# Tema 1: Markov modell

Markov kjeder kan bli brukt for å løse problemer i kjemi, som her i kjemisk kinetikk.

## DEL I

Anta at vi har en homogen blanding av to kjemiske komponenter A og B som reagerer med hverandre. I starten har vi 1,0 mol av den ene komponenten og 0,2 mol av den andre. Ved hvert minutt vil 75% av stoffet i A konverteres til B og 5% av stoffet i B konverteres til stoff A. Vi ønsker å finne ut følgende i oppgaven ***(PS: IKKE START FØR DERE HAR LEST RESTEN AV OPPGAVETEKSTEN!)***

1. Hvor mange mol av typen A og B har vi etter ett minutt etter prosessen startet
2. Hvor mye etter to minutter?
3. Hvor mye etter 10 minutter?
4. Hva vil bli likevekts-løsningen?

Når dere løser oppgaven ønsker vi at dere tar stilling til følgende

1. Hvordan vil dere illustrere/tegne en modell ved å bruke matematikk og figurer? Er det noen måte å anvende vektorer og matriser?
2. Hvordan kan dere kode modellen i Matlab (eventuelt andre språk/verktøy som f.eks. Octave online)?
3. Hvor mange iterasjoner måtte dere utføre før dere fikk fram en likevektsløsning?

## DEL II

1. Kan dere prøve å formulere en annen måte å beregne likevekts-løsningen på? Kan dere bruke vektorer og matriser til dette?
2. La oss ta en titt på verdiene som vi fant ved å gjøre iterasjonene i DEL I. Observer at forskjellen/differansen mellom tilstandene i nabo-tidspunktene blir mindre og mindre, dvs. minker med hensyn på tida. Anta nå at vi ønsker å finne hvor mange mol av A og B som finnes i blandinga etter si 90 sekunder eller 150 sekunder (1,5 og 2,5 minutter). Hvordan kunne man beregne tilstanden mellom hele minutt?

Appendix: Matrise-syntax i Matlab

Bruk http://octave-online.net om dere ikke har Matlab installert.

Eksempel på 2x2 matrise i Matlab: A = [1 2; 3 4]

Eksempel på kolonne-vektor: x = [3;4]