

IN-KJM1900 — Forelesning 2

Simen Kvaal

Onsdag 22/11/2017

- 1 Beskjeder og litt av hvert
 - Beskjeder
- 2 Litt om numeriske feil og eksempelberegningene
- 3 Litt om eksamen
- 4 Ønsketema: Eulers metode
- 5 Ønsketema: plotting av data fra KJM1140

- 1 Beskjeder og litt av hvert
 - Beskjeder
- 2 Litt om numeriske feil og eksempelberegningene
- 3 Litt om eksamen
- 4 Ønsketema: Eulers metode
- 5 Ønsketema: plotting av data fra KJM1140

- 1 Beskjeder og litt av hvert
 - Beskjeder
- 2 Litt om numeriske feil og eksempelberegningene
- 3 Litt om eksamen
- 4 Ønsketema: Eulers metode
- 5 Ønsketema: plotting av data fra KJM1140

- 1 Det snek seg inn en trykkfeil i oppgave 6b, vedr. konstanten K_H . Den er nå fikset.

Last ned siste versjon!

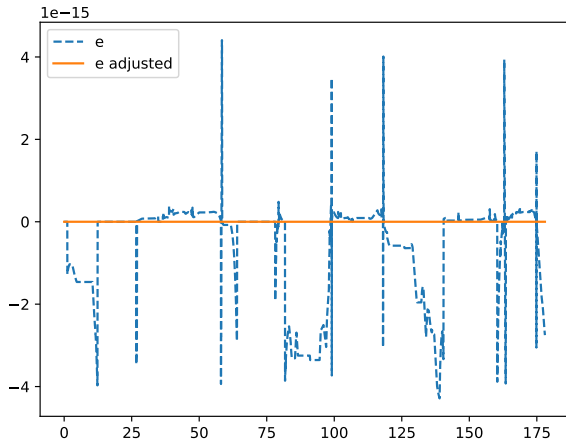
- 1 Frist for del II: Fredag 1. desember 23:59.
- 2 Husk: Samretting er heretter i Vilhelm Bjerknes, IT-aud 3
- 3 Bruk samrettingen og gruppetimene!
- 4 Vanlige feilmeldinger, tips fra gruppelærerne: `feilmeldinger.py` på kurssiden
- 5 Notat om fremgangsmåte fra gruppelærerne: `prosjekt_del_2_1.rtf`
- 6 Alle hjelpefiler ligger/blir lagt ut i mappen med prosjektoppgave på emnesiden

- 1 Beskjeder og litt av hvert
 - Beskjeder
- 2 Litt om numeriske feil og eksempelberegningene
- 3 Litt om eksamen
- 4 Ønsketema: Eulers metode
- 5 Ønsketema: plotting av data fra KJM1140

- Numeriske feil er ofte små
- Ørsmå ulikheter i implementering kan gi konsekvenser for feilen!
- Eksempel: rekkefølgen på addisjon, valg av toleranseparameter, ...
- Bugs/features i forelesers kode
- Det vil være forskjeller i manges plott sammenliknet med eksempelberegningene
- Slike plott er sjelden direkte sammenliknbare
- Det viktige er at det er små tall

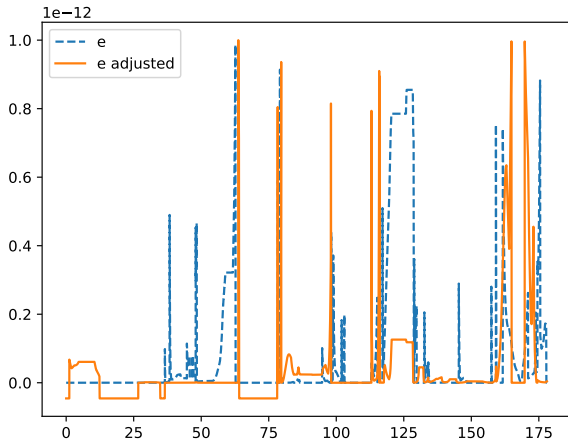
Gammelt plott av elektronøytralitet

Opprinnelig eksempelberegning, vist i forelesning:



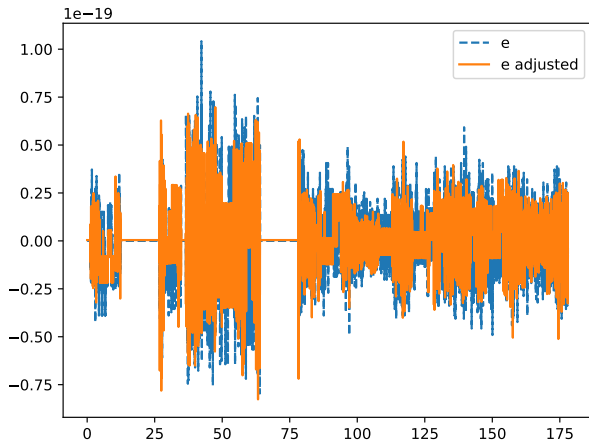
Oppdatert plott av elektronøytralitet

Her er en funksjon oppdatert:



Nok et plott dere kan få

Her er Newtons metode re-implementert:



- Alle plottene ville blitt akseptert!
- **Viktig!** Ulikheter i plott kan *bare regnes med* når vi plotter numeriske feil – dvs noe som i praksis er støy
- Alle andre plott i denne oppgaven har mye mindre rom for variasjon.

- 1 Beskjeder og litt av hvert
 - Beskjeder
- 2 Litt om numeriske feil og eksempelberegningene
- 3 Litt om eksamen
- 4 Ønsketema: Eulers metode
- 5 Ønsketema: plotting av data fra KJM1140

- Skriftlig eksamen
- Hele pensum testes: fellesdel og kjemidel
- Dere kan **for eksempel** bli testet i: birkenesmodellen, Newtons metode, Eulers metode, numeriske feil, lesing av fil, dictionaries, . . .
- Dere trenger **ikke** memorere alle detaljer om birkenesmodellen, men dere må forstå hvordan den henger sammen

- 1 Beskjeder og litt av hvert
 - Beskjeder
- 2 Litt om numeriske feil og eksempelberegningene
- 3 Litt om eksamen
- 4 Ønsketema: Eulers metode
- 5 Ønsketema: plotting av data fra KJM1140

Eulers metode som diskretisering av ODE

- Gitt et initialverdiproblem: Finn $y(t)$ slik at

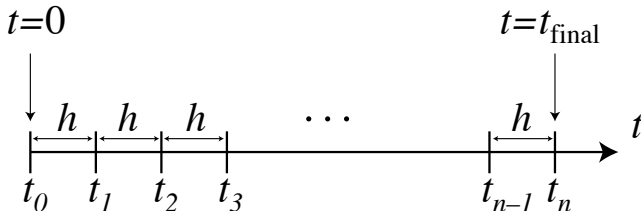
$$\frac{d}{dt}y(t) = f(y(t), y), \quad y(0) = a$$

- $y(t)$ kan ha flere komponenter — birkenesmodellen
- Eulers metode **diskretiserer dette problemet**

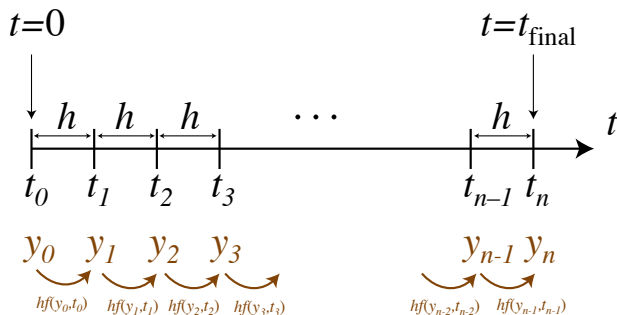
$$y_0 = a$$

$$y_{j+1} = y_j + h \cdot f(y_j, t_j), \quad t_j = h \cdot j$$

- Sentralt her er **tidsgitteret**



Tidsgitteret igjen



- Tidspunktene nummereres **fra 0 til n**
 - $n + 1$ punkter \longrightarrow $n + 1$ verdier for y_j
 - n intervaller \longrightarrow n verdier for $f(y_j, t_j)$
- Den deriverte “lever i intervallene”
- Funksjonen y_j “lever på gitterpunktene”

- Vanntransport:

$$\frac{d}{dt}A(t) = P(t) - E_A(t) - Q_A(t) = f_A$$

$$\frac{d}{dt}B(t) = (1 - A_{\text{sig}}(t))Q_A(t) - E_B(t) - Q_B(t) - Q_{\text{over}}(t) = f_B$$

- Eulers metode

$$A_{j+1} = A_j + h \cdot P_j - h \cdot E_{A,j} - \delta t \cdot Q_{A,j}.$$

$$B_{j+1} = B_j + h \cdot A_{\text{sig},j} \cdot Q_{A,j} - h \cdot E_{B,j} - h \cdot Q_{B,j} - h \cdot Q_{\text{over},j}.$$

- A_j, B_j : “lever” på gitterpunktene
- $P_j, E_{A,j}, Q_{A,j}$, et.c.: “lever” i intervallene
- **Kort sagt:** Vannstrømmer “lever” på intervallene, vannmengder/konsentrasjoner “lever” på gitterpunktene.

- Sulfattransport:

$$\frac{d}{dt}M_A = P \cdot C_P - Q_A \cdot C_A = f_{M_A}$$

$$\frac{d}{dt}M_B = A_{\text{sig}} \cdot Q_A \cdot C_A - (Q_B + Q_{\text{over}}) \cdot C_B = f_{M_B}.$$

- Eulers metode

$$(M_A)_{j+1} = (M_A)_j + h[P_j \cdot C_{P,j} - Q_{A,j} \cdot C_{A,j}]$$

$$(M_B)_{j+1} = (M_B)_j + h[A_{\text{sig},j} \cdot Q_{A,j} \cdot C_{A,j} - (Q_{B,j} + Q_{\text{over},j}) \cdot C_{B,j}]$$

- $M_{A,j}, M_{B,j}$: “lever” på gitterpunktene
- $Q_{A,j}, E_{A,j}, Q_{\text{over},j}$, et.c.: “lever” i intervallene
- NB: $C_{A,j} = M_{A,j}/A_j$ er **avledet** fra en størrelse som “lever” på gitterpunktene. Så denne har lengde $n + 1$ likevel

Eksempel: Fritt fall

Ball faller fritt fra 10 meters høyde:

$$\frac{d}{dt}y(t) = v(t), \quad y(0) = 10.0$$

$$\frac{d}{dt}v(t) = -Mg - \alpha v(t), \quad v(0) = 0.0 \text{ m}$$

- M = masse, $g = 9.81 \text{ m/s}^2$ gravitasjonskonstanten
- α = luftmotstandskonstant (Stokes lov)
- $\alpha = 6\pi\eta R$: $\eta = 1.002 \text{ mPa} \cdot \text{s}$ er luftens viskositet, R = ballens radius
- Vi programmerer dette: `freefall.py`

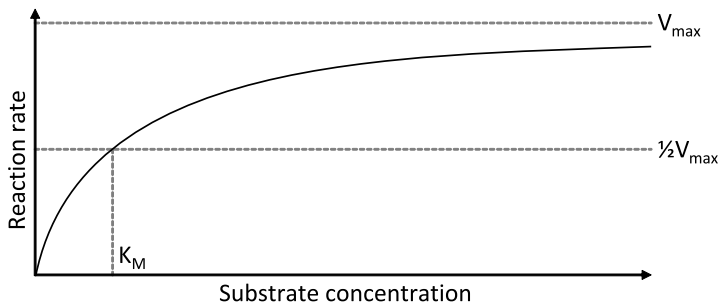
- 1 Beskjeder og litt av hvert
 - Beskjeder
- 2 Litt om numeriske feil og eksempelberegningene
- 3 Litt om eksamen
- 4 Ønsketema: Eulers metode
- 5 Ønsketema: plotting av data fra KJM1140

- Fra og med denne sliden er ikke pensum – dere vil ikke bli testet på eksamen i dette.
- Python kan være veldig nyttig på labben!
- Plotting og analyse av data er en lek
- Jupyter Notebooks – kan brukes til komplett rapport!

Michaelis–Menten-plott

Michaelis–Menten-modellen for reaksjonshastighet V som funksjon av substratkonsentrasjon $[S]$:

$$S \xrightleftharpoons{E} P$$
$$V = \frac{V_{\max}[S]}{K_m + [S]}$$

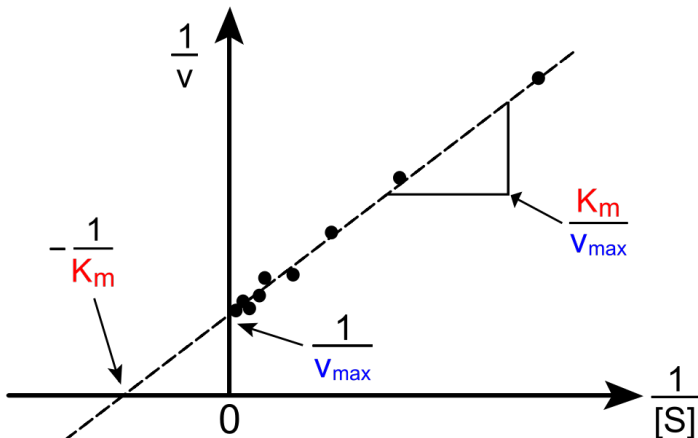


Lineweaver–Burk-plott

Omskriving:

$$\frac{1}{V} = \frac{1}{V_{\max}} + \frac{K_M}{V_{\max}} \frac{1}{[S]}$$

Lettere å finne V_{\max} og K_m .



[S]	V
900.0	0.0182
225.0	0.0151
120.0	0.0122
60.0	0.0089
40.0	0.0070

- Lineær regresjon og plotting i Jupyter Notebook.
- Start Jupyter med kommandoen `jupyter notebook`
- Web-vindu åpnes, her kan vi åpne filer, lagre, programmere, ...