DIFERENCIÁLNÍ POČET

Při odvozování funkčních závislostí je většinou jednodušší nalézt tuto závislost v diferenciálním tvaru.

Např. rychlost reakce (změna /přírůstek, úbytek/ koncentrace s časem) je přímo (lineárně) úměrná koncentraci výchozích látek, celkové ploše povrchu, tlaku plynné složky atd.

APLIKACE: HLEDÁNÍ *LOKÁLNÍCH EXTRÉMŮ*

Minimum a maximum funkce

Směrnice tečny křivky v daném bodě je rovna nule! Např. funkce

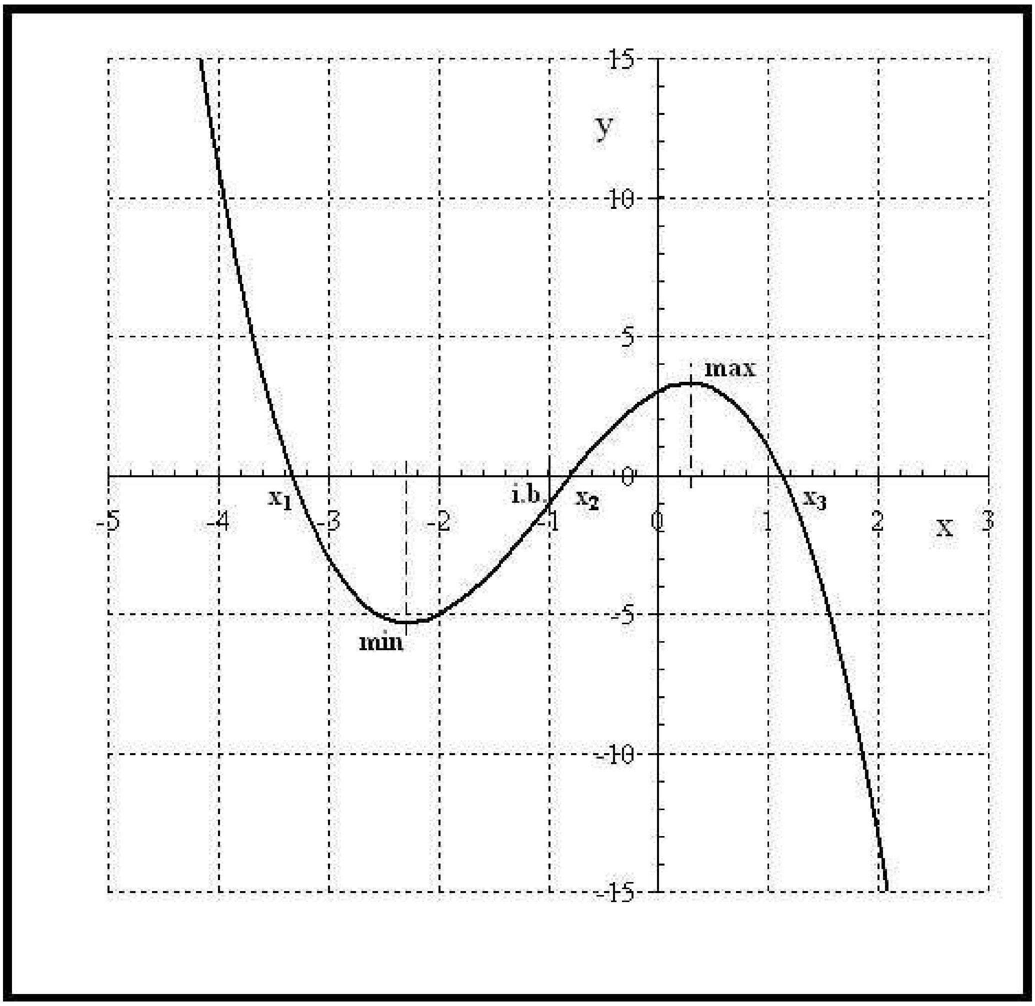
$\mathbf{y = - x^3 - 3x^2 + 2x + 3}$ s derivací

$\mathbf{y' = - 3x^2 - 6x + 2}$

Hledáme hodnoty **x**, kdy derivace fce **y´** je rovna nule.

Pak: $\mathbf{- 3x^2 - 6x + 2 = 0}$

Kořeny rovnice jsou: $x_1 = - 2,29$ a $x_2 = 0,29$. V těchto „pozicích“ jsou ***lokální extrémy***.



Konvexní (vydutá) křivka: $f''(x) > 0$ (směrnice funkce v daném bodě s přírůstkem x ***roste***): $-6x - 6 > 0 \quad x < -1$

Konkávní (vypuklá) křivka: $f''(x) < 0$ (směrnice funkce v daném bodě s přírůstkem x ***klesá***): $-6x - 6 < 0 \quad x > -1$

Jestliže **f´´(x) > 0** ***minimum*** (směrnice funkce za extrémem ***roste*** s přírůstkem x).

Pokud **f´´(x1)** < 0 ***maximum*** (směrnice funkce za extrémem ***klesá*** s přírůstkem x):

$f''(x) = -6x - 6$

$f''(-2{,}29) = 7{,}75$ (minimum)

$f''(0{,}29) = -7{,}75$ (maximum)

Inflexní bod:

konvexní část křivky přechází na konkávní nebo opačně

$f''(x) = 0$

$y'' = -6x - 6$

pak $x = -1$

Derivace složené funkce

Mějme funkce $\begin{matrix} y = f(u) \\ u = f(x) \end{matrix}$. Derivace podle x: $\frac{dy}{dx} = \frac{dy}{du}\frac{du}{dx}$

Příklad: Intenzita pufrace: směrnice na křivce F = f(pH)

$$F = \frac{Kw}{c_f\,[H]} - \frac{[H]}{c_f} + \frac{1}{\left(1 + \frac{[H]}{K_1} + \frac{K_2}{[H]}\right)} + \frac{2}{\left(1 + \frac{[H]}{K_2} + \frac{[H]^2}{K_1 K_2}\right)}$$

$$\frac{dF}{d\,pH} = \frac{dF}{d[H]}\,\frac{d[H]}{d\,pH}$$

$pH = -\log [H]$ $\qquad 10^{-pH} = [H]$ $\qquad \ln 10^{-pH} = \ln[H]$

$-pH \ \ln 10 = \ln[H]$ $\qquad -2{,}3\ pH = \ln[H]$ $\qquad \ln e^{-2{,}3\ pH} = \ln[H]$

$[H] = e^{-2{,}3\ pH}$

$$\frac{d[H]}{d\,pH} = -2{,}3\,e^{-2{,}3pH} \qquad \frac{d[H]}{d\ pH} = -2{,}3[H]$$

DIFERENCIÁLNÍ POČET FUNKCE VÍCE PROMĚNNÝCH

Nechť **u = f(x,y,z,...t)**, pak ***parciální (částečný) diferenciál*** vzhledem k proměnné **x** je

dxu = u´x dx,

nebo detailněji rozepsáno

$$d_x u = \frac{\partial u}{\partial x} dx$$

kde $\frac{\partial u}{\partial x}$ je parciální derivace **u** podle **x**. Vyjadřuje, jak se změní **u** s diferenciální změnou proměnné **x**! *Geometricky:* směrnice k vícerozměrné ploše v daném bodě ve směru osy **x**!

Pokud postupně diferencujeme **u** podle všech proměnných, pak dostaneme

totální diferenciál:

$$du = \frac{\partial u}{\partial x} dx + \frac{\partial u}{\partial y} dy + \frac{\partial u}{\partial z} dz + ... + \frac{\partial u}{\partial t} dt$$

Geometricky: fce **u(x,y)**, **du** se rovná přírůstku souřadnice **u** v bodě **u(x+dx, y+dy)** oproti původnímu bodu **u(x,y)**

(**x** se změnilo o **dx** a **y** o **dy**).

Body leží na tangenciální (tečné) ploše k ploše **u** (funkční závislost)!

Příklad: Totální diferenciál Gibbsovy funkce:

$$dG(T,p,n_i) = \frac{\partial G}{\partial T} dT + \frac{\partial G}{\partial p} dp + \frac{\partial G}{\partial n_1} dn_1 + \frac{\partial G}{\partial n_2} dn_2 ... + \frac{\partial G}{\partial n_i} dn_i$$

$$dG(T,p,n_i) = \frac{\partial G}{\partial T} dT + \frac{\partial G}{\partial p} dp + \sum_i \frac{\partial G}{\partial n_i} dn_i$$

$$dG(T,p,n_i) = -SdT + Vdp + \mu_i dn_i$$

PARCIÁLNÍ DIFERENCIÁLY (DERIVACE) VYŠŠÍCH ŘÁDŮ:

Diferenciál druhého řádu funkce **u(x,y)**

$$d^2u = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} dx^2$$

Smíšený diferenciál (nezávisí na pořadí derivací)

$$d^2u = \frac{\partial^2 u}{\partial x\,\partial y}\,dx\,dy$$

Totální diferenciál druhého řádu

$$d^2u = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\,dx^2 + 2\,\frac{\partial^2 u}{\partial x\,\partial y}\,dx\,dy + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2}\,dy^2$$