

Repetitorium chemie



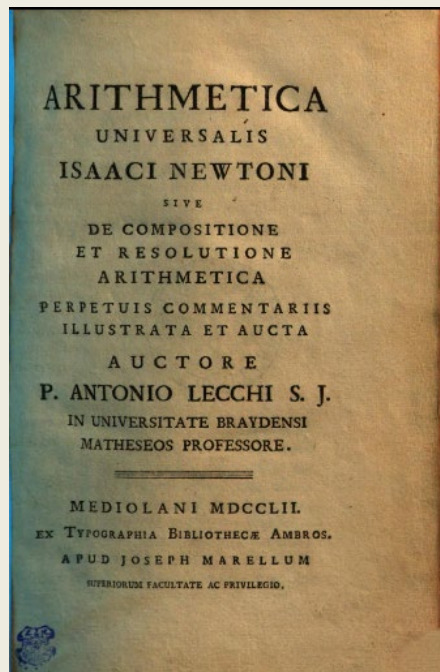
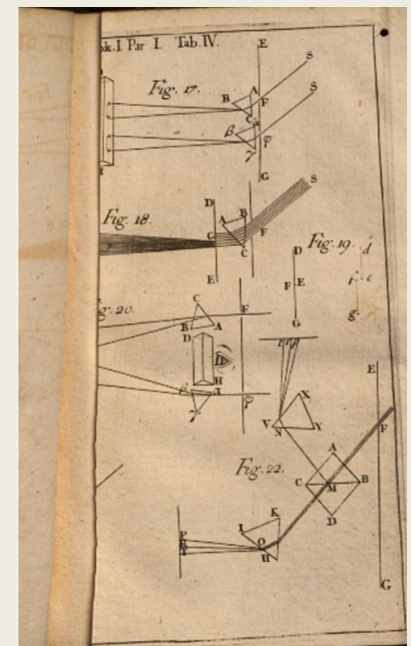
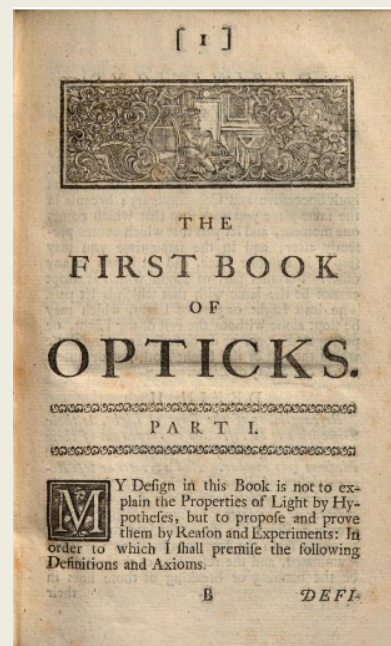
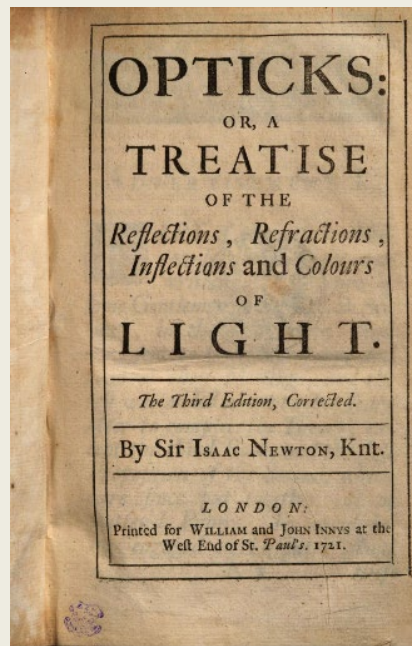
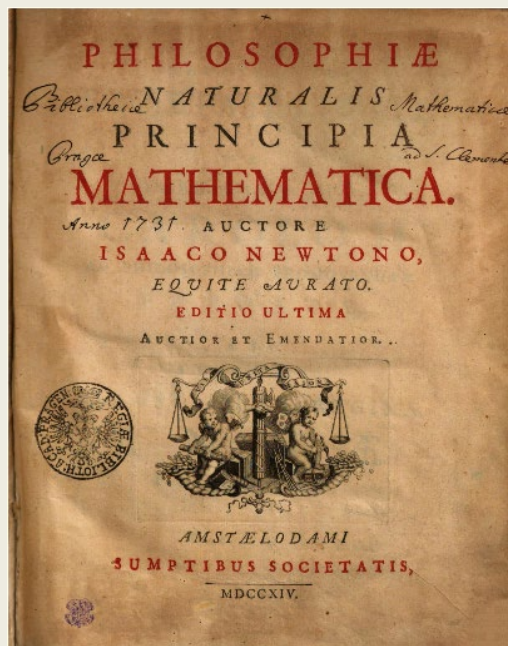
Illustrovaný „Stručný přehled potřebné matematiky“
celkem v šesti dílech (© J. Gabriel 2023)

(Pro úspěšné absolvování kursu „Repetitorium chemie“ je nutná středně pokročilá znalost matematiky.

Ověřte si v následujícím dotazníku své předpoklady:)

	Zvládám	Nezvládám
1. Ovládám umění <i>sčítat</i> a <i>odčítat</i> .	☐	☐
2. Také zvládám <i>násobit</i> i <i>dělit</i> .	☐	☐
3. Znáám slovo „ <i>rovnice</i> “.	☐	☐
4. Chápu smysl <i>rovnítka</i> v rovnici.	☐	☐
5. Víám, co znamená slovo „ <i>funkce</i> “.	☐	☐
6. Znáám <i>například</i> logaritmus nebo mocninu.	☐	☐
7. Umím spočítat <i>aritmetický průměr</i> .	☐	☐
8. Slyšel/a jsem slova „ <i>úměra</i> “ a „ <i>trojčlenka</i> “.	☐	☐
9. Víám, <i>k čemu</i> se to používá.	☐	☐
10. Víám, co je to <i>vektor</i> .	☐	☐
11. Zhruba chápu, co je to „ <i>derivace</i> “.	☐	☐
12. To samé s „ <i>integrálem</i> “.	☐	☐

Pokud jste zaškrtnuli alespoň 4x „zvládám“, uspějete v Parlamentu, či z Vás třeba bude dobrý kadeřník/kadeřnice. Pokud alespoň 8x, jste na půl cesty v kursu úspěš; že by to někdo dal 12x, se mi moc nechce věřit. Každopádně, nějaké nápady na učebnice jsou na dalším obrázku. Jsou, pravda, starší, ale stále platné.



Některé tipy pro další čtení:

PHILOSOPHIAE NATURALIS PRINCIPIA MATHEMATICA. /Auctore
Isaaco Newtono, equite aurato (1714, Compagnie Amstaelodani)

OPTICKS, OR, A TREATISE OF THE Reflections, Refractions, Inflections
and Colours OF LIGHT /By Sir ISAAC NEWTON, Knt., 1721, W. aj.
Innys, West End of St. Paul, London

ARITHMETICA UNIVERSALIS ISAACI NEWTONI sive de compositione et
resolutione arithmetica perpetuis commentariis illustrata et aucta /
IN ARITHMETICAM UNIVERSALEM ISAACI NEWTONI COMMENTARIA.
LIBER I. Giuseppe Marelli, 1752 Mediolani

Matematická vsuvka I. „trojčlenka“



Trojčlenka – přímá úměra

Pokud platí, že „čím více... tím více“, jedná se o přímou úměru.

- Čím více kopáčů bude kopat, tím více toho vykopají.
- Čím déle necháme čerpadlo čerpat, tím více vody vyčerpáme.
- Čím více budeme sypat soli do vody, tím koncentrovanější bude roztok.

Trojčlenka – nepřímá úměra

Pokud platí, že „čím více ... tím méně“, jedná se o nepřímou úměru.

- Čím více stránek knihy přečteme, tím méně nám jich zbývá do konce.
- Čím rychlejší máme internet, tím dříve stáhneme film.
- Čím více budeme v noci mlátit do bubnu, tím méně budeme mít spokojených sousedů.

Trojčlenka – přímá úměra

Příklad: Auto spotřebuje 6 litrů benzínu na 100 kilometrů. Kolik litrů benzínu spotřebuje po ujetí 250 kilometrech?

Postup: Jako první si zapíšeme co známe. Využijeme k tomu následující tabulku, která nám přehledně, co známe a co chceme vypočítat:

100 km	6 litru
250 km.....	x litru

V prvním řádku máme zapsané údaje, které zcela známe. Ve druhém řádku máme na pravé straně údaj, který neznáme a na levé straně údaj, pro který chceme neznámou vypočítat. Ve sloupcích musí vždy být stejné údaje, v tomto případě ve sloupci musí být buď vždy kilometry nebo vždy litry.

Existuje pomůcka, která vám pomůže tento příklad vypočítat. Jako první nakreslete napravo šipku zdola nahoru, takto:

100 km.....	6 litru
250 km.....	x litru ↑

Pokud se jedná o přímou úměru, pak nalevo nakreslíme stejnou šipku, zdola nahoru:

↑ ↑

V dalším kroku sestavíme zlomky ze sloupců ve směru šipek. Čítel tak odpovídá číslu, kde šipka začíná a jmenovatel číslu, kde šipka končí. Tyto zlomky dáme do rovnosti. Z prvního sloupce (kilometry) tak získáme zlomek $\frac{250}{100}$ a z druhého (litry) zlomek $\frac{x}{6}$. Zapsáno do rovnice:

$$\frac{250}{100} = \frac{x}{6}$$

Trojčlenka – nepřímá úměra

Příklad: Na svém počítači máte internet o rychlosti 2 MB za sekundu a záznam koncertu Dády Patrasové jste si stáhli za 450 sekund. Za jak dlouho byste stáhli stejný koncert, pokud byste měli internet o rychlosti 6 MB za sekundu?

Postup bude stejný jako u přímé úměry – zapíšeme si údaje do přehledné tabulky:

2 MB/s	450 sekund
6 MB/s.....	x sekund

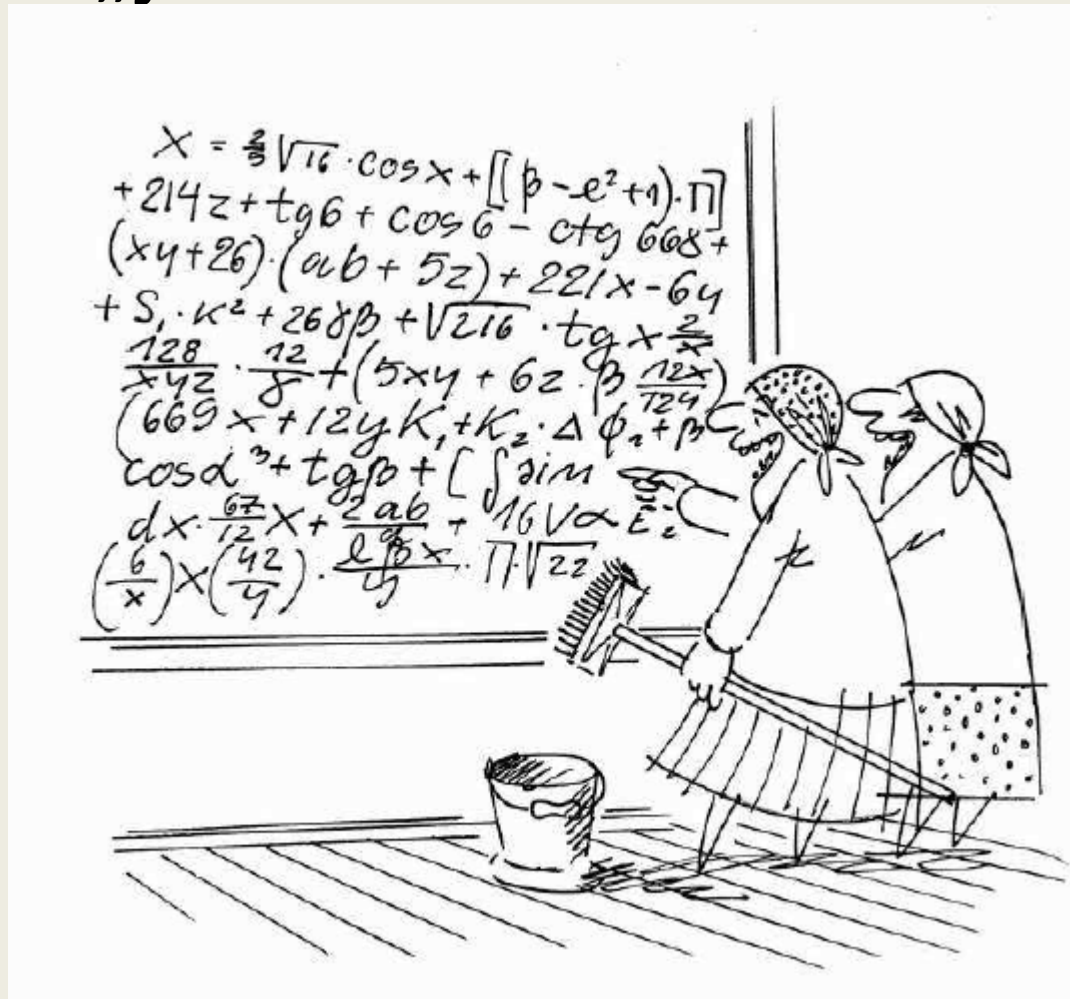
Nyní šipky. Pravá šipka bude opět zdola nahoru, tady se nic nemění. Ale protože se jedná o nepřímou úměru, půjde levá šipka opačným směrem, shora dolů.

2 MB/s	450 sekund
↓ 6 MB/s.....	x sekund ↑

Další postup už je stejný – vytvoříme z této tabulky zlomky, opět po směru šipek. Dostaneme tak zlomky 26 a x450, které dáme do rovnosti:

$$2/6=x/450$$

Matematická vsuvka II. „jednoduchá statistika“



Průměr, medián a modus

- Průměrem se rozumí klasický aritmetický průměr souboru sledovaných hodnot.
- Medián vyjadřuje prostřední hodnotu souboru dat, srovnaných od nejmenšího do největšího.
- Modus je nejčastěji se vyskytující hodnota ve zkoumaném souboru dat.

Jméno	známka		
Arnošt	1	průměr	1,92307692
Bedřich	3	modus	1
Cyril	1	medián	2
David	2		
Dita	1		
Dittmar	3		
Eliška	2		
Franta	1		
Jirka G.	1		
Jirka H.	2		
Karel	3		
Varel	1		
Žaba	4		

Rozptyl a směrodatná odchylka

- Popisují variabilitu (homogenitu) základního datového souboru.

- Rozptyl:

$$s^2 = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2$$

- Směrodatná odchylka:
(odmocnina z rozptylu)

$$s_x = \sqrt{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2} = \sqrt{s_x^2}$$

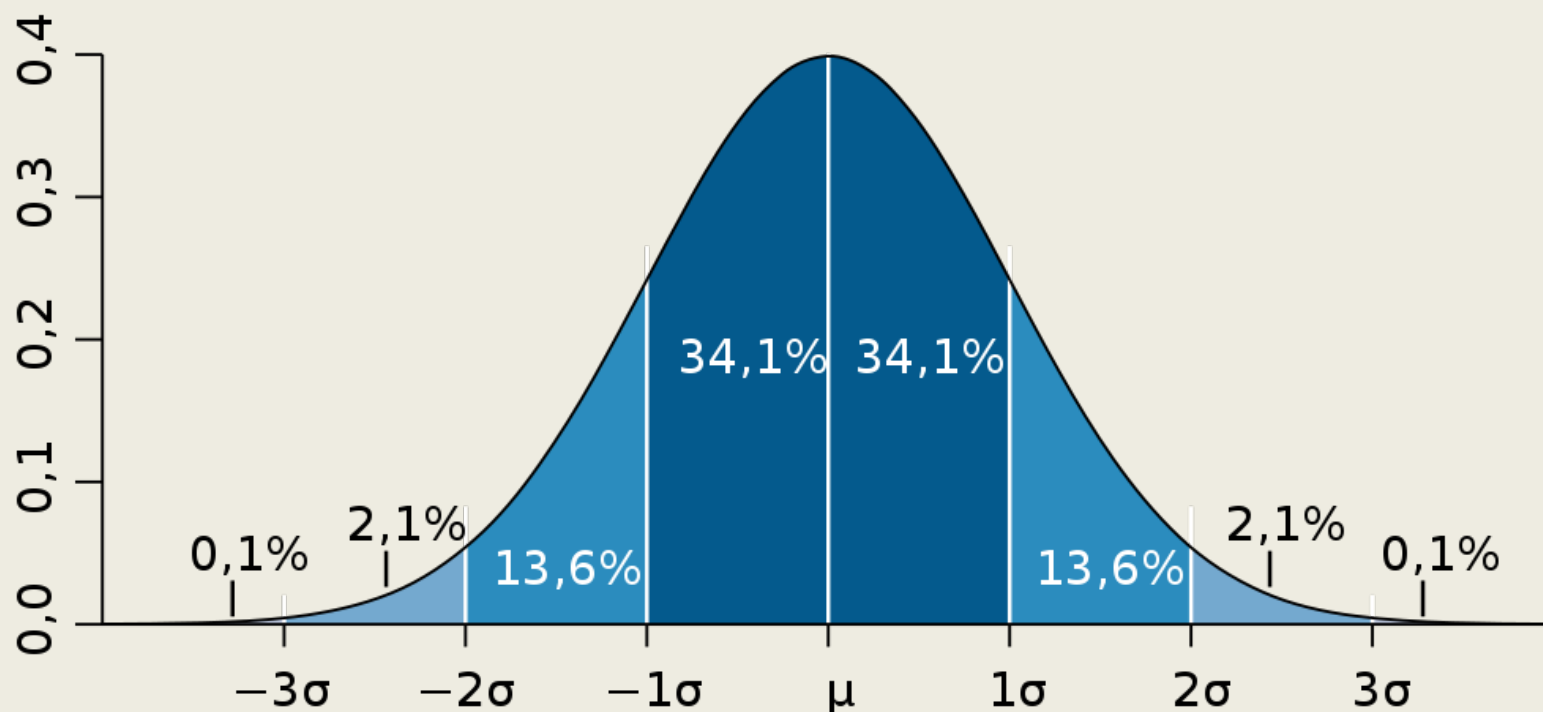
Jméno	Repetitorium	Fyzika		Repetitorium	Fyzika
Adlabert	1	4	rozptyl	0,674556213	1,786982
Bohouš	1	1	sm. odch.	0,821313712	1,336781
Cecílie	1	4			
Emerich	1	2			
Dita	1	3			
Jirka G.	1	1			
Eliška	1	4			
Kvído	1	1			
Ruprecht	1	4			
Šimon	1	1			
Valentýn	1	3			
Varel	2	1			
Žaba	4	4			

Průměrná známka z repetitoria: $1,92 \pm 0,82$

Průměrná známka z fyziky: $2,54 \pm 1,34$

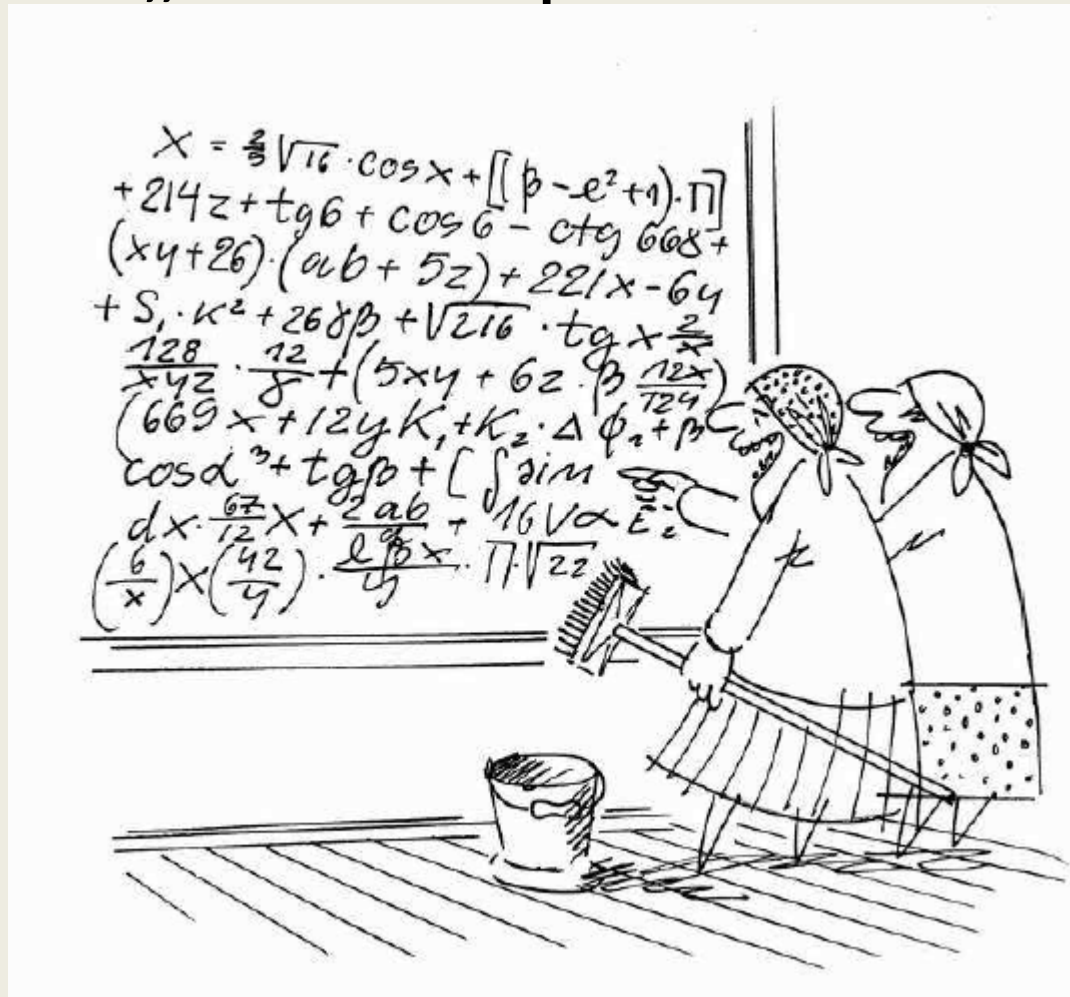
U normálního rozložení hraje velkou roli směrodatná odchylka. Pokud máme rozložení, které je normální a má odchylku σ , pak musí platit, že 68 % hodnot se nachází v intervalu $\langle \mu - \sigma, \mu + \sigma \rangle$. Tedy 68 % hodnot se liší od průměru maximálně o jednu směrodatnou odchylku. Přibližně 95 % hodnot pak musí ležet v intervalu $\langle \mu - 2\sigma, \mu + 2\sigma \rangle$ a 99,7 % hodnot v intervalu $\langle \mu - 3\sigma, \mu + 3\sigma \rangle$.

Přehledně to znázorňuje následující obrázek:



Matematická vsuvka III.

„funkce – první část“

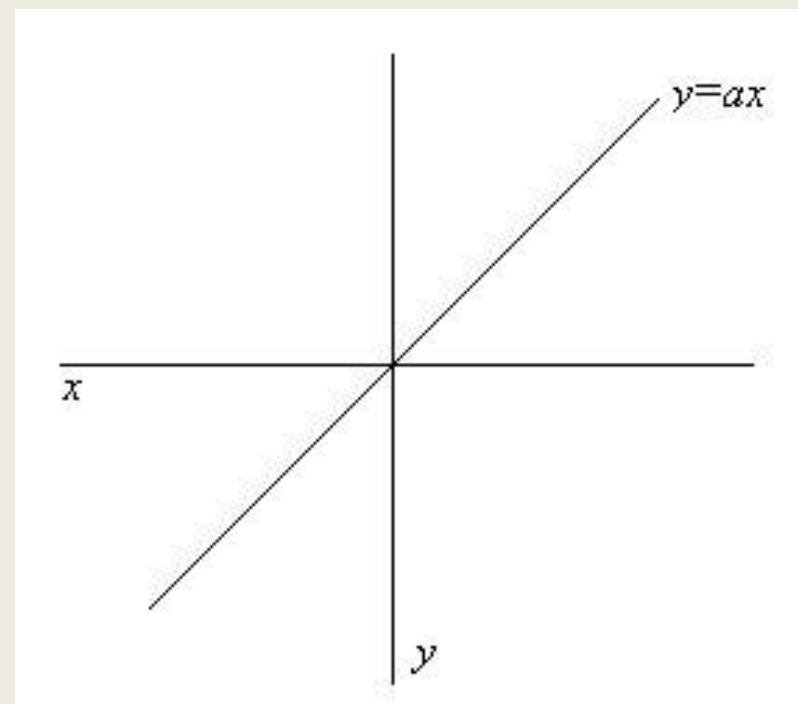
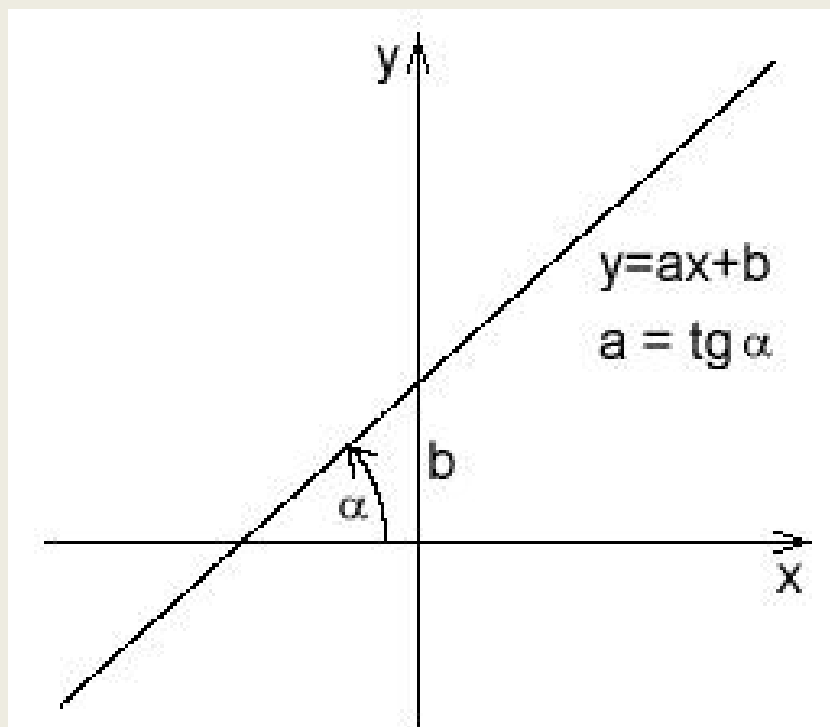


Funkce jedné proměnné

- Funkce je předpis, který každému číslu x z definičního oboru M přiřadí právě jedno y z oboru hodnot N .
- Funkci obvykle zapisujeme ve tvaru $y = f(x)$
- Funkci lze znázornit graficky v x - y , popřípadě v x - y - z souřadnicích

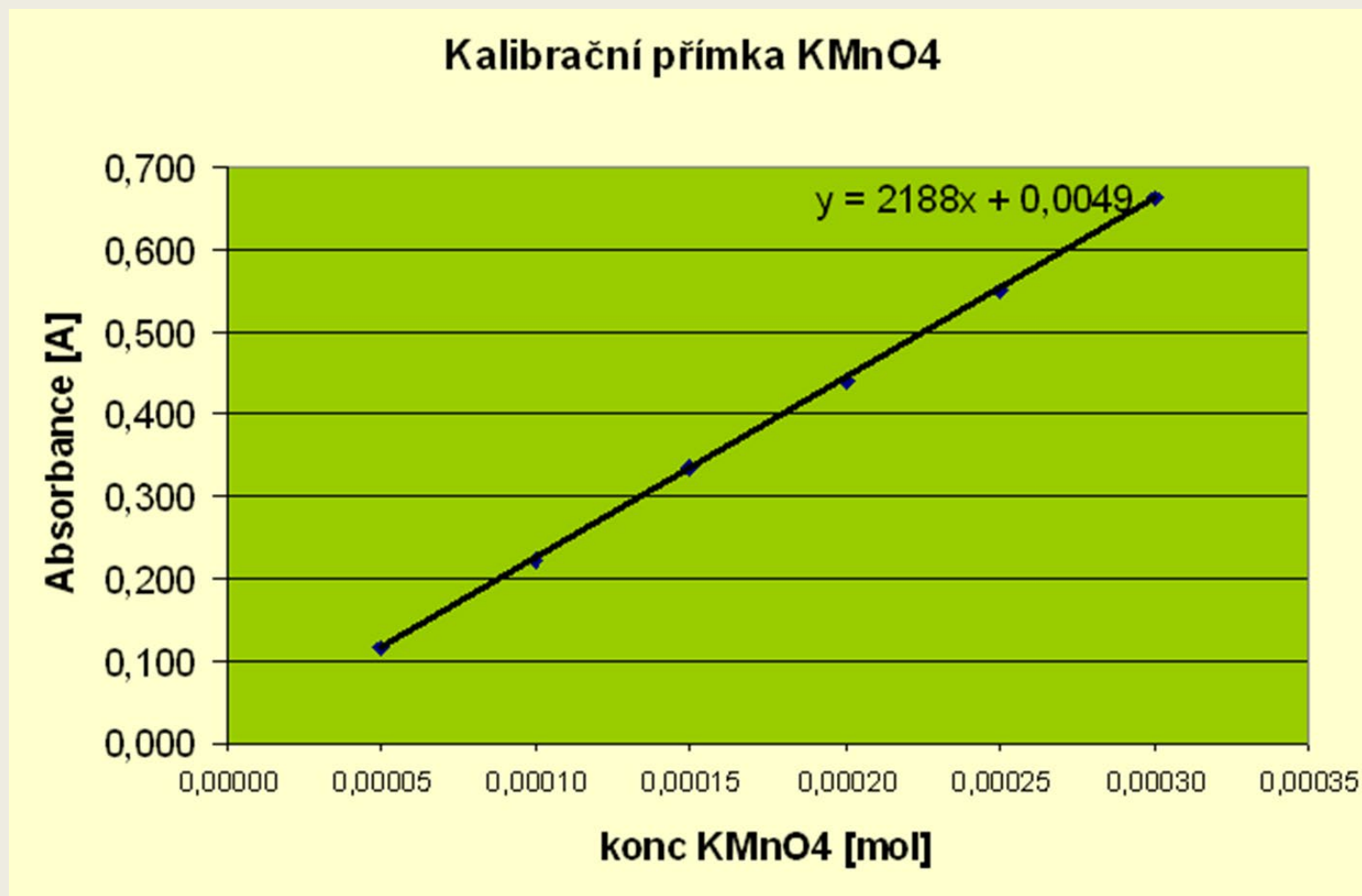
Lineární funkce

- Lineární funkce je každá funkce, která je dána předpisem $y = ax + b$, kde a a b jsou reálná čísla.



Příklad: Lambert-Beerův zákon

$A = \varepsilon \cdot c \cdot l$ Absorbance jako funkce koncentrace

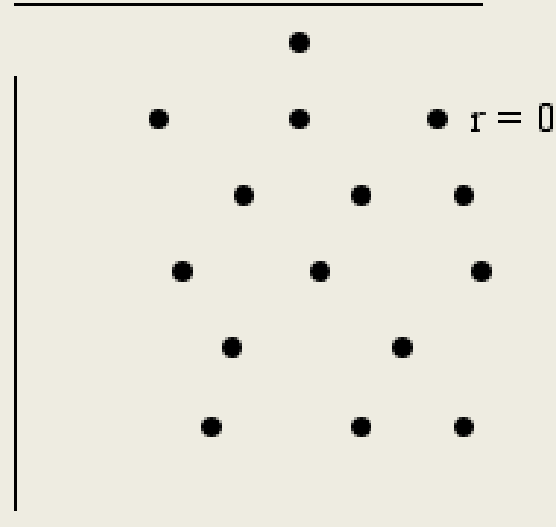
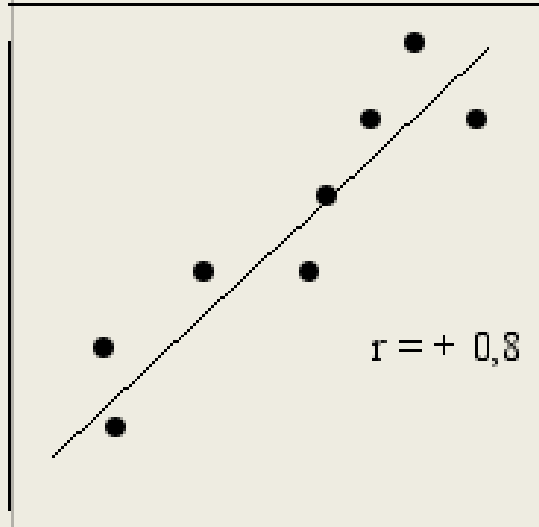
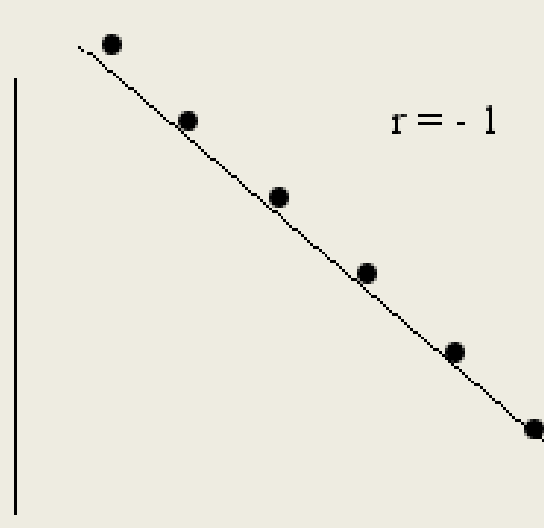
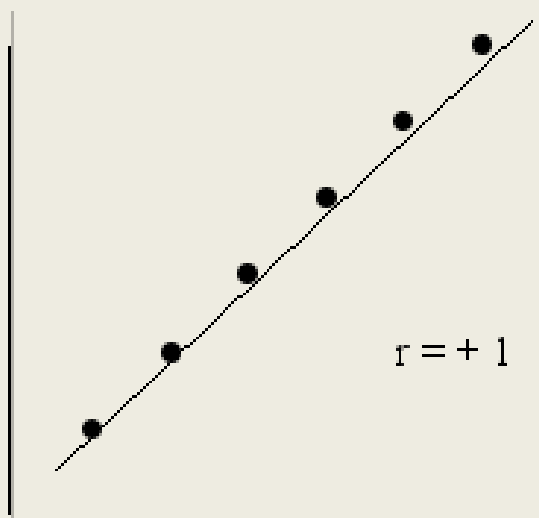


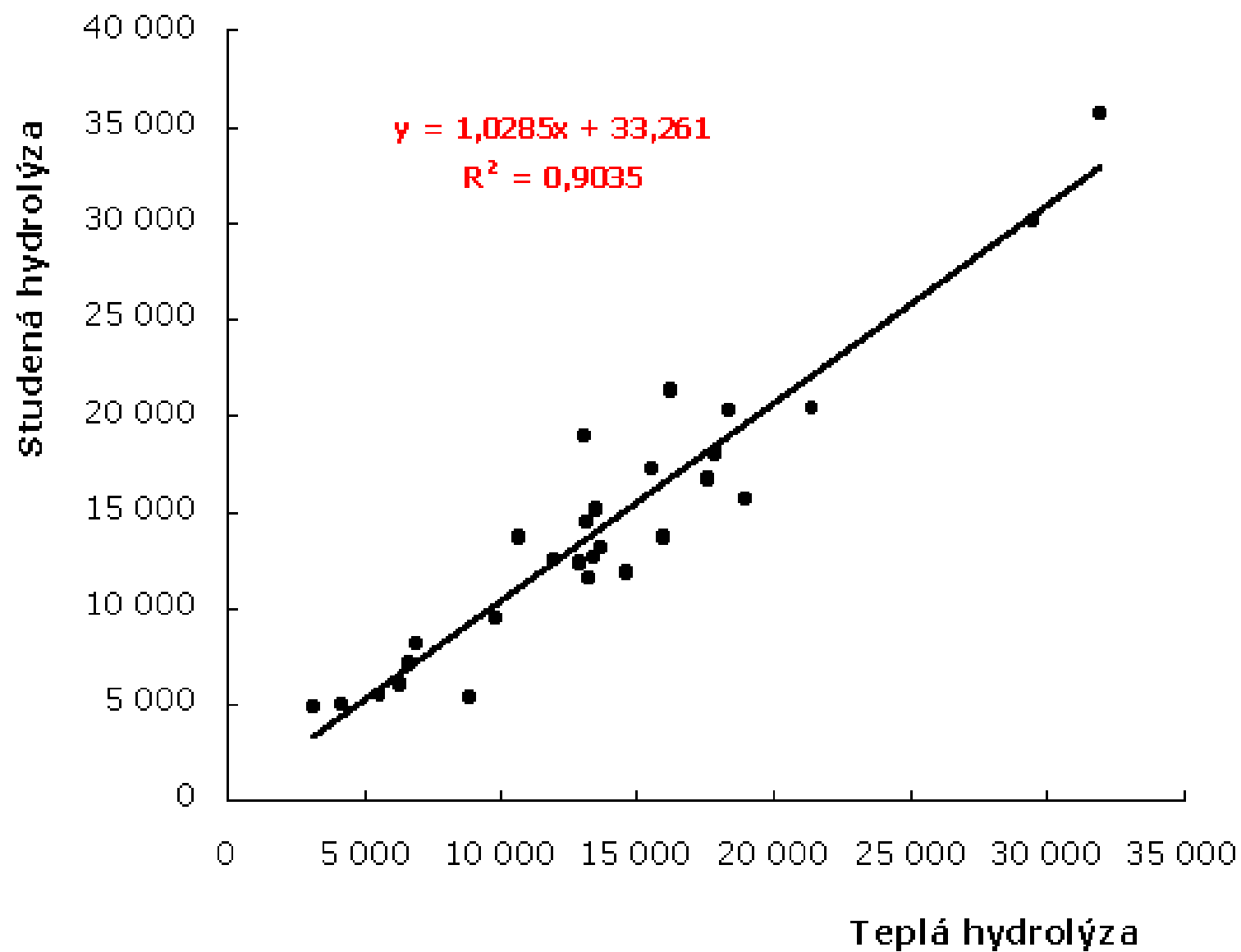
Lineární funkce

- Korelační koeficient dvojice dat: $-1,000 \dots 1,000$

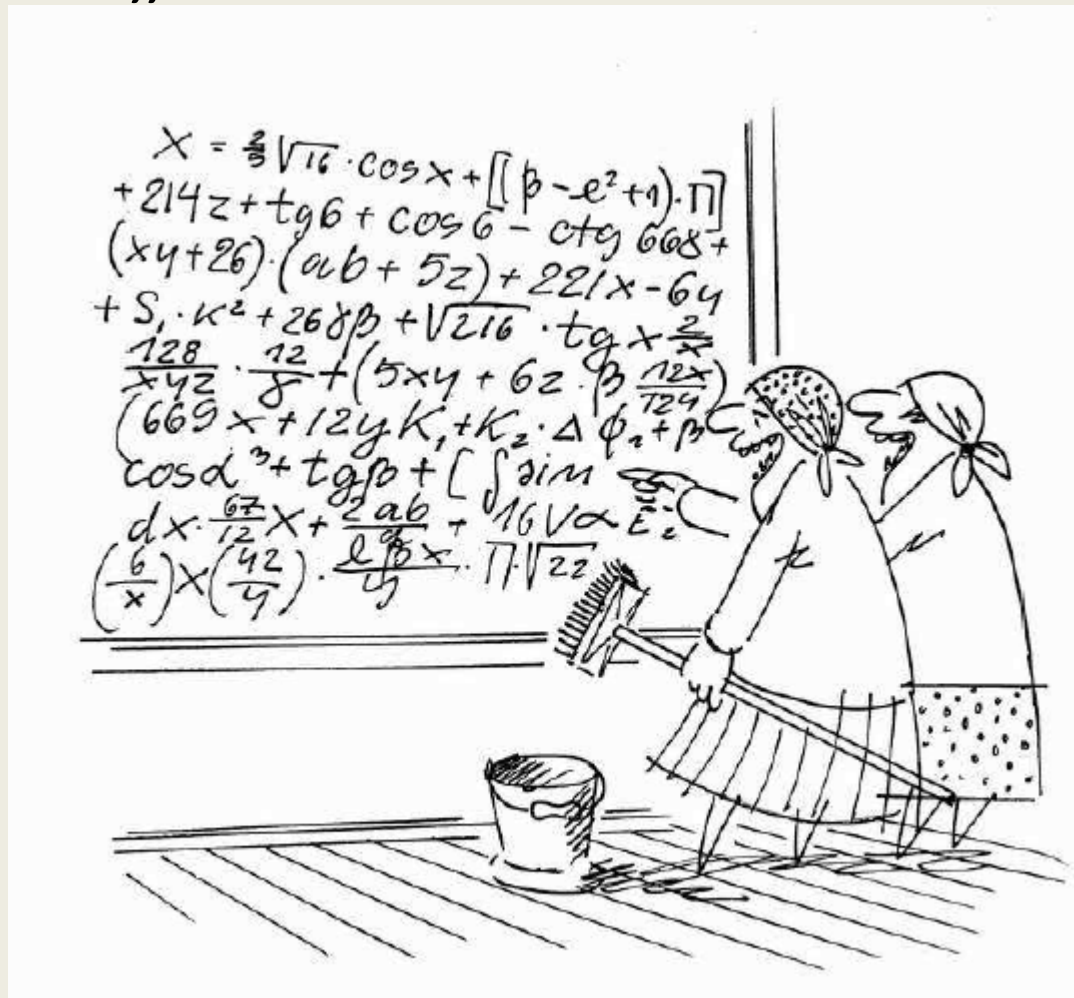
$$r = \frac{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y})}{\sqrt{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2 \sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2}}$$

Lineární funkce





Matematická vsuvka IV. „funkce – druhá část“



Funkce jedné proměnné

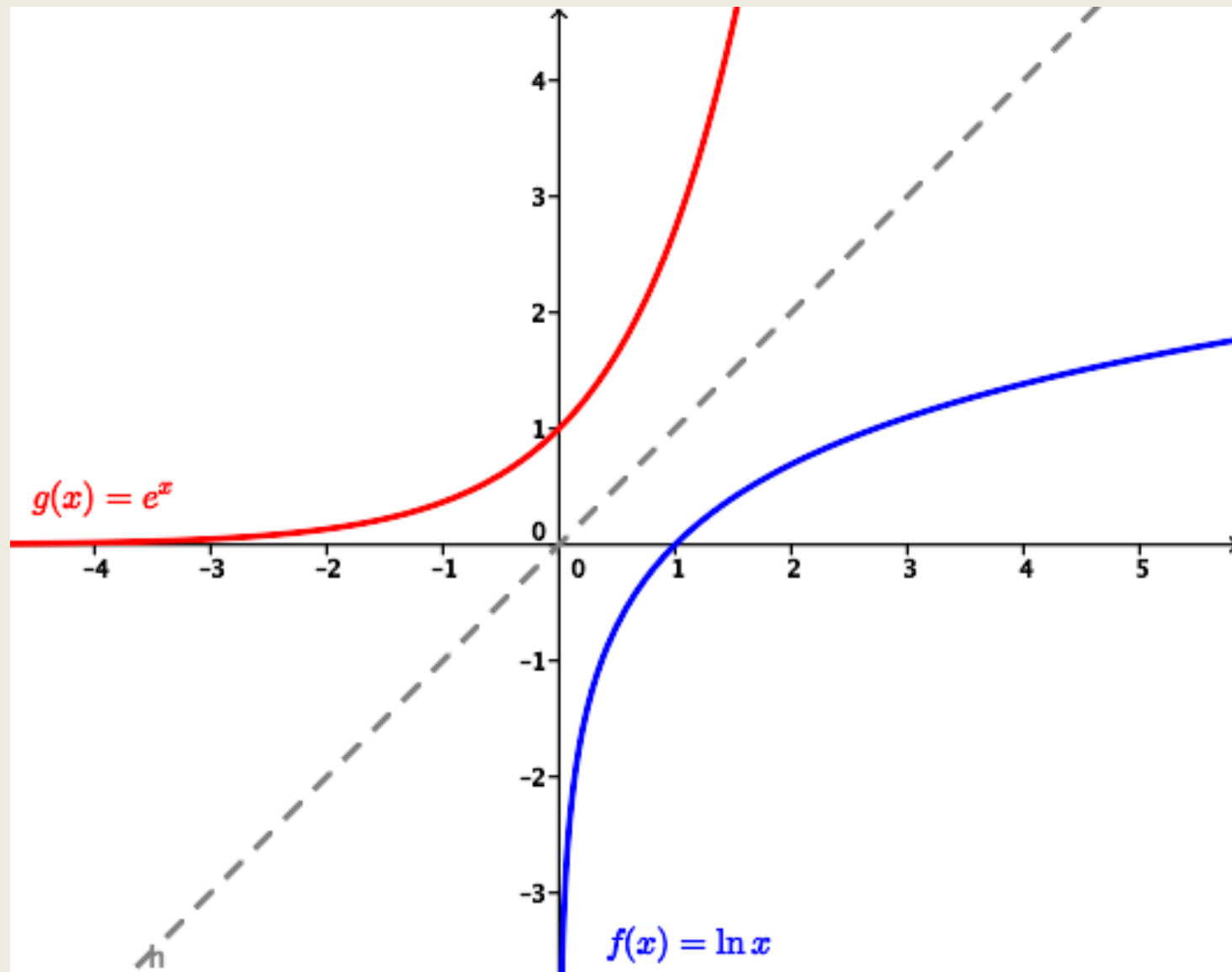
- Funkce je předpis, který každému číslu x z definičního oboru M přiřadí právě jedno y z oboru hodnot N .
- Funkci obvykle zapisujeme ve tvaru $y = f(x)$
- Funkci lze znázornit graficky v x - y , popřípadě v x - y - z souřadnicích

Logaritmy

- Logaritmus je exponent (y), na který musíme umocnit základ (a), abychom získali argument (x).
- Logaritmickou funkci zapisujeme slovem log (základ 10, Henry Briggs), pokud se jedná o přirozený logaritmus, tak jej značíme ln (základ e , John Napier).

$$y = \log_a x \iff a^y = x$$

Logaritmus a exponenciála



Použití v chemii

- Dekadické logaritmy – např. výpočet pH

$$\text{pH} = -\log c [\text{H}^+]$$

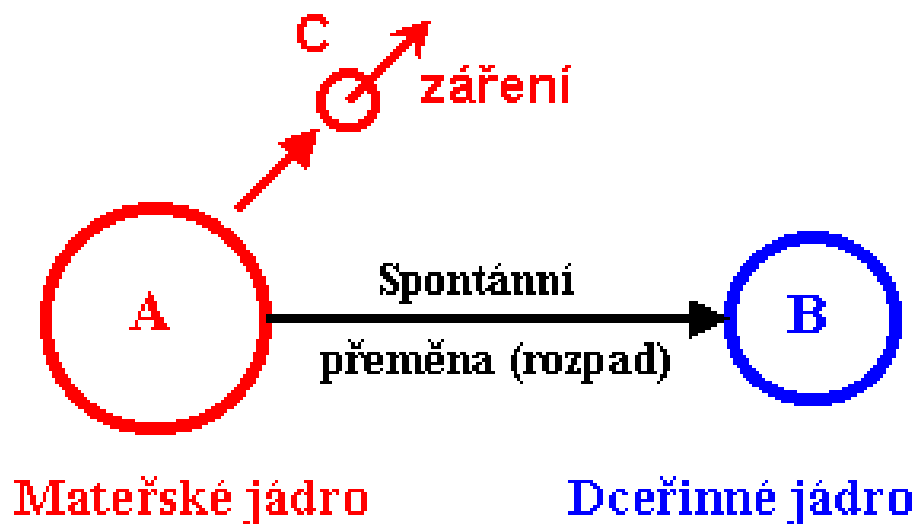
(kde $c [\text{H}^+]$ je koncentrace vodíkových iontů)

- Přirozené logaritmy – např. výpočet radioaktivity

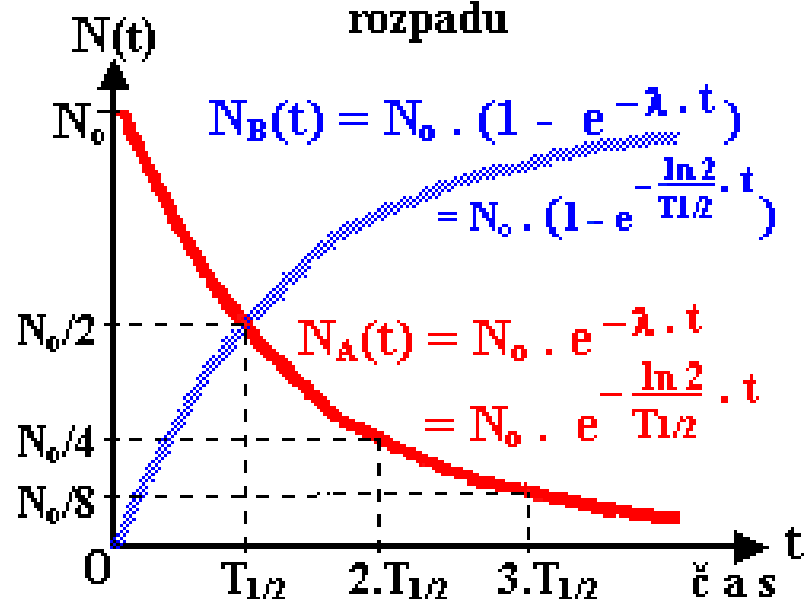
$$N = N_0 e^{-\lambda t} = N_0 2^{-\frac{t}{T}}$$

(kde T je poločas rozpadu)

Radioaktivita



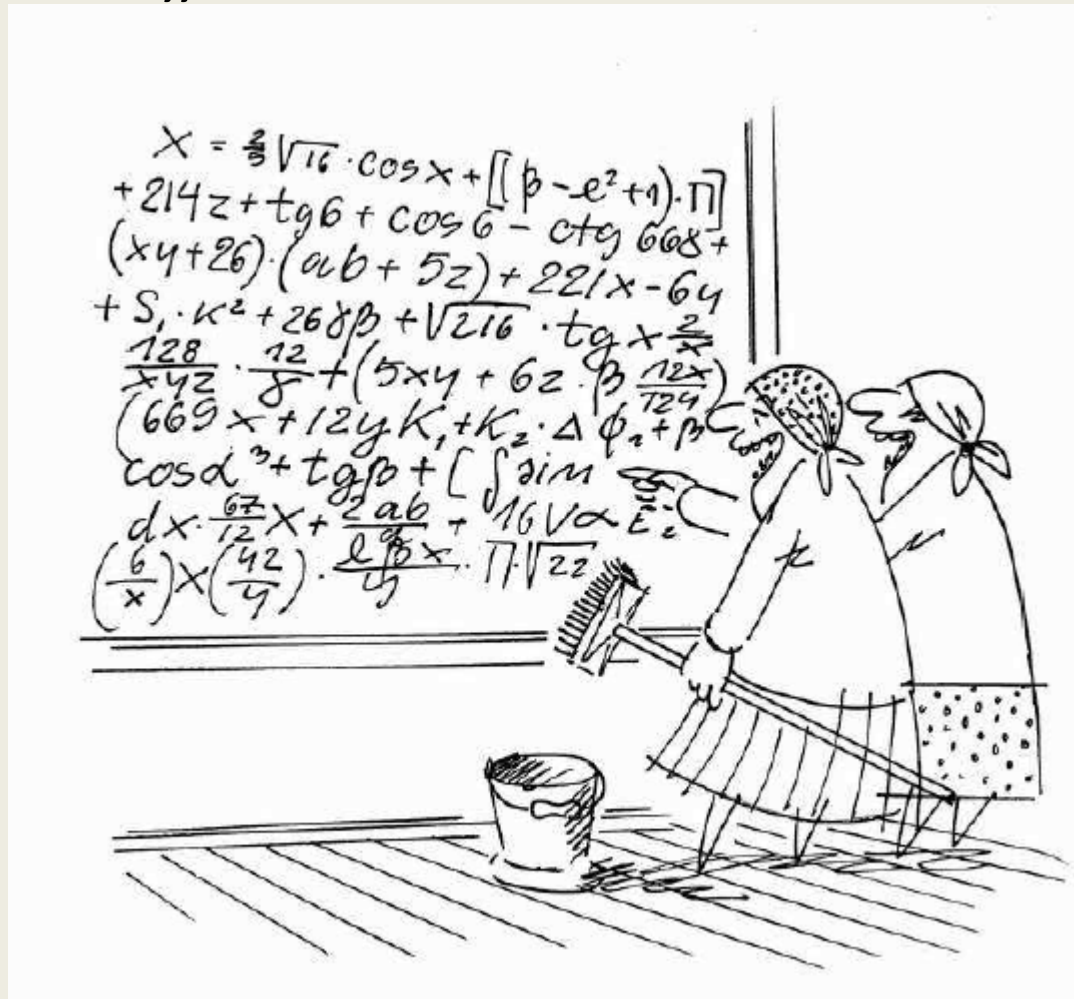
Exponenciální zákon radioaktivního rozpadu



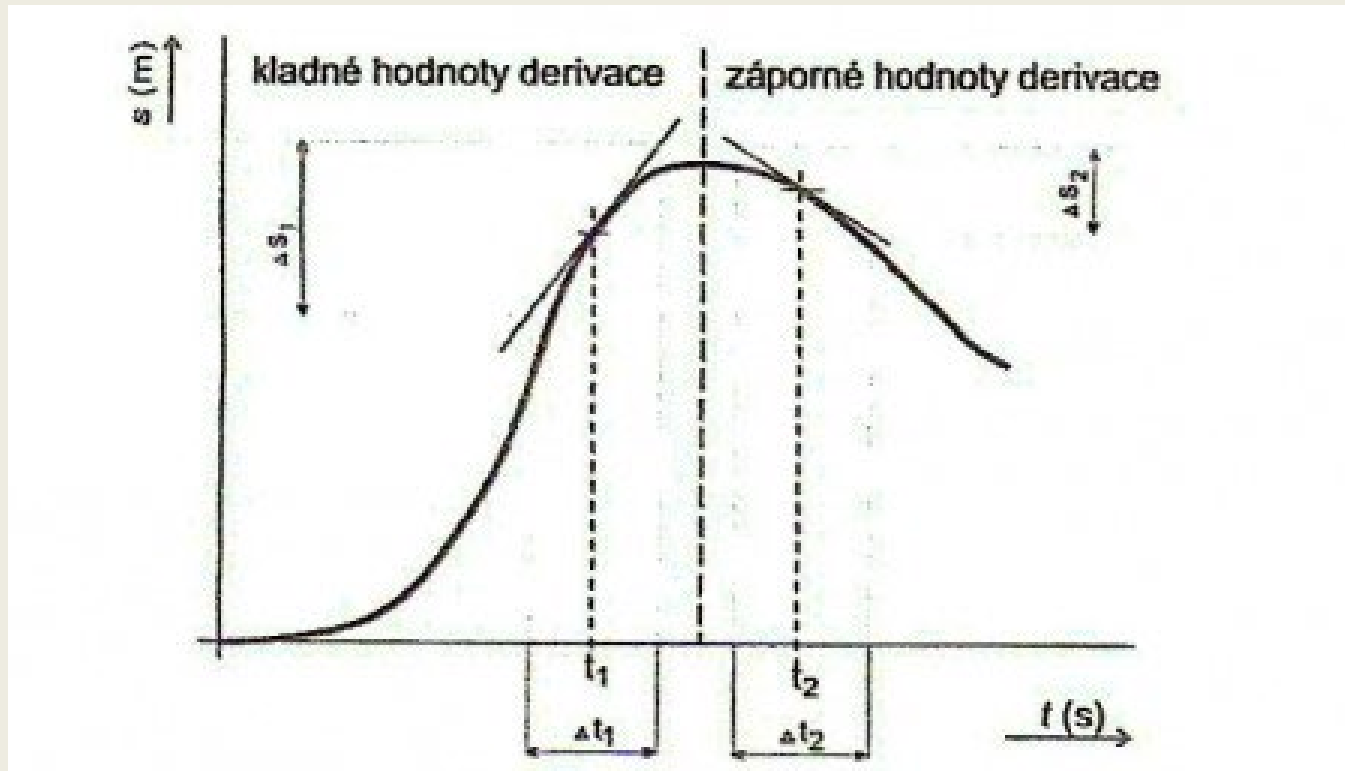
$$\ln \frac{N}{N_0} = -\frac{\ln 2}{T} \cdot t$$

Matematická vsuvka V.

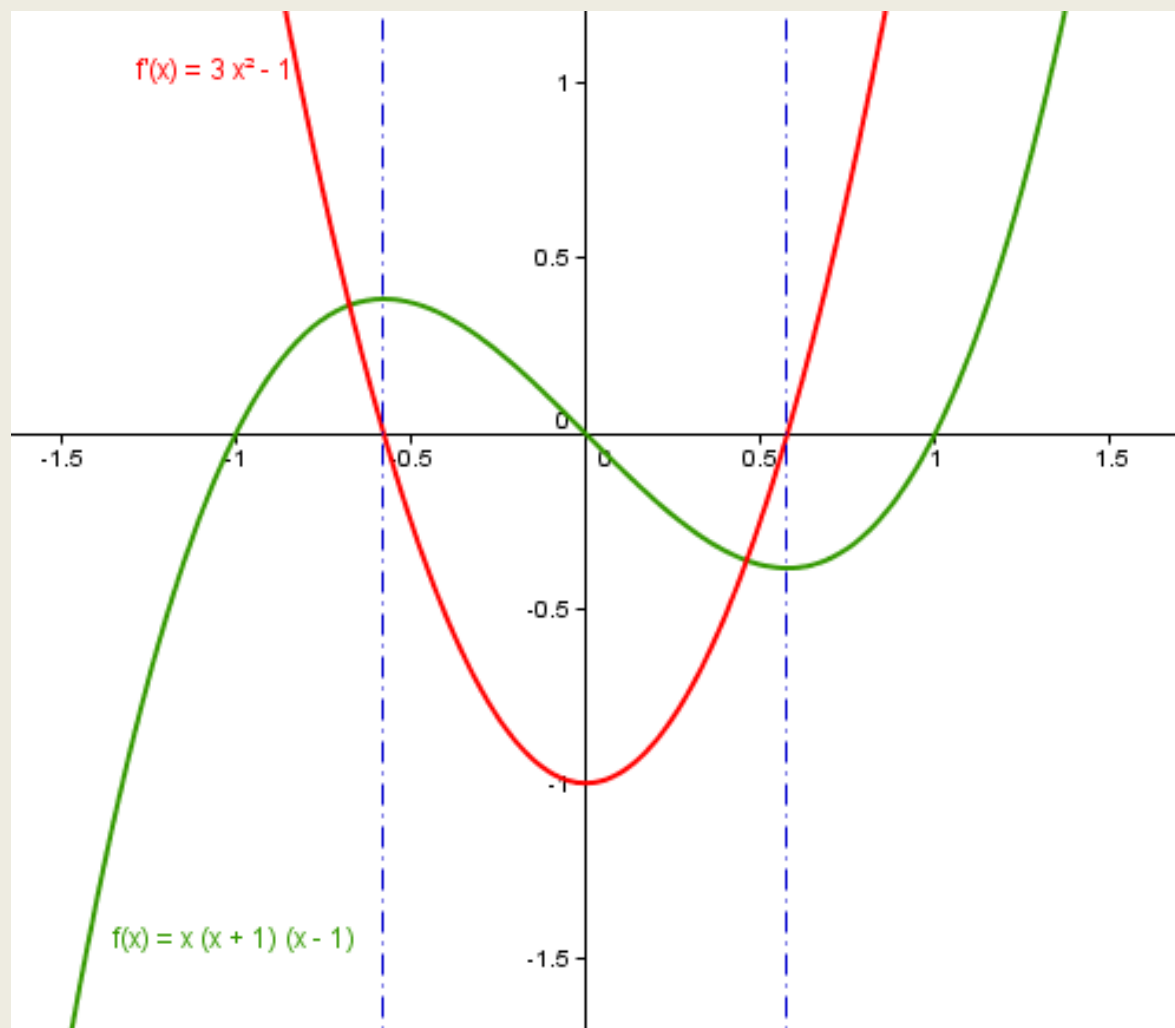
„funkce – třetí část“



Derivace a integrály

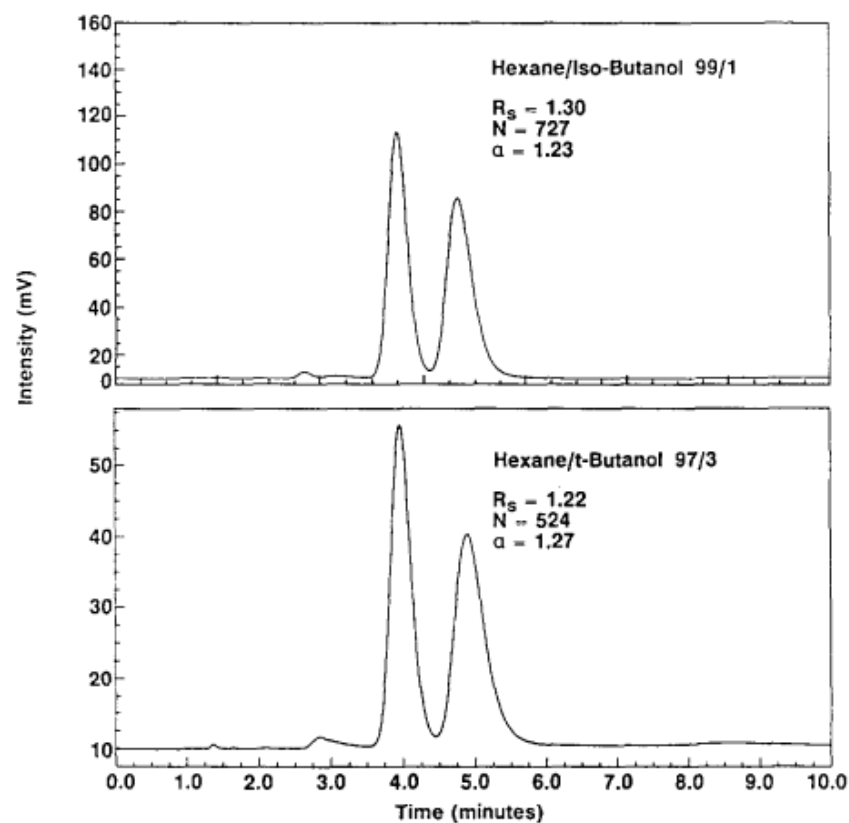
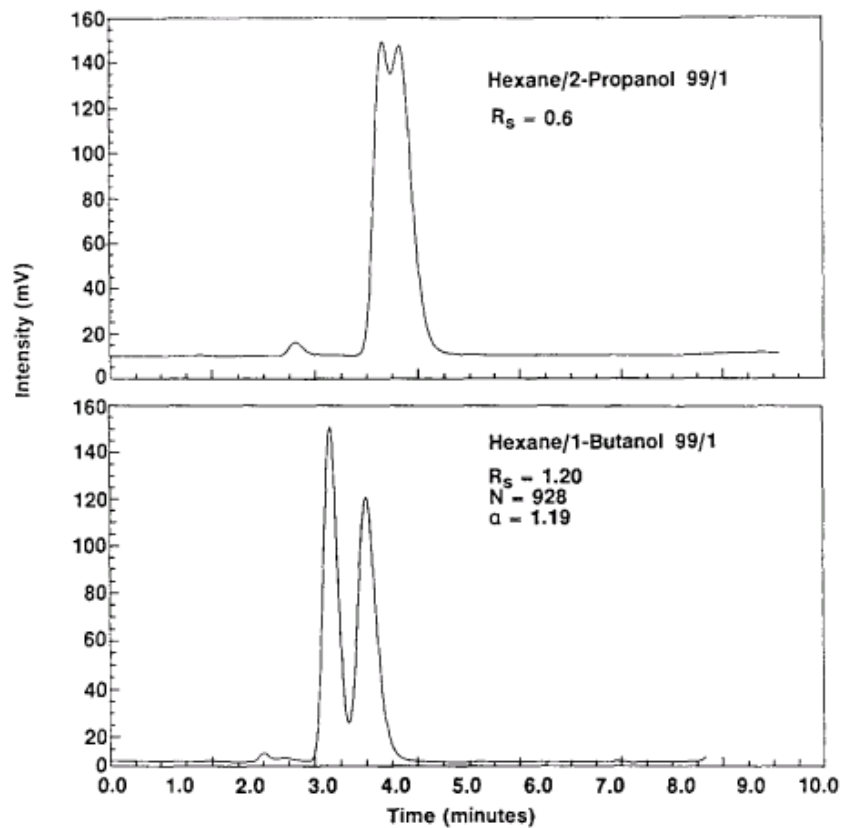


Určení lokálního maxima – první derivace je zde nulová (tečna je rovnoběžná s osou x)



Zeleně: funkce, červeně: její první derivace

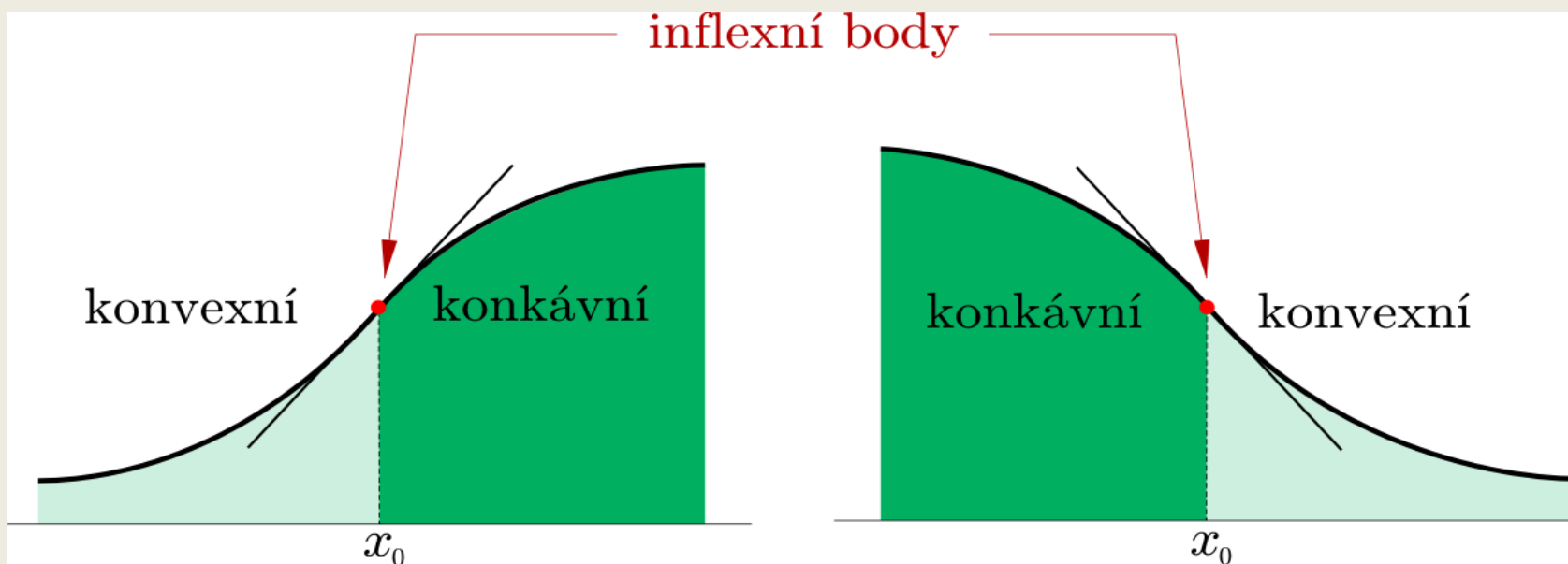
Derivace a integrály



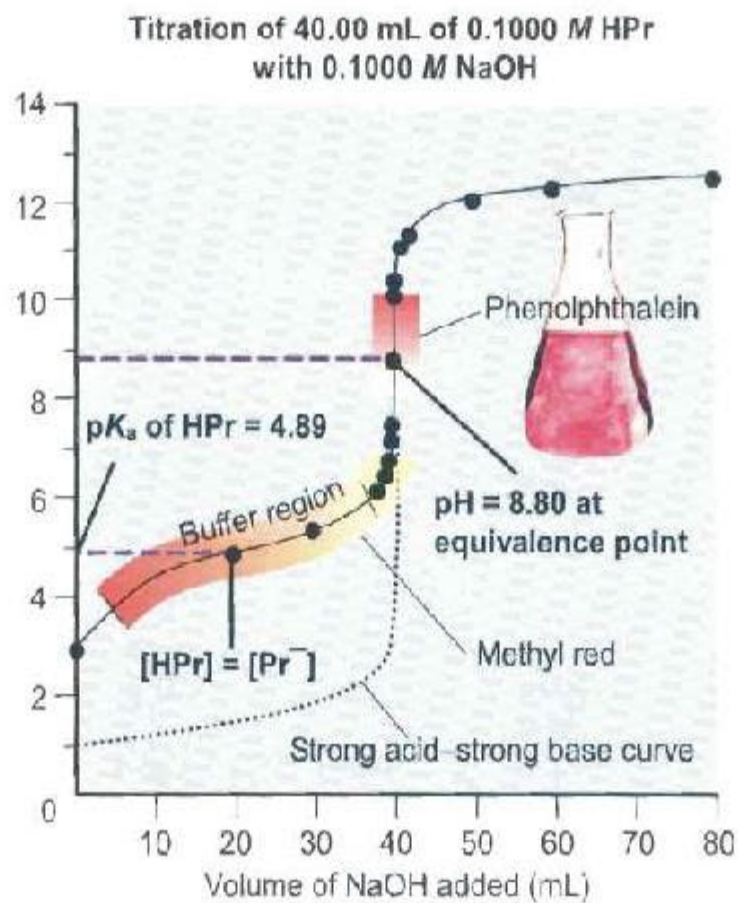
Využití např. při počítačových analýzách chromatografických záznamů

Derivace a integrály:

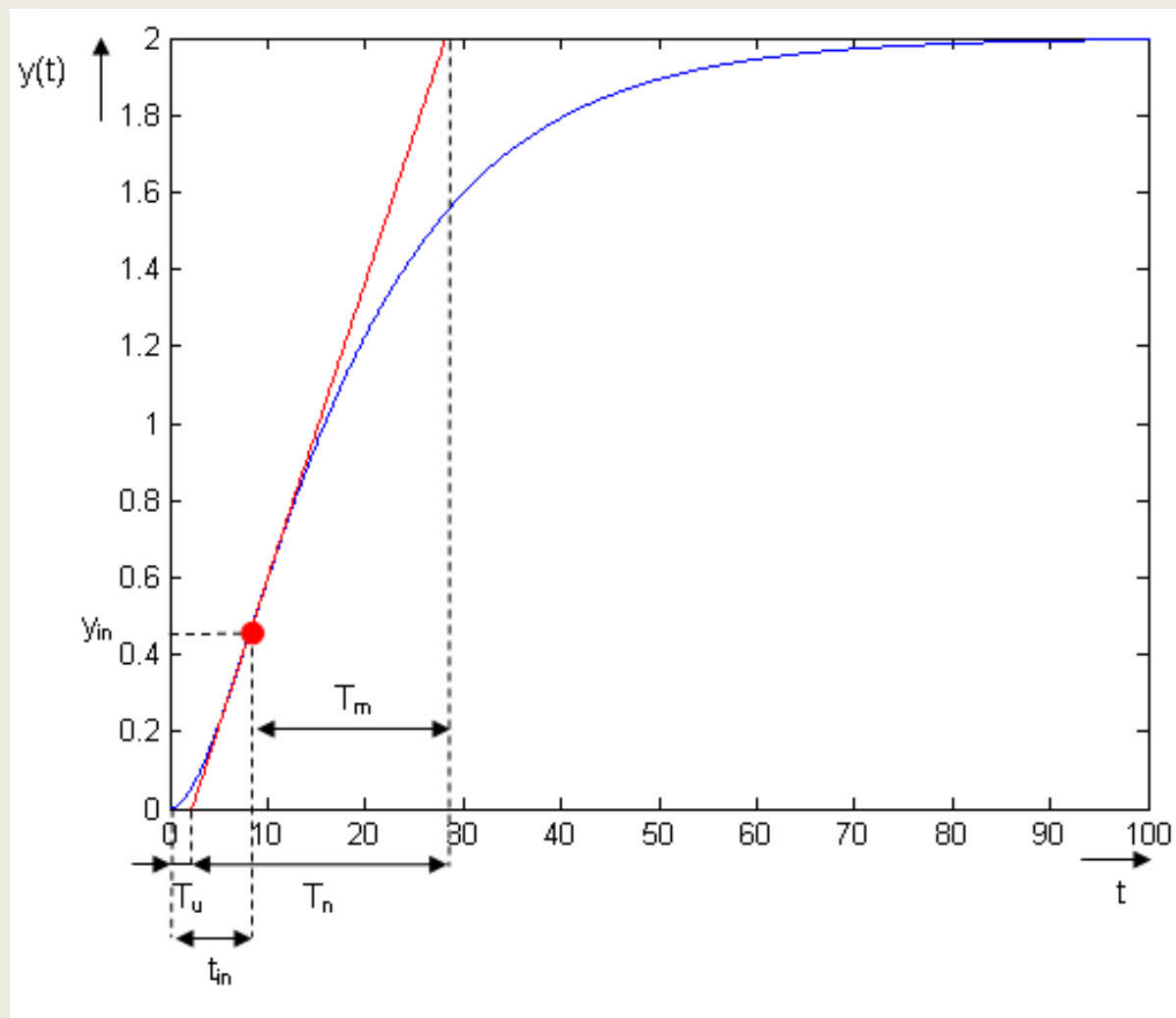
1. Definice Přejíždí-li graf spojitě funkce $f(x)$ v bode $B = [x_0, f(x_0)]$ z jedné strany tečny na druhou, říkáme, že $f(x)$ má v bode B (tj. pro x_0) inflexní bod.



Derivace a integrály

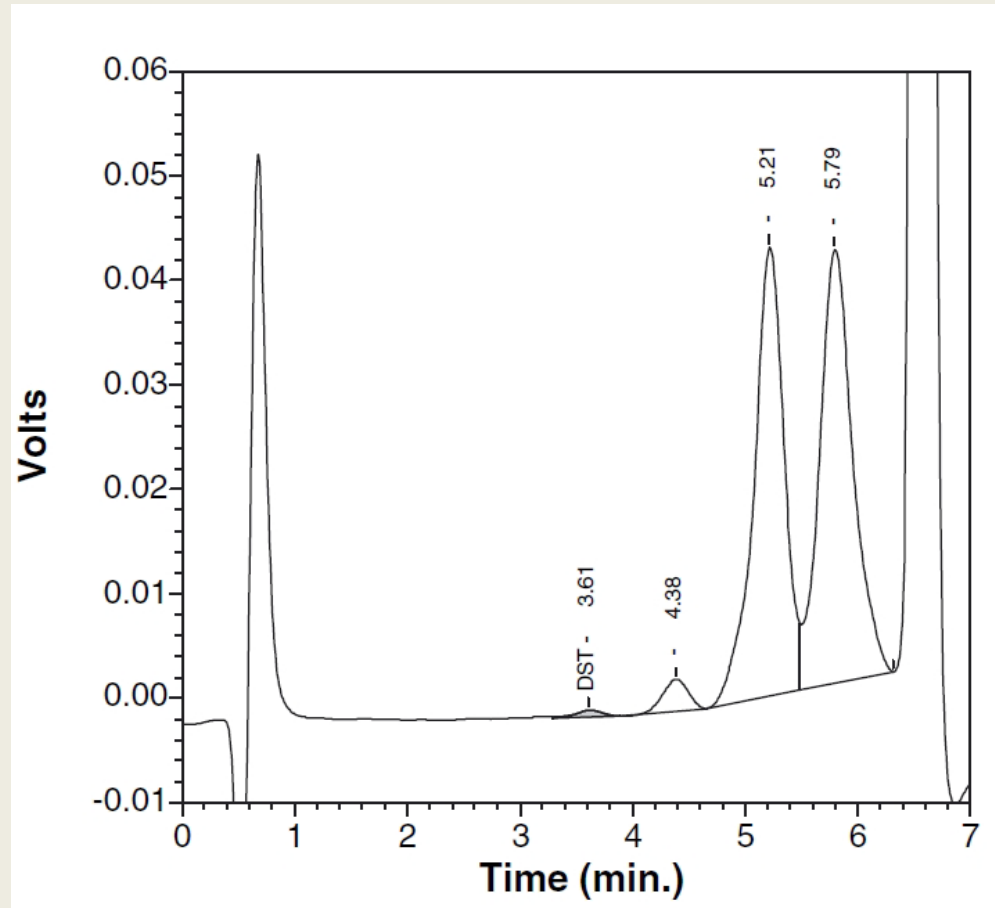


Určení inflexního bodu – hodnota první derivace je zde maximální



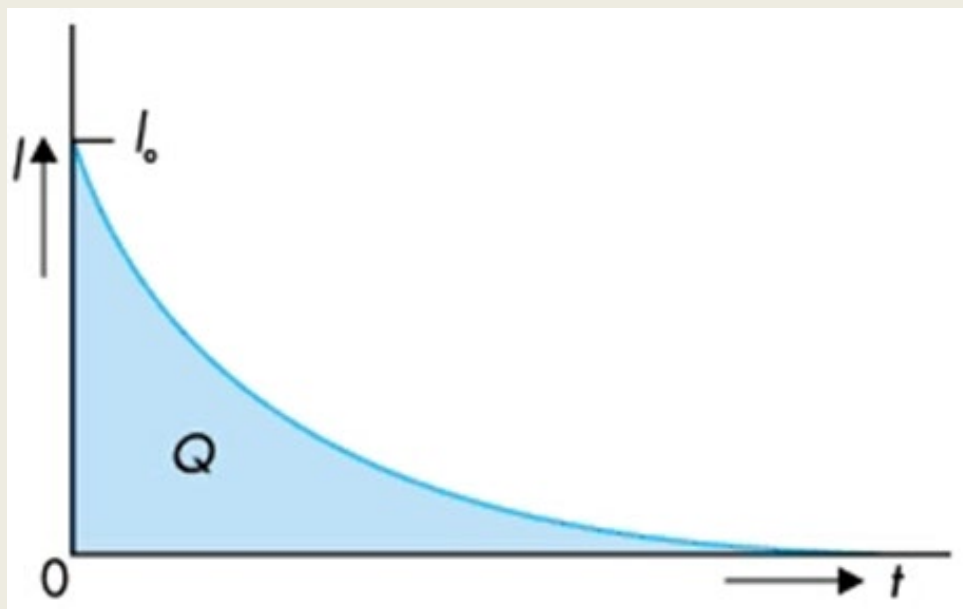
Inflexní bod: hodnota 1. derivace je zde maximální

Derivace a integrály



Určení plochy pod křivkou („plocha píku“ je úměrná koncentraci látky)

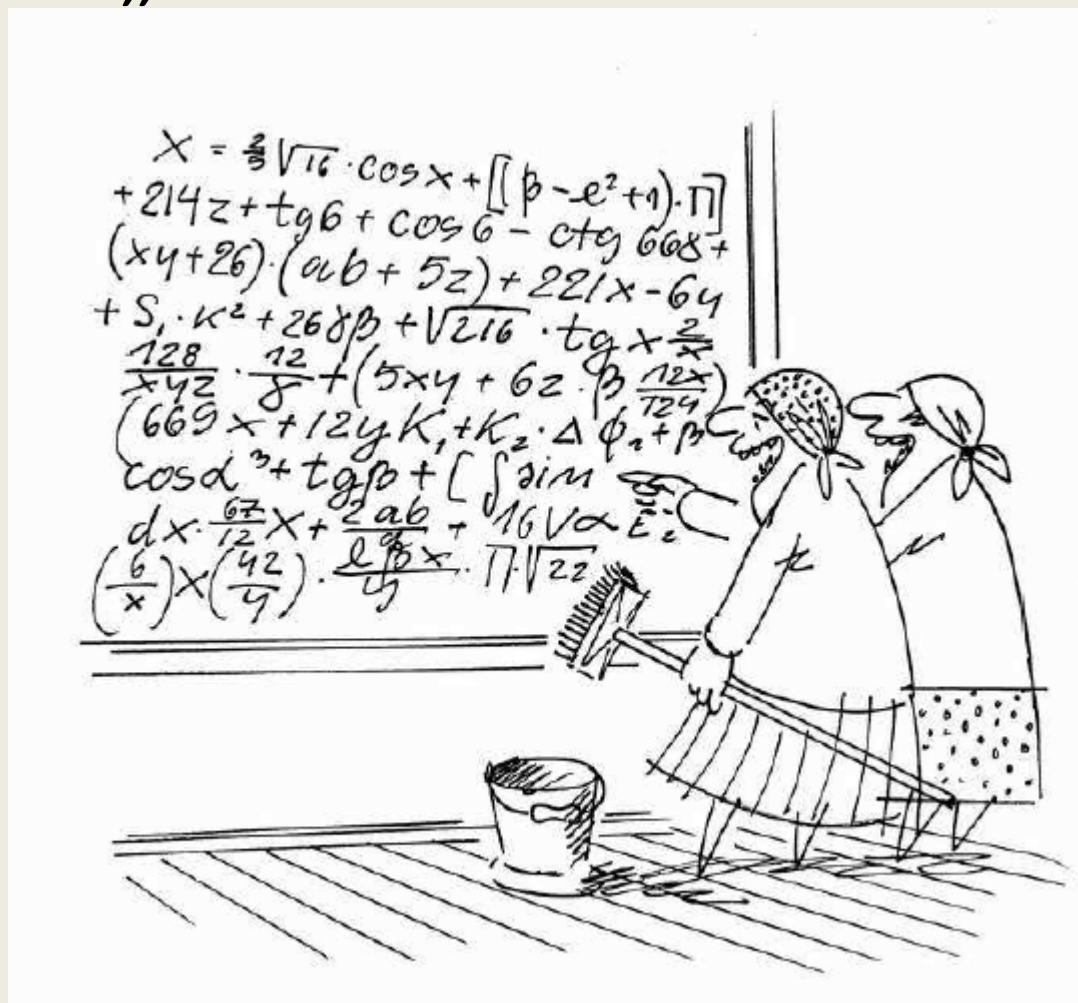
Derivace a integrály



Určení plochy pod křivkou (coulometrie: počet vyměněných elektronů při chemické reakci)

(Poslední) Matematická vsuvka VI.

„funkce – čtvrtá část“



Vyšší dívčí: operátory

$$\nabla = \frac{\partial}{\partial x} \mathbf{i} + \frac{\partial}{\partial y} \mathbf{j} + \frac{\partial}{\partial z} \mathbf{k}$$

$$\nabla = \begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial x} \\ \frac{\partial}{\partial y} \\ \frac{\partial}{\partial z} \end{pmatrix}$$

„nabla“ – první derivace funkce podle souřadnic

$$\Delta = \nabla^2$$

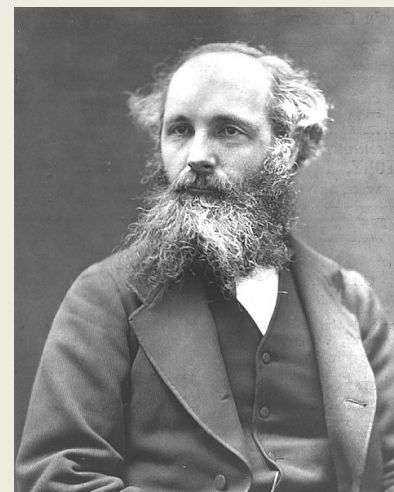
„nabla na druhou je lapla“

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$$

„lapla“ – druhá derivace funkce podle souřadnic

Vektorové operátory: divergence (tryskání) a rotace (otáčení)

$$\begin{aligned}\operatorname{div} \mathbf{D} &= \rho, & \operatorname{rot} \mathbf{H} &= \mathbf{j} + \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t}, \\ \operatorname{rot} \mathbf{E} &= -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}, & \operatorname{div} \mathbf{B} &= 0.\end{aligned}$$



Maxwellovy rovnice popisující vlastnosti elektromagnetického pole



Matematické universum a zároveň krásno:

$$e^{i\pi} + 1 = 0$$

Eulerova rovnice

Leonhard Euler; 1748, **Introductio in analysin infinitorum**

(Úvod do analýzy nekonečna)

$$e = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} = \frac{1}{0!} + \frac{1}{1!} + \frac{1}{2!} + \frac{1}{3!} + \frac{1}{4!} + \cdots = 2,7182818284....$$

$$e^x = \sum_{j=0}^{\infty} \frac{x^j}{j!},$$

$$e^{i\pi} + 1 = 0$$

Výše uvedený vztah je považován za krásný z několika hledisek: obsahuje pět důležitých konstant (0, 1, e, i, π) a tři základní aritmetické operace (sčítání, násobení, umocnění).

Benjamin Peirce k němu řekl svým studentům následující:

Gentlemen, we have not the slightest idea what this equation means, but we may be sure that it means something very important.

Tento materiál je určen pouze pro výuku studentů.

This presentation has been scheduled for educational purposes only.

Pokud má někdo dojem, že použité obrázky (jiné než moje vlastní) jsou kryty copyrightem, necht' mi dá vědět.

If somebody believes, that pictures or figures in this presentation are covered by copyright, please let me know.

Jiří Gabriel (gabriel@biomed.cas.cz)