Praktikum matematiky pro chemiky

opora pro studium

Informace o předmětu

Základní informace

Název předmětu: **Praktikum matematiky pro chemiky**
Forma výuky: seminář
Ověření studijních výsledků: zápočet

Anotace

Cílem kurzu je prohloubení znalostí a dovedností studentů z předmětu Matematika I. Důraz je kladen na řešení úloh z praxe a používání matematického softwaru. Studenti se také seznámí se základní matematickou terminologií v anglickém jazyce. Výuka probíhá především v prostředí programu GeoGebra, využívány budou ale i jiné volně dostupné programy.

Sylabus

1) Úvod do ovládání programu GeoGebra, verze programu, zdroje pro studium
2) Elementární funkce a jejich vlastnosti, inverzní funkce ke goniometrickým funkcím
3) Rovnice, nerovnice a jejich soustavy, geometrický význam, použití v praxi
4) Numerické řešení rovnic (úvod do problematiky, geometrický význam)
5) Limity posloupností a funkcí (geometrický význam, výpočet, odhad limity z grafu)
6) Derivace (geometrický význam, výpočet)
7) Průběh funkce, monotonie, konvexnost/konkávnost, asymptoty
8) Extrémy funkcí, použití v praxi
9) Taylorův polynom (geometrický význam, konstrukce)
10) Riemannův integrál (geometrický význam, numerický výpočet integrálu)
11) Výpočet integrálu, použití v praxi
12) Interpolace a aproximace funkcí
13) Shrnutí

Zdroje pro studium

- BRŮŽKOVÁ, Nikola. *GeoGebra Grafický kalkulátor – návod*. Dostupné z: `https://www.geogebra.org/m/grwxgqmx`.
- BRŮŽKOVÁ, Nikola. *Návody k aplikaci GeoGebra Classic*. Dostupné z: `https://www.geogebra.org/m/zwbyag58`.
- CUNNINGHAM, Allan a Rory WHELAN. *Maths for Chemists*. University of Birmingham, University of Leeds, 2014. Dostupné z: `https://www.birmingham.ac.uk/Documents/college-eps/college/stem/Student-Summer-Education-Internships/Maths-for-Chemists-Booklet.pdf`.
- DOŠLÁ, Zuzana a Petr LIŠKA. *Matematika pro nematematické obory: s aplikacemi v přírodních a technických vědách*. Praha: Grada, 2014. ISBN 978-80-247-5322-5.

Programové vybavení

V rámci tohoto předmětu budou využívány tyto programy:

- GeoGebra Klasik 6 (ke stažení na `https://www.geogebra.org/download`) nebo její online varianta (dostupná na `https://www.geogebra.org/classic`)
- Excel libovolné verze (postačuje i Excel Online)

Blok 1 – limita posloupnosti

Cílem tohoto bloku se vyzkoušet si odhadovat limity složitějších posloupností na základě jejich vlastností.

Co se naučíte

✓ Pomocí Excelu a GeoGebry odhadovat limity sloužitějších posloupností a zdůvodňovat správnost těchto odhadů.

Pokyny pro studium

1) Odhadněte, čemu je rovna $\lim\limits_{n\to\infty} \frac{2^n}{n^2}$. Na základě čeho takto usuzujete?

2) V Excelu nechte vypsat prvních 25 hodnot, které nabývají posloupnosti $a_n = 2^n$ a $b_n = n^2$ a zároveň i hodnotu jejich podílu.

   Řešení v Excelu: `https://www.dropbox.com/s/nc9th4evu53xthm/Limita_posloupnosti.xlsx?dl=0`
   Konstrukce v GeoGebře: `https://www.geogebra.org/classic/f4h4dpgf`

3) Jaké vlastnosti mají posloupnosti $a_n = 2^n$ a $b_n = n^2$? Jsou rostoucí/klesající, omezené? Jakých hodnot nabývají? Co to znamená pro jejich podíl, tj. námi zkoumanou posloupnost?

   (Odpověď: Obě posloupnosti nabývají kladných hodnot, jsou rostoucí, ale posloupnost $a_n = 2^n$ roste rychleji. Proto platí, $\lim_{n\to\infty} \frac{2^n}{n^2} = \infty$.)

4) Odhadněte, čemu je rovna $\lim\limits_{n\to\infty} \frac{10^n}{n!}$. Stejně jako v předchozím případě zkuste experimentovat v Excelu a na základě vlastností posloupností v čitateli a jmenovateli zlomku zdůvodnit vámi uvedený výsledek.

   (Odpověď: Obě posloupnosti opět nabývají kladných hodnot a jsou rostoucí, ale v tomto případě posloupnost ve jmenovateli zlomku roste rychleji – tento jev se neprojeví hned od začátku, nejprve podíl roste, růst podílu se zastaví u devátého členu a následně podíl klesá. Proto platí, že $\lim_{n\to\infty} \frac{10^n}{n!} = 0$.)

   Řešení v Excelu je zde: `https://www.dropbox.com/s/nc9th4evu53xthm/Limita_posloupnosti.xlsx?dl=0` (na druhém listu)

Blok 2 – funkce jedné proměnné

Cílem je tohoto bloku je v Geogebře zkonstruovat inverzní funkci k dané prosté funkci pomocí osové souměrnosti podle přímky $y = x$.

Co se naučíte

✓ Nakreslit v GeoGebře graf funkce jedné proměnné na základě jejího předpisu,

✓ v Geogebře omezit definiční obor funkce, tak aby na něm funkce byla prostá,

✓ používat osovou souměrnost v Geogebře.

Pokyny pro studium

1) Projděte si návod k základnímu ovládání programu GeoGebra na webu `https://www.geogebra.org/m/zwbyag58` (stačí sekce Grafy).

2) Zopakujte si definici inverzní funkce k dané funkci.

3) Jmenujte příklady dvojic funkcí, které jsou k sobě inverzní. Jaké jsou jejich definiční obory a obory hodnot? Jak spolu souvisí?

4) V Geogebře sestrojte grafy funkcí $f(x) = 10^x$ a $g(x) = \log x$. Z grafů je patrné, že funkce jsou osově souměrné, a to podle přímky $y = x$. Doplňte do vaší konstrukce přímku $y = x$ a graf funkce $f(x) = 10^x$ zobrazte osově souměrně podle této přímky. Obraz by se měl shodovat s funkcí $g(x) = \log x$.

   Konstrukce v GeoGebře: `https://www.geogebra.org/m/bt5rpxef`

5) Dále v GeoGebře sestrojte graf funkce $f(x) = x^2$ a pomocí osové souměrnosti podle přímky $y = x$ najděte inverzní funkci k této funkci. Jaký objekti jste získali, jde vůbec o funkci?

6) Omezte definiční obor funkce $f(x) = x^2$ na interval $\langle 0, +\infty)$ a opět zkonstruujte inverzní funkci k této funkci (omezení definičního oboru lze provést např. takto: `f(x)=x^2,x>=0` nebo použijte příkaz `Funkce`, manuál je zde: `https://wiki.geogebra.org/cs/P%C5%99%C3%ADkaz_Funkce`). Je získaná inverzní funkce již funkcí? Jakou vlastnost musí funkce splňovat, aby k ní šla sestrojit inverzní funkce?

   (Odpověď: Funkce musí být prostá.)

   Konstrukce v GeoGebře: `https://www.geogebra.org/m/debxy2tk`

Úlohy

V GeoGebře zkonstruujte inverzní funkci k funkcím $\sin x$, $\cos x$, $\mathrm{tg} x$ a $\mathrm{cotg} x$. Omezte vhodně definiční obor všech funkcí tak, aby bylo možné inverzní funkce sestrojit. Proč je to nutné?

Nápověda: Konstrukce pro funkci $\sin x$ je na webu `https://www.geogebra.org/m/m4necubt`.

Blok 3 – průběh funkce

Cílem tohoto bloku je naučit se vyšetřovat průběh funkce v GeoGebře, přičemž budete kopírovat postup, který provádíte u ručního výpočtu. Dále si vyzkoušíte řešení úloh na extrémy funkcí pomocí experimentování.

Co se naučíte

- ✓ Vyšetřovat průběh funkce pomocí GeoGebry v prostředí CAS,
- ✓ řešit v prostředí CAS rovnice a nerovnice,
- ✓ experimentovat v prostředí Excelu a GeoGebry při řešení úloh.

Pokyny pro studium

1) Projděte si základní ovládání CAS pohledu v Geogebře na webu `https://wiki.geogebra.org/cs/CAS_pohled`,

2) Klasickým způsobem (tj. ručně) vyšetřete průběh funkce $f(x) = x^2 \ln x$.

3) Totéž proveďte v prostředí CAS. Využijte následující příkazy a postupy:

   - Průsečíky s osou x najdeme řešením rovnice $f(x) = 0$.

   - `Limita(funkce,bod)` – i pro výpočty limit v nevlastních bodech, nekonečno zadáme z klávesnice GeoGebry, nebo zapíšeme `infinity`
   - `LimitaZleva(funkce, bod)`, `LimitaZprava(funkce,bod)`
   - `Derivace(f,n)` – `n` značí řád derivace
   - `Extrem(funkce,a,b)` – numericky najde extrém na intervalu (a, b), pro polynom najde vždy všechny extrémy
   - Hledáte-li intervaly, na nichž je funkce rostoucí/klesající, je vhodné spočítat v GeoGebře první derivaci, a pak vyřešit rovnice $f'(x) > 0$, resp. $f'(x) < 0$. Podobně body, v nichž je první derivace nulová (patří mezi body podezřelé z extrému), najdeme řešením rovnice $f'(x) = 0$.
   - `InflexniBod(polynom)` – inflexní body nepolynomiální funkce je třeba hledat jako extrémy derivace (viz předchozí bod, pouze pracujeme s druhou derivací)
   - `Asymptota(funkce)` – někdy najde všechny asymptoty, občas je třeba pomáhat si výpočtem limit

     Konstrukce v GeoGebře: `https://www.geogebra.org/m/cgwrqzhw`

4) Vyřešte následující úlohu:

Mezi všemi kladnými čísly vyberte to, jehož součet s jeho převrácenou hodnotou je minimální.

- Najděte funkci, která popisuje uvedenou situaci. V tomto případě jde o funkci $m(x) = x + \frac{1}{x}$.
- Pomocí experimentování v Excelu zjistěte, v jakém bodě x má funkce $m(x)$ minumum. Příklad experimentu je zde: `https://www.dropbox.com/s/k5xlwgqpvdcvfx2/Extremy_uloha_1.xlsx?dl=0`.
- Jakou velikost kroku jste volili? Jaký vliv to má na výsledek? Získáme pomocí tohoto experimentování vždy správný výsledek? Proč?
- Úlohu vyřešte pomocí diferenciálního počtu a porovnejte s výsledkem vašeho experimentování (řešením je $x = 1$).

Úlohy

Vyřešte „problém líného kosa“:

> Na plotě, jehož výška je 1 m, sedí kos. Ve vzdálenosti 15 m od plotu roste strom, který má větev ve výšce 3 m. Na zemi mezi plotem a stromem jsou hustě rozsety žížaly. V jaké vzdálenosti od plotu má kos sezobnout žížalu, aby proletěl trasu plot $\rightarrow$ žížala $\rightarrow$ strom po přímkách a po nejkratší dráze?

- Situaci nakreslete v GeoGebře a pomocí příkazu `Vzdalenost` odhadněte vzdálenost, kde má kos přistát. Pro konstrukci situace můžete také použít příkaz `Bod na objektu`, pomocí něhož vytvoříte bod, který je přichycen k danému objektu (např. přímce), ale může se po něm pohybovat – takto zkonstruujete hypotetické místo přistání kosa. Dále už vás zajímá jen součet vzdáleností od místa na stromě a od místa na plotě.
- Najděte funkci, která popisuje uvedenou situaci.
- Úlohu vyřešte v Geogebře jednak pomocí CAS pohledu (např. pomocí příkazu `Extrem`, nebo řešením rovnice $f' = 0$, jednak v grafickém okně (vykreslením grafu funkce, nebo jako průsečík grafu první derivace fukce s osou x).

Nápověda:

- nakreslení situace: `https://www.geogebra.org/classic/ezkerega`
- řešení v CAS: `https://www.geogebra.org/classic/aknbpufb`
- řešení graficky: `https://www.geogebra.org/classic/zumeabke`

Blok 4 – Taylorův polynom

Cílem tohoto bloku je naučit se v GeoGebře konstruovat Taylorův polynom pro danou funkci.

Co se naučíte

- ✓ V GeoGebře zkonstuovat Taylorův polynom pro zadanou funkci v daném bodě,
- ✓ pracovat s posuvníky v GeoGebře.

Pokyny pro studium

1) Zopakujte si postup výpočtu Taylorova polynomu stupně n pro funkci $f(x)$ v bodě a.

2) Pomocí příkazu `TaylorovaRada(<Funkce>,<Číslo a>,<Číslo n>)` postupně zkonstruujte Taylorovy polynomy stupně $n = 1, 2, 3, 4, 5$ pro funkci $f(x) = e^x$ v bodě $a = 0$. Všechny Taylorovy polynomy zakreslete do jedné soustavy souřadnic, do této soustavy souřadnic zakreslete i funkci $f(x) = e^x$. Konstrukce v GeoGebře: `https://www.geogebra.org/classic/zw8pfzgp`

   Manuál k funkci `TaylorovaRada` najdete zde: `https://wiki.geogebra.org/cs/P%C5%99%C3%ADkaz_TaylorovaRada`.

3) Porovnejte chování jednotlivých Taylorových polynomů v okolí bodu $a = 0$. Který z polynomů se v okolí nuly nejvíce přibližuje funkci f(x) = e^x?

4) V GeoGebře vytvořte posuvník p, který bude nabývat hodnot 0 až 20. Znovu sestavte Taylorův polynom pro funkci $f(x) = e^x$ v bodě $a = 0$, za `<Číslo n>` tentokrát zvolte vámi vytvořený posuvník, tj. p. Konstrukce v GeoGebře: `https://www.geogebra.org/classic/tycy6dur`

   Manuál k funkci `Posuvník` naleznete zde: `https://wiki.geogebra.org/cs/N%C3%A1stroj_Posuvn%C3%ADk`.

5) Opět zkoumejte chování Taylorova polynomu v závislosti na jeho stupni p. Všímejte si intervalu, na němž se funkční hodnoty Taylorova polynomu blíží funkčním hodnotám funkce $f(x)$.

6) Zkonstruujte Taylorův polynom pro funkci $f(x) = \sqrt{x}$ v bodě $a = 4$, stupeň polynomu volte v rozmezí 1 až 10 (pomocí posuvníku). Porovnejte funkční hodnoty funkce $f(x)$ a Taylorova polynomu v $x = 5$, $x = 4{,}5$, a $x = 4{,}1$. Odhadněte chybu, které jste se použitím Taylorova polynomu dopustili, chybu odhadujte jako rozdíl funkčních hodnot funkce $f(x)$ a Taylorova polynomu v uvedených bodech. Konstrukce v GeoGebře: `https://www.geogebra.org/classic/ncrrxstw`

Úlohy

Určete přibližnou hodnotu $\sqrt[3]{30}$ pomocí Taylorova polynomu stupně 2.

Nápověda:

- Nejprve je nutné určit, pro jakou funkci a v jakém bodě budeme Taylorův polynom konstruovat. Následně již stačí Taylorův polynom sestavit a dosadit do něho $x = 30$.
- řešení v GeoGebře: `https://www.geogebra.org/classic/tfz9qqtm`

Blok 5 – numerické metody

V tomto bloku se seznámíte se základními numerickými metodami a vyzkoušíte si jejich provedení v GeoGebře a Excelu.

Co se naučíte

- ✓ Pomocí CAS pohledu numericky řešit algebraické rovnice,
- ✓ v prosředí CAS pohledu numericky určit hodnotu určitého integrálu,
- ✓ pomocí GeoGebry a Excelu interpolovat a aproximovat funkce.

Pokyny pro studium

1) V CAS pohledu se pokuste vyřešit rovnici $x = \cos x$. Při standardním postupu pomocí tlačítka „x =“ nenajde GeoGebra řešení. Je to z toho důvodu, že analytické řešení této rovnice neexistuje. Využijeme tedy metodu numerickou, která výsledek určí pouze přibližně (ale s libovolnou přesností). V CAS pohledu slouží pro tyto účely příkazu `NVyresit`, manuál k této funkci je na webu `https://wiki.geogebra.org/cs/P%C5%99%C3%ADkaz_NVyresit`.

   Rovnici $x = \cos x$ vyřešte pomocí této funkce, v geometrickém pohledu vykreslete funkce $f(x) = x$ a $g(x) = \cos x$ a najděte jejich průsečík. Jeho x-ovou souřadnici porovnejte s výsledkem řešení numerickou metodou.

   Konstrukce v GeoGebře: `https://www.geogebra.org/m/gxuqbrge`

2) Podobně existuje i několik metod určených pro numerický výpočet určitého integrálu, které spočívají v nahrazení integrované funkce nějakou jednodušší funkcí, např. polynomem. Mezi nejznámnější metody patří obdélníková metoda, kdy integrovanou funkci nahradíme po částech konstantní funkcí, nebo lichoběžníková metoda, která spočívá v nahrazení integrované funkce po částech lineární funkcí. V CAS pohledu GeoGebry pro tyto účely slouží příkaz `NIntegral(<Funce f>, <Počáteční hodnota a proměnné x>,<Koncová hodnota b proměnné x>)`, manuál k této funkci je zde: `https://wiki.geogebra.org/cs/P%C5%99%C3%ADkaz_NIntegral`.

   Pomocí této funkce vypočítejte $\int_1^2 \frac{\sin x}{x}\mathrm{d}x$ (tento integrál je jedním z mnoha, který není řešitelný analytickými metodami). V případě zájmu zkuste tento integrál vypočítat pomocí obdélníkové metody (applet zde: `https://www.geogebra.org/m/u4wha7d7`) a lichoběžníkové metody (applet zde: `https://www.geogebra.org/m/tfnhh8kq`).

3) V praxi jsou často používaná interpolace a aproximace funkcí:

   - V případě *interpolace* hledáme předpis polynomické funkce, která prochází zadanými body (pro n bodů vždy získáme polynom $(n-1)$-tého stupně).
   - U *aproximace* hledáme předpis funkce (obvykle lineární, kvadratická, exponenciální, logaritmická), která je v jistém smyslu nejblíže zadaným bodům; tato funkce nemusí zadanými body procházet.

- Aproximace je vhodná pro větší počet bodů nebo výsledky měření (zde může nastat situace, že pro jednu hodnotu x může být více hodnot y – to je v rozporu metodou interpolace, neboť body prokládáme funkci).

Interpolaci lze v GeoGebře provést pomocí příkazu `Mnohoclen(<Seznam n bodů>)` v Grafickém pohledu, kde do pole `<Seznam n bodů>` vkládáme názvy bodů tak, jak jsou pojmenovány v GeoGebře. Např. příkazem `Mnohoclen(A,B,C)` vytvoříme kvadratickou funkci, která prochází body A, B, C. Manuál pro tento příkaz je uveden zde: `https://wiki.geogebra.org/cs/P%C5%99%C3%ADkaz_Mnohoclen`

Aproximaci lze v GeoGebře provést v pohledu Tabulka, kde si zadáme příslušné body a následně volbou Regresní analýza dvourozměrných dat, kde si zvolíme model, který chceme využít – získaná funkce právě hledanou aproximací. Manuál k pohledu Tabulka je zde: `https://www.geogebra.org/m/zwbyag58#chapter/318090` (z tohoto manuálu si projděte kapitoly Jak vkládat data a odkázat se na buňku a Regresní analýza dvourozměrných dat). Ke stejnému výsledku se můžeme dostat i pomocí Excelu, v němž ze zadaných dat vytvoříme bodový graf a přidáme k němu spojnici trendu (návod zde: `https://exceltown.com/navody/pokrocila-analyza-regrese-korelace/linearni-regrese-v-excelu/`.

4) Metody zmíněné v předchozích odstavcích si vyzkoušejte na následující úloze:

   Pro sadu dat v tabulce najděte interpolační polynom příslušného stupně (zobrazte jeho rovnici) a zároveň tuto sadu dat aproximujte lineární funkcí.

x	1	2	5
y	-4	3	8

   - Intepolace – řešení v GeoGebře: `https://www.geogebra.org/m/u6tpxtba`
   - Aproximace – řešení v Geogebře: `https://www.geogebra.org/m/unjysqk5`
   - Aproximace – řešení v Excelu: `https://www.dropbox.com/s/eaiu5un5mo3ajmq/NM_interpolace.xlsx?dl=0`

5) Zájemci o hlubší porozumnění numerickým metodám mohou čerpat např. z knihy *Numerické metody* od Vratislavy Mošové, která je dostupná na webu `http://physics.ujep.cz/~jskvor/NME/DalsiSkripta/numerickemetody.pdf`.