Derivace

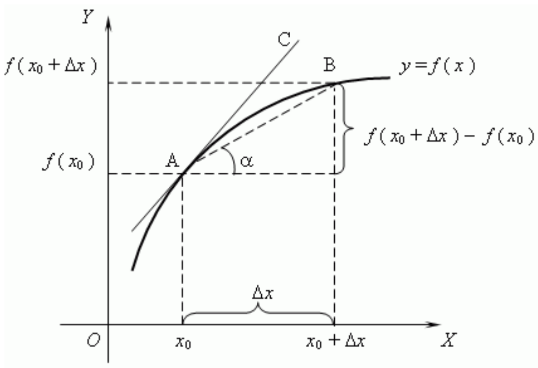
Derivace funkce udává míru změny této funkce (sklon funkční závislosti) tj. derivace funkce v daném bodě je číslo, které je rovno směrnici tečny ke grafu funkce. Směrnice přímky vyjadřuje jak rychle přímka roste/klesá. Derivace popisuje růst/pokles funkce v okolí daného bodu.

Funkce f definovaná v jistém okolí bodu x_0, pak

$$\lim_{\Delta x \to 0} \frac{f(x_0 + \Delta x) - f(x_0)}{\Delta x}$$

je derivací funkce f v bodě x_0

označení derivace funkce f: $\boldsymbol{df/dx}$ *nebo* $\boldsymbol{f'}$



Základní vztahy:

$$(f+g)' = f' + g'$$

$$(c \cdot f)' = c \cdot f'$$

$$(f \cdot g)' = f \cdot g' + f' \cdot g$$

$$\left(\frac{f}{g}\right)' = \frac{f'g - fg'}{g^2}$$

Derivace elementárních funkcí

$$c' = 0$$

$$(x^c)' = c \cdot x^{c-1}$$

$$(e^x)' = e^x$$

$$(\ln x)' = \frac{1}{x}$$

Derivace složené funkce

$$F(x) = f[g(x)]$$

$$F'^{(x)} = f'[g(x)] \cdot g'(x)$$

- příklad č. 1: $y = \sqrt{e^x + x}$ $\quad y' = \left((e^x + x)^{\frac{1}{2}}\right)' = \frac{1}{2}\,(e^x + x)^{-\frac{1}{2}}(e^x + x)' = \frac{e^x + 1}{2\sqrt{e^x + x}}$

Parciální derivace

- parciální derivace $f(x, y)$ - derivace funkce podle jedné z proměnných za podmínky, že ostatní proměnné jsou udržovány konstantní
- příklady funkce více proměnných ve fyzikální chemii:

  termodynamické veličiny - Helmholtzova energie závisí na látkovém množství, objemu a teplotě
- příklad č. 2:
  $z = f(x, y) = x^3 + xy + y^3$

  parciální derivace funkce z podle x: $\left(\frac{\partial z}{\partial x}\right)_y = 3x^2 + y$

Totální diferenciál

- vyjadřuje závislost změny hodnoty funkce několika proměnných na malé změně jedné nebo vice proměnných směrem od daného bodu.
- snažíme se danou funkci aproximovat lineární funkcí poblíž daného bodu
- pro funkci o jedné proměnné jde jen o obyčejnou derivaci (tj. jedná se tečnu k dané funkci)

$$df = \left(\frac{\partial f}{\partial x}\right)_y dx + \left(\frac{\partial f}{\partial y}\right)_x dy$$

- příklad č. 3:
  Uvažujeme-li vnitřní energii za funkci objemu (V) a teploty (T) a dojde-li k infinitezimálním změnám těchto veličin, pak se vnitřní energie změní o
  $$dU = \left(\frac{\partial U}{\partial V}\right)_T dV + \left(\frac{\partial U}{\partial T}\right)_V dT$$
  tj. v uzavřeném systému s konstantním složením je infinitezimální změna vnitřní energie úměrná infinitezimálním změnám objemu a teploty, přičemž konstantami úměrnosti jsou příslušné parciální derivace.

Přičemž $\left(\frac{\partial U}{\partial T}\right)_V$ je izochorická tepelná kapacita (jak se vnitřní energie mění v závislosti na měnící se teplotě za konstantního objemu) a $\left(\frac{\partial U}{\partial V}\right)_T$ je vnitřní tlak (měřítko toho jak se mění vnitřní energie s objemem za konstantní teploty)

Integrace

Operace opačná k derivaci

$F = \int f(x)dx$ derivace primitivní funkce F je funkce f

Základní vztahy:

$$\int cf(x)dx = c\int f(x)dx$$

$$\int \big(f(x) + g(x)\big)dx = \int f(x)dx + \int g(x)dx$$

$$\int \big(f(x) - g(x)\big)dx = \int f(x)dx - \int g(x)dx$$

Integrace základních funkcí

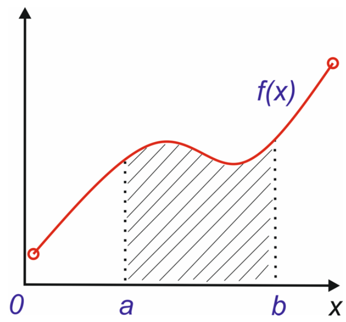
$$\int 0dx = C$$

$$\int x^{\alpha}dx = \frac{x^{\alpha+1}}{\alpha+1} + C$$

$$\int e^{x}\,dx = e^{x} + C$$

$$\int \frac{dx}{x} = ln|x| + C$$

Určitý integrál



$$\int_a^b f(x)dx = [F(x)dx]_a^b = F(b) - F(a)$$

obsah plochy v dvojrozměrné rovině, který je omezen grafem funkce f, osou x a svislými přímkami $x = a$ s $x = b$

- příklad č. 4: Řešte určitý integrál: $\int_{x_1}^{x_2}(a + bx + cx^{-2} + dx^{-1})dx$

$$\int_{x_1}^{x_2} (a + bx + cx^{-2} + dx^{-1})dx =$$

$$= \int_{x_1}^{x_2} \left(a + bx + \frac{c}{x^2} + \frac{d}{x}\right) dx = \left[ax + b\frac{x^2}{2} + c\frac{x^{-1}}{-1} + d \cdot lnx\right]_{x_1}^{x_2}$$

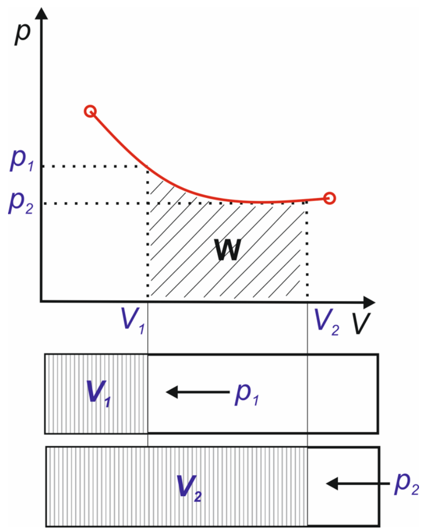
$$= \left(ax_2 + \frac{b}{2}x_2^2 - \frac{c}{x_2} + d \cdot lnx_2\right) - \left(ax_1 + \frac{b}{2}x_1^2 - \frac{c}{x_1} + d \cdot lnx_1\right)$$

$$= a(x_2 - x_1) + \frac{b}{2}(x_2^2 - x_1^2) - c\left(\frac{1}{x_2} - \frac{1}{x_1}\right) + d \cdot \ln\left(\frac{x_2}{x_1}\right)$$

Využití integrálního počtu v chemii:

Reverzibilní expanze

Práce vykonaná plynem při vratné expanzi



$$W = \int_{V_1}^{V_2} pdV = \int_{V_1}^{V_2} \frac{nRT}{V} dV = nRTln\frac{V_2}{V_1}$$

Ireverzibilní expanze

Práce vykonaná proti tlaku p_2

$$W = \int_{V_1}^{V_2} p_2 dV = p_2 \int_{V_1}^{V_2} dV = p_2(V_2 - V_1)$$

Diferenciální rovnice (DR)

- rovnice, ve kterých jako proměnné vystupují funkce a jejich derivace
- řád DR – řád nejvyšší derivace hledané funkce
- řešení DR – každá funkce (definované na intervalu I), která na zadaném intervalu rovnici vyhovuje

<u>Separovatelné DR</u>

- základní tvar: $y' = P(x).Q(y)$
- při řešení využijeme rovnosti: $y' = \frac{dy}{dx}$ a provedeme tzv. separaci proměnných: tj. převedeme na tvar: $\frac{dy}{Q(y)} = P(x)dx$
- následuje integrace rovnice