(\mathbf{C}, T) \cdot -\Delta H_r}{C_{tot} C_p T_0} \quad (4.145)$$

Den totale molare konsentration er regnet fra den totale molstrøm fra ligning (4.135).

$$C_{tot} = F_T \frac{1}{v_0} = F_{0,A} \frac{1}{v_0} \left(6 - \frac{X}{2}\right) = C_{A0} \left(6 - \frac{X}{2}\right) \quad (4.146)$$

Den gennemsnitlige varmekapacitet can også skives som en funktion af omdannelse.

$$C_p = \sum_{i=1}^N C_{p,i} y_i = \sum_{i=1}^N C_{p,i} \frac{C_i}{C_{tot}} = \frac{C_{A0}}{C_{tot}} \left(C_{p,A}(1 - X) + C_{p,B} \left(\frac{1}{2}X \right) + C_{p,C} 5 \right) \quad (4.147)$$

$$C_p C_{tot} = C_{A0} \left(C_{p,A}(1 - X) + C_{p,B} \left(\frac{1}{2}X \right) + C_{p,C} 5 \right) \quad (4.148)$$

Dette kan nu indsættes i energibalancen.

KAPITEL 4. REAKTORLÆRE OG REAKTIONS KINETIK

$$\frac{d\hat{T}}{dt} = \frac{(1 - \hat{T})(C_{p,A} + 5C_{p,B})}{C_{p,A}(1 - X) + C_{p,B}(\frac{1}{2}X) + C_{p,C}5} + \tau \frac{C_{A0}^2(1 - X)^2 A \exp\left(-\frac{E_a}{R\hat{T}T_0}\right) \cdot -\Delta H_r}{C_{A0}(C_{p,A}(1 - X) + C_{p,B}(\frac{1}{2}X) + C_{p,C}5) T_0} \quad (4.149)$$

$$\frac{d\hat{T}}{dt} = \frac{(1 - \hat{T})(C_{p,A} + 5C_{p,B})}{C_{p,A}(1 - X) + C_{p,B}(\frac{1}{2}X) + 5C_{p,C}} + \tau \frac{C_{A0}(1 - X)^2 A \exp\left(-\frac{E_a}{R\hat{T}T_0}\right) \cdot -\Delta H_r}{(C_{p,A}(1 - X) + C_{p,B}(\frac{1}{2}X) + 5C_{p,C}) T_0} \quad (4.150)$$

$$\frac{d\hat{T}}{dt} = \frac{(1 - \hat{T})(C_{p,A} + 5C_{p,B})}{C_{p,A}(1 - X) + C_{p,B}(\frac{1}{2}X) + 5C_{p,C}} + \frac{(1 - X)^2 D_a \exp\left(-\frac{E_a}{R\hat{T}T_0}\right) \cdot -\Delta H_r}{(C_{p,A}(1 - X) + C_{p,B}(\frac{1}{2}X) + 5C_{p,C}) T_0} \quad (4.151)$$

Der introduceres en ny dimensionsstørrelse, som går under navnet Damköhler talet (D_A). Der er nu blevet opstillet et system, der kan løses.

$$\frac{dX}{dt} = \left(1 - \hat{T} \left(1 - \frac{1}{12}X\right)(1 - X)\right) + D_a \exp\left(-\frac{E_a}{R\hat{T}T_0}\right) (1 - X)^2 \quad (4.152)$$

$$\frac{d\hat{T}}{dt} = \frac{(1 - \hat{T})(C_{p,A} + 5C_{p,B})}{C_{p,A}(1 - X) + C_{p,B}(\frac{1}{2}X) + 5C_{p,C}} + \frac{(1 - X)^2 D_a \exp\left(-\frac{E_a}{R\hat{T}T_0}\right) \cdot -\Delta H_r}{(C_{p,A}(1 - X) + C_{p,B}(\frac{1}{2}X) + 5C_{p,C}) T_0} \quad (4.153)$$

For illustrationens skyld kan vi se på et system hvor det kan antages at C_p kan antages ikke at være afhængig af omdannelse (X), og at reaktionsenthalpien kan antages at være konstant. Der bliver dannet en ny dimensionløs størrelse, som bliver kaldt for $D_{A,II} = \frac{-\Delta H_r}{C_{p,0}T_0}$ og en anden dimensionløs størrelse $\alpha = \frac{C_{p,A} + 5C_{p,B}}{C_{p,0}}$, og for aktiveringsenergien bruges $\hat{E}_a = \frac{E_a}{RT_0}$

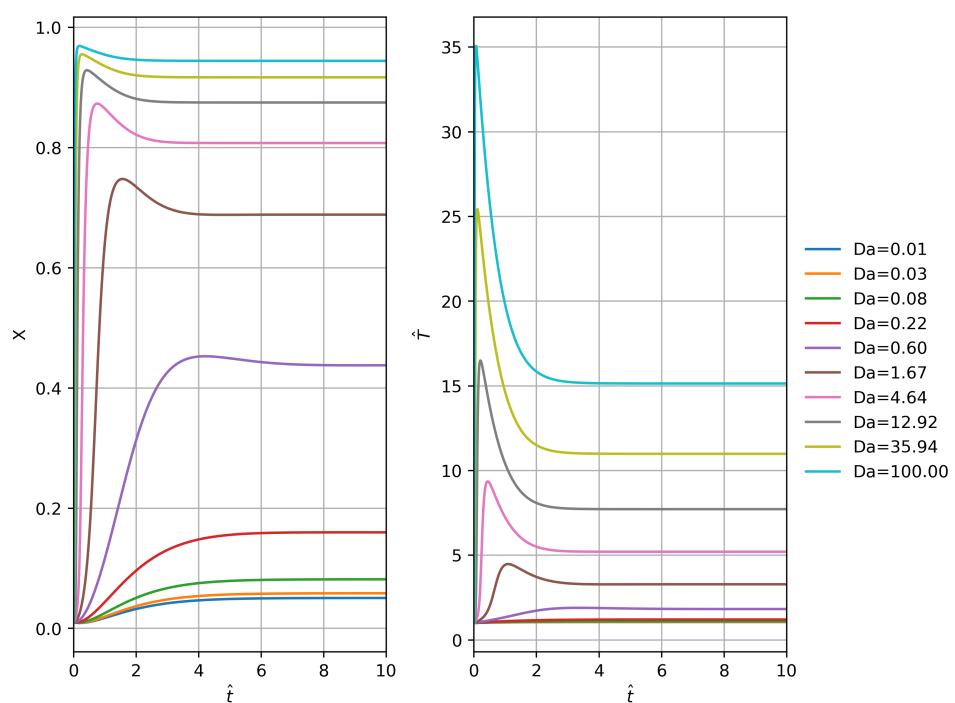
$$\frac{dX}{dt} = - \left(1 - \hat{T} \left(1 - \frac{1}{12}X\right)(1 - X)\right) + D_a \exp\left(-\frac{\hat{E}_a}{\hat{T}}\right) (1 - X)^2 \quad (4.154)$$

$$\frac{d\hat{T}}{dt} = (1 - \hat{T})\alpha + (1 - X)^2 D_a D_{a,II} \exp\left(-\frac{\hat{E}_a}{\hat{T}}\right) \quad (4.155)$$

Dette system kan løses numerisk ved at bruge f.eks. en Runge–Kutta methode. Dette er vist i figur 4.11

I figur 4.11 er der vist simuleringen for et valgt sæt af parametre og med et varierende Damköhler-tal. Her kan man se, at alle simuleringer blever konstante, det vil sige, at de når et stedm hvor at $\frac{dX}{dt} = 0$ og $\frac{d\hat{T}}{dt} = 0$. Det er, hvad man kalder et fikspunkt. D_a har betydning for, hvorløsningen ender, $D_a = 100$ giver en omdannelse på omkring 95% og en $D_a = 0.1$ giver en omdannelse på omkring 0.5%. Man kan analysere systemet ved at bruge metoder fra dynamisk systemteori, og det vil vi gå i dybden med senere.

4.6. ENERGIBALANCE FOR REAKTOREN MED EN REAKTION



Figur 4.11: Numerisk løsning af system (4.154)-(4.155), med $D_{aII} = 60$, $\alpha = 0.95$, $\hat{E}_a = 5$ og med varierende $D_a \in \{0.01, 0.03, 0.08, 0.22, 0.6, 1.67, 4.64, 12.92, 35.94, 100\}$

Kapitel 5

Differentialgeometri

5.1 Differentialgeometri

I første afsnit går vi i dybden med hvad euklidisk - klassisk - geometri er, og i senere afsnit vil vi gå i dybden med mere interessante og kraftfulde differentialgeometrier - herunder riemannsk geometri - som bl.a. bruges til Einsteins generelle relativitetsteori. Noget af det måske mest brugbare ved differentialgeometri er dens evne til at måle og finde korteste ruter mellem to punkter på arbitraære mangfoldigheder via geodæter som er løsningerne til de *geodætiske* differentialligninger. En *mangfoldighed* er groft sagt et fysisk objekt eller rum. Og en *geodæt* γ er en kortest kurve på en mangfoldighed under givne afstandsforhold.

Euklidisk geometri

Når vi ser ordet 'geometri' tænker vi nok på ord som vinkler, længder, afstande; arealer og volumener af geometriske objekter - i planen eller i rummet. Her er genstanden til at måle størrelser med en lineal og vinkelmåler, og observatøren er os mennesker. Denne form for geometri omtales euklidisk geometri, navngivet efter den græske matematiker Euklid. Et (matematisk) rum hvor euklidisk geometri foregår i kaldes et *euklidisk* rum, og derinde kan vi bruge den samme lineal og vinkelmåler, uanset hvorhenne i rummet vi befinder os. Rummet hverken skrumper eller udstrækkes, og det er det, som kendetegner euklidiske rum.



Figur 5.1: Euklid (c. 300 bca)

P
•

Figur 5.2: \mathbb{E}^0



Figur 5.3: \mathbb{E}^1

Det nul-dimensionelle euklidiske rum \mathbb{E}^0

Vi er landet i det 0-dimensionelle euklidiske rum, som tildeles notationen \mathbb{E}^0 . Dette rum er kendtegnet ved at have et enkelt punkt P og en enkelt vektor $\mathbf{0}$ (nulvektoren). Vi ankommer ved punktet P og kan bevæge os i retningen af $\mathbf{0}$. Hvis vi gør dette, ankommer vi til selvsamme punkt vi startede i: $P + \mathbf{0} = P$. Her er det "pointless" at bruge koordinater.

Det 1-dimensionelle euklidiske rum \mathbb{E}^1

Vi er sprunget videre til det 1-dimensionelle euklidiske rum \mathbb{E}^1 . I modsætning til \mathbb{E}^0 , er \mathbb{E}^1 uendeligt stort. Med visuelle termer er \mathbb{E}^1 en ret linje uden ende. Det er et *affint* rum, hvilket vil sige, at der eksisterer både punkter og vektorer her. Punkter er kendtegnet ved at have en position, hvor vektorer er kendtegnet ved at have retning og længde. Hver vektor er også kendtegnet ved at forbinde to punkter: Lad P være et punkt, og \vec{v} en vektor. Vi kan lægge \vec{v} til P og få et nyt punkt: $P + \vec{v} = Q$. Vores udgangspunkt er punktet P og derfra bevæger vi os langs vektoren \vec{v} for så at ankomme til punktet Q . I dette tilfælde kaldes vektoren \vec{v} *translationsvektoren* fra P til Q og gives notationen \overrightarrow{PQ} . \mathbb{E}^1 kan konstrueres ud fra et enkelt punkt P og en enkel (egentlig) vektor \vec{e}_1 som

$$\mathbb{E}^1 = \{P + x_1 \vec{e}_1 : x_1 \in \mathbb{R}\}.$$

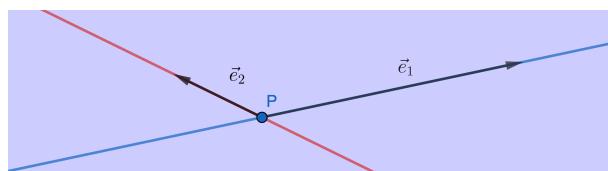
Her kan hvert punkt beskrives med et enkelt koordinat x_1 .

Det 2-dimensionelle euklidiske rum \mathbb{E}^2

Vi er nu i det 2-dimensionelle euklidiske rum \mathbb{E}^2 , som ligesom \mathbb{E}^1 er et affint rum (med punkter og vektorer). Her er der uendeligt meget mere plads sammenlignet med \mathbb{E}^1 , i den forstand at \mathbb{E}^2 har en ekstra dimension. Med visuelle termer er \mathbb{E}^2 et rektangel uden ende. Hvis vi har et punkt P og to (egentlige) ikke-parallelle vektorer \vec{e}_1 og \vec{e}_2 som

$$\mathbb{E}^2 = \{P + x_1 \vec{e}_1 + x_2 \vec{e}_2 : x_1, x_2 \in \mathbb{R}\}.$$

(To vektorer er parallelle hvis de er kollineære - at den ene vektor kan skrives som en skalar ganget den anden vektor.) Her kan hvert punkt beskrives med to koordinater x_1 og x_2 .



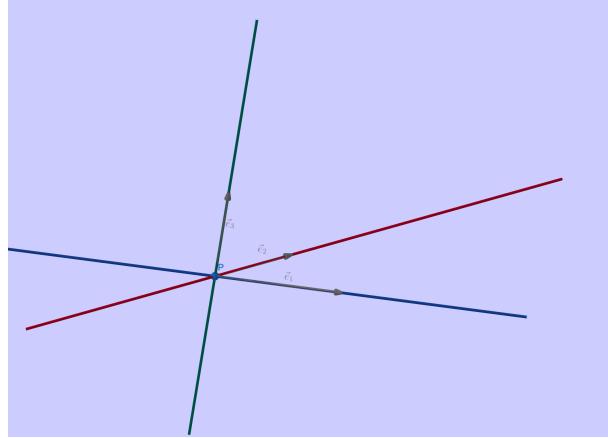
Figur 5.4: \mathbb{E}^2

Det 3-dimensionelle euklidiske rum \mathbb{E}^3

Vores univers er endnu engang udvidet med 1 dimension, og vi er landet i det 3-dimensionelle (affine) euklidiske rum \mathbb{E}^3 , som ligner en kasse uden ende. For at konstruere dette univers - dette matematiske rum - skal vi bruge et punkt, P , og tre (egentlige) lineært uafhængige vektorer, \vec{e}_1 , \vec{e}_2 og \vec{e}_3 :

$$\mathbb{E}^3 = \{P + x_1\vec{e}_1 + x_2\vec{e}_2 + x_3\vec{e}_3 : x_1, x_2, x_3 \in \mathbb{R}\}.$$

Denne gang skal vi bruge tre koordinater til at beskrive et punkts position: x_1 , x_2 og x_3 .



Figur 5.5: \mathbb{E}^3

Det n -dimensionelle euklidiske rum \mathbb{E}^n

Nu springer vi videre til (affine) n -dimensionelle euklidiske rum \mathbb{E}^n , hvor $n \in \mathbb{N}$ kan være et hvilket som helst naturligt tal. Til vores formål kommer vi til at begrænse os til tilfældene $n \leq 3$, men dette forhindrer os ikke i at definere hvordan disse matematiske rum "ser" ud. Lad $P \in \mathbb{E}^n$ være et givet punkt, og $\vec{e}_1, \dots, \vec{e}_n \in \overrightarrow{\mathbb{E}^n}$ være n lineært uafhængige vektorer. (For at distingvere punkter fra vektorer, bruger vi notationen \mathbb{E}^n til at betegne den uendelige mængde af punkter i rummet, og $\overrightarrow{\mathbb{E}^n}$ den uendelige mængde af vektorer i rummet.) Med disse ingredienser kan - og vil - vi konstruere punktmængden \mathbb{E}^n som

$$\mathbb{E}^n = \{P + x_1\vec{e}_1 + \dots + x_n\vec{e}_n : x_1, \dots, x_n \in \mathbb{R}\}. \quad (5.1)$$

Her bliver punkter altså repræsenteret med n koordinater: x_1, \dots, x_n . Ydermere siger vi, at vektorerne $\vec{e}_1, \dots, \vec{e}_n$ udgør en *basis* for rummet. Ofte vil man også kræve, at basisvektorerne - vektorerne fra basen - er ortogonale på hinanden og hver især have længden 1. I så fald kaldes basen *ortonormal*. To vektorer er som bekendt ortogonale på hinanden, hvis de danner en ret vinkel imellem hinanden, eller hvis projektionen af den ene vektor på den anden resulterer i *nulvektoren* - den tomme vektor.

Nogle nyttige begreber

Ovenfor har vi brugt ordene *vektor* og *punkter* uden helt at definere, hvad det er for nogle matematiske objekter, og hvordan de er kompatible med hinanden. Hvorfor må vi fx lægge en vektor sammen med et punkt, og hvordan skal denne operation forstås? Vi har også brugt ordet *koordinater* uden at præcisere et *koordinatsystem* for rummet. Dette kan nemlig gøres på mange måder. Derudover nævnes *ortogonalitet*, *vektorprojektion*, og *vinkel* mellem to vektorer. Men hvad betyder disse begreber egentlig, og hvordan

KAPITEL 5. DIFFERENTIALGEOMETRI

defineres de? For at svare på disse spørgsmål tager vi først en tur forbi den abstrakte matematiske verden bestående af vektorrum - de matematiske rum hvor vektorer eksisterer:

Definition 1: Lad \vec{V} være en mængde. Elementerne $\vec{v}, \vec{w} \in \vec{V}$ kaldes vektorer, og tallene $a, b \in \mathbb{R}$ kaldes skalarer. Antag nu, at vektor-addition $(\vec{v} + \vec{w})$ og skalar-multiplikation $(a\vec{v})$ er to veldefinerede operatorer, som overholder følgende regneregler:

1. (Kommutativitet) $\vec{v} + \vec{w} = \vec{w} + \vec{v}$,
2. (Associativitet) $\vec{u} + (\vec{v} + \vec{w}) = (\vec{u} + \vec{v}) + \vec{w}$,
3. (Det neutrale element under vektor-addition) $\vec{v} + \vec{0} = \vec{v}$,
4. (Enhver vektor har en invers vektor) $\vec{v} + (-\vec{v}) = \vec{0}$,
5. (Kompatibilitet af alm. og skalar-vektor-multiplikation) $a(b\vec{v}) = (ab)\vec{v}$,
6. (Det neutrale tal under multiplikation) $1\vec{v} = \vec{v}$,
7. (Distributivitet 1) $a(\vec{v} + \vec{w}) = a\vec{v} + a\vec{w}$,
8. (Distributivitet 2) $(a + b)\vec{v} = a\vec{v} + b\vec{v}$.

I så fald kaldes tuplen $(\vec{V}, +, \cdot)$ et (reelt) vektorrum.

Bemærkning. Ovenstående aksiomer / regler generaliserer vores almindelige forståelse for hvad en vektor er. Intuitivt forstår vi en vektor som et matematisk objekt med en retning og en størrelse. Naturligvis kan vi lægge vektorer til hinanden og få en ny vektor. Ligeledes har det ingen betydning hvilken rækkefølge vi lægger vektorer sammen i. Hvis vi betragter en vektor, kan vi naturligvis også betragte dens modsatrettede vektor. Lægger vi disse to sammen får vi naturligvis en vektor som ingen retning eller størrelse har. Hvis vi skalerer en vektor med 1, får vi vores oprindelige vektor, osv. Der er en vigtig egenskab omkring vektorer og vektorrum - nemlig deres dimension. Intuitivt forstår vi et vektorrum med dimension 1 som vektorer der ligger på en linje, og vektorrum med dimension 2 som vektorer der ligger i planen, osv.

Eksempel 1: I lineær algebra defineres en vektor \vec{v} som en (real) n -tupel, altså en liste af n reelle tal: $\vec{v} = (v_1, \dots, v_n) \in \mathbb{R}^n$. Hvis $\vec{w} = (w_1, \dots, w_n) \in \mathbb{R}^n$ er endnu en vektor, er vektorsummen $\vec{v} + \vec{w} \in \mathbb{R}^n$ givet ved

$$\vec{v} + \vec{w} = (v_1 + w_1, \dots, v_n + w_n). \quad (5.2)$$

Hvis $a \in \mathbb{R}$ er en skalar, er skalarmultiplikationen $a\vec{v} \in \mathbb{R}^n$ givet ved

$$a\vec{v} = (av_1, \dots, av_n). \quad (5.3)$$

Og nulvektoren $\vec{0} \in \mathbb{R}^n$ er vektoren hvis indgange alle er nul:

$$0_i = 0, \forall i \in \{1, \dots, n\}. \quad (5.4)$$

Man kan vise, at rummet \mathbb{R}^n - sammen med ovenstående definition af vektoraddition og skalarmultiplikation - er et reelt vektorrum.

Eksempel 2: Mængderne \mathbb{R}^1 , \mathbb{R}^2 og \mathbb{R}^3 , hvor nulvektoren $\vec{0}$, vektoraddition og skalarmultiplikation er definerede via ligningerne (5.2), (5.3), og (5.4) er alle reelle vektorrum.

Efter at have fået afklaret, hvordan en matematisk vektor defineres, vil vi kigge på, hvad en vektorbasis er, og hvordan denne kan bruges til at konstruere et vektorrum:

Definition 2: Lad \vec{V} betegne et vektorrum. Hvis alle vektorer fra \vec{V} kan skrives som en linearkombination af en mængde $\mathcal{B} = \{\vec{v}_1, \dots, \vec{v}_n\} \subset \vec{V}$, siges \mathcal{B}^n at udgøre en *vektorbasis* for \vec{V} , og vi skriver $\vec{V} = \text{span}(\mathcal{B}^n)$. Basen \mathcal{B}^n kaldes ydermere *minimal*, hvis der ikke findes en mindre basis for \vec{V} . I så fald har \vec{V} dimension n .

Eksempel 3: Vi betragter nu vektorrummet \mathbb{R}^2 fra eksempel 2. Lad mængden \mathcal{B}^2 bestå af vektorerne $\vec{e}_1 = (1,0)$ og $\vec{e}_2 = (0,1)$, altså

$$\mathcal{B}^2 = \{(1,0), (0,1)\}.$$

Denne udgør en basis for \mathbb{R}^2 , og den er minimal, eftersom vi skal bruge minimum to vektorer til at udspænde planen \mathbb{R}^2 , som har dimension 2.

Eksempel 4: Vektorrummet \mathbb{R}^3 fra eksempel 2 har en minimal basis

$$\mathcal{B}^3 = \{(1,0,0), (0,1,0), (0,0,1)\},$$

og \mathbb{R}^3 har altså dimension 3.

Før vi kan definere vinkler, ortogonalitet, vektorprojektioner, længder og afstande, skal vi bruge nogle målestok: Et *indre produkt* og en *vektornorm*:

Definition 3: Lad \vec{V} være et vektorrum, og antag, at vi er givet en funktion $\langle \cdot, \cdot \rangle : \vec{V} \times \vec{V} \mapsto \mathbb{R}$, som opfylder følgende regneregler:

1. (Symmetri) $\langle \vec{v}, \vec{w} \rangle = \langle \vec{w}, \vec{v} \rangle$,
2. (Linearitet) $\langle a \cdot \vec{u} + b \cdot \vec{v}, \vec{w} \rangle = a \cdot \langle \vec{u}, \vec{w} \rangle + b \cdot \langle \vec{v}, \vec{w} \rangle$,
3. (Positiv definit) $\langle \vec{v}, \vec{v} \rangle > 0$ for $\vec{v} \neq \vec{0}$.

I så fald kaldes $\langle \cdot, \cdot \rangle$ et *indre produkt*, og tuplen $(\vec{V}, \langle \cdot, \cdot \rangle)$ et *indre produkt-rum*.

Eksempel 5: Vi betragter nu vektorrummet \mathbb{R}^n fra eksempel 1. Vi definerer nu et indre produkt $\langle \vec{v}, \vec{w} \rangle$ mellem to vektorer $\vec{v}, \vec{w} \in \mathbb{R}^n$ som

$$\langle \vec{v}, \vec{w} \rangle = v_1 w_1 + \cdots + v_n w_n. \quad (5.5)$$

Dette er det velkendte prikprodukt, altså er prikproduktet et indre produkt.

Eksempel 6: Et indre produkt er ligeledes defineret for vektorrummet \mathbb{R}^2 via

$$\langle \vec{v}, \vec{w} \rangle = v_1 w_1 + v_2 w_2. \quad (5.6)$$

Eksempel 7: Og for vektorrummet \mathbb{R}^3 via

$$\langle \vec{v}, \vec{w} \rangle = v_1 w_1 + v_2 w_2 + v_3 w_3. \quad (5.7)$$

Definition 4: Funktionen $|\cdot| : \vec{V} \mapsto \mathbb{R}_0$ givet ved

$$|\vec{v}| = \sqrt{\langle \vec{v}, \vec{v} \rangle} \quad (5.8)$$

kaldes en *vektornorm*, og $|\vec{v}|$ læses *normen* - eller længden - af vektoren \vec{v} .

Sætning 1: En norm har følgende nyttige egenskaber for alle $\vec{v}, \vec{w} \in \vec{V}$, $\alpha \in \mathbb{R}$.

1. Absolut homogenitet: $|\alpha\vec{v}| = |\alpha||\vec{v}|$
2. Trekantsuligheden: $|\vec{v} + \vec{w}| \leq |\vec{v}| + |\vec{w}|$
3. Pythagoras sætning: $\vec{v} \perp \vec{w} \implies |\vec{v} + \vec{w}|^2 = |\vec{v}|^2 + |\vec{w}|^2$.

Definition 5: Vinklen $\angle(\vec{v}, \vec{w})$ mellem \vec{v} og \vec{w} defineres som det mindste tal i intervallet $[0, 2\pi]$ for hvilket der gælder

$$\cos \angle(\vec{v}, \vec{w}) = \frac{\langle \vec{v}, \vec{w} \rangle}{|\vec{v}| |\vec{w}|}. \quad (5.9)$$

Eksempel 8: Betragt vektoren $\vec{v} = (-1, 2, 5) \in \mathbb{R}^3$. Denne har længden(normen)

$$|(-1, 2, 5)| = \sqrt{\langle (-1, 2, 5), (-1, 2, 5) \rangle} = \sqrt{(-1)^2 + 2^2 + 5^2} = \sqrt{30},$$

når det indre produkt er defineret som prikproduktet i ligning (5.7).

Nu når vi har defineret begreberne indre produkt og vektornorm, kan vi præcisere begreberne *ortogonalitet* og *ortonormal vektorbasis*:

Definition 6: Lad $\{\vec{e}_1, \dots, \vec{e}_n\}$ være en vektorbasis for et indre produkt-rum \vec{V} med dimension n . Lad der gælde

$$\langle \vec{e}_i, \vec{e}_j \rangle = 0 \text{ for alle } i, j \in \{1, \dots, n\} \text{ hvor } i \neq j. \quad (5.10)$$

Da siges $\{\vec{e}_1, \dots, \vec{e}_n\}$ at udgøre en *ortogonal* vektorbasis for \vec{V} . Hvis også

$$|\vec{e}_i| = 1 \text{ for alle } i \in \{1, \dots, n\}, \quad (5.11)$$

kaldes vektorerne for *enhedsvektorer*, og basen udgør en *ortonormal* vektorbasis for \vec{V} .

Notation. Vi vil også benytte os af notationen $\vec{e}_i \perp \vec{e}_j$ for at indikere, at vektorerne \vec{e}_i og \vec{e}_j er ortogonale, altså

$$\langle \vec{e}_i, \vec{e}_j \rangle = 0 \iff \vec{e}_i \perp \vec{e}_j.$$

Eksempel 9: Basen \mathcal{B}^2 fra eksempel 3 og er ortonormal for vektorrummet \mathbb{R}^2 .

Eksempel 10: Basen \mathcal{B}^3 fra eksempel 4 og er ortonormal for vektorrummet \mathbb{R}^3 .

Eksempel 11: Mængden $\mathcal{B}^n = \{\vec{e}_1, \dots, \vec{e}_n\} \subset \mathbb{R}^n$, hvor indgangen j til vektoren \vec{e}_i er givet ved

$$(\vec{e}_i)_j = \begin{cases} 0, & \text{hvis } j \neq i \\ 1, & \text{hvis } j = i, \end{cases} \quad (5.12)$$

udgør en ortonormalbasis for vektorrummet \mathbb{R}^n .

Det skal vise sig, at ethvert reelt (indre produkt-rum)vektorrum med endelig dimension n har en ortonormalbasis:

Sætning 2: Lad $\vec{e}_1, \dots, \vec{e}_k$ være en mængde enhedsvektorer fra et indre produkt-rum \overrightarrow{V} , som er ortogonale på hinanden, altså $\langle \vec{e}_i, \vec{e}_j \rangle = 0$ og $|\vec{e}_i| = 1$ for alle $i, j \in \{1, \dots, k\}$ hvor $j \neq i$. Med andre ord, $\{\vec{e}_1, \dots, \vec{e}_k\}$ er en ortonormal vektorbasis for et underrum af \overrightarrow{V} med dimension k . Lad der så være givet en vektor $\vec{v}_{k+1} \in \overrightarrow{V}$, som er lineært uafhængig af $\vec{e}_1, \dots, \vec{e}_k$. Lad vektoren \vec{e}_{k+1} være givet ved

$$\vec{e}_{k+1} = \frac{\vec{w}_{k+1}}{|\vec{w}_{k+1}|} \quad (5.13)$$

hvor

$$\vec{w}_{k+1} = \vec{v}_{k+1} - \sum_{i=1}^k \langle \vec{v}_{k+1}, \vec{e}_i \rangle \vec{e}_i. \quad (5.14)$$

Da er \vec{e}_{k+1} en enhedsvektor, som er ortogonal på vektorerne $\vec{e}_1, \dots, \vec{e}_k$, og $\{\vec{e}_1, \dots, \vec{e}_{k+1}\}$ udgør en ortonormal basis.

Bevis. Vi starter med at bevise, at \vec{e}_{k+1} er ortogonal på en vilkårlig vektor \vec{e}_j fra basen $\{\vec{e}_1, \dots, \vec{e}_k\}$:

$$\begin{aligned} \vec{e}_{k+1} \perp \vec{e}_j &\iff \langle \vec{e}_{k+1}, \vec{e}_j \rangle = 0 \iff \langle \vec{w}_{k+1}/|\vec{w}_{k+1}|, \vec{e}_j \rangle = 0 \\ &\iff \frac{1}{|\vec{w}_{k+1}|} \langle \vec{w}_{k+1}, \vec{e}_j \rangle = 0 \iff \langle \vec{w}_{k+1}, \vec{e}_j \rangle = 0. \end{aligned}$$

Altså er det tilstrækkeligt at vise, at \vec{w}_{k+1} er ortogonal på \vec{e}_j .

$$\begin{aligned} \langle \vec{w}_{k+1}, \vec{e}_j \rangle &= \left\langle \vec{v}_{k+1} - \sum_{i=1}^k \langle \vec{v}_{k+1}, \vec{e}_i \rangle \vec{e}_i, \vec{e}_j \right\rangle \\ &= \langle \vec{v}_{k+1}, \vec{e}_j \rangle - \sum_{i=1}^k \langle \vec{v}_{k+1}, \vec{e}_i \rangle \cdot \langle \vec{e}_i, \vec{e}_j \rangle \end{aligned}$$

Her har vi brugt linearitet-aksiomet fra definition 3 af et indre produkt. Vi ved også, at $\langle \vec{e}_i, \vec{e}_j \rangle = 0$ for alle par $i, j \in \{1, \dots, k\}$ så længe $i \neq j$. Nulreglen giver os altså, at det eneste led, som er tilbage under sumtegnet, er $\langle \vec{v}_{k+1}, \vec{e}_j \rangle \cdot \langle \vec{e}_j, \vec{e}_j \rangle$:

$$\begin{aligned} \langle \vec{w}_{k+1}, \vec{e}_j \rangle &= \langle \vec{v}_{k+1}, \vec{e}_j \rangle - \langle \vec{v}_{k+1}, \vec{e}_j \rangle \cdot \langle \vec{e}_j, \vec{e}_j \rangle \\ &= \langle \vec{v}_{k+1}, \vec{e}_j \rangle - \langle \vec{v}_{k+1}, \vec{e}_j \rangle \\ &= 0. \end{aligned}$$

Altså er \vec{e}_{k+1} ortogonal på vektorerne $\vec{e}_1, \dots, \vec{e}_k$. Vi mangler nu at vise, at \vec{e}_{k+1} er en enhedsvektor. Under antagelsen, at \vec{v}_{k+1} var en egentlig vektor lineært uafhængig af vektorerne $\vec{e}_1, \dots, \vec{e}_k$, er \vec{w}_{k+1} per automatik også en egentlig vektor. Det eneste der skulle forhindre \vec{w}_{k+1} i at være en egentlig vektor ville være hvis \vec{v}_{k+1} var en linearkombination

af $\vec{e}_1, \dots, \vec{e}_k$, men det er den per antagelse ikke. Altså ved vi, at $|\vec{w}_{k+1}| > 0$. Vi viser nu, at \vec{e}_{k+1} har længden 1:

$$|\vec{e}_{k+1}| = 1 \iff |\vec{e}_{k+1}|^2 = 1,$$

$$\begin{aligned} |\vec{e}_{k+1}|^2 &= \langle \vec{e}_{k+1}, \vec{e}_{k+1} \rangle = \langle \vec{w}_{k+1}/|\vec{w}_{k+1}|, \vec{w}_{k+1}/|\vec{w}_{k+1}| \rangle \\ &= \frac{1}{\langle \vec{w}_{k+1}, \vec{w}_{k+1} \rangle} \langle \vec{w}_{k+1}, \vec{w}_{k+1} \rangle = 1. \end{aligned}$$

■

Sætning 3: Ethvert (reelt) indre produkt-rum (med endelig dimension) har en ortonormal basis.

Bevis. Lad \overrightarrow{V} være et reelt indre produkt-rum med dimension n . Med andre ord har \overrightarrow{V} en minimal vektorbasis bestående af n vektorer: $\vec{v}_1, \dots, \vec{v}_n$. Vi starter nu med at definere en vektor \vec{e}_1 givet ved $\vec{e}_1 := \vec{v}_1/|\vec{v}_1|$. Eftersom \vec{v}_1 er en egentlig vektor, er \vec{e}_1 veldefineret med længden 1. Vi bruger nu ligning (5.13) og (5.14) til at konstruere de næste $n - 1$ enhedsvektorer $\vec{e}_2, \dots, \vec{e}_n$, som definerer en ortonormal basis $\{\vec{e}_1, \dots, \vec{e}_n\}$. Eftersom denne basis består af n vektorer, er dimensionen af det udspændte vektorrum n . Det er altså en ortonormal basis for vores oprindelige indre produkt-rum \overrightarrow{V} . ■

Og nu(!) kommer definitionen af hvad der skal forstås med et *euklidisk* vektorrum:

Definition 7: Et *euklidisk vektorrum* er et reelt indre-produktrum med endelig dimension.

Notation. Vi vil bruge symbolet $\overrightarrow{\mathbb{E}}^n$ som notation for et euklidisk vektorrum med dimension n .

Eksempel 12: Vektorrummene \mathbb{R}^2 , \mathbb{R}^3 og \mathbb{R}^n er eksempler på et hhv. 2-dimensionelt, 3-dimensionelt og n -dimensionelt euklidisk vektorrum.

Eksempel 13: Lad $\varepsilon \in]0, 1[$ være en skalar, og betragt mængden $\mathbb{M}_\varepsilon^n =]-\frac{\varepsilon}{2}, \frac{\varepsilon}{2}[^n$. Definér vektorsummen $\vec{v} + \vec{w} \in \mathbb{M}_\varepsilon^n$ for to vektorer $\vec{v}, \vec{w} \in \mathbb{M}_\varepsilon^n$ som

$$(\vec{v} + \vec{w})_i = \text{mod}\left(v_i + w_i + \frac{\varepsilon}{2}, \varepsilon\right) - \frac{\varepsilon}{2}, \quad (5.15)$$

og skalar-vektor-produktet $a\vec{v} \in \mathbb{M}_\varepsilon^n$ for en skalar $a \in \mathbb{R}$ og vektor $\vec{v} \in \mathbb{M}_\varepsilon^n$ som

$$(a\vec{v})_i = \text{mod}\left(av_i + \frac{\varepsilon}{2}, \varepsilon\right) - \frac{\varepsilon}{2}. \quad (5.16)$$

Lad det indre produkt mellem to vektorer $\vec{v}, \vec{w} \in \mathbb{M}_\varepsilon^n$ være defineret som prikproduktet, altså

$$\langle \vec{v}, \vec{w} \rangle = v_1 w_1 + \dots + v_n w_n. \quad (5.17)$$

Da er \mathbb{M}_ε^n også et n -dimensionelt euklidisk vektorrum.

Definition 8: (Prikproduktet) *Prikproduktet* $\langle \cdot, \cdot \rangle_E$ er et særligt indre produkt for et euklidisk vektorrum $\overrightarrow{\mathbb{E}}^n$ defineret ved

$$\langle \vec{v}, \vec{w} \rangle_E = v_1 w_1 + \dots + v_n w_n = w_1 v_1 + \dots + w_n v_n = \langle \vec{w}, \vec{v} \rangle_E,$$

hvor v_i, w_i udtrykker det i 'te koordinat for vektorerne $\vec{v}, \vec{w} \in \overrightarrow{\mathbb{E}^n}$ mht. en ortonormalbasis.

Bevis. Prikproduktet $\langle \cdot, \cdot \rangle_E$ er et indre produkt hvis og kun hvis den overholder de tre aksiomer præsenteret i Definition 3: symmetri, linearitet og positiv definitet. Til at bevise dette betragter vi nu nogle vilkårlige vektorer \vec{u}, \vec{v} og \vec{w} fra $\overrightarrow{\mathbb{E}^n}$.

1. (Symmetri) $\langle \vec{v}, \vec{w} \rangle_E = \langle \vec{w}, \vec{v} \rangle_E$: Vi opskriver venstresiden

$$\langle \vec{v}, \vec{w} \rangle_E = v_1 \cdot w_1 + \dots + v_n \cdot w_n = w_1 \cdot v_1 + \dots + w_n \cdot v_n,$$

højresiden

$$\langle \vec{w}, \vec{v} \rangle_E = w_1 \cdot v_1 + \dots + w_n \cdot v_n.$$

og konkluderer at de er ens. Altså er symmetri-aksiomet opfyldt.

2. (Linearitet) $\langle a \cdot \vec{u} + b \cdot \vec{v}, \vec{w} \rangle_E = a \cdot \langle \vec{u}, \vec{w} \rangle_E + b \cdot \langle \vec{v}, \vec{w} \rangle_E$: Vi opskriver venstresiden

$$\begin{aligned} \langle a\vec{u} + b\vec{v}, \vec{w} \rangle_E &= (au_1 + bv_1) \cdot w_1 + \dots + (au_n + bv_n) \cdot w_n \\ &= au_1 w_1 + bv_1 w_1 + \dots + au_n w_n + bv_n w_n \\ &= a(u_1 w_1 + \dots + u_n w_n) + b(v_1 w_1 + \dots + v_n w_n), \end{aligned}$$

højresiden

$$a\langle \vec{u}, \vec{w} \rangle_E + b\langle \vec{v}, \vec{w} \rangle_E = a(u_1 w_1 + \dots + u_n w_n) + b(v_1 w_1 + \dots + v_n w_n),$$

og konkluderer at de er ens. Altså er linearitet-aksiomet opfyldt.

3. (Positiv definitet) $\langle \vec{v}, \vec{v} \rangle_E > 0$ for $\vec{v} \neq \vec{0}$: Vi antager nu at $\vec{v} \neq \vec{0}$, altså $v_1 \neq 0$ eller $v_2 \neq 0$, og opskriver venstresiden i uligheden:

$$\langle \vec{v}, \vec{v} \rangle_E = v_1 v_1 + \dots + v_n v_n = v_1^2 + \dots + v_n^2.$$

Vi ved, at for et eller andet $i \in \{1, \dots, n\}$ skal v_i være forskellig fra nul, altså $v_i^2 > 0$. Eftersom $a^2 \geq 0$ for et reelt tal, må der også gælde $v_1^2 + \dots + v_n^2 > 0$. Altså er positiv definitet-aksiomet også opfyldt. ■

For at beskrive euklidisk geometri mangler vi en sidste puslebrik: Definitionen af et *euklidisk affint rum*:

Definition 9: Lad A være en mængde, og \overrightarrow{A} et (reelt) vektorrum. Lad $P, Q \in A$ repræsentere nogle elementer fra A , og $\vec{v}, \vec{w} \in \overrightarrow{A}$ elementer fra \overrightarrow{A} . Antag nu, at der findes en veldefineret punkt vektor-addition $(P + \vec{v})$, som overholder følgende regneregler:

1. (Neutralt vektorelement) $P + \vec{0} = P$,
2. (Associativitet) $(P + \vec{v}) + \vec{w} = P + (\vec{v} + \vec{w})$,
3. (Eksistens af *translationsvektor*) $Q = P + \overrightarrow{PQ}$.

I så fald kaldes A et *affint rum* mht. \overrightarrow{A} og $+$, og elementerne fra A kaldes *punkter*.

Definition 10: Hvis \overrightarrow{A} er et euklidisk vektorrum, kaldes A et *euklidisk affint rum*.

Notation. Symbolet \mathbb{E}^n vil bruges som notation for et n -dimensionelt (affint) euklidisk rum.

Eksempel 14: Mængden \mathbb{R}^2 er et 2-dimensionelt affint euklidisk rum mht. vektorrummet $\overrightarrow{\mathbb{R}^2}$, hvor elementet $P + \vec{v} \in \mathbb{R}^2$ er defineret som

$$(P + \vec{v})_i = p_i + v_i, \quad (5.18)$$

hvor p_i er den i 'te indgang til punktet $P \in \mathbb{R}^2$, og v_i den i 'te indgang til vektoren $\vec{v} \in \overrightarrow{\mathbb{R}^2}$.

Så et affint rum er altså et matematisk rum hvor punkter eksisterer med et underliggende kompatibelt vektorrum. Vi kan nu definere, hvordan afstand mellem to punkter skal forstås:

Definition 11: Lad \mathbb{E}^n være et n -dimensionelt euklidisk rum. Vi lader funktionen $\text{dist}_E : \mathbb{E} \times \overrightarrow{\mathbb{E}} \mapsto \mathbb{R}_0$ være givet ved forskriften

$$\text{dist}_E(p, q) := |\overrightarrow{PQ}|.$$

Funktionen dist_E kaldes den *euklidiske afstand* mellem punkter i \mathbb{E} . Mere generelt siger vi også, at dist_E er en *metrik*.

For at finde afstanden af to vektorer, skal vi altså finde længden af en translationsvektor imellem dem. Tidligere har vi været inde på begrebet *koordinater*, som kun giver mening, hvis et *koordinatsystem* er blevet defineret:

Definition 12: (Koordinatsystem) Lad \mathbb{E}^n være et euklidisk rum med dimension $n \in \mathbb{N}$. Derudover lad der være givet en vektorbasis $\mathcal{B}^n = \{\vec{v}_1, \vec{v}_2, \dots, \vec{v}_n\}$ og et punkt O . Da udgør O og \mathcal{B}^n et *koordinatsystem* for \mathbb{E}^n med O som *origo* - centrum. Lad et punkt P være givet ved $P = O + \vec{w}$, hvor $\vec{w} = w_1 \vec{v}_1 + w_2 \vec{v}_2 + \dots + w_n \vec{v}_n$. Da fås *koordinaterne* for P som n -tuplen $(w_1, w_2, \dots, w_n) \in \mathbb{R}^n$. Koordinaterne beskriver altså et punkts position i forhold til valgte origo og vektorbasis.

Definition 13: Hvis den valgte base \mathcal{B}^n for koordinatsystemet er ortonormal, kaldes koordinatsystemet *kartesisk*.

Eksempel 15: Lad \mathbb{E}^3 være et 3-dimensionelt euklidisk rum med ortonormalbasis $\mathcal{B}^3 = \{\vec{e}_1, \vec{e}_2, \vec{e}_3\}$, og betragt et punkt $O \in \mathbb{E}^3$. Da er (O, \mathcal{B}^3) et kartesisk koordinatsystem. Lad et punkt P være givet ved $P = O + 1\vec{e}_1 - 4\vec{e}_2 + 43\vec{e}_3 \in \mathbb{E}^3$. Dette kan da skrives som $P(1, -4, 43)$ - ud fra valgte koordinatsystem.

Når vi skal bestemme længder af kurver i et euklidisk rum er det foredelagtigt at have etableret et koordinatsystem.

Definition 14: (Kurvelængde) Lad $\gamma : [0, b] \mapsto \mathbb{E}^3$ være en rumlig kurve parameteriseret over intervallet $[0, b] \subset \mathbb{R}$, hvor $b > 0$. Da defineres længden af γ , $L(\gamma)$, som følgende bestemte integrale:

$$L(\gamma) := \int_0^b |\gamma'(t)|_E dt = \int_0^b \sqrt{\langle \gamma'(t), \gamma'(t) \rangle_E} dt. \quad (5.19)$$

Det overrasker nok ikke, men den euklidiske afstand mellem to punkter i rummet svarer til længden af et ret linjesegment som forbinder de to punkter. (En ret linje skal forstås som en punktmængde i forlængelse af en vektor.)

Sætning 4: Lad $\gamma : [a, b] \mapsto \mathbb{R}^3$ være en ret linje i rummet med startpunkt $\gamma(a) = p$ og slutpunkt $\gamma(b) = q$, for nogle konstanter $b > a \in \mathbb{R}$. Da er kurvelængden $L(\gamma)$ lig den euklidiske afstand, $\text{dist}_E(p, q)$, mellem p og q :

$$L(\gamma) = \text{dist}_E(p, q).$$

Bevis. Lad \overrightarrow{PQ} repræsenterer translationsvektoren der går fra p til q , og brug denne til at parameterfremstille det rette linjesegment $\gamma : [0,1] \mapsto \mathbb{R}^3$ givet ved

$$\gamma(s) = p + s \cdot \overrightarrow{PQ}.$$

Ud fra konstruktionen af γ ses at $\gamma'(s) = \overrightarrow{PQ}$, altså at translationsvektoren \overrightarrow{PQ} er den afledte af kurven mht. parameteren. Vi opskriver nu længden $L(\gamma)$ via ligning (5.19).

$$\begin{aligned} L(\gamma) &= \int_0^1 |\gamma'(s)|_E ds = \int_0^1 \sqrt{\langle \gamma'(t), \gamma'(t) \rangle_E} dt = \int_0^1 \sqrt{\langle \overrightarrow{PQ}, \overrightarrow{PQ} \rangle_E} dt \\ &= |\overrightarrow{PQ}|_E \int_0^1 1 dt = |\overrightarrow{PQ}|_E = \text{dist}_E(p, q). \end{aligned}$$

■

Definition 15: En n -sfære med centrum $P \in \mathbb{E}^{n+1}$ og radius $r > 0$:

$$S_r^n = \{Q \in \mathbb{E}^{n+1} : |\overrightarrow{PQ}|_E = r\}$$

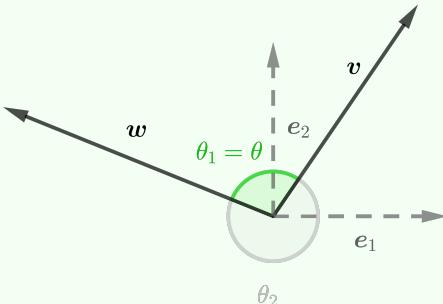
Vi kan også bruge det indre produkt til at måle vinklen θ mellem to vektorer:

Definition 16: Vinklen mellem to vektorer \vec{v} og \vec{w} fra samme indre produkt-rum

Eksempel 16:

$$\cos(\theta) = \frac{\langle \vec{v}, \vec{w} \rangle}{\sqrt{\langle \vec{v}, \vec{v} \rangle} \cdot \sqrt{\langle \vec{w}, \vec{w} \rangle}}.$$

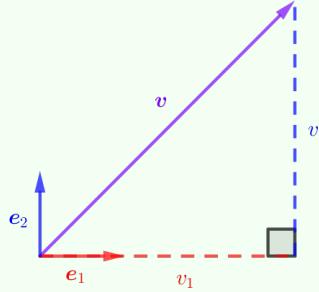
Vi definerer vinklen θ som den mindste af de to vinkler $\theta_1, \theta_2 \in [0, 2\pi)$ mellem 0 og 2π radianer, som \vec{v} og \vec{w} danner med hinanden.



Eksempel 17: (Den euklidiske plan \mathbb{E}^2) Vi kigger nu på et helt konkret eksempel på et euklidisk rum. Det rum vi vil betragte kalder vi \mathbb{E}^2 , medens vektorrummet gives notationen $\overrightarrow{\mathbb{E}^2}$. Vi betragter nemlig et to-dimensionelt euklidisk rum. Sætning 3 fortæller os, at denne har en ortonormalbasis $\{\vec{e}_1, \vec{e}_2\}$. Vi lader O være et fikseret punkt og definerer koordinatsystemet $(O, \{\vec{e}_1, \vec{e}_2\})$ med O som origo. Dernæst

betrugter vi en vektor \vec{v} givet ved vektorkoordinaterne v_1 og v_2 :

$$\vec{v} = v_1 \cdot \vec{e}_1 + v_2 \cdot \vec{e}_2 = (v_1, v_2).$$



Et af kravene for at være et euklidisk vektorrum, er at dette skal være et indre produkt-rum. Vi skal altså definerer et indre produkt. Vi vælger det klassiske prikprodukt (8):

$$\langle \vec{v}, \vec{w} \rangle_E = v_1 \cdot w_1 + v_2 \cdot w_2. \quad (5.20)$$

I et euklidisk rum definerer vi længden af en vektor via vektornormen: Længden af en vektor \vec{v} fås som

$$|\vec{v}|_E = \sqrt{\langle \vec{v}, \vec{v} \rangle_E} = \sqrt{v_1^2 + v_2^2}.$$

Denne form kender vi. Det er længden af hypotenusen af en retvinklet trekant. Vi kan også betragte afstanden mellem to punkter fra \mathbb{E}^2 , hvor det ene punkt er defineret ift. det andet:

$$q = p + \vec{v}.$$

Vektoren \vec{v} svarer til \overrightarrow{PQ} fra definition 9, aksiom 3. Den kaldes også for *translationsvektoren* fra p til q .

Sætning 5: Vinklen mellem to egentlige vektorer er 1) ret hvis $\langle \vec{v}, \vec{w} \rangle = 0$, 2) spids hvis $\langle \vec{v}, \vec{w} \rangle > 0$, og 3) stump hvis $\langle \vec{v}, \vec{w} \rangle < 0$.

Bevis. Vi beviser de tre udsagn hver for sig. Vi starter med at antage, at vi har to egentlige vektorer \vec{v} og \vec{w} - dvs. $|\vec{v}|, |\vec{w}| > 0$.

- Hvis $\cos(\theta) = 0$ ved vi, at $\theta = \pi/2$ altså vinklen θ mellem \vec{v} og \vec{w} er ret. Antagelsen $\langle \vec{v}, \vec{w} \rangle = 0$ er ækvivalent med følgende:

$$\frac{\langle \vec{v}, \vec{w} \rangle}{|\vec{v}| |\vec{w}|} = 0 \iff \cos(\theta) = 0.$$

Altså er θ ret når $\langle \vec{v}, \vec{w} \rangle = 0$.

- Hvis $\cos(\theta) > 0$ ved vi, at $0 < \theta < \pi/2$, altså at θ er spids. Antagelsen $\langle \vec{v}, \vec{w} \rangle > 0$ er ækvivalent med følgende:

$$\frac{\langle \vec{v}, \vec{w} \rangle}{|\vec{v}| |\vec{w}|} > 0 \iff \cos(\theta) > 0.$$

Altså er θ spids når $\langle \vec{v}, \vec{w} \rangle > 0$.

- Hvis $\cos(\theta) < 0$ ved vi, at $\pi/2 < \theta < \pi$, altså at θ er stump. Antagelsen $\langle \vec{v}, \vec{w} \rangle > 0$ er ækvivalent med følgende:

$$\frac{\langle \vec{v}, \vec{w} \rangle}{|\vec{v}| |\vec{w}|} < 0 \iff \cos(\theta) < 0.$$

Altså er θ stump når $\langle \vec{v}, \vec{w} \rangle < 0$.

■

Definition 17: (Euklidisk afstand mellem punkt og linje) Lad $(\mathbb{E}^n, O, \{\vec{v}_1, \dots, \vec{v}_n\})$ være et euklidisk rum med valgt koordinatsystem $(O, \{\vec{v}_1, \dots, \vec{v}_n\})$. Betragt nu et punkt p og en linje \mathcal{L} i forlængelse af en egentlig vektor \vec{v} , givet ved $\mathcal{L} = \{O + \alpha \cdot \vec{v}\}_{\alpha \in \mathbb{R}}$. Betragt nu translationsvektoren \mathbf{pq}_α der går fra p til punktet på linjen $q_\alpha = O + \alpha \vec{v}$, altså $p + \mathbf{pq}_\alpha = q_\alpha$. Da defineres *afstanden* mellem p og linjen \mathcal{L} som længden af den mindste translationsvektor \mathbf{pq}_α mellem p og \mathcal{L} :

$$\text{dist}_E(p, \mathcal{L}) = \min_{\alpha} |\mathbf{pq}_\alpha|.$$

Definition 18: (Hyperplan) Lad \mathbb{E}^n være et n -dimensionelt euklidisk rum. En *hyperplan* $\mathbb{P}^{n-1} \subset \mathbb{E}^n$ er et affint underrum med dimension $n - 1$.

Eksempel 18: (Euklidisk afstand mellem punkt og hyperplan) Lad $\mathcal{I}_j^n = \{1, 2, \dots, j-1, j+1, \dots, n\} = \{1, \dots, n\} \setminus \{j\}$ være mængden af indeks fra 1 til n uden j . Definér det j 'te underrum \mathbb{P}_j^{n-1} som

$$\mathbb{P}_j^{n-1} = \{O + \sum_{i \in \mathcal{I}_j^n} \alpha_i \vec{v}_i : \alpha_i \in \mathbb{R}\}. \quad (5.21)$$

Lad \mathbf{pq}_α være translationsvektoren givet ved $p + \mathbf{pq}_\alpha = q_\alpha$ hvor $q_\alpha = O + \sum \alpha_i \vec{v}_i$. Definér afstanden $\text{dist}_E(\mathbb{P}_j^{n-1}, p)$ mellem \mathbb{P}_j^{n-1} og et punkt p fra \mathbb{E}^n som

$$\begin{aligned} \text{dist}_E(\mathbb{P}_j^{n-1}, p) &= \min_{\alpha} \text{dist}_E(p, q_\alpha) \\ &= \min_{\alpha} |\mathbf{pq}_\alpha|_E \end{aligned}$$

Definition 19: (Kartesisk koordinatsystem) Lad der være givet et n -dimensionelt euklidisk rum \mathbb{E}^n , og lad et punkt p være givet ved koordinaterne $p(w_1, \dots, w_n)$ ift. et koordinatsystem (O, \mathcal{B}^n) hvor \mathcal{B}^n er en ortogonal basis. Hvis der gælder

$$w_i = \text{dist}_E(p, \mathbb{P}_j^{n-1}),$$

hvor \mathbb{P}_j^{n-1} er hyperplanen givet ved ligning (5.21), kaldes (O, \mathcal{B}^n) et *kartesisk* koordinatsystem for \mathbb{E}^n . Med andre ord skal det i 'te koordinat for p tilsvare afstanden mellem p og \mathbb{P}_j^{n-1} .

Sætning 6: Basisvektorerne fra \mathcal{B}^n udgør en ortonormal basis for \mathbb{E}^n .

Bevis. Lad $\vec{v}_1, \dots, \vec{v}_n$ repræsenterer de ordnede basisvektorer i \mathcal{B}^n . Basen er ortonormal hvis og kun hvis basen er ortogonal og vektorerne har længden 1. Vi mangler altså at vise, at vektorerne har længden 1. Lad $P = O + \vec{v}_j$.

$$\begin{aligned} \min_{\alpha} |\overrightarrow{PQ}_\alpha|_E &= \min_{\alpha} \sqrt{\sum_{i \in \mathcal{I}_j^n} \alpha_i^2 + 1^2} \\ &= \sqrt{1^2} = 1. \end{aligned}$$

■

Topologiske rum

I forrige afsnit beskæftigede vi os udelukkende med euklidiske rum, hvor punkter og vektorer ko-eksisterer, og hvor vi bruger den samme lineal og vinkelmåler uanset hvorhenne i rummet vi befinder os. Med matematiske termer: et affint rum (A, \overrightarrow{A}) hvor $(\overrightarrow{A}, \langle \cdot, \cdot \rangle)$ er et reelt vektorrum udstyret med et indre produkt $\langle \cdot, \cdot \rangle$ og normen $|\cdot| = \sqrt{\langle \cdot, \cdot \rangle}$. Det giver mening at betragte euklidiske rum og euklidisk geometri, når dette repræsenterer den fysiske verden, som vi vil analysere. Man kan godt argumentere for, at vores fysiske univers er et euklidisk rum, men det viser sig, at hvis vi begrænser os til visse underrum af et euklidisk rum, så vil den euklidiske geometri fejle os: Lad os begrænse os selv til overfladen af jordkloden, som groft sagt kan modelleres som en kugle med radius $r > 0$. Hvis Peter står på nordpolen ($P(0,0,r)$), og Quinn står på sydpolen ($Q(0,0,-r)$), ville vi kunne måle deres euklidiske afstand som $\text{dist}_E(P,Q) = |(0,0,r) - (0,0,-r)|_E = |(0,0,2r)|_E = 2r$ svarende til diameteren af kloden. Her kan afstand dog ikke fortolkes som længden af den korteste rute mellem Peter og Quinn. Længden af den korteste rute mellem Peter og Quinn må svare til længden af en kortest kurve langs overfladen af kloden med start og slut i P og Q . Afstanden må altså være $\pi r \approx 3,14r > 2r$. Vi har tydeligvis brug for et målebånd til at måle afstande med, og ikke en lineal. Hvilken matematisk struktur, skal vi betragte? Indenfor differentialgeometri studerer vi geometri på nogle lidt anderledes rum, end dem fra euklidisk geometri. I differentialgeometri er genstanden for observation *glatte mangfoldigheder* - en underklasse af *topologiske rum*.

Definition 20: (Topologisk rum) Lad A være en mængde, hvis elementer vi kalder punkter. Lad τ repræsentere en samling af delmængder fra A . Antag, at følgende kriterier for τ er overholdt:

1. Den tomme mængde \emptyset og A er elementer i τ .
2. τ indeholder samtlige (uendelige og endelige) foreningsmængder af sine egne elementer.
3. τ indeholder samtlige (endelige) fællesmængder af sine egne elementer.

Da siger (A, τ) at være et *topologisk rum*, og elementerne i τ kaldes rummets *åbne mængder*.

Eksempel 19: Betrag den reelle talakse \mathbb{R} , og lad $(a,b) \subset \mathbb{R}$ være det åbne interval mellem $a \in \mathbb{R}$ og $b \in \mathbb{R}$ defineret ved $(a,b) = \{x \in \mathbb{R} : a < x < b\} \subset \mathbb{R}$. Definér nu *standardtopologien* som samlingen af delmængder U fra \mathbb{R} for hvilke der gælder:

- Hvis et punkt $x \in \mathbb{R}$ er indeholdt i U , skal x også være indeholdt i et åbent interval (a,b) indeholdt i U .

$$x \in U \implies \exists a, b \in \mathbb{R} : x \in (a, b) \subset U$$

Eksempel 20: Betrag det euklidiske rum \mathbb{R}^n og definér funktionen $d : \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ som

$$d(x,y) = \left(\sum_{i=1}^n (x_i - y_i)^2 \right)^{\frac{1}{2}},$$

hvor x_i, y_i er de i 'te komponenter af hhv. $x \in \mathbb{R}^n$ og $y \in \mathbb{R}^n$. Lad så $B_\varepsilon(x) \subset \mathbb{R}^n$ være den *åbne bold* om x defineret ved

$$B_\varepsilon(x) = \{y \in \mathbb{R}^n : d(x, y) < \varepsilon\}.$$

Vi definerer nu *standardtopologien* til \mathbb{R}^n som samlingen af delmængder U fra \mathbb{R}^n for hvilke der gælder

- Hvis et punkt $x \in \mathbb{R}^n$ er indeholdt i U , skal x også være indeholdt i en åben bold $B_\varepsilon(x)$ indeholdt i U .

$$x \in U \implies \exists \varepsilon > 0 : x \in B_\varepsilon(x) \subset U$$

Bemærkning. Ovenstående funktion d er en såkaldt metrik.

Definition 21: En **metrik** $d : M \times M \rightarrow \mathbb{R}$ er en bivariat reel funktion på mængden M , som overholder følgende aksiomer.

1. Afstand til sig selv er nul: $d(x,x) = 0$
2. Afstand til et andet punkt er større end nul: $d(x,y) > 0$ for $x \neq y$
3. Afstand fra x til y er lig afstanden fra y til x : $d(x,y) = d(y,x)$
4. Trekantsuligheden: $d(x,z) \leq d(x,y) + d(y,z)$

Sætning 7: Funktionen $d : \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n$ fra eksempel 20 er en metrik.

Bevis. Vi beviser aksiomerne en efter en.

1. Afstand til sig selv er nul:

$$d(x,x) = \left(\sum_{i=1}^n (x_i - x_i)^2 \right)^{\frac{1}{2}} = \left(\sum_{i=1}^n 0 \right)^{\frac{1}{2}} = 0$$

2. Afstand til et andet punkt er større end nul: $y \neq x \implies y_j \neq x_j$ for en indgang j . Derudover har vi, at $(x_i - y_i)^2 \geq 0$. Dette resulterer i uligheden

$$d(x,y)^2 = \sum_{i=1}^n (x_i - y_i)^2 \geq (x_j - y_j)^2 > 0,$$

så $d(x,y) > 0$.

3. Afstand fra x til y er lig afstanden fra y til x :

$$d(x,y) = \left(\sum_{i=1}^n (x_i - y_i)^2 \right)^{\frac{1}{2}} = \left(\sum_{i=1}^n (y_i - x_i)^2 \right)^{\frac{1}{2}} = d(y,x)$$

4. Trekantsuligheden: Betragt punktet $p(t) = x + t \cdot \vec{xz}$ hvor $t \in \mathbb{R}$.

$$d(x,p) = |\vec{xp}| = |t \cdot \vec{xz}| = |t| |\vec{xz}| = |t| \cdot d(x,z)$$

$$d(p,z) = |\vec{pz}| = |(1-t)\vec{xz}| = |1-t| |\vec{xz}| = |1-t| d(x,z)$$

$$d(x,p) + d(p,z) = (|t| + |1-t|) d(x,z) \geq d(x,z) \quad (5.22)$$

Lad $\{\vec{e}_1, \dots, \vec{e}_{n-1}, \vec{xz}\}$ være en mængde på n ortogonale vektorer fra \mathbb{R}^n , og lad y være et vilkårligt punkt. Da kan y skrives som

$$\begin{aligned} y &= p + \vec{py} = p + \sum_{i=1}^{n-1} \alpha_i \vec{e}_i \\ &= x + t \cdot \vec{xz} + \sum_{i=1}^{n-1} \alpha_i \vec{e}_i = x + \vec{yz}. \end{aligned}$$

Afstanden fra x til y fås som

$$\begin{aligned} d(x,y)^2 &= |\vec{yz}|^2 = |t \cdot \vec{xz} + \vec{py}|^2 \\ &= |t\vec{xz}|^2 + |\vec{py}|^2 \\ &= t^2 |\vec{xz}|^2 + |\vec{py}|^2 = t^2 d(x,z)^2 + d(p,y)^2, \end{aligned}$$

så

$$|t|d(x,z) = \sqrt{d(x,y)^2 - d(p,y)^2}.$$

Ved omskrivning af y fås også

$$\begin{aligned} y &= p + \vec{py} = x + t\vec{xz} + \vec{py} = x + t\vec{xz} + \vec{py} + \vec{xz} - \vec{xz} \\ &= x + \vec{xz} + (t-1)\vec{xz} + \vec{py} = z + (t-1)\vec{xz} + \vec{py} \\ &= z + \vec{yz}. \end{aligned}$$

Afstanden fra y til z kan da skrives som

$$\begin{aligned} d(y,z)^2 &= |\vec{yz}|^2 = |\vec{zy}|^2 = |(t-1)\vec{xz} + \vec{py}|^2 \\ &= |(t-1)\vec{xz}|^2 + |\vec{py}|^2 \\ &= (t-1)^2 |\vec{xz}|^2 + |\vec{py}|^2 \\ &= (t-1)^2 d(x,z)^2 + d(p,y)^2, \end{aligned}$$

så $|t-1|d(x,z) = \sqrt{d(y,z)^2 - d(p,y)^2}$. Eftersom $|t| + |t-1| \geq 0 + 1 = 1$ får vi nu følgende ulighed:

$$\begin{aligned} d(x,z) &\leq (|t| + |t-1|)d(x,z) = |t|d(x,z) + |t-1|d(x,z) \\ &= \sqrt{d(x,y)^2 - d(p,y)^2} + \sqrt{d(y,z)^2 - d(p,y)^2} \\ &\leq d(x,y) + d(y,z), \end{aligned}$$

altså $d(x,z) \leq d(x,y) + d(y,z)$.

■

Definition 22: Lad x_1, x_2, \dots være en veldefineret sekvens af elementer fra en mængde X . Hvis $\{x_1, x_2, \dots\} = X$, kaldes X for en *tællelig mængde*.

Sætning 8: \mathbb{N} , \mathbb{Z} og \mathbb{Q} er tællelige mængder.

Bevis.

$$\begin{aligned} \{1, 2, \dots\} &= \mathbb{N}, \\ \{0, 1, -1, 2, -2, \dots\} &= \mathbb{Z}, \end{aligned}$$

$$\left\{ \frac{0}{1}, \frac{1}{1}, \frac{-1}{1}, \frac{2}{1}, \frac{1}{2}, \frac{-2}{1}, \frac{-1}{2}, \frac{3}{1}, \frac{3}{2}, \frac{1}{3}, \frac{2}{3}, \frac{-3}{1}, \frac{-3}{2}, \frac{-1}{3}, \frac{-2}{3}, \dots \right\} = \mathbb{Q}. \quad (5.23)$$

■

Definition 23: Lad (X, τ) repræsentere et topologisk rum, og lad $\mathcal{B} \subseteq \tau$ være en delsamling af åbne delmængder i X . Antag nu, at der for enhver åben mængde $U \in \tau$ findes en samling $\mathcal{B}' \subseteq \mathcal{B}$, således U kan skrives som en forening af elementerne (åbne delmængder) fra \mathcal{B}' :

$$U = \bigcup_{B \in \mathcal{B}' \subseteq \mathcal{B}} B.$$

Da kaldes \mathcal{B} en **topologisk basis** for (X, τ) .

Sætning 9: Det euklidiske rum (\mathbb{R}^n, τ) , hvor τ er standardtopologien, har en tællelig basis bestående af åbne bolde med rationelle radier til rationelle punkter:

$$\mathcal{B} = \{B_a(b) : a, b \in \mathbb{Q}\}.$$

Bevis. (For at bevise dette, skal man vise, dels at $\mathbb{Q} \times \mathbb{Q}$ er tællelig, og dels at alle åbne delmængder kan skrives som en forening af elementer fra \mathcal{B}). ■

Definition 24: (Nabolag) Lad (X, τ) være et topologisk rum. Betragt et element $x \in X$ og en delmængde $\mathcal{N} \subseteq X$. Antag nu, at der findes en åben delmængde $U \in \tau$, for hvilken der gælder, at $x \in U$ og $U \subseteq \mathcal{N}$. Da kaldes \mathcal{N} et *nabolag* til x .

Sætning 10: Lad (X, τ) være et topologisk rum. Hvis x er et punkt fra en åben delmængde $U \in \tau$ indeholdende x , er U i sig selv et nabolag til x .

Definition 25: (Hausdorff-rum) Lad p og q være to vilkårlige punkter i et topologisk rum (X, τ) . Hvis der findes et nabolag \mathcal{N}_p til p og et nabolag \mathcal{N}_q til q , for hvilket der gælder

$$\mathcal{N}_p \cup \mathcal{N}_q = \emptyset,$$

kaldes (X, τ) et **Hausdorff-rum** eller et **separeret rum**.

Bemærkning. I ovenstående definition kan vi også kræve, at \mathcal{N}_p og \mathcal{N}_q skal være åbne mængder til hhv. p og q . Dette giver en ækvivalent definition, af hvad et Hausdorff-rum er.

Sætning 11: Det euklidiske rum (\mathbb{R}^n, τ) med standardtopologien τ er et Hausdorff-rum.

Bevis. Lad x og y være to forskellige punkter i \mathbb{R}^n . Lad $\varepsilon = d(x, y) > 0$ betegne den euklidiske afstand, og betragt de åbne bolde $B_x(\varepsilon/2)$, $B_y(\varepsilon/2)$. Da fås fællesmængden som

$$B_x(\varepsilon/2) \cap B_y(\varepsilon/2) = \{z \in \mathbb{R}^n : d(x, z) < \varepsilon/2 \wedge d(y, z) < \varepsilon/2\}.$$

For at undersøge om ovenstående mængde er tom, undersøger vi nu, om der findes et punkt $z \in \mathbb{R}^n$ for hvilket der gælder $d(x, z) < \varepsilon/2$ og $d(y, z) < \varepsilon/2$. Trekantsuligheden giver os $d(x, y) = \varepsilon \leq d(x, z) + d(z, y) < \varepsilon/2 + \varepsilon/2 = \varepsilon$, altså at $\varepsilon < \varepsilon$. Dette er en modsigelse, så fællesmængden være tom. Ergo er \mathbb{R}^n et Hausdorff-rum. ■

Definition 26: Lad (\mathcal{M}, τ) være et Hausdorff-rum hvor topologien τ er konstrueret for en tællelig topologisk basis \mathcal{B} . Da kaldes (\mathcal{M}, τ) for en **topologisk mangfoldighed**.

dighed.

Sætning 12: Det euklidiske rum (\mathbb{R}^n, τ) er en topologisk mangfoldighed.

Bevis. Sætning 9 siger, at \mathbb{R}^n har en tællelig topologisk basis, og sætning 11 siger, at \mathbb{R}^n er et Hausdorff-rum. Per definition er \mathbb{R}^n altså en topologisk mangfoldighed. ■

Definition 27: En afbildning $f : U \subset \mathbb{R}^n \rightarrow f(U) \subset \mathbb{R}^n$ kaldes en **diffeomorfi** hvis f er bijektiv, glat, og f^{-1} er glat. Overordnet er en funktion **glat** hvis den er uendelig differentiabel, og sine afledede funktioner er kontinuerte.

Eksempel 21: Alle lineære funktioner $f : \mathbb{R}^2 \rightarrow f(\mathbb{R}^2) \subset \mathbb{R}^2$ er diffeomorfier.

Eksempel 22: Funktionen $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ givet ved $f(x) = x^2$ er glat, fordi $\frac{d^k}{dx^k} f(x)$ alle er kontinuerte:

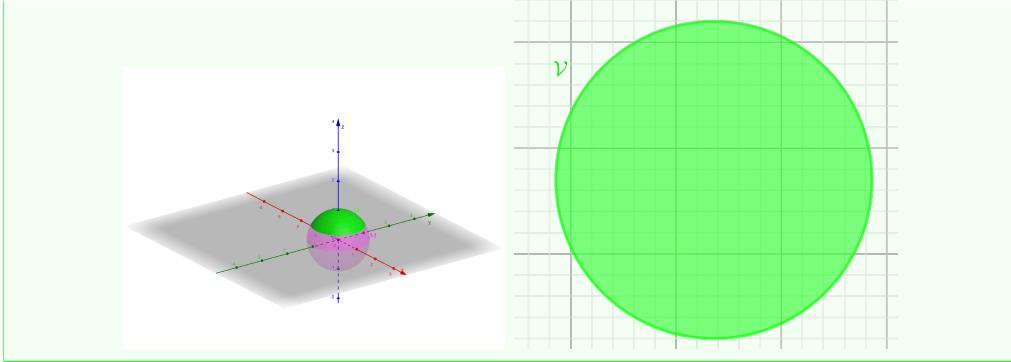
$$\frac{df}{dx}(x) = 2x, \quad \frac{d^2f}{dx^2}(x) = 2, \quad \frac{d^k f}{dx^k}(x) = 0$$

for alle $k \in \mathbb{N}_{\geq 2}$. f er dog *ikke* injektiv, eftersom $f(-a) = a^2 = f(a)$, så f er ikke bijektiv. Så f over de reelle tal er *ikke* en diffeomorfi, men hvis vi begrænser domænet af f til den åbne mængde $]0, \infty[$ og ko-domænet som $f(]0, \infty[)$, så er f bijektiv. I sidste tilfælde, er f en diffeomorfi.

Definition 28: Lad (\mathcal{M}, τ) være en topologisk mangfoldighed, og lad $\varphi : \mathcal{U} \mapsto \mathcal{V}$ være en funktion som afbilder punkter fra en delmængde $\mathcal{U} \subset \mathcal{M}$ til en delmængde $\varphi(\mathcal{U}) \subset \mathbb{R}^n$. Da kaldes φ et **koordinatkort**. Med andre ord: φ udtrykker koordinaterne for punkterne i \mathcal{M} . To koordinatkort (\mathcal{U}, φ) , (\mathcal{V}, ψ) for samme mangfoldighed siges at overlappe glat i følgende to tilfælde:

1. $\mathcal{U} \cap \mathcal{V} = \emptyset$
2. $\psi \circ \varphi^{-1} : \mathcal{U} \rightarrow \psi(\mathcal{U} \cap \mathcal{V})$ (og $\varphi \circ \psi^{-1} : \mathcal{V} \rightarrow \varphi(\mathcal{U} \cap \mathcal{V})$) er en diffeomorfi.

Eksempel 23: Det klassiske eksempel på et koordinatkort er et atlas over jordkloden. Her skal jordkloden forstås som den topologiske mangfoldighed, hvor atlasset forbinder hvert punkt på jordkloden med nogle koordinater i et todimensionelt koordinatsystem. Atlasset er altså et koordinatkort $\varphi : \mathcal{U} \mapsto \varphi(\mathcal{U})$ hvor $\mathcal{U} \subset \mathcal{M}$ repræsenterer et udsnit af jordkloden, og $\varphi(\mathcal{U}) \subset \mathbb{R}^2$ et udsnit af planen.



Definition 29: Et *atlas* \mathcal{A} er en samling af koordinatkort. \mathcal{A} er *glat*, hvis alle kort i \mathcal{A} overlapper glat. Lad (\mathcal{U}, φ) være et kort fra et glat atlas \mathcal{A} , og betragt et vilkårligt kort (\mathcal{V}, ψ) over \mathcal{M} . \mathcal{A} kaldes *maksimal glat* hvis de to kort overlapper glat, og $(\mathcal{V}, \psi) \in \mathcal{A}$.

Definition 30: Lad en mangfoldighed \mathcal{M} være udstyret med et maksimalt glat atlas \mathcal{A} . Da kaldes \mathcal{M} en *glat mangfoldighed* med hensyn til atlasset \mathcal{A} .

Sætning 13: Lad \mathcal{M} være en mangfoldighed udstyret med et glat atlas \mathcal{A} . Da findes et maksimalt glat atlas $\overline{\mathcal{A}}$ indeholdende \mathcal{A} , altså $\mathcal{A} \subseteq \overline{\mathcal{A}}$.

Eksempel 24: Betragt det euklidiske rum \mathbb{R}^n udstyret med atlasset $\mathcal{A} = \{\mathbb{R}^n, \text{id}_{\mathbb{R}^n}\}$, hvor $\text{id}_{\mathbb{R}^n} : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$ er *identitetsafbildningen* med forskriften $\text{id}_{\mathbb{R}^n}(x) = x$. Vi kan da betragte \mathbb{R}^n som den glatte mangfoldighed med det maksimale glatte atlas $\overline{\mathcal{A}}$. Med andre ord er $\overline{\mathcal{A}}$ atlasset over alle diffeomorfier i \mathbb{R}^n .

Sætning 14: Lad $\mathcal{U} \subset \mathbb{R}^n$ repræsentere en åben mængde fra \mathbb{R}^n . Da er \mathcal{U} en *delmangfoldighed* af \mathbb{R}^n .

Sætning 15: Lad $r : \mathcal{U} \subset \mathbb{R}^m \rightarrow \mathcal{V} \subset \mathbb{R}^n$ være en injektiv glat afbildning mellem de euklidiske rum \mathbb{R}^m og \mathbb{R}^n . Jacobi-matricen $D_r(x)$ til r ved et punkt $x \in \mathcal{U}$ er defineret som

$$D_r(x) = \begin{pmatrix} \frac{\partial r_1(x)}{\partial x_1} & \dots & \frac{\partial r_1(x)}{\partial x_m} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial r_n(x)}{\partial x_1} & \dots & \frac{\partial r_n(x)}{\partial x_m} \end{pmatrix}.$$

Antag nu, at $\text{rang}(D_r(x)) = m$ for alle $x \in \mathcal{U}$. Da er billede $r(\mathcal{U}) \subset \mathbb{R}^n = \mathcal{V}$ en glat mangfoldighed med topologien $\tau_{\mathcal{V}} = \mathcal{V} \cap \tau_{\mathbb{R}^n}$ og atlas defineret som kortene

$$(r(A), \varphi \circ r^{-1}), \text{ hvor } (A, \varphi) \text{ glat i } \mathbb{R}^n.$$

Bemærkning. Billedet $r(A) \subset \mathbb{R}^n$ er en del af den klasse af glatte mangfoldigheder, som kaldes *indlejrede delmangfoldigheder*, altså $r(A)$ er en indlejret delmangfoldighed til \mathbb{R}^n .

Bevis. Se proposition 5.2 i bogen *Lee, John M. Introduction to Smooth Manifolds. 2nd ed. Graduate Texts in Mathematics 218. New York: Springer, 2012. https://doi.org/10.1007/978-1-4419-9982-5.*

Eksempel 25: Betragt den åbne enheds-cirkelskive

$$\mathbb{D}^2(0,1) = \{x \in \mathbb{R}^2 : |x|_E < 1\},$$

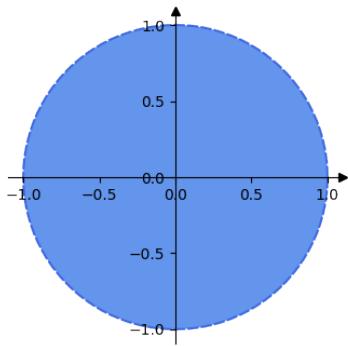
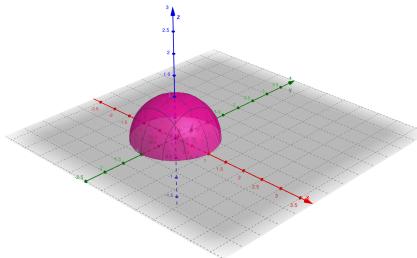
og afbildningen $r : \mathbb{D}^2(0,1) \rightarrow \mathbb{R}^3$ defineret som

$$r(x_1, x_2) = \left(x_1, x_2, \sqrt{1 - x_1^2 - x_2^2} \right).$$

Vi vil nu vise, at r har konstant rang 2 ved at opskrive jacobi-matricen:

$$J_r(x) = \begin{pmatrix} \frac{\partial r_1(x)}{\partial x_1} & \frac{\partial r_1(x)}{\partial x_2} \\ \frac{\partial r_2(x)}{\partial x_1} & \frac{\partial r_2(x)}{\partial x_2} \\ \frac{\partial r_3(x)}{\partial x_1} & \frac{\partial r_3(x)}{\partial x_2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \\ \frac{-x_1}{\sqrt{1-x_1^2-x_2^2}} & \frac{-x_2}{\sqrt{1-x_1^2-x_2^2}} \end{pmatrix},$$

hvor det ses, at $\text{rang}(D_r(x)) = 2$. Altså kan vi betragte billedet - en kugleflade - af den åbne cirkelskive som en glat mangfoldighed. ($\mathbb{D}^2(0,1)$ er også i sig selv en mangfoldighed.)

(a) Mangfoldigheden $\mathbb{D}^2(0,1)$ (b) Den indlejrede delmangfoldighed i \mathbb{R}^3

Riemannsk geometri

I dette afsnit kan vi endelig besvare spørgsmålet, om hvad den korteste rute mellem Pedro og Quinn, som står hver sit sted på en kugleflade. Som nævnt er dette altså ikke bare et ret linjesegment. I så fald ville de skulle grave en tunnel imellem hinanden og igennem kuglen. Hvis vi antager, at vi ikke har en skovl, må Pedro og Quinn altså finde en vej langs den krumme overflade. Og de vil gerne finde en kortest vej imellem dem. En sådan kortest vej hedder en *geodæt*, og senere i dette afsnit kigger vi på et konkret eksempel med en geodæt på en kugleflade.

Definition 31: Lad \mathcal{U} repræsentere en mangfoldighed, og $g_p : T_p\mathcal{U} \times T_p\mathcal{U} \rightarrow \mathbb{R}$ være et indre produkt tilknyttet **tangentrummet** $T_p\mathcal{U}$. Tangentrummet i p kan betragtes som vektorrummet af vektorer med startpunkt i p . g_p skal altså opfylde følgende krav:

1. Symmetrisk: $g_p(\vec{v}, \vec{w}) = g_p(\vec{w}, \vec{v})$.
2. Bilineær: $g_p(\alpha\vec{u} + \beta\vec{v}, \vec{w}) = \alpha g_p(\vec{u}, \vec{w}) + \beta g_p(\vec{v}, \vec{w})$.
3. Positiv definit: $g_p(\vec{v}, \vec{v}) > 0$ så længe $\vec{v} \neq 0$.

En **riemannsk metrik** g tildeler et indre produkt g_p til hvert punkt $p \in \mathcal{U}$ på en "glat måde", og tuplen (\mathcal{U}, g) kaldes da en **riemannsk mangfoldighed**.

Definition 32: Betrag en n -dimensionel mangfoldighed $\mathcal{U} \subseteq \mathbb{R}^n$, og lad $G_{\mathcal{U}} : \mathcal{U} \rightarrow \mathbb{R}^2$ tildele hvert punkt $p(x_1, \dots, x_n)$ i \mathcal{U} en regulær matrix $G(p)$ som er symmetrisk og positiv definit:

1. $G(p)$ symmetrisk: $G(p)^T = G(p)$,
2. $G(p)$ positiv definit: $\vec{v}^T \cdot G(p) \cdot \vec{v} > 0$ for alle vektorer $\vec{v} \in \mathbb{R}^n \setminus \{\vec{0}\}$.

Antag, at elementerne i $G(p)$ såvel som i den inverse matrix $G^{-1}(p)$ er glatte funktioner af p . Da kaldes $G(p)$ en **metrisk matrix** til punktet p , og G et **metrisk matrix-tensorfelt**.

Sætning 16: For en n -dimensionel mangfoldighed $\mathcal{U} \subseteq \mathbb{R}^n$ kan vi konstruere en

riemannsk metrik g givet et metrisk matrix-tensorfelt G via formlen

$$g_p(\vec{v}, \vec{w}) = \vec{v}^T \cdot G(p) \cdot \vec{w}. \quad (5.24)$$

Eksempel 26: For en indlejret delmangfoldighed, typisk repræsenteret som en hyperoverflade i \mathbb{R}^3 , kan vi konstruere en riemannsk metrik ud fra afbildningen $r : \mathbb{R}^m \rightarrow \mathbb{R}^n$ som

$$g_p(\vec{v}, \vec{w}) = \vec{v}^T J_r^T(p) J_r(p) \vec{w} \quad (5.25)$$

$$= \vec{v}^T G(p) \vec{w} \quad (5.26)$$

I forlængelse af eksempel 25 kan vi betragte afbildningen

$$r(x_1, x_2) = (x_1, x_2, \sqrt{1 - x_1^2 - x_2^2}),$$

med domæne $\mathcal{U} = \mathbb{D}^2(0,1)$ og Jacobi-matrix

$$J_r(x_1, x_2) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \\ \frac{-x_1}{\sqrt{1-x_1^2-x_2^2}} & \frac{-x_2}{\sqrt{1-x_1^2-x_2^2}} \end{pmatrix}.$$

Dette giver en metrisk matrix på formen

$$\begin{aligned} G(x_1, x_2) &= J_r(x_1, x_2)^T J_r(x_1, x_2) \\ &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & \frac{-x_1}{\sqrt{1-x_1^2-x_2^2}} \\ 0 & 1 & \frac{-x_2}{\sqrt{1-x_1^2-x_2^2}} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \\ \frac{-x_1}{\sqrt{1-x_1^2-x_2^2}} & \frac{-x_2}{\sqrt{1-x_1^2-x_2^2}} \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} 1 + \frac{(x_1)^2}{1-(x_1)^2-(x_2)^2} & \frac{x_1 x_2}{1-(x_1)^2-(x_2)^2} \\ \frac{x_1 x_2}{1-(x_1)^2-(x_2)^2} & 1 + \frac{(x_2)^2}{1-(x_1)^2-(x_2)^2} \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} 1 - (x_2)^2 & x_1 x_2 \\ x_1 x_2 & 1 - (x_1)^2 \end{pmatrix} \cdot \frac{1}{(1 - (x_1)^2 - (x_2)^2)} \\ &= \begin{pmatrix} 1 - (x_2)^2 & x_1 x_2 \\ x_1 x_2 & 1 - (x_1)^2 \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

Det indre produkt mellem to vektorer $\vec{v} = (v_1, v_2)$ og $\vec{w} = (w_1, w_2)$ i tangentrummet $T_p \mathcal{U}$ er altså

$$\begin{aligned} g_p(\vec{v}, \vec{w}) &= (v_1, v_2) \cdot \begin{pmatrix} 1 - (x_2)^2 & x_1 x_2 \\ x_1 x_2 & 1 - (x_1)^2 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} w_1 \\ w_2 \end{pmatrix} \\ &= v_1 w_1 (1 - (x_2)^2) + v_2 w_2 (1 - (x_1)^2) + v_1 w_2 x_1 x_2 + v_2 w_1 x_1 x_2. \end{aligned}$$

Sætning 17: Vi betragter nu en kurve $\gamma : [a, b] \rightarrow \mathbb{R}^n$. Lad $|\vec{v}|_p = \sqrt{g_p(\vec{v}, \vec{v})}$ betegne normen af \vec{v} i punktet p . Da fås kurvelængden $L(\gamma)$ som

$$L(\gamma) = \int_a^b |\gamma'(s)|_{\gamma(s)} ds = \int_a^b \sqrt{g_{\gamma(s)}(\gamma'(s), \gamma'(s))} ds \quad (5.27)$$

$$(5.28)$$

Sætning 18: En geodæt $\gamma : [a,b] \rightarrow \mathbb{R}^n$ er en kurve for hvilken der gælder, at den er den korteste kurve mellem sine endepunkter:

$$L(\gamma) = \inf\{L(\gamma^*) \text{ hvor } \gamma^* : [a,b] \rightarrow \mathbb{R}^n \text{ og } \gamma^*(a) = \gamma(a), \gamma^*(b) = \gamma(b)\}. \quad (5.29)$$

Sætning 19: Lad $\gamma : [a,b] \rightarrow \mathbb{R}^n$ være en parameteriseret kurve i \mathbb{R}^n givet ved koordinatfunktionerne $\gamma(s) = (\gamma_1(s), \dots, \gamma_n(s))$. Da fås de geodætiske ligninger som

$$\left\{ \frac{d^2}{ds^2} \gamma_i(s) = - \sum_{j=1}^n \sum_{k=1}^n \Gamma_{jk,i} \frac{d}{ds} \gamma_j \frac{d}{ds} \gamma_k \right\}, \quad (5.30)$$

$$(5.31)$$

hvor

$$\Gamma_{ij,k} = \sum_{l=1}^n \frac{1}{2} g^{kl} \left(\frac{\partial g_{jl}}{\partial x_i} + \frac{\partial g_{il}}{\partial x_j} - \frac{\partial g_{ij}}{\partial x_l} \right), \quad (5.32)$$

og g_{ab} repræsenterer indgangen på række a , kolonne b i matricen $G(p)$; medens g^{cd} repræsenterer indgangen på række c , kolonne d i den inverse matrix $G^{-1}(p)$. Symbolerne $\Gamma_{ab,c}$ kaldes desuden **Christoffel-symbolerne**.

Eksempel 27: Vi betragter eksempel 26 fra før, hvor metrik-matricen havde formen

$$G(x_1, x_2) = \begin{pmatrix} 1 - (x_2)^2 & x_1 x_2 \\ x_1 x_2 & 1 - (x_1)^2 \end{pmatrix}.$$

Det kan vises, at den inverse metrik-matrix $G^{-1}(p)$ har formen

$$G^{-1}(p) = \begin{pmatrix} 1 - (x_1)^2 & -x_1 x_2 \\ -x_1 x_2 & 1 - (x_2)^2 \end{pmatrix}$$

For at finde Christoffel-symbolerne $\Gamma_{ab,c}$ finder vi først de afledede til funktionerne g_{ab}

$$\frac{\partial g_{11}}{\partial x^1} = 0, \frac{\partial g_{11}}{\partial x^2} = -2x_2, \frac{\partial g_{12}}{\partial x^1} = \frac{\partial g_{21}}{\partial x^1} = x_2, \frac{\partial g_{12}}{\partial x^2} = \frac{\partial g_{21}}{\partial x^2} = x_1, \frac{\partial g_{22}}{\partial x^1} = -2x_1, \frac{\partial g_{22}}{\partial x^2} = 0.$$

Christoffel-symbolerne kan nu beregnes via ligning (5.32):

$$\begin{aligned} 2\Gamma_{11,1} &= \sum_{l=1}^2 g^{1l} \left(\frac{\partial g_{1l}}{\partial x_1} + \frac{\partial g_{1l}}{\partial x_1} - \frac{\partial g_{11}}{\partial x_l} \right) \\ &= g^{11} \left(\frac{\partial g_{11}}{\partial x^1} + \frac{\partial g_{11}}{\partial x^1} - \frac{\partial g_{11}}{\partial x^1} \right) + g^{12} \left(\frac{\partial g_{12}}{\partial x^1} + \frac{\partial g_{12}}{\partial x^1} - \frac{\partial g_{11}}{\partial x^2} \right) \\ &= (1 - (x_1)^2)(0 + 0 - 0) - x_1 x_2 (x_2 + x_2 + 2x_2) \\ &= -x_1 x_2 (4x_2) \\ &= -4x_1 (x_2)^2 \implies \Gamma_{11,1} = -2x_1 (x_2)^2. \end{aligned}$$

Samme procedure følges for de resterende Christoffel-symboler. Her er resultaterne:

$$\begin{aligned}\Gamma_{11,1} &= -2x_1(x_2)^2, \Gamma_{11,2} = 2x_2(1 - (x_2)^2), \\ \Gamma_{12,1} &= \frac{x_2(3 - 2(x_1)^2 - x_1x_2)}{2} = \Gamma_{21,1}, \Gamma_{12,2} = \frac{x_1(1 - 2(x_2)^2) - x_2(3 - 2(x_2)^2)}{2} = \Gamma_{21,2} \\ \Gamma_{22,1} &= \frac{-x_1(4 - 4(x_1)^2 - x_1x_2)}{2}, \Gamma_{22,2} = \frac{-x_1(1 - (x_2)^2 - 4x_1x_2)}{2}\end{aligned}$$

Ved udledning kan man vise, at dette resulterer i følgende geodætiske ligninger:

$$\begin{aligned}\gamma_1''(s) &= 2\gamma_1(s)[\gamma_2(s)]^2[\gamma_1'(s)]^2 + \gamma_2(s)[2 + 2[\gamma_1(s)]^2 - \gamma_1(s)\gamma_2(s)]\gamma_1'(s)\gamma_2'(s) \\ &\quad - \frac{\gamma_1(s)[1 - [\gamma_1(s)]^2 + 2\gamma_1(s)\gamma_2(s)]}{2}[\gamma_2'(s)]^2 \\ \gamma_2''(s) &= -2\gamma_2(s)[1 - [\gamma_2(s)]^2][\gamma_1'(s)]^2 - \gamma_2(s)[2\gamma_1(s)\gamma_2(s) - 1 + [\gamma_2(s)]^2]\gamma_1'(s)\gamma_2'(s) \\ &\quad + \frac{\gamma_1(s)[\gamma_1(s)\gamma_2(s) + 2 - 2[\gamma_2(s)]^2]}{2}[\gamma_2'(s)]^2\end{aligned}$$

De geodætiske ligninger kan da løses, hvis vi kender startpositionen af $\gamma(s) = x_0$ og starthastigheden $\gamma'(s) = \vec{y}_0$, og ofte numerisk.

Ekstra

Definition 33: Lad $\mathcal{U} \subseteq \mathbb{R}^n$ være en glat mangfoldighed. En **afledet** til et punkt $p \in \mathcal{U}$ er en lineær afbildning $D : C^\infty(\mathcal{U}) \rightarrow \mathbb{R}$ som respekterer produkt-reglen

$$D(f \cdot g) = D(f) \cdot g(p) + D(g) \cdot f(p).$$

Eksempel 28: Lad $\vec{v} \in \mathcal{U}$ være en vektor fra det euklidiske underrum $\mathcal{U} \subset \mathbb{R}^n$. Med andre ord er \vec{v} en geometrisk vektor. Lad $f : \mathcal{U} \rightarrow \mathbb{R}$ være en glat funktion. Vi kan nu definerer den **retningsaflede** af f mht. \vec{v} som følgende grænseværdi

$$\nabla_{\vec{v}} f(p) = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{f(p + h\vec{v}) - f(p)}{h}. \quad (5.33)$$

$\nabla_{\vec{v}} f(p)$ er lineær:

$$\begin{aligned} \nabla_{\vec{v}}(\alpha f + \beta g) &= \lim_{h \rightarrow 0} \frac{(\alpha f + \beta g)(p + h\vec{v}) - (\alpha f + \beta g)(p)}{h} \\ &= \lim_{h \rightarrow 0} \frac{\alpha f(p + h\vec{v}) - \alpha f(p) + \beta g(p + h\vec{v}) - \beta g(p)}{h} \\ &= \alpha \lim_{h \rightarrow 0} \frac{f(p + h\vec{v})}{h} + \beta \lim_{h \rightarrow 0} \frac{g(p + h\vec{v}) - g(p)}{h} \\ &= \alpha \nabla_{\vec{v}} f(p) + \beta \nabla_{\vec{v}} g(p), \end{aligned}$$

og følger produkt-reglen:

$$\begin{aligned} \nabla_{\vec{v}}(f \cdot g)(p) &= \lim_{h \rightarrow 0} \frac{(f \cdot g)(p + h\vec{v}) - (f \cdot g)(p)}{h} \\ &= \lim_{h \rightarrow 0} \frac{f(p + h\vec{v}) \cdot g(p + h\vec{v}) - f(p) \cdot g(p)}{h} \\ &= \lim_{h \rightarrow 0} \left[\frac{f(p + h\vec{v}) \cdot g(p + h\vec{v})}{h} - \frac{f(p) \cdot g(p)}{h} \right] \\ &= \lim_{h \rightarrow 0} \left[\frac{f(p + h\vec{v}) - f(p) + f(p)}{h} \cdot g(p + h\vec{v}) - \frac{f(p) \cdot g(p)}{h} \right] \\ &= \lim_{h \rightarrow 0} \left[\frac{f(p + h\vec{v}) - f(p)}{h} \cdot g(p + h\vec{v}) + \frac{g(p + h\vec{v})f(p)}{h} - \frac{f(p) \cdot g(p)}{h} \right] \\ &= \nabla_{\vec{v}} f(p) \cdot g(p) + \lim_{h \rightarrow 0} \left[\frac{g(p + h\vec{v})f(p)}{h} - \frac{f(p) \cdot g(p)}{h} \right] \\ &= \nabla_{\vec{v}} f(p) \cdot g(p) + \lim_{h \rightarrow 0} \left[\frac{g(p + h\vec{v}) - g(p)}{h} \cdot f(p) \right] \\ &= \nabla_{\vec{v}} f(p) \cdot g(p) + \nabla_{\vec{v}} g(p) \cdot f(p) \end{aligned}$$

Eksempel 29: Lad $\gamma : [a,b] \rightarrow \mathbb{R}^n$ være en glat kurve i \mathbb{R}^n parameteriseret over det ikke-tomme interval $[a,b] \subset \mathbb{R}$. Da repræsenterer $\nabla_{\gamma'(s)} : C^\infty(\mathcal{U}) \rightarrow \mathbb{R}^n$ en afledet til punktet $\gamma(s) \in \mathbb{R}^n$.

Kapitel 6

Produktintegralet, Markovkæder og pension

I dette valgfrie forløb skal vi arbejde med en række sandsynlighedsteoretiske værktøjer og deres anvendelser inden for modellering i livsforsikring og pension. Vi gennemgår først produktintegralet, som er en generalisering af en bestemt førsteordens lineær differentialligning. Herefter skal vi arbejde med såkaldte Markovkæder og til slut anvendelser i pensionsberegninger. I løbet af forløbet får vi brug for alle vores redskaber fra numerisk analyse, lineær algebra og differentialligninger.

Forløbet er opbygget med opgaver løbende i stedet for i slutningen af en sektion. Idéen er, at I (gerne i grupper) skal arbejde jer igennem stoffet og løbende opbygge forståelse gennem opgaveløsning. Der vil både være opgaver af teoretisk og numerisk/praktisk natur. I har flere muligheder i tilgangen til forløbet. Herunder er skitseret nogle mulige ruter. I dem alle vil det være nødvendigt at læse definitionerne, brødteksten og resultaterne undervejs.

Den praktiske rute: Til dem, som gerne hurtigt vil nå frem til de numeriske/praktiske opgaver kan følgende opgaveliste anbefales:

1. Til sektionen om produktintegralet, lav opgave 1.1.1 og 1.1.2 for at opnå en basal forståelse. Tag Lemma 1.1.6 for givet og lav opgave 1.1.5. Løs opgave 1.1.9, hvor I endelig må bruge alt det ovenstående. Proposition 6.1.10 bliver vigtig senere. Læs og forstå Van Loans sætning. Beviset skal I kun lave, hvis I har lyst. Dette inkluderer alt det teoretiske omkring produktintegralet, I behøver. **Løs opgave 1.1.12.** Dette er den numeriske arbejdshest, I vil få brug for igen og igen.
2. Til sektionen om Markovkæder, lav opgave 1.2.1 og 1.2.2 (og læs afsnittet grundigt!). Lav opgave 1.2.3 (for forståelsens skyld) og 1.2.5, som er af numerisk natur.
3. Til sektionen om anvendelser i livsforsikring og pension kan det anbefales at lave opgave 1.3.1 til 1.3.5 for at få intuition og forståelse. Opgave 1.3.6 har nogle numeriske opgaver hen mod slutningen, der er gode at lave. Lav herefter opgave 1.3.9. I kan herefter springe frem mod afsnittet om matrixmetoder og lave alle opgaver heri pånær 1.3.15 og 1.3.20.

Den (mere) teoretiske rute: Til dem, som nyder at arbejde mere teoretisk med stoffet, kan ruten koges ned til følgende.

1. Lav alle opgaver i rækkefølge i produktintegralafsnittet pånær eventuelt 1.1.12, som er rent praktisk. Ekstraopgaverne bør springes over i første omgang, men de er alle af teoretisk natur, så hvis I er interesserede, kan I sagtens springe tilbage til dem.

2. Lav alle opgaver i afsnittet om Markovkæder pånær 1.2.5. Her kan ekstraopgaverne være gode til at opnå forståelse, men tag jer i afg. Nogle af dem involverer noget omstændige beregninger i hånden, så det kan være en idé at se på dem senere på ugen.
3. I afsnittet om anvendelser er alle opgaver relevante. Det fremgår tydeligt, når fokus skifter fra teori til praksis, så I kan blot undlade at lave implementeringsdelene.

Ingen af disse forløb kræver, at I kigger på ekstraopgaverne. Disse er primært tiltænkt dem, der ønsker mere teori og som kommer hurtigt igennem alt det andet.

6.1 Produktintegralet

Hvad er produktintegralet?

Definition 6.1.1. En *matrixfunktion* $A : I \rightarrow \mathbb{R}^{n \times n}$ er en funktion af én variabel t i et interval $I \subseteq \mathbb{R}$, som tager $n \times n$ -matricer som værdier. Vi kan for sådan en funktion skrive

$$A(t) = \begin{pmatrix} a_{11}(t) & a_{12}(t) & \cdots & a_{1n}(t) \\ a_{21}(t) & a_{22}(t) & \cdots & a_{2n}(t) \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ a_{n1}(t) & a_{n2}(t) & \cdots & a_{nn}(t) \end{pmatrix}$$

for funktioner $a_{ij} : I \rightarrow \mathbb{R}$.

Differentiering og integration af matrixfunktioner fungerer præcist som forventet. Man gør det blot indgangsvist. Med denne konvention holder de gængse regneregler for differentiation ligeledes for matricer.

Lemma 6.1.2 (Produktregel for matricer). *Lad $A(t)$ og $B(t)$ være differentiable matrixfunktioner. Da gælder*

1. $(A(t) + B(t))' = A'(t) + B'(t)$.
2. $(A(t)B(t))' = A'(t)B(t) + A(t)B'(t)$.

Definition 6.1.3. Betragt matrixfunktionen $A(t)$. *Produktintegralet* er den unikke løsning $Y(t)$ til differentialligningen

$$Y'(t) = Y(t)A(t), \quad Y(s) = I.$$

Vi betegner løsningen med

$$Y(t) = \prod_s^t (I + A(x)dx).$$

Vi har hverken vist, at produktintegralet eksisterer, eller at det er unikt. Eksistens er dækket i følgende proposition. Vi udelader at vise unikhed.

Proposition 6.1.4. *Produktintegralet eksisterer. Løsningen er givet ved*

$$Y(t) = \sum_{k=0}^{\infty} Y_k(t),$$

hvor $Y_0(t) = I$ og $Y_k(t) = \int_s^t Y_{k-1}(u)A(u)du$.

Bevis. Vores bud på en løsning opfylder

$$\begin{aligned} Y(t) &= Y_0(t) + \sum_{k=1}^{\infty} Y_k(t) = I + \sum_{k=1}^{\infty} \int_s^t Y_{k-1}(u) A(u) du \\ &= I + \int_s^t \sum_{k=1}^{\infty} Y_{k-1}(u) A(u) du = I + \int_s^t Y(u) A(u) du. \end{aligned}$$

Herudfra ses, at $Y(s) = I$. Ved at differentiere dette udtryk mht. t , får vi $Y'(t) = Y(t)A(t)$ som ønsket. I tredje ulighed bytter vi rundt på integration og summation. Når summen har uendelig mange led, kræver dette såkaldt uniform konvergens, men vi udelader at gennemgå disse detaljer. ■

- **Opgave 6.1.1:**

Produktintegralet har en eksplisit løsning i én dimension. Hvad er denne løsning?

Egenskaber for produktintegralet

Produktintegralet har et væld af pæne egenskaber.

Proposition 6.1.5. *Lad $s \leq u \leq t$. Da har vi*

$$\prod_s^t (I + A(x)dx) = \prod_s^u (I + A(x)dx) \prod_u^t (I + A(x)dx).$$

- **Opgave 6.1.2:**

Bevis denne proposition på følgende måde.

- 1) Kald højresiden $Y(t)$. Bestem $Y'(t)$.
- 2) Vis, at $Y'(t) = Y(t)A(t)$.
- 3) Vis, at $Y(s) = I$. Vink: Overvej, hvad u må være i tilfældet $t = s$.
- 4) Brug nu unikheden af produktintegralet til at færdiggøre beviset.

- **Opgave 6.1.3:**

Brug forrige resultat til at vise, at

$$\left(\prod_s^t (I + A(x)dx) \right)^{-1} = \prod_t^s (I + A(x)dx).$$

Fra Proposition 6.1.4 har vi et udtryk for produktintegralet, nemlig

$$\begin{aligned} \prod_s^t (I + A(x)dx) &= I + \int_s^t A(x_1)dx_1 + \sum_{k=2}^{\infty} \int_s^t \int_s^{x_1} \cdots \int_s^{x_{k-1}} A(x_k)A(x_{k-1}) \cdots A(x_1) dx_k dx_{k-1} \cdots dx_1 \\ &= I + \int_s^t A(x_1)dx_1 + \int_s^t \int_s^{x_1} A(x_2)A(x_1)dx_2 dx_1 \\ &\quad + \int_s^t \int_s^{x_1} \int_s^{x_2} A(x_3)A(x_2)A(x_1)dx_3 dx_2 dx_1 + \cdots \end{aligned}$$

Denne repræsentation for løsningen kaldes *Peanorepræsentationen* for produktintegralet.

Lemma 6.1.6 (Den kommutative egenskab for produktintegralet). *Antag, at alle $A(x)$ kommuterer, dvs. $A(u)A(v) = A(v)A(u)$ for alle $u, v \in [s, t]$. Da gælder*

$$A(x) \prod_s^t (I + A(u)du) = \prod_s^t (I + A(u)dx)A(x)$$

for alle $x \in [s, t]$.

•• **Opgave 6.1.4:**

Brug Peanorepræsentationen til at bevise ovenstående lemma.

Sætning 6.1.7. *Antag, at $A(x)$ kommuterer med alle $B(y)$. Da gælder*

$$\prod_s^t (I + A(x)dx) \prod_s^t (I + B(x)dx) = \prod_s^t (I + (A(x) + B(x))dx).$$

•• **Opgave 6.1.5:**

Bevis ovenstående sætning i følgende trin.

1) Definér

$$F(s, t) = \prod_s^t (I + A(x)dx) \prod_s^t (I + B(x)dx).$$

Beregn $\frac{\partial}{\partial t} F(s, t)$. Du får brug for produktreglen.

2) Vis, at

$$\frac{\partial}{\partial t} F(s, t) = F(s, t)(A(t) + B(t)).$$

3) Argumentér for, at $F(s, s) = I$ og færdiggør beviset.

4) Minder differentialligningen for $F(s, t)$ dig om en funktion, vi kender?

Definition 6.1.8. Lad A være en $n \times n$ -matrix. Da definerer vi

$$e^A = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{n!} A^n.$$

Denne funktion kaldes *matrixekspontialet*.

Vi ser, at matrixekspontialet er defineret med udgangspunkt i Taylorudvidelsen for den almindelige eksponentialfunktion. Man kan vise, at denne funktion er veldefineret og altid giver en matrix som resultat. Vi kan herudfra definere en matrixfunktion givet ved

$$e^{Ax} = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{A^n x^n}{n!}.$$

•• **Opgave 6.1.6:**

Antag, at $\lambda_1, \dots, \lambda_n$ er egenværdier for A og at A kan diagonaliseres med

$$A = BDB^{-1},$$

hvor D er diagonalmatricen med indgange $\lambda_1, \dots, \lambda_n$, og B er en matrix, hvis søjler består af tilhørende egenvektorer. Bevis, at

$$e^{Ax} = B \begin{pmatrix} e^{\lambda_1 x} & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & e^{\lambda_2 x} & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & e^{\lambda_n x} \end{pmatrix} B^{-1}.$$

Forrige opgave viser, at vi kan beregne matrixeksponentialet eksplisit, hvis blot vi kan diagonalisere inputmatricen A . Hvis I har lyst, er der en række ekstraopgaver til bl.a. matrixeksponentialet i slutningen af sektionen. Vi skal nu se, at matrixeksponentialet er et specialtilfælde af produktintegralet.

Sætning 6.1.9. *Antag, at alle $A(x)$ kommuterer. Da gælder*

$$\prod_s^t (I + A(x)dx) = e^{\int_s^t A(u)du}.$$

•• **Opgave 6.1.7:**

Bevis ovenstående sætning. Du må frit benytte, at

$$\frac{d}{dt} \left(\int_s^t A(u)du \right)^k = kA(t) \left(\int_s^t A(u)du \right)^{k-1}.$$

• **Opgave 6.1.8:**

Bevis, at hvis $A(x) = A\lambda(x)$ for en konstant matrix A , og λ er en funktion ind i \mathbb{R} , da gælder

$$\prod_s^t (I + A(x)dx) = e^{A \int_s^t \lambda(u)du}.$$

Specielt hvis $A(x) = A$ er konstant, så har vi

$$\prod_s^t (I + Adx) = e^{A(t-s)}.$$

Følgende resultat bliver særdeles brugbart, når vi skal indarbejde renter i en livsforeningskontekst.

Proposition 6.1.10. *Lad $r(x)$ være en funktion ind i \mathbb{R} . Da gælder*

$$e^{-\int_s^t r(x)dx} \prod_s^t (I + A(x)dx) = \prod_s^t (I + (A(x) - r(x)I)dx).$$

•• **Opgave 6.1.9:**

Bevis ovenstående resultat i følgende trin.

1) Bevis, at

$$e^{-\int_s^t r(x)dx} I = e^{-\int_s^t r(x)Idx} = \prod_s^t (I - r(x)Idx).$$

2) Bevis nu ovenstående proposition.

Vi viser nu, at produktintegralet opfylder en anden differentialligning, hvor vi differentialtager mht. det nedre fodpunkt i stedet for det øvre.

Sætning 6.1.11. *Produktintegralet opfylder*

$$\frac{d}{ds} \prod_s^t (I + A(x)dx) = -A(s) \prod_s^t (I + A(x)dx).$$

••• **Opgave 6.1.10:**

Bevis ovenstående sætning i følgende trin.

- 1) Bevis, at der for en differentielabel matrixfunktion $C(x)$ gælder

$$\frac{d}{dx} C^{-1}(x) = -C^{-1}(x)C'(x)C^{-1}(x).$$

Hvad siger dette resultat i tilfældet, hvor C er 1×1 ? Vink: Differentér begge sider af $I = C(x)C^{-1}(x)$.

- 2) Brug forrige delopgave samt Opgave 6.1.3 til at bevise sætningen.

Følgende sætning giver et formidabelt værktøj til at regne med produktintegraler. Vi kommer til at bruge dette i flere konkrete eksempler i sektionen om Markovkæder.

Sætning 6.1.12 (Van Loan). *Lad $A(x), B(x)$ og $C(x)$ være kontinuerte matrixfunktioner. Da gælder*

$$\prod_s^t \left(I + \begin{pmatrix} A(x) & B(x) \\ 0 & C(x) \end{pmatrix} dx \right) = \begin{pmatrix} \prod_s^t (I + A(x)dx) & \int_s^t \prod_s^u (I + A(x)dx)B(u) \prod_u^t (I + C(x)dx)du \\ 0 & \prod_s^t (I + C(x)dx) \end{pmatrix}.$$

••• **Opgave 6.1.11:**

Vi beviser Van Loans sætning. Lad

$$M(s, t) = \begin{pmatrix} \prod_s^t (I + A(x)dx) & \int_s^t \prod_s^u (I + A(x)dx)B(u) \prod_u^t (I + C(x)dx)du \\ 0 & \prod_s^t (I + C(x)dx) \end{pmatrix}$$

være vores bud på en løsning.

- 1) Brug Leibniz' regel til at vise, at øverste højre blok i $M(s, t)$ differentierer til

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \int_s^t \prod_s^u (I + A(x)dx)B(u) \prod_u^t (I + C(x)dx)du &= \\ &= \int_s^t \prod_s^u (I + A(x)dx)B(u) \prod_u^t (I + C(x)dx)duC(t) + \prod_s^t (I + A(u)du)B(t). \end{aligned}$$

- 2) Vis nu, at

$$\frac{d}{dt} M(s, t) = M(s, t) \begin{pmatrix} A(t) & B(t) \\ 0 & C(t) \end{pmatrix}.$$

- 3) Færdiggør nu beviset.

Vi har nu alle de essentielle redskaber for produktintegralet på plads. Vi mangler nu blot at lave en effektiv og præcis implementering.

••• **Opgave 6.1.12:**

Skriv en funktion, som beregner produktintegralet med en fjerdeordens Runge–Kutta-metode. Jeres funktion skal tage følgende input: En matrixfunktion A , et starttidspunkt

s , et sluttidspunkt t samt et tal n , der angiver antal iterationer. Outputtet skal være produktintegralet

$$\prod_s^t (I + A(x)dx).$$

Lav også en udgave af jeres produktintegral løsner, som giver en liste af værdierne

$$\prod_s^{s+h} (I + A(x)dx), \prod_s^{s+2h} (I + A(x)dx), \dots, \prod_s^t (I + A(x)dx)$$

som output.

Ekstraopgaver

Hvis I har lyst, kan I løse nogle af følgende ekstraopgaver omhandlende teoretiske egenskaber for produktintegralet samt matrixeksponentialet.

- **Opgave 6.1.13:**

Lad $B(x)$ være en kontinuert matrixfunktion. Vis, at

$$Y(t) = C \prod_s^t (I + A(x)dx) + \int_s^t B(u) \prod_u^t (I + A(x)dx) du$$

er en løsning til differentialligningen

$$Y'(t) = Y(t)A(t) + B(t), \quad Y(s) = C.$$

- **Opgave 6.1.14:**

Lad $s \leq u \leq t$. Antag, at matrixfunktionen $C(x)$ er defineret stykvist konstant ved

$$C(x) = \begin{cases} A, & x \in [s, u] \\ B, & x \in [u, t] \end{cases}$$

Vis, at

$$\prod_s^t (I + C(x)dx) = e^{A(u-s)} e^{B(t-u)}.$$

- **Opgave 6.1.15:**

Vis, at produktintegralet opfylder

$$\frac{d}{dt} \prod_{t/2}^t (I + A(x)dx) = -\frac{1}{2} A(t/2) \prod_{t/2}^t (I + A(x)dx) + \prod_{t/2}^t (I + A(x)dx) A(t).$$

Vink: Du får brug for kædereglen.

- **Opgave 6.1.16:**

Lad $\varphi(t)$ være en reel funktion. Bevis, at produktintegralet opfylder

$$\prod_{\varphi(s)}^{\varphi(t)} (I + A(x)dx) = \prod_s^t (I + A(\varphi(x))\varphi'(x)dx).$$

Man kan tænke på dette som substitution for produktintegraler.

••• **Opgave 6.1.17:**

Vis, at der for enhver invertibel matrix C gælder

$$\prod_s^t (I + C^{-1}A(x)C dx) = C^{-1} \prod_s^t (I + A(x)dx)C.$$

•• **Opgave 6.1.18:**

I denne opgave fastlægger vi yderligere egenskaber for produktintegralet.

1) Vis, ved at differentiere ledvist, at

$$\frac{d}{dx} e^{Ax} = Ae^{Ax}.$$

2) Vis, at $e^0 = I$.

3) Vis, at e^A er invertibel for alle A . Hvad er den inverse?

4) Vis, at for alle $t, s \in \mathbb{R}$ og $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$, gælder

$$e^{A(t+s)} = e^{At} e^{As}.$$

Vink: Du må uden bevis benytte, at hvis A og B kommuterer (dvs. $AB = BA$), da gælder $e^{A+B} = e^A e^B = e^B e^A$. Se evt. Opgave 6.1.20 nedenunder.

5) Vis, at $(e^A)^T = e^{A^T}$.

•• **Opgave 6.1.19:**

I denne opgave implementerer vi matrixeksponentialet.

1) Skriv en naiv implementering af matrixeksponentialet baseret på approksimationen

$$e^A \approx \sum_{k=0}^N \frac{A^k}{k!}.$$

Lav implementeringen som en funktion af både A og N , antallet af led i summen.

2) Test din implementation på en rækker matricer A og sammenlign resultaterne med et andet program (f.eks. Maple, en pakke til Python eller andet).

3) Lav nu en anden implementering baseret på diagonalisering som i Opgave 6.1.6.

4) Sammenlign dine to implementeringer med hinanden. Hvilken er mest præcis, hurtigst og i hvilke sammenhænge?

••• **Opgave 6.1.20:**

Vis, at $e^{A+B} = e^A e^B = e^B e^A$, såfremt $AB = BA$. Vink: Én måde at vise dette er ved at benytte *Cauchy-multiplikation* for rækker,

$$\left(\sum_{k=0}^{\infty} a_k \right) \left(\sum_{k=0}^{\infty} b_k \right) = \sum_{k=0}^{\infty} \sum_{i=0}^k a_l b_{k-l}$$

samt binomialformlen, se Sætning A.22.

••• **Opgave 6.1.21:**

Giv et alternativt bevis for Sætning 6.1.11 ved at bruge Peanorepræsentationen samt Leibniz' regel

$$\frac{s}{ds} \int_s^t g(s, x) dx = \int_s^t g(s, x) dx - g(s, s).$$

6.2 Markovkæder

Definition 6.2.1. En stokastisk proces (i kontinuert tid) er en samling af stokastiske variable $\{X_t\}_{t \geq 0}$ indeksret af $[0, \infty)$.

I klassisk livsforsikring er Markovkæder en central komponent i at modellere police-tagerens livsforløb.

Definition 6.2.2. En stokastisk proces $Z = \{Z_t\}_{t \geq 0}$ med værdier i det endelige tilstandsrum $E = \{1, 2, \dots, p\}$ kaldes en *Markovkæde*, hvis der for alle $0 = t_0 < t_1 < \dots < t_n$ og $i_0, i_1, \dots, i_n \in E$ gælder

$$\mathbb{P}(X_{t_n} = i_n \mid X_{t_{n-1}} = i_{n-1}, \dots, X_{t_1} = i_1, X_{t_0} = i_0) = \mathbb{P}(X_{t_n} = i_n \mid X_{t_{n-1}} = i_{n-1}).$$

Fortolkningen af Markovegenskaben er, at processens fremtidige opførsel er uafhængig af processens fortid betinget på nutiden (her t_{n-1}). Sagt kort: Fremtiden er uafhængig af fortiden givet nutiden. Vi lader

$$\mathcal{F}_t = \sigma(Z_s : s \leq t)$$

betegne *informationen* indeholdt i processen til og med tid t . Man kan give denne størrelse en formel matematisk definition, men vi skal i dette forløb nøjes med at tænke rent intuitivt på \mathcal{F}_t .

Følgende brugbare resultat tager vi for givet.

Proposition 6.2.3. *Lad Z være en Markovkæde. Lad Y være en variabel, der kun afhænger af Z_s for $s \geq t$. Da gælder*

$$\mathbb{E}[Y \mid \mathcal{F}_t] = \mathbb{E}[Y \mid Z_t].$$

Det er vigtigt at understrege, at der er to antagelser i spil. Først og fremmest skal Y kun afhænge af fremtiden, og derudover skal Z være Markov.

Overgangssandsynheder og intensiteter

Der er to måder at beskrive en Markovkæde, som benyttes i praksis. Den første og mest håndgribelige er gennem overgangssandsynheder.

Definition 6.2.4. Lad Z være en Markovkæde. For $s \leq t$ og $i, j \in E$ lader vi $p_{ij}(s, t) = \mathbb{P}(Z_t = j \mid Z_s = i)$ betegne *overgangssandsynligheden* for at gå fra tilstand i til j på tid t givet at man er i tilstand i på tid s . Disse arrangeres i en matrix

$$p(s, t) = \{p_{ij}(s, t)\}_{i,j \in E}$$

kaldet *overgangsmatricen*. Hvis det for alle $i, j \in E$ gælder, at $p_{ij}(s, t)$ kun afhænger af $t - s$, da kaldes Z *tidshomogen*, og vi skriver

$$p_{ij}(t) = \mathbb{P}(Z_{s+t} = j \mid Z_s = i).$$

- **Opgave 6.2.1:**

Forklar hvorfor, rækkerne i $p(s, t)$ skal summere til 1.

Overgangssandsynhederne virker umiddelbart til at være den oplagte måde at beskrive en Markovkæde på. Til statistikformål er det dog ikke praktisk at estimere overgangssandsynhederne direkte. Derfor indfører vi nu en anden størrelse, nemlig *overgangsintensiteter*.

Definition 6.2.5. Vi antager, at følgende grænseværdi eksisterer:

$$\Lambda(t) := \lim_{h \rightarrow 0^+} \frac{1}{h} (p(t+h, t) - I),$$

og indgangene $\mu_{ij}(t)$ i Λ kaldes *overgangsintensiteterne* for Z .

Overgangssandsynlighederne har en naturlig fortolkning. For $i \neq j$ ser vi, at

$$p_{ij}(t+h, t) = \mu_{ij}(t)h + o(h),$$

dvs. $\mu_{ij}(t)dt$ er sandsynligheden for at springe fra i til j i det infinitesimale tidsrum $[t, t+dt)$. Idet rækkerne i $p(s, t)$ summerer til én, skal vi have

$$\mu_{ii}(t) = - \sum_{j:j \neq i} \mu_{ij}(t),$$

dvs. rækkerne i Λ skal summere til 0. Hvis $i = j$ har vi

$$p_{ii}(t+h, t) = 1 + \mu_{ii}(t)h + o(h) = 1 - \sum_{j:j \neq i} \mu_{ij}(t)h + o(h), \quad (6.1)$$

og altså er $1 + \mu_{ii}(t)dt$ sandsynligheden for ingen spring i $[t, t+dt)$ givet ophold i tilstand i til tid t . Følgende nyttige resultater kan I benytte frit i det følgende. Det er smart at lade $\mu_i(t) := -\mu_{ii}(t)$.

Proposition 6.2.6. *For en Markovkæde Z med intensiteter $\Lambda = \mu_{ij}_{i,j \in E}$ gælder følgende.*

1. *Givet, at et spring ud af tilstand i finder sted på tidspunkt t , da er sandsynligheden for at springet sker til tilstand j givet ved*

$$\frac{\mu_{ij}(t)}{\mu_i(t)} = -\frac{\mu_{ij}(t)}{\mu_{ii}(t)}.$$

2. *Givet ophold i tilstand i til tid s er sandsynligheden for at forblive i tilstand i til tid t givet ved*

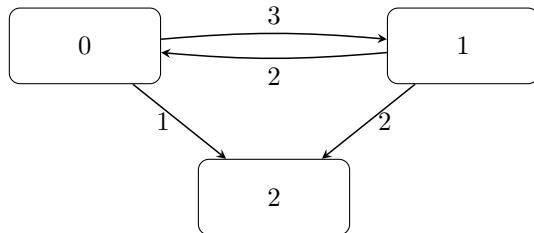
$$e^{-\int_s^t \mu_i(u)du}.$$

•• **Opgave 6.2.2:**

Betrægt en Markovkæde Z med tilstandsrum $E = \{0, 1, 2\}$ og intensitetsmatrix

$$\Lambda = \begin{pmatrix} -4 & 3 & 1 \\ 2 & -4 & 2 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Markovkæden kan illustreres således:



- 1) Argumentér for, at Λ er en gyldig intensitetsmatrix.
- 2) Antag, at $Z_2 = 1$. Hvad er sandsynligheden for, at $Z_3 = 1$, og at der ikke har været spring i tidsrummet $[2, 3]$?
- 3) Hvad er fordelingen af opholdstiden i tilstand 0, indtil Z springer? Vink: Genkend et udtryk på formen $1 - F(t)$, hvor F er en fordelingsfunktion for en kendt fordeling. Dette må være fordelingen af opholdstiden.
- 4) Hvad er den forventede opholdstid i tilstand 0 indtil næste spring?
- 5) Givet at Z springer ud af tilstand 0 til tid 5.621, hvad er sandsynligheden for, at springet er til tilstand 1 eller 2 henholdsvis?

Hvad er den præcise relation mellem overgangsintensiteterne og overgangssandsynlighederne? Næste sætning giver en elegant og brugbar sammenhæng.

Sætning 6.2.7 (Kolmogorovs differentialligninger). For en Markovkæde Z og $s \leq t$ gælder

$$p(s, t) = \prod_s^t (I + \Lambda(x)dx),$$

dvs.

$$\frac{d}{dt} p(s, t) = p(s, t) \Lambda(t), \quad p(s, s) = I.$$

Det er vigtigt at understrege, at Kolmogorovs differentialligninger kun gælder for en Markovkæde. Hvis Markovegenskaben udelades, skal man i stedet betragte opholdssandsynigheder, hvis en elegant sammenhæng med produktintegralet skal fremkomme. I det følgende skal vi se på en række konkrete Markovkæder. I de to første er det muligt at bestemme overgangssandsynighederne eksplizit.

- **Opgave 6.2.3: Liv-død-modellen**

Liv-død-modellen er en totilstandsmodel. Helt præcist, lad Z have overgangsmatrix

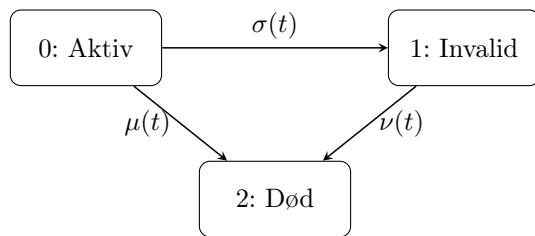
$$\Lambda(t) = \begin{pmatrix} -\mu(t) & \mu(t) \\ 0 & 0 \end{pmatrix},$$

hvor μ kaldes *dødeligheden*.

- 1) Skitsér modellen som gjort i forrige opgave.
- 2) Skriv Kolmogorovs differentialligninger ud helt eksplizit for $s \leq t$.
- 3) Løs Kolmogorovs differentialligninger og opstil $p(s, t)$.

- • **Opgave 6.2.4: Invalidemodellen uden reaktivering**

I invalidemodellen uden reaktivering betragter vi en Markovkæde Z med tilstandsrum $E = \{0, 1, 2\}$, hvor 0 : Aktiv, 1 : Invalid og 2 : Død. Modellen kan skitseres således:



- 1) Opskriv intensitetsmatricen $\Lambda(t)$.
- 2) Argumentér for, at overgangsmatricen $p(s, t)$ har formen

$$p(s, t) = \begin{pmatrix} e^{-\int_s^t \sigma(x) + \mu(x) dx} & p_{01}(s, t) & p_{02}(s, t) \\ 0 & e^{-\int_s^t \nu(x) dx} & p_{12}(s, t) \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

- 3) Udled $p_{23}(s, t)$.
- 4) Brug Van Loan til at vise, at

$$p_{01}(s, t) = \int_s^t e^{-\int_s^x \mu(y) + \sigma(y) dy} \sigma(x) e^{-\int_x^t \nu(y) dy} dx$$

og at

$$p_{02}(s, t) = \int_s^t e^{-\int_s^x \mu(y) + \sigma(y) dy} (\mu(x) + \sigma(x)) (1 - e^{-\int_x^t \nu(y) dy}) dx.$$

Vi har dermed bestemt $p(s, t)$ eksplizit!

5) Læs og forstå følgende fortolkning af udtrykket for p_{01} : En overgang fra 0 til 1 foregår som følger. Vi forbliver i tilstand 0 indtil tid x med sandsynlighed

$$e^{-\int_s^x \mu(y)+\sigma(y)dy},$$

hvorefter vi laver et spring fra 0 til 1 med sandsynlighed $\sigma(x)dx$. Derefter bliver vi i tilstand 1 fra tid x og frem til t med sandsynlighed

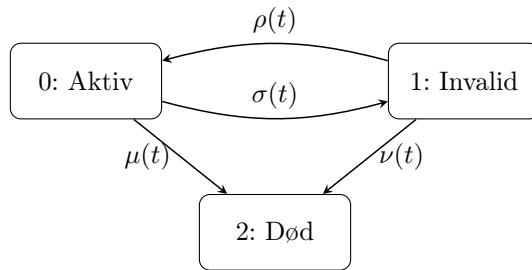
$$e^{-\int_x^t \nu(y)dy}.$$

Gang nu disse tre sandsynligheder sammen for at få sandsynligheden for det samlede forløb for værdien x . Idet dette forløb kan finde sted for alle $x \in [s, t]$, må vi summere (dvs. integrere) alle disse sandsynligheder og få det ønskede udtryk.

6) Giv en fortolkning af udtrykket for p_{02} .

••• **Opgave 6.2.5: Invalidemodellen med reaktivering**

I invalidemodellen med reaktivering betragter vi en udvidelse af invalidemodellen fra før, hvor man også kan gå fra invalidetilstanden til aktivtilstanden.



1) Opskriv intensitetsmatricen $\Lambda(t)$.

2) Det viser sig, at man ikke kan løse for $p(s, t)$ analytisk. Derfor må vi bruge numeriske metoder. Antag, at

$$\begin{aligned}\sigma(t) &= (0.0004 + 10^{4.54+0.06(t+x)-10})1_{\{t+x \leq 65\}}, \\ \mu(t) &= 0.0005 + 10^{5.88+0.038(t+x)-10}, \\ \nu(t) &= \mu(t)(1 + 1_{\{t+x \leq 65\}}), \\ \rho(t) &= (2.0058e^{-0.117(t+x)})1_{\{t+x \leq 65\}}.\end{aligned}$$

Vi antager, at $x = 40$ er alderen for forsikringstager ved kontraktens begyndelse, $t = 0$. Vi antager en maksimal kontraktid på $T = 120$.

Implementér $\Lambda(t)$ og beregn $p(40, t)$ for $t \in [40, 120]$ ved at bruge din produktintegraphålløser fra tidligere.

3) Lav et plot af overgangssandsynlighederne $p_{00}(40, t)$, $p_{01}(40, t)$ og $p_{02}(40, t)$ i én graf. Kommentér på, hvad du ser.

Ekstraopgaver

••• **Opgave 6.2.6: Intensiteter**

Lad T være en positiv kontinuert stokastisk variabel med tæthed f og fordelingsfunktion F . Vi antager, at T er levetiden for en person. Hvis $x > 0$ er personens alder til tid 0, lader vi T_x betegne T betinget på begivenheden $T > x$. T_x kaldes *restlevetiden*. Fordelingsfunktionen for T_x er givet ved

$$F_x(t) = \mathbb{P}(T \leq t + x \mid T > x).$$

1) Definér $\bar{F} = 1 - F$ og $\bar{F}_x = 1 - F_x$. Bevis, at

$$\bar{F}_x(t) = \frac{\bar{F}(x+t)}{\bar{F}(x)},$$

og at

$$F_x(t) = \frac{F(x+t) - F(x)}{\bar{F}(x)}.$$

for $t \geq 0$.

2) Definér for $t \geq 0$

$$f_x(t) = \frac{f(t+x)}{\bar{F}(x)}.$$

Bevis, at

$$F_x(t) = \int_0^t f_x(s)ds.$$

Vink: Det kan være smart at skrive højresiden ud og bruge forrige opgave.

Definér *dødelighedsraten/dødelighedsintensiteten* μ ved

$$\mu(t) = \lim_{h \rightarrow 0^+} F_x(h).$$

3) Giv en fortolkning af $\mu(t)$. Hvordan kan man tænke på $\mu(t)dt$?

4) Bevis, at

$$\mu(x) = f_x(0) = \frac{f(x)}{\bar{F}(x)} = -\frac{d}{dx} \log(\bar{F}(x)).$$

5) Bevis, at

$$\bar{F}(t) = e^{- \int_0^t \mu(s)ds}.$$

6) Bevis, at

$$\bar{F}_x(t) = e^{- \int_x^{x+t} \mu(s)ds}.$$

7) Sammenlign resultaterne i denne opgave med Opgave 6.2.3 og forklar, hvorfor de to modeller er ens.

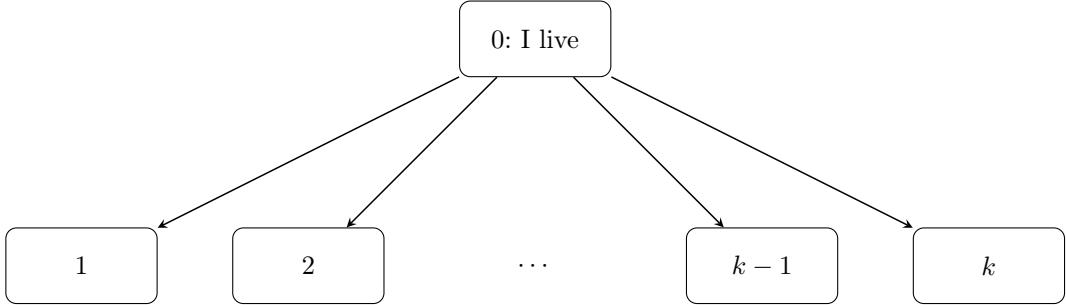
I det følgende betragter vi en række konkrete eksempler.

8) Lad T være eksponentialfordelt med parameter $\lambda > 0$. Vis, at $\mu(t) = \lambda$. Antag omvendt, at T opfylder, at $\mu(t) = \lambda > 0$. Vis, at T er eksponentialfordelt med parameter λ .

9) Antag, at T er en variabel med dødelighedsrate $\mu(t) = \alpha + \beta e^{\gamma t}$. Sådan en variabel kaldes *Gompertz-Makeham*-fordelt. Bestem F og F_x .

••• Opgave 6.2.7: Competing risks-modellen

I denne opgave betragter vi en udvidelse af liv-død-modellen, hvor man kan dø af flere årsager, specifikt k forskellige årsager. Modellen kan illustreres således.



Modellen kaldes for *competing risks-modellen* eller *k causes of death-modellen*. Lad μ^i betegne intensiteten for død ved årsag i . Definér $\mu^\bullet := \mu^1 + \dots + \mu^k$.

- 1) Opstil intensitetsmatricen Λ for modellen.
- 2) Vis ved hjælp af Kolmogorovs differentialaligninger, at overgangssandsynlighederne er givet ved

$$p_{00}(s, t) = e^{-\int_s^t \mu^\bullet(u) du}$$

og

$$p_{0i}(s, t) = \int_s^t e^{-\int_s^u \mu^\bullet(y) dy} \mu^i(u) du.$$

- 3) Giv en fortolkning af ovenstående overgangssandsynligheder.
- 4) Vis, at sandsynligheden for at dø i tidsrummet $[0, t]$ er

$$\int_0^t e^{-\int_0^u \mu^\bullet(y) dy} \mu^\bullet(u) du.$$

- 5) Antag, at personen dør i tidsrummet $[0, t]$. Hvad er sandsynligheden for, at dødsårsagen var i ?

Antag, at vi har $k = 2$ dødsårsager. Den første årsag er ulykke, og vi sætter intensiteten til at være konstant på tværs af alder, $\mu^1(t) = \alpha$. Den anden årsag er alle andre årsager, hvor alderen spiller en rolle. Her bruger vi intensiteten

$$\mu^2(t) = \beta e^{\gamma t},$$

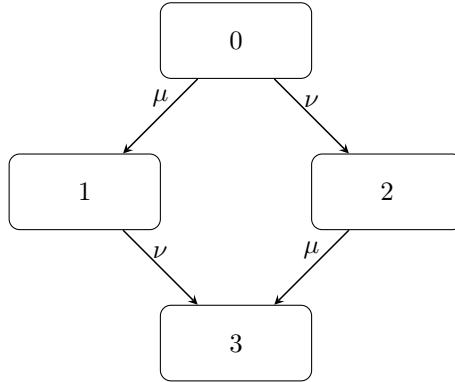
hvor $\beta, \gamma > 0$.

- 6) Antag, at personen dør i tidsrummet $[0, t]$. Vis, at sandsynligheden for, at dette skyldes en ulykke er givet ved

$$\left(1 + \frac{\beta}{\alpha} \frac{\int_0^t e^{-\int_0^u \mu^\bullet(y) dy} e^{\gamma u} du}{\int_0^t e^{-\int_0^u \mu^\bullet(y) dy} du} \right)^{-1}.$$

••• **Opgave 6.2.8: Ægtefællemodellen**

I denne opgave betragter vi *aegtefællemodellen*, som kan illustreres ved



- 1) Giv en fortolkning af de forskellige tilstande i modellen.

Målet er at beregne overgangssandsynhederne $p(s, t)$ for $t \geq s$. Dette er muligt med lidt knofedt. Tricket er at benytte Van Loan mange gange. Vi starter med at opskrive intensitetsmatricen

$$\Lambda(t) = \begin{pmatrix} -\mu(t) - \nu(t) & \mu(t) & \nu(t) & 0 \\ 0 & -\nu(t) & 0 & \nu(t) \\ 0 & 0 & -\mu(t) & \mu(t) \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Vi opdeler intensitetsmatricen i fire blokke af 2×2 -matricer og benytter Van Loan.

- 2) Beregn

$$\prod_s^t \left(I + \begin{pmatrix} -\mu(x) & \mu(x) \\ 0 & 0 \end{pmatrix} dx \right).$$

Vink: Du kan bruge Van Loan igen. Alternativt, brug ren logik kombineret med Proposition 6.2.6.

- 3) Beregn

$$\prod_s^t \left(I + \begin{pmatrix} -\mu(x) - \nu(x) & \mu(x) \\ 0 & -\nu(x) \end{pmatrix} dx \right).$$

Vink: Brug Van Loan!

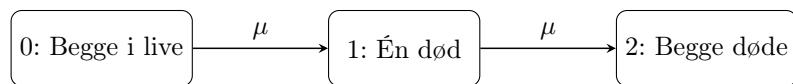
- 4) Brug Van Loan til at vise, at 2×2 -matricen øverst til højre er givet ved

$$\begin{pmatrix} (1 - e^{-\int_s^t \nu(u)du} e^{-\int_s^t \mu(u)du}) & \int_s^t \nu(u)(1 - e^{-\int_u^t \mu(v)dv}) e^{-\int_s^u \mu(v)+\nu(v)dv} + \int_s^u e^{-\int_s^v \mu(x)+\nu(x)dx} \mu(v) e^{-\int_v^u \nu(x)dx} dv du \\ 0 & 1 - e^{-\int_s^t \nu(u)du} \end{pmatrix}$$

- 5) Saml resultaterne og skriv $p(s, t)$ op (hvis I har plads på papiret...)

••• **Opgave 6.2.9: Reduceret ægtefællemodel**

Hvis begge ægtefæller har samme køn, kan ovenstående model reduceres, idet deres dødeligheder kan antages at være ens (såfremt deres alder er ens, hvilket vi antager for simpelhedens skyld). Modellen kan illustreres således.



- 1) Opskriv intensitetsmatricen Λ for modellen.

KAPITEL 6. PRODUKTINTEGRALET, MARKOVKÆDER OG PENSION

2) Vis, ved en kombination af Proposition 6.2.6 og Van Loan, at matricen af overgangssandsynligheder er givet ved

$$p(s, t) = \begin{pmatrix} e^{-\int_s^t \mu(u)du} & e^{-\int_s^t \mu(v)dv} \int_s^t \mu(u)du & \int_s^t e^{-\int_s^u \mu(v)dv} \mu(u)(1 - e^{-\int_u^t \mu(v)dv})du \\ 0 & e^{-\int_s^t \mu(v)dv} & 1 - e^{-\int_s^t \mu(v)dv} \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

6.3 Anvendelser i livsforsikring og pension

Vi har nu en forståelse for Markovkæder og matematikken bag dem. Vi skal nu se, hvordan disse redskaber kan bruges i en livsforsikringskontekst.

Betalingsstrømme

I livsforsikring benytter vi en Der er essentielt set to komponenter i en livsforsikringsmodel. Disse er følgende.

1. En model for den forsikredes tilstand til alle tidspunkter. I dette forløb modelleres dette med en Markovkæde Z med tilstandsrum $E = \{0, 1, \dots, p\}$. Eksempler på tilstande kunne være aktiv, invalid, pensioneret, død osv.
2. En model for betalingerne i kontrakten.

Første punkt har vi allerede dækket. Ift. andet punkt, så antager vi, at betalingerne er på formen

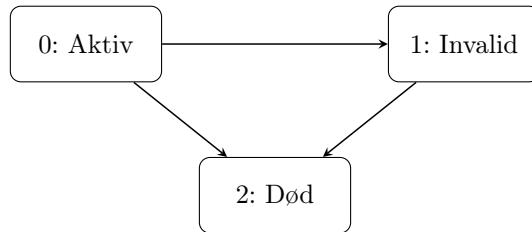
$$dB(t) = \sum_{i \in E} \left(1_{\{Z_{t-}=i\}} b_i(t) dt + \sum_{j \in E, j \neq i} b_{ij}(t) dN_{ij}(t) \right).$$

Husk, at $1_{\{Z_{t-}=i\}}$ er en indikatorfunktion. Denne er 1, netop når $Z_{t-} = i$ og 0 ellers. $t-$ betyder grænseværdien fra venstre, hvilket I kan tænke på som lige før tid t . b_i er en kontinuert (løbende) betaling i tilstand i , mens b_{ij} er en betaling ved spring fra tilstand i til j . $N_{ij}(t)$ er antallet af spring fra tilstand i til j i tidsrummet $[0, t]$, og $dN_{ij}(t)$ er 1, hvis der sker et spring fra i til j på tidspunkt t og 0 ellers. Rent formelt er ovenstående udtryk notation for

$$B(t) = \sum_{i \in E} \left(\int_0^t 1_{\{Z_s=i\}} b_i(s) ds + \sum_{j \in E, j \neq i} \int_0^t b_{ij}(s) dN_{ij}(s) \right).$$

Vi foretrækker blot at skrive uden integraltegn, da det også har en mere klar betydning. Vi benytter konventionen, at *præmier* (dvs. betalinger fra forsikrede til selskabet) er negative, mens *ydelser* (dvs. betalinger fra selskabet til forsikrede) er positive.

Eksempel 6.3.1. Betragt invalidemodellen uden reaktivering.



Vi har følgende kontrakt: I aktivtilstanden betaler forsikrede den løbende præmie $\pi(t)$, mens forsikrede modtager ydelsen $b(t)$ som invalid. Ved overgang til død fra aktivtilstanden betales et beløb på S (en dødsfaldssum). I notationen ovenover har vi altså

$$b_0(t) = \pi(t), \quad b_1(t) = b(t), \quad b_{02}(t) = S$$

og alle andre betalinger lig 0. Betalingsstrømmen bliver da

$$dB(t) = 1_{\{Z_{t-}=0\}} \pi(t) + 1_{\{Z_{t-}=1\}} b(t) + S dN_{02}(t).$$

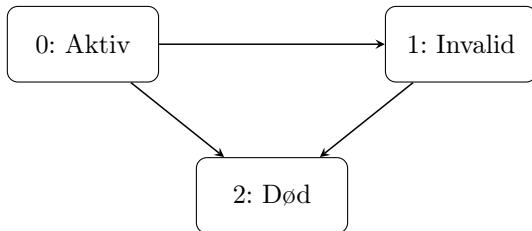
○

- **Opgave 6.3.1:**
Betrægt liv-død-modellen



Vi har følgende kontrakt: Så længe forsikrede er i live, betales præmien $\pi(t)$ til selskabet. Ved død udbetales éngangsbeløbet S til forsikredes arvinger. Opskriv betalingsstrømmen B for kontrakten.

- **Opgave 6.3.2:**
Betrægt atter invalidemodellen (uden reaktivering):



Vi har følgende kontrakt: Indtil tid m betaler forsikrede præmien $\pi(t)$, så længe forsikrede er aktiv. Fra tid m og frem får forsikrede pension $p(t)$ (både som aktiv og invalid).

- 1) Hvad er betalingsstrømmen B ? Vink: Hvis en betaling kun løber indtil et bestemt tidspunkt, kan man bruge indikatorfunktioner, f.eks. $1_{\{t \leq m\}}$.
- 2) Vi udvider nu kontrakten, så forsikrede også modtager invalideydelsen $b(t)$ indtil tid m (hvorefter forsikrede jo får pension). Hvordan ser betalingsstrømmen nu ud?
- 3) Antag yderligere, at forsikrede får udbetalt S ved overgang til død som aktiv og $S/2$ ved overgang til død som invalid. Opskriv betalingsstrømmen.

Reserver og ækvivalensprincippet

Den vigtigste opgave for aktuaren i en pensionskasse er at bestemme, hvor meget der skal sættes til side for at sikre, at selskabet kan opfylde sine forpligtelser overfor kunden. Dette beløb kaldes en *reserve* og er givet som den *forventede værdi af de akkumulerede diskonterede fremtidige betalinger*. For at definere størrelsen matematisk, skal vi have en *rente* på plads. Vi arbejder her med en kontinuert og deterministisk (ikke-stokastisk) rente r . Hvis i dag er tid t , og s er et fremtidigt tidspunkt, $s > t$, da er værdien af 1 krone til tid s i dag givet ved

$$e^{-\int_t^s r(u)du}.$$

Det ses, at hvis renten er positiv, da er denne størrelse, kaldet *diskonteringsfaktoren* fra tid t til s , mindre end 1. Den inverse størrelse,

$$e^{\int_t^s r(u)du},$$

kaldet *akkumuleringsfaktoren*, er værdien af 1 krone i dag (tid t) målt i kronens værdi til tidspunkt $s > t$. Idet en pension forløber over flere årtier, er tidsværdien af penge nødvendigt at have med i alle beregninger. Husk, at informationen til rådighed i $[0, t]$ er givet ved \mathcal{F}_t .

Definition 6.3.2. Lad B være en betalingsstrøm og $T > 0$ et udløbstidspunkt for kontrakten¹. Da definerer vi *reserven* til tid t ved

$$V(t) = \mathbb{E} \left[\int_t^T e^{-\int_t^s r(u)du} dB(s) \mid \mathcal{F}_t \right].$$

- **Opgave 6.3.3:**

Hvis, at når Z er Markov, da gælder

$$V(t) = \mathbb{E} \left[\int_t^T e^{-\int_t^s r(u)du} dB(s) \mid Z_t \right],$$

ved at benytte Proposition 6.2.3.

Vi antager i dette forløb altid, at Z er Markov². Et nøgleværktøj til at beregne reserven

$$V_i(t) = \mathbb{E} \left[\int_t^T e^{-\int_t^s r(u)du} dB(s) \mid Z_t = i \right]$$

er *Thieles differentialligninger*.

Definition 6.3.3. Størrelsen

$$\text{RS}_{ij}(t) = V_j(t) - V_i(t) + b_{ij}(t)$$

kaldes *risikosummen* for overgangen fra tilstand i til j til tid t .

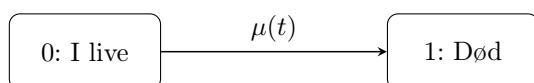
Sætning 6.3.4 (Thieles differentialligninger for en Markovmodel). Lad Z være en Markovkæde og B en betalingsstrøm. Da gælder Thieles differentialligninger³:

$$\frac{d}{dt} V_i(t) = r(t)V_i(t) - b_i(t) - \sum_{j \in E, j \neq i} \mu_{ij}(t) \text{RS}_{ij}(t), \quad V_i(T) = 0.$$

Fortolkningen af Thieleligningerne er som følger. Ændringen i reserven til tid t består i en rentetilvækst (leddet $r(t)V_i(t)$), løbende betalinger ind og ud af selskabet ($b_i(t)$) samt sandsynlighedsvægtede risikosummer. Husk, at $\mu_{ij}(t)dt$ er sandsynligheden for at springe fra i til j i det infinitesimale tidsrum $[t, t + dt]$. Hvis sådan et spring finder sted, skal vi opsætte den nye reserve $V_j(t)$, indkassere den gamle ($-V_i(t)$) og udbetale $b_{ij}(t)$, hvilket forklarer formen på $\text{RS}_{ij}(t)$.

- • **Opgave 6.3.4:**

Betrægt atter liv-død-modellen:



Betrægt følgende kontrakt: Indtil tid m betaler policetager præmien $\pi(t)$. Efter tid m modtager policetageren pension $b(t)$ indtil død. På dødsfaldstidspunktet udbetales en dødsfaldssum S fra selskabet.

1) Opskriv Thieles differentialligning for både tilstand 0 og 1.

2) Vis, at $V_1(t) = 0$. Hvorfor giver dette mening intuitivt?

¹Det er typisk at antage en maksimal levetid på 120 år. Så hvis policetager er x år gammel ved kontrakts begyndelse, vil $T = 120 - x$ være en naturlig øvre grænse for kontraktsens længde.

²I industrien er den gyldne standard i disse år at bruge en mere generel springproces kaldet en *semi-Markovproces*.

³Efter den danske statistiker, aktuar, matematiker og professor i astronomi Thorvald Nicolai Thiele (1838 - 1910).

- 3) Vis, ved at løse Thieles differentialligning for V_0 , at

$$V_0(t) = \int_t^T e^{-\int_t^s \mu(v)+r(v)dv} (b(s) + \mu(s)S) ds$$

når $t > m$ og

$$\begin{aligned} V_0(t) &= \int_t^m e^{-\int_t^s \mu(v)+r(v)dv} (\mu(s)S - \pi(s)) ds \\ &\quad + \int_m^T e^{-\int_t^s \mu(v)+r(v)dv} (b(s) + \mu(s)S) ds \end{aligned}$$

for $t \leq m$. Vink: Del op i de to tilfælde $t > m$ og $t \leq m$ og benyt panserformlen, Sætning 3.3.5.

- 4) Giv en udførlig intuitiv forklaring på udtrykkene for V_0 . Skitsér også V_0 .

Nu har vi fået lidt intuition for, hvad en reserve er, og hvordan den fortolkes. Spørsgsmålet er, hvordan størrelsen af præmien eller ydelerne skal fastlægges. Den typiske tilgang er gennem *ækvivalensprincippet*, som intuitivt siger, at ingen vinder på kontrakten.

Definition 6.3.5. *Ækvivalensprincippet* siger, at

$$V(0-) := V(0) + b_0 = 0,$$

hvor b_0 er en eventuel betaling ved kontraktens begyndelse.

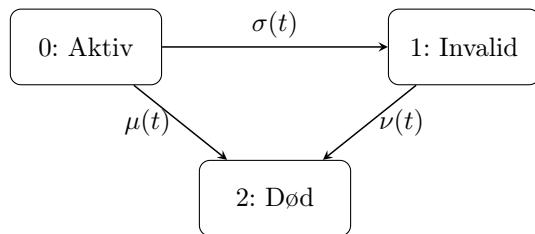
Ækvivalensprincippet bruges på én af to måder. Typisk er ydelerne fastlagt (f.eks. kunne forsikringstager ønske sig 400.000 kr. om året i pension), og så fastlægges præmien herudfra. I det tilfælde kaldes præmien, som medfører $V(0-) = 0$ for *ækvivalenspræmien*. I det modsatte tilfælde kan man tale om *ækvivalensydeler*.

- **Opgave 6.3.5:**

Denne opgave er en fortsættelse på Opgave 6.3.4. Vi antager, at vi starter i tilstand 0, så $V(0) = V_0(0)$. Antag, at præmien skal være konstant. Bestem *ækvivalenspræmien* for $t < m$.

- **Opgave 6.3.6:**

Betrægt nu invalidmodellen uden reaktivering:



Antag følgende kontrakt: I aktivtilstanden betales præmie $\pi(t)$. I invalidtilstanden udbetales en ydelse på $b(t)$. Ved overgang fra aktiv til død udbetales S_0 , mens der ved overgang fra invalid til død udbetales S_1 .

- 1) Opskriv Thieles differentialligninger for alle tre tilstade.
- 2) Argumentér igen for, at $V_2(t) = 0$.
- 3) Vis, ved at løse Thieles differentialligning, at

$$V_1(t) = \int_t^T e^{-\int_t^s r(v)+\nu(v)dv} (b(s) + \nu(s)S_2) ds.$$

- 4) Giv en fortolkning af ovenstående udtryk.
- 5) Løs Thieles differentialligning for V_0 . Udtrykket kommer til at afhænge af V_1 , og det kan anbefales ikke at skrive V_1 ud.
- 6) Kan du give en fortolkning af dit udtryk for V_0 ?
- 7) Opskriv et udtryk for ækvivalenspræmien π (vi antager en konstant præmie).
- 8) Lad os gøre kontrakten konkret. Antag, at policetager er $x = 30$ år ved kontraktens begyndelse. Lad

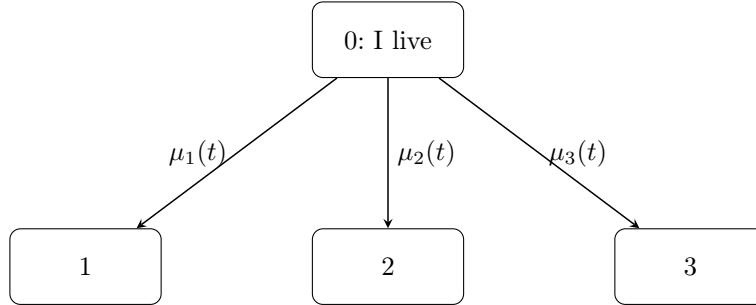
$$\begin{aligned}\mu(t) &= 0.0005 + 10^{5.88+0.038(t+x)-10}, \\ \sigma(t) &= (0.0004 + 10^{4.54+0.06(t+x)-10})1_{\{t+x \leq 65\}}, \\ \nu(t) &= \mu(t)(1 + 1_{\{t+x \leq 65\}}).\end{aligned}$$

Antag derudover, at $b(t) = 400.000$, $S_0 = 1.000.000$ og $S_1 = 800.000$. Brug enten Thieles differentialligning eller ovenstående integraludtryk til at implementere $V_1(t)$ for $t \in [0, T]$, f.eks. i Python. Antag kontraktudløb ved $T = 90$, svarende til en maksimal alder på 120 år.

- 9) Brug nu Thieles differentialligning eller dit fundne udtryk for V_0 til at implementere $V_0(t)$ for $t \in [0, T]$.
- 10) Lav et plot af V_0 og V_1 over perioden $[0, T]$ i samme plot. Opfører de to reserver sig som forventet? Kommentér.

••• Opgave 6.3.7:

Betræt competing risks-modellen med tre dødsårsager:



Antag, at et forsikringsselskab udbyder en samlet forsikring for alle tre dødsårsager. Så længe forsikringstager er i live, betales π (konstant) løbende. Derudover betaler forsikringstager b_0 ved kontraktens begyndelse. Ved dødsfald grundet årsag 1 (naturlig død), betales S_1 til arvingerne. Ved dødsfald grundet årsag 2 (ulykke) betales S_2 , og ved årsag 3 (kritisk sygdom) betales S_3 .

- 1) Overbevis dig selv om, at $V_1(t) = V_2(t) = V_3(t) = 0$.
- 2) Opskriv Thieles differentialligning for tilstand 0.
- 3) Lad $\mu^\bullet(t) = \mu_1(t) + \mu_2(t) + \mu_3(t)$. Vis, at

$$V_0(t) = \int_t^T e^{-\int_t^s \mu^\bullet(u)du} (\mu_1(s)S_1 + \mu_2(s)S_2 + \mu_3(s)S_3 - \pi(s))ds.$$

- 4) Giv en fortolkning af dette udtryk.
- 5) Antag, at π er konstant. Bestem ækvivalenspræmien. Husk, at $b_0 \neq 0$.
- 6) Hvis $S_1 = S_2 = S_3 = S$, hvordan kan udtrykket for V_0 så simplificeres? Kunne man i dette tilfælde nøjes med at betragte en simpelere model? Vær så præcis som muligt i din argumentation.

•• **Opgave 6.3.8: Bonus:** Hvis $V(T) \neq 0$

Vi har i alle ovenstående opgaver antaget, at $V(T) = 0$. Men i principippet kan man sagtens indarbejde en betaling ved udløb. Da antager man blot $V(T) = S_T$ for en sum S_T . Vi illustrerer med liv-død-modellen med dødelighed μ . Antag, at forsikrede indtil tid m betaler præmien $\pi(t)$ og modtager pension $p(t)$ efter tid m . Ved død udbetales dødsfaldssummen S , og ved kontraktens udløb udbetales S_T .

- 1) Naturligvis er $V_1(t) = 0$. Opskriv Thieles differentialligning for V_0 .
- 2) Løs for V_0 med panserformlen.
- 3) Sammenlign dit resultat med det fra Opgave 6.3.4.

Forventede cash flows

Som I fandt ud af i forrige afsnit, så skal man i implementeringen af Thieles differentialligning regne baglæns. Man starter ved sluttidspunktet T og regner tilbage til tid 0. Derfor kaldes metoden for en *baglæns metode* (på engelsk: *backward method*). Fordelen er, at vi får værdien af reserven $V_i(t)$ på alle tidspunkter $t \in [0, T]$. Ulempen er, at vi skal regne alle værdierne $V_i(t)$ igen, hvis vi vil ændre på renten r . Vi præsenterer nu en *forlæns metode* (på engelsk: *backward method*), der kan bruges til at beregne reserven på ét bestemt tidspunkt, men hvor det er nemt at variere på renten og dermed undersøge reservens *rentesensitivitet*, dvs. hvor meget reserven påvirkes af ændringer i renten. Dette er uvurderligt for risikostyringen for et pensionsselskab, da renten også indeholder information om afkast fra det finansielle marked.

Proposition 6.3.6. *Lad Z være en Markovkæde og B en betalingsstrøm med tilhørende reserve V . Da har vi*

$$V_i(t) = \int_t^T e^{-\int_t^s r(u)du} a_i(t, s) ds,$$

hvor

$$a_i(t, s) = \sum_{j \in E} p_{ij}(t, s) \left(b_j(s) + \sum_{k \in E, k \neq j} b_{jk}(s) \mu_{jk}(s) \right).$$

Bevis. Husk, at

$$dB(s) = \sum_{j \in E} \left(1_{\{Z_{s-}=j\}} b_j(s) ds + \sum_{k \in E, k \neq j} b_{jk}(s) dN_{jk}(s) \right).$$

Vi indsætter i definitionen af reserven og ombytter middelværdi og integralet, hvor vi husker, at r er antaget at være deterministisk:

$$\begin{aligned} V_i(t) &= \mathbb{E} \left[\int_t^T e^{-\int_t^s r(u)du} dB(s) \mid Z_t = i \right] \\ &= \int_t^T e^{-\int_t^s r(u)du} \sum_{j \in E} \left(b_j(s) \mathbb{E}[1_{\{Z_{s-}=j\}} \mid Z_t = i] ds + \sum_{k \in E, k \neq j} b_{jk}(s) \mathbb{E}[dN_{jk}(s) \mid Z_t = i] \right). \end{aligned}$$

Her er også brugt, at betalingsfunktionerne er deterministiske. Se på første led i den ydre sum. Idet vi integrerer mht. ds , og Z kun laver tælleligt mange spring, kan vi erstatte $s-$ med s og få

$$\mathbb{E}[1_{\{Z_{s-}=j\}} \mid Z_t = i] ds = \mathbb{P}(Z_s = j \mid Z_t = i) = p_{ij}(t, s).$$

Man kan yderligere vise⁴, at

$$\mathbb{E}[dN_{jk}(s) \mid Z_t = i] = \mathbb{E}[1_{\{Z_{s-}=j\}} \mu_{jk}(s) ds \mid Z_t = i].$$

⁴Dette bygger på meget dyb teori indenfor feltet *stokastisk kalkulus*.

6.3. ANVENDELSE I LIVSFORSIKRING OG PENSION

Intensiteterne μ_{jk} er antaget at være deterministiske, og dermed har vi

$$\mathbb{E}[dN_{jk}(s) \mid Z_t = i] = p_{ij}(t, s)\mu_{jk}(s)ds.$$

Altså bliver reserven

$$\begin{aligned} V_i(t) &= \int_t^T e^{-\int_t^s r(u)du} \sum_{j \in E} \left(b_j(s)p_{ij}(t, s)ds + \sum_{k \in E, k \neq j} b_{jk}(s)p_{ij}(t, s)\mu_{jk}(s)ds \right) \\ &= \int_t^T e^{-\int_t^s r(u)du} \sum_{j \in E} p_{ij}(t, s) \left(b_j(s) + \sum_{k \in E, k \neq j} b_{jk}(s)\mu_{jk}(s) \right) ds \\ &= \int_t^T e^{-\int_t^s r(u)du} a_i(t, s)ds. \end{aligned}$$

■

Bemærkning 6.3.7. Ovenstående bevis bygger på en masse matematik, vi ikke har talt om. Det forventes ikke, at I forstår teorien bag eller beregningerne. Beviset er udelukkende taget med, så resultatet ikke fremkommer helt af den blå luft og for at illustrere, at teorien bag livsforsikring stikker ganske dybt.

Vi ser, at vi blot skal beregne $a_i(t, s)$ én gang. Derefter kan vi lade r variere og dermed lave undersøgelser af rentens påvirkning af renten. Størrelsen $a_i(t, \cdot)$ er vigtig nok til at få sit eget navn.

Definition 6.3.8. Størrelsen $a_i(t, \cdot)$ kaldes det *forventede cash flow* til tid t for tilstand i eller blot *cash flowet*.

•• **Opgave 6.3.9:**

Betrægt modellen i Opgave 6.3.4.

- 1) Opskriv a_0 . Husk at dele op i tilfælde alt efter $t \leq m$ eller $t > m$.
- 2) Fortolk på a_0 . Lav en skitse af a_0 .
- 3) Opskriv reserven V_0 ved at bruge a_0 . Check at resultatet stemmer med det fra Opgave 6.3.4.

Lad os gøre kontrakten konkret. Antag, at pensionsalderen er $m = 65$, startalderen for den forsikrede er $x = 30$, $T = 120$ og

$$\begin{aligned} \mu(t) &= 0.0005 + 10^{5.88+0.038(t+x)-10}, \\ b(t) &= 400.000, \quad S = 1.000.000, \quad r = 0.01, \end{aligned}$$

og hvor π er konstant og fastlagt gennem ækvivalenspræmien.

- 4) Udregn ækvivalenspræmien π . Husk, at denne er udregnet i Opgave 6.3.4 5).
- 5) Implementér $a_0(30, s)$ for $s \in [30, T]$. Lav et plot og fortolk på grafen.
- 6) Nu kan reserven beregnes for forskellige rentekurver via

$$V_0(t) = \int_t^T e^{-\int_t^s r(u)du} a_0(t, s)ds.$$

Udregn og plot V_0 for $r \in \{0.01, 0.015, 0.02, 0.025, 0.03, 0.04\}$. Forklar opførslen af reserven.

••• **Opgave 6.3.10:**

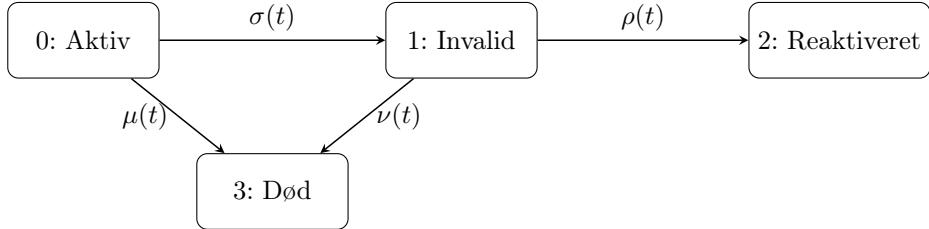
Betrægt modellen fra Opgave 6.3.6 delopgave 1) - 6).

- 1) Opskriv cash flowet a_0 og a_1 . Du kan bruge resultaterne fra Opgave 6.2.4 ift. overgangssandsynlighederne.

- 2) Brug a_1 til at bestemme V_1 . Check at resultatet stemmer med det i Opgave 6.3.6 3).
- 3) Prøv at benytte a_0 til at bestemme V_0 . Det kan være udfordrende at få udtrykkene til at passe!

••• **Opgave 6.3.11: Dækning af første invalidehændelse**

I denne opgave betragter vi en model for tab af erhvervsevne-forsikring. Modellen ser således ud:



Kontrakten er specifieret på følgende måde: Så længe forsikrede er aktiv (dvs. kun i tilstand 0) betales løbende præmie π (konstant). I invaliditetstanden udbetales b . Begge betalinger antages konstante.

- 1) Opskriv intensitetsmatricen $\Lambda(t)$.
- 2) Hvilke overgangssandsynligheder skal vi kende for at kunne beregne $a_0(t, s)$ og $a_1(t, s)$ for $s \in [t, T]$?
- 3) Beregn overgangssandsynlighederne fra forrige delopgave konkret. Vis herudfra, at

$$a_0(t, s) = -\pi e^{-\int_t^s \sigma(u) + \mu(u) du} + b \int_t^s e^{-\int_t^u \sigma(v) + \mu(v) dv} \sigma(u) e^{-\int_u^s \rho(v) + \nu(v) dv} du,$$

$$a_1(t, s) = b e^{-\int_t^s \rho(v) + \nu(v) dv}.$$

- 4) Brug udtrykket for $a_1(t, s)$ til at bestemme $V_1(t)$.

- 5) Vis nu, at

$$V_0(t) = \int_t^T e^{-\int_t^s r(v) + \sigma(v) + \mu(v) dv} (\sigma(u) V_1(u) - \pi) du.$$

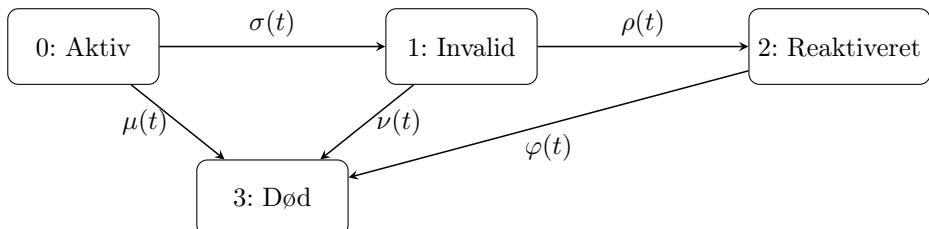
Vink: Start med at bruge cash flow-udtrykket for reserven. Byt derefter rundt på integrationsrækkefølgen. Denne opgave kan godt være udfordrende!

- 6) Giv en intuitiv forklaring af udtrykket for V_0 .
- 7) Bestem ækvivalenspræmien.

Følgende opgave er en udvidelse af forrige og er nok en af de mest komplekse eksempler på en model, hvor vi kan regne alting eksplisit i hånden. Den bør betragtes som en ekstraopgave for dem, der godt kan lide håndberegning.

•••• **Opgave 6.3.12: Invalidemodellen med netop én reaktivering**

I denne opgave betragter vi en model, hvor det kun er muligt at blive reaktivert én gang. Modellen er næsten identisk med den i forrige opgave.



6.3. ANVENDELSE I LIVSFORSIKRING OG PENSION

Vi vil i første omgang beregne matricen af overgangssandsynligheder.

- 1) Overbevis jer om, at intensitetsmatricen er givet ved

$$\Lambda(t) = \begin{pmatrix} -\mu(t) - \sigma(t) & \sigma(t) & 0 & \mu(t) \\ 0 & -\rho(t) - \nu(t) & \rho(t) & \nu(t) \\ 0 & 0 & -\varphi(t) & \varphi(t) \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

- 2) Lad $s \geq t$: Definér nu

$$A(x) = \begin{pmatrix} -\mu(x) - \sigma(x) & \sigma(x) \\ 0 & -\rho(x) - \nu(x) \end{pmatrix} \quad \text{og} \quad C(x) = \begin{pmatrix} -\varphi(x) & \varphi(x) \\ 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Beregn

$$\prod_t^s (I + C(x)dx).$$

- 3) Vis, at

$$\prod_t^s (I + A(x)dx) = \begin{pmatrix} e^{-\int_t^s \mu(u)+\sigma(u)du} & \int_t^s e^{-\int_t^u \mu(v)+\sigma(v)dv} \sigma(u) e^{-\int_u^s \rho(v)+\nu(v)dv} du \\ 0 & e^{-\int_t^s \rho(v)+\nu(v)dv} \end{pmatrix}.$$

Vink: Van Loan!

- 4) Vis, at $p(t, s)$ har formen

$$p(t, s) = \begin{pmatrix} e^{-\int_t^s \mu(u)+\sigma(u)du} & \int_t^s e^{-\int_t^u \mu(v)+\sigma(v)dv} \sigma(u) e^{-\int_u^s \rho(v)+\nu(v)dv} du & p_{02}(t, s) & p_{03}(t, s) \\ 0 & e^{-\int_t^s \rho(u)+\nu(u)du} & p_{12}(t, s) & p_{13}(t, s) \\ 0 & 0 & e^{-\int_t^s \varphi(u)du} & 1 - e^{-\int_t^s \varphi(u)du} \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Vink: Brug Van Loan kombineret med de forrige opgaver. Alternativt kan man lave et argument baseret udelukkende på sandsynlighedsteori og intuition. I kan prøve begge metoder.

- 5) Udled et udtryk for $p_{02}(t, s)$.

- 6) [Bonus] Udled udtryk for de resterende overgangssandsynligheder.

Betrægt nu følgende kontrakt: I aktivtilstanden og reaktiveringstilstanden betales den løbende præmie $\pi(t)$. I invalidetilstanden udbetales invaliderenten $b(t)$. Ved overgang til død fra enten aktivtilstanden eller reaktiveringstilstanden udbetales S som éngangsbeløb.

- 7) Vis, at Thieles differentialligning for tilstand 0 er givet ved

$$\frac{d}{dt} V_0(t) = r(t)V_0(t) + \pi(t) - \mu(t)(S - V_0(t)) - \sigma(t)(V_1(t) - V_0(t)), \quad V_0(T) = 0.$$

Løs denne differentialligning for at opnå et udtryk for $V_0(t)$. Dette udtryk vil naturligvis afhænge af $V_1(t)$.

- 8) Opskriv Thieles differentialligning for V_2 og løs for V_2 .

- 9) Opskriv Thieles differentialligning for V_1 og vis, at

$$V_1(t) = \int_t^T e^{-\int_t^s r(u)+\rho(u)+\nu(u)du} (b(s) + \rho(s)V_2(s)) ds.$$

Idet vi har et udtryk for V_2 , har vi også et eksplisit udtryk for V_1 og dermed også for V_0 . I resten af opgaven skal vi benytte forlænsmetoden i stedet.

10) Lad $s \geq t$. Vis, at

$$a_0(t, s) = p_{00}(t, s)(-\pi(s) + S\mu(s)) + p_{01}(t, s)b(s) + p_{02}(t, s)(-\pi(s) + S\nu(s)).$$

Vi har fundet udtryk for alle disse overgangssandsynligheder. Dermed er det muligt at udregne $V_0(t)$ med forlænsmetoden ved at indsætte det eksplizite udtryk for $a_0(t, s)$, og det vil give samme udtryk for $V_0(t)$, som I fandt før. Det er dog ikke forventet, at I gør dette.

Denne model kan betragtes som en approksimation af invalidmodellen med reaktivering, hvor det, som vi tidligere så, ikke er muligt at bestemme overgangssandsynlighederne (og dermed cash flowet) eksplizit.

Matrixmetoder i livsforsikring

Afslutningsvis skal vi se på nogle moderne metoder præsenteret i artiklen [9] omkring matrixmetoder i livsforsikring. Disse gør det nemt at implementere ovenstående modeller. Faktisk skal man kun bruge en produktintegralløser for at udregne reserver.

Vi har en Markovkæde Z givet på tilstandsrummet $E = \{1, \dots, p\}$ med intensitetsmatrix Λ . Vi betragter som tidlige betalinger på formen

$$dB(t) = \sum_{i \in E} \left(1_{\{Z_{t-} = i\}} b_i(t) dt + \sum_{j \in E, j \neq i} b_{ij}(t) dN_{ij}(t) \right).$$

Definér nu

$$b(t) = \begin{pmatrix} b_1(t) \\ \vdots \\ b_p(t) \end{pmatrix}, \quad B(t) = \{b_{ij}(t)\}_{i,j \in E}.$$

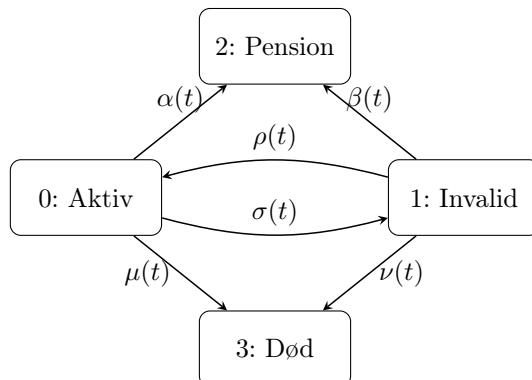
Vi ser, at $b(t)$ er de løbende betalinger samlet i en vektor, mens B er matricen af overgangsbetalinger. Lad $\Delta b(t)$ betegne diagonalmatricen med betalingerne $b(t)$ på diagonalen. Lad \bullet betegne indgangsvis multiplikation. Da definerer vi *ydelsesmatricen* (engelsk: *reward matrix*) ved

$$R(t) = \Lambda(t) \bullet B(t) + \Delta b(t).$$

Bemærkning 6.3.9. Vi betragter her en simpel udgave af matrixmetoderne. Det er f.eks. ikke svært at generalisere til situationer, hvor overgangsbetalinger kun sker med en bestemt sandsynlighed.

- **Opgave 6.3.13:**

Betræt følgende hypotetiske model:



6.3. ANVENDELSE I LIVSFORSIKRING OG PENSION

Vi har følgende kontrakt: I aktivtilstanden betales præmie $\pi(t)$, i invalidetilstanden udbetales en ydelse $b(t)$, og i pensionstilstanden betales $p(t)$. Ved overgang fra aktiv til invalid udbetales I , mens der ved overgang fra aktiv eller invalid til død udbetales S .

1) Opgiv intensitetsmatricen $\Lambda(t)$.

2) Opgiv $b(t)$ og $B(t)$.

3) Opgiv ydelsesmatricen $R(t)$.

Vi udvider nu reservebegrebet en smule og introducerer *partielle reserver*. Disse er givet ved

$$V_{ij}(s, t) = \mathbb{E} \left[1_{\{Z_t=j\}} \int_s^t e^{-\int_s^u r(x)dx} dB(u) \mid Z_s = i \right], \quad s \leq t.$$

Disse hænger sammen med de oprindelige reserver, vi har betragtet indtil nu, blot nedbrudt i mindre bidder, som næste opgave viser.

- **Opgave 6.3.14:**

Vis, at

$$V_i(t) = \sum_{j \in E} V_{ij}(t).$$

Vi definerer reserven af partielle reserver til

$$\mathbf{V}(s, t) = \{V_{ij}(s, t)\}_{i,j \in E}$$

Man kan herudfra vise følgende resultat.

Proposition 6.3.10. *Matricen af partielle reserver opfylder*

$$\mathbf{V}(s, t) = \int_s^t e^{-\int_s^u r(x)dx} p(s, u) R(u) p(u, t) du.$$

Dette resultat er ikke svært at fortolke på. Lad os for simpelhedens skyld fortolke på det én-dimensionelle tilfælde. For ethvert tidspunkt $u \in [s, t]$ overlever man fra s til u med sandsynlighed $p(s, u)$, modtager sin ydelse $R(u)du$ på tid u og overlever frem til tid t med sandsynlighed $p(u, t)$. Summér nu over alle tidspunkter u for at få ovenstående udtryk. Flere dimensioner har samme fortolkning, blot over et mere kompliceret livsforløb.

- **Opgave 6.3.15:**

Differentier efter s og brug Leibniz' regel (se Sætning 1.2.31 og det efterfølgende korollar) til at udlede en differentialligning for $\mathbf{V}(s, t)$ i tilfældet $r = 0$. Kan I også udlede en differentialligning i tilfældet $r \neq 0$?

Ved at bruge regneregler for produktintegralet (se især Proposition 6.1.10) har vi

$$\begin{aligned} \mathbf{V}(s, t) &= \int_s^t \prod_s^u (I + \Lambda(x)dx) e^{-\int_s^u r(x)dx} R(u) \prod_u^t (I + \Lambda(x)dx) du \\ &= \int_s^t \prod_s^u (I + (\Lambda(x) - r(x))dx) R(u) \prod_u^t (I + \Lambda(x)dx) du \end{aligned}$$

Dermed fås følgende centrale resultat.

Proposition 6.3.11. *Vi har*

$$\prod_s^t \begin{pmatrix} I + (\Lambda(x) - r(x)I) & R(x) \\ 0 & \Lambda(x) \end{pmatrix} dx = \begin{pmatrix} \prod_s^t (I + (\Lambda(x) - r(x)I)dx) & \mathbf{V}(s, t) \\ 0 & p(s, t) \end{pmatrix}$$

Bemærk, at vi ovenikøbet får matricen af overgangssandsynligheder helt gratis!

- **Opgave 6.3.16:**

Brug Van Loan til at bevise ovenstående proposition.

Definition 6.3.12. Hvis T er udløbstidstiden for kontrakten, da lader vi

$$\mathbf{V}(t) := \mathbf{V}(t, T)$$

betegne matricen af *prospektive partielle reserver* til tid t .

Lad os diskutere, hvordan man beregner ækvivalenspræmier eller ækvivalensydelser med matrixmetoder. Antag, at ydelsesmatricen R afhænger af parameteren θ , så vi skriver $R(t, \theta)$. Antag ydermere, at θ kun indgår i R . Et eksempel kunne være præmieraten i en tilstand (f.eks. aktivtilstanden) i b -vektoren eller en bestemt ydelse. Vi har da

$$\mathbf{V}(t, \theta) = \int_t^T \prod_t^u (I + (\Lambda(x) - r(x)I)dx) R(u, \theta) \prod_u^T (I + \Lambda(x)dx) du$$

på samme måde som før.

- **Opgave 6.3.17:**

I denne opgave fastlægger vi en beregningsmetode til at bestemme $\frac{\partial}{\partial \theta} \mathbf{V}(t, \theta)$.

1) Vis, at

$$\frac{\partial}{\partial \theta} \mathbf{V}(t, \theta) = \int_t^T \prod_t^u (I + (\Lambda(x) - r(x)I)dx) \frac{\partial}{\partial \theta} R(u, \theta) \prod_u^T (I + \Lambda(x)dx) du.$$

Vis, at

$$\prod_t^T \begin{pmatrix} I + \left(\begin{pmatrix} \Lambda(x) - r(x)I & \frac{\partial}{\partial \theta} R(x, \theta) \\ 0 & \Lambda(x) \end{pmatrix} dx \right) & \cdot \\ \cdot & \frac{\partial}{\partial \theta} \mathbf{V}(t, \theta) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cdots & \frac{\partial}{\partial \theta} \mathbf{V}(t, \theta) \\ 0 & p(t, T) \end{pmatrix}.$$

Med redskaber til at beregne både $\mathbf{V}(t, \theta)$ og $\mathbf{V}_\theta(t, \theta) := \frac{\partial}{\partial \theta} \mathbf{V}(t, \theta)$, kan beregningen af ækvivalenspræmien udføres således. Vi skal løse

$$e_i^T \mathbf{V}(0, \theta) e = 0,$$

hvor e_i er vektoren med 1 på i 's plads og nul alle andre steder, mens e er vektoren med 1 i alle indgange. Antag, at R er lineær i θ . Da vil $\mathbf{V}(t, \theta)$ også være lineær i θ (overvej). Dermed kan vi skrive

$$e_i^T \mathbf{V}(0, \theta) e = a\theta + b$$

for passende tal a og b .

- **Opgave 6.3.18:**

Vis, at

$$a = e_i^T \mathbf{V}(0, 0) e \quad \text{og} \quad b = e_i^T \mathbf{V}_\theta(0, 0) e,$$

6.3. ANVENDELSE I LIVSFORSIKRING OG PENSION

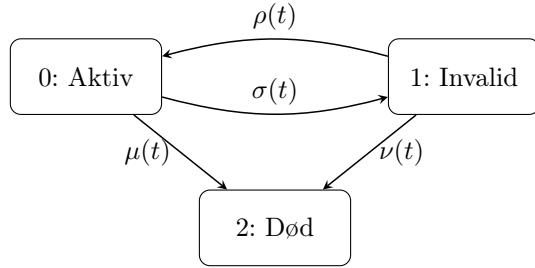
og konkludér, at ækvivalenspræmien (eller ydelsen) kan fastlægges ved

$$\theta = -\frac{b}{a} = -\frac{e_i^T \mathbf{V}(0,0)e}{e_i^T \mathbf{V}_\theta(0,0)e}. \quad (6.2)$$

Lad os bruge dette redskab i praksis!

••• **Opgave 6.3.19:**

Betrægt invalidemodellen med reaktivering.



Vi antager følgende intensiteter.

$$\begin{aligned}\sigma(t) &= (0.0004 + 10^{4.54+0.06(x+t)-10})1_{\{t+x \leq 65\}} \\ \rho(t) &= (2.0058e^{-0.117(t+x)})1_{\{t+x \leq 65\}} \\ \mu(t) &= 0.0005 + 10^{5.88+0.038(t+x)-10} \\ \nu(t) &= \mu(t)(1 + 1_{\{t+x \leq 65\}}).\end{aligned}$$

Antag, at policetager er $x = 40$ år gammel ved kontraktens begyndelse. Vores policetager køber en invalideforsikring med en årlig (dvs. løbende) udbetalning på 100,000 kr. indtil 65 år. Derefter udbetales pension indtil død på 100,000 kr. Renten sættes til $r = 0.01$ svarende til 1%. Den konstante præmie π betales løbende i aktivtilstanden indtil pensionering. Sæt $T = 120$.

- 1) Opskriv de relevante matricer $\Lambda(t), B(t), b(t)$ og $R(t)$ i modellen. I kommer til at skulle bruge indikatorfunktioner til at holde styr på pensionstidspunktet.
- 2) Implementér de fundne matricer.
- 3) Argumentér for, at ligning (6.2) kan benyttes til at bestemme ækvivalenspræmien.
- 4) Beregn ækvivalenspræmien numerisk. Artiklen [10] rapporterer en ækvivalenspræmie på 46409 kr. svarende til 3867 kr. om måneden.
- 5) Opskriv Thieles differentialligninger for reserverne V_0 og V_1 for tilstand 0 og 1, hvor du benytter den fundne ækvivalenspræmie.
- 6) Plot reserverne V_0 og V_1 i perioden $[40, T]$. Sammenlign reservernes forløb med differentialligningerne i forrige opgave.
- 7) Betragt nu den omvendte situation, hvor policetageren i stedet ønsker at indbetale 5.000 kr. om måneden (svarende til en løbende præmie på 60.000 kr.). Beregn den tilsvarende ækvivalensydelse.

••• **Opgave 6.3.20:**

I denne opgave skal vi udlede Thieles differentialligninger for matricen $\mathbf{V}(t)$. De ser ud som følger:

$$\frac{d}{dt} \mathbf{V}(t) = r(t)\mathbf{V}(t) - \Lambda(t)\mathbf{V}(t) - R(t)p(t, T), \quad \mathbf{V}(T) = 0.$$

KAPITEL 6. PRODUKTINTEGRALET, MARKOVKÆDER OG PENSION

- 1) Differentier venstresiden af udtrykket i Proposition 6.3.11.
- 2) Differentier højresiden af udtrykket i Proposition 6.3.11.
- 3) Saml brikkerne og bevis Thieles differentialligninger.
- 4) De klassiske reserver V_i kan sammes i en vektor $V^{\text{Th}}(t) = (V_0(t), \dots, V_p(t))$ ("Th" for Thiele). Disse er relateret til \mathbf{V} gennem

$$V^{\text{Th}}(t) = \mathbf{V}(t)e.$$

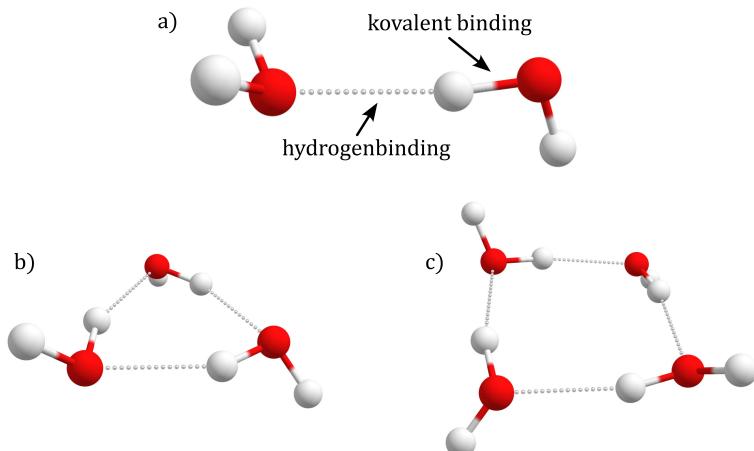
Genskab de klassiske Thiele-differentialligninger ved at bruge denne relation samt differentialligningen for \mathbf{V} .

Kapitel 7

IR spektroskopi af molekulære klynger

7.1 Introduktion

I dette valgfrie forløb skal vi se et eksempel på, hvordan matematiske modeller anvendes i sammenhold med eksperimentel fysisk kemi. Vi skal kigge på karakteriseringen af intermolekulære bindinger i små molekulære klynger, herunder vandklynger $(H_2O)_{n=2-6}$. En molekylær klynge er beskrevet ved en samling af molekyler, som holdes sammen af intermolekulære bindinger. Molekulære klynger af vand er holdt sammen af hydrogenbindinger ($H_2O \cdots HOH$) og van der Waals interaktioner.

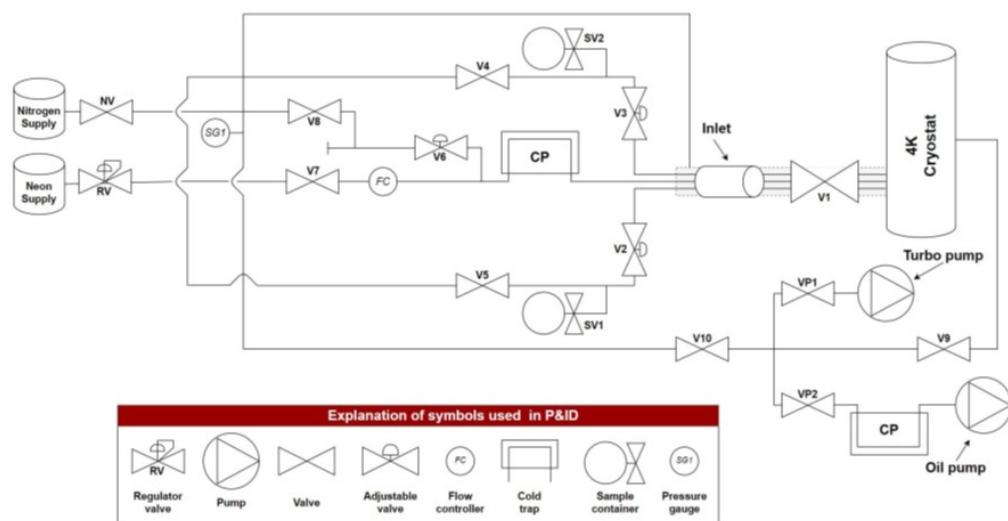


Figur 7.1: Eksempler på molekulære vandklynger. a) I (homo)dimeren er to vandmolekyler sammenholdt af én hydrogenbinding. b) I (homo)trimere er tre vandmolekyler sammenholdt af tre hydrogenbindinger. c) I (homo)tetrameren er fire vandmolekyler sammenholdt af fire hydrogenbindinger.

Forløbet er opbygget med en samling af teori og praksis. I vil få mulighed for at komme i laboratoriet og overvære et matrixisolations infrarød spektroskopi eksperiment af molekulære klynger. Dertil vil I have mulighed for at anvende en supercomputer og foretage nogle simple kvantekemiske beregninger til at forudsige geometrier, relative energier og harmonisk forudsagte vibrationelle frekvenser for molekulære klynger af vand. Forløbet fokuserer på anvendelsen af teori og eksperiment, men indeholder også gennemgang af teorien.

7.2 Matrixisolation

Vi anvender matrixisolation til at undersøge molekulære klynger. I et matrixisolations eksperiment fanger man molekyler/molekulære klynger i et inert, kryogent medium. Det inerte medium kaldes *matrixvært*, mens molekylerne, som undersøges, kaldes *gæsten*. Matrixisolation kan anvendes i kombination med flere forskellige typer af spektroskopi og til flere formål. Valget af matrixvært afhænger af formålet med eksperimentet. Idet vi undersøger molekulære klynger, dvs. interaktionen mellem enkelte molekyler, falder valget af matrixvært på ædelgassen Neon for at minimisere interaktionerne mellem gæsten og værten. Andre hyppigt anvendte matrixværter til studie af molekulære klynger er ædelgasserne Argon og Krypton, eller nitrogen.



Figur 7.2: En illustration af et eksperimentelt matrixisolations set-up.

Temperaturen af matricen afhænger af matrixvært. En neon matrix kan køles til 4 Kelvin (forkortet K fremadrettet). Til erindring gælder, at $0^\circ\text{C} = 273.15 \text{ K}$, hvorfor $4 \text{ K} = -269.15 \text{ }^\circ\text{C}$. Inden et eksperiment pumpes matrixisolationsopstillingen (Figur 7.2) til højt/ultrahøjt vakuum, se tabel 7.1. Selve deponeringen af vært og gæst molekyler foregår i kryostaten. Ordet *kryostat* er en sammensætning af ordene kryogen og thermostat. Vi bruger kryostaten til at køle neon matricen til 4 K og vedligeholde denne temperatur under IR målingerne.

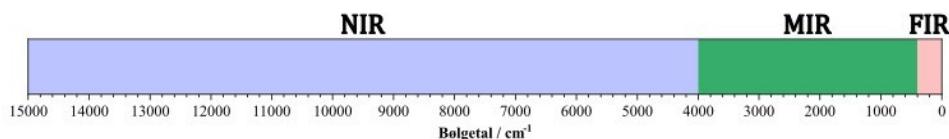
Tabel 7.1: Forskellige kategorier for tryk i atm (atmosfære), bar og Pa (Pascal).

	atm	bar	Pa
Atmosfærsik tryk	1	1.01325	101 325
Præ-vakuum		$10^{-3}\text{-}10^{-8}$	$10^2\text{-}10^{-3}$
Højt vakuum		$10^{-8}\text{-}10^{-11}$	$10^{-3}\text{-}10^{-6}$
Ultrahøjt vakuum		$10^{-11}\text{-}10^{-13}$	$10^{-6}\text{-}10^{-8}$
Vakuum (rummet)		$< 10^{-15}$	$< 10^{-10}$

Matrixisolation (MI) er en general og effektiv metode til at akkumulere en høj densitet af molekyler i en kvasi-gasformig tilstand. Alternative metoder til at opnå samme resultat som MI-spektroskopi er direkte gasfasespektreroskopi, supersonisk jetekspansion og helium-nanodræbe-isolationsspektreroskopi (HENDI). De to første metoder undersøger analytten i gasfasen og afhænger derfor i høj grad af damptrykket og stabiliteten af det system, der skal undersøges. Vi vil kun besætte os med neon matrixisolation.

7.3 Infrarød spektroskopi

Vi anvender infrarød spektroskopi til at identificere molekulære klynger i neon matricen og kvantificere de intermolekulære bindinger, der er til stede i en given molekulær klynge. I infrarød spektroskopi belyser vi molekyler med lys fra det infrarøde område i det elektromagnetiske spektrum, svarende til bølgelængder i intervallet $0.7\text{-}1000\ \mu\text{m}$. Vi kan inddеле det infrarøde område i tre dele; NIR (near-infrared: $0.7\text{-}2.5\ \mu\text{m}$), MIR (mid-infrared: $2.5\text{-}25\ \mu\text{m}$), og FIR (far-infrared: $25\text{-}1000\ \mu\text{m}$). I den eksperimentelle øvelser kommer vi til at kigge i MIR og FIR området.



Figur 7.3: De tre spektrale områder i infrarød spektroskopi.

Alle molekyler har egenvibrationer, kaldet *vibrational modes* på engelsk. Disse indre vibrationer er karakteristiske for strukturen af et givent molekyle. Der gælder generelt, at et ikke lineær molekyle har $3 \cdot N - 6$ vibrationelle modes og at et lineær molekyle har $3 \cdot N - 5$ vibrationelle modes, hvor N er antallet af atomer i molekylet. Hvis vi tager et vandmolekyle som eksempel, har vi $N = 3$ idet et vandmolekyle består af to hydrogenatomer og et oxygenatom. Antallet af vibrationelle modes for et vandmolekyle er hermed $3 \cdot 3 - 6 = 9 - 6 = 3$. Figur 7.4 viser de tre vibrationelle modes for et vandmolekyle.

$$\begin{array}{ll} \text{Ikke-lineært:} & 3N - 6 \text{ vibrationelle modes} \\ \text{Lineært:} & 3N - 5 \text{ vibrationelle modes} \end{array}$$



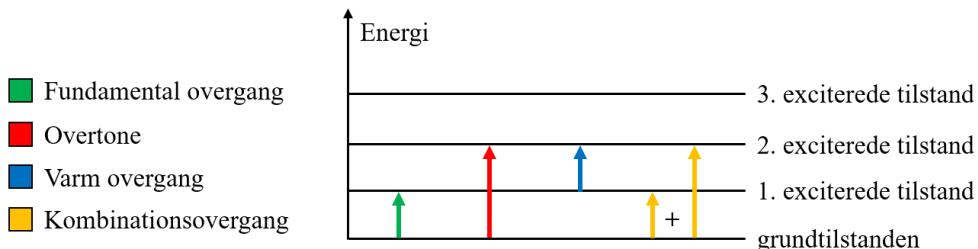
Figur 7.4: De tre vibrationelle modes for et vandmolekyle.

For molekulære klynger skelner vi mellem *intramolekulære* og *intermolekulære* vibrationelle modes. Hvis vi tager vand-dimeren som eksempel, så har vi $3 \cdot 6 - 6 = 18 - 6 = 12$ vibrationelle modes, idet vand-dimeren består af to vandmolekyler (i alt fire hydrogenatomer og to oxygenatomer). For to separate vandmolekyler, der ikke interagerer, har vi kun $2 \cdot (3 \cdot 3 - 6) = 2 \cdot 3 = 6$ vibrationelle modes, dvs. for en vand-dimer har vi fået seks ekstra vibrationer, nemlig seks intermolekulære vibrationer. De *intramolekulære vibrationer* er dem, som vi også har i de isolerede monomere, mens de *intermolekulære vibrationer* er karakteristiske for en given molekulær klynge. De intermolekulære vibrationelle overgange findes hovedsageligt under $400\ \text{cm}^{-1}$ i det infrarøde spektrum (FIR) for molekulære vandklynger.

Når vi belyser et molekyle eller en molekulær klynge med lys fra den infrarøde del af det elektromagnetiske spektrum, vil det optage strålingen ved de energier, der svarer til energiforskellen mellem forskellige vibrationelle tilstande for en given vibrationel mode. Vibrationsenergerne for et molekyle er kvantiserede, dvs. de kan kun antage bestemte værdier. Figur 7.5 viser forskellige typer vibrationelle overgange, som kan forekomme i et IR spektrum. Vi skelner mellem:

KAPITEL 7. IR SPEKTROSKOPI AF MOLEKYLÆRE KLYNGER

- Fundamentale overgange (grundtilstanden \rightarrow 1. exciterede tilstand)
- Overtoner (grundtilstanden \rightarrow > 1 . exciterede tilstand)
- Varme overgange, "hot transitions" (n . exciterede tilstand \rightarrow $> n$. exciterede tilstand)
- Kombinationsovergange



Figur 7.5: Forskellige typer af overgange

Det er værd at bemærke, at intensiteterne af overtoner, varme overgange og kombinationsovergange ofte er meget lave, hvorfor vi primært observerer de fundamentale overgange i et IR spektrum. Heldigvis er vi også interesserede i de fundamentale overgange.

De primære fordele ved matrixisolation infrarød spektroskopি sammenlignet med almindelig gasfase-infrarød spektroskopি er en reduktion af "hot transitions" og undertrykelse af rotation og translation af gæstmolekylerne. I IR-spektroskopи ønsker man ofte at identificere de rene fundamentale vibrationelle overgange, $n_i = 0 \rightarrow n_f = 1$. Den relative population af en tilstand $n_i = j$, hvor $j = 0, 1, 2, \dots$, beskrives af Boltzmann-fordelingen:

$$p_j = \frac{e^{-\varepsilon_j/k_B T}}{\sum_n e^{-\varepsilon_n/k_B T}} \quad (7.1)$$

hvor ε_j er energien af tilstand j , ε_n er energien af tilstand n , k_B er Boltzmanns kontant, og T er temperaturen. I grænsen $T \rightarrow 0$, nærmer populationen af grundtilstanden sig én. Derfor forventes grundtilstanden at være højst populeret i et matrixisolationsexperiment (neon, $T \approx 4$ K). Dette medfører en reduktion af "hot transitions", dvs. overgange med $n_i > 0$.

Selvom MI-IR har fordele, introducerer det også matrixeffekter, herunder matrixforskydninger og *site-splitting*. Når en gæstemolekyle omgives af værtsatomer (Ne-atomer), vil der forekomme en lille forskydning af båndcenteret, som observeres i det infrarøde spektrum, som følge af svage interaktioner mellem gæstemolekylet og værtsatomerne. Forskellen mellem $\tilde{\nu}_{\text{matrix}}$ og $\tilde{\nu}_{\text{gasfase}}$ kaldes matrixforskydningen (*matrix shift*). Heldigvis er matrixforskydningen ofte lille, især i Neon. I Neon matricer er matrixforskydningerne normalt under 0.5% ift. det absolute båndcenter. Den anden effekt, *site-splitting* opstår som følge af anisotropi i måden hvorpå værten "fanger" gæsten. Det kan være variatiorer i værtsmiljøet omkring gæsten, hvilket medfører en opsplitning og/eller udvidelse af IR-signalet. Site-splitting er hyppigt rapporteret i Argon, Krypton og N₂ matricer, men der er kun få tilfælde, hvor det er observeret i Neon matricer.

7.4 Kvantemekanik [11]

Forestil dig en partikel med massen m , der bevæger sig langs x -aksen under påvirkning af kraften $F(x,t)$. Ved hjælp af klassisk mekanik kan vi bestemme partiklens hastighed ($v = dx/dt$), kinetiske energi ($T = (1/2)mv^2$), osv. I klassisk mekanik anvendes f.eks. Newtons anden lov til at beskrive partiklen. I kvantemekanik kan vi ikke længere bruge Newtons love. For at beskrive positionen af en partikel kvantemekanisk skal vi bestemme partiklens bølgefunktion, $\Psi(x,t)$, ved at løse Schrödingerligningen:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + V\Psi \quad (7.2)$$

I det følgende gives en kort introduktion til kvantemekanik. Indholdet vil blive ud-dybet under forløbet.

Bølgefunktionen

Tilstanden af et kvantemekanisk system er fuldstændig beskrevet af dets bølgefunktion, $\Psi(x,t)$. Bølgefunktionen har den egenskab, at $|\Psi(x,t)|^2$ er en sandsynlighedsfordeling.

Bemærk at partiklens position i kvantemekanik ikke er beskrevet ved et sæt specifikke koordinater som i klassisk mekanik, men ved en funktion, der afhænger af de rumlige koordinater og tiden. Ifølge Born's statistiske fortolkning gælder, at sandsynligheden for at finde partiklen mellem a og b til tiden t er:

$$\int_a^b |\Psi(x,t)|^2 dx \quad (7.3)$$

I denne statistiske fortolkning af bølgefunktionen gælder naturligt, at:

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(x,t)|^2 dx = 1 \quad (7.4)$$

Vi kan vise, at hvis $\Psi(x,t)$ er en løsning til Schrödingerligningen, så er $A \cdot \Psi(x,t)$ ligeledes en løsning. Vi kan hermed introducere en normaliseringskonstant A , der sikre, at kriteriet ovenfor i den statistiske fortolkning er opfyldt.

Den tidsuafhængige Schrödingerligning

Bølgefunktionen for en partikel findes ved at løse Schrödingerligningen for et givent potentiale $V(x,t)$. Hvis vi antager, at potentialet er uafhængigt af tiden, dvs. $V(x)$, så kan vi løse Schrödingerligningen ved separation af variable. Vi kan undersøge mulige løsninger af formen $\Psi(x,t) = \psi(x)\varphi(t)$. Denne separation af variable omdanner den partielle differentialligning til to ordinære differentialligninger.

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}\varphi(t) &= -\frac{iE}{\hbar}\varphi(t) \\ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2}\psi(x) + V(x)\psi(x) &= E\psi(x) \end{aligned} \quad (7.5)$$

Den anden ligning er den *tidsuafhængige Schrödingerligning*. Den tidsuafhængige Schrödingerligning kan løses for forskellige potentialer $V(x)$. Under forløbet vil vi kigge på hvordan vi kan løse den tidsuafhængige Schrödingerligning for to forskellige simple potentialer og hvilke fysiske fortolkninger, der følger heraf. De to eksempler er "en partikel i en kasse" og "den harmoniske oscillator".

Den tidsuafhængige Schrödingerligning er central i beregningskemi. For løsningerne til Schrödingerligningen kan knyttes følgende fortolkninger:

KAPITEL 7. IR SPEKTROSKOPI AF MOLEKYLÆRE KLYNGER

1. De er *stationære tilstænde*. Dette ses i sandsynlighedstætheden, som er tidsuafhængig. Heraf følger, at enhver observerbar størrelse ligeledes er tidsuafhængig, selvom selve bølgefunktionen er tidsafhængig.
2. Løsningerne svarer til tilstande med en veldefineret total energi. Forventningsværdien for Hamiltonoperatoren, \hat{H} i den tidsuafhængige Schrödingerligning er energien E . Dette er i overenstemmelse med den klassiske Hamiltonian, der definerer den klassiske totale energi (kinetisk plus potential energi).
3. Den generelle løsning er en linearkombination af løsninger. For hver tilladte energi, E_i , findes en tilhørende bølgefunktion, $\Psi_i(x,t)$.

Det sidste princip er et matematisk argument, der også anvendes når Schrödingerligningen løses for en gruppering af atomer (molekyle, molekylærklynge, mm.). Der anvendes en LCAO-MO (linear combination of atomic orbitals - molecular orbitals) fremskrivning af bølgefunktionen i beregningskemi, [11].

7.5 Beregningskemi

Beregningskemi er en gren af kemi, der anvender fundamentale principper inden for kvantemekanik og fysik til at beskrive molekylers struktur, reaktionsveje og egenskaber. Den grundlæggende ligning, der ligger bag alt hvad vi kommer til at diskutere er den tidsuafhængige Schrödingerligning:

$$\hat{H}\Psi = E\Psi \quad (7.6)$$

\hat{H} er Hamiltonoperatoren, Ψ er bølgefunktionen og E er den totale energi. Ved at løse Schrödingerligningen med den elektroniske Hamiltonoperator for et givent molekyle, kan vi bestemme den totale energi af det givne molekyle. Som postuleret i kvantemekanikken kan vi med den eksakte bølgefunktion for et givent system ligeledes beskrive alle andre fysiske egenskaber, som systemet har. Schrödingerligningen er en differentialligning, der ikke kan løses eksakt for mere end én-elektronsystemer. For et vandmolekyle eller for en given molekylær klynge, bliver vi derfor nødt til at løse den numerisk.

At vi ikke kan løse Schrödingerligningen analytisk skyldes operatoren, der beskriver frastødningen mellem elektronerne i systemet. I kvantekemi findes flere metoder, hvorved vi enten approksimerer dette led i Hamiltonoperatoren eller anvender andre matematiske metoder til at approksimere den elektronkorrelation, som går tabt under de simpleste antagelser. Den simpleste approksimation, som vi kan lave for elektronernes frastødning, er at antage, at hver elektron bevæger sig i et gennemsnitligt potentielt af alle andre elektroner. Dette definere Hartree-Fock (HF) teori.

I beskrivelsen af molekylets orbitaler anvender vi linearkombinationer af atomorbitaler til at skrive molekyleorbitaler. Hvordan vi vælger disse atomorbitaler indgår i teorien om basissæt. Et basissæt er en samling af matematiske funktioner, vi bruger som approksimationer til orbitaler. Udvikling af basisssæt til specifikke formål eller til specifikke metoder er et særskilt område inden for kvantekemi. I vil lære mere om dette, når I skal udføre simple beregninger for vandklynger. Her vil vi både anvende forskellige metoder, herunder HF teori, og forskellige basissæt.

7.6 Sammenspil mellem teori og eksperiment

I eksperimentel spektroskopi anvender vi kvantekemi til at forudsige vores eksperimentelle observationer, og samtidig anvender vi selvstændige eksperimentelle observation til at bekræfte teoretiske modeller udledt eller begrundet i kvantemekanikken. Der er hermed et tæt sammenspil mellem teori og praksis.

7.6. SAMMENSPIL MELLEM TEORI OG EKSPERIMENT

I matrixisolations infrarød spektroskopi af molekylære klynger er vi interesserede i den totale elektroniske energi af den molekylære klynge og de individuelle monomere, der udgør klyngen, idet vi gerne vil bestemme den elektroniske dissocieringsenergi, D_e .

$$D_e = E_{\text{total, molekylær klynge}} - \sum E_{\text{total, monomer}} \quad (7.7)$$

Der kan forekomme forskellige konformationer af et givent molekyle eller for en given molekylær klynge. Disse konformationer har ofte forskellige totale energier. Generelt forventer vi at se den mest stabile (laveste totale energi) konformation ved 4 K. Det kan dog forekomme, at to konformere ligger tæt på hinanden i energi og dermed begge dannes i neon matricen, eller at energibarrieren mellem to konformere er lav. Her er det fordelagtigt både at have kvantekemisk forudsagte relative dissocieringsenergier, og også forudsagte vibrationelle båndcentre, som kan sammenlignes med observerede båndcentre.

I beregningskemi kan vi uddover at bestemme den totale energi af systemet, ligeledes forudsige de fundamentale vibrationelle overgange. En simpleste approksimation, som vi kan anvende til at forudsige de fundamental overgange, er den harmoniske approksimation. En kovalent binding kan opfattes som en fjeder med en kugle i hver ende. Når bindingen vibrerer (når fjederen svinger), vil svingningsfrekvensen afhænge af dens (bindingens) styrke og af kugternes (atomernes) masse. I den harmoniske approksimation antager vi, at hver binding kan beskrives som en harmonisk oscillator. Dertil foretager vi et koordinatskifte fra kartesiske koordinater (x, y, z) til normal mode koordinater. For vandmolekylet er de tre normal mode koordinater de tre vibrationelle modes, som er illustreret i figur 7.4. Udtrykt i normal mode koordinater vil de harmoniske oscillatører for hver normal mode koordinat ikke være koblede, hvilket simplificere løsningen af Schrödingerliningen med den harmoniske Hamiltonoperator.

Til øvelsen vil en supercomputer løse Schrödingerliningen for jer under den harmoniske approksimation og derefter betemme forskellene i energi mellem grundtilstanden og den 1. exciterede tilstand for hver normal mode i det system, som I undersøger. Dette er energien af en fundamental overgang.

Hvorfor er denne information vigtig i beskrivelsen af intermolekylære bindinger?

Molekyler står aldrig stille. Selv ved 0 K vil molekyler vibrere/have en hvis vibrationel energi. Vi kalder denne vibrationelle energi for nulpunktsenergien (ZPE). For at kvantificere intermolekylære bindinger i en molekylær klynge er det hermed ikke nok at bestemme ændringen i den elektroniske energi, D_e . Der vil ligeledes være et bidrag fra ændringen i nulpunktsenergien mellem den molekylære klynge og de isolerede molekyler. Især de intermolekylære fundamental vibrationelle overgange er vigtige i denne sammenhæng, da disse ikke eksisterer i monomerene. De intramolekylære vibrationelle overgange vil kun give et lille bidrag til ΔZPE , idet de ofte kun er lidt forskudt ift. de tilsvarende overgange i monomeren.

Dissocieringsenergien D_0 af en molekylær klynge kan bestemmes ved:

$$D_0 = D_e + \Delta ZPE \quad (7.8)$$

hvor

$$\Delta ZPE = ZPE_{\text{molekylær klynge}} - \sum ZPE_{\text{monomer}} \quad (7.9)$$

Idet de *intramolekylære* overgange også findes i monomeren og ofte ikke er betydeligt forskudt i den molekylære klynge ift. i monomere, introducere en teoretisk overestimering eller underestimering af disse vibrationelle modes i D_0 ikke en betydelig fejl. De *intermolekylære* overgange eksisterer kun i den molekylære klynge og det er hermed

KAPITEL 7. IR SPEKTROSKOPI AF MOLEKYLÆRE KLYNGER

den absolutte størrelsen af den intermolekylære overgangsenergi, der bidrager til D_0 . En signifikant overestimering eller underestimering af disse bidrag kan introducere signifikante fejl i D_0 . Et aspekt af de kvantekemisk forudsagte vibrationelle overgangsenergier, som endnu ikke er nævnt er anharmonicitet. Anharmonicitet er defineret som afvigelsen fra den harmoniske approksimation. Vi vil diskutere dette til øvelsen i laboratoriet og se eksempler herpå i sammenligningen mellem de teoretisk forudsagte vibrationelle overgangsenergier og de eksperimentelt observerede båndcentre. Generelt gælder, at de intermolekylære vibrationelle overgange er mere anharmoniske end de intramolekylære.

Bibliografi

- [1] Nathalie Wahl og Lars Hesselholt. *Lineær Algebra*. 2016.
- [2] Sheldon Axler. *Linear Algebra Done Right*. 3. udg. Springer. ISBN: 978-3-319-11079-0.
- [3] Tom Lindstrøm. *Kalkulus*. 4. udg. Universitetsforlaget, 2016. ISBN: 978-82-15-02710-4.
- [4] Steffen L. Lauritzen. *Thiele: Pioneer in statistics*. Oxford University Press, 2002. ISBN: 978-01-98-50972-1.
- [5] David Kincaid og Ward Cheney. *Numerical Analysis. Mathematics of Scientific Computing*. 3. udg. 2002. ISBN: 978-0-8218-4788-6.
- [6] H. Scott Fogler. *Elements of chemical reaction engineering*. eng. Prentice-Hall, Pearson, 2016, XXXIII, 957 Seiten (unknown). ISBN: 0133887510, 0133888096, 1488667152, 9780133887518, 9780133888096, 9781488667152.
- [7] Octave Levenspiel. *Chemical reaction engineering*. eng. Wiley, 1999, XVI, 668 S (unknown). ISBN: 047125424x, 160119921x, 9780471254249, 9781601199218, 047125424X.
- [8] Arphaphon Champirak m.fl. „An experimental, theoretical, and kinetic modeling study of gas-phase sulfation of KCl“. I: *Fuel* 363 (2024), s. 130974. ISSN: 0016-2361. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2024.130974>. URL: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0016236124001200>.
- [9] Mogens Bladt, Søren Asmussen og Mogens Steffensen. „Matrix representations of life insurance payments“. I: *European Actuarial Journal* (2020).
- [10] Kristian Buchardt og Thomas Møller. „Life Insurance Cash Flows with Policyholder Behavior“. I: *Risks* (2015).
- [11] David J. Griffiths og Darrell F. Schroeter. *Introduction to Quantum Mechanics*. Third edition. Cambridge ; New York, NY: Cambridge University Press, 2018. ISBN: 978-1-107-18963-8.
- [12] Wikipedia. *Pascal's triangle*. 2024. URL: https://en.wikipedia.org/wiki/Pascal%27s_triangle.
- [13] Wikipedia. *Unit circle*. 2024. URL: https://en.wikipedia.org/wiki/Unit_circle.

Appendiks

Regnereglerne og funktionerne i dette kapitel formodes at være kendt, og vi kommer ikke til at lægge større vægt på det i løbet af undervisningen på campen. Ikke desto mindre er det rart at kunne slå disse elementære ting op. Derfor dette appendiks.

A Grundlæggende algebra

Vi starter med at gennemgå nogle grundlæggende algebraiske relationer og funktioner, man støder på ofte.

Potenser og rødder

Vi starter med at genkalde potenser og deres egenskaber. Lad a være et fast tal. Hvis n er et positivt heltal, definerer vi a^n til at være a ganget med sig selv n gange.

Eksempel A.1. Vi har $2^3 = 2 \cdot 2 \cdot 2 = 8$ og $(-3)^3 = (-3) \cdot (-3) \cdot (-3) = 9 \cdot (-3) = -27$.
○

Et interessant specialtilfælde er, når potensen er nul. Hvis $a \neq 0$, har vi konventionen, at $a^0 = 1$ (denne konvention kommer til at give mening senere, når vi taler om negative potenser). Det varierer fra lærebog til lærebog, hvad 0^0 er defineret til. Vi vælger at definere $0^0 = 0$. Vi får umiddelbart følgende egenskaber fra definitionen.

Lemma A.2. *Lad a og b være tal og n, m ikke-negative heltal. Da har vi*

1. $a^n \cdot a^m = a^{n+m}$,
2. $(a^n)^m = a^{nm}$,
3. $(ab)^n = a^n b^n$.

Eksempel A.3. Vi ser, at $3^{1+2} = 3^3 = 27$, og $3^1 \cdot 3^2 = 27$. Vi har $(2^3)^2 = 8^2 = 64$, og $2^{3 \cdot 2} = 2^6 = 64$. Vi ser også, at $(3 \cdot 5)^2 = 15^2 = 225$, og $3^2 \cdot 5^2 = 9 \cdot 25 = 225$.
○

At tage rødder kan ses som den omvendte operation til at tage potenser. For et tal a er $\sqrt[n]{a}$ for n et ikke-negativt heltal lig det tal (hvis det findes!), som opfylder $(\sqrt[n]{a})^n = a$. For $n = 2$ plejer vi at skrive \sqrt{a} i stedet for $\sqrt[2]{a}$.

Eksempel A.4. Vi har $\sqrt{4} = 2$, thi $2^2 = 4$. Ligeledes ses, at $\sqrt[3]{27} = 3$, og at $\sqrt[4]{16} = 2$. Vi ser, at $\sqrt{-4}$ ikke eksisterer¹, idet ethvert tal opløftet i to er ikke-negativt.
○

Generelt kan vi observere, at så længe n er lige, eksisterer $\sqrt[n]{a}$ kun, hvis $a \geq 0$. Vi ser også umiddelbart, at følgende regneregler gælder.

Lemma A.5. *Lad a og b være tal (ikke-negative, hvis potensen er lige) og n, m ikke-negative heltal. Da har vi*

¹Mere korrekt: Det eksisterer, men det er ikke et *reelt tal*, det er et *komplekst tal*.

. APPENDIKS

$$1. \sqrt[n]{\sqrt[m]{a}} = \sqrt[nm]{a},$$

$$2. \sqrt[n]{ab} = \sqrt[n]{a} \sqrt[n]{b}.$$

Bevis. Vi viser først punkt 1. Per definition er $\sqrt[nm]{a}$ det tal, som opfylder $(\sqrt[nm]{a})^{nm} = a$. Vi viser, at $\sqrt[n]{\sqrt[m]{a}}$ opfylder samme regel. Vi har per forrige lemma, at

$$\left(\sqrt[n]{\sqrt[m]{a}}\right)^{nm} = \left(\left(\sqrt[n]{\sqrt[m]{a}}\right)^n\right)^m = (\sqrt[n]{a})^m = a,$$

hvilket viser det ønskede. At bevise punkt 2 overlades til læseren. ■

Brøker

Vi genkalder kort, hvad en brøk er gennem et eksempel. Brøken $3/4$ svarer til, at man har en andel på tre stykker ud af fire. Tænk på en pizza eller en lagkage. Hvis vi deler alle fire stykker på i to lige store stykker, har vi nu 8 dele i alt, og vores andel svarer nu til 6 stykker. Vi har *forlænget* brøken! Matematisk vil vi skrive

$$\frac{3}{4} = \frac{6}{8}.$$

Vi kan også altid regne baglæns. Ved at "lime" stykkerne sammen igen, kan vi gå fra brøken $6/8$ tilbage til $3/4$. Matematisk kaldes dette at *forkorte* brøken. Lad os gå mere matematisk til værks. En brøk skrives som a/b , hvor a og b er heltal, og $b \neq 0$. a kaldes *tælleren* og b *nævneren*. For alle tal $c \neq 0$ har vi

$$\frac{a}{b} = \frac{ac}{bc}$$

svarende til at forlænge eller forkorte brøken. Hvis en brøk a/b opfylder, at a og b ikke har nogle fælles faktorer, så brøken ikke kan forkortes mere, kaldes a/b *uforkortelig*. Som eksempel er $2/3$, $4/5$ og $5/26$ uforkortelige, mens $6/9$ og $10/15$ ikke er uforkortelige.

Hvordan regner man med brøker? At gange brøker sammen er simpelt. Vi har

$$\frac{a}{b} \cdot \frac{c}{d} = \frac{ac}{bd}.$$

Man skal være mere påpasselig med at lægge brøker sammen. Regnereglen er

$$\frac{a}{b} + \frac{c}{d} = \frac{ad + bc}{bd}.$$

Hvorfor ser den sådan ud? Idéen er, at det kun giver mening at lægge brøker sammen, hvis nævneren er den samme. Tænk på det som, at hvis du har en pizza inddelt i ottendededele, så er man nødt til at omregne, hvis du vil bytte lige over med en, hvis pizza er inddelt i fjerdededele. Du skal give to stykker for at få ét fra din kammerat. Derfor skal du forlænge din brøk med to.

Eksempel A.6. Lad os regne $1/4 + 1/2$. Vi forlænger $1/2$ med 2. Da får vi

$$\frac{1}{4} + \frac{1}{2} = \frac{1}{4} + \frac{2}{4} = \frac{3}{4}.$$

Tegn dette som diagrammer!

○

Den generelle formel for at lægge brøker sammen følger nu ved at forlænge begge brøker på passende vis.

$$\frac{a}{b} + \frac{c}{d} = \frac{ad}{bd} + \frac{bc}{bd} = \frac{ad + bc}{bd}.$$

Vi har nu gennemgået addition og multiplikation med brøker. Vi mangler nu kun division. I den forbindelse giver det mening at tale om invertering af en brøk. Lad a/b være en brøk med $a \neq 0$. Da kan vi danne den *reciprokke* brøk b/a . Vi ser, at

$$\frac{a}{b} \cdot \frac{b}{a} = \frac{ab}{ba} = 1,$$

så $(a/b)^{-1} = b/a$. Det følger herfra, at

$$\frac{a/b}{c/d} = \frac{a}{b} \left(\frac{c}{d} \right)^{-1} = \frac{a}{b} \cdot \frac{d}{c} = \frac{ad}{bc}.$$

Eksempel A.7. Lad os beregne $(2/3)/(-5/9)$ med formlen ovenover

$$\frac{2/3}{-5/9} = \frac{2 \cdot 9}{3 \cdot (-5)} = -\frac{18}{15} = -\frac{6}{5}.$$

Et alternativ til at huske formlen er ved blot at forlænge brøken passende. Hvis vi forlænger den store brøk med 9 fås

$$\frac{2/3}{-5/9} = \frac{2/3 \cdot 9}{-5/9 \cdot 9} = \frac{6}{-5} = -\frac{6}{5},$$

som er det samme resultat. \circ

Da vi nu har fået styr på brøker, kan vi vende tilbage til potenser og rødder. Da vi definerede potenser, gjorde vi det kun for ikke-negative heltalspotenser. Men vi kan udvide definitionen til alle heltal ved at definere

$$a^{-n} = \frac{1}{a^n}$$

for et heltal n . Vi kan endda udvide definitionen til brøk-potenser ved

$$a^{n/m} = \sqrt[m]{a^n}.$$

Med disse mere generelle definitioner på plads, kan vi opskrive følgende regneregler for brøker, potenser og rødder.

Lemma A.8. *Lad q være en brøk og a, b tal med $b \neq 0$. Da gælder følgende.*

$$\left(\frac{a}{b}\right)^q = \frac{a^q}{b^q}, \quad \left(\frac{a}{b}\right)^{-q} = \frac{b^q}{a^q} \quad \text{for } a \neq 0, \quad \sqrt[n]{\frac{a}{b}} = \frac{\sqrt[n]{a}}{\sqrt[n]{b}}.$$

Bevis. Overlades til læseren. \blacksquare

Kvadratsætninger

Kvadratsætningerne siger følgende for tal a og b :

$$\begin{aligned} (a + b)^2 &= a^2 + b^2 + 2ab, \\ (a - b)^2 &= a^2 + b^2 - 2ab, \\ (a + b)(a - b) &= a^2 - b^2. \end{aligned}$$

Når man første gang støder på udtrykket $(a + b)^2$, kan man være fristet til at tro, at $(a + b)^2 = a^2 + b^2$, men det er tilsyneladende forkert²! Lad os se hvorfor ved at bevise den første af ovenstående relationer ved at gange paranteserne ud.

$$(a + b)^2 = (a + b)(a + b) = a^2 + ab + ba + b^2 = a^2 + b^2 + 2ab.$$

De resterende relationer overlades det til jer at vise.

²"Reglen" $(a + b)^2 = a^2 + b^2$ omtales til tider som "freshman's dream".

Summer og produkter

I er allerede vant til at gange og lægge tal sammen. Det kan dog være, at I ikke er vant til sum- og produkttegn. Derfor gennemgår vi kort notationen for generelle summer og produkter.

Definition A.9. Lad a_1, a_2, \dots, a_n være tal. Da er

$$\sum_{i=1}^n a_i = a_1 + a_2 + \cdots + a_n.$$

Definitionen kan forekomme lidt abstrakt til en start, så lad os tage nogle eksempler.

Eksempel A.10. Vi har

$$\sum_{i=1}^5 i = 1 + 2 + 3 + 4 + 5 = 15.$$

Man kan tænke på det som, at først er $i = 1$, så vi lægger 1 til. Da er $i = 2$, så vi lægger 2 til osv. Summen løber til og med 5, så vi stopper efter, at vi har lagt 5 til. \circ

Eksempel A.11. Vi har

$$\sum_{i=1}^4 i^2 = 1^2 + 2^2 + 3^2 + 4^2 = 1 + 4 + 9 + 16 = 30.$$

\circ

Der er intet, der forhindrer os i at starte en sum i andre værdier end ét. F.eks. kunne man have

$$\sum_{i=-2}^1 i^3 = (-2)^3 + (-1)^3 + 0^3 + 1^3 = -8 - 1 + 1 = -8.$$

Det er i øvrigt ret typisk, at man støder på summer, der starter i $i = 0$. Ligesom man kan definere generelle (endelige) summer, kan man definere generelle produkter.

Definition A.12. Lad a_1, a_2, \dots, a_n være tal. Da er

$$\prod_{i=1}^n a_i = a_1 \cdot a_2 \cdots a_n.$$

Eksempel A.13. Vi har

$$\prod_{i=1}^3 i^2 = 1^2 \cdot 2^2 \cdot 3^2 = 1 \cdot 4 \cdot 9 = 36.$$

\circ

Fakultetsfunktionen, binomialkoefficienter og binomialformlen

Vi lukker sektionen om grundlæggende algebra med at præsentere binomialformlen, som er en generalisering af kvadratsætningerne til højere potenser. Med lidt knofedt er det ikke svært at vise

$$(a + b)^3 = a^3 + 3a^2b + 3ab^2 + b^3.$$

Det resultat kaldes ofte *kubiksætningen*. Man kan også lave variationer af dette resultat, f.eks.

$$(a - b)^3 = a^3 - 3a^2b + 3ab^2 - b^3,$$

der følger af at erstatte b med $-b$ i den første kubiksætning. Man kan så spørge, hvordan udtryk for $(a + b)^4, (a + b)^5$ osv. ser ud. Det er det, vi her skal undersøge. Vi starter i det små med at introducere fakultetsfunktionen.

Definition A.14. Lad n være et positivt heltal. Da definerer vi

$$n! = n \cdot (n - 1) \cdot (n - 2) \cdots 2 \cdot 1.$$

Vi omtaler $n!$ som " n fakultet". Vi definerer yderligere $0! = 1$.

Eksempel A.15. Vi har $4! = 4 \cdot 3 \cdot 2 \cdot 1 = 24$ og $5! = 5 \cdot 4 \cdot 3 \cdot 2 \cdot 1 = 120$. ○

Vi bemærker den rekursive relation $n! = n \cdot (n - 1)!$. $n!$ har også en kombinatorisk fortolkning.

Lemma A.16. $n!$ er antallet af permutationer af n elementer, dvs. antallet af rækkefølger, man kan opstille n forskellige objekter i.

Bevis. Vi har n objekter og dermed n pladser. Der er n muligheder for at vælge et element til første plads. Der er $n - 1$ muligheder for anden plads, thi vi allerede har valgt ét til den første plads. Med samme argument er der $n - 2$ muligheder for den næste osv. Altså er der

$$n \cdot (n - 1) \cdot (n - 2) \cdots 2 \cdot 1 = n!$$

mulige rækkefølger i alt. ■

Eksempel A.17. Der er $3! = 6$ forskellige permutationer af tre elementer. Eksplicit, hvis a, b og c er tre elementer, da er de forskellige rækkefølger givet ved

$$abc, \quad acb, \quad bac, \quad bca, \quad cab \quad \text{og} \quad cba.$$

○

Det er centralt for en permutation, at rækkefølgen har betydning. I eksemplet ovenover skelner vi mellem abc og acb . I virkeligheden kan permutationer dukke op i et kortspil. Her er rækkefølgen central for, hvordan spillet kommer til at udfoldes sig. Nogle gange er det omvendt ligegyldigt, hvad rækkefølgen er. Et eksempel er at udtagte et hold til et spil. Hvis man har brug for 10 spillere, og man har 20 personer at vælge imellem, så er det ligegyldigt, hvordan rækkefølgen af de 10 spillere ser ud. Når rækkefølgen er ligegyldig, omtaler vi sådan en udvælgelse som en *kombination*. Vi indfører nu en størrelse til at beskrive antallet af kombinationer.

Definition A.18. For ikke-negative heltal n og k med $k \leq n$ definerer vi *binomialkoeficienten*

$$\binom{n}{k} = \frac{n!}{k!(n-k)!}.$$

Til tider udtales $\binom{n}{k}$ som " n vælger k " (på engelsk: " n choose k ") eller som " n over r ". Hvis $k > n$, definerer vi $\binom{n}{k} = 0$.

Lemma A.19. For ikke-negative heltal n og k er $\binom{n}{k}$ lig antallet af kombinationer, man kan lave med k elementer ud af n mulige. Med andre ord, $\binom{n}{k}$ er antal måder, man kan udvælge k elementer ud af n , hvor rækkefølgen er ligegyldig.

Bevis. Lad os starte med at finde antallet af permutationer, man kan lave med k elementer ud af en samling på n elementer. Vi har n muligheder for første plads, $n - 1$ for den anden osv. k gange. På den k 'te plads har vi $n - k + 1$ muligheder, så antallet af permutationer er

$$n \cdot (n - 1) \cdots (n - k + 1) = \frac{n!}{(n - k)!}.$$

Vi er dog interesseret i at finde antallet af kombinationer. Lad $P_{n,k}$ betegne dette antal. For hver kombination med k elementer kan vi omarrangere elementerne $k!$ gange. Dermed må $P_{n,k} \cdot k!$ være antallet af permutationer med k elementer,

$$P_{n,k} \cdot k! = \frac{n!}{(n - k)!}.$$

Ved at dele med $k!$ på begge sider fås resultatet. ■

Undervejs i beviset udledte vi følgende nyttige resultat.

Korollar A.20. *Antallet af permutationer, man kan lave med k elementer ud af en samling med n elementer er*

$$\frac{n!}{(n-k)!}.$$

Eksempel A.21. Vi har et spil, hvor vi skal bruge seks spillere, og vi har otte, der gerne vil være med. På hvor mange måder kan vi sammensætte et hold spillere? Vi genkender dette som antallet af kombinationer med seks elementer ud af otte. Dermed er svaret

$$\binom{8}{6} = \frac{8!}{6!(8-6)!} = \frac{8!}{6! \cdot 2} = \frac{8 \cdot 7}{2} = 4 \cdot 7 = 28$$

forskellige måder at sammensætte holdet. \circ

Vi kan nu formulere binomialformlen.

Sætning A.22 (Binomialformlen). *For tal a og b gælder*

$$(a+b)^n = \sum_{i=0}^n \binom{n}{i} a^{n-i} b^i.$$

Bevis. Ganger vi parentesen $(a+b)^n$ ud, får vi klart led på formen $a^{n-i} b^i$, hvor i går fra 0 til n . Idet rækkefølgen af multiplikation ikke har nogen betydning, må antallet af led på formen $a^{n-i} b^i$ være lig $\binom{n}{i}$. Dette beviser sætningen. \blacksquare

Eksempel A.23. Lad os beregne $(a+b)^5$. Vi har fra binomialformlen, at

$$(a+b)^5 = \binom{5}{0} a^5 + \binom{5}{1} a^4 b + \binom{5}{2} a^3 b^2 + \binom{5}{3} a^2 b^3 + \binom{5}{4} a b^4 + \binom{5}{5} b^5.$$

Vi skal blot beregne de binomialkoefficienter, der indgår.

$$\begin{aligned} \binom{5}{0} &= \frac{5!}{0!(5-0)!} = 1, & \binom{5}{1} &= \frac{5!}{1!(5-1)!} = \frac{5!}{4!} = 5, & \binom{5}{2} &= \frac{5!}{2!(5-2)!} = \frac{5!}{2 \cdot 3!} = 10, \\ \binom{5}{3} &= \frac{5!}{3!(5-3)!} = 10, & \binom{5}{4} &= \frac{5!}{4!(5-4)!} = 5, & \binom{5}{5} &= \frac{5!}{5!(5-5)!} = 1. \end{aligned}$$

Dermed bliver svaret

$$(a+b)^5 = a^5 + 5a^4 b + 10a^3 b^2 + 10a^2 b^3 + 5ab^4 + b^5.$$

\circ

Det kan være anstrengende at beregne mange store binomialkoefficienter, men heldigvis er der en række nyttige regneregler, der kan spare en meget tid. Vi opilater nogle af de mest centrale.

Lemma A.24. *Der gælder følgende for binomialkoefficienten, hvor $k \leq n$.*

1.

$$\binom{n}{k} = \binom{n}{n-k}.$$

2. *Pascals regel/Pascals trekant*

$$\binom{n}{k} = \binom{n-1}{k-1} + \binom{n-1}{k}.$$

Bevis. Beviset for punkt 1 overlades som øvelse til jer. Ift. punkt 2, så regner vi højresiden ud, sætter på fælles brøkstreg og får

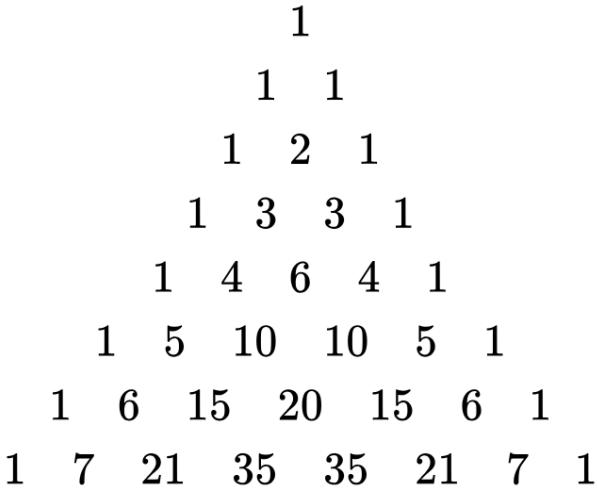
$$\begin{aligned} \binom{n-1}{k-1} + \binom{n-1}{k} &= \frac{(n-1)!}{(k-1)!(n-1-(k-1))!} + \frac{(n-1)!}{k!(n-1-k)!} \\ &= \frac{(n-1)!k}{k!(n-k)!} + \frac{(n-1)!(n-k)}{k!(n-k)!} \\ &= \frac{(n-1)!k + (n-1)!(n-k)}{k!(n-k)!} = \frac{(n-1)!n}{k!(n-k)!} \\ &= \frac{n!}{k!(n-k)!} = \binom{n}{k} \end{aligned}$$

som ønsket. ■

Punkt 1 forklarer, hvorfor koefficienterne begynder at gentage sig i udtryk på formen $(a+b)^n$. Dette sparer os for omkring halvdelen af beregningerne, når vi benytter binomialformlen. Punkt 2 er særdeles nyttig. Det er ikke svært at vise, at

$$\binom{n}{0} = 1 \quad \text{og} \quad \binom{n}{1} = n$$

for all $n \geq 0$. Ud fra disse to startværdier kan man beregne alle $\binom{n}{k}$ ved blot at bruge punkt 2 en masse gange. Ofte ser man binomialkoefficienter opstillet i en trekant kaldet Pascals trekant. Denne er illustreret herunder.



Figur .1: De første otte rækker af Pascals trekant. Figuren er fra [12].

Rækkerne i trekanten laves ved, at et tal er lig summen af de to tal fra rækken over, det står imellem. Første række er $\binom{0}{0}$, anden række er $\binom{1}{0}, \binom{1}{1}$, tredje række er $\binom{2}{0}, \binom{2}{1}, \binom{2}{2}$ osv. Bemærk, at række seks stemmer med det, vi regnede i eksemplet med $(a+b)^5$ ovenover.

Opgaver

- **Opgave A.1:**

Udregn følgende.

- 1) 5^4 .
- 2) 6^2 .
- 3) 7^3 .
- 4) $(-3)^4$.

- **Opgave A.2:**

Udregn følgende.

- 1) $2^3 \cdot 2^2$.
- 2) $((-4)^2)^2$.

- **Opgave A.3:**

Beregn $(-1)^n$ for $n = 0, 1, 2, 3, 4, 5$. Find en formel for $(-1)^n$ for et vilkårligt heltal n .

- **Opgave A.4:**

Udregn følgende.

- 1) $\sqrt[4]{81}$.
- 2) $\sqrt{36}$.
- 3) $\sqrt[5]{32}$.
- 4) $\sqrt[3]{-8}$.

- **Opgave A.5:**

Bevis punkt 2 i Lemma A.5.

- **Opgave A.6:**

Udregn følgende. Skriv svaret på hver opgave som en uforkortelig brøk.

$$\frac{1}{3} \cdot \frac{-2}{5}, \quad \frac{10}{4} \cdot \frac{5}{7} \quad \text{og} \quad \frac{-5}{6} \cdot \frac{9}{10}.$$

- **Opgave A.7:**

Udregn følgende. Skriv svaret på hver opgave som en uforkortelig brøk.

$$\frac{1}{3} + \frac{-2}{5}, \quad \frac{10}{4} + \frac{5}{7} \quad \text{og} \quad \frac{-5}{6} + \frac{9}{10}.$$

- **Opgave A.8:**

Udregn følgende. Skriv svaret på hver opgave som en uforkortelig brøk.

$$\frac{1/3}{-2/5}, \quad \frac{10/4}{5/7} \quad \text{og} \quad \frac{-5/6}{9/10}.$$

- **Opgave A.9:**

Bevis Lemma A.8.

- **Opgave A.10:**

Bevis de kvadratsætninger, vi ikke beviste i begyndelsen, nemlig

- 1) $(a - b)^2 = a^2 + b^2 - 2ab$ og

2) $(a + b)(a - b) = a^2 - b^2.$

- **Opgave A.11:**

Udregn følgende summer.

1)

$$\sum_{i=1}^5 (2i - 1).$$

2)

$$\sum_{i=0}^2 (i - 1)^2.$$

3)

$$\sum_{i=5}^7 i^2.$$

- **Opgave A.12:**

Udregn følgende produkter.

1)

$$\prod_{i=1}^3 i.$$

2)

$$\prod_{i=1}^4 2.$$

3)

$$\prod_{i=-5}^3 i^7.$$

- **Opgave A.13:**

- **Opgave A.14:**

Bevis ved at gange parenteserne ud, at

$$(a + b)^3 = a^3 + 3a^2b + 3ab^2 + b^3.$$

- **Opgave A.15:**

Du har seks bøger, der skal placeres på en hylde. Hvor mange rækkefølger kan du placere dem i? Hvad hvis du kun ønsker, at tre af bøgerne skal stå på hylden?

- **Opgave A.16:**

Du skal have tre film med til en filmaften. Du har i alt 10 film, du kan tage med. Hvor mange kombinationer af film kan du medbringe?

- **Opgave A.17:**

Bevis punkt 1 i Lemma A.24, nemlig at

$$\binom{n}{k} = \binom{n}{n-k}.$$

. APPENDIKS

Giv en kombinatorisk fortolkning af dette resultat.

•• **Opgave A.18:**

Bevis ved at bruge binomialformlen, at

$$(a + b)^4 = a^4 + 4a^3b + 6a^2b^2 + 4ab^3 + b^4.$$

B Ligninger og uligheder

Ligningsløsning, herunder første- og andengrads ligninger

Ganske ofte kan man komme ud for at løse en ligning på formen $ax + b = 0$, hvor $a \neq 0$ og b er et vilkårligt tal. Sådan en ligning kaldes en *førstegrads ligning*. Ligningen løses ved først at trække b fra på begge sider,

$$ax = -b.$$

Herefter kan vi (thi $a \neq 0$) dele med a på begge sider og få

$$x = -\frac{b}{a}.$$

Eksempel B.1. Lad os løse ligningen $5x + 2 = 8$ for x . Vi starter med at trække 8 fra på begge sider, så ligningen siger

$$5x - 6 = 0.$$

Dette er en førstegrads ligning som ovenover med $a = 5$ og $b = -6$. Dermed er løsningen givet ved $x = 6/5$. \circ

En mere interessant type ligning, som også er særdeles nyttig at mestre, er *andengradsligninger*. Det er ligninger på formen

$$ax^2 + bx + c = 0,$$

hvor $a \neq 0$ og b, c er faste tal. Løsningsformlen til denne ligning er berømt og er givet i følgende resultat.

Proposition B.2. *Betrægt andengrads ligningen*

$$ax^2 + bx + c = 0, \quad a \neq 0.$$

Definér diskriminanten $D = b^2 - 4ac$. Da gælder følgende.

(i) Hvis $D < 0$ findes ingen (reelle) løsning til ligningen.

(ii) Hvis $D = 0$ findes netop én løsning givet ved

$$x = -\frac{b}{2a}.$$

(iii) Hvis $D > 0$ findes to løsninger givet ved hhv.

$$x = \frac{-b + \sqrt{D}}{2a} \quad \text{og} \quad x = \frac{-b - \sqrt{D}}{2a}.$$

Skrevet kompakt kan vi sige, at ligningen har løsninger hvis og kun hvis $D \geq 0$, og i så fald er løsningerne givet ved

$$x = \frac{-b \pm \sqrt{D}}{2a}.$$

Bevis. Definér $f(x) = ax^2 + bx + c$. Lad os starte med at vise, at

$$f(x) = a \left(x + \frac{b}{a} x \right)^2 - \frac{D}{4a}.$$

Ved at gange og dividere med a i ledetet bx får vi

$$f(x) = a \left(x^2 + \frac{b}{a} x \right) + c = a \left(x^2 + 2 \frac{b}{2a} x \right) + c.$$

. APPENDIKS

Vi lægger nu leddet $a(b/2a)^2 = ab^2/4a^2$ til og trækker det fra igen³. Dette giver os

$$f(x) = a \left(x^2 + 2 \frac{b}{2a} x + \frac{b^2}{4a^2} \right) + c - a \frac{b^2}{4a^2}.$$

Udtrykket i parentesen genkender vi som en kvadratsætning, nemlig $(x + b/2a)^2$, så vi får

$$f(x) = a \left(x + \frac{b}{2a} \right)^2 + \frac{4ac - b^2}{4a} = a \left(x + \frac{b}{2a} \right)^2 - \frac{D}{4a}$$

som ønsket. Ligningen $ax^2 + bx + c = 0$ er identisk med $f(x) = 0$. Vi ser, at $f(x) = 0$ hvis og kun hvis

$$\left(x + \frac{b}{2a} \right)^2 = \frac{D}{4a^2}.$$

Vi deler nu op i tilfældene som i sætningen.

- (i) Antag $D < 0$. Da er højresiden strengt negativ, men venstresiden kan ikke være negativ uanset valget af x . Ergo findes ingen løsninger i dette tilfælde.
- (ii) Antag $D = 0$. Da er højresiden nul, så vi har ligningen

$$\left(x + \frac{b}{2a} \right)^2 = 0,$$

der åbenlyst har netop én løsning givet ved $x = -b/2a$.

- (iii) Antag $D > 0$. Da kan vi tage kvadratroden på begge sider og få

$$x + \frac{b}{2a} = \pm \frac{\sqrt{D}}{2a},$$

og ved at trække $b/2a$ fra på begge sider, får vi

$$x = \frac{-b \pm \sqrt{D}}{2a},$$

dvs. de to angivne løsninger som i sætningen. Denne formel ses også at gælde i tilfældet $D = 0$, og dermed er sætningen bevist.

■

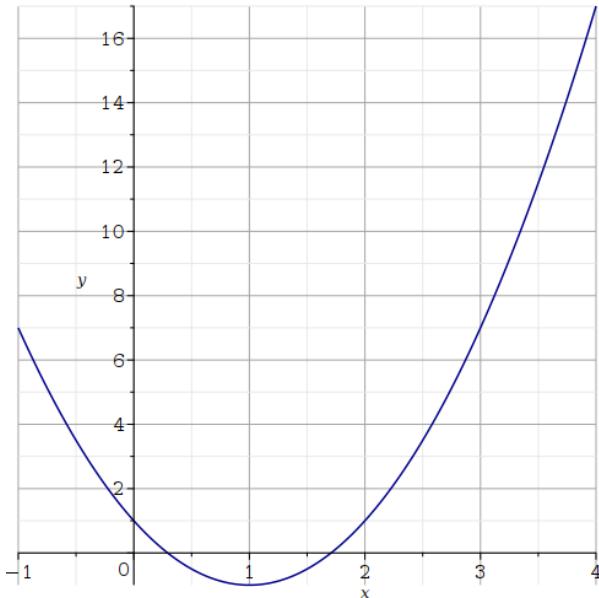
Bemærkning B.3. Det kritiske trin i beviset er den gode idé med at tilføje leddet $(b/2a)^2$, så vi kan genkende $(x+b/2a)^2$. Denne teknik kaldes på dansk at *fuldstændiggøre kvadratet* og på engelsk *completing the square*.

Eksempel B.4. Lad os undersøge ligningen $2x^2 - 4x + 1 = 0$. Diskriminanten er givet ved $D = (-4)^2 - 4 \cdot 2 \cdot 1 = 16 - 8 = 8 > 0$, og dermed er der to løsninger til ligningen. De er givet ved

$$x = \frac{4 \pm \sqrt{8}}{2 \cdot 2} = \frac{4 \pm 2\sqrt{2}}{4} = 1 \pm \frac{\sqrt{2}}{2}.$$

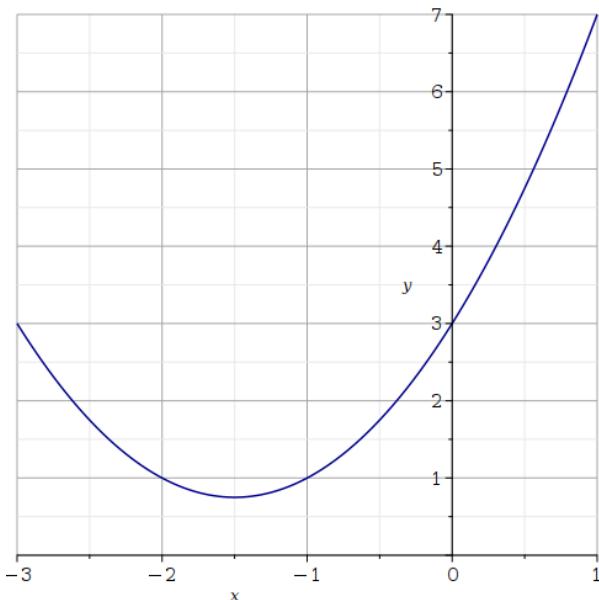
De to løsninger kan ses grafisk som skæringen med x -aksen for polynomiet $2x^2 - 4x + 1$. Dette er illustreret på figuren herunder.

³At lægge nul til på en smart måde er en overraskende brugbar teknik i mange matematikbeviser.

Figur .2: Polynomiet $2x^2 - 4x + 1$.

○

Eksempel B.5. Betragt nu ligningen $x^2 + 3x + 3 = 0$. Vi beregner diskriminanten til $D = 3^2 - 4 \cdot 1 \cdot 3 = 9 - 12 = -3 < 0$. Idet diskriminanten er negativ, findes ingen reelle løsninger til ligningen. Dette kan også ses, hvis man skitserer $x^2 + 3x + 3$ i et koordinatsystem.

Figur .3: Polynomiet $x^2 + 3x + 3$.

○

Nu er det naturligt at spørge sig selv, om man kan finde løsningsformler til tredegrads ligninger, fjerdegradsligninger og så videre. Det viser sig, at man kan finde en generel løsningsformel for tredje- og fjerdegradsligninger, men at det er umuligt for grad fem eller over! Vi præsenterer ikke løsningsformlerne til tredje- og fjerdegradspolynomier

. APPENDIKS

her. Den interesserende læser kan søge på hhv. *cubic equation* og *quartic equation*.

Inden vi forlader andengrads ligninger, præsenterer vi en alternativ metode, nemlig *faktorisering*. Faktorisering er en metode til at "nedbryde" et polynomium i et produkt af lavere grad. Vi starter med et eksempel.

Eksempel B.6. Vi ser på $x^2 - 4$. Ved at bruge kvadratsætningen $(a+b)(a-b) = a^2 - b^2$ baglæns, kan vi se, at

$$x^2 - 4 = (x+2)(x-2).$$

Vi har dermed faktoriseret $x^2 - 4$! Jævnfør nulreglen vil $x^2 - 4 = 0$ hvis og kun hvis enten $x+2 = 0$ eller $x-2 = 0$. Det betyder, at løsningerne til $x^2 - 4 = 0$ er $x = 2$ og $x = -2$. \circ

Generelt kan man faktorisere andengradspolynomier på formen $x^2 + bx + c$ på følgende måde, såfremt der findes rødder:

1. Find tal s og t , så $s+t = b$ og $st = c$.
2. Da er faktoriseringen givet ved

$$x^2 + bx + c = (x+s)(x+t).$$

Specielt må rødderne være $-s$ og $-t$.

Det er ikke svært at vise, at metoden er korrekt. Antag, at vi har bestemt tal s og t , så $s+t = b$ og $st = c$. Da har vi

$$(x+s)(x+t) = x^2 + xt + sx + st = x^2 + (s+t)x + st = x^2 + bx + c$$

ved at bruge kvadratsætningerne. Lad os gennemgå et eksempel på brugen af metoden.

Eksempel B.7. For at illustrere ovenstående metode ser vi på polynomiet $x^2 + 5x + 6$. Vi ser, at $2+3=4$ og $2 \cdot 3 = 6$. Dermed er faktoriseringen af polynomiet givet ved

$$x^2 + 5x + 6 = (x+2)(x+3).$$

Vi aflæser, at rødderne i polynomiet er -2 og -3 . \circ

Uligheder og absolutværdier

I har uden tvivl set uligheder før. Ikke desto mindre giver det mening at genopfriske regnereglerne for uligheder, da de har en tendens til at gå i glemmebogen. Vi starter fra bunden og genkalder, at vi skriver $a < b$, såfremt b er strengt større end a . F.eks. er $3 < 5$. Dog er det ikke sandt, at $3 < 3$. Hvis vi også ønsker at medtage tilfældet, hvor a kan være lig b , skriver vi $a \leq b$, og vi siger, at " a er mindre end eller lig b ".

Ligesom man kan løse ligninger med ligheder, kan man også "løse" ligninger, der involverer uligheder. Til det har man brug for regneregler. Vi har samlet de vigtigste herunder. Antag, at vi har $x \leq y$.

1. Vi kan lægge det samme tal til eller trække det samme tal fra på begge sider af uligheden:

$$x + a \leq y + a \quad \text{eller} \quad x - a \leq y - a.$$

2. Vi kan gange med det samme tal $a \neq 0$ på begge sider. Hvis $a > 0$, får vi

$$ax \leq ay.$$

Hvis $a < 0$ vender uligheden,

$$ax \geq ay.$$

3. De præcist samme regler gælder ved division. Hvis $a > 0$ har vi

$$\frac{x}{a} \leq \frac{y}{a},$$

og hvis $a < 0$ fås

$$\frac{x}{a} \geq \frac{y}{a}.$$

4. Hvis man "vender" brøken, skal man også tage sig i agt. Hvis $x \leq y$, da har vi

$$\frac{1}{x} \geq \frac{1}{y}.$$

Dette gælder, såfremt fortægnene for x og y er ens. Hvis $x < 0$, og $y > 0$, skal fortægnene **ikke** vendes!

Man kan måske i starten undre sig over, at uligheden vender ved multiplikation/division med negative tal. Men det giver god mening, hvis man tænker på multiplikation med et negativt tal som, at man spejler talaksen. Et eksempel illustrerer også, hvorfor det skal gælde. Vi ved, at $2 \leq 3$. Hvis vi ganger begge sider med -1 , skal vi have $-2 \geq -3$. Lad os se på reglerne for brøker. Vi har $2 \leq 3$, men $1/2 \geq 1/3$, så det giver mening, at uligheden vender. Ser vi på et eksempel med negative tal, $-3 \leq -2$, da skal vi have $-1/3 \geq -1/2$, og igen vender uligheden. Men hvis vi f.eks. betragter $-2 \leq 3$, da ser vi, at vi stadig har $-1/2 \leq 1/3$, så her vender uligheden ikke!

Lad os se nogle eksempler på, hvordan uligheder løses med ovenstående regneregler.

Eksempel B.8. Betragt uligheden

$$5x - 3 \leq 7.$$

Vi starter med at lægge 3 til på begge sider. Da får $5x \leq 10$. Vi deler nu med 5 på begge sider og får $x \leq 2$. Uligheden skal ikke vendes, da 5 er positivt. \circ

Eksempel B.9. Lad os se på uligheden

$$\frac{4}{3x+2} \leq \frac{2}{x}, \quad x \neq 0, -\frac{2}{3}.$$

Vi er nødt til at antage, at x ikke er 0 eller $-2/3$, da vi ellers ville divicere med nul. Vi starter med at vende brøken på hver side. Da skal vi huske at vende uligheden.

$$\frac{3x+2}{4} \geq \frac{x}{2}.$$

Vi ganger med 4 på begge sider og får

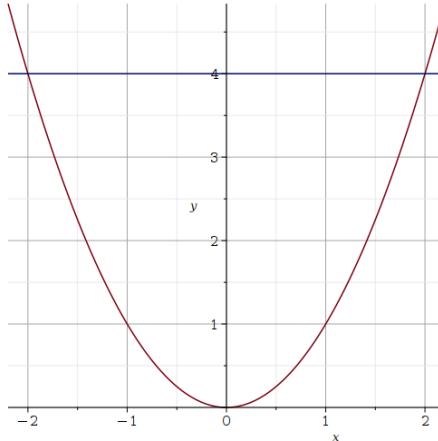
$$3x + 2 \geq 2x.$$

Vi trækker $2x$ fra på begge sider og får $x + 2 \geq 0$. Trækker vi 2 fra på begge sider, får vi løsningen

$$x \geq -2, \quad x \neq 0, -\frac{2}{3}.$$

\circ

Eksempel B.10. Et lidt drilsk eksempel er x^2 . Lad os undersøge uligheden $x^2 \leq 4$. Man kan fristes til at sige, at løsningen er $x \leq 2$, men det er ikke hele fortællingen. Når man sætter et tal i anden, forsvinder et eventuelt fortægn, og det er ikke svært at se, at f.eks. $x = -2$ også opfylder uligheden. Den fulde løsning til uligheden er $-2 \leq x \leq 2$. Dette ses lettest på nedenstående figur.



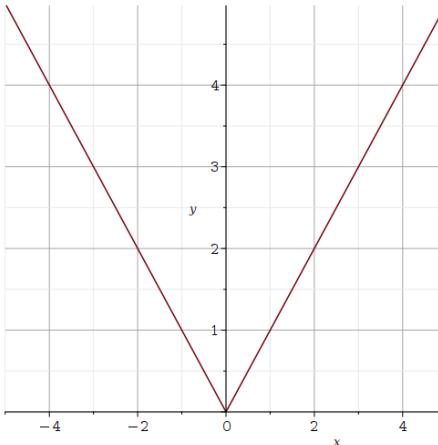
Figur .4: Funktionen x^2 (rød) og linjen $y = 4$ (blå). Det ses, at de x -værdier, som opfylder $x^2 \leq 4$, netop er $[-2, 2]$, dvs. $-2 \leq x \leq 2$.

○

Vi gennemgår nu absolutværdier. Absolutværdifunktionen $|\cdot|$ er defineret ved

$$|x| = \begin{cases} x, & x \geq 0 \\ -x, & x < 0 \end{cases}.$$

I ord: $|x|$ fjerner et eventuelt fortegn på x . Som eksempel er $|-3| = 3$, mens $|5| = 5$. Grafen for absolutværdifunktionen ser således ud.



Figur .5: Absolutværdifunktionen.

Absolutværdifunktionen kan være drilsk i forhold til uligheder. Men huskereglen er, at for $a \geq 0$ er $|x| \leq a$ det samme som $-a \leq x \leq a$. Dette ses let fra figuren ovenover. Der er dog en meget simpel ulighed, der viser sig at være uovertruffen i mange sammenhænge, nemlig *trekantsuligheden*.

Proposition B.11 (Trekantsuligheden). *For tal a og b gælder $|a + b| \leq |a| + |b|$.*

Bevis. Vi har $(a + b)^2 = a^2 + b^2 + 2ab$. Det holder klart, at $ab \leq |ab|$. Dermed har vi

$$(a + b)^2 \leq a^2 + b^2 + 2|ab| = (|a| + |b|)^2,$$

idet $|x|^2 = x^2$ for alle tal x . Ved at tage kvadratrødder, får vi $|a + b| \leq |a| + |b|$ som ønsket. ■

B. LIGNINGER OG ULIGHEDER

En anden smart ulighed fås ved at bruge trekantsuligheden på en snedig måde.

Korollar B.12 (Omvendt trekantsulighed). *For alle tal a og b gælder*

$$||a| - |b|| \leq |a - b|.$$

Bevis. Fra trekantsuligheden har vi $|a| = |a - b + b| \leq |a - b| + |b|$, hvilket omarrangeres til $|a| - |b| \leq |a - b|$. Laver vi samme trick med a og b byttet rundt, får vi tilsvarende $|b| - |a| \leq |a - b|$. Kombineres de to udsagn, fås det ønskede. ■

Opgaver

- **Opgave B.1:**

Find løsningen til følgende ligninger.

- 1) $2x + 4 = 0$.
- 2) $x + 7 = 0$.
- 3) $-4x + 19 = -1$.

- **Opgave B.2:**

For hver af følgende ligninger, bestem løsningerne eller vis, at der ikke findes en løsning.

- 1) $x^2 - 1 = 0$.
- 2) $2x^2 + 3x + 1 = 0$.
- 3) $5x^2 + 9x - 2 = 0$.
- 4) $x^2 + 2 = -2x$.

- **Opgave B.3:**

Løs følgende ligninger **uden** at bruge formlen til løsning af andengrads ligninger. Vink: Faktorisering.

- 1) $x^2 + x - 2 = 0$.
- 2) $x^2 + 4x + 4 = 0$.
- 3) $x^2 - x - 6 = 0$.
- 4) $x^2 + 6x + 8 = 0$.

- **Opgave B.4:**

Løs følgende uligheder.

- 1) $3x \leq 6$.
- 2) $4x - 7 \geq 5$.
- 3) $-2x \leq x + 8$.

- **Opgave B.5:**

Løs uligheden

$$-\frac{3}{x^2} \leq 6.$$

Her må vi selvfølgelig antage, at $x \neq 0$.

- **Opgave B.6:**

Overvej, hvordan reglerne 1. - 4. for uligheder ser ud for skarpe uligheder, dvs. hvis \leq erstattes af $<$ og så videre.

- **Opgave B.7:**

Løs uligheden

$$\frac{1}{2(1+x)} \leq 1-x,$$

når $x > -1$. Vink: Start med at gange med $1+x$ på begge sider og brug en kvadratsætning på højresiden. Skal uligheden vendes?

C Trigonometriske funktioner

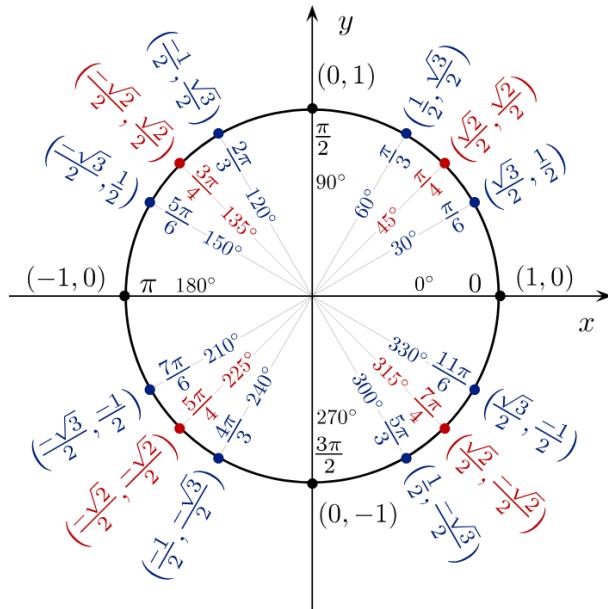
I denne sektion genkalder vi os de vigtige funktioner cosinus, sinus og tangens samt deres mest essentielle egenskaber. Før vi kan gøre dette, er vi dog nødt til at genintroducere enhedscirklen.

Enhedscirklen, radianer og grader

Enhedscirklen er blot cirklen med radius én omkring origo. Denne har omkreds 2π . Når I regner med vinkler, plejer I måske at bruge grader. Efter gymnasiet er det kutyme at benytte radianer. Der er 360° i en cirkel, og der er 2π radianer. Man omregner altså mellem de to som følger. Hvis v betegner en vinkel i grader, er vinklen i radianer givet ved

$$\frac{v}{360} \cdot 2\pi.$$

Idet omkredsen af enhedscirklen er 2π , er radianer en langt mere naturlig enhed, og vi vil i løbet af campen så vidt muligt holde os til radianer. I er meget velkomne til at benytte nedenstående figur til jeres beregninger.



Figur .6: Enhedscirklen med en række vinkler i både radianer og grader samt deres tilhørende koordinater. Figuren er fra [13].

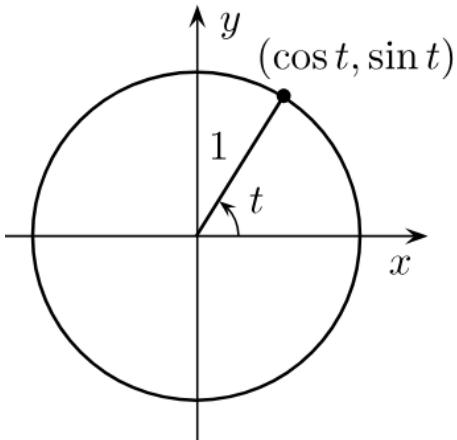
Cosinus, sinus og tangens

Med enhedscirklen og radianer på plads kan vi definere de vigtigste trigonometriske funktioner, nemlig cos og sinus.

Definition C.1. Hvis $C(t)$ betegner koordinaterne på enhedscirklen til vinklen t (målt i radianer), da definerer vi cos og sin som funktionerne, der opfylder

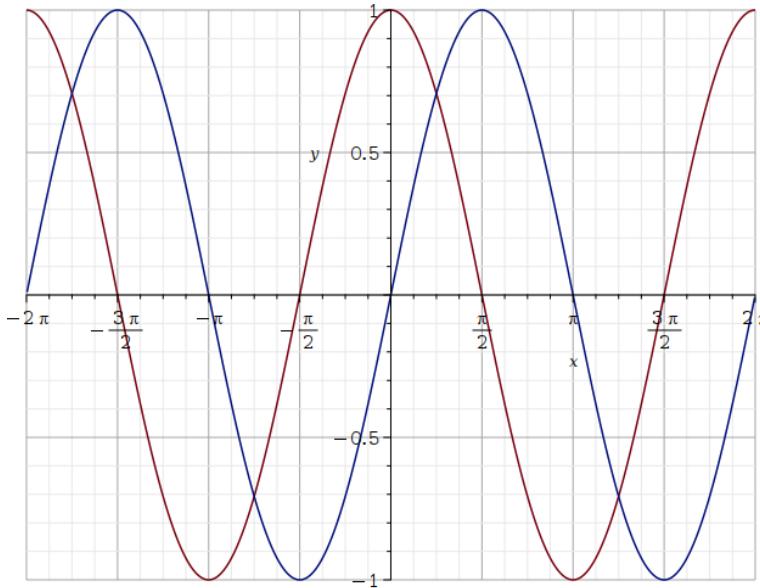
$$C(t) = (\cos(t), \sin(t)).$$

Definitionen af cosinus og sinus er illustreret herunder.



Figur .7: Funktionerne cosinus og sinus er defineret som hhv. x - og y -koordinatet for enhedscirklen til en givet vinkel. Figuren er fra [13].

Tegnet i et koordinatsystem ser cosinus og sinus ud som følger.



Figur .8: Cosinus og sinus tegnet i et koordinatsystem.

Vi kan allerede nu ved brug af enhedscirklen i starten af afsnittet fastlægge nogle værdier for cosinus og sinus. De ses i tabellen herunder.

Tabel .1: Nogle vigtige værdier for cosinus og sinus.

t	$\cos(t)$	$\sin(t)$
0	1	0
$\pi/6$	$\sqrt{3}/2$	$1/2$
$\pi/4$	$\sqrt{2}/2$	$\sqrt{2}/2$
$\pi/3$	$1/2$	$\sqrt{3}/2$
$\pi/2$	0	1
$2\pi/3$	$-1/2$	$\sqrt{3}/2$
$3\pi/4$	$-\sqrt{2}/2$	$\sqrt{2}/2$
$5\pi/6$	$-\sqrt{3}/2$	$1/2$
π	-1	0
$7\pi/6$	$-\sqrt{3}/2$	$-1/2$
$5\pi/4$	$-\sqrt{2}/2$	$-\sqrt{2}/2$
$4\pi/3$	$-1/2$	$-\sqrt{3}/2$
$3\pi/2$	0	-1
$5\pi/3$	$1/2$	$-\sqrt{3}/2$
$7\pi/4$	$\sqrt{2}/2$	$-\sqrt{2}/2$
$11\pi/6$	$\sqrt{3}/2$	$-1/2$

De følgende lemmaer opsummerer de vigtigste egenskaber for cosinus og sinus.

Lemma C.2 (Egenskaber for cosinus og sinus). *Vi har følgende.*

1. **Grundrelationen/idiotformlen:** For alle $t \in \mathbb{R}$ gælder

$$\cos(t)^2 + \sin(t)^2 = 1.$$

2. **2π -periodicitet:** For alle $t \in \mathbb{R}$ gælder

$$\cos(t + 2\pi) = \cos(t) \quad \text{og} \quad \sin(t + 2\pi) = \sin(t).$$

3. cos er en lige funktion, dvs. $\cos(t) = \cos(-t)$ for alle t .

4. sin er en ulige funktion, dvs. $\sin(-t) = -\sin(t)$ for alle t .

Bevis. For et givet $t \in \mathbb{R}$ er $\cos(t)$ og $\sin(t)$ de to kateter i en retvinklet trekant med en hypotenuse af længe ét. Dermed følger punkt 1 direkte fra Pythagoras. Punkt 2 følger direkte af, at værdierne t og $t + 2\pi$ udgør samme vinkel i enhedscirklen, da omkredsen af enhedscirklen er 2π . Punkt 3 og 4 følger af se på en tegning. Bytter man fortegn på t , forbliver x -koordinaten den samme, mens y koordinaten spejles, dvs. bytter fortegn. ■

De følgende formler, kaldet *additionsformlerne*, er særdeles vigtige. Et bevis er givet i afsnittet om komplekse tal.

Lemma C.3 (Additionsformlerne). *Vi har følgende resultater.*

$$\begin{aligned}\cos(x + y) &= \cos(x)\cos(y) - \sin(x)\sin(y), \\ \sin(x + y) &= \cos(x)\sin(y) + \sin(x)\cos(y).\end{aligned}$$

Ud fra additionsformlerne kan man vise forbløffende mange resultater. Et eksempel er givet i korollaret herunder, og endnu flere kan findes i opgaverne.

Korollar C.4. *Følgende dobbeltvinkelformler gælder.*

$$\begin{aligned}\cos(2x) &= \cos(x)^2 - \sin(x)^2, \\ \sin(2x) &= 2\cos(x)\sin(x).\end{aligned}$$

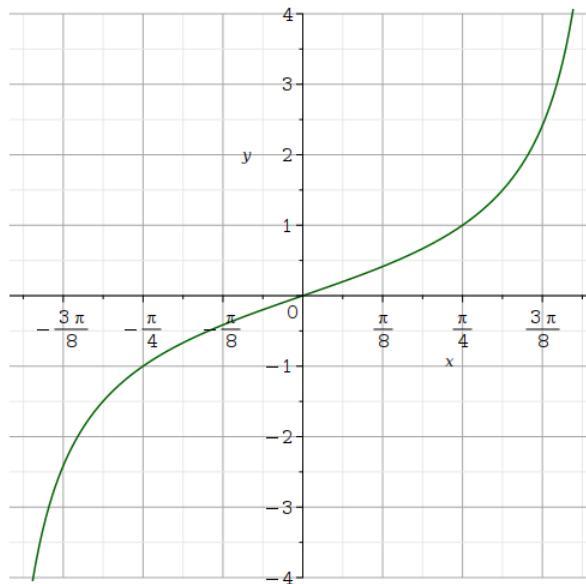
. APPENDIKS

Bevis. Overlades som øvelser til jer. ■

Lad os introducere den sidste trigonometriske funktion, nemlig tangens. Tangens er defineret til

$$\tan(x) = \frac{\sin(x)}{\cos(x)}, \quad x \in \left(-\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2}\right).$$

Bemærk, at tan i modsætning til cos og sin ikke er defineret på hele \mathbb{R} , men kun på et interval. Dette er for at undgå division med nul. Det er også værd at bemærke, at tan ikke er begrænset, i modsætning til cos og sin, som per definition ligger i $[-1, 1]$. tan er tegnet i et koordinatsystem herunder. Bemærk, hvordan funktionen går mod $-\infty$, som x nærmer sig $-\pi/2$ og ∞ , som x nærmer sig $\pi/2$.



Figur .9: Tangens tegnet i et koordinatsystem.

Fundamentale uligheder

Som det sidste vil vi se på nogle uligheder for trigonometriske funktioner. Disse er nyttige i flere henseender. Rent matematisk gør de det muligt at vise brugbare egenskaber såsom kontinuitet og differentiabilitet. Disse egenskaber gør det muligt at beregne cos og sin til arbitrer præcision, hvilket er en nødvendighed i utallige praktiske sammenhænge.

Vi starter med den trivuelle observation, vi også gjorde os tidligere, nemlig at cos og sin er opadbegrænset af 1 og nedadbegrænset af -1 ,

$$-1 \leq \cos(x) \leq 1 \quad \text{og} \quad -1 \leq \sin(x) \leq 1,$$

hvilket kompakt kan skrives som

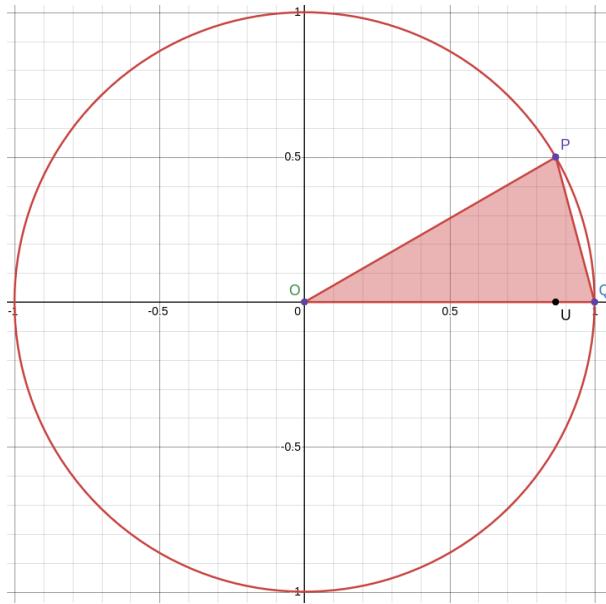
$$|\cos(x)| \leq 1 \quad \text{og} \quad |\sin(x)| \leq 1.$$

Hvis numeriske tegn og uligheder stadig er lidt mystiske, er det en god idé at læse de tidligere afsnit om disse koncepter en gang til. Vi starter med den vigtigste ulighed for sinus.

Lemma C.5. *For alle $x \in \mathbb{R}$ gælder, at*

$$|\sin(x)| \leq |x|.$$

Bevis. Bemærk, at uligheden er opfyldt for $x = 0$, da begge sider af uligheden da er nul. Antag nu, at $x \in (0, \pi/2)$, og betragt nedenstående tegning.



Figur .10: Figur til beviset for Lemma C.5.

Vi ser, at arealet af trekant OPQ er mindre en arealet af cirkelsegmentet specificeret af OPQ . Idet $\sin(x)$ er højden af trekanten, har trekanten areal $\sin(x)/2$. Cirkelsegmentets andel af omkredsen er $x/2\pi$, så cirkelsegmentets areal $x/2\pi \cdot \pi = x/2$. Dermed er

$$\frac{\sin(x)}{2} \leq \frac{x}{2},$$

som jo er $\sin(x) \leq x$. Idet $x \in (0, \pi/2)$, er begge sider positive, så vi kan uden problemer tilføje numeriske tegn, så $|\sin(x)| \leq |x|$. For $x \geq \pi/2$, har vi

$$|\sin(x)| \leq 1 \leq \frac{\pi}{2} \leq x = |x|.$$

Dermed gælder uligheden for alle $x \geq 0$. Antag nu, at $x < 0$. Da bruger vi, at sin er ulige og får

$$|\sin(x)| = |- \sin(-x)| = |\sin(-x)| \leq |-x| = |x|$$

ved at bruge, at $-x > 0$, og at sætningen allerede er vist for positive x . Dette konkluderer beviset. ■

Vi kan bruge denne ulighed til at give en ulighed for cosinus.

Korollar C.6. *Der gælder, at*

$$0 \leq 1 - \cos(x) \leq x^2 \quad \text{for } |x| < \frac{\pi}{2}.$$

Bevis. For $|x| < \pi/2$ er $\cos(x) > 0$, så $1 < 1 + \cos(x)$. Idet $1 - \cos(x) \geq 0$, er

$$1 - \cos(x) \leq (1 - \cos(x))(1 + \cos(x)) = 1 - \cos(x)^2 = \sin(x)^2 \leq x^2$$

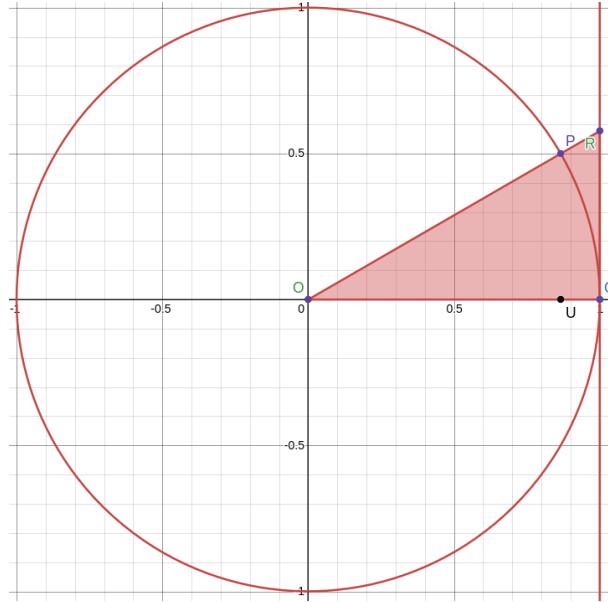
ved at bruge grundrelationen og forrige lemma. ■

Følgende ulighed er brugbar, når vi skal bestemme differentialkvotienten for cosinus og sinus.

Lemma C.7. *Der gælder, at*

$$x \cos(x) \leq \sin(x) \quad \text{for } x \in \left(0, \frac{\pi}{2}\right).$$

Bevis. Vi viser dette resultat på lignende facon som for lemmaet ovenover, men med en lidt modificeret tegning.



Figur .11: Figur til beviset for Lemma C.7.

Vi har tilføjet punktet R i skæringspunktet mellem linjen gennem O og P og den lodrette linje gennem Q . Bemærk nu, at trekantene OUP og OQR er lignedannede. Forholdet mellem kateterne i OUP er $\sin(x)/\cos(x) = \tan(x)$, mens den i OQR er $|QR|/1$, hvor $|QR|$ betegner afstanden mellem Q og R . Dermed er $|QR| = \tan(x)$, da forholdet mellem kateterne jo er ens. Trekant OQR har areal $\tan(x)/2$ og indeholder cirkelsegmentet, som vi tidligere fandt arealet for, nemlig $x/2$. Dermed er

$$\frac{x}{2} \leq \frac{\tan(x)}{2} \quad \text{for } x \in \left(0, \frac{\pi}{2}\right).$$

Gang igennem med to og del med $\cos(x)$ på begge sider for at opnå den ønskede ulighed. ■

Opgaver

• **Opgave C.1:**

Brug additionsformlerne på $\cos(\pi/2 - x)$ til at vise, at $\cos(\pi/4) = \sin(\pi/4)$.

• **Opgave C.2:**

Bevis dobbeltvinkelformlerne, korollar C.4. Vink: Brug additionsformlerne med $x = y$.

•• **Opgave C.3:**

Bevis følgende trippelvinkelformler.

$$\begin{aligned}\cos(3x) &= 4\cos(x)^3 - 3\cos(x), \\ \sin(3x) &= 3\sin(x) - 4\sin(x)^3.\end{aligned}$$

Vink: Brug dobbeltvinkelformlerne, korollar C.4, og brug additionsformlerne med $y = 2x$.

••• **Opgave C.4:**

Bevis følgende formler.

$$\cos(4x) = 8\cos(x)^4 - 8\cos(x)^2 + 1, \quad \sin(4x) = 4\sin(x)\cos(x) - 8\sin(x)^3\cos(x).$$

Vink: Strategien er mere af det samme som i de to forrige opgaver.

D Logaritmer, potensfunktioner og eksponentialfunktionen

Grundlæggende definitioner

Logaritmer er en type funktioner, der benyttes flittigt i mange forskellige discipliner. I datalogi benyttes logaritmen med base to til at beskrive køretider for algoritmer, og i kemi bruges logaritmen med base 10 til at definere pH. Lad os definere logaritmefunktionen.

Definition D.1. Lad $a > 0$ være et tal, kaldet *grundtallet* eller *basen*. Vi definerer *logaritmen med base a* \log_a på følgende vis. For $x > 0$ er $\log_a(x)$ lig det tal, som opfylder $x = a^{\log_a(x)}$ ⁴.

Definitionen forstås bedst med en række eksempler.

Eksempel D.2. Vi har $\log_2(8) = 3$, idet $2^3 = 8$. Her er $a = 2$ og $x = 8$. Vi har $\log_{10}(100) = 2$, idet $100 = 10^2$. ○

Bemærk i øvrigt, at $\log_a(1) = 0$ uanset grundtallet a (overvej hvorfor). Man kan også tænke på \log_a som den inverse funktion af potensfunktionen a^x på $(0, \infty)$. Vi har nemlig per definition, at

$$a^{\log_a(x)} = x, \quad x > 0 \quad \text{og} \quad \log_a(a^x) = x, \quad x \in \mathbb{R}.$$

Logaritmer har en række brugbare regneregler, vi nu præsenterer.

Lemma D.3. Lad $a > 0$ være et grundtal, $x, y > 0$ og b et vilkårligt tal. Da gælder følgende.

1. $\log_a(xy) = \log_a(x) + \log_a(y)$.
2. $\log_a(x^b) = b \log_a(x)$.
3. $\log_a(1/x) = -\log_a(x)$.

Bevis. Ift. punkt 1, så har vi

$$a^{\log_a(x)+\log_a(y)} = a^{\log_a(x)}a^{\log_a(y)} = xy,$$

så $\log_a(x) + \log_a(y)$ har samme egenskab som tallet $\log_a(xy)$, og dermed må disse tal være ens. Punkt 2 bevises tilsvarende. Vi har

$$a^{b \log_a(x)} = \left(a^{\log_a(x)}\right)^b = x^b,$$

så $b \log_a(x)$ opfylder samme egenskab som $\log_a(x^b)$, og dermed er de to tal ens som ønsket. Punkt 3 følger direkte fra punkt 1, idet

$$0 = \log_a(1) = \log_a\left(x \frac{1}{x}\right) = \log_a(x) + \log_a\left(\frac{1}{x}\right).$$

Træk nu $\log_a(x)$ fra på begge sider for at få det ønskede. ■

Bemærkning D.4. Man kunne håbe, at der også fandtes en pæn regneregel for $\log_a(x+y)$. Dette er **ikke** tilfældet! Som et simpelt modeksempel har vi

$$\log_2(1) + \log_2(1) = 0 + 0 = 0 \neq 1 = \log_2(2).$$

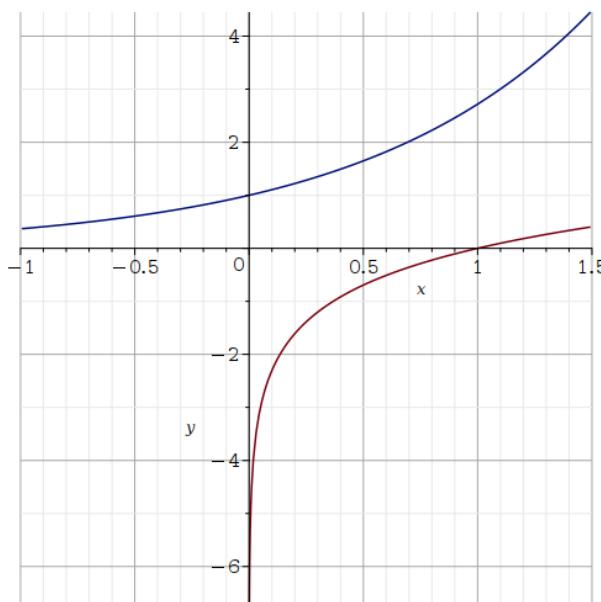
⁴Bemærk, at denne løsning eksisterer og er unik, idet funktionen a^x er strengt voksende.

D. LOGARITMER, POTENSFUNKTIONER OG EKSPONENTIALFUNKTIONEN

For matematikere er der et grundtal, der er særlig pænt, nemlig Eulers tal e . Der er flere måder at definere e . Én mulighed er som en grænseværdi, nemlig

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \left(1 + \frac{1}{n}\right)^n,$$

hvilket skal læses som værdien, udtrykket $(1 + 1/n)^n$ nærmer sig, som n bliver arbitraert stor. Numerisk viser det sig, at $e \approx 2.718$. Man kan også vise, at e er irrationalt, dvs. at e ikke kan skrives som en brøk af heltal. Logaritmen med grundtal e , betegnet \log_e , er så pæn, at matematikere foretrækker at bruge den. Faktisk er det også typisk, at matematikere blot skriver \log eller \ln i stedet for \log_e (I er muligvis vant til notationen \ln). Denne logaritme omtales som *den naturlige logaritme*. Den inverse funktion til \ln , nemlig e^x , kaldes *eksponentialfunktionen*. Eksponentialfunktionen og den naturlige logaritme er tegnet ind herunder.



Figur .12: Eksponentialfunktionen (blå) og den naturlige logaritme (rød).

Ligningsløsning og fundamentale uligheder

Logaritmer er enormt brugbare til at løse visse typer ligninger, specifikt dem, der involverer udtryk på formen a^x . Vi demonstrerer gennem en række eksempler. Flere eksempler kan findes i opgaverne herunder.

Eksempel D.5. Lad os løse ligningen

$$4 \cdot 7^x = 1.$$

Vi starter med at tage \log_7 på begge sider, hvilket giver

$$\log_7(4) + x = 0,$$

hvor vi også har brugt regnereglerne for logaritmer. Omarrangerer vi, fås $x = -\log_7(4) \approx -0.7124$.

Eksempel D.6. Vi løser ligningen

$$2 \ln(x) - 7 = 0.$$

Vi starter med at lægge syv til på begge sider og dele med to,

$$2 \ln(x) = 7 \Leftrightarrow \ln(x) = \frac{7}{2}.$$

Vi tager nu eksponentialfunktionen på begge sider og får

$$x = e^{7/2}.$$

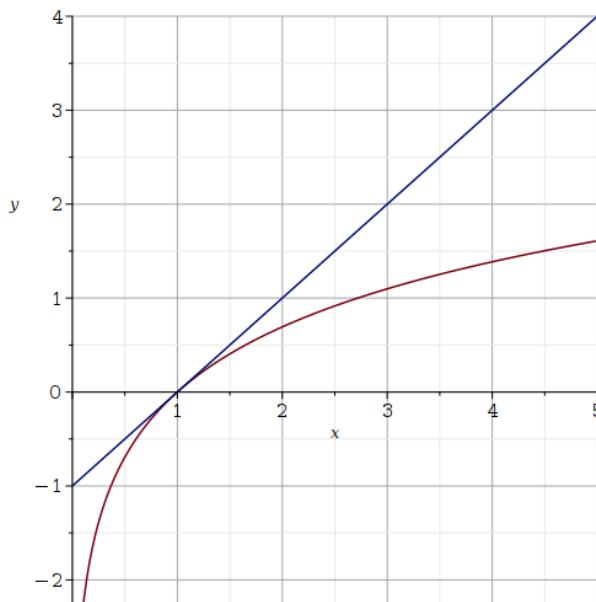
○

Vi slutter dette kapitel af med at omtale nogle fundamentale uligheder for den naturlige logaritme og eksponentialfunktionen. Det viser sig, at den naturlige logaritme \ln opfylder følgende ulighed, som vi ikke går mere i dybden med (omend vi kommer til at benytte den i flere sammenhænge).

Sætning D.7. *For alle $x > 0$ gælder*

$$\ln(x) \leq x - 1.$$

Vi bemærker, at vi faktisk har lighed for $x = 1$. Uligheden kan ses, hvis man tegner de to funktioner \ln og $x - 1$ ind i samme koordinatsystem.



Figur .13: Illustration af uligheden $\ln(x) \leq x - 1$, som gælder for $x > 0$. Den røde funktion er \ln og den blå $x - 1$.

Vi kan bruge uligheden $\ln(x) \leq x - 1$ til at vise en ulighed, der vender den anden vej som følger.

Korollar D.8. *For $x > 0$ opfylder den naturlige logaritme, at*

$$\ln(x) \geq \frac{x-1}{x}.$$

Bevis. For $x > 0$ har vi

$$-\ln(x) = \ln\left(\frac{1}{x}\right) \leq \frac{1}{x} - 1 = \frac{1-x}{x}$$

ved blot at bruge sætningen ovenover med $1/x$ i stedet for x . Gang nu med -1 på begge sider for at få det ønskede. Husk, at uligheden vender, thi -1 er negativ. ■

D. LOGARITMER, POTENSFUNKTIONER OG EKSPONENTIALFUNKTIONEN

Vi har nu to uligheder for den naturlige logaritme, nemlig

$$\frac{x-1}{x} \leq \ln(x) \leq x-1, \quad x > 0.$$

Vi kan benytte disse to uligheder til at få to uligheder for eksponentialfunktionen.

Lemma D.9. *Eksponentialfunktionen opfylder, at*

$$e^x \geq 1+x \quad \text{for } x \in \mathbb{R}$$

og

$$e^x \leq \frac{1}{1-x} \quad \text{for } x < 1.$$

Bevis. Vi viser den første ulighed. Lad $x \in \mathbb{R}$. $e^x > 0$ for alle $x \in \mathbb{R}$, så vi kan benytte uligheden $\ln(x) \leq x-1$ for $x > 0$ med e^x i stedet for x og få

$$\ln(e^x) \leq e^x - 1.$$

Venstresiden er lig x . Omarrangering giver nu $1+x \leq e^x$ som ønsket. Vi kan nu bruge denne ulighed (som jo er vist for alle $x \in \mathbb{R}$) til at få

$$e^{-x} \geq 1-x.$$

Husk nu, at

$$e^{-x} = \frac{1}{e^x},$$

og dermed har vi

$$\frac{1}{e^x} \geq 1-x.$$

Hvis nu $x < 1$, er fortegnene de samme på venstre og højre side, nemlig positive. Dermed kan vi vende brøken på begge sider og vende uligheden og få

$$e^x \leq \frac{1}{1-x}.$$

Dermed er beviset færdigt. ■

Følgende korollar giver en begrænsning på e ud fra ovenstående uligheder.

Korollar D.10. *Vi har $2 \leq e \leq 4$.*

Bevis. Brug anden ulighed fra ovenstående lemma med $x = 1/2$. Da har vi

$$e^{1/2} \leq \frac{1}{1-\frac{1}{2}} = 2,$$

og kvadreres dette, fås $e \leq 4$ som ønsket. $e \geq 2$ følger direkte fra første ulighed ved at sætte $x = 1$. ■

Opgaver

• **Opgave D.1:**

Beregn følgende.

- 1) $\log_4(16)$.
- 2) $\log_3(81)$.
- 3) $\log_5(125)$.
- 4) $\log_{10}(0.01)$.

•• **Opgave D.2:**

Brug logaritmeregneregler til at vise, at

$$\log_2(76) = 2 + \log_2(19).$$

•• **Opgave D.3:**

Løs følgende ligninger.

- 1) $2 \cdot 5^x = 3$.
- 2) $7^x = 9^x$.
- 3) $3 \cdot 4^x = 5 \cdot 6^x$.

••• **Opgave D.4:**

Løs ligningen

$$9^x + 3^x - 1 = 0.$$

Vink: Bemærk, at $(3^x)^2 = 9^x$. Genkend herudfra en andengrads ligning.

Indeks

- ABC-kriteriet, 112
- absolutværdi, 326
- Adams lov, 55
- additionsformlerne, 331
- additiv invers, 71
- afledt
 - eksponentialfunktion, 6
 - logaritmen, 6
 - polynomium, 5
- afleddt:funktion, 4
- afleddt:trigonometriske funktioner, 6
- afpareringsstrategi, 14
- akkumuleringsfaktor, 288
- analysens fundamentalsætning, 27
- analytisk løsning, 169
- andengradsligning, 321
- andenordens differentialligning, 183
- Archimedes' spiral, 106
- associativitet, 71, 73
- baglæns metode (livsforsikring), 292
- Bayes regel, 42
 - for fordelinger, 53
- Bayes sætning, 42
 - for fordelinger, 53
- begivenhed, 40
- Bernoullifordeling, 58
- betalingsstrøm, 287
- beting og bland ud, 55
- betinget fordeling, 52
- betinget middelværdi, 54
 - givet en variabel, 54
- betinget sandsynlighed, 41
- betinget tæthed, 52
- betinget varians, 62
- binomialfordelingen, 63
- binomialformlen, 316
- binomialkoefficient, 315
- blandinsfordeling, 62
- brøk, 312
- cash flow, 293
- Cauchy-multiplikation, 278
- centraliseret moment, 48
- Clairauts sætning, 109
- codomæne, 103
- competing risks-modellen, 283, 291
- completing the square, 322
- cosinus, 329
- Crout's faktorisering, 102
- de Moivres formel, 131
- definitionsmængde, 103
- den naturlige logaritme, 337
- determinant, 74
- diagonaliserbar, 88
- diagonalisering, 85, 89
- diagonalmatrix, 85, 88
- differenskvotient, 2
- differentialkvotient, 2, 4
- differentialligning, 169
- dilogaritmefunktionen, 207
- diskonteringsfaktor, 180, 288
- diskret uniform fordeling, 66
- diskriminant, 321
- distributiv lov, 73
- dobbeltvinkelformler, 331
- domæne, 103
- Doolittle's faktorisering, 102
- dødelighedsintensitet, 179, 281
- dødelighedsintensiteten, 283
- dødelighedsrate, 179, 281
- dødelighedsraten, 283
- egenvektor, 85
- egenværdi, 85
- eksponentialfordelingen, 46
 - rate, 46
- eksponentialfunktionen, 337
- ellipse, 106
- enhedscirkel, 106
- enhedscirklen, 329
- Eulers identitet, 131
- Eulers metode, 204
- Eve's law, 63
- faktorisering, 324
- fakultetsfunktionen, 315
- fejllede, 191
- fordelingsfunktion, 43
 - i flere variable, 51
- foreningsmængde, 40

- forkort en brøk, 312
- forlænge en brøk, 312
- forlæns metode (livsforsikring), 292
- fuldstændig løsning, 169
- fuldstændiggøre kvadratet, 322
- funktionalmatrix, 109
- fællesmængde, 40
- førstegrads ligning, 321
- førsteordens differentialligning, 176
- gammafordelingen, 64
- gammafunktionen, 64
- Gauss-elimination, 78
- generaliseret harmonisk tal, 65
- geometrisk fordeling, 59
- Gompertz-Makeham-fordelingen, 283
- grader, 329
- gradient, 110
- grundrelationen, 331
- grænseværdi, 2, 14
- gøre prøve, 170
- helix, 107
- Hessematrix, 112
- Heuns metode, 205
- homogen differentialligning, 183
- hyperbolsk cosinus, 20
- hyperbolsk sinus, 20
- hyperbolsk tangens, 20
- hyperbolske funktioner, 20
- hændelse, 40
- højrekontinuitet, 44
- idempotent matrix, 102
- identitetsafbildning, 73
- identitetsmatricen, 70
- idiotformlen, 331
- indikatorfunktion, 52, 61
- indskudsreglen, 28, 36
- induktion, 120
- integraltegn, 22
- intensitet, 279, 282
- interpolation, 194
 - Lagrangeform, 194
- Interpolationssætningen, 195
- invalidemodellen
 - med reaktivering, 282, 299
 - uden reaktivering, 281, 287, 288, 290
- invertibel matrix, 74
- Jacobimatrix, 109
- karakteristisk polynomium, 86, 183
- kardinalpolynomium, 194
- kartetiske koordinater, 113
- klemmelemmaet, 21
- klumpbetaling, 179
- Kolmogorovs differentialligninger, 281
- kombination, 315
- kommutativitet, 71
- komplekse tal, 126
 - argument, 130
 - eksponentialform, 132
 - imaginærdel, 126
 - konjugeret, 128
 - modulus, 128
 - polarform, 130
 - realdel, 126
- komplement (af en mængde), 40
- konditionering, 196
- kovarians, 60
- kubiksætningen, 314
- kvadratisk form, 101
- kvadratisk matrix, 69
- kvadratsætningerne, 313
- kvotientregel, 8
- kædereglen, 9
- L'Hospitals regel, 10
- Laplace-udvikling, 83
- Leibniz' regel, 32
- linearitet
 - for integraler, 27, 36
 - for middelværdier, 48
 - for stamfunktioner, 36
- lineær afbildning, 69
- lineær differentialligning, 176
- lineær model, 55
- lineært ligningssystem, 73, 75
- liv-død-modellen, 281, 288, 289
- logaritme, 336
 - basen, 336
 - grundtal, 336
- lognormalfordelingen, 64
- lokalt maksimum, 111
- lokalt minimum, 111
- loven om itererede middelværdier, 55
- Loven om total middelværdi, 55
- loven om total varians, 63
- LU-faktorisering, 102
- Markovegenskaben, 279
- Markovkæde, 279
- Markovproces, 279
- matrix, 69
 - indgang, 69
- matrix-matrixmultiplikation, 72
- matrix-vektorprodukt, 71
- matrixekspontialet, 274
- matrixfunktion, 272
- mean squared error, 60
- middelværdi, 47

middelværdisætningen, 34
mixture distribution, 62
moment, 48
mængdedifferens, 40

negativ binomialfordeling, 65
neutralelement, 71, 73
Newton–Cotes-formel, 197
Newtons metode, 196
nilpotent matrix, 101
normalfordelingen, 45
nulvektor, 70
numerisk differentiation, 191
numerisk integration, 196
numerisk løsning, 190
numerisk metode, 190
nævner, 312

O-notation, 189
ODE, 203
omvendt trekantsulighed, 327
ordinære differentialligninger, 203
ortogonal matrix, 101
ortogonale vektorer, 93
overgangsintensitet, 279
overgangsmatrix, 279
overgangssandsynlighed, 279

panserformlen, 176
panserformlen med randbetingelse, 178
parametriseret kurve, 104
Paretofordeling, 59
partiel integration, 25, 31, 36
partiel reserve, 297
 prospektiv, 298
partielt afledt, 108
 højere orden, 109
partikulær løsning, 169
Pascals regel, 316
Pascals trekant, 316
Peanorepræsentation, 273
permutation, 315
Poissonfordeling, 50
polære koordinater, 113
populationstilvækst, 175
potens, 311
prikkprodukt, 72, 93
produktintegral, 272
produktregel for matricer, 272
produktreglen, 7
præmie (forsikring), 179, 287

radianer, 329
randbetingelse, 169
randpunkt, 111
ratepension, 181
reduceret echelonform, 77

ren oplevelsesforsikring, 180
rente, 179, 288
rentesensitivitet, 292
reserve, 289
reserve (livsforsikring), 179
restlevetid, 282
reward matrix, 296
Richardson-ekstrapolation, 193
rod, 311
rotationsinvariant, 115
rotationsmatrix, 92
Runge–Kutta, 205
 andenorden, 205
 fjerdeordens, 206
 tredjeordens, 209

saddelpunkt, 112
sandsynlighed, 41
sekant, 1
separation af variable, 172
sinus, 329
skalarprodukt, 72, 93
skaleringsmatrix, 92
snippet (af mængder), 40
sporet (af en matrix), 90
spredning, 48
stamfunktion, 22
 trigonometriske funktioner, 23
stamfunktion:proposition, 23
standardnormalfordelingen, 45
startbetingelse, 169
stokastisk proces, 279
stokastisk variabel, 43
 diskret, 43
 kontinuert, 43
støjvariabel, 55
størrelsesorden, 189
substitution, 24, 31, 36
symmetrisk matrix, 91

Taylorpolynomium, 119
 udviklingspunkt, 119
Taylors formel med restled, 122
Thieles differentialligninger, 289
 partielle reserver, 299
tidshomogen Markovkæde, 279
tilstandsrum (for en Markovkæde), 287
totalmatrix, 77
transponeret matrix, 91
Trapezmetoden, 197
Trapezreglen, 197
trekantsuligheden, 326
triangulær matrix, 102
trigonometriske funktioner, 329
træppelvinkelformler, 335
trunkeringsfejl, 191

tværvektor, 93
tårnegenskaben, 55
tæller, 312
tæthed
 i flere variable, 51
tæthed (for en stokastisk variabel), 44

uafhængighed, 42
 for stokastiske variable, 53
udfald, 40
udfaldsrum, 40
uegentligt integral, 29
uforkortelig brøk, 312
ulighed, 324
uniform fordeling, 44, 60
 i to dimensioner, 51

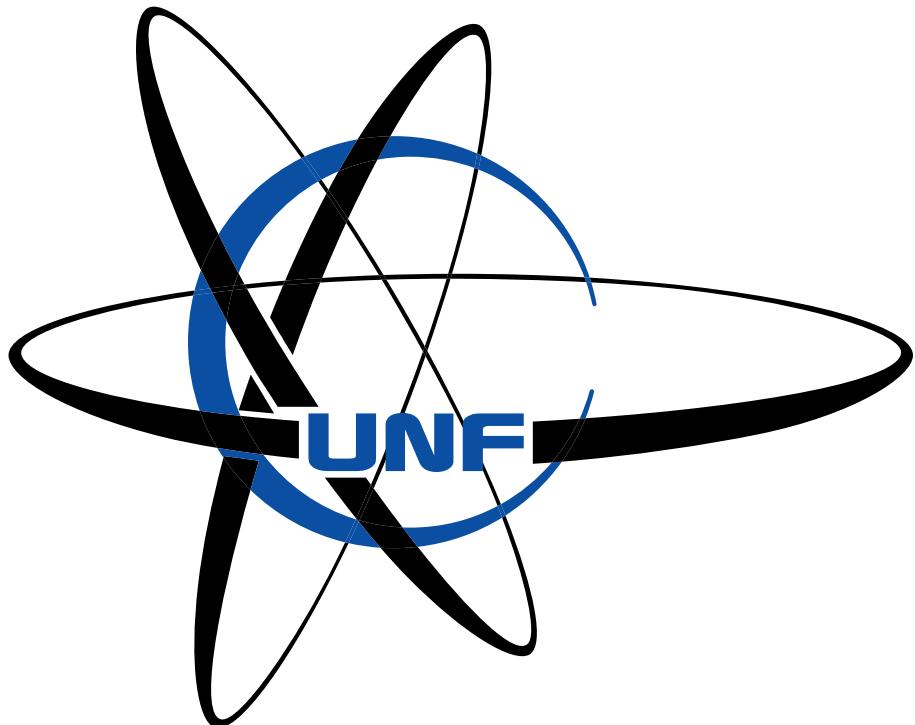
Van Loans sætning, 276
Vandermondematrix, 194
Vandermondemetoden, 194
varians, 48

vektor, 67
 indgang, 67
vektorfunktion, 104
 fart, 110
 hastighedsvektor, 110
 koordinatfunktion, 104
 parameter, 104
vektorrum, 69
venstrekontinuert, 44

ydelse (forsikring), 287
ydelsesmatrix, 296

Zipf-fordelingen, 65

ægtefællemodellen, 285
 reduceret, 285
ækvivalensprincip, 181
ækvivalensprincippet, 290
ækvivalenspræmien, 290
ækvivalensydelser, 290



Ungdommens Naturvidenskabelige Forening

Ungdommens Naturvidenskabelige Forening (UNF) har til formål at fremme kendskabet til og interessen for naturvidenskab og teknologi fortrinsvis blandt unge.

Formålet realiseres ved at arrangere foredrag, studiebesøg, workshops, offentlige events og ikke mindst ScienceCamps! Målgruppen er især elever ved ungdomsuddannelserne, men i de seneste år er der også kommet fokus på folkeskolens ældste klasser. Mens især ScienceCamps altid har en veldefineret målgruppe, er de øvrige aktiviteter normalt åbne for alle.

På landsplan har vi over 15.000 deltagere, der hvert år har glæde af mere end 170 spændende arrangementer.

Det hele organiseres af over 300 frivillige unge, primært universitetsstuderende og gymnasieelever, som brænder for at dele deres glæde ved naturvidenskaben. De frivillige i foreningen planlægger og afholder aktivitetene, og de, der har lyst, er også med til selv at undervise og formidle naturvidenskaben. Det frivillige arbejde i UNF er kompetence-givende i flere sammenhænge, og samtidigt giver det et godt netværk på tværs af hele landet.

Foreningens rødder strækker sig helt tilbage til H. C. Ørsted, som i 1824 stiftede SNU - Selskabet for Naturlærerns Udbredelse. UNF så dagens lys i 1944, da en gruppe gymnasieelærere fra SNU ønskede at fokusere udelukkende på unge. Stiftelsen af landsforeningen, UNF Danmark, i 2002 samlede de fire lokalforeninger i Aalborg, København, Odense og Aarhus og muliggjorde blandt andet afholdelsen af ScienceCamps og andre landsdækkende arrangementer.

I april 2005 blev Hennes Kongelige Højhed Kronprinsesse Mary protektor for UNF. Vi er meget beærede og taknemmelige for den anerkendelse, der ligger i vores protektorat. Det er UNF's håb, at det kongelige protektorat kan hjælpe os i vores virke for at fremme de naturvidenskabelige og tekniske discipliner i Danmark.

Tuborgfondet

Tuborgfondet støtter unge og organisationer, der som os styrker ungdommens muligheder for sammen at udleve deres drømme og handlekraft til gavn for samfundet og dansk erhvervsliv.

**TUBORG
FONDET**

Dansk Ungdoms Fællesråd - DUF

DUFs lokalforeningspulje støtter de lokale foreningers arbejde for børn og unge i Danmark og Sydslesvig. Puljen kan søges af lokalforeninger og lokale grupper i DUFs medlemsorganisationer og observatørorganisationer.



**DANSK
UNGDOMS
FÆLLESRÅD**



Jane
Street

