

Toshxonov A.
O'qituvchisi
(NamDU)

KIMYO VA MATEMATIKA O'RTASIDAGI O'ZARO ALOQADORLIK

Ta'lim sohasini rivojlantirish va takomillashtirishda fanlararo aloqadorlikning o'рни juda katta hisoblanadi. Fanlarning bir-biriga bog'liqligi bir qancha muammolarning yechilishini osonlashtiradi. Fanlararo aloqadorlik bo'yicha juda ko'p ilmiy-amaliy ishlar olib borildiki, bular o'z navbatida amaliyotda o'z tasdig'ini topmoqda. Jumladan, kimyo va matematikaning o'zaro aloqalarini o'rganish yuzasidan yetarlicha tajribalar to'plangan, bu yo'nalishda ayrim ijobiy yechimlar topilgan, ular amaliyotchi o'qituvchilar uchun dastlabki ko'rsatmalar vazifasini ado eta oladi. Buning uchun o'qituvchi faqat o'zi dars berayotgan predmet materiallari ichida chegaralanib qolmasdan, boshqa o'quv predmetlarining asosiy mazmuni bilan ham qiziqishi, ularning o'zaro aloqador nuqtalarini ko'proq topishi va amaliyotda ulardan foydalanishi kerak bo'ladi.

Fanlararo aloqalarga doir tadqiqotlarning asosiy muammosi sifatida mazmuni va xarakteri mutlaqo bir-biriga o'xshamaydigan, turli-tuman o'ziga xos metod va ko'rinishdagi tadqiq usullariga ega bo'lgan o'quv fanlari orasidagi asosiy bog'lanishlarni topishni asosiy muammo sifatida belgilashadi. Mazkur muammo yechilmasa tabiatan boshqa-boshqa xususiyatlarga ega bo'lgan fanlarni birlashtiradigan, bog'laydigan, ularning o'zaro munosabatga kirishish jarayonini tahminlaydigan vosita va omillar haqida gapirish ham ortiqcha bo'ladi.

Bu o'z-o'zidan turli kimyo va matematikaga oid bo'lgan bilimlar tizimi bilan muayyan kengliklarda yaxlitlashgan holda ishlashni shart qilib qo'yadi. Endi gap faqat bir o'quv predmetini o'zlashtirish usuli haqida emas, balki ikki yoki undan ortiq fanlarga oid bo'lgan ish usullari bilan ayni paytning o'zida shug'ullanish zaruriyatini ham yuzaga keltiradi. Kimyoda matematik hisoblashlarni bajarish uchun matematikadan yetarlicha bilimga ega bo'lishni talab qiladi.

Kimyo fanlarini o'qitishda matematik usullarni, axborot texnologiyalarini qo'llash va kimyo yo'nalishida matematikani o'qitishda kimyoviy jarayonlarga matematikani bog'lab o'rgatish asosida mutaxassislarini kasbiy tayyorlash samaradorligini oshirish ijobiy natijalar beradi. SHu maqsadda keyingi yillarda kimyo va matematikaning rivojlanishi natijasida yangi **kimyoda matematik usullar** fani paydo bo'ldi. 1986 yil M. A. Sharaf, D. L. Illman, B. R. Kowalskilar **“Chemometrics”** nomli kitob yozishdi. 1989 yil kimyo fanlari kandedati A. H. Мариничева va kimyo fanlari doktori A. K.

Чарыкова bu kitobni ingliz tilidan rus tiliga tarjima qilishdi. 2006 yil pedagogika fanlari doktori, professor В.Г. Скатецкий , kimyo fanlari doktori, professor Д.В. Свиридов, fizika-matematika fanlari kandidati, dotsent В.И. Яшкин larning **“Математические методы в химии”** studentlar uchun o'quv qo'llanmasi nash qilindi. Bu darslik chiziqli algebralik sistemalar, vektorlar, bir o'zgaruvchili funksiya elementlarini tekshirish, integrallar, bir o'zgaruvchi funksiyaning differensial xisobi, eng kichik kvadratlar usuli, bir o'zgaruvchi funksiyaning integral xisobi, oddiy differensial tenglamalar, qatorlar, differensial tenglamaning xususiy xosilasi, ehtimollar nazariyasi va matematik statistika elementlari, chiziqli fazo, chiziqli almashtirishlar, gruppalar nazariyasining asosiy qoidalarini o'z ichiga olgan. 2007 yil Erich Steinerning **“The Chemistry Maths Book”** darsligi New Yorkdagi Oksford universitetida chop etildi. Bu darslik miqdor sonlar, nomalum sonlar, birlik sonlar, algebralik funksiyalar, transendent funksiyalar, differensiallash, integrallash, integrallash usullari, kema-ketliklar va qatorlar, kompleks sonlar, turli o'zgaruvchi funksiyalar, uch o'lchovli funksiyalar, birinchi tartbli differensial tenglamalar, ikkinchi tartbli differensial tenglamalar, o'zgarmas koeffitsientlar, ikkinchi tartbli differensial tenglamalar, ba'zi o'ziga xos funksiyalar, to'liq bo'lmagan differensial tenglamalar, vektorlar, determinantlar, matritsalar va chiziqli tenglamalar, teskari matritsalar, sonli usullar, ehtimollar nazariyasi va statistik malumotlarni o'zichiga oladi. Shuningdek Allan Cunningham.

Rory Whelanlarning **“Maths for Chemists”** kitobi ham matematika va kimyoni bir biriga bog'lashda katta ahamiyatga ega.

Kimyoda matematik usullar fanining metodlarini yaratish va uni amalda qo'llash hozirgi kundagi dolzarb muammolardan hisoblanadi.

Kimyo va matematikaga oid statistik ko'rsatkichlarni qayta ishlash, xulosalar chiqarish bir oz takomillashmoqda. Matematik modellashtirishning asosiy maqsadi texnologiya jarayonining fizik-kimyoviy, gidrodinamik va konstruktiv kattaliklarini o'zaro bog'laydigan tenglamalarni tuzishdan iborat. Matematik modellashtirishda asosan elektron hisoblash mashinalaridan foydalaniladi. Kimyo va matematikaga doir statistik ma'lumotlarni matematik modellashtirish uchun umumiy holda

$$Y = F(x_1, x_2, x_3, \dots, x_n, a_1, a_2, a_3, \dots, a_n)$$

ko'rinishidagi maqsad funksiyasi tanlanadi. Bu yerda $x_1, x_2, x_3, \dots, x_n$ –statistik ko'rsatkichlar, $a_1, a_2, a_3, \dots, a_n$ –o'zgarmas parametrlar. Odatda $X = (x_1, x_2, x_3, \dots, x_n)$ – statistik ko'rsatkichlar

vektori, Y -maqsad funksiyasi, $a = (a_1, a_2, a_3, \dots, a_n)$ – statistik ko'rsatkichlarning parametrlari vektori deb ataladi.

Kimyo va matematikaga doir ma'lumotlarni korrelyatsion-regression tahlil usullari bilan samarali modellashtirishda qarayotgan omillar o'rtasidagi eng yaxshi bog'lanish shakllarini tanlash katta ro'l o'ynaydi. Biz bu yerda ko'pchilik hollarda foydalaniladigan regressiya funksiyalarining matematik modellarini va modellardagi noma'lum parametrlarni aniqlash uchun eng kichik kvadratlar usuli bilan hosil qilingan normal tenglamalar tizimini keltiramiz.

1. CHiziqli funksiya $u = a_0 + a_1 x$

$$\begin{cases} na_0 + a_1 \sum x = \sum y, \\ a_0 \sum x + a_1 \sum x^2 = \sum y \cdot x. \end{cases} \quad (1)$$

2. Ikkinchi darajali parabola $y = a_0 + a_1 x + a_2 x^2$

$$\begin{cases} na_0 + a_1 \sum x + a_2 \sum x^2 = \sum y, \\ a_0 \sum x + a_1 \sum x^2 + a_2 \sum x^3 = \sum y \cdot x, \\ a_0 \sum x^2 + a_1 \sum x^3 + a_2 \sum x^4 = \sum y \cdot x^2. \end{cases} \quad (2)$$

3. Kubik parabola $y = a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + a_3 x^3$

$$\begin{cases} na_0 + a_1 \sum x + a_2 \sum x^2 + a_3 \sum x^3 = \sum y, \\ a_0 \sum x + a_1 \sum x^2 + a_2 \sum x^3 + a_3 \sum x^4 = \sum y \cdot x, \\ a_0 \sum x^2 + a_1 \sum x^3 + a_2 \sum x^4 + a_3 \sum x^5 = \sum y \cdot x^2, \\ a_0 \sum x^3 + a_1 \sum x^4 + a_2 \sum x^5 + a_3 \sum x^6 = \sum y \cdot x^3. \end{cases} \quad (3)$$

4. k – darajali polinom $y = a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + \dots + a_n x^k$

$$\begin{cases} na_0 + a_1 \sum x + a_2 \sum x^2 + \dots + a_n \sum x^k = \sum y, \\ a_0 \sum x + a_1 \sum x^2 + a_2 \sum x^3 + \dots + a_n \sum x^{k+1} = \sum y \cdot x, \\ \dots \dots \dots \\ a_0 \sum x^k + a_1 \sum x^{k+1} + a_2 \sum x^{k+2} + \dots + a_n \sum x^{2k} = \sum y \cdot x^k. \end{cases} \quad (4)$$

5. Giperbola $y = a_0 + \frac{a_1}{x}$

$$\begin{cases} na_0 + a_1 \sum \frac{1}{x} = \sum y, \\ a_0 \sum \frac{1}{x} + a_1 \sum \frac{1}{x^2} = \sum \frac{y}{x}. \end{cases} \quad (5)$$

6. k – darajali giperbola $y = a_0 + \frac{a_1}{x^k}$

$$\begin{cases} na_0 + a_1 \sum \frac{1}{x^k} = \sum y, \\ a_0 \sum \frac{1}{x^k} + a_1 \sum \frac{1}{x^{2k}} = \sum \frac{y}{x^k}. \end{cases} \quad (6)$$

7. Ko'rsatkichli funksiya $y = a_0 \cdot a_1^x$

$$\begin{cases} n \ln a_0 + \ln a_1 \sum x = \sum \ln y, \\ \ln a_0 \sum x + \ln a_1 \sum x^2 = \sum x \cdot \ln y. \end{cases} \quad (7)$$

8. Darajali (bir resursli ishlab chiqarish) funksiya $y = a_0 x^{a_1}$

$$\begin{cases} n \ln a_0 + a_1 \sum \ln x = \sum \ln y, \\ \ln a_0 \sum \ln x + a_1 \sum \ln^2 x = \sum \ln y \cdot \ln x. \end{cases} \quad (8)$$

9. Logarifmik funksiya $\ln y = a_0 + a_1 x$

$$\begin{cases} na_0 + a_1 \sum x = \sum \ln y, \\ a_0 \sum x + a_1 \sum x^2 = \sum x \cdot \ln y. \end{cases} \quad (9)$$

10. Yarim logarifmik funksiya $y = a_0 + a_1 \ln x$

$$\begin{cases} na_0 + a_1 \sum \ln x = \sum y, \\ a_0 \sum \ln x + a_1 \sum \ln^2 x = \sum y \cdot \ln x. \end{cases} \quad (10)$$

11. Logistik funksiya $y = \frac{a_0}{1 + a_1 \cdot e^{-bx}}$

Eng avvalo berilgan funksiyaning $\frac{a_0}{y} = 1 + a_1 e^{-bx}$ ko'rinishga

keltiramiz, so'ngra eng kichik kvadratlar usuli bilan quyidagi tenglamalar tizimini hosil qilamiz:

$$\begin{cases} a_0 \sum \frac{1}{y^2} + a_1 \cdot \left(-\sum \frac{e^{-bx}}{y} \right) = \sum \frac{1}{y}, \\ a_0 \cdot \left(-\sum \frac{e^{-bx}}{y} \right) + a_1 \cdot \sum e^{-2bx} = \sum e^{-bx}. \end{cases} \quad (11)$$

12. Neoklassik foydalilik Kobba-Duglas ishlab chiqarish funksiyasi

$$y = a_0 \cdot x_1^{a_1} \cdot x_2^{a_2} \quad (a_1 + a_2 \leq 1).$$

Model darajasidagi parametrlarni aniqlash uchun, avvalo modelni logarifmik-chiziqli ko'rinishga o'zgartirish lozim:

$$\ln y = \ln a_0 + a_1 \ln x_1 + a_2 \ln x_2.$$

SHundan so'ng normal tenglamalar tizimini tuzishda logarifmlardan foydalanamiz:

$$\begin{cases} n \ln a_0 + a_1 \sum \ln x_1 + a_2 \sum \ln x_2 = \sum \ln y, \\ \ln a_0 \sum \ln x_1 + a_1 \sum \ln^2 x_1 + a_2 \sum \ln x_1 \cdot \ln x_2 = \sum \ln x_1 \cdot \ln y, \\ \ln a_0 \sum \ln x_2 + a_1 \sum \ln x_1 \cdot \ln x_2 + a_2 \sum \ln^2 x_2 = \sum \ln x_2 \cdot \ln y. \end{cases} \quad (12)$$

Regressiya tenglamasining shaklini tanlashda quyidagilarga e'tibor qilish lozim:

1. Bog'lanishni umumiy shakli, bog'lanishning tabiati va xususiyatiga nisbatan professional tushuncha mos kelishi kerak.

2. Imkoni boricha interpretatsiya va amaliy qo'llashda oson bo'lgan tenglamalarning eng sodd shakllaridan foydalanish kerak. Boshlang'ich ma'lumotlarning grafik tasviri - tarqoqlik diagrammasi va regressiyaning empirik chiziqlari regressiyalarini tenglama shakllarini tanlashda yordam beradi.

Bu yerdagi parametrlarni matematik statistika metodlari asosida topiladi. Parametrlar G'-fisher mezon, t-St'yudent, Kolmogorov, xi-kvadrat kabi mezonlar yordamida baholanadi. SHuningdek, statistik ma'lumotlarni qayta ishlash algoritmlari va paket dasturlari tayyorlanadi.

Amaliyotda uchraydigan differensial tenglamalarning aniq yechimlarini har doim ham topib bo'lavermaydi. Shu sababli differensial tenglamalarni taqribiy yechish usullari katta ahamiyatga ega. Eyler usuli va uning modifikatsiyalari shu usullar jumlasiga kiradi. Eylerning tavsiflangan usulining umumiy formulasi ushbu ko'rinishga ega bo'ladi.

$$y_{i+1} = y_i + h y'_i, \text{ bunda } y'_i = y'(x_i) \\ i = 1, 2, \dots, n.$$

Biror idishda tinch turgan suyuqlikka og'irlik va bosim kuchlari ta'sir qiladi. Bu kuchlarning o'zaro ta'sirining suyuqlik ichida taqsimlanishi *Eyler* tomonidan ishlab chiqilgan *differensial tenglama* bilan ifodalanadi. Ushbu tenglamani keltirib chiqarish uchun idishdagi suyuqlik hajmidan kichkina parallelepiped shaklidagi bo'lakcha olib, fazoviy koordinatalar sistemasida unga ta'sir qilayotgan kuchlarni ko'ramiz. Parallelepipedning hajmini dv , uning x, y va z koordinatalar o'qiga parallel yo'nalgan qirralarini dx, dy va dz bilan belgilaymiz. Parallelepipedga ta'sir qilayotgan og'irlik kuchi massa

m bilan erkin tushish tezlanishi g ning ko'paytmasiga teng, ya'ni $g \, dm$. Hidrostatik bosim kuchlari esa gidrostatik bosimning shu qirralar yuzasi ko'paytmasiga teng bo'lib, uning ko'paytmasi koordinatalar o'qlariga bog'liq:

$$P = f(x, y, z).$$

Parallelepipedning hajmi

$$dv = dx \, dy \, dz$$

Shunday qilib, parallelepipedning muvozanat sharti quyidagi tenglamalar sistemasi bilan ifodalanadi.

$$\left. \begin{aligned} -\frac{\partial P}{\partial x} &= 0 \\ -\frac{\partial P}{\partial y} &= 0 \\ -\rho g - \frac{\partial P}{\partial z} &= 0 \end{aligned} \right\}$$

Bu tenglamalar sistemasi Eylerning suyuqlik muvozanat holatining differensial tenglamasi deyiladi. Suyuqlikning istalgan nuqtasidagi gidrostatik va og'irlik kuchini aniqlash uchun bu tenglamalar sistemasini integrallash kerak. Tenglamalarning integrali gidrostatikaning asosiy tenglamasi bo'lib, muhandislik hisoblash ishlarida keng qo'llaniladi.

Umuman olganda, kimyoda matematik usullarni qo'llab bir qancha yangi natijalarga erishish mumkin.

ADABIYOTLAR

1. Salimov Z. Kimyoviy texnologiyaning asosiy jarayonlari va qurilmalari. I tom. – Toshkent "O'zbekiston" 1994 – 37 b, 59 b.
2. G'ofurov M., Xolmurodov M., Xusanov K. Iqtisodiy-matematik usullar va modellar. –T.: AGNI, 2001. – 100 b.B.Г.
3. Скатецкий, Д.В. Свиридов, В.И. Яшкин. Математические методы в химии. – Минск: «ТетраСистемсы» 2006
4. Erich Steiner. The Chemistry Maths Book – Oxford University Press Inc., New York. 2008