

ADELA IONESCU

DANA CONSTANTINESCU

Seria de Lucrări Didactice

Colectivul Editorial

Cristian Vladimirescu - coordonator

Maria–Magdalena Boureanu

Liliana–Maria Bucur

Dana Constantinescu

Aurelia Florea

Luminița Grecu

Florian Munteanu

Marcela Popescu

Paul Popescu

Mihaela Racilă

ADELA IONESCU

DANA CONSTANTINESCU

CAPITOLE DE MATEMATICI CU APLICAȚII ÎN CHIMIE



**EDITURA UNIVERSITARIA
CRAIOVA, 2024**

Referenți științifici

Conf.univ.dr. Mihaela RACILĂ

Conf.univ.dr. Nicoleta CIOATERĂ

Copyright © 2024 Editura Universitaria

Toate drepturile sunt rezervate Editurii Universitaria

Cod ISBN 978-606-14-2098-8

Seria de Lucrări Didactice ale Departamentului de Matematici Aplicate

Volumul 1: C. Vladimirescu, F. Munteanu, M. –M. Boureanu, D. Constantinescu, C. –P. Dăneț, A. Florea, L. –E. Temereancă, G. Popescu, C. Șterbeți, D. Bălă, *101 Teste pentru Proba Scrisă la Matematică a Examenului de Admitere la Licență la Facultatea de Automatică, Calculatoare și Electronică*, Editura Universitaria, Craiova, 2018, iii+325p.

Volumul 2: D. Bălă, M.–M. Boureanu, L. –M. Bucur, C. –P. Dăneț, L. Grecu, F. Munteanu, G. Popescu, M. Racilă, L. –E. Temereancă, C. Vladimirescu, *Teste Grilă pentru Proba Scrisă la Matematică a Examenului de Admitere la Licență la Facultatea de Automatică, Calculatoare și Electronică*, Editura Universitaria, Craiova, 2024, i+446p.

Volumul 3: A. Ionescu, D. Constantinescu, *Capitole de matematici cu aplicații în chimie*, Editura Universitaria, Craiova, 2024.

Coperta: Pompiliu Demetrescu

© 2024 by Editura Universitaria

Această carte este protejată prin copyright. Reproducerea integrală sau parțială, multiplicarea prin orice mijloace și sub orice formă, cum ar fi xeroxarea, scanarea, transpunerea în format electronic sau audio, punerea la dispoziția publică, inclusiv prin internet sau prin rețelele de calculatoare, stocarea permanentă sau temporară pe dispozitive sau sisteme cu posibilitatea recuperării informațiilor, cu scop comercial sau gratuit, precum și alte fapte similare săvârșite fără permisiunea scrisă a deținătorului copyrightului reprezintă o încălcare a legislației cu privire la protecția proprietății intelectuale și se pedepsesc penal și/sau civil în conformitate cu legile în vigoare.

Cuvânt înainte

Lucrarea de față se adresează studenților de la facultățile cu profil de științe aplicate, dar în special studenților din anul I de la Facultatea de Chimie, care au în planul de Învățământ disciplina Matematică.

Ea este însă utilă tuturor celor care folosesc matematica în activitatea lor pentru că trebuie privită în contextul predării interdisciplinare, care implică stabilirea și folosirea unor conexiuni între limbaje explicative sau operații, cu scopul diminuării delimitărilor care apar între disciplinele de învățământ clasice.

Lucrarea este structurată pe 14 capitole, urmând structura generală de 14 săptămâni a unui semestru școlar academic. Capitolele sunt grupate în funcție de ariile de bază ale matematicii cu aplicații directe în științe.

În capitolul 1, sunt prezentate elemente generale de teoria numerelor și a structurilor matematice fundamentale (algebrică, de ordine, topologică).

Capitolul 2 se referă la elemente de bază din algebra liniară, cu accent pe studiul și rezolvarea sistemelor liniare.

Următoarele trei capitole sunt dedicate statisticii descriptive, punându-se accentul în abordare, pe elementele fundamentale din categoria indicatorilor statistici, corelația datelor, teste de concordanță statistice, împreună cu aplicații în chimie. Contextul matematic este favorabil evidențierii utilității deosebite a formulelor din această zonă matematică, în analiza și compararea mai multor seturi de date, experimentale și calculate, indiferent din ce zonă a științelor aplicate provin acestea.

Capitolele 6 și 7 sunt dedicate studiului funcțiilor matematice elementare și reliefează modul cum acestea apar în modelarea diferitelor procese din chimie.

În capitolele 8 și 9 se realizează o sinteză a noțiunilor fundamentale ale calculului diferențial și integral pentru funcții reale de o variabilă reală.

Capitolele 10 și 11 sunt dedicate studiului ecuațiilor diferențiale, al sistemelor de ecuații diferențiale și al aplicațiilor lor în chimie. Este astfel abordată o zonă deosebit de importantă a chimiei, care nu poate exista fără ajutorul modelării matematice, și anume cinetica chimică.

În Capitolul 12 sunt prezentate unele aplicații ale calcului integral.

Capitolele 13 și 14, sunt dedicate studiului funcțiilor de două și mai multe variabile și al aplicațiilor lor în chimie.

Fiecare capitol conține elemente teoretice, probleme rezolvate și probleme propuse, ambele categorii de probleme conținând exemple relevante din chimie. Studenții au astfel la îndemână o paletă destul de largă de exemple de modele și aplicații. Toate elementele prezentate au referințe la o bibliografie acoperitoare pentru ramurile matematice abordate.

Predarea – învățarea interdisciplinară este o condiție importantă în înfăptuirea unui învățământ modern, formativ. Corelarea cunoștințelor de la diferitele obiecte de învățământ contribuie substanțial la realizarea educației studenților, la formarea și dezvoltarea flexibilității gândirii, a capacității lor de a aplica cunoștințele în practică.

De aceea sperăm că lucrarea va fi de un real folos studenților din domeniul chimie, dar nu numai, dat fiind modul sintetic în care sunt prezentate cunoștințe de bază din matematică, cu aplicații numeroase în toate domeniile. Nu considerăm, desigur, că am epuizat aria aplicațiilor corespunzătoare diferitelor teme de matematică abordate, de aceea suntem recunoscătoare celor care vor contribui la îmbunătățirea acestei lucrări.

Noiembrie 2024,

Autoarele

TEMA 1. MULȚIMEA NUMERELOR REALE. STRUCTURI MATEMATICE FUNDAMENTALE (ALGEBRICĂ, DE ORDINE, TOPOLOGICĂ). PROBLEME NUMERICE TIPICE

1.1. Mulțimea numerelor reale

Reamintim noțiuni de bază despre mulțimea N a numerelor naturale, mulțimea Z a numerelor întregi, mulțimea Q a numerelor raționale și mulțimea R a numerelor reale.

Mulțimea numerelor naturale este $N = \{0, 1, 2, 3, \dots, n, \dots\}$.

Mulțimea numerelor întregi este $Z = \{\dots, -n, \dots, -3, -2, -1, 0, 1, 2, 3, \dots, n, \dots\}$.

Mulțimea numerelor raționale este $Q = \left\{ \frac{m}{n} \mid m, n \in Z, n \neq 0, (m, n) = 1 \right\}$.

Aici m, n sunt nr întregi

Observații: **1)** $(m, n) = 1$ arată ca m și n nu au divizori comuni, deci fracțiile $1/2, 2/4, 3/6, \dots, n/(2n)$ reprezintă același număr rațional.

2) Există numere care nu pot fi scrise sub forma de fracție (adică nu sunt numere raționale), de exemplu $\sqrt{2}$. Astfel de numere se numesc numere iraționale.

Pentru a arăta că $\sqrt{2}$ nu este număr rațional se procedează prin reducere la absurd: presupunem că $\sqrt{2} = \frac{m}{n}$ și $(m, n) = 1$.

Atunci $(\sqrt{2})^2 = (m/n)^2$, deci $m^2/n^2 = 2$, adică $m^2 = 2n^2$. Aceasta arată că m este număr par, adică există $k \in N$ astfel încât $m = 2k$.

Din relația $m^2 = 2n^2$ rezultă atunci că $n^2 = 2k^2$, ceea ce arată că n este număr par.

Deoarece și m și n sunt numere pare rezultă că ele nu sunt prime între ele, adică $(m, n) \neq 1$. Aceasta contrazice presupunerea făcută.

Rezultă că presupunerea făcută nu este adevărată, adică $\sqrt{2}$ nu este număr rațional.

Numerale raționale și iraționale se deosebesc prin scrierea lor sub formă zecimală.

- dacă numitorul fracției m/n conține doar puteri ale lui 2 sau 5, atunci fracția zecimală corespunzătoare are un număr finit de zecimale nenule.

$$\text{Exemple: } \frac{3}{2} = 1,5, \quad \frac{7}{20} = 0,35, \quad -\frac{9}{50} = -0,18, \quad \frac{79}{250} = 0,316$$

- dacă numitorul fracției m/n nu conține puteri ale lui 2 sau 5, atunci fracția zecimală corespunzătoare are un număr infinit de zecimale care se repetă periodic (adică este o fracție zecimală periodică simplă).

$$\text{Exemple: } \frac{1}{3} = 0,3333 \dots = 0,(3),$$

$$\frac{1}{7} = 0,1428571428 \ 57142857 \dots = 0,(142857)$$

- dacă numitorul fracției m/n conține puteri ale lui 2 sau 5 dar și puteri ale altor numere, atunci fracția zecimală corespunzătoare are un număr infinit de zecimale dintre care o parte se repetă periodic (adică este fracție zecimală periodică mixtă).

$$\text{Exemple: } \frac{1}{6} = 0,16666 \dots = 0,1(6), \quad \frac{116}{495} = 0,234343434 \dots = 0,2(34)$$

- numerele iraționale au un număr infinit de zecimale care nu se repetă periodic. De exemplu, calculând $\sqrt{2}$ obținem $\sqrt{2} = 1,4142135 \dots$ și oricâte zecimale am calcula, ele nu se vor repeta periodic.

Oare de ce suntem siguri ca nu se vor repeta periodic zecimalele?

Pentru că $\sqrt{2}$ nu este număr rațional, deci nu se încadrează în nici una din categoriile prezentate anterior.

Există o infinitate de numere iraționale: între orice două numere raționale se află cel puțin un număr irațional și între orice două numere iraționale se află cel puțin un număr rațional.

Numerale iraționale pot fi approximate oricât de bine cu ajutorul numerelor raționale.

Exemplu: pentru $\sqrt{2} = 1,4142135 \dots$ avem următoarele aproximații $a_1 = 1,4 < \sqrt{2} < 1,5 = A_1$. Eroarea la aproximație este $e_1 = 0,1 = A_1 - a_1$.

$a_2 = 1,41 < \sqrt{2} < 1,42 = A_2$. Eroarea la aproximație este $e_2 = 0,01 = A_2 - a_2$
 $a_3 = 1,414 < \sqrt{2} < 1,415 = A_3$. Eroarea la aproximație este
 $e_3 = 0.001 = A_3 - a_3$

.....

$a_7 = 1,4142135 < \sqrt{2} < 1,4142136$. Eroarea la aproximație este
 $e_7 = 0.0000001 = A_7 - a_7$

.....

Mulțimea numerelor reale este formată din toate numerele raționale și iraționale, adică

$$R = Q \cup Ir .$$

1.1.1 Operații cu numere reale (structura algebrică a mulțimii numerelor reale)

Operațiile cu numere raționale sunt următoarele:

- adunarea: $\frac{a}{b} + \frac{p}{q} = \frac{aq + bp}{bq}$

- înmulțirea: $\frac{a}{b} \cdot \frac{p}{q} = \frac{ap}{bq}$

În raport cu aceste operații mulțimea numerelor raționale, Q , are o structură de corp comutativ.

Mai complicate sunt operațiile cu numere iraționale: dacă numerele iraționale a și b au aproximațiile de ordin n a_n, A_n , respectiv b_n, B_n , atunci $a + b$ este numărul (unic) aflat între $a_n + b_n$ și $A_n + B_n$ pentru orice $n \in N$,
 $a \cdot b$ este numărul (unic) aflat între $a_n \cdot b_n$ și $A_n \cdot B_n$ pentru orice $n \in N$.

În practică, pentru efectuarea operațiilor cu numere iraționale se consideră aproximații raționale ale numerelor și se adună (înmulțesc) acestea.

Exemplu pentru a calcula $\sqrt{2} + \sqrt{3}$ cu eroare de 0,01 se consideră aproximațiile acestora cu eroare 0,001, adică

$$a_3 = 1,414 < \sqrt{2} < 1,415 = A_3, \text{ respectiv } b_3 = 1,732 < \sqrt{3} < 1,733 = B_3$$

Atunci $a_3 + b_3 = 3,146 < \sqrt{2} + \sqrt{3} < 3,148 = b_3 + B_3$ și rezultă că aproximarea $\sqrt{2} + \sqrt{3} \approx 3,14$ are două zecimale exacte.

Pentru a obține un număr mai mare de zecimale exacte se consideră aproximații de ordin mai mare.

Operațiile de adunare și înmulțire au proprietăți importante, care ne ajută să efectuăm calcule numerice complicate:

D1: Adunarea este lege de compoziție internă, adică suma a două numere reale este un număr real: $\forall x, y \in R, x + y \in R$

A1: Adunarea este asociativă, adică $(x + y) + z = x + (y + z), \forall x, y, z \in R$

(această proprietate ne permite să grupăm termenii atunci când îi adunăm)

N1: Adunarea are ca element neutru numărul 0: adică $x + 0 = 0 + x, \forall x \in R$

S1: Orice număr real x are ca simetric față de adunare numărul $-x$, adică $x + (-x) = -x + x = 0, \forall x \in R$.

C1: Adunarea este comutativă, adică $x + y = y + x, \forall x, y \in R$

(această proprietate ne permite să schimbăm ordinea termenilor unei adunări)

D2: Înmulțirea este lege de compoziție internă, adică produsul oricăror numere reale este un număr real: $\forall x, y \in R, x \cdot y \in R$.

A2: Înmulțirea este asociativă, adică $(x \cdot y) \cdot z = x \cdot (y \cdot z), \forall x, y, z \in R$

(această proprietate ne permite să grupăm factorii unui produs)

N2: Înmulțirea are ca element neutru numărul „1”, adică $x \cdot 1 = 1 \cdot x = x, \forall x \in R$

S2: Orice număr real $x \neq 0$ are inversul $1/x$, adică $x \cdot \frac{1}{x} = \frac{1}{x} \cdot x = 1, \forall x \neq 0$ (această proprietate ne permite să schimbăm ordinea factorilor)

(din acest motiv nici o fracție nu poate avea numitorul „0”)

C2: Înmulțirea este comutativă, adică $x \cdot y = y \cdot x, \forall x, y \in R$

(această proprietate ne permite să schimbăm ordinea factorilor)

D: Înmulțirea este distributivă față de adunare, adică $x(y + z) = xy + xz, \forall x, y, z \in R$

(această proprietate ne permite să desfacem parantezele, așa cum facem de obicei)

Toate aceste proprietăți se demonstrează (cu dificultate) pornind de la definițiile operațiilor de adunare și înmulțire prezentate anterior. Rezultă următoarea propoziție:

Propoziția 1.1: Mulțimea numerelor reale, R , este corp comutativ în raport cu operațiile de adunare și înmulțire. [1]

1.1.2. Ordonarea numerelor reale (structura de ordine a mulțimii numerelor reale)

Pe mulțimea numerelor reale se poate introduce relația de ordine lexicografică.

În esență $x \leq y$ dacă și numai dacă $y - x$ este număr pozitiv.

Această relație de ordine are două proprietăți importante:

P1: este o relație de ordine totală, adică orice două numere reale pot fi comparate: $\forall x, y \in R$ avem $x \leq y$ sau $y \leq x$.

(această proprietate ne permite să reprezentăm toate numerele reale pe axa numerelor: dacă $x < y$, atunci x va fi reprezentat pe axă la stânga lui y)

P2: relația de ordine este compatibilă cu structura algebrică, adică:

P21: dacă $a \leq b$ și $x \leq y$, atunci $a + x \leq b + y$

(această proprietate ne permite să adunăm inegalități de același sens)

P22: dacă $a \leq b$ și $0 < x$, atunci $ax \leq bx$

(această proprietate ne permite să înmulțim o inegalitate cu un număr pozitiv fără să schimbăm sensul inegalității)

Propoziția 1.2. $(R, +, \cdot)$ are o structură de corp comutativ total ordonat
Reprezentarea geometrică a mulțimii numerelor reale este posibilă deoarece orice două numere reale pot fi comparate. Numerele reale se reprezintă pe axa numerelor reale: numărul „ x ” se reprezintă prin punctul de abscisă „ x ”.



Cu ajutorul relației de ordine $\leq$ se pot defini intervalele:

$$(a,b) = \{x \mid a < x < b\} \quad (\text{interval deschis})$$

$$[a,b] = \{x \mid a \leq x \leq b\} \quad (\text{interval închis}).$$

Aceste mulțimi sunt utile pentru descrierea structurii geometrice (topologice) a lui $\mathbb{R}$.

1.1.3. Structura topologică (geometrică) a mulțimii numerelor reale

Pentru orice număr real x *modulul* este definit astfel:

$$|x| = \max \{x, -x\} = \begin{cases} x, & x \geq 0 \\ -x, & x < 0 \end{cases}$$

Exemple: $|3|=3$, deoarece $3>0$; $|-7|=-(-7)=7$, deoarece $-7<0$.

Următoarele proprietăți pot fi verificate pornind de la definiție:

$$[N_1] \quad |x| \geq 0 \text{ pentru orice } x \in \mathbb{R}; \quad |x| = 0 \Leftrightarrow x = 0$$

$$[N_2] \quad |x + y| \leq |x| + |y| \text{ pentru orice } x, y \in \mathbb{R}$$

$$[N_3] \quad |x \cdot y| = |x| \cdot |y| \text{ pentru orice } x, y \in \mathbb{R}$$

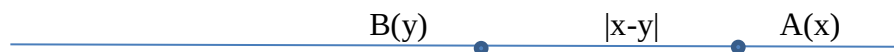
$$[N_4] \quad |x| = |-x|$$

Observații: 1. $|x + y| = |x| + |y|$ dacă și numai dacă $x \cdot y \geq 0$, adică x și y au același semn.

2. Cantitatea $|x|$ reprezintă distanța între punctele $O(0)$ și $A(x)$, adică lungimea segmentului OA

Distanța (euclidiană) dintre două numere reale x și y este lungimea segmentului ce unește punctele $A(x)$ și $B(y)$. Ea se calculează folosind formula

$$d(x, y) = |x - y|.$$



Se verifică imediat, folosind $[N_1]$, $[N_2]$, $[N_3]$, următoarele proprietăți:

$$[D_1] \quad d(x, y) \geq 0 \text{ pentru orice } x, y \in \mathbb{R}; \quad d(x, y) = 0 \Leftrightarrow x = y$$

(proprietatea arată că distanța între două numere e un număr pozitiv)

$$[D_2] \quad d(x, y) = d(y, x) \text{ pentru orice } x, y \in \mathbb{R}$$

(proprietatea arată că distanța este aceeași, indiferent de la ce extremitate a segmentului AB începem măsurătoarea)

$$[D_3] \quad d(x, z) \leq d(x, y) + d(y, z) \text{ pentru orice } x, y, z \in \mathbb{R}$$

(dacă $y \in [x, z]$, atunci $d(x, z) = d(x, y) + d(y, z)$ iar dacă $y \in (-\infty, x) \cup (y, +\infty)$ atunci $d(x, z) < d(x, y) + d(y, z)$)

Structura topologică (geometrică) a mulțimii numerelor reale, care folosește noțiunea de vecinătate a unui punct, este cea care stă la baza analizei matematice [1].

Definiția 1.1: Se numește **vecinătate a punctului** $x \in R$ orice interval deschis (a, b) ce conține pe x . Se scrie $(a, b) \in V(x)$

Se numește **vecinătate a lui** $+\infty$ orice interval de forma $(a, +\infty)$. Se scrie $(a, +\infty) \in V(+\infty)$

Se numește **vecinătate a lui** $-\infty$ orice interval de forma $(-\infty, b)$. Se scrie $(-\infty, b) \in V(-\infty)$.

1.2. Probleme numerice tipice

1.2.1 Mărimi proporționale. Regula de trei simplă

O variabilă numerică $y : A \rightarrow R$ este direct proporțională cu variabila numerică $x : A \rightarrow R$ dacă raportul $y(a)/x(a)$ are aceeași valoare pentru orice $a \in A$. Dacă $\frac{y(a)}{x(a)} = k, \forall a \in A$, atunci k se numește factor de proporționalitate a variabilei y în raport cu variabila x .

Exemple de variabile (mărimi) direct proporționale:

1) Raza și lungimea cercului sunt variabile direct proporționale. Considerăm $y : (0, +\infty) \rightarrow (0, +\infty), y(r) = r$ și

$x : (0, +\infty) \rightarrow (0, +\infty), x(r) = 2\pi r$. Deoarece $\frac{y(r)}{x(r)} = \frac{r}{2\pi r} = \frac{1}{2\pi} = k$ rezultă că variabilele y și x sunt proporționale și factorul de proporționalitate este $k = \frac{1}{2\pi}$.

2) În fizică, masa unei cantități variabile dintr-o substanță chimică A este direct proporțională cu volumul său, adică $\frac{m(a)}{v(a)} = \rho$ unde ρ este densitatea absolută a substanței A .

3) În cazul gazelor ideale considerăm n_A măsura în moli a gazului ideal A aflat în volumul v_A . Avogadro a observat că raportul $\frac{n_A}{v_A}$ atât în raport cu cantitatea de gaz cât și cu natura chimică a gazului (în aceleași condiții de temperatură și presiune).

Dacă se consideră mai multe gaze ideale A, B, C..., atunci

$$\frac{n_A}{v_A} = \frac{n_B}{v_B} = \frac{n_C}{v_C} = \dots$$

în condițiile în care $v_A = v_B = v_C$ rezultă că $n_A = n_B = n_C$. Aceasta este binecunoscuta lege a lui Avogadro (enunțată în 1811).

Un mol de gaz ocupă aproximativ $22,4 \text{ dm}^3$ în condiții standard de temperatură și presiune. Numărul de molecule dintr-un mol de substanță este numărul lui Avogadro, aproximativ $6,022 \cdot 10^{23}$ particule/mol.

În realitate gazele nu sunt gaze ideale. Dacă însă presiunea gazului este relativ mica (ceea ce practic se realizează mărind suficient de mult volumul) atunci gazul se comportă ca un gaz ideal și are loc relația de proporționalitate $\frac{v}{n} = 22,415$. Pe această relație se bazează metoda stoechiometrică de calcul a volumelor cantităților de substanțe gazoase, atunci când presiunea este relativ mica.

4. Dintr-un amestec omogen S conținând o substanță activă A se consideră o cantitate variabilă "s" conținând o cantitate "a" de substanță activă. Atunci raportul $\frac{a}{s}$ are o valoare constantă, care reprezintă concentrația substanței A în amestecul S.

În practică intervine următoarea problemă practică:

Problemă: Știind că o variabilă numerică y este direct proporțională cu o altă variabilă x, și cunoscând o pereche de valori y_1, x_1 care se corespund prin relația respectivă, se cere să se calculeze valoarea y_2 care corespunde valorii x_2 a variabilei x.

$$\text{Rezolvare: Deoarece } \frac{y_1}{x_1} = \frac{y_2}{x_2} \text{ rezultă că } y_2 = \frac{x_2 y_1}{x_1}.$$

Aceasta este **regula de trei simplă**, conform schemei bine cunoscute: