

# Capitole de matematici cu aplicații în chimie

[N<sub>1</sub>]  $|x| \geq 0$  pentru orice  $x \in \mathbb{R}$ ;  $|x| = 0 \Leftrightarrow x = 0$

[N<sub>2</sub>]  $|x + y| \leq |x| + |y|$  pentru orice  $x, y \in \mathbb{R}$

[N<sub>3</sub>]  $|x \cdot y| = |x| \cdot |y|$  pentru orice  $x, y \in \mathbb{R}$

[N<sub>4</sub>]  $|x| = |-x|$



**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.

## Cuprins

### TEMA 1.

|                                                                                                                                |    |
|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----|
| MULȚIMEA NUMERELOR REALE. STRUCTURI MATEMATICE FUNDAMENTALE (ALGEBRICĂ, DE ORDINE, TOPOLOGICĂ). PROBLEME NUMERICE TIPICE ..... | 11 |
| 1.1 Mulțimea numerelor reale .....                                                                                             | 11 |
| 1.2. Probleme numerice tipice.....                                                                                             | 17 |

### TEMA 2.

|                                                        |    |
|--------------------------------------------------------|----|
| MATRICI. DETERMINANȚI. SISTEME DE ECUAȚII LINIARE..... | 25 |
| 2.1. Matrici .....                                     | 25 |
| 2.2. Determinanți.....                                 | 30 |
| 2.3. Rangul unei matrice. Matrice inversabilă .....    | 33 |
| 2.4. Sisteme de ecuații liniare .....                  | 35 |
| 2.5. Probleme propuse.....                             | 39 |

### TEMA 3.

|                                           |    |
|-------------------------------------------|----|
| ELEMENTE DE STATISTICĂ DESCRIPTIVĂ .....  | 42 |
| 3.1. Serii statistice .....               | 42 |
| 3.2. Indicatorii seriilor statistice..... | 46 |
| 3.3. Probleme rezolvate.....              | 56 |
| 3.4. Probleme propuse.....                | 62 |

### TEMA 4.

|                                                                |    |
|----------------------------------------------------------------|----|
| CORELAȚIA DATELOR ÎN ANALIZA LEGĂTURILOR DINTRE FENOMENE ..... | 64 |
| 4.1. Introducere .....                                         | 64 |
| 4.2. Corelația – noțiuni, tipuri .....                         | 64 |
| 4.3. Corelația simplă .....                                    | 65 |
| 4.4. Probleme rezolvate.....                                   | 71 |
| 4.5. Probleme propuse.....                                     | 77 |

### TEMA 5.

|                                                                                    |    |
|------------------------------------------------------------------------------------|----|
| TESTE DE CONCORDANȚĂ STATISTICĂ ÎNTRE DATELE TEORETICE ȘI CELE EXPERIMENTALE ..... | 79 |
| 5.1. Noțiuni introductive .....                                                    | 79 |
| 5.2. Ipoteze statistice. Verificarea caracterului aleator al rezultatelor .....    | 84 |
| 5.3. Teste de concordanță cu utilitate mare în practică .....                      | 86 |
| 5.4. Probleme rezolvate.....                                                       | 90 |

|                            |    |
|----------------------------|----|
| 5.5. Probleme propuse..... | 92 |
|----------------------------|----|

#### TEMA 6.

|                                                     |     |
|-----------------------------------------------------|-----|
| FUNȚII ELEMENTARE ȘI APLICAȚIILE LOR ÎN CHIMIE..... | 94  |
| 6.1. Funcții afine .....                            | 94  |
| 6.2. Funcția de gradul al doilea .....              | 102 |
| 6.3. Probleme propuse.....                          | 109 |

#### TEMA 7.

|                                                                                         |     |
|-----------------------------------------------------------------------------------------|-----|
| FUNȚII DE TIP EXPONENȚIAL ȘI LOGARITMIC. APLICAȚII.....                                 | 110 |
| 7.1. Funcția exponențială .....                                                         | 110 |
| 7.2. Funcția logaritmică .....                                                          | 115 |
| 7.3. Problema fundamentală a controlului biologic cantitativ al<br>medicamentelor ..... | 119 |
| 7.4. Aplicații în chimie. Câteva exemple rezolvate .....                                | 120 |

#### TEMA 8.

|                                              |     |
|----------------------------------------------|-----|
| CALCUL DIFERENȚIAL ȘI APLICAȚII.....         | 126 |
| 8.1. Elemente de teorie.....                 | 126 |
| 8.2. Aplicații ale noțiunii de derivată..... | 132 |
| 8.3. Probleme rezolvate.....                 | 136 |
| 8.4. Probleme propuse.....                   | 137 |

#### TEMA 9.

|                                                                     |     |
|---------------------------------------------------------------------|-----|
| INTEGRALA FUNCȚIILOR REALE DE O VARIABILĂ REALĂ.<br>APLICAȚII ..... | 139 |
| 9.1. Elemente de teorie.....                                        | 139 |
| 9.2. Exemple rezolvate.....                                         | 149 |
| 9.3. Aplicații ale integralei în chimie.....                        | 152 |
| 9.4. Probleme propuse.....                                          | 153 |

#### TEMA 10.

|                                                                             |     |
|-----------------------------------------------------------------------------|-----|
| ECUAȚII DIFERENȚIALE ORDINARE DE ORDINUL ÎNTÂI.<br>APLICAȚII ÎN CHIMIE..... | 155 |
| 10.1. Introducere .....                                                     | 155 |
| 10.2. Considerații generale.....                                            | 157 |
| 10.3. Ecuații diferențiale de ordinul întâi.....                            | 158 |
| 10.4. Aplicații în chimie.....                                              | 166 |
| 10.5. Probleme propuse.....                                                 | 166 |

## TEMA 11.

### SISTEME DE ECUAȚII DIFERENȚIALE DE ORDINUL ÎNTÂI.

|                                                                                           |     |
|-------------------------------------------------------------------------------------------|-----|
| APLICAȚII ÎN CHIMIE.....                                                                  | 167 |
| 11.1. Considerații generale.....                                                          | 167 |
| 11.2. Probleme de cinetica chimică modelate prin sisteme de ecuații<br>diferențiale ..... | 167 |
| 11.3. Sisteme de ecuații liniare cu coeficienți constanți .....                           | 173 |
| 11.4. Exerciții propuse .....                                                             | 183 |

## TEMA 12.

|                                                                                                |     |
|------------------------------------------------------------------------------------------------|-----|
| APLICAȚII ALE INTEGRALEI DEFINITE.....                                                         | 185 |
| 12.1. Aria subgraficului unei funcții .....                                                    | 185 |
| 12.2. Aria unei suprafețe plane .....                                                          | 187 |
| 12.3. Centrul de greutate al plăcilor omogene .....                                            | 191 |
| 12.4. Volumul unui corp de rotație .....                                                       | 193 |
| 12.5. Calculul lungimii graficului unei funcții și al ariei unei suprafețe de<br>rotație ..... | 196 |
| 12.6. Probleme propuse.....                                                                    | 199 |

## TEMA 13.

### FUNCȚII DE MAI MULTE VARIABLE. DERIVATE PARȚIALE,

|                                                                              |     |
|------------------------------------------------------------------------------|-----|
| APLICAȚII .....                                                              | 202 |
| 13.1. Elemente de teorie.....                                                | 202 |
| 13.2. Extremele locale ale funcțiilor reale de mai multe variabile reale.... | 208 |
| 13.3. Exemple rezolvate.....                                                 | 212 |
| 13.4. Probleme propuse.....                                                  | 214 |

## TEMA 14.

|                                                      |     |
|------------------------------------------------------|-----|
| APLICAȚII ALE CALCULULUI DIFERENȚIAL ÎN CHIMIE ..... | 216 |
| 14.1. Termodinamica .....                            | 216 |
| 14.2. Cinetica chimică.....                          | 227 |

|                    |     |
|--------------------|-----|
| BIBLIOGRAFIE ..... | 233 |
|--------------------|-----|



## *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.

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

- 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).

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).

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

- 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:**

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

$[a,b] = \{x \mid a \leq x \leq b\}$  (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<sub>1</sub>]  $|x| \geq 0$  pentru orice  $x \in \mathbb{R}$ ;  $|x| = 0 \Leftrightarrow x = 0$

[N<sub>2</sub>]  $|x + y| \leq |x| + |y|$  pentru orice  $x, y \in \mathbb{R}$

[N<sub>3</sub>]  $|x \cdot y| = |x| \cdot |y|$  pentru orice  $x, y \in \mathbb{R}$

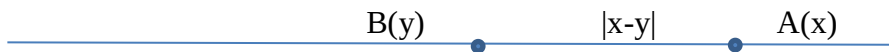
[N<sub>4</sub>]  $|x| = |-x|$

**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<sub>1</sub>], [N<sub>2</sub>], [N<sub>3</sub>], următoarele proprietăți:

[D<sub>1</sub>]  $d(x, y) \geq 0$  pentru orice  $x, y \in \mathbb{R}$ ;  $d(x, y) = 0 \Leftrightarrow x = y$

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

[D<sub>2</sub>]  $d(x, y) = d(y, x)$  pentru orice  $x, y \in \mathbb{R}$

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

[D<sub>3</sub>]  $d(x, z) \leq d(x, y) + d(y, z)$  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  $\rho$  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:

$$x_1 \dots\dots\dots y_1$$

$$x_2 \dots\dots\dots y$$

---


$$y = \frac{x_2 y_1}{x_2}$$

*Este de menționat faptul că regula de trei simplă se aplică doar mărimilor direct proporționale.*

### **Exemple de probleme ce se rezolvă folosind proporționalitatea mărimilor**

**1.** Două corpuri cu același volum au densitatea  $\rho_1 = 7,3 \text{ kg/dm}^3$ , respectiv  $\rho_2 = 2,7 \text{ kg/dm}^3$ . Care este masa celui de-al doilea corp, dacă masa primului corp este 4,8 kg?

*Rezolvare:* Notăm  $V$  volumul corpurilor, și cu  $m_1, m_2$  masele celor două corpuri.

$$\text{Din relația } V = \frac{m_1}{\rho_1} = \frac{m_2}{\rho_2} \text{ rezultă } m_2 = \frac{m_1 \rho_2}{\rho_1} = \frac{4,8 \cdot 2,7}{7,3} = 1,77$$

**2.** Se prepară 1500 g soluție  $H_2SO_4$  cu concentrația de 40% din amestecarea unei soluții cu concentrația 80% cu o soluție cu concentrația 20%.

- Presupunând că volumul nu variază la amestecare, să se precizeze ce cantitate din fiecare soluție trebuie amestecată.
- Să se determine volumul de hidrogen ce se poate obține teoretic prin reacția soluției obținute cu 0,52 kg zinc (volumul molar al hidrogenului este 22,4 l).
- Să se determine cantitatea de zinc ce nu a reacționat  
Masele atomice sunt Zn=65; H=1; O=16; S=32.

*Rezolvare:* Se notează  $X$ , respectiv  $Y$ , cantitățile de soluții cu concentrațiile 80%, respectiv 20%.

$$\text{a) Din problemă rezultă relațiile } \begin{cases} X + Y = 1500 \\ \frac{80}{100} X + \frac{20}{100} Y = \frac{40}{100} \cdot 1500 \end{cases}$$

Rezolvând sistemul de ecuații se obține

$$X = 500 \text{ g}, \quad Y = 1000 \text{ g}.$$



b) Reacția stoechiometrică este  $Zn + H_2SO_4 = ZnSO_4 + H_2$

În cantitatea de soluție obținută (1500 g) se află  $\frac{40}{100} \cdot 1500 \text{ g} = 600 \text{ g}$

de  $H_2SO_4$

Pentru determinarea volumului de hidrogen se poate folosi regula de 3 simplă

$$\begin{array}{l} 98 \text{ g } H_2SO_4 \dots\dots\dots 22,4 \text{ l } H_2 \\ 600 \text{ g } H_2SO_4 \dots\dots\dots x \text{ l } H_2 \\ \hline \end{array} \cdot$$

$$x = \frac{600 \cdot 22,4}{98} = 137,14 \text{ l}$$

c) Și aici se poate aplica regula de trei simplă:

$$\begin{array}{l} 98 \text{ g } H_2SO_4 \dots\dots\dots 65 \text{ g } Zn \\ 600 \text{ g } H_2SO_4 \dots\dots\dots y \text{ g } Zn \\ \hline \end{array} \cdot$$

$$y = \frac{600 \cdot 65}{98} = 397,96 \text{ g}$$

Cantitatea de zinc rămasă este  $520 \text{ g} - 397,96 \text{ g} = 122,04 \text{ g}$

3. Se consideră 600 g soluție KOH (hidroxid de potasiu) cu concentrația 11,2%. Se cere numărul de moli de  $H_2SO_4$  care neutralizează total baza.

*Rezolvare:* Masa  $KOH = (39 + 16 + 1) \text{ g} / \text{mol} = 56 \text{ g} / \text{mol}$

Masa  $H_2SO_4 = 98 \text{ g} / \text{mol}$

Ecuția stoechiometrică a reacției este  
 $2KOH + H_2SO_4 \rightarrow K_2SO_4 + 2H_2O$ .

Calculăm mai întâi cantitatea de  $KOH$  din soluție:

$$\begin{array}{l} 100 \text{ g soluție} \dots\dots\dots 11,2 \text{ g } KOH \\ 600 \text{ g soluție} \dots\dots\dots x \text{ g } KOH \\ \hline \end{array} \cdot$$

$$x = \frac{600 \cdot 11,2}{100} = 67,2 \text{ g}$$

Calculăm masa de acid sulfuric necesară:

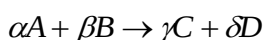
$$\begin{array}{r} 2 \cdot 56 \dots\dots\dots 98 \\ 67,2 \dots\dots\dots y \\ \hline y = \frac{67,2 \cdot 98}{112} g \end{array}$$

Calculăm numărul de moli:

$$\begin{array}{r} 98 g \dots\dots\dots 1 mol \\ \frac{67,2 \cdot 98}{112} g \dots\dots\dots z \text{ moli} \\ \hline z = \frac{67,2}{112} = 0,6 \text{ moli} \end{array}$$

#### 4. Formula fundamentală a calculului stoechiometric.

Să considerăm o reacție ireversibilă având ecuația stoechiometrică [10]



Fie  $n_A, n_B, n_C, n_D$  măsurile în moli ale unor cantități variabile de substanță A, B, C, D, care se corespund pe baza reacției considerate.

Dacă amplificăm relația cu numărul lui Avogadro rezultă că la  $\alpha$  moli de substanță A corespund  $\beta$  moli de substanță B și rezultă  $\gamma$  moli de substanță C și  $\delta$  moli de substanță D.

Se obține astfel șirul de rapoarte egale  $\frac{n_A}{\alpha} = \frac{n_B}{\beta} = \frac{n_C}{\gamma} = \frac{n_D}{\delta}$ .

Acest șir de egalități formează **Formula fundamentală a calculului stoechiometric** corespunzător reacției considerate.

### 1.2.2. Proprietatea fundamentală a șirurilor de rapoarte egale. Aplicații.

**Propoziția 1.3:** Dacă  $\frac{x_1}{a_1} = \frac{x_2}{a_2} = \frac{x_3}{a_3} = \dots = \frac{x_n}{a_n}$ , atunci

$$\frac{x_1}{a_1} = \frac{x_2}{a_2} = \frac{x_3}{a_3} = \dots = \frac{x_n}{a_n} = \frac{x_1 + x_2 + \dots + x_n}{a_1 + a_2 + \dots + a_n}$$

*Demonstrație:* Fie  $k = \frac{x_1}{a_1} = \frac{x_2}{a_2} = \frac{x_3}{a_3} = \dots = \frac{x_n}{a_n}$  atunci

$$x_1 = ka_1, x_2 = ka_2, \dots, x_n = ka_n$$

Calculând raportul  $\frac{x_1 + x_2 + \dots + x_n}{a_1 + a_2 + \dots + a_n}$  obținem

$$\frac{x_1 + x_2 + \dots + x_n}{a_1 + a_2 + \dots + a_n} = \frac{ka_1 + ka_2 + \dots + ka_n}{a_1 + a_2 + \dots + a_n} = k, \text{ de unde rezultă imediat egalitatea}$$

$$\frac{x_1}{a_1} = \frac{x_2}{a_2} = \frac{x_3}{a_3} = \dots = \frac{x_n}{a_n} = \frac{x_1 + x_2 + \dots + x_n}{a_1 + a_2 + \dots + a_n}.$$

Pe această proprietate se bazează procedeul de descompunere al unui număr “N” în numere  $x_1, x_2, \dots, x_n$  proporționale cu  $a_1, a_2, \dots, a_n$ .

Din proporționalitatea impusă în problemă rezultă  $\frac{x_1}{a_1} = \frac{x_2}{a_2} = \dots = \frac{x_n}{a_n}$

Aplicând proprietatea fundamentală a rapoartelor egale rezultă

$$\frac{x_1}{a_1} = \frac{x_2}{a_2} = \dots = \frac{x_n}{a_n} = \frac{x_1 + x_2 + \dots + x_n}{a_1 + a_2 + \dots + a_n} = \frac{N}{a_1 + a_2 + \dots + a_n}.$$

De aici rezultă  $x_k = a_k \cdot \frac{N}{a_1 + a_2 + \dots + a_n}, k \in \{1, 2, \dots, n\}.$

## Aplicații ale proprietății fundamentale a șirurilor de rapoarte egale

**1. Expresia analitică a legii lui Dalton.** Se consideră un amestec de gaze ideale A, B, C, ..., închis într-un recipient. Fie  $p$  presiunea totală pe care o exercită amestecul asupra pereților recipientului și  $p_A, p_B, p_C, \dots$  presiunile parțiale (definite ca presiunea pe care ar exercita-o gazul A asupra pereților dacă ar ocupa singur întreg volumul recipientului). Să se determine relația între  $p$  și  $p_A, p_B, p_C, \dots$

*Rezolvare:*

Notăm  $v$  volumul recipientului,  $v_A, v_B, v_C, \dots$  volumele ocupate de componentele A, B, C, ... și  $n_A, n_B, n_C, \dots$  măsurile în moli ale cantităților respective de gaz.

În baza ecuației generale de stare a gazelor perfecte rezultă că

|       |                                                                           |
|-------|---------------------------------------------------------------------------|
| (1.1) | $p \cdot v_A = n_A RT, p \cdot v_B = n_B RT, p \cdot v_C = n_C RT, \dots$ |
|-------|---------------------------------------------------------------------------|

$R$  este constanta gazului ideal.

În baza definiției presiunilor parțiale și conform ecuației generale de stare a gazelor perfecte rezultă că

|       |                                                                     |
|-------|---------------------------------------------------------------------|
| (1.2) | $p_A \cdot v = n_A RT, p_B \cdot v = n_B RT, p_C \cdot v = n_C RT,$ |
|-------|---------------------------------------------------------------------|

Din relațiile precedente rezultă  $p v_A = p_A v, p v_B = p_A v, p v_C = p_C v, \dots$ , adică

|       |                                                                             |
|-------|-----------------------------------------------------------------------------|
| (1.3) | $\frac{p_A}{v_A} = \frac{p_B}{v_B} = \frac{p_C}{v_C} = \dots = \frac{p}{v}$ |
|-------|-----------------------------------------------------------------------------|

Folosind proprietatea fundamentală a șirului de rapoarte egale rezultă

|       |                                                                                                                 |
|-------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| (1.4) | $\frac{p_A}{v_A} = \frac{p_B}{v_B} = \frac{p_C}{v_C} = \frac{p_A + p_B + p_C + \dots}{v_A + v_B + v_C + \dots}$ |
|-------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------|

Din relațiile (1.3) și (1.4) rezultă

$$p = p_A + p_B + p_C + \dots$$

Aceasta este expresia analitică a legii lui Dalton [6].

**2. Calculul presiunilor parțiale ale componentelor A, B, C,... ale unui amestec gazos dacă se cunosc fracțiile procentuale de volum ale componentelor și presiunea totală a amestecului.**

Se notează:  $v$ =volumul total al amestecului,  $v_A, v_B, v_C \dots$  volumele ocupate de gazele A, B, C,... și  $p_A, p_B, p_C, \dots$  presiunile corespunzătoare.

Valorile  $\frac{v_A}{v}, \frac{v_B}{v}, \frac{v_C}{v} \dots$  sunt cunoscute deoarece se dau în problemă

fracțiile procentuale de volum, adică  $v_A \% = \frac{v_A}{v} \cdot 100, v_B \% = \frac{v_B}{v} \cdot 100, \dots$

Deoarece  $\frac{p_A}{v_A} = \frac{p_B}{v_B} = \dots = \frac{p}{v}$  rezultă  $p_A = p \frac{v_A}{v}, p_B = p \frac{v_B}{v}, \dots$

**3. Rezolvarea unor probleme de amestec.** Fiind date două soluții  $S_1, S_2$  conținând aceeași substanță activă A în concentrație procentuală de masă  $c_1$ , respectiv  $c_2$ , cu  $c_1 > c_2$ , să se determine masele soluțiilor  $S_1, S_2$  astfel încât soluția care se obține prin amestecare să aibă concentrația  $c_3$  (cu  $c_1 > c_3 > c_2$ ) și masa  $m$ .

Notăm  $m_1$  și  $m_2$  masele soluțiilor  $S_1$ , respectiv  $S_2$

Cele două relații din care se pot calcula  $m_1$  și  $m_2$  formează un sistem cu două ecuații:

$$\begin{cases} m_1 + m_2 = m \\ m_1 \cdot c_1 + m_2 c_2 = m \cdot c_3 \end{cases}.$$

$$\text{Rezolvând sistemul se obțin } m_1 = \frac{m(c_3 - c_2)}{c_1 - c_2}, \quad m_2 = \frac{m(c_1 - c_3)}{c_1 - c_2}.$$

Ca un caz particular se poate considera diluarea unei soluții cu un solvent. În acest caz soluția  $S_2$  este solventul și  $c_2 = 0$ .

Mai multe exemple de acest gen se găsesc în lucrarea [10]

## TEMA 2. MATRICI. DETERMINANȚI. SISTEME DE ECUAȚII LINIARE

Scopul acestei secțiuni este de a reactualiza elementele de bază din algebra din liceu legate de matrici, determinanți și principala lor aplicație – rezolvarea sistemelor de ecuații liniare.

### 2.1. Matrici

Prezentăm pe scurt în această subsecțiune elementele de bază legate de matrici, fără demonstrații întrucât noțiunile se presupun cunoscute din liceu.

**Definiția 2.1.** Se numește *matrice* cu  $m$  linii și  $n$  coloane o funcție:  $f: \{1, 2, \dots, m\} \times \{1, 2, \dots, n\} \rightarrow C$  definită prin tabloul

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{m1} & \cdots & a_{mn} \end{pmatrix} \in M_{m,n}(C)$$

*Observația 1.*

a) în cazul  $m=n$  spunem că matricea  $A$  este *pătratică*;

b) Elementele unei matrici pot fi și numere complexe, cazul complex fiind definiția mai generală. *Pentru scopul de față vom considera însă numai matrici cu elemente reale.*

Dată o matrice  $A$ , transpusa sa se obține înlocuind liniile cu coloanele, adică:

$$A^t = \begin{pmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1m} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & \cdots & a_{nm} \end{pmatrix} \in M_{m,n}(C)$$

### Exemplu 2.1.

a)  $A = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 3 & 1 \end{pmatrix} \in M_2(C)$

b)  $A = \begin{pmatrix} a & b & c \end{pmatrix} \in M_{1,3}(C)$  matrice linie

c)  $A = \begin{pmatrix} i \\ -1 \end{pmatrix} \in M_{2,1}(C)$  matrice coloană cu elemente complexe

$$d) A = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 3 & 1 \end{pmatrix} \Rightarrow A^t = \begin{pmatrix} 1 & 3 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}; A = \begin{pmatrix} a & b & c \end{pmatrix} \Rightarrow A^t = \begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix}$$

**Definiția 2.2.** Două matrici A și B se numesc *egale* dacă elementele lor sunt egale. Adică:

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{m1} & \cdots & a_{mn} \end{pmatrix}, B = \begin{pmatrix} b_{11} & \cdots & b_{1n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ b_{m1} & \cdots & b_{mn} \end{pmatrix} \quad A = B \Leftrightarrow \begin{cases} a_{11} = b_{11} \\ a_{1n} = b_{1n} \\ \cdots \\ a_{m1} = b_{m1} \\ a_{mn} = b_{mn} \end{cases}$$

**Exemplu 2.2** Rezolvați ecuația  $A=B$ , unde

$$A = \begin{pmatrix} a & b-2 \\ c+1 & 1-d \end{pmatrix}, B = \begin{pmatrix} -1 & 4 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

*Rezolvare.* Egalând elementele de pe pozițiile corespunzătoare, obținem sistemul de patru ecuații cu patru necunoscute din care vom deduce imediat valorile lui a, b, c și d:

$$\begin{cases} a = -1 \\ b - 2 = 4 \\ c + 1 = 0 \\ 1 - d = 1 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} a = -1 \\ b = 6 \\ c = -1 \\ d = 0 \end{cases}$$

**Definiția 2.3.** Adunarea a două matrici. Pentru  $A, B \in M_n(C)$

|       |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                     |
|-------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| (2.1) | $  \begin{aligned}  A + B &= \begin{pmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{m1} & \cdots & a_{mn} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} b_{11} & \cdots & b_{1n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ b_{m1} & \cdots & b_{mn} \end{pmatrix} \\  &= \begin{pmatrix} a_{11} + b_{11} & \cdots & a_{1n} + b_{1n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{m1} + b_{m1} & \cdots & a_{mn} + b_{mn} \end{pmatrix} \in M_n(C)  \end{aligned}  $ |
|-------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|

**Observația 2.1.** Așa cum se știe din liceu [3] mulțimea matricilor împreună cu operația de adunare formează o structură de grup comutativ:

$$M_{m,n}(C) \text{ grup abelian}$$

Într-adevăr:

- i) “+” este bine definită; ea este “lege de compoziție internă” ar fi mai corect (adică se pot aduna doar matrici de același tip și suma lor are același tip cu termenii săi);
- ii) “+” este asociativă; adică  $A+(B+C)=(A+B)+C$ , pentru orice  $A, B, C \in M_n(C)$
- iii) Matricea nulă este element neutru:  $O_{m,n} = \begin{pmatrix} 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & 0 \end{pmatrix}$
- iv) Orice matrice are opusă: matricea opusă lui  $A$  este matricea  $-A = \begin{pmatrix} -a_{11} & \cdots & -a_{1n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ -a_{m1} & \cdots & -a_{mn} \end{pmatrix} \in M_{m,n}(C)$
- v) “+” este comutativă, (adică  $A+B=B+A$ , pentru orice  $A, B \in M_n(C)$ )

**Exemplu 2.3** Să calculăm  $A+B$ , unde  $A = \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ -1 & 3 \end{pmatrix}, B = \begin{pmatrix} -1 & 4 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$ ,  $A, B \in M_2(C)$

Adunând elementele de pe pozițiile cu aceiași indici, obținem

$$A + B = \begin{pmatrix} 1-1 & 2+4 \\ -1+0 & 3+1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 6 \\ -1 & 4 \end{pmatrix}$$

**Definiția 2.4.** Înmulțirea cu scalari a matricelor. Avem că:

$$A \in M_{m,n}(R) \text{ și } a \in R \Rightarrow aA \in M_{m,n}(C)$$

**Exemplu 2.4.** Calculați  $-2A$ , unde  $A = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 2 & 4 & 6 \\ 3 & 6 & 9 \end{pmatrix}$

$$\text{Obținem imediat } -2A = \begin{pmatrix} -2 & -4 & -6 \\ -4 & -8 & -12 \\ -6 & -12 & -18 \end{pmatrix}$$

**Definiția 2.5.** Înmulțirea matricilor. Avem că:

$$A \in M_{m,n}(C), B \in M_{n,p}(C) \Rightarrow A \cdot B \in M_{m,p}(C)$$

|       |  |
|-------|--|
| (2.2) |  |
|-------|--|



$$A \cdot B = \begin{pmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{m1} & \cdots & a_{mn} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} b_{11} & \cdots & b_{1p} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ b_{n1} & \cdots & b_{np} \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} a_{11}b_{11} + \cdots + a_{1n}b_{n1} & \cdots & a_{11}b_{1p} + \cdots + a_{1n}b_{np} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{m1}b_{11} + \cdots + a_{mn}b_{n1} & \cdots & a_{m1}b_{1p} + \cdots + a_{mn}b_{np} \end{pmatrix}$$

**Observația 2.2.** Trebuie menționate câteva proprietăți importante.

- i) Înmulțirea matricilor  $AB$  are sens dacă numărul de coloane din matricea  $A$  este egal cu numărul de linii din matricea  $B$ ,  $(m, n)(n, p) \rightarrow (m, p)$ .
- ii) Pentru produsul  $BA$  avem  $(n, p)(m, n)$  adică numărul de coloane din matricea  $B$  este diferit de numărul de linii din matricea  $A$ , de aceea, în general, înmulțirea  $BA$  nu are sens. *Cele două înmulțiri au sens dacă  $m=n=p$ , adică matricile sunt pătrate.*
- iii) În general înmulțirea matricilor nu este comutativă, adică  $AB \neq BA$

**Exemplu 2.5.** Calculați  $AB$ , unde:

a)  $A = \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ -1 & 3 \end{pmatrix}, B = \begin{pmatrix} -1 & 4 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, A, B \in M_{2,2}(R)$

b)  $A = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 2 & 4 & 6 \\ 3 & 6 & 9 \end{pmatrix} \in M_{3,3}(R), B = (5 \quad -1 \quad 0) \in M_{1,3}(R)$

*Rezolvare*

a)  $AB = \begin{pmatrix} 1 \cdot (-1) + 2 \cdot 0 & 1 \cdot 4 + 2 \cdot 1 \\ (-1) \cdot (-1) + 3 \cdot 0 & (-1) \cdot 4 + 3 \cdot 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1 & 6 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}$

- b) Înmulțirea nu are sens deoarece matricea  $A$  are 3 coloane iar  $B$  are o linie

**Observația 2.3.** Ca și în cazul operației de adunare a matricilor, și la înmulțire trebuie menționat că aceasta induce pe mulțimea matricilor pătrate o structură de monoid [3]

$(M_n(C), \cdot)$  este monoid

Într-adevăr:

- i) “ $\cdot$ ” este lege de compoziție internă;

ii) “.” este asociativă;

iii) Matricea unitate este element neutru:  $I_n = \begin{pmatrix} 1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & 1 \end{pmatrix} \in M_n(C)$

**Definiția 2.6.** Ridicarea la putere a unei matrice

|       |                                                                                                                                    |
|-------|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| (2.3) | $A^n = \underbrace{A \cdot A \cdot A \cdot \cdots \cdot A}_{\text{de } n \text{ ori}}, A \in M_n(C), n \in \mathbb{N}^*, n \geq 2$ |
|-------|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|

**Exemplu 2.6.** Să se calculeze  $A^n$ , unde

a)  $A = \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \in M_2(C)$

*Rezolvare.* Observăm ușor că  $A^2 = A \cdot A = I_2$ ;

$A^3 = A^2 \cdot A = I_2 \cdot A = A$  s.a.m.d. Atunci avem că:

$$A^n = \begin{cases} A, & n = \text{număr impar} \\ I_2, & n = \text{număr par} \end{cases}$$

b)  $A = \begin{pmatrix} \cos x & \sin x \\ -\sin x & \cos x \end{pmatrix}$

$$\begin{aligned} A^2 &= A \cdot A = \begin{pmatrix} \cos x & \sin x \\ -\sin x & \cos x \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \cos x & \sin x \\ -\sin x & \cos x \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \cos^2 x - \sin^2 x & 2\sin x \cos x \\ -2\sin x \cos x & \cos^2 x - \sin^2 x \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos 2x & \sin 2x \\ -\sin 2x & \cos 2x \end{pmatrix} \end{aligned}$$

Deducem atunci că  $A^n = \begin{pmatrix} \cos nx & \sin nx \\ -\sin nx & \cos nx \end{pmatrix}$  și demonstrăm prin inducție matematică [3].

Presupunem  $A^{n+1} = \begin{pmatrix} \cos(n+1)x & \sin(n+1)x \\ -\sin(n+1)x & \cos(n+1)x \end{pmatrix}$  și verificăm relația

$$A^{n+1} = A^n \cdot A = \begin{pmatrix} \cos nx & \sin nx \\ -\sin nx & \cos nx \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \cos x & \sin x \\ -\sin x & \cos x \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos(n+1)x & \sin(n+1)x \\ -\sin(n+1)x & \cos(n+1)x \end{pmatrix} \text{ adevărat.}$$

**Definiția 2.7.** Urma unei matrice pătratice.  $\text{Tr}A$  – urma matricii pătratice  $A$  este suma elementelor de pe diagonala principală a lui  $A$ .

|       |                                                                                                                                                                           |
|-------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| (2.4) | $A = \begin{pmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix} \in M_n(C)$ $TrA = a_{11} + a_{22} + \cdots + a_{nn}$ |
|-------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|

**Exemplu 2.7.** Să se calculeze  $TrA$ , unde

- a)  $A = \begin{pmatrix} 5 & 4 \\ 6 & 9 \end{pmatrix} \in M_2(R); TrA = 5 + 9 = 14$   
b)  $A = \begin{pmatrix} 1+i & 3 \\ i-1 & 1-2i \end{pmatrix} \in M_2(C); TrA = 1+i+1-2i = 2-i$

## 2.2. Determinanți

**2.2.1.** Determinantul de ordinul doi. Dată matricea  $A = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} \in M_2(C)$ , *determinantul* atașat matricii  $A$  este

|       |                                                                       |
|-------|-----------------------------------------------------------------------|
| (2.5) | $detA = \begin{vmatrix} a & b \\ c & d \end{vmatrix} = ad - bc \in C$ |
|-------|-----------------------------------------------------------------------|

**Observația 2.4.** Matricea este o funcție, iar determinantul este un număr.

**Exemplul 2.8.** Să calculăm determinanții asociați matricilor definite în exemplul 2.7.

- a)  $detA = 5 \cdot 9 - 6 \cdot 4 = 45 - 24 = 21$   
b)  $detA = (1+i)(1-2i) - 3(i-1) = 1-i-2i^2-3i+3 = 6-4i$ , unde am ținut cont de faptul că  $i^2 = -1$

**Teorema 2.1.** (Hamilton-Cayley) pentru matrici pătratice de ordinul doi.

Dată matricea  $A = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} \in M_2(C)$ . Atunci are loc relația :

|       |                                            |
|-------|--------------------------------------------|
| (2.6) | $A^2 - A \cdot TrA + detA \cdot I_2 = O_2$ |
|-------|--------------------------------------------|

sau, echivalent,

|       |                                                 |
|-------|-------------------------------------------------|
| (2.7) | $A^2 - (a+d) \cdot A + (ad-bc) \cdot I_2 = O_2$ |
|-------|-------------------------------------------------|

**2.2.2.** Determinantul de ordin 3. Așa cum este cunoscut din liceu [3], metodele cele mai utilizate sunt regula triunghiului și regula lui Sarrus.

a) Regula triunghiului.

$$\begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{vmatrix} = a_{11}a_{22}a_{33} + a_{21}a_{32}a_{13} + a_{12}a_{23}a_{31} - a_{31}a_{22}a_{13} - a_{32}a_{23}a_{11} - a_{21}a_{12}a_{33}$$

b) Regula lui Sarrus

$$\begin{pmatrix} \begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{vmatrix} \\ \begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \end{vmatrix} \end{pmatrix} = a_{11}a_{22}a_{33} + a_{21}a_{32}a_{13} + a_{12}a_{23}a_{31} - a_{31}a_{22}a_{13} - a_{32}a_{23}a_{11} - a_{21}a_{12}a_{33}$$

c) Calculul determinantului folosind dezvoltarea după o linie

$$\begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{vmatrix} = +a_{11} \begin{vmatrix} a_{22} & a_{23} \\ a_{32} & a_{33} \end{vmatrix} - a_{12} \begin{vmatrix} a_{21} & a_{23} \\ a_{31} & a_{33} \end{vmatrix} + a_{13} \begin{vmatrix} a_{21} & a_{22} \\ a_{31} & a_{32} \end{vmatrix}$$

Analog se poate calcula determinantul folosind dezvoltarea după o coloană [3].

**Exemplu 2.9.** Să se calculeze determinanții următori:

a)  $\begin{vmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 2 & 4 & 6 \\ 3 & 6 & 9 \end{vmatrix};$

b)  $\begin{vmatrix} 1 & 0 & 1 \\ -2 & 4 & 0 \\ -1 & 3 & 2 \end{vmatrix}$

Rezolvare.

$$\text{a) } \begin{vmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 2 & 4 & 6 \\ 3 & 6 & 9 \end{vmatrix} = \text{Regula triunghiului} = 1 \cdot 4 \cdot 9 + 2 \cdot 6 \cdot 3 + 2 \cdot 6 \cdot 3 - 3 - 3 \cdot 4 \cdot 3 - 6 \cdot 6 \cdot 1 - 2 \cdot 2 \cdot 9 = 0$$

$$\text{b) } \begin{vmatrix} 1 & 0 & 1 \\ -2 & 4 & 0 \\ -1 & 3 & 2 \end{vmatrix} = \text{dezvoltare dupa prima linie} = 1 \begin{vmatrix} 4 & 0 \\ 3 & 2 \end{vmatrix} - 0 \begin{vmatrix} -2 & 0 \\ -1 & 2 \end{vmatrix} + 1 \begin{vmatrix} -2 & 4 \\ -1 & 3 \end{vmatrix} = 6$$

**2.2.3.** Pentru calculul determinanților de ordin superior se folosește dezvoltarea după o linie sau coloană. Determinantul matricii de ordin  $n$  este suma produselor elementelor din prima linie cu complementii lor algebrici. Formula are expresia de forma:

$$\det(A) = a_{11}D_{11} - a_{12}D_{12} + a_{13}D_{13} + \dots + (-1)^{n+1}D_{1n}$$

dacă considerăm dezvoltarea după prima linie.

Exemplu. Să calculăm determinantul de ordinul 4

$$d = \begin{vmatrix} 1 & 0 & -1 & 2 \\ 1 & -2 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & -1 \\ 1 & -1 & 0 & 0 \end{vmatrix}$$

Aplicăm definiția dată mai sus pentru  $n = 4$  și dezvoltăm determinantul după elementele liniei întâi.

Avem:

$$d = 1 \cdot \begin{vmatrix} 2 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & -1 \\ -1 & 0 & 0 \end{vmatrix} - 0 \cdot \begin{vmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -1 \\ 1 & 0 & 0 \end{vmatrix} + (-1) \cdot \begin{vmatrix} 1 & -2 & 0 \\ 0 & 1 & -1 \\ 1 & -1 & 0 \end{vmatrix} - 2 \cdot \begin{vmatrix} 1 & -2 & 0 \\ 0 & 1 & 1 \\ 1 & -1 & 0 \end{vmatrix} = 0 - 0 - 1 + 2 = 1$$

unde determinanții de ordin 3 i-am calculat prin una din metodele prezentate mai sus pentru determinanții de ordin 3.

### 2.3. Rangul unei matrice. Matrice inversabilă

În stabilirea rangului unei matrice se face o analiză a minorilor matricii, astfel, analiza este bazată pe noțiunea de determinant.

**Definiția 2.8.** Dacă  $A \in M_{m,n}(C)$ ,  $A$  nenulă, atunci rangul matricii  $A$  este cel mai mare dintre ordinele minorilor nenuli ai matricii  $A$ . Dacă  $A$  este matricea nulă,  $A=0$ , atunci  $\text{rang } A=0$ . Amintim că *minor = determinant de ordin  $\leq \min(m,n)$*

Pentru a stabili rangul unei matrice algoritmul este următorul. Să luăm ca exemplu matricea

$$A = \begin{pmatrix} 2 & 3 & 1 \\ 4 & 6 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ -2 & 3 & 6 \end{pmatrix} \in M_{4,3}(C). \text{ Etapele sunt următoarele.}$$

- $2 \neq 0 \rightarrow \text{rang } A \geq 1$
- $\begin{vmatrix} 2 & 3 \\ 4 & 6 \end{vmatrix} = 0$
- $\begin{vmatrix} 2 & 1 \\ 4 & 0 \end{vmatrix} = -4 \neq 0 \rightarrow \text{rang } A \geq 2$
- $\begin{vmatrix} 2 & 3 & 1 \\ 4 & 6 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \end{vmatrix} = -6 \neq 0 \rightarrow \text{rang } A = 3$

Observăm că într-adevăr  $\text{rang } A \leq \min(4,3)$

**Exemplu 2.10.** Să se găsească rangul matricii  $A$  următoare.

$$\text{a) } A = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 2 & 4 & 6 \\ 3 & 6 & 9 \end{pmatrix}$$

Din calcul găsim  $\det A = 0$ . Apoi găsim că toți minorii de ordinul doi sunt nuli. Rezultă  $\text{rang } A = 1$ .

$$\text{b) } A = \begin{pmatrix} 1 & x & 1 \\ 1 & -1 & 1 \\ x & -1 & 1 \end{pmatrix}$$

$$\det A = x^2 - 1$$

$$\rightarrow \begin{cases} x \in \mathbb{R} - \{\pm 1\} \rightarrow \det A \neq 0 \text{ si } \text{rang} A = 3 \\ x = 1 \rightarrow \det A = 0 \text{ si } \begin{vmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{vmatrix} \neq 0 \rightarrow \text{rang} A = 2 \\ x = -1 \rightarrow \det A = 0 \text{ si } \begin{vmatrix} 1 & -1 \\ -1 & -1 \end{vmatrix} \neq 0 \rightarrow \text{rang} A = 2 \end{cases}$$

**Definiția 2.9.** Dacă o matrice  $A$  este așa încât:  $A \in M_n(\mathbb{C})$ ,  $\det A \neq 0$ , atunci inversa sa este dată de relația:

|       |                                                           |
|-------|-----------------------------------------------------------|
| (2.8) | $A^{-1} = \frac{1}{\det A} \cdot A^* \in M_n(\mathbb{C})$ |
|-------|-----------------------------------------------------------|

unde  $A^*$  este matricea adjuncă, care se calculează astfel:

- se calculează  $A^t$ , transpusa matricei  $A$ ;
- fiecare element al lui  $A^t$  se înlocuiește cu complementul său algebric

**Observația 2.5.** Matricea  $A \in M_n(\mathbb{Z})$  este inversabilă în  $M_n(\mathbb{Z})$  dacă și numai dacă  $\det A = \pm 1$

**Exemplu 2.11.** Să se găsească inversele următoarelor matrici

a)  $A = \begin{pmatrix} 2 & 4 \\ 3 & 7 \end{pmatrix} \in M_2(\mathbb{C})$

$$\det A = 2 \neq 0 \Rightarrow \exists A^{-1}$$

$A^t = \begin{pmatrix} 2 & 3 \\ 4 & 7 \end{pmatrix}$ . Apoi avem că  $\begin{pmatrix} + & - \\ - & + \end{pmatrix}$  sunt semnele minorilor, iar în dreptul fiecăruia vom scrie elementul obținut prin bordarea (tăierea) liniei și coloanei cu indicii corespunzători. Obținem astfel matricea adjuncă și inversa:

$$A^* = \begin{pmatrix} +7 & -4 \\ -3 & +2 \end{pmatrix} \rightarrow A^{-1} = \frac{1}{\det A} A^* = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 7 & -4 \\ -3 & 2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{7}{2} & -2 \\ -\frac{3}{2} & 1 \end{pmatrix}$$

Pentru verificare: imediat obținem că  $A \cdot A^{-1} = A^{-1} \cdot A = I_2$

b)  $A = \begin{pmatrix} 2 & 5 & 3 \\ 2 & 0 & -1 \\ 0 & 2 & 1 \end{pmatrix} \in M_3(\mathbb{C})$

$$\det A = 6 \neq 0 \Rightarrow \exists A^{-1}$$

$$A^t = \begin{pmatrix} 2 & 2 & 0 \\ 5 & 0 & 2 \\ 3 & -1 & 1 \end{pmatrix}$$

Expresia matricii adjunkte este dată de  $A^* = \begin{pmatrix} +A_{11} & -A_{12} & +A_{13} \\ -A_{21} & +A_{22} & -A_{23} \\ +A_{31} & -A_{32} & +A_{33} \end{pmatrix}$ , unde  $A_{ij}$  sunt minorii obținuți prin bordarea matricii  $A^t$  cu linia  $i$  și coloana  $j$ . Pentru primul minor avem:

$A_{11} = \begin{vmatrix} 0 & 2 \\ -1 & 1 \end{vmatrix} = 2$ . Apoi obținem succesiv:  $A_{12} = -1, A_{13} = -5, A_{21} = 2, A_{22} = 2, A_{23} = -8, A_{31} = 4, A_{32} = 4, A_{33} = -10$ . Apoi adjuncta va fi:

$$A^* = \begin{pmatrix} +2 & -(-1) & +(-5) \\ -2 & +2 & -(-8) \\ +4 & -4 & +(-10) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 & 1 & -5 \\ -2 & 2 & 8 \\ 4 & -4 & -10 \end{pmatrix}$$

$$A^{-1} = \frac{1}{\det A} \cdot A^* = \frac{1}{6} \cdot \begin{pmatrix} 2 & 1 & -5 \\ -2 & 2 & 8 \\ 4 & -4 & -10 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{3} & \frac{1}{6} & -\frac{5}{6} \\ -\frac{1}{3} & \frac{1}{3} & \frac{4}{3} \\ \frac{2}{3} & -\frac{2}{3} & \frac{5}{3} \end{pmatrix}$$

$$\text{Verificare: } A \cdot A^{-1} = A^{-1} \cdot A = I_3$$

## 2.4. Sisteme de ecuații liniare

**Definiția 2.10.** Un sistem de ecuații în care fiecare ecuație este de gradul I cu una sau mai multe necunoscute se numește *sistem de ecuații liniare*.

Forma generală a unui sistem de  $m$  ecuații liniare cu  $n$  necunoscute este:

|       |                                                                                                                                                                                                                                                                                    |
|-------|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| (2.9) | $\begin{cases} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \cdots + a_{1n}x_n = b_1 \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \cdots + a_{2n}x_n = b_2 \\ \quad \quad \quad \dots \\ a_{m1}x_1 + a_{m2}x_2 + \cdots + a_{mn}x_n = b_m \end{cases}, \quad a_{ij}, b_i \in C, i = \overline{1..n}, j = \overline{1..m}$ |
|       | $m, n \in C$                                                                                                                                                                                                                                                                       |



### Exemple 2.12.

$$\text{a) } \begin{cases} x + 2y = -5 \\ 3x - y = 13 \end{cases}$$

$$\text{b) } \begin{cases} x - y + z = 1 \\ x + y + z = 3 \\ -x + y + z = -3 \end{cases}$$

#### 2.4.1. Forma matricială a sistemului

Sistemului (2.9) i se asociază următoarele matrici: matricea coeficienților  $A$ , matricea extinsă (adăugând la  $A$  vectorul termenilor liberi), vectorul necunoscutelor  $X$  și cel al termenilor liberi,  $B$ , după cum urmează:

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ a_{m1} & a_{m2} \cdots & a_{mn} \end{pmatrix}, \bar{A} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \cdots & a_{1n} & b_1 \\ a_{21} & a_{22} \cdots & a_{2n} & b_2 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ a_{m1} & a_{m2} \cdots & a_{mn} & b_m \end{pmatrix},$$
$$X = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix}, B = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_m \end{pmatrix}$$

Folosind aceste notații putem rescrie sistemul sub forma  $A \cdot X = B$ , și aceasta reprezintă *forma matricială* a sistemului linear.

Dacă toți termenii liberi sunt nuli, atunci spunem că sistemul este *omogen*.

#### 2.4.2. Metoda matricială de rezolvare a sistemelor liniare

Dacă matricea  $A$  este pătrată, rezolvarea sistemului linear (2.9) scris sub forma matricială se face în cazul în care determinantul matricii  $A$  este nenul. În acest caz ecuația se înmulțește la stânga cu  $A^{-1}$  și sistemul admite o singură soluție  $X = A^{-1} \cdot B$

**Exemplul 2.13.** Să rezolvăm sistemul linear b) din Ex. 2.12 . Atașăm forma matricială a sistemului:

$$\begin{pmatrix} 1 & -1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \\ -1 & 1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 3 \\ -3 \end{pmatrix}$$

Rezolvăm ecuația atașată  $A \cdot X = B$  înmulțind la stânga cu  $A^{-1}$ .  
Obținem succesiv:

$$A^{-1} = \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 0 & 2 & -2 \\ -2 & 2 & 0 \\ 2 & 0 & 2 \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 0 & 2 & -2 \\ -2 & 2 & 0 \\ 2 & 0 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 3 \\ -3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 3 \\ 1 \\ -1 \end{pmatrix}$$

### 2.4.3. Metoda lui Cramer

Se aplică unui sistem (2.9) format din  $m$  ecuații cu  $n$  necunoscute, când determinantul matricei coeficienților este nenul. Sistemul care admite o singură soluție se numește *compatibil determinat*.

Metoda lui Cramer se aplică doar pentru sisteme “pătrate”, deoarece se calculează determinantul și se referă la cazul când determinantul e nenul.

*Etapa 1.* Calculăm  $\Delta$  și observăm că  $\Delta \neq 0$ .

*Etapa 2.* Calculăm  $\Delta x_i = \overline{1, n}$  prin înlocuirea coloanei  $i$  cu coloana termenilor liberi.

*Etapa 3.* Soluția sistemului este  $x_i = \frac{\Delta x_i}{\Delta}$  (formulele lui Cramer).

**Exemplul 2.14.** Să considerăm din nou exemplul de mai sus.

$$\Delta = \begin{vmatrix} 1 & -1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \\ -1 & 1 & 1 \end{vmatrix} = 4 \neq 0$$

$$\Delta_x = \begin{vmatrix} 1 & -1 & 1 \\ 3 & 1 & 1 \\ -3 & 1 & 1 \end{vmatrix} = 12, \Delta_y = \begin{vmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1 & 3 & 1 \\ -1 & -3 & 1 \end{vmatrix} = 4, \Delta_z = \begin{vmatrix} 1 & -1 & 1 \\ 1 & 1 & 3 \\ -1 & 1 & -3 \end{vmatrix} = -4$$

Trecând la etapa 3 găsim în final  $(x, y, z) = (3, 1, -1)$

Remarcă: metoda lui Cramer se bazează pe metoda generală din paragraful 2.4.2 și folosește calcule directe pentru obținerea soluției sistemului.

### 2.4.4. Compatibilitatea sistemelor liniare

Un sistem se numește *compatibil* dacă are cel puțin o soluție. Dacă sistemul are o singură soluție, atunci este *compatibil determinat*, iar dacă are mai multe soluții sistemul este *compatibil nedeterminat*. Un sistem care nu are soluții se numește *sistem incompatibil*.

Compatibilitatea sistemelor liniare se analizează pe baza a două proprietăți importante [3]

**Proprietatea 2.1. (Kronecker-Capelli)**

Sistemul liniar (2.9) este compatibil dacă și numai dacă  $\text{rang } A = \text{rang } \bar{A}$

Un minor care dă rangul matricii se numește minor principal (pot exista mai mulți minori principali, dar toți au același ordin). Minorii obținuți dintr-un minor principal prin bordare cu elementele unei linii și unei coloane se numesc minori caracteristici.

**Proprietatea 2.2. (Rouche)**

Sistemul liniar (2.9) este compatibil dacă și numai dacă toți minorii caracteristici sunt nuli.

**Exemplul 2.15.** Să se rezolve sistemul următor

$$\begin{cases} x - y + z = 1 \\ x + y + z + t = 2 \\ -x + y + z - t = 3 \end{cases}$$

Matricea extinsă a sistemului este  $\bar{A} = \begin{pmatrix} 1 & -1 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 2 \\ -1 & 1 & 1 & -1 & 3 \end{pmatrix}$ .

Studiem minorii:

$$1 \neq 0; \begin{vmatrix} 1 & -1 \\ 1 & 1 \end{vmatrix} = 2 \neq 0; \begin{vmatrix} 1 & -1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \\ -1 & 1 & 1 \end{vmatrix} = 4 \neq 0.$$

Astfel avem că  $\text{rang } A = \text{rang } \bar{A} = 3$  și deci sistemul este compatibil nedeterminat. Fixăm  $t \in R$  ca și parametru (deoarece coeficienții săi nu apar în minorul principal), și rezolvăm sistemul:

$$\begin{cases} x - y + z = 1 \\ x + y + z = 2 - t \\ -x + y + z = 3 + t \end{cases}$$

care se numește “sistem principal”. El este un sistem de tip Cramer, deoarece determinantul matricii coeficienților săi este nenul.

$$\Delta = \begin{vmatrix} 1 & -1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \\ -1 & 1 & 1 \end{vmatrix} = 4 \neq 0, \Delta x = \begin{vmatrix} 1 & -1 & 1 \\ 2-t & 1 & 1 \\ 3+t & 1 & 1 \end{vmatrix} = -4t-2, \Delta y = \begin{vmatrix} 1 & -1 & 1 \\ 1 & 2-t & 1 \\ -1 & 3+t & 1 \end{vmatrix} = -2t+2,$$

$$\Delta z = \begin{vmatrix} 1 & -1 & 1 \\ 1 & 1 & 2-t \\ -1 & 1 & 3+t \end{vmatrix} = 2t+8$$

Aplicând apoi formulele lui Cramer găsim soluția sistemului

$$\left( \frac{-2t-1}{2}, \frac{-t+1}{2}, \frac{t+4}{2}, t \right), t \in \mathbb{R}$$

Un exemplu de sistem incompatibil este următorul:

$$\begin{cases} x + y + z = 3 \\ 2x + y + 2z = 5 \\ 3x - y + 2z = 4 \\ x + 2y + z = 5 \end{cases}$$

## 2.5. Probleme propuse

1. Calculați  $A^n$  unde  $A$  este:

a)  $A = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 2 & 1 & 0 \\ 3 & 2 & 1 \end{pmatrix} \in M_3(\mathbb{C})$

b)  $A = \begin{pmatrix} 1 & 2x & 5x^2 - 2x \\ 0 & 1 & 5x \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \in M_3(\mathbb{R})$

2. Calculați urma matricii  $A$ , unde  $A$  este dată de:

a)  $A = \begin{pmatrix} \cos x & \sin x \\ -\sin x & \cos x \end{pmatrix} \in M_2(\mathbb{C});$

b)  $A = \begin{pmatrix} 1 - \sqrt{3} & 2 \\ 4 & 1 + \sqrt{3} \end{pmatrix} \in M_2(\mathbb{R});$

c)  $A = \begin{pmatrix} 1 & \log_3 5 \\ \log_5 3 & 2 \end{pmatrix} \in M_2(\mathbb{R}).$

3. Calculați determinanții atașați matricilor următoare:

a)  $A = \begin{pmatrix} 1 - \sqrt{3} & 2 \\ 4 & 1 + \sqrt{3} \end{pmatrix} \in M_2(R);$

b)  $A = \begin{pmatrix} 1 & \log_3 5 \\ \log_5 3 & 2 \end{pmatrix} \in M_2(R);$

c)  $A = \begin{pmatrix} -\sqrt{3} & 4 & 7 \\ 0 & \sqrt{2} & -5 \\ 0 & 6 & -9 \end{pmatrix};$

d)  $\begin{vmatrix} 1 & x & x^2 \\ 1 & y & y^2 \\ 1 & z & z^2 \end{vmatrix}$  (determinant de tip Vandermonde)

4. Aflați rangul următoarelor matrici:

a)  $A = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 2 & 3 & -1 \\ 1 & 4 & 6 \end{pmatrix};$

b)  $A = \begin{pmatrix} m & 1 & 1 \\ 1 & m & 1 \\ 1 & 1 & 1 \end{pmatrix}$ , discuție după  $m \in R$ ;

c)  $A = \begin{pmatrix} -5 & 2 & 1 & 6 \\ 3 & 0 & 1 & 0 \\ 10 & -4 & -2 & -12 \end{pmatrix}.$

5. Fie matricea  $A = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1 & a & a^2 \\ 1 & b & b^2 \end{pmatrix}$

a) Calculați  $\det A$ ;

b) Determinați inversa matricii  $A$  pentru  $a=2, b=3$ ;

c) Rezolvați sistemul liniar:

$$\begin{cases} x + y + z = 1 \\ x + 2y + 3z = 1 \\ x + 4y + 9z = 1 \end{cases}$$

6. Să se rezolve sistemul de ecuații omogene:

$$\begin{cases} x + y - 2z = 0 \\ x - y + 2z = 0 \\ 2x + 2y + 4z = 0 \end{cases}$$

7. Fie matricile:  $A = \begin{pmatrix} 1 & -1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 \\ a & b & 1 \end{pmatrix}$ ,  $B = \begin{pmatrix} 4 \\ 5 \\ 5 \end{pmatrix}$

Pentru  $a=0$ ,  $b=1$ , rezolvați sistemul  $A \cdot X = B$ ,  $X = \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} \in R^3$

## TEMA 3. ELEMENTE DE STATISTICĂ DESCRIPTIVĂ

### 3.1. Serii statistice

#### 3.1.1. Noțiuni de bază.

Primul pas important care trebuie făcut după culegerea datelor primare, atunci când există într-un număr suficient de mare, este *gruparea* acestora. Gruparea datelor primare se face după anumite însușiri, caracteristici ale obiectelor suport care constituie indivizii statistici.

Convenim să numim *variabilă de grupare (caracteristică de grupare)* acea însușire după care se distribuie în clase omogene, unitățile statistice dintr-o colectivitate dată sau după care se urmărește modificarea – fie în timp, fie în spațiu – a unei alte variabile.

Variabilele de grupare pot fi clasificate după conținut și după forma de exprimare.

După conținut, deosebim:

- ◆ **variabile atributive** – sunt însușiri, atribute ale unităților statistice dintr-o colectivitate dată, în funcție de care se face gruparea acestora în clase omogene (Ex.: sexul, vârsta, profesia etc.);
- ◆ **variabile de timp** – oferă posibilitatea cunoașterii tendințelor evolutive ale unui fenomen oarecare (Ex.: ziua, luna, trimestrul, anul);
- ◆ **variabile de spațiu** – oferă posibilitatea cunoașterii variabilității unui fenomen în profil teritorial, în spațiu (Ex.: întreprinderea, localitatea, județul, țara etc.).

Să subliniem faptul că variabila atributivă este utilizată la gruparea propriu-zisă a unităților dintr-o colectivitate în clase omogene, în timp ce cu variabilele de timp și spațiu se urmărește variația – în timp sau spațiu – a unei caracteristici oarecare.

După forma de exprimare, deosebim:

- ◆ **variabile cantitative** – au variantele exprimate numai prin numere, sunt variabile numerice (Ex.: salariul, prețul etc.). Acestea se împart la rândul lor în:
  - **variabile discrete** – pot lua numai anumite valori, de obicei întregi (Ex.: populația, numărul de angajați, producția exprimată în bucăți etc.);
  - **variabile continue** – pot lua orice valoare dintr-un anumit interval (Ex.: salariul, procentul realizării normelor etc.);

- ♦ **variabile calitative** – au variantele exprimate numai prin cuvinte, sunt variabile alfabetice (Ex.: sexul, profesia, culoarea ochilor etc.); o astfel de variabilă poate fi transpusă în limbajul cifric prin codificarea variantelor sale.

Având la dispoziție una sau mai multe variabile de grupare, putem construi serii statistice. **Seria statistică** reprezintă o paralelă între două sau mai multe șiruri de date, dintre care cel puțin unul vizează caracteristica de grupare.

Una dintre noțiunile fundamentale ale statisticii, derivată însă din cea de individ, populație și caracteristică, este **frecvența**.

Considerând de exemplu rezultatele unei grupe de studenți la un examen, putem aprecia o entitate izolată – un student – prin răspunsul la întrebarea „*Ce notă a luat studentul X la examen?*”. Dar atunci când ne referim la întreaga grupă, ne așteptăm la întrebări de genul „*Câți studenți au promovat examenul și câți nu?*”, „*Câți studenți au luat nota 7?*” etc. Întrebările lansate ascund deja în ele împărțirea studenților în grupe, după caracteristica de grupare „*nota la examen*” („*promovați – nepromovați*”, „*nota 7 – alte note*”). Răspunsul la întrebările respective nu înseamnă altceva decât căutarea frecvențelor caracteristicii respective sau, cu alte cuvinte, a numărului de indivizi care populează fiecare clasă a caracteristicii.

Dacă avem deci o caracteristică de grupare  $C$ , cu variantele  $C_1, C_2, \dots, C_k$ , a celor  $N_0$  indivizi ai unei colectivități și dacă din acești indivizi  $f_1$  sunt în clasa  $C_1$ ,  $f_2$  sunt în clasa  $C_2$ , ...,  $f_k$  sunt în clasa  $C_k$ , se poate defini o funcție biunivocă

$$f : \{C_1, C_2, \dots, C_k\} \rightarrow \{f_1, f_2, \dots, f_k\}$$

numită **distribuție de frecvență**.

Putem spune deci că **seria de distribuție simplă** reprezintă o paralelă între șirul variantelor sau intervalelor de variație ale caracteristicii atributive și șirul frecvențelor corespunzătoare fiecărei variante sau interval. Este cunoscută și sub numele de **distribuție unidimensională**. Există și distribuții bidimensionale, tridimensionale, etc [5]

Frecvențele specifice seriilor de distribuție pot fi:

- ♦ **frecvențe absolute** – reprezintă numărul de unități statistice corespunzătoare fiecărei grupe sau variante; sunt numere naturale, convenim să le notăm cu  $f_i$  și, dacă  $N_0$  este volumul colectivității

supuse studiului, avem  $f_1 + f_2 + \dots + f_k = \sum_{i=1}^k f_i = N_0$  ;



- ♦ **frecvențe relative** - se determină ca raport între frecvențele absolute și numărul total de unități; sunt numere subunitare, mai mari sau egale cu zero, convenim să le notăm cu  $p_i$  și satisfac:

$$p_1 + p_2 + \dots + p_k = \sum_{i=1}^k p_i = 1,$$

deoarece:

$$p_1 = \frac{f_1}{\sum f_i}, p_2 = \frac{f_2}{\sum f_i}, \dots, p_k = \frac{f_k}{\sum f_i}.$$

În mod obișnuit, atunci când se utilizează expresia „frecvențe relative” se presupune că este vorba despre frecvențe relative la unitate ( $\sum p_i = 1$ ).

Frecvențele relative la 100 ( $\sum p_i = 100$ ) se numesc „procente” (se notează cu semnul %) și pot fi interpretate ca *ponderi* ale claselor în totalul populației. Totodată, ele pot fi interpretate și ca *probabilități empirice*, în sensul că  $p_i$  reprezintă probabilitatea ca, alegând la întâmplare un individ din cei  $N_0$ , el să aparțină clasei  $i$ .

### 3.1.2. Reprezentarea geometrică a seriilor statistice

Reprezentarea datelor statistice se realizează cu ajutorul **histogramei**. Histograma se construiește sub forma unor dreptunghiuri lipite, cu baza pe Ox, mărimea lor fiind egală la bază cu mărimea intervalului de variație respectiv. Înălțimea dreptunghiului va fi dată de frecvența corespunzătoare fiecărui interval de variație. Histograma arată forma de repartiție, precum și densitatea de repartiție a frecvențelor.

Să considerăm ca exemplu punctele obținute de o grupă de studenți care cuantifică cunoștințele la examenul de matematică. Punctajele sunt următoarele:

{64, 62, 76, 82, 66, 76, 72, 71, 74, 72, 71, 73, 70, 75, 77, 84, 92, 86, 62, 58, 78, 80, 79, 84, 83, 82, 66, 68, 68, 82, 84, 78, 76, 69, 77, 58, 62, 82, 85, 58, 78, 84, 94, 88, 77, 78, 88, 91, 70, 71, 78, 58, 65, 53, 60, 49, 68, 74, 71, 66, 68, 71, 73, 70, 85, 78, 65, 54, 51, 78, 89, 66, 68, 95, 94, 99, 81, 81, 92, 88, 99, 81, 81}.

Observăm că datele din colecția de mai sus se repetă. Adică, apar fiecare cu o anumită frecvență (de un anumit număr de ori). În consecință ele trebuie reprezentate într-un tablou de forma tabelului 3.1 de mai jos:

|       |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |
|-------|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|
| $X$   | 49 | 51 | 53 | 54 | 58 | 60 | 62 | 64 | 65 | 66 | 68 | 69 |
| $n_i$ | 1  | 1  | 1  | 1  | 4  | 1  | 3  | 1  | 2  | 4  | 5  | 1  |
| $X$   | 70 | 71 | 72 | 73 | 74 | 75 | 76 | 77 | 78 | 79 | 80 | 81 |
| $n_i$ | 3  | 5  | 2  | 2  | 2  | 1  | 3  | 3  | 7  | 1  | 1  | 4  |
| $X$   | 82 | 83 | 84 | 85 | 86 | 88 | 89 | 91 | 92 | 94 | 95 | 99 |
| $n_i$ | 4  | 1  | 4  | 2  | 1  | 3  | 1  | 1  | 2  | 2  | 1  | 2  |

Tabelul 3.1.

în care  $X$  este variabila statistică (cu variantele sale) iar  $n_i$  reprezintă *frecvențele relative*. În cazul seriilor date prin intervale, datele se grupează într-un tablou de forma:

|     |              |              |         |                  |
|-----|--------------|--------------|---------|------------------|
| $X$ | $[t_1, t_2)$ | $[t_2, t_3)$ | $\dots$ | $[t_m, t_{m+1})$ |
| $n$ | $n_1$        | $n_2$        | $\dots$ | $n_m$            |

în care  $X$  este variabila statistică, iar  $n_j$  este numărul valorilor variabilei statistice aflate în intervalul  $[t_j; t_{j+1})$ , adică *frecvența absolută*.

Cum alcătuim histograma aferentă unor date ca cele din tabelul 3.1? Avem nevoie de așa numita *grupare pe clase*. Dacă avem o selecție  $x_1, x_2, \dots, x_n$  de volum total  $n$  de date obținute în urma măsurării unor mărimi fizice, tehnice, economice de care depinde evoluția unor procese sau fenomene, notăm  $m = \min_i x_i$ ,  $M = \max_i x_i$ . Organizăm datele selecției în grupe sau subintervale obținute divizând intervalul  $[m; M]$  într-un număr  $r$  de subintervale congruente (de aceeași lungime). Pentru determinarea numărului de subintervale de grupare poate fi folosită *formula lui H. A. Sturges*:

$$r = [1 + 3.322 \lg n]$$

Având la îndemână această formulă, definim pasul de histogramă  $h = \frac{M-m}{r}$ . Obținem astfel  $r$  intervale de grupare, anume:

$$I_1 = [m, m + h), I_2 = [m + h, m + 2h), I_r = [m + (r - 1)h, M)$$

Notăm cu  $n_1$  numărul acelor valori  $x_i$  care sunt situate în intervalul  $I_1$ ,  $n_2$  numărul acelor valori  $x_i$  care sunt situate în intervalul  $I_2$ ,  $\dots$ ,  $n_r$  numărul acelor valori  $x_i$  care sunt situate în intervalul  $I_r$ . Histograma asociată selecției

$x_1, x_2, \dots, x_n$  este reuniunea dreptunghiurilor  $D_k = I_k \times [0, n_k]$  (produs cartezian), pentru  $1 \leq k \leq r$ .

Concret: alegem un sistem ortogonal de axe  $xOy$ , cu intervalul  $[m; M]$  plasat pe axa  $Ox$  (cu originea  $O$  eventual în punctul  $m$ ). Pe intervalul  $I_1$  se construiește dreptunghiul de înălțime  $n_1$  și baza de lungime  $h$ , pe intervalul  $I_2$  se construiește dreptunghiul de înălțime  $n_2$  și baza de lungime  $h$ , etc. Intervalul  $I_k$  pentru care  $n_k$  este maxim este **moda** selecției.

Pentru exemplificare, dacă reluăm tabelul 1 cu punctajele obținute de grupa de student, aplicând metoda de construcție a histogramei, se obține forma din figura 3.1:

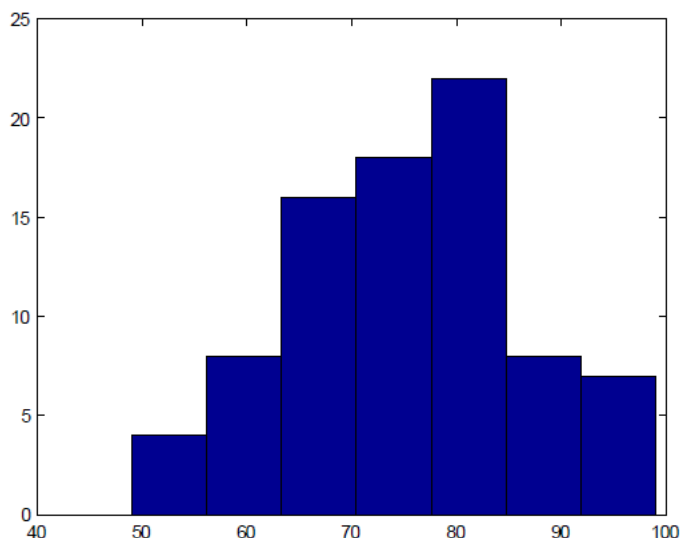


Fig. 3.1.

### 3.2. Indicatorii seriilor statistice

Indicatorii seriilor de distribuție se împart în două grupe. Din prima grupă, *indicatorii tendinței centrale*, descriem aici *media și mediana*, iar din cea de-a doua, *indicatorii variației și asimetriei*, ne ocupăm de *amplitudinea, abaterea variantelor caracteristicii de la media lor, abaterea medie lineară, dispersia, abaterea medie pătratică sau abaterea standard, coeficientul de variație*. Detalii despre alți indicatori statistici pot fi găsiți în [5].

#### 3.2.1. Media – noțiune, tipuri, metodologie de calcul

**Noțiune.** *Media este expresia sintetică a nivelurilor individuale ale unei variabile oarecare, concretizată într-un singur nivel reprezentativ, care*

evidențiază ceea ce este esențial, firesc, tipic și obiectiv în dezvoltarea unui fenomen.

Prin definiție, media anihilează toate abaterile variantelor caracteristicii de la nivelul său.

**Tipuri.** Se deosebesc:

a) **media aritmetică;**

b) **media geometrică;**

Fiecare dintre aceste tipuri are două variante: **simplă** și **ponderată**. Menționăm că mai există încă două tipuri de medie, de care nu ne ocupăm aici [5]

#### a) **Media aritmetică**

**Condiții de aplicabilitate.** În general, media aritmetică se folosește atunci când variabilitatea unui fenomen se produce aproximativ în progresie aritmetică, adică atunci când nivelurile caracteristicii cresc sau descresc aproximativ cu aceeași valoare, înregistrând o tendință lineară.

Media aritmetică simplă, se folosește atunci când numărul variantelor caracteristicii este egal cu numărul unităților statistice supuse studiului, adică atunci când nu se repetă nici o variantă.

Media aritmetică ponderată se folosește atunci când cel puțin o variantă se repetă; ea este specifică seriilor de distribuție.

#### **Metodologie de calcul**

##### a<sub>1</sub>) **Media aritmetică simplă.**

Funcția determinantă este de tip adițional, adică nivelul general (total) al caracteristicii  $X$  se obține prin însumarea variantelor  $x_i$ . Calculul mediei are la bază următoarea proprietate: substituind, în cadrul funcției determinante, variantele  $x_i$  cu media lor, nivelul general al caracteristicii  $X$  nu trebuie să se schimbe. Deci:

$$\begin{aligned}x_1 + x_2 + \dots + x_n &= \sum x_i \\ \bar{x} + \bar{x} + \dots + \bar{x} &= n\bar{x}\end{aligned}$$

|       |                                                                |
|-------|----------------------------------------------------------------|
| (3.1) | $n\bar{x} = \sum x_i \Rightarrow \bar{x} = \frac{\sum x_i}{n}$ |
|-------|----------------------------------------------------------------|

##### a<sub>2</sub>) **Media aritmetică ponderată.**

Pentru media aritmetică ponderată, se folosește – în principiu – aceeași metodologie, cu deosebirea că fiecare variantă este ponderată

(înmulțită) cu frecvența corespunzătoare.

Aici este vorba de frecvențe absolute.

Deci:

$$x_1 f_1 + x_2 f_2 + \dots + x_n f_n = \sum x_i f_i$$

$$\bar{x} f_1 + \bar{x} f_2 + \dots + \bar{x} f_n = \bar{x} \sum f_i$$

|       |                                                                                       |
|-------|---------------------------------------------------------------------------------------|
| (3.2) | $\bar{x} \sum f_i = \sum x_i f_i \Rightarrow \bar{x} = \frac{\sum x_i f_i}{\sum f_i}$ |
|-------|---------------------------------------------------------------------------------------|

Comparând relația mediei aritmetice ponderate cu cea a mediei aritmetice simple, se observă că nivelul mediei aritmetice ponderate este dependent de frecvențele corespunzătoare fiecărei variante.

**Proprietățile mediei aritmetice.** Se deosebesc două grupe de proprietăți:

- de verificare a exactității mediei;
- de simplificare a calculului.

Prima grupă cuprinde:

♦ Media valorilor unei caracteristici este mai mare decât varianta minimă și mai mică decât varianta maximă, adică:

|       |                                 |
|-------|---------------------------------|
| (3.3) | $x_{\min} < \bar{x} < x_{\max}$ |
|-------|---------------------------------|

Orice valoare în afara acestui interval, semnalează nivel eronat al mediei.

♦ Suma abaterilor variantelor caracteristicii de la media lor, este egală cu zero, adică:

$$\sum (x_i - \bar{x}) = 0 \text{ (pentru media aritmetică simplă);}$$

$$\sum (x_i - \bar{x}) f_i = 0 \text{ (pentru media aritmetică ponderată).}$$

Cea de-a doua grupă cuprinde:

♦ Media calculată din variantele caracteristicii, micșorate în prealabil cu o constantă  $a$ , este mai mică decât media reală cu constanta  $a$ , adică:

$$\frac{\sum (x_i - a) f_i}{\sum f_i} < \bar{x} \text{ cu constanta } a,$$

sau:

$$\bar{x} = \frac{\sum (x_i - a) f_i}{\sum f_i} + a \text{ (lucru foarte simplu de demonstrat).}$$

♦ Media calculată din variantele caracteristicii, împărțite în prealabil la constanta  $k$ , este mai mică decât media reală de  $k$  ori, adică (în cazul în care avem  $k > 1$ ):

$$\frac{\sum \frac{x_i}{k} f_i}{\sum f_i} < \bar{x} \text{ de } k \text{ ori,}$$

sau:

$$\bar{x} = \frac{\sum \frac{x_i}{k} f_i}{\sum f_i} \cdot k.$$

Aplicând simultan cele două proprietăți, se obține relația de calcul simplificat al mediei:

|       |                                                               |
|-------|---------------------------------------------------------------|
| (3.4) | $\bar{x} = \frac{\sum \frac{x_i - a}{k} f_i}{\sum f_i} k + a$ |
|-------|---------------------------------------------------------------|

La prima vedere, această relație pare destul de complicată; practic, cu ajutorul său calculul mediei se simplifică într-o măsură considerabilă, întrucât:

- ▶ constanta  $a$  este, de regulă, varianta caracteristicii cu frecvența cea mai mare;
- ▶ constanta  $k$  este mărimea intervalului de variație;
- ▶ după stabilirea poziției lui  $a$  în cadrul seriei de distribuție, pentru rapoartele  $\frac{x_i - a}{k}$  se vor trece automat valorile: zero în dreptul lui  $a$ ; -1, -2, -3, ... deasupra și 1, 2, 3, ... sub zero.

În exemplul rezolvat 2 se poate observa cum funcționează această tehnică.

Proprietățile de simplificare a calculului mediei se aplică la seriile de distribuție cu intervale de variație egale.

## b) Media geometrică

**Condiții de aplicabilitate.** Media geometrică se folosește în cazurile în care fenomenele înregistrează modificări, aproximativ, în progresie geometrică; este utilizată mai frecvent în cazurile în care diferențele dintre variantele caracteristicii sunt mai mari la începutul seriei și din ce în ce mai mici către sfârșitul acesteia. Rezultă că media geometrică este recomandată

pentru analiza tendințelor neliniare care evidențiază creșteri mari la început și o atenuare a acestora spre sfârșitul seriei.

Este folosită și ca model matematic în calculul unuia dintre indicatorii sintetici ai seriilor cronologice și anume, indicele mediu al dinamicii.

### **Metodologie de calcul**

În cazul mediei geometrice, funcția determinantă este de tip multiplicativ.

#### **b<sub>1</sub>) Media geometrică simplă**

$$x_1 \cdot x_2 \cdot \dots \cdot x_n = \prod x_i$$

$$\bar{x}_g \cdot \bar{x}_g \cdot \dots \cdot \bar{x}_g = \bar{x}_g^n$$

|       |                                                                       |
|-------|-----------------------------------------------------------------------|
| (3.5) | $\bar{x}_g^n = \prod x_i \Rightarrow \bar{x}_g = \sqrt[n]{\prod x_i}$ |
|-------|-----------------------------------------------------------------------|

#### **b<sub>2</sub>) Media geometrică ponderată**

$$x_1^{f_1} \cdot x_2^{f_2} \cdot \dots \cdot x_n^{f_n} = \prod x_i^{f_i}$$

$$\bar{x}_g^{f_1} \cdot \bar{x}_g^{f_2} \cdot \dots \cdot \bar{x}_g^{f_n} = \bar{x}_g^{\sum f_i}$$

Este vorba desigur tot despre frecvențe absolute.

|       |                                                                                                   |
|-------|---------------------------------------------------------------------------------------------------|
| (3.6) | $\bar{x}_g^{\sum f_i} = \prod x_i^{f_i} \Rightarrow \bar{x}_g = \sqrt[\sum f_i]{\prod x_i^{f_i}}$ |
|-------|---------------------------------------------------------------------------------------------------|

Ambele variante ale mediei geometrice se calculează prin logaritmare; evident, se apelează la acest mod de calcul atunci când nu dispunem de un calculator cu facilități corespunzătoare calculului direct.

- pentru media geometrică simplă:

$$\lg \bar{x}_g = \frac{1}{n} \sum \lg x_i \Rightarrow \bar{x}_g = 10^{\frac{1}{n} \sum \lg x_i}$$

- pentru media geometrică ponderată:

$$\lg \bar{x}_g = \frac{1}{\sum f_i} \sum f_i \lg x_i \Rightarrow \bar{x}_g = 10^{\frac{1}{\sum f_i} \sum f_i \lg x_i}$$

### **3.2.2. Mediana – noțiune, metodologie de calcul, utilitate**

**Noțiune.** *Mediana* este acea valoare a caracteristicii care împarte

seria în două părți egale, cu același nr de elemente.

### Metodologie de calcul

Pentru seriile simple se deosebesc două cazuri:

a) Când seria are un număr impar de termeni – mediana este varianta caracteristicii care ocupă locul central ( $x_{\frac{n+1}{2}}$ ) în cadrul seriei ordonate

crescător sau descrescător.

Exemplu, fie seria: 15, 27, 10, 38, 23, 31, 18.

Ordonăm seria: 10, 15, 18, 23, 27, 31, 38.

Mediana este 23, ocupând locul  $(7 + 1) / 2 = 4$ .

b) Când seria are un număr par de termeni – mediana este dată de media aritmetică simplă a termenilor centrali din seria ordonată crescător sau descrescător

|       |                                                         |
|-------|---------------------------------------------------------|
| (3.7) | $\frac{\frac{x_n}{2} + \frac{x_{\frac{n}{2}+1}}{2}}{2}$ |
|-------|---------------------------------------------------------|

Exemplu, fie seria: 15, 27, 10, 38, 23, 31, 18, 40.

Ordonăm seria: 10, 15, 18, 23, 27, 31, 38, 40.

Mediana este  $(18 + 23) / 2 = 20,5$  (media aritmetică a locurilor 4 și 5).

Pentru seriile de distribuție alcătuite după intervale de variație, se folosește relația:

|       |                                                                       |
|-------|-----------------------------------------------------------------------|
| (3.8) | $Me = L_i + \left( \frac{\sum f_i}{2} - S_n \right) \frac{k}{f_{Me}}$ |
|-------|-----------------------------------------------------------------------|

unde:

$L_i$  = limita inferioară a intervalului în care se plasează mediana;

$\frac{\sum f_i}{2}$  = jumătate din numărul de unități statistice, conform definiției medianei;

$S_n$  = suma frecvențelor intervalelor care preced intervalul în care se plasează mediana;

$k$  = mărimea intervalului de variație;

$f_{Me}$  = frecvența intervalului în care se plasează mediana.

Această relație are la bază ipoteza că, în interiorul intervalului de



variație, unitățile statistice sunt uniform distribuite.

**Utilitate.** Mediana are, în principal, următoarele utilizări:

- ◆ poate fi folosită în locul mediei, în aprecierea nivelului mediu al unor serii statistice;

- ◆ este folosită, ca bază de calcul, în determinarea unor indicatori ai asimetriei;

- ◆ este folosită, ca etalon, în aprecierea gradului de semnificație a mediei, prin diferența dintre acești indicatori; cu cât diferența este mai mică, cu atât semnificația mediei este mai apropiată de cea a medianei.

### 3.2.3. Indicatorii variației

În cadrul analizei statistice, studiul variației fenomenelor social-economice ocupă un loc foarte important; este absolut necesară cunoașterea domeniului de variație a unei caracteristici oarecare pentru a aprecia și estima corect principalele tendințe ale acesteia, raporturile dintre variabilitatea ei și cea a altor caracteristici etc.

Este cunoscut faptul că, gradul de semnificație a indicatorilor medii este strâns legat de câmpul de variație a valorilor unui fenomen, de modul de dispersare a acestor valori în interiorul câmpului de variație, de gradul de aglomerare a cazurilor în jurul unor valori etc. Aspectele respective sunt cuantificate prin intermediul unor indicatori specifici a căror metodologie de calcul, semnificație și utilitate vor fi prezentate în acest subcapitol.

Se deosebesc două grupe:

**a) Indicatori simpli.**

**b) Indicatori sintetici.**

Prima grupă cuprinde:

**a1) Amplitudinea variației.** Oferă posibilitatea delimitării câmpului de variație a unui fenomen. Se deosebesc două variante:

**a1.1) Amplitudinea absolută.** Se calculează ca diferență între varianta maximă și varianta minimă ale caracteristicii, folosind relația:

|       |                             |
|-------|-----------------------------|
| (3.9) | $A_a = x_{\max} - x_{\min}$ |
|-------|-----------------------------|

**a1.2) Amplitudinea relativă.** Se calculează ca raport între amplitudinea absolută și media caracteristicii respective, exprimându-se în procente:

|        |                                       |
|--------|---------------------------------------|
| (3.10) | $A_r = \frac{A_a}{\bar{x}} \cdot 100$ |
|--------|---------------------------------------|

**a2) Abaterea variantelor de la media lor.** Oferă posibilitatea cunoașterii structurii variației la nivelul fiecărei unități statistice. Se întâlnesc două variante:

**a2.1) Abaterea absolută.** Se calculează ca diferență între variantele caracteristicii și media lor, folosind relația:

|        |                                                                                         |
|--------|-----------------------------------------------------------------------------------------|
| (3.11) | $d_a = x_i - \bar{x}$ , deci șirul $x_1 - \bar{x}, x_2 - \bar{x}, \dots, x_n - \bar{x}$ |
|--------|-----------------------------------------------------------------------------------------|

**a2.2) Abaterea relativă.** Se calculează ca raport între abaterea absolută și medie, folosindu-se relația:

|        |                                                                                 |
|--------|---------------------------------------------------------------------------------|
| (3.12) | $d_r = \frac{d_a}{\bar{x}} \cdot 100 = \frac{x_i - \bar{x}}{\bar{x}} \cdot 100$ |
|--------|---------------------------------------------------------------------------------|

Cea de-a doua grupă cuprinde:

**b1) Abaterea medie lineară.** Se calculează ca o medie aritmetică simplă sau ponderată a modulelor abaterilor absolute ale variantelor caracteristicii de la media lor, folosind una dintre relațiile:

|        |                                                                         |
|--------|-------------------------------------------------------------------------|
| (3.13) | $\bar{d} = \frac{\sum  x_i - \bar{x} }{n}$ (simplă)                     |
| (3.14) | $\bar{d} = \frac{\sum  x_i - \bar{x}  \cdot f_i}{\sum f_i}$ (ponderată) |

**Semnificație.** Sintetizează nivelul mediu al abaterilor absolute ale variantelor caracteristicii de la media lor. Datorită faptului că abaterile absolute se iau în calcul în valoare absolută, se acordă aceeași importanță atât abaterilor negative, cât și celor pozitive.

**Utilitate.** Se folosește pentru determinarea intervalului mediu de variație, care este următorul:

$$I = [\bar{x} - \bar{d}; \bar{x} + \bar{d}]$$

În practică acest indicator este folosit mai rar.

**b2) Dispersia.** Se calculează ca o medie aritmetică simplă sau ponderată a pătratului abaterilor variantelor caracteristicii de la media lor

(fiind de fapt, momentul centrat de ordinul doi), folosind una dintre relațiile:

|        |                                                                     |
|--------|---------------------------------------------------------------------|
| (3.15) | $\sigma^2 = \frac{\sum (x_i - \bar{x})^2}{n} \quad (\text{simplă})$ |
|--------|---------------------------------------------------------------------|

|        |                                                                                   |
|--------|-----------------------------------------------------------------------------------|
| (3.16) | $\sigma^2 = \frac{\sum (x_i - \bar{x})^2 f_i}{\sum f_i} \quad (\text{ponderată})$ |
|--------|-----------------------------------------------------------------------------------|

Nu poate fi folosită la caracterizarea variației distribuției (unitățile sale de măsură fiind „unități pătrate”), fiind folosită doar ca bază de calcul pentru abaterea medie pătratică. În literatura de specialitate mai este cunoscută și sub numele de **varianță**.

**b3) Abaterea standard** sau **abaterea medie pătratică**. Se calculează ca radical din dispersie, deci ca o medie pătratică – simplă sau ponderată – a abaterilor absolute ale variantelor caracteristicii de la media lor, folosind una dintre relațiile:

|        |                                                                                                          |
|--------|----------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| (3.17) | $\sigma = \sqrt{\sigma^2} = \sqrt{\frac{\sum (x_i - \bar{x})^2}{n}} \quad (\text{simplă})$               |
| (3.18) | $\sigma = \sqrt{\sigma^2} = \sqrt{\frac{\sum (x_i - \bar{x})^2 f_i}{\sum f_i}} \quad (\text{ponderată})$ |

Fiind un indicator de gradul I, ca și media, poate fi folosit în caracterizarea variației, determinându-se cu ajutorul său intervalul mediu de variație, astfel:

$$I = [\bar{x} - \sigma; \bar{x} + \sigma]$$

Dacă pentru aceeași serie se calculează abaterea medie lineară și abaterea standard, întotdeauna  $\sigma > \bar{d}$ .

Rezultă că intervalul mediu de variație, determinat cu ajutorul abaterii standard, este mai larg decât cel stabilit cu abaterea medie lineară și, din acest motiv, abaterea standard este preferată în analiza variației.

**b4) Coeficientul de variație**. Se determină ca raport între abaterea standard și nivelul mediu al unei variabile oarecare, exprimându-se, de obicei, în procente. El este de fapt, expresia relativă a abaterii standard, adică ponderea acesteia în valoarea mediei. Deci, se calculează după următoarea relație:

(3.19)

$$v = \frac{\sigma}{\bar{x}} \cdot 100$$

**Semnificație.** Cu cât nivelul său este mai apropiat de zero, cu atât variația unui fenomen este mai redusă, mai slabă. În acest caz colectivitatea studiată este mai omogenă; indicatorii sintetici folosiți în analiza diferitelor caracteristici ale acestei colectivități, au un grad din ce în ce mai ridicat de semnificație. Cu cât nivelul coeficientului de variație este mai îndepărtată de zero, cu atât variația fenomenului studiat este mai pronunțată; eterogenitatea colectivității statistice este din ce în ce mai accentuată; indicatorii sintetici au în acest caz un grad de semnificație din ce în ce mai redus.

În practică se consideră semnificative valorile lui  $v$  de până la 30%. Nivelurile mai mari, presupun faptul că indicatorii sintetici, folosiți mai ales în calcule estimative, introduc erori din ce în ce mai mari. Pentru evitarea acestor situații, atunci când  $v > 30\%$ , se recomandă împărțirea colectivității în grupe omogene și determinarea indicatorilor sintetici pentru fiecare grupă.

Coeficientul de variație este folosit pe scară largă în analiza statistică, alături de abaterea standard, apreciindu-se cu ajutorul său nu numai intensitatea variației unui fenomen, ci și gradul de semnificație a unor valori tipice, cum este – spre exemplu – media.

### 3.2.4. Proprietățile dispersiei

Dispersia fiind calculată ca o medie aritmetică, înseamnă că proprietățile mediei aritmetice sunt aplicabile și în cazul dispersiei. Rețin atenția în mod deosebit proprietățile care facilitează calculul dispersiei.

**Prima proprietate.** Dispersia calculată din abaterile variantelor  $x_i$  de la o constantă  $a$ , este mai mare decât dispersia reală cu pătratul diferenței dintre medie și constanta  $a$ . Avem:

$$\begin{aligned} \frac{\sum (x_i - a)^2 f_i}{\sum f_i} &= \frac{\sum (x_i^2 - 2ax_i + a^2) f_i}{\sum f_i} = \\ &= \frac{\sum (x_i^2 - 2\bar{x}x_i + \bar{x}^2 + 2\bar{x}x_i - \bar{x}^2 - 2ax_i + a^2) f_i}{\sum f_i} = \frac{\sum (x_i^2 - 2\bar{x}x_i + \bar{x}^2) f_i}{\sum f_i} + \\ &+ 2\bar{x} \frac{\sum x_i f_i}{\sum f_i} - \bar{x}^2 \frac{\sum f_i}{\sum f_i} - 2a \frac{\sum x_i f_i}{\sum f_i} + a^2 \frac{\sum f_i}{\sum f_i} = \\ &= \sigma^2 + 2\bar{x}^2 - \bar{x}^2 - 2a\bar{x} + a^2 = \sigma^2 + (\bar{x} - a)^2 \end{aligned}$$

Reținem această proprietate sub forma:

$$\sigma^2 = \frac{\sum (x_i - a)^2 f_i}{\sum f_i} - (\bar{x} - a)^2.$$

**A doua proprietate.** Dispersia calculată din abaterile variantelor de la media lor, împărțite la o constantă  $k$ , este mai mică de  $k^2$  ori decât dispersia reală, adică:

$$\frac{\sum \left( \frac{x_i - \bar{x}}{k} \right)^2 f_i}{\sum f_i} = \frac{1}{k^2} \sigma^2 \Leftrightarrow \sigma^2 = k^2 \cdot \frac{\sum \left( \frac{x_i - \bar{x}}{k} \right)^2 f_i}{\sum f_i}.$$

Aplicând simultan cele două proprietăți se ajunge la formula de calcul simplificat al dispersiei:

|        |                                                                                                       |
|--------|-------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| (3.20) | $\sigma^2 = \frac{\sum \left( \frac{x_i - a}{k} \right)^2 f_i}{\sum f_i} \cdot k^2 - (\bar{x} - a)^2$ |
|--------|-------------------------------------------------------------------------------------------------------|

La prima vedere, această relație pare mult mai complicată decât relația obișnuită; practic însă, calculul se simplifică într-o măsură considerabilă dacă vom proceda la fel ca în cazul formulei de calcul simplificat al mediei, adică dacă vom considera pe  $a$  ca fiind varianta caracteristicii cu frecvența cea mai mare, iar pe  $k$  ca fiind lungimea intervalului de variație; și în acest caz, pentru rapoartele  $\frac{x_i - a}{k}$  se va trece zero în dreptul lui  $a$ , -1, -2, -3,... deasupra și 1, 2, 3,... sub zero. Modul de acțiune al metodei este prezentat în exemplul rezolvat 2.

### 3.3. Probleme rezolvate

1. Fiind dat următorul șir de valori:

|       |       |       |       |       |       |       |       |       |       |
|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|
| 6,41; | 6,75; | 6,35; | 6,62; | 6,45; | 6,50; | 6,41; | 6,75; | 6,50; | 6,05; |
| 6,62; | 6,05; | 6,80; | 6,41; | 6,50; | 6,75; | 6,35; | 6,50; | 6,75; | 6,45; |
| 6,45; | 6,75; | 6,50; | 6,35; | 6,62; | 6,45; | 6,50; | 6,41; | 6,80; | 6,50; |
| 6,50; | 6,45; | 6,62; | 6,50; | 6,41; | 6,05; | 6,75; | 6,45; | 6,35; | 6,62; |

se cere:

- a) să se construiască seria de distribuție după variante;
- b) să se determine indicatorii seriei.

*Rezolvare:*

- a) Seria de distribuție este:

|       |       |      |       |      |       |       |      |      |          |
|-------|-------|------|-------|------|-------|-------|------|------|----------|
| $x_i$ | 6,05  | 6,35 | 6,41  | 6,45 | 6,50  | 6,62  | 6,75 | 6,80 | $\Sigma$ |
| $f_i$ | 3     | 4    | 5     | 6    | 9     | 5     | 6    | 2    | 40       |
| $p_i$ | 0,075 | 0,1  | 0,125 | 0,15 | 0,225 | 0,125 | 0,15 | 0,05 | 1,00     |

- b) Determinăm mai întâi indicatorii tendinței centrale.

**Media.** Fiind o serie de distribuție, calculăm media aritmetică ponderată:

$$\bar{x} = \frac{\sum_{i=1}^8 x_i f_i}{\sum_{i=1}^8 f_i} = \frac{6,05 \cdot 3 + 6,35 \cdot 4 + 6,41 \cdot 5 + 6,45 \cdot 6 + 6,50 \cdot 9 + 6,62 \cdot 5 + 6,75 \cdot 6 + 6,80 \cdot 2}{3 + 4 + 5 + 6 + 9 + 5 + 6 + 2} = 6,50$$

**Mediana.** Fiind o serie de distribuție alcătuită după variante ale caracteristicii de grupare și având un număr par de termeni, mediana va fi dată de media aritmetică a celor doi termeni centrali din seria ordonată crescător sau descrescător, adică:

$$Me = \frac{x_{20} + x_{21}}{2} = \frac{6,50 + 6,50}{2} = 6,50$$

*Observație: mediana fiind egală cu media, rezultă că ele au același grad de semnificație.*

Urmează să calculăm acum indicatorii variației.

**Abateră varianțelor caracteristicii de la media lor.**

- **Abateră absolută:** este dată de șirul:

$$-0,45; -0,15; -0,09; -0,05; 0; 0,12; 0,25; 0,30$$

- **Abateră relativă:** este dată de șirul:

-6,92%; -2,31%; -1,38%; -0,77%; 0%, 1,85%; 3,85%; 4,62%

Analizând cele două șiruri, se observă că variantele caracteristicii variază de la media lor într-o plajă de la -0,45 la 0,30 în cifre absolute, respectiv de la -6,92 la 4,62 în procente.

**Abaterea medie lineară.** Se determină cu relația:

$$\begin{aligned}\bar{d} &= \frac{\sum_{i=1}^8 |x_i - \bar{x}| \cdot f_i}{\sum_{i=1}^8 f_i} = \\ &= \frac{|6,05 - 6,50| \cdot 3 + |6,35 - 6,50| \cdot 3 + \dots + |6,80 - 6,50| \cdot 2}{3 + 4 + 5 + 6 + 9 + 5 + 6 + 2} = 0,14\end{aligned}$$

Intervalul mediu de variație, determinat cu ajutorul abaterii medii lineare va fi:

$$[\bar{x} - \bar{d}; \bar{x} + \bar{d}] \Leftrightarrow [6,36; 6,64].$$

**Amplitudinea.** Este dată de:

$$A_a = x_{\max} - x_{\min} = 6,80 - 6,05 = 0,75 \text{ (amplitudinea absolută)}$$

$$A_r = \frac{x_{\max} - x_{\min}}{\bar{x}} \cdot 100 = \frac{0,75}{6,50} \cdot 100 = 11,54\% \text{ (amplitudinea relativă)}.$$

**Dispersia.**

Avem:

$$\begin{aligned}\sigma^2 &= \frac{\sum_{i=1}^8 (x_i - \bar{x})^2 \cdot f_i}{\sum_{i=1}^8 f_i} = \\ &= \frac{(6,05 - 6,50)^2 \cdot 3 + (6,35 - 6,50)^2 \cdot 3 + \dots + (6,80 - 6,50)^2 \cdot 2}{3 + 4 + 5 + 6 + 9 + 5 + 6 + 2} = \\ &= \frac{1,38}{40} = 0,0345\end{aligned}$$

### ***Abaterea medie pătratică.***

$$\sigma = \sqrt{\sigma^2} = \sqrt{0,0345} = 0,1857$$

Intervalul mediu de variație, determinat cu ajutorul abaterii medii pătratice va fi:

$$[\bar{x} - \sigma; \bar{x} + \sigma] \Leftrightarrow [6,31; 6,69].$$

*Observație: deoarece întotdeauna  $\sigma > \bar{d}$ , intervalul mediu de variație determinat cu ajutorul abaterii medii pătratice va fi mai larg decât cel determinat cu ajutorul abaterii medii lineare. În cazul nostru:*

$$[\bar{x} - \bar{d}; \bar{x} + \bar{d}] \subset [\bar{x} - \sigma; \bar{x} + \sigma] \Leftrightarrow [6,36; 6,64] \subset [6,31; 6,69]$$

### ***Coefficientul de variație.***

$$v = \frac{\sigma}{\bar{x}} \cdot 100 = \frac{0,1857}{6,50} \cdot 100 = 2,86\% \text{ (adică o populație omogenă).}$$

2. Se consideră următoarea serie de distribuție:

|       |             |             |             |             |             |             |             |
|-------|-------------|-------------|-------------|-------------|-------------|-------------|-------------|
| $x_i$ | [4,07;4,17) | [4,17;4,27) | [4,27;4,37) | [4,37;4,47) | [4,47;4,57) | [4,57;4,67) | [4,67;4,77) |
| $f_i$ | 4           | 6           | 12          | 6           | 9           | 8           | 5           |

Se cere să se determine indicatorii acestei serii.

### ***Rezolvare:***

Fiind o serie de distribuție alcătuită după intervale de variație, pentru determinarea indicatorilor, cu excepția medianei și a dominantei, se pot folosi formulele de calcul direct, considerând drept reprezentant al fiecărui interval centrul acestuia (aceasta datorită presupunerii că în cadrul fiecărui interval, unitățile statistice sunt uniform repartizate).

Vom utiliza însă, pentru determinarea mediei și a dispersiei, procedeul de calcul simplificat. Astfel:

- pentru **medie**:

$$\bar{x} = \frac{\sum \frac{x_i - a}{k} \cdot f_i}{\sum f_i} \cdot k + a$$



- pentru **dispersie**:

$$\sigma^2 = \frac{\sum \left( \frac{x_i - a}{k} \right)^2 f_i}{\sum f_i} \cdot k^2 - (\bar{x} - a)^2$$

unde:

$a$  – varianta caracteristicii cu frecvența cea mai mare;

$k$  – mărimea intervalului de variație;

După stabilirea poziției lui  $a$  în cadrul seriei de distribuție, pentru rapoartele  $\frac{x_i - a}{k}$  se vor trece automat valorile 0 în dreptul poziției lui  $a$ , 1, 2,

3,... sub  $a$ , respectiv -1, -2, -3,... deasupra.

În cazul nostru  $a = 4,32$ ,  $k = 0,1$ .

Întocmim următorul tabel:

| Intervalul  | $f_i$ | $x_i$ | $\frac{x_i - a}{k}$ | $\frac{x_i - a}{k} \cdot f_i$ | $\left( \frac{x_i - a}{k} \right)^2$ | $\left( \frac{x_i - a}{k} \right)^2 \cdot f_i$ |
|-------------|-------|-------|---------------------|-------------------------------|--------------------------------------|------------------------------------------------|
| [4,07;4,17) | 4     | 4,12  | -2                  | -8                            | 4                                    | 16                                             |
| [4,17;4,27) | 6     | 4,22  | -1                  | -6                            | 1                                    | 6                                              |
| [4,27;4,37) | 12    | 4,32  | 0                   | 0                             | 0                                    | 0                                              |
| [4,37;4,47) | 6     | 4,42  | 1                   | 6                             | 1                                    | 6                                              |
| [4,47;4,57) | 9     | 4,52  | 2                   | 18                            | 4                                    | 36                                             |
| [4,57;4,67) | 8     | 4,62  | 3                   | 24                            | 9                                    | 72                                             |
| [4,67;4,77) | 5     | 4,72  | 4                   | 20                            | 16                                   | 80                                             |
| Total       | 50    | *     | *                   | 54                            | *                                    | 216                                            |

$$\bar{x} = \frac{54}{50} \cdot 0,1 + 4,32 = 0,108 + 4,32 = 4,428$$

$$\sigma^2 = \frac{216}{50} \cdot 0,1^2 - (4,428 - 4,32)^2 = 0,0432 - 0,011664 = 0,031536$$

Pentru calculul **medianei** se utilizează relația:

$$Me = L_i + \left( \frac{\sum f_i}{2} - S_n \right) \cdot \frac{k}{f_{Me}}$$

unde:

$L_i$  = limita inferioară a intervalului în care se plasează mediana;

$S_n$  = suma frecvențelor intervalelor care preced intervalul median;

$f_{Me}$  = frecvența intervalului în care se plasează mediana;

Această relație are la bază ipoteza că, în intervalul de variație, unitățile statistice sunt uniform distribuite. În cazul nostru:

$$Me = 4,37 + (25 - 22) \cdot \frac{0,1}{6} = 4,42 .$$

3. Variația temperaturii de topire a apei cu presiunea, în faza „Gheața I” este dată conform tabelului 1 de mai jos [10].

- Să se găsească temperatura medie de topire;
- Să se determine mediana și abaterea medie lineară a valorilor presiunii.

| Faza solidă<br>Gheață I | P, atm | t, °C | $\Delta V^t, cm^3/mol$ |
|-------------------------|--------|-------|------------------------|
|                         | 1      | -0.0  | -1.62                  |
|                         | 610    | -5.0  | -1.83                  |
|                         | 1130   | -10.0 | -2.02                  |
|                         | 1590   | -15.0 | -2.195                 |
|                         | 1970   | -20.0 | -2.365                 |

Tabelul 1.(  $\Delta V^t$  este volumul de topire)

- Un calcul imediat ne dă temperatura medie ca fiind

$$\bar{t} = - \frac{0.0 + 5.0 + 10.0 + 15.0 + 20.0}{5} = -10^0 C$$

- Este vorba de o serie alcătuită după variante ale caracteristicii de grupare – temperatura în acest caz – cu un număr impar de variante, deci mediana va ocupa locul central în seria de date; așadar avem:

$$Me = 1130 atm$$

În continuare aplicăm formula (3.13) pentru abaterea medie lineară (n=5) și obținem:

$$\bar{d} = \frac{(1 + 10) + (610 + 10) + (1130 + 10) + (1590 + 10) + (1970 + 10)}{5} = 1070.2$$

### 3.4. Probleme propuse

1. Fiind dat următorul șir de valori:

4 5 5 6 7 5 8 6 5 7 4 8 7 5 8 6 7 5 4 5  
6 4 7 8 4 8 6 8 4 8 6 7 5 7 5 8 4 5 7 6

se cere:

- să se construiască seria de distribuție după variante;
- să se determine indicatorii seriei.

2. Se consideră următoarea serie de distribuție:

|       |             |             |             |             |             |             |             |
|-------|-------------|-------------|-------------|-------------|-------------|-------------|-------------|
| $x_i$ | [4,05;4,15) | [4,15;4,25) | [4,25;4,35) | [4,35;4,45) | [4,45;4,55) | [4,55;4,65) | [4,65;4,75) |
| $f_i$ | 4           | 6           | 12          | 10          | 6           | 7           | 5           |

Să se determine indicatorii seriei.

3. Variația temperaturii de topire a apei cu presiunea, în faza „Gheața VI” este dată conform tabelului 3.2 de mai jos [10]:

| Faza solidă<br>Gheață VI | P, atm | t, °C | $\Delta V^t, cm^3/mol$ |
|--------------------------|--------|-------|------------------------|
|                          | 6360   | 0.0   | 1.65                   |
|                          | 7000   | 5.0   | 1.59                   |
|                          | 7640   | 10.0  | 1.52                   |
|                          | 8310   | 15.0  | 1.435                  |
|                          | 9000   | 20.0  | 1.355                  |
|                          | 10590  | 30.0  | 1.195                  |
|                          | 12319  | 40.0  | 1.065                  |
|                          | 15000  | 52.5  | 0.915                  |
|                          | 18000  | 66.0  | 0.764                  |
|                          | 20000  | 73.8  | 0.677                  |
|                          | 22400  | 81.6  | 0.595                  |

Tabelul 3.2.(  $\Delta V^t$  este volumul de topire)

- Să se găsească temperatura medie de topire;
- Să se determine mediana și abaterea medie lineară a valorilor presiunii.

4. Căldura specifică a soluțiilor apoase de acid azotic și acid sulfuric, la  $P=1atm$ , sunt date în tabelul 3.3 de mai jos [10]

| Acid<br>(%m) | $c_p$                        |                                         |
|--------------|------------------------------|-----------------------------------------|
|              | HNO <sub>3</sub> (t=21.07°C) | H <sub>2</sub> SO <sub>4</sub> (t=20°C) |
|              | J/(gK)                       | J/(gK)                                  |
| 1            | 4.14                         | 4.14                                    |
| 5            | 3.93                         | 3.98                                    |
| 10           | 3.72                         | 3.78                                    |
| 15           | 3.52                         | 3.60                                    |
| 20           | 3.35                         | 3.43                                    |
| 25           | 3.26                         | 3.26                                    |
| 30           | 3.18                         | 3.10                                    |
| 35           | 3.10                         | 2.95                                    |
| 40           | 3.01                         | 2.80                                    |
| 45           | 2.93                         | 2.665                                   |
| 50           | 2.85                         | 2.53                                    |
| 55           | 2.76                         | 2.40                                    |
| 60           | 2.68                         | 2.28                                    |
| 65           | 2.59                         | 2.16                                    |
| 70           | 2.47                         | 2.048                                   |
| 75           | 2.39                         | 1.937                                   |
| 80           | 2.26                         | 1.829                                   |
| 85           | 2.18                         | 1.723                                   |
| 90           | 2.05                         | 1.619                                   |
| 95           | 1.93                         | 1.517                                   |
| 100          | 1.76                         | 1.415                                   |

Tabelul 3.3.

Să se determine indicatorii celor două serii de date.

## TEMA 4. CORELAȚIA DATELOR ÎN ANALIZA LEGĂTURILOR DINTRE FENOMENE

### 4.1. Introducere

Etimologic „**corelația**” își are rădăcina în cuvântul latinesc **correlatio** = relație cu...; cuvântul **corelație** are – în esență – și în limba română același înțeles, exprimând relația, legătura reciprocă dintre fenomene.

Este cunoscut faptul că variabilitatea fenomenelor social-economice și industriale este, în majoritatea cazurilor, determinată de acțiunea simultană a mai multor factori; o parte dintre acești factori favorizează evoluția unui fenomen, alții o frânează sau acționează chiar în sens invers.

Sensurile și intensitățile diferiților factori se schimbă în condiții de timp și spațiu, astfel că evoluția fenomenelor dependente înregistrează și ea tendințe diferite față de cele anterioare.

Raporturile de cauzalitate dintre fenomenele social-economice și industriale pot fi cuantificate și analizate cu ajutorul corelației. Informațiile obținute sunt deosebit de utile, mai ales pentru faptul că, metodele specifice pe care statistica le pune la dispoziția cercetătorului, oferă posibilitatea cunoașterii, în principal, a următoarelor aspecte:

- ◆ existența raporturilor de cauzalitate dintre fenomene;
- ◆ contribuția fiecărui factor la variabilitatea globală a fenomenelor efect;
- ◆ intensitatea legăturilor cauzale dintre fenomenele și procesele social-economice;
- ◆ tendințele evolutive ale corelației dintre fenomene.

### 4.2. Corelația – noțiuni, tipuri

*Corelația este expresia sintetică a intensității legăturilor cauzale dintre fenomene.*

Cuplul corelativ poate cuprinde două sau mai multe variabile, din care una este variabila **efect**, cunoscută sub numele de variabilă **rezultativă**, simbolizată în general cu  $Y$ , iar celelalte sunt variabile **cauză**, cunoscute sub numele de variabile **factoriale** – fiind simbolizate cu  $X_1, X_2, X_3, \dots$

Se deosebesc mai multe tipuri de corelație:

a) După numărul de variabile din cuplul corelativ, se disting:

a<sub>1</sub>) **Corelație simplă**. În cadrul său cuplul corelativ cuprinde două variabile, din care una este variabila rezultativă  $Y$  și cealaltă variabila factorială  $X$ .

a<sub>2</sub>) **Corelație multiplă**. Cuplul corelativ cuprinde trei sau mai multe variabile, dintre care una este variabila rezultativă  $Y$  și celelalte sunt variabilele factoriale  $X_1, X_2, X_3, \dots$

Dat fiind faptul că, în general, variabilitatea unui fenomen social-economic este determinată de acțiunea simultană a mai multor factori, corelația simplă apare mai mult ca o corelație parțială, determinată în condițiile considerării celorlalte influențe din afara cuplului corelativ al acestui tip de corelație ca fiind constante.

b) După sensul legăturilor factoriale, se deosebesc:

b<sub>1</sub>) **Corelație directă**. În cadrul său variabilitatea rezultativei  $Y$  se produce în același sens cu variabilitatea factorialei  $X$  (sau factorialelor  $X_1, X_2, X_3, \dots$ ).

b<sub>2</sub>) **Corelație inversă**. În cadrul său variabilitatea rezultativei  $Y$  se produce în sens invers cu variabilitatea factorilor determinanți.

c) După forma legăturilor cauzale, se disting:

c<sub>1</sub>) **Corelație lineară**. Constă în aceea că variabila rezultativă  $Y$  înregistrează o tendință lineară ca urmare a factorilor determinanți.

c<sub>2</sub>) **Corelația nelineară**. În acest caz, variabilitatea rezultativei  $Y$  se integrează într-o tendință de tip nelinear (parabolic, exponențial, logaritm etc.).

Cunoașterea formei corelațiilor prezintă un interes deosebit în estimarea tendințelor evolutive ale fenomenelor efect în strânsă legătură cu variabilitatea factorilor determinanți. Evident, o tendință lineară a rezultativei  $Y$ , sugerează faptul că nivelurile acestei variabile cresc sau descresc aproximativ în progresie aritmetică; tendința nelineară, evidențiază modificarea acestor niveluri în progresie geometrică, exponențială etc. Aceste informații sunt deosebit de utile în calculele de previziune precum și în modelarea tendințelor evolutive.

### 4.3. Corelația simplă

În cele ce urmează ne vom limita la metodologia **corelației simple**, și vom aborda aplicarea funcțiilor statistico-matematice în studiul regresiei simple, precum și metodologia cuantificării intensității corelației simple.

În cadrul analizei corelației se au în vedere, în principal, două aspecte esențiale:

a) *Regresia* – cu ajutorul căreia, prin folosirea și interpretarea coeficienților de regresie ai diferitelor funcții statistico-matematice, se determină contribuțiile factorilor determinanți la variabilitatea fenomenelor efect;

b) *Intensitatea corelației* – sintetizată cu ajutorul coeficienților de corelație.

Pentru corelația simplă, primul aspect poate fi evidențiat cu ajutorul funcțiilor: lineară – pentru legăturile cauzale de tip linear; parabolică, hiperbolică, exponențială, logaritmică, semilogaritmică, logistică etc. – pentru legăturile cauzale de tip nelinear.

Problema care se pune constă în determinarea unei legături funcționale între variabila factorială  $X$  și cea rezultativă  $Y$ :

$$Y = f(a_1, a_2, \dots, a_k, X)$$

care să satisfacă:  $y_i = f(a_1, a_2, \dots, a_k, x_i)$ ,  $i = \overline{1, n}$

unde  $x_1, x_2, \dots, x_n, y_1, y_2, \dots, y_n$  sunt valorile cunoscute ale factorialei, respectiv ale rezultativei (valori empirice), iar  $a_1, a_2, \dots, a_k$  sunt parametri care trebuie determinați.

Determinarea parametrilor se face cu ajutorul „metodei celor mai mici pătrate”, al cărui principiu constă în minimizarea sumei pătratelor diferențelor dintre valorile empirice și cele teoretice.

Deci:

$$S = \sum_{i=1}^n (y_i - f(a_1, a_2, \dots, a_k, x_i))^2 = \min.$$

Minimul acestei expresii se obține pentru acele valori ale parametrilor  $a_1, a_2, \dots, a_k$ , soluții ale sistemului de ecuații normale  $\frac{\partial S}{\partial a_j} = 0$ ,  $j = \overline{1, k}$ , sistem care poate fi rezolvat printr-una dintre metodele de rezolvare ale sistemelor liniare.

Pentru a avea o imagine sugestivă asupra câtorva dintre cele mai utilizate funcții propuse, prezentăm unele observații asupra comportării acestora, sistemele de ecuații normale precum și reprezentarea grafică a acestor funcții în unele exemple concrete.

♦ O observație general valabilă este aceea că, în cazurile în care apar, termenii liberi sintetizează nivelul variabilei rezultative  $Y$  în absența influenței factorialei  $X$ ;

♦ funcția liniară  $y = a + bx$  și cea parabolică  $y = a + bx + cx^2$  sunt cel mai des întâlnite și cele mai cunoscute; prima este strict crescătoare pentru  $b > 0$  și strict descrescătoare pentru  $b < 0$ ; cea de-a doua, are un punct de extrem de coordonate  $(-\frac{b}{2c}; -\frac{\Delta}{4c})$ , acest punct fiind de minim dacă  $c > 0$  și respectiv de maxim dacă  $c < 0$ , iar graficul funcției este simetric în raport cu dreapta  $x = -\frac{b}{2c}$ ; sistemele de ecuații normale sunt:

- pentru funcția liniară:

|       |                                                                                    |
|-------|------------------------------------------------------------------------------------|
| (4.1) | $\begin{cases} na + b\sum x = \sum y \\ a\sum x + b\sum x^2 = \sum xy \end{cases}$ |
|-------|------------------------------------------------------------------------------------|

- pentru funcția parabolică:

|       |                                                                                                                                                             |
|-------|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| (4.2) | $\begin{cases} na + b\sum x + c\sum x^2 = \sum y \\ a\sum x + b\sum x^2 + c\sum x^3 = \sum xy \\ a\sum x^2 + b\sum x^3 + c\sum x^4 = \sum x^2y \end{cases}$ |
|-------|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|

În figura 4.1 de mai jos sunt prezentate graficele pentru câteva funcții liniare și respectiv parabolice.

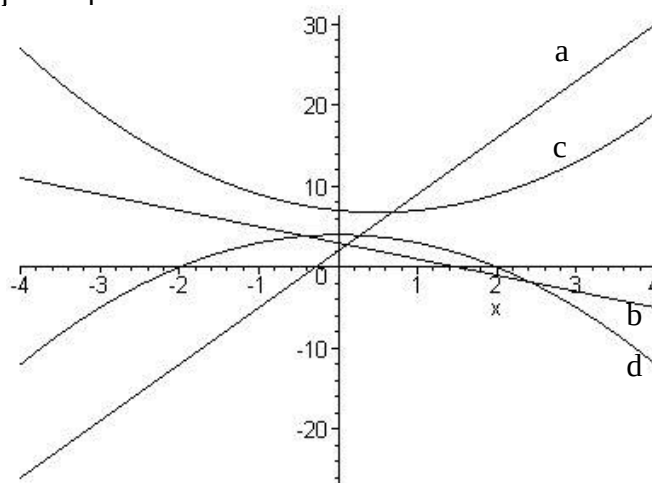


Figura 4.1. a)  $y = 2 + 7x$ ; b)  $y = 3 - 2x$ ; c)  $y = 7 - x + x^2$ ; d)  $y = 4 - x^2$



♦ funcția  $y = \frac{1}{a + bx}$  se comportă invers decât funcția liniară, în sensul că este strict crescătoare dacă  $b < 0$  și strict descrescătoare dacă  $b > 0$ ; în acest caz nivelul rezultativei  $y$  în afara influenței factorialei  $x$  este sintetizat de inversul lui  $a$ ; același lucru se poate spune și despre funcția  $y = a + \frac{b}{x}$ , adică este strict crescătoare pentru  $b < 0$  și strict descrescătoare pentru  $b > 0$ , dar nivelul lui  $y$  în afara influenței lui  $x$  este dat în acest caz de  $a$ ; sistemele de ecuații normale sunt:

- pentru funcția  $y = \frac{1}{a + bx}$ :

|       |                                                                                                                 |
|-------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| (4.3) | $\begin{cases} na + b\sum x = \sum \frac{1}{y} \\ a\sum x + b\sum x^2 = \sum \frac{x}{y} \end{cases}, y \neq 0$ |
|-------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------|

- pentru funcția  $y = a + \frac{b}{x}$ :

|       |                                                                                                                                     |
|-------|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| (4.4) | $\begin{cases} na + b\sum \frac{1}{x} = \sum y \\ a\sum \frac{1}{x} + b\sum \frac{1}{x^2} = \sum \frac{y}{x} \end{cases}, x \neq 0$ |
|-------|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|

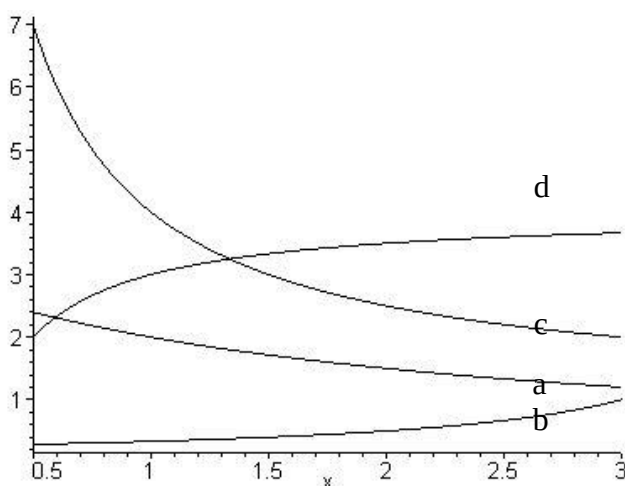


Figura 4.2.

a)  $y = 6/(2+x)$ ; b)  $y = 1/(4-x)$ ; c)  $y = 1+3/x$ ; d)  $y = 1+3x/(x+1)$ ;

**Observație 4.1:**

a) În graficele de mai sus au fost considerate valori pozitive ale lui  $x$ ; la exemplul b) funcția are asimptotă verticală în  $x=4$ , iar la exemplul c) există o asimptotă verticală în  $x=0$ .

b) În formulele (4.1)-(4.4) de mai sus, sumarea o facem implicit după indicele  $i$ . Pentru simplificarea scrierii acesta a fost omis.

c) Alte tipuri de funcții pentru analiza legăturii dintre variabila cauzală și cea rezultativă, pot fi găsite în [5]

**Intensitatea corelației simple lineare** este dată de coeficientul de corelație lineară al lui Pearson:

|       |                                                      |
|-------|------------------------------------------------------|
| (4.5) | $r_{XY} = \frac{\text{cov}(X,Y)}{\sigma_X \sigma_Y}$ |
|-------|------------------------------------------------------|

Ținând cont de relația pentru indicele de covarianță:

$$\text{cov}(X,Y) = n \sum x_i y_i - \left( \sum x_i \right) \left( \sum y_i \right)$$

și înlocuind, obținem:

|       |                                                                                                                                                                                                                  |
|-------|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| (4.6) | $r_{XY} = \frac{n \sum x_i y_i - \left( \sum x_i \right) \left( \sum y_i \right)}{\sqrt{\left[ n \sum x_i^2 - \left( \sum x_i \right)^2 \right] \cdot \left[ n \sum y_i^2 - \left( \sum y_i \right)^2 \right]}}$ |
|-------|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|

iar în cazul în care valorile sunt ponderate cu frecvențele  $f_x, f_y, f_{xy}$ :

$$r_{XY} = \frac{\sum f \cdot \sum xy f_{xy} - \left( \sum x f_x \right) \cdot \left( \sum y f_y \right)}{\sqrt{\left[ \sum f \cdot \sum x^2 f_x - \left( \sum x f_x \right)^2 \right] \cdot \left[ \sum f \cdot \sum y^2 f_y - \left( \sum y f_y \right)^2 \right]}}$$

$f_{xy}$  măsoară în relația de mai sus, „de câte ori variabila X ia valoarea  $x$  și în același timp variabila Y ia valoarea  $y$ ”.

În practică se consideră că dacă:

- ◆  $0 \leq |r_{XY}| < 0,2$  între cele două variabile nu există nici-o legătură;
- ◆  $0,2 \leq |r_{XY}| < 0,5$  există o legătură slabă;
- ◆  $0,5 \leq |r_{XY}| < 0,75$  există o legătură de intensitate medie;

- ◆  $0,75 \leq |r_{XY}| < 0,95$  există o legătură puternică;
- ◆  $0,95 \leq |r_{XY}| \leq 1$  există o legătură relativ deterministă.

În cazul regresiei nelineare (parabolică, hiperbolică, exponențială, logaritmică etc.) pentru determinarea intensității corelației se folosește raportul de corelație, care are la baza metodologia de calcul descompunerea dispersiei generale în dispersii factoriale. Astfel:

|       |                                                                                    |
|-------|------------------------------------------------------------------------------------|
| (4.7) | $\sigma_y^2 = \frac{\sum (y_i - \bar{y})^2}{n} \quad (\text{dispersia generală});$ |
|-------|------------------------------------------------------------------------------------|

Dacă seriei de date  $X = \{x_1, x_2, \dots, x_n\}$  i se asociază seria de date teoretice

$Y_X = \{y_{x_1}, y_{x_2}, \dots, y_{x_n}\}$  atunci se pot calcula

|       |                                                                                                                                                                                                  |
|-------|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| (4.8) | $\sigma_{y_x}^2 = \frac{\sum (y_{x_i} - \bar{y})^2}{n} \quad (\text{dispersia valorilor teoretice față de media lor sau dispersia variației explicate; am ținut cont că } \bar{y}_x = \bar{y});$ |
|-------|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|

|       |                                                                                                                                                                                        |
|-------|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| (4.9) | $\sigma_{yy_x}^2 = \frac{\sum (y_i - y_{x_i})^2}{n} \quad (\text{dispersia valorilor teoretice față de cele empirice, sau dispersia variației neexplicate, sau dispersia reziduală}).$ |
|-------|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|

Avem:

|        |                                                                                                  |
|--------|--------------------------------------------------------------------------------------------------|
| (4.10) | $\sigma_y^2 = \sigma_{y_x}^2 + \sigma_{yy_x}^2 \quad (\text{regula de adunare a dispersiilor}).$ |
|--------|--------------------------------------------------------------------------------------------------|

Împărțind prin  $\sigma_y^2$ , obținem:

$$1 = \frac{\sigma_{y_x}^2}{\sigma_y^2} + \frac{\sigma_{yy_x}^2}{\sigma_y^2}; \quad R^2 = \frac{\sigma_{y_x}^2}{\sigma_y^2}, \text{ sau}$$

|        |                                                                                                |
|--------|------------------------------------------------------------------------------------------------|
| (4.11) | $R^2 = 1 - \frac{\sigma_{yy_x}^2}{\sigma_y^2} \quad R^2 = \text{coeficientul de determinație}$ |
|--------|------------------------------------------------------------------------------------------------|

Din coeficientul de determinație obținem raportul de corelație:

|        |                                                                                                                 |
|--------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| (4.12) | $R = \sqrt{R^2} = \sqrt{1 - \frac{\sigma_{yy_x}^2}{\sigma_y^2}} \quad \text{cu proprietatea: } 0 \leq R \leq 1$ |
|--------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------|

#### 4.4. Probleme rezolvate

1. Cunoscând următoarele date referitoare la două serii de valori:

|          |      |      |     |     |     |     |     |     |     |     |
|----------|------|------|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|
| <i>X</i> | 1,5  | 1,8  | 2,5 | 3,2 | 3,4 | 4,0 | 4,5 | 5,2 | 5,7 | 6,3 |
| <i>Y</i> | 13,0 | 11,3 | 9,0 | 7,7 | 7,4 | 6,7 | 6,3 | 5,9 | 5,6 | 5,4 |

se cere:

- a) să se determine natura legăturii dintre cele două variabile, utilizând:
  - funcția lineară;
  - funcția parabolică;
  - funcția hiperbolică;
- b) pe baza principiului abaterii reziduale minime, să se determine care din cele trei funcții aproximează cel mai bine legătura dintre variabile;
- c) să se determine intensitatea acestei legături.

*Rezolvare:*

a) Pentru cazul unei legături liniare  $Y = a + bX$ , sistemul de ecuații normale pentru estimarea parametrilor modelului este:

$$\begin{cases} 10 \cdot a + 38,1 \cdot b = 78,3 \\ 38,1 \cdot a + 169,01 \cdot b = 263,91 \end{cases}$$

obținut prin înlocuirile:

$$n = 10, \sum x_i = 38,1, \sum y_i = 78,3, \sum x_i^2 = 169,01, \sum x_i y_i = 263,91.$$

În urma calculelor, se obțin parametrii:  $a = 13,33, b = -1,44$ , iar ecuația de regresie are forma:

$$Y = 13,33 - 1,44X.$$

Valorile ajustate se obțin înlocuind valorile lui  $X$  cu fiecare dintre valorile seriei inițiale, astfel:

$$Y_1 = 13,33 - 1,44 \cdot 1,5 = 11,17$$

$$Y_2 = 13,33 - 1,44 \cdot 1,8 = 10,74$$

...

obținându-se tabelul următor:

| $X$                 | 1,5   | 1,8   | 2,5  | 3,2  | 3,4  | 4,0  | 4,5  | 5,2  | 5,7  | 6,3  |
|---------------------|-------|-------|------|------|------|------|------|------|------|------|
| $Y = 13,33 - 1,44X$ | 11,17 | 10,74 | 9,73 | 8,72 | 8,43 | 7,57 | 6,85 | 5,84 | 5,12 | 4,26 |

Calculând abaterea reziduală pentru acest caz, se obține:

$$\xi_1 = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^{10} (y_i - Y_i)^2}{10}} = \sqrt{\frac{8,89}{10}} = 0,94 .$$

Pentru cazul unei legături parabolice  $Y = a + bX + cX^2$ , sistemul de ecuații normale pentru estimarea parametrilor modelului este:

$$\begin{cases} 10 \cdot a + 38,1 \cdot b + 169,01 \cdot c = 78,3 \\ 38,1 \cdot a + 169,01 \cdot b + 827,88 \cdot c = 263,91 \\ 169,01 \cdot a + 827,88 \cdot b + 4321,23 \cdot c = 1077,09 \end{cases}$$

obținut prin înlocuirile:

$$n = 10, \sum x_i = 38,1, \sum y_i = 78,3, \sum x_i^2 = 169,01, \sum x_i y_i = 263,91$$

$$\sum x_i^3 = 827,88, \sum x_i^4 = 4321,23, \sum x_i^2 y_i = 1077,09$$

În urma calculelor, se obțin parametrii:  $a = 18,53$ ,  $b = -4,66$ ,  $c = 0,42$ , iar ecuația de regresie are forma:

$$Y = 18,53 - 4,66X + 0,42X^2$$

Valorile teoretice obținute sunt prezentate în tabelul următor:

| $X$ | 1,5   | 1,8   | 2,5  | 3,2  | 3,4  | 4,0  | 4,5  | 5,2  | 5,7  | 6,3  |
|-----|-------|-------|------|------|------|------|------|------|------|------|
| $Y$ | 12,48 | 11,50 | 9,49 | 7,89 | 7,51 | 6,57 | 6,01 | 5,58 | 5,52 | 5,73 |

Calculând abaterea reziduală pentru acest caz, se obține:

$$\xi_2 = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^{10} (y_i - Y_i)^2}{10}} = \sqrt{\frac{0,92}{10}} = 0,30.$$

Pentru cazul unei legături hiperbolice  $Y = a + \frac{b}{X}$ , sistemul de ecuații normale pentru estimarea parametrilor modelului este:

$$\begin{cases} 10 \cdot a + 3,23 \cdot b = 78,3 \\ 3,23 \cdot a + 1,30 \cdot b = 29,18 \end{cases}$$

obținut prin înlocuirile:

$$n = 10, \sum \frac{1}{x_i} = 3,23, \sum y_i = 78,3, \sum \frac{1}{x_i^2} = 1,30, \sum \frac{y_i}{x_i} = 29,18$$

În urma calculelor, se obțin parametrii:  $a = 2,99, b = 15,00$ , iar ecuația de regresie are forma:

$$Y = 2,99 + \frac{15}{X}$$

Valorile teoretice obținute sunt prezentate în tabelul următor:

|   |       |       |      |      |      |      |      |      |      |      |
|---|-------|-------|------|------|------|------|------|------|------|------|
| X | 1,5   | 1,8   | 2,5  | 3,2  | 3,4  | 4,0  | 4,5  | 5,2  | 5,7  | 6,3  |
| Y | 12,99 | 11,32 | 8,99 | 7,68 | 7,40 | 6,74 | 6,32 | 5,87 | 5,62 | 5,37 |

Calculând abaterea reziduală pentru acest caz, se obține:

$$\xi_3 = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^{10} (y_i - Y_i)^2}{10}} = \sqrt{\frac{0,0052}{10}} = 0,022.$$

b) Pe baza principiului abaterii reziduale minime, deducem că dintre cele trei funcții propuse, funcția hiperbolică aproximează cel mai bine legătura dintre cele două variabile.

c) Pentru determinarea intensității legăturii, vom folosi raportul de corelație, în care, valorile teoretice sunt determinate cu ajutorul funcției hiperbolice. Avem:

$$R = \sqrt{1 - \frac{\sum (y_i - Y_i)^2}{\sum (y_i - \bar{y})^2}} = \sqrt{1 - \frac{0,0052}{23,849}} = 0,99$$

fapt care evidențiază o legătură relativ deterministă între cele două variabile.

*Observație. Exemplul abordat în problema anterioară are un caracter didactic, menit fiind spre a-l obișnui pe cititor cu aplicarea metodelor de determinare a formelor analitice ale legăturilor dintre fenomene. Credem că alegerea legăturii funcționale dintre cele două variabile depinde, într-o foarte mare măsură, de experiența și intuiția cercetătorului. Subliniem, totuși, importanța criteriului „abaterii reziduale minime” în alegerea celei mai potrivite expresii a legăturii, în momentul în care există dubii asupra naturii acesteia.[5]*

2. Fie  $X, Y$  două serii de valori:

|     |     |     |     |     |     |     |     |     |
|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|
| $X$ | 2,1 | 1,3 | 3,4 | 5,2 | 4,7 | 2,6 | 3,8 | 1,9 |
| $Y$ | 1,8 | 3,7 | 2,6 | 4,5 | 5,3 | 2,2 | 2,8 | 3,4 |

Să se determine coeficientul de corelație Pearson.

*Rezolvare:*

Coeficientul de corelație Pearson se calculează după formula:

$$r_{XY} = \frac{n \cdot \sum xy - \sum x \sum y}{\sqrt{(n \sum x^2 - (\sum x)^2) \cdot (n \sum y^2 - (\sum y)^2)}}$$

Avem:

$$\sum x = 25; \sum y = 26,3; \sum xy = 88,56; \sum x^2 = 91,6; \sum y^2 = 96,27$$

și, înlocuind în formulă, obținem:

$$r_{XY} = \frac{8 \cdot 88,56 - 25 \cdot 26,3}{\sqrt{(8 \cdot 91,6 - 25^2) \cdot (8 \cdot 96,27 - 26,3^2)}} =$$

$$= \frac{708,48 - 657,5}{\sqrt{107,8 \cdot 78,47}} = \frac{50,98}{91,97} = 0,55$$

3. În tabelul 4.1. de mai jos sunt prezentate comparativ valorile experimentale și cele calculate (cu formula  $0.51 \cdot \sqrt{J}$ ) pentru factorul mediu de activitate a NaCl în soluție apoasă la 25°C.

Amintim că atât  $\sqrt{J}$  cât și  $-\lg f_{\pm}$  se calculează cu formulele de tip F(8.1)-F(8.4) ca în [10]

| C<br>mol/l | $\sqrt{J}$ | $-\lg f_{\pm}$ <i>experimental</i><br>(x <sub>i</sub> ) | $-\lg f_{\pm}$ <i>calculat</i><br>(y <sub>i</sub> ) |
|------------|------------|---------------------------------------------------------|-----------------------------------------------------|
| 0.001      | 0.0317     | 0.0150                                                  | 0.0162                                              |
| 0.005      | 0.0707     | 0.0320                                                  | 0.0355                                              |
| 0.01       | 0.1        | 0.0438                                                  | 0.0510                                              |
| 0.05       | 0.224      | 0.0846                                                  | 0.114                                               |
| 0.1        | 0.317      | 0.1018                                                  | 0.162                                               |
| 0.5        | 0.707      | 0.1611                                                  | 0.360                                               |
| 1.0        | 1.0        | 0.1805                                                  | 0.510                                               |

Tabelul 4.1.

- Să se determine natura legăturii dintre cele două variabile (experimental și calculat) utilizând funcția lineară; să se determine apoi abaterea reziduală pentru acest tip de legătură;
- Să se calculeze coeficientul de corelație Pearson și să se determine intensitatea legăturii dintre variabilele X și Y.

#### Rezolvare

a) Trebuie să găsim coeficienții a și b ai ecuației liniare de regresie, deci aplicăm formulele (4.1). În cazul nostru n=7 (căci avem șapte variante ale celor două variabile cauzală și rezultativă) și sumele sunt:



$$\sum x_i = 0.6188, \\ \sum y_i = 1.2487, \sum x_i^2 = 0.07922, \sum x_i y_i = 0.179798$$

Sistemul (3.1) este în consecință următorul:

$$\begin{cases} 7a + 0.6188b = 1.2487 \\ 0.6188a + 0.07922b = 0.179798 \end{cases}$$

Rezolvând sistemul, găsim  $a = -0.071862, b = 2.83087$ .

Astfel dreapta de regresie găsită are un aspect descrescător:  
 $\bar{Y} = -0.071862x + 2.83087$ .

Variantele  $Y_i$  ale acestora le calculăm ușor și sintetizăm toate datele într-un tabel după cum urmează:

|       |          |          |          |          |          |          |          |
|-------|----------|----------|----------|----------|----------|----------|----------|
| $x_i$ | 0.0150   | 0.0320   | 0.0438   | 0.0846   | 0.1018   | 0.1611   | 0.1805   |
| $y_i$ | 0.0162   | 0.0355   | 0.0510   | 0.114    | 0.162    | 0.360    | 0.510    |
| $Y_i$ | 2.829792 | 2.828570 | 2.827722 | 2.824790 | 2.823554 | 2.819293 | 2.817898 |

În continuare folosim datele din tabel pentru a calcula **abaterea reziduală** aplicând formula:

$$\xi = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n (y_i - Y_i)^2}{n}}$$

cu  $n=7$  în cazul nostru. După toate înlocuirile găsim  $\xi = 2.65202$

b) Pentru coeficientul de corelație Pearson, aplicăm formula (4.6). O parte din sume sunt deja calculate la pct a). Apare în plus suma  $\sum y_i^2 = 0.433061$ . Formula (4.6) ne conduce la

$$r_{XY} = \frac{1.258586 - 0.772695}{\sqrt{0.17164 \cdot 1.472227}} = 0.9665$$

*Observație.* Pe baza valorii obținute pentru coeficientul Pearson, putem trage concluzia că între cele două variabile din acest exemplu există o legătură relativ deterministă.

## 4.5. Probleme propuse

1. Cunoscând următoarele date referitoare la două serii de valori:

|   |     |     |     |     |     |     |     |     |     |     |
|---|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|
| X | 2,3 | 2,4 | 2,5 | 2,6 | 2,7 | 2,8 | 2,9 | 3,0 | 3,1 | 3,2 |
| Y | 4,5 | 4,6 | 4,7 | 4,9 | 5,0 | 5,1 | 5,2 | 5,3 | 5,4 | 5,5 |

se cere:

- să se determine natura legăturii dintre cele două variabile, utilizând funcția lineară apoi parabolică;
- pe baza principiului abaterii reziduale minime, să se determine care din cele trei funcții aproximează cel mai bine legătura dintre variabile;
- să se determine intensitatea acestei legături.

2. Fie  $X, Y$  două serii de valori:

|   |     |     |     |     |     |     |     |     |     |      |
|---|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|------|
| X | 2,1 | 3,1 | 3,5 | 3,6 | 3,8 | 4,2 | 4,6 | 4,7 | 4,9 | 5,6  |
| Y | 6,4 | 5,3 | 6,8 | 7,3 | 5,8 | 8,4 | 6,9 | 9,3 | 9,5 | 10,3 |

Să se determine coeficientul de corelație Pearson și să se determine intensitatea legăturii dintre variabile.

3. Se consideră seriile de date ca în tabelul următor

|                                      |     |     |    |     |     |     |    |     |  |  |
|--------------------------------------|-----|-----|----|-----|-----|-----|----|-----|--|--|
| Cheltuieli<br>Reclama<br>Mii lei (X) | 50  | 25  | 21 | 65  | 30  | 40  | 25 | 40  |  |  |
| Vanzari (Y)                          | 157 | 152 | 69 | 218 | 134 | 173 | 81 | 113 |  |  |

- Să se calculeze coeficientul de corelație;
- Să se determine dreapta de regresie;
- Să se prezică nivelul vânzărilor când se cheltuiesc 35 000 lei /lună.

4. Datele din tabelul 2 de mai jos prezintă comparativ valorile experimentale și cele calculate (cu formula  $2 \cdot 0.51 \cdot \sqrt{J}$ ) pentru factorul mediu de activitate a  $\text{FeCl}_2$  în soluție apoasă la  $25^\circ\text{C}$ . [10]

| C<br>mol/l | $\sqrt{J}$ | $-\lg f_{\pm} \text{ experimental}$<br>( $x_i$ ) | $-\lg f_{\pm} \text{ calculat}$<br>( $y_i$ ) |
|------------|------------|--------------------------------------------------|----------------------------------------------|
| 0.001      | 0.0548     | 0.0506                                           | 0.0558                                       |
| 0.002      | 0.0774     | 0.0655                                           | 0.0790                                       |
| 0.005      | 0.1224     | 0.0969                                           | 0.1248                                       |
| 0.01       | 0.1732     | 0.1249                                           | 0.1766                                       |
| 0.02       | 0.2449     | 0.1549                                           | 0.2498                                       |
| 0.05       | 0.3873     | 0.2076                                           | 0.3950                                       |
| 0.1        | 0.5477     | 0.2840                                           | 0.5586                                       |
| 0.5        | 1.224      | 0.3468                                           | 1.2480                                       |
| 1.0        | 1.732      | 0.2924                                           | 1.7666                                       |
| 2.0        | 2.449      | 0.1024                                           | 2.498                                        |

Tabelul 4.2.

a) Să se determine natura legăturii dintre cele două variabile considerând o funcție de tip linear și parabolic;

b) Folosind principiul abaterii reziduale minime să se stabilească care dintre tipurile de funcții aproximează cel mai bine legătura dintre variabile

5. Datele din tabelul 4.3 de mai jos prezintă vâscozitatea apei în funcție de temperatură [10]

| Temperatura ( $^{\circ}\text{C}$ ) | Vâscozitatea ( $\eta$ , CP) |
|------------------------------------|-----------------------------|
| 5                                  | 1.5188                      |
| 10                                 | 1.3077                      |
| 15                                 | 1.1404                      |
| 16                                 | 1.1111                      |
| 17                                 | 1.0828                      |
| 18                                 | 1.0559                      |
| 19                                 | 1.0299                      |
| 20                                 | 1.0050                      |
| 21                                 | 0.9810                      |
| 22                                 | 0.9579                      |

Tabelul 4.3.

Să se calculeze coeficientul lui Pearson și să se determine intensitatea corelației dintre cele două variabile.

## TEMA 5. TESTE DE CONCORDANȚĂ STATISTICĂ ÎNTRU DATELE TEORETICE ȘI CELE EXPERIMENTALE

### 5.1. Noțiuni introductive

#### 5.1.1. Noțiunea de populație statistică. Eșantion

Problemele pe care le aduce în discuție atât experimentarea fizică, cât și cea din diverse alte domenii, cu înregistrările statistice specifice, au relevat din ce în ce mai pregnant necesitatea abordării modelării din punct de vedere interdisciplinar. Concret, conceptul de probabilitate și-a făcut recent simțită prezența în tot mai multe discipline. Aparent, probabilitatea nu răspunde direct unei existențe ca atare: ea este un simbol matematic, numeric chiar, cu care întâmpinăm sau caracterizăm, direct sau indirect, evenimente aleatoare, dominate de întâmplare - se spunea de preferință în epoca ce merge de la Bernoulli la Poincaré, sau sub semnul nesiguranței - au preferat să spună B.de Finetti și L.J. Savage.

În afară de evenimente și probabilități trebuie amintit și rolul pe care l-au jucat în preocuparea probabilistă și mărimile cunoscute sub numele de variabile aleatoare asociate evenimentelor și susceptibile de probabilitate. De asemenea, și căutarea relațiilor directe între evenimente și probabilități.

Este firesc ca aceste concepte fundamentale să stea și la baza teoriei prelucrării informaționale a datelor de măsurare. Având un pronunțat caracter interdisciplinar, și aplicații directe în toate domeniile de activitate (atât tehnice, cât și socio-economice), această tehnică are ca principal obiect de studiu *analiza calitativă a rezultatelor obținute din măsurări*. Prin utilizarea unor teste consacrate, fundamentate pe un aparat statistico-matematic, se urmărește atât evaluarea calitativă a datelor obținute din măsurări, cât și eliminarea datelor afectate de unele erori grosiere.

Vom prezenta în cele ce urmează câteva noțiuni fundamentale de probabilități și statistică, necesare pentru a înțelege obiectivul prelucrării datelor de măsurare.

**Definiția 5.1. Populația sau colectivitatea statistică.** Este dată de totalitatea indivizilor (subiecților studiului) care au caracteristici comune. Ex.: totalitatea locuitorilor dintr-un teritoriu delimitat, numărul total de familii dintr-o localitate, numărul de muncitori dintr-o întreprindere etc. Deci, **populația** poate fi definită ca fiind ansamblul de unități statistice caracterizate

printr-o serie de însușiri comune; pentru persoanele dintr-o colectivitate dată aceste însușiri sunt: sexul, vârsta, culoarea ochilor, culoarea părului, profesia, ocupația, domiciliul etc.; pentru autoturisme: marca, tipul, puterea, capacitatea cilindrică, numărul de locuri etc.

**Unitățile statistice** din componența populației, pot fi:

♦ **simple** - sunt unități indivizibile; ex.: studentul, medicul, muncitorul etc.;

♦ **complexe** - sunt unități formate din mai multe unități simple; deci, acestea sunt divizibile în unitățile care le compun; ex.: familia este o unitate complexă, compusă din mai multe unități simple (persoane).

**Baza de selecție.** Atunci când dintr-o colectivitate statistică se extrage un anumit număr de unități în vederea efectuării unui sondaj statistic, acea colectivitate constituie **baza de selecție**. Volumul bazei de selecție este simbolizat, de obicei, prin  $N$  (sau  $N_0$  pentru sondajul stratificat).

**Definiția 5.2. Eșantionul.** Reprezintă numărul de unități statistice extrase din baza de selecție și supuse studiului selectiv în cadrul sondajului. Volumul eșantionului este simbolizat prin  $n$  (sau  $n_0$  pentru sondajul stratificat).

**Eroarea de reprezentativitate.** Este diferența dintre nivelurile indicatorilor sintetici folosiți în cadrul sondajului pentru analiza eșantionului și nivelurile indicatorilor similari folosiți pentru analiza bazei de selecție. [5]

Eroarea de reprezentativitate este determinată, în final, de:

- stabilirea incorectă a volumului și structurii eșantionului;
- natura și aria de întindere a erorilor de observare;
- folosirea incorectă a metodelor de extrapolare a rezultatelor sondajului în estimarea parametrilor bazei de selecție.

**Estimator.** Rolul de estimator îl au indicatorii sintetici ai sondajului, calculați pentru un eșantion oarecare: media, dispersia, coeficientul de corelație etc. Ei sunt folosiți ca bază de calcul în estimarea nivelurilor indicatorilor similari ai bazei de selecție (în estimarea parametrilor acesteia). Aceștia au fost analizați în temele precedente de statistica descriptivă.

### 5.1.2. Probabilitate

În teoria probabilităților, noțiunile de *eveniment* și *probabilitate* sunt concepte de bază. Noțiunea de eveniment se află la frontiera dintre empiric și teoretic.

Generarea sau producerea unui anumit fenomen, care poate fi repetat ori de câte ori dorim, poartă numele de **experiență**. Vom înțelege prin **probă** orice reluare a unei experiențe. Rezultatele unei experiențe poartă numele de

**evenimente**, sau, mai exact, orice rezultat posibil al unei experiențe se numește **eveniment elementar**.

Să considerăm o experiență foarte uzuală, aceea a aruncării cu zarul. În urma acestei experiențe poate să apară una dintre cele șase fețe. Să convenim să notăm cu  $A_i$  ( $i = \overline{1,6}$ ) evenimentul constând în apariția feței cu  $i$  puncte.

Este natural să considerăm realizarea evenimentului  $A_i$  sau a evenimentului  $A_j$  (apariția feței cu  $i$  puncte, sau a feței cu  $j$  puncte) tot un eveniment, pe care îl vom numi **reuniunea** celor două evenimente și îl vom nota  $A_i \cup A_j$ . Putem considera astfel:

$$A = A_{i_1} \cup A_{i_2} \cup \dots \cup A_{i_p}, 1 \leq i_1 \leq i_2 \leq \dots \leq i_p \leq 6.$$

Evenimentul  $\Omega = A_1 \cup A_2 \cup \dots \cup A_6$  care se realizează totdeauna când aruncăm zarul (în orice aruncare a zarului va apare una dintre cele șase fețe) îl vom numi **eveniment sigur**.

Să considerăm evenimentul  $A_1 \cup \dots \cup A_{i-1} \cup A_{i+1} \cup \dots \cup A_6$ . Un astfel de eveniment care se realizează atunci și numai atunci când nu se realizează evenimentul  $A_i$  îl vom numi **eveniment complementar** al lui  $A_i$  și îl vom nota cu  $\overline{CA_i}$  sau  $\overline{A_i}$ .

Evenimentul care nu se realizează în nici o probă a experienței se numește **eveniment imposibil**, îl vom nota cu  $\Phi$  și este complementarul evenimentului sigur (în contextul aruncării cu zarul ar corespunde situației în care zarul s-ar așeza pe o muchie, sau într-un colț).

Considerând două evenimente  $A_i$  și  $A_j$ , atunci realizarea atât a lui  $A_i$ , cât și a lui  $A_j$  va fi tot un eveniment pe care îl vom numi **intersecția** celor două evenimente și îl vom nota  $A_i \cap A_j$ .

Considerând două evenimente  $A$  și  $B$ , vom spune că:

♦ **evenimentul  $A$  implică evenimentul  $B$**  și vom scrie  $A \subset B$ , dacă în orice probă în care se realizează evenimentul  $A$  se realizează și evenimentul  $B$  (în contextul experienței aruncării cu zarul, dacă  $A$  este evenimentul „apariția feței cu două puncte”, iar  $B$  evenimentul „apariția unei fețe cu un număr par de puncte” - deci 2, 4 sau 6 -, atunci realizarea evenimentului  $A$ , în mod evident, implică realizarea evenimentului  $B$ , deci  $A \subset B$ );

♦ **evenimentele  $A$  și  $B$  sunt echivalente** și vom scrie  $A=B$ , dacă și numai dacă  $A \subset B$  și  $B \subset A$ ;

♦ **diferența evenimentelor  $A$  și  $B$** , notată  $A-B$ , este evenimentul care se

realizează într-o probă, dacă se realizează evenimentul  $A$  și nu se realizează evenimentul  $B$  (în contextul aruncării cu zarul, dacă  $A$  este evenimentul „apariția unei fețe cu un număr impar de puncte”, iar  $B$  este evenimentul „apariția feței cu 3 sau 5 puncte”, atunci  $A-B$  este evenimentul care constă în „apariția feței cu 1 punct”); observație:  $A-B = A \cap \overline{B}$ ;

♦ evenimentele  $A$  și  $B$  se numesc **compatibile** dacă în cel puțin o probă a experienței se realizează și  $A$  și  $B$  (două evenimente  $A, B$  sunt **compatibile** dacă și numai dacă  $A \cap B \neq \Phi$ );

♦ evenimentele  $A$  și  $B$  se numesc **incompatibile**, dacă producerea unuia dintre ele într-o probă, atrage după sine imposibilitatea producerii celuilalt eveniment în aceeași probă (două evenimente  $A$  și  $B$  sunt **incompatibile** dacă și numai dacă  $A \cap B = \Phi$ ); (în contextul experienței aruncării cu zarul, dacă evenimentul  $A$  constă în „apariția feței cu 1 sau 2 puncte”, evenimentul  $B$  în „apariția feței cu 1 sau 3 puncte”, iar evenimentul  $C$  în „apariția feței cu 2 sau trei 3 puncte”, atunci acestea sunt incompatibile în totalitatea lor, dar compatibile două câte două).

Mulțimea evenimentelor rezultate în urma unei experiențe formează un **sistem de evenimente**.

În cazul în care rezultatul unei experiențe depinde de o întâmplare, evenimentul poate să apară cu o anumită probabilitate; evenimentul se numește în acest caz **întâmplător** sau **aleator**.

Există mai multe definiții ale noțiunii de probabilitate, funcție de cum a apărut de-a lungul istoriei necesitatea definirii acestui concept [5, 15, 16]

**Definiția 5.3. Probabilitatea** producerii unui eveniment este egală cu raportul dintre numărul rezultatelor favorabile producerii evenimentului și numărul total al rezultatelor egal posibile (formulare dată de Laplace).

Reluând experiența aruncării cu zarul, fiecare dintre cele șase fețe ale zarului este „la fel de probabilă”, deci este normal ca  $P(A_i) = \frac{1}{6}, i = \overline{1,6}$ .

Evenimentul  $A_i \cup A_j (i \neq j)$  este un eveniment de două ori mai probabil decât fiecare dintre evenimentele  $A_i$  și  $A_j$ , deci  $P(A_i \cup A_j) = \frac{2}{6} = \frac{1}{3}$ .

La fel:

$$P(A_1 \cup \dots \cup A_h) = \frac{h}{6}, h \leq 6 \text{ și } P(A_1 \cup A_2 \cup \dots \cup A_6) = P(\Omega) = 1.$$

În acest fel, câmpului de evenimente i-am atașat o funcție  $P$  cu valori

numerice. Astfel are loc o definiție echivalentă a noțiunii de probabilitate:

**Definiția 5.4.** Vom numi **probabilitate** o funcție numerică  $P$ , definită pe câmpul de evenimente, cu valori în  $[0,1]$ , care are proprietățile:

1.  $P(A) \geq 0$ , oricare ar fi evenimentul  $A$ ;
2.  $P(\Omega) = 1$ ,  $\Omega$  = evenimentul sigur;
3.  $P(A_1 \cup A_2 \cup \dots \cup A_n) = P(A_1) + P(A_2) + \dots + P(A_n)$ , dacă evenimentele  $A_1, A_2, \dots, A_n$  sunt incompatibile ( $A_i \cap A_j = \Phi$ ,  $i \neq j$ ).

Din definiție, se pot deduce imediat următoarele proprietăți:

- a)  $P(A \cap \bar{B}) = P(A) - P(A \cap B)$ ;
- b)  $P(A \cap \bar{B}) = P(A) - P(B)$  dacă  $B \subseteq A$ ;
- c)  $P(B) \leq P(A)$  dacă  $B \subseteq A$ ;
- d)  $P(\Phi) = 0$ ;
- e)  $P(\bar{A}) = 1 - P(A)$ ;
- f)  $0 \leq P(A) \leq 1$ .

Vom spune că evenimentele  $A$  și  $B$  sunt **independente** dacă  $P(A \cap B) = P(A) \cdot P(B)$  și, în general, evenimentele  $A_1, A_2, \dots, A_n$  sunt **independente** dacă

$$P(A_1 \cap A_2 \cap \dots \cap A_n) = P(A_1) \cdot P(A_2) \cdot \dots \cdot P(A_n).$$

**Definiția 5.5. a)** Vom numi **variabilă aleatoare**  $X$  acea variabilă care poate lua anumite valori  $(x_1, x_2, \dots, x_n)$  cu anumite probabilități  $(p_1, p_2, \dots, p_n)$ . Numărul valorilor  $n$  poate fi finit sau infinit, iar suma probabilităților (sau suma seriei  $\sum p_n$  când numărul valorilor este infinit) este egală cu 1.

**b)** O variabilă aleatoare  $X$  care poate lua un număr finit de valori se numește **variabilă aleatoare simplă**. Dacă variabila aleatoare poate lua o mulțime cel mult numărabilă de valori, ea se numește **variabilă aleatoare discretă**. Dacă mulțimea valorilor posibile este un interval al dreptei reale (nu neapărat mărginit), sau chiar axa reală, atunci variabila aleatoare se numește **variabilă aleatoare continuă**.

**c)** Vom numi **funcție de repartiție** a variabilei aleatoare continue  $X$  funcția  $F: R \rightarrow [0,1]$ ,  $F(x) = P(X < x)$ .

Funcția de repartiție are proprietățile:

- $F(\infty) = 1$ ;
- $F(-\infty) = 0$ ;



$$0 \leq F(x) \leq 1, \forall x \in R;$$

$$P(a \leq X < b) = F(b) - F(a), a, b \in R, a < b;$$

$$F(a) \leq F(b) \text{ dacă } a < b.$$

Dacă  $X$  este o variabilă aleatoare discretă, atunci mulțimea perechilor  $(x_i, p_i)$  se numește **repartiția variabilei aleatoare** și se scrie:

|       |                                                                                                                                       |
|-------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| (5.1) | $X : \begin{pmatrix} x_1 & x_2 & \dots & x_n & \dots \\ p_1 & p_2 & \dots & p_n & \dots \end{pmatrix} \quad p_i \geq 0, \sum p_i = 1$ |
|-------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|

(se presupune în acest tabel că valorile  $x_i$  au fost ordonate crescător).

Astfel funcție de repartiție a variabilei aleatoare  $X$  este:

$$F(x) = P(X, x) = \sum_{x_i < x} p_i$$

Strâns legat de repartiția unei variabile aleatoare  $X$  se definește *densitatea de repartiție*.

**d)** Dacă  $X$  este o variabilă aleatoare continuă, care are funcția de repartiție  $F(X)$ , se numește **densitate de probabilitate (de repartiție)** a variabilei aleatoare  $X$  o funcție  $f: R \rightarrow [0, +\infty)$  integrabilă pe  $R$ , astfel încât

$$F(x) = \int_{-\infty}^x f(t) dt$$

În mod similar proprietăților funcției de repartiție se definesc unele proprietăți ale densității de repartiție. Detalii se pot găsi în [5].

## 5.2. Ipoteze statistice. Verificarea caracterului aleator al rezultatelor

**Definiția 5.6. a)** Vom înțelege prin *ipoteză statistică* o presupunere care se face cu privire la parametrii unei repartiții sau la legea de repartiție pe care o urmează anumite variabile aleatoare în procesul experimental asupra cărora acționează o multitudine de factori aleatori și sistematici. Ipotezele statistice pot fi folosite în următoarele direcții principale [5, 15, 16]:

- ◆ verificarea concordanței dintre repartițiile empirice și cele teoretice;
- ◆ verificarea caracterului aleator al rezultatelor;
- ◆ verificarea parametrilor statistici.

b) Procedul de verificare a unei ipoteze statistice poartă numele de **test** sau **criteriu de semnificație**.

Ipoteza ce urmează a fi verificată se numește **ipoteză nulă**, se notează de obicei cu  $H_0$  și constă în admiterea caracterului întâmplător al deosebirilor, adică în presupunerea că nu există deosebiri esențiale; verificarea sa se face pe baza unui eșantion  $x_1, x_2, \dots, x_n$ , de volum  $n$ , extras din populația  $X$  care este o variabilă aleatoare cu densitatea  $f(x, \theta_1, \theta_2, \dots, \theta_k)$ , unde  $\theta_1, \theta_2, \dots, \theta_k$  reprezintă parametrii acestei repartiții.

Principiul construirii unui test pe baza căruia se poate accepta sau respinge ipoteza  $H_0$  presupune împărțirea spațiului de selecție  $X$  în două submulțimi: **regiunea critică** ( $R_C$ ) și complementara acesteia, **domeniu de încredere**, ( $CR_C$ ). Dacă punctul definit de vectorul de sondaj  $x_1, x_2, \dots, x_n$  cade în regiunea critică  $R_C$  ipoteza se respinge, iar dacă punctul cade în afara regiunii critice, respectiv în  $CR_C$ , ipoteza se acceptă.

În procesul verificării ipotezelor statistice pot fi comise două tipuri de erori și anume: să se respingă o ipoteză justă considerând că aceasta nu este adevărată, sau, dimpotrivă, să acceptăm o ipoteză falsă considerând că ea este adevărată. Erorile comise în primul caz se numesc **erori de genul I**, probabilitatea comiterii unor astfel de erori fiind denumită **risc de genul I** (**prag de semnificație** sau **nivel de încredere**, notat cu  $\alpha$ ), iar erorile comise prin acceptarea ca adevărată a unei ipoteze false se numește risc de **genul II** (notat cu  $\beta$ ); în mod evident, cele două riscuri sunt într-o relație inversă (dacă unul crește, celălalt scade), deci singura modalitate de a micșora concomitent cele două riscuri constă în mărirea volumului eșantionului. Mărirea acestor riscuri se stabilește în funcție de considerente economice și de natura subiectului analizat prin sondaj.

**Definiția 5.7.** Probabilitatea  $\pi$  de a respinge ipoteza  $H_0$  pe baza unui test de verificare se numește **puterea testului** și este dată de relația  $\pi = 1 - \beta$ . Dacă ipoteza  $H_0$  este adevărată, atunci puterea testului trebuie să fie foarte mică, iar dacă ipoteza  $H_0$  este falsă, atunci puterea testului trebuie să fie cât mai mare.

Este cunoscut faptul că asupra datelor de sondaj pot acționa două tipuri de erori: erori sistematice, cu acțiune unilaterală și erori aleatoare, cu acțiune în ambele sensuri, datorate unei multitudini de factori a căror influență individuală este neglijabilă.

Atât erorile sistematice, cât și valorile afectate de erori grosolane trebuie depistate și eliminate ele influențând nefavorabil rezultatele sondajului.

Depistarea și eliminarea erorilor sistematice se dovedește practic dificilă datorită multitudinii de factori care se intercondiționează și de aceea metodică eliminării acestor erori are un caracter foarte complex și variat. Ținând cont de acest lucru, amintim două teste [5], *testul iterațiilor și testul lui Young*, care nu oferă posibilitatea eliminării erorilor sistematice, ci doar pe aceea a aprecierii influenței cauzelor sistematice asupra datelor de sondaj.

În cazul depistării valorilor afectate de erori grosolane, deci al omogenizării datelor, posibilitățile „standard” de eliminare a acestor valori sunt mai numeroase. Aici trebuie amintite testele lui *Grubbs-Smirnov*, *Irwin*, *Grubbs* și *Chauvenet* [5,15,16]

### 5.3. Teste de concordanță cu utilitate mare în practică

Prezentăm în cele ce urmează câteva dintre testele de concordanță cu cea mai mare utilitate practică.

#### 5.3.1. Testul Young

Dat fiind dat șirul de valori experimentale  $x_1, x_2, \dots, x_n$ , se calculează mărimile

$$(5.2) \quad \delta^2 = \frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^{n-1} (x_{i+1} - x_i)^2, \quad M = \frac{\delta^2}{\sigma^2}$$

Mărimea  $M$  astfel determinată se compara cu valorile  $VCI$  (valoare critică inferioară) și  $VCS$  (valoare critică superioară), alese din *tabelul 5.1* [5] și se consideră că șirul de valori experimentale are un caracter aleator, cu probabilitatea  $\alpha$ , dacă este îndeplinită condiția:

$$(5.3) \quad VCI < M < VCS$$

| $n$ | $VCI$           |                 | $VCS$           |                 |
|-----|-----------------|-----------------|-----------------|-----------------|
|     | $\alpha = 0,95$ | $\alpha = 0,99$ | $\alpha = 0,95$ | $\alpha = 0,99$ |
| 4   | 0,78            | 0,53            | 3,22            | 3,47            |
| 5   | 0,82            | 0,54            | 3,18            | 3,46            |
| 6   | 0,89            | 0,56            | 3,11            | 3,44            |
| 7   | 0,94            | 0,61            | 3,06            | 3,39            |
| 8   | 0,98            | 0,66            | 3,02            | 3,34            |

|    |      |      |      |      |
|----|------|------|------|------|
| 9  | 1,02 | 0,71 | 2,98 | 3,29 |
| 10 | 1,06 | 0,75 | 2,94 | 3,25 |
| 11 | 1,10 | 0,79 | 2,90 | 3,21 |
| 12 | 1,13 | 0,83 | 2,87 | 3,17 |
| 15 | 1,21 | 0,92 | 2,79 | 3,08 |
| 20 | 1,30 | 1,04 | 2,70 | 2,96 |
| 25 | 1,37 | 1,13 | 2,63 | 2,87 |

*Tabelul 5.1 Valorile VCI și VCS pentru testul Young*

Se poate observa că testul nu poate fi aplicat decât pentru eșantioane conținând cel mult 25 de valori experimentale. Parametrul  $\alpha$  din *tabelul 5.1* are semnificația unui coeficient de încredere și poate fi ales orientativ, în funcție de volumul eșantionului, din *tabelul 5.2*. Aici înțelegem desigur căci  $\alpha=0.95$  corespunde unei probabilități de 95%, și  $\alpha=0.99$  unei probabilități de 99%.

Dacă volumul eșantionului se află între două valori din *tabelul 5.2*, este indicat să se aleagă valoarea  $\alpha$  corespunzătoare unui volum mai mic al eșantionului.

|          |       |       |       |       |       |       |       |        |
|----------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|--------|
| $n$      | 5     | 6     | 7     | 8     | 9     | 10    | 12    | 14     |
| $\alpha$ | 0,960 | 0,970 | 0,976 | 0,980 | 0,983 | 0,985 | 0,988 | 0,990  |
| $n$      | 16    | 18    | 20    | 25    | 30    | 50    | 100   | 150    |
| $\alpha$ | 0,991 | 0,992 | 0,993 | 0,994 | 0,995 | 0,996 | 0,997 | 0,9973 |

*Tabelul 5.2*

Alegerea coeficientului de încredere din *tabelul 5.2* poate fi înlocuită de determinarea acestuia cu ajutorul relației:

|       |                                                                         |
|-------|-------------------------------------------------------------------------|
| (5.4) | $\alpha = \frac{1,5057 + 0,9968 \cdot n^{1,7404}}{2,1803 + n^{1,7404}}$ |
|-------|-------------------------------------------------------------------------|

Dacă valoarea aleasă sau calculată a coeficientului de încredere se află între valorile disponibile în *tabelul 5.1*, este indicat să se aleagă valoarea disponibilă inferioară.

Alegerea valorilor VCI și VCS din *tabelul 5.1* poate fi înlocuită cu determinarea acestora cu ajutorul relațiilor:

|       |                                                                                                                                                                                                        |
|-------|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| (5.5) | $VCI = \begin{cases} 0,491 + 0,081 \cdot n - 0,003 \cdot n^2 & \text{pentru } \alpha = 0,95 \\ \frac{192,883 + 1,269 \cdot n^{2,336}}{411,427 + n^{2,336}} & \text{pentru } \alpha = 0,99 \end{cases}$ |
| (5.6) | $VCS = \begin{cases} 3,317 - 1,057 \cdot e^{-8,919n^{-0,941}}, & \text{pentru } \alpha = 0,95 \\ 3,484 - 0,882 \cdot e^{-33,574n^{-1,399}}, & \text{pentru } \alpha = 0,99 \end{cases}$                |

### 5.3.2. Testul Irwin

Se aplică pentru eliminarea datelor afectate de erori grosolane în cazul în care se cunoaște numai  $\sigma^2$ .

Pentru aplicarea acestui test, considerând șirul de valori de sondaj ordonat crescător, se calculează rapoartele:

|        |                                            |
|--------|--------------------------------------------|
| (5.7a) | $\lambda_M = \frac{x_n - x_{n-1}}{\sigma}$ |
| (5.7b) | $\lambda_m = \frac{x_2 - x_1}{\sigma}$     |

Relația (5.7a) este folosită pentru valoarea maximă, iar (5.7b) pentru valoarea minimă.

Fie în cazul testării valorii maxime, fie în cazul testării valorii minime din șir, diferența dintre cei doi termeni situați la una dintre extremitățile șirului raportați la abaterea medie pătratică nu poate depăși o anumită valoare dată în funcție de nivelul de semnificație ales.

Valorile funcție de  $n$  și de  $\sigma$  sunt prezentate în *tabelul 5.3* de mai jos.

| $n$ | $\alpha$ |      |      | $n$ | $\alpha$ |      |      |
|-----|----------|------|------|-----|----------|------|------|
|     | 0,10     | 0,05 | 0,01 |     | 0,10     | 0,05 | 0,01 |
| 2   | 2,33     | 2,77 | 3,64 | 12  | 1,11     | 1,41 | 1,97 |
| 3   | 1,79     | 2,17 | 2,90 | 13  | 1,09     | 1,39 | 1,94 |
| 4   | 1,64     | 2,05 | 2,75 | 14  | 1,07     | 1,37 | 1,91 |
| 5   | 1,51     | 1,93 | 2,60 | 15  | 1,06     | 1,35 | 1,88 |
| 6   | 1,39     | 1,81 | 2,45 | 16  | 1,05     | 1,33 | 1,86 |
| 7   | 1,31     | 1,69 | 2,30 | 17  | 1,04     | 1,31 | 1,84 |
| 8   | 1,24     | 1,57 | 2,16 | 18  | 1,03     | 1,29 | 1,82 |
| 9   | 1,20     | 1,51 | 2,09 | 19  | 1,03     | 1,28 | 1,81 |
| 10  | 1,18     | 1,46 | 2,03 | 20  | 1,03     | 1,27 | 1,80 |
| 11  | 1,14     | 1,43 | 2,00 |     |          |      |      |

Tabelul 5.3. Valorile  $\lambda_{\alpha,n}$

Deci dacă:

$H_0 : \lambda < \lambda_{\alpha;n}$  atunci valoarea extremă rămâne în șir;

$H_1 : \lambda > \lambda_{\alpha;n}$  în acest caz, valoarea extremă se elimină fiind considerată o abatere grosolană.

Aici  $\lambda$  este cel calculat convenabil (maxim sau minim) funcție de datele concrete supuse analizei.

### 5.3.3. Testul Chauvenet

Fiind dat un șir de valori experimentale  $x_1, x_2, \dots, x_n$ , se consideră că valoarea  $x_i$  este *afectată de erori aberante* dacă este verificată condiția (criteriul Chauvenet):

|       |                                    |
|-------|------------------------------------|
| (5.8) | $ x_i - \bar{x}  > z \cdot \sigma$ |
|-------|------------------------------------|

unde  $\bar{x}$  și  $\sigma$  reprezintă media aritmetică, respectiv abaterea standard a șirului de valori experimentale, iar mărimea  $z$  se alege din *tabelul 5.4* în funcție de numărul  $n$  de valori din șir.

Din motive evidente, este suficient ca verificarea relației de mai sus să fie efectuată doar pentru valorile extreme (minimă și maximă) din cadrul eșantionului.

Valoarea abaterii standard a șirului de valori experimentale este determinată în acest caz cu expresia:

|       |                                                                |
|-------|----------------------------------------------------------------|
| (5.9) | $\sigma = \sqrt{\frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2}$ |
|-------|----------------------------------------------------------------|

Valoarea  $z$  din *tabelul 5.4* poate fi determinată și cu ajutorul relației:

|        |                                                                                                                    |
|--------|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| (5.10) | $z = \frac{0,435 - 0,862 \cdot a}{1 - 3,604 \cdot a + 3,213 \cdot a^2}, \quad a = \frac{2 \cdot n - 1}{4 \cdot n}$ |
|--------|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|

| <i>n</i> | <i>z</i> | <i>n</i> | <i>z</i> | <i>n</i>  | <i>z</i> |
|----------|----------|----------|----------|-----------|----------|
| 5        | 1,64     | 14       | 2,10     | 27 – 29   | 2,37     |
| 6        | 1,73     | 15       | 2,12     | 30 – 33   | 2,41     |
| 7        | 1,80     | 16       | 2,14     | 34 – 38   | 2,46     |
| 8        | 1,87     | 17       | 2,17     | 39 – 45   | 2,51     |
| 9        | 1,91     | 18       | 2,20     | 46 – 55   | 2,58     |
| 10       | 1,96     | 19       | 2,23     | 56 – 71   | 2,65     |
| 11       | 2,00     | 20 – 21  | 2,26     | 72 – 100  | 2,75     |
| 12       | 2,04     | 22 – 23  | 2,29     | 101 – 166 | 2,88     |
| 13       | 2,07     | 24 - 26  | 2,33     | 167 - 500 | 3,09     |

*Tabelul 5.4 Valorile z pentru testul Chauvenet*

## 5.4. Probleme rezolvate

**5.4.1.** În urma efectuării unui sondaj s-au obținut următoarele 12 rezultate:

13,4; 13,8; 13,4; 13,1; 13,3; 13,5; 13,5; 13,6; 13,6; 13,8; 13,1; 13,2.

Cunoscând că  $\lambda_{0,05;12} = 1,41$  și  $\sigma = 0,09$  să se specifice ce test se aplică și să se decidă dacă valorile extreme constituie valori aberante, pentru o probabilitate de 95%.

*Rezolvare:*

Deoarece se cunoaște doar abaterea medie pătratică se aplică testul Irwin.

Considerăm șirul de valori ordonat crescător, astfel:

13,1; 13,1; 13,2; 13,3; 13,4; 13,4; 13,5; 13,5; 13,6; 13,6; 13,8; 13,8

și calculăm rapoartele:

$$\lambda = \frac{x_n - x_{n-1}}{\sigma} \text{ pentru valoarea maximă,}$$

respectiv:

$$\lambda = \frac{x_2 - x_1}{\sigma}, \text{ pentru valoarea minimă.}$$

În cazul nostru ,  $\lambda = \frac{13,8-13,6}{0,09} = 2,22 > 1,41$  , deci valoarea maximă se elimină și, respectiv,  $\lambda = \frac{13,2-13,1}{0,09} = 1,11 < 1,41$  , deci valoarea minimă nu se elimină.

**5.4.2.** Considerând următorul șir de date:

20    25    17    24    29    32    33    25    28    26

23    22    19    34    35    18    20    24    22    24

se cere:

- a)** utilizând testul Chavenet, să se specifice dacă există valori aberante;
- b)** utilizând testul Young, să se verifice dacă există erori sistematice.

Se cunosc:  $\alpha = 0,99$  ,  $z = 2,26$  ,  $VCI = 1,04$  ,  $VCS = 2,96$  .

*Rezolvare:*

**a)** Determinăm:

- media:  $\bar{x} = \frac{1}{20} \cdot \sum_{i=1}^{20} x_i = 25$  ;

- abaterea medie pătratică:  $\sigma = \sqrt{\frac{1}{19} \cdot \sum_{i=1}^{20} (x_i - \bar{x})^2} = 5,35$  .

Avem:

$$x_{\min} = 17 \text{ și } x_{\max} = 35 .$$

Deoarece:

$$|x_{\min} - \bar{x}| = |-8| = 8 < 12,091 = 2,26 \cdot 5,35 = z \cdot \sigma ,$$

rezultă că valoarea minimă nu constituie o valoare aberantă, deci rămâne în șir;

$$|x_{\max} - \bar{x}| = |10| = 10 < 12,091 = 2,26 \cdot 5,35 = z \cdot \sigma ,$$



rezultă că valoarea maximă nu constituie o valoare aberantă, deci rămâne în șir.

**b) Determinăm:**

$$\delta^2 = \frac{1}{19} \sum_{i=1}^{19} (x_{i+1} - x_i)^2 = 42,74 .$$

Avem acum:

$$M = \frac{\delta^2}{\sigma^2} = \frac{42,74}{28,63} = 1,49$$

și, deoarece  $1,04 < 1,49 < 2,96 \Leftrightarrow VCI < M < VCS$ , rezultă, cu o probabilitate de 99% că nu există erori sistematice.

## 5.5. Probleme propuse

**5.5.1.** În urma efectuării unui sondaj s-au obținut următoarele 12 rezultate:

56,4; 56,8; 56,4; 56,1; 56,3; 56,5; 56,5; 56,6; 56,6; 56,8; 56,1; 56,2.

Cunoscând că  $\lambda_{0,05;12} = 1,41$  și  $\sigma = 0,11$  să se specifice ce test se aplică și să se decidă dacă valorile extreme constituie valori aberante, pentru o probabilitate de 95%.

**5.5.2.** Se consideră următorul set de date obținute în urma unui experiment

30    35    28    34    40    42    43    35    38    36

33    32    29    44    46    29    31    34    32    35

Utilizând testul Chauvenet, să se determine dacă în această mulțime de date există valori aberante.

**5.5.3.** În urma efectuării unui sondaj de volum  $n = 20$ , s-au obținut următoarele rezultate:

7,93;    7,99    8,05    7,93    7,95    7,94    7,96    7,93    8,03    8,01

7,92    7,94    8,06    7,95    8,02    7,97    8,05    7,99    7,95    8,03

Din cercetări anterioare, se cunoaște că abaterea medie pătratică este  $\sigma = 0,042$ . Știind că se lucrează cu o probabilitate  $p = 95\%$ , (corespunzător coeficientului de încredere de 0.95) se cere să se specifice ce test se aplică și dacă valorile extreme constituie valori aberante.

**5.5.4.** Pentru cunoașterea modului în care variază „solubilitatea” în apă a carbonatului de sodiu -  $Na_2CO_3 \cdot 10H_2O$  în raport cu temperatura, s-au determinat experimental valorile solubilității la câteva temperaturi, rezultatele determinărilor fiind sistematizate în tabelul alăturat (preluat din [2] pg. 93)

|   |       |      |       |       |       |       |       |
|---|-------|------|-------|-------|-------|-------|-------|
| T | -2.05 | 0    | 10    | 20    | 25    | 30    | 32    |
| S | 6.06  | 6.86 | 11.98 | 21.58 | 29.20 | 39.70 | 44.50 |

Aici T reprezintă temperatura ( $^{\circ}C$ ) iar S solubilitatea, exprimată în g substanță anhidră la 100g solvent (apă).

Să se arate că se poate aplica testul lui Chauvenet și să se determine dacă între aceste valori ale solubilității există și valori afectate de erori.

## TEMA 6. FUNCȚII ELEMENTARE ȘI APLICAȚIILE LOR ÎN CHIMIE

### 6.1. Funcții afine

#### 6.1.1. Conceptul de funcție afină. Forme de reprezentare

a) **Definiția 6.1.** Prin **funcție afină** se înțelege o corespondență univocă (aplicație) de la mulțimea valorilor variabilei reale  $x$ , la mulțimea altei variabile reale  $y$ , prin legea de corespondență de forma:

|       |                                                |
|-------|------------------------------------------------|
| (6.1) | $y = f(x) = mx + n, \quad x \in R, m, n \in R$ |
|-------|------------------------------------------------|

Aici  $m$  și  $n$  reprezintă numere reale date. Dacă  $n=0$  atunci funcția devine liniară.

Amintim că funcție “liniară” înseamnă  $f(ax_1 + bx_2) = af(x_1) + bf(x_2)$  pentru orice  $a, b, x_1, x_2 \in R$

Graficul unei funcții afine într-un sistem de coordonate carteziane (ortogonale), este o linie dreaptă care, spre deosebire de cazul funcțiilor liniare, nu mai trece în general prin origine, ci printr-un punct  $N$  cu coordonatele  $x = 0, y = n$  (fig. 6.1). Datorită acestui fapt, termenul  $n$  din formula de definiție a funcției  $f$  poartă numele de “ordonata la origine”.

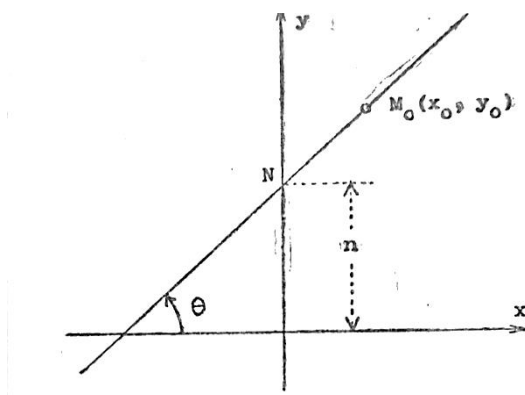


Fig. 6.1

Semnificația geometrică a termenului  $m$  este aceeași ca și în cazul funcției liniare, anume  $m = \frac{u}{v}tg\theta$ ,  $u$  și  $v$  reprezentând lungimile în mm ale unităților de măsură  $\vec{u}$ ,  $\vec{v}$  ale axelor de coordonate, iar  $\theta$ , unghiul orientat pe care-l formează dreapta reprezentativă cu axa  $Ox$  (fig. 6.1)

Luăm  $u=v=1$ , deoarece vectorii din baza ortonormată  $\{\vec{i}, \vec{j}\}$  au modulul 1.

Deci  $m = tg\theta$

**b)** Să reamintim că ecuația unei curbe plane (C), într-un sistem de coordonate carteziene, este dată de o relație de forma  $F(x, y) = 0$  între coordonatele  $x$  și  $y$  ale unui punct curent  $M(x, y)$  din plan, astfel încât să fie îndeplinite următoarele două condiții:

i) dacă punctul  $M$  se situează pe curba (C), atunci coordonatele sale verifică relația  $F(x, y) = 0$ ;

ii) reciproc, dacă coordonatele  $x$  și  $y$  ale unui punct  $M$  din plan verifică relația  $F(x, y) = 0$ , atunci punctul respectiv se află pe curba (C).

În ceea ce privește natura analitică a relației  $F(x, y) = 0$ , această relație provine din eliminarea unui parametru  $t$  dintr-un sistem de două relații  $x = f(t), y = g(t), t \in (a, b)$ , în care  $f$  și  $g$  sunt funcții continue și derivabile, pe intervalul lor de definiție.

În cazul particular în care curba (C) este o linie dreaptă, ecuația  $F(x, y) = 0$  este algebrică de gradul întâi, în raport cu fiecare din variabilele  $x$  și  $y$  cât și în raport cu ansamblul lor. Forma concretă a acestei ecuații depinde de modul geometric de definire a dreptei în cauză. Se disting în principal două situații:

**b1.** Ecuația unei drepte care trece printr-un punct  $M_0(x_0, y_0)$  dat și are coeficientul unghiular  $m = \frac{u}{v}tg\theta$  dat. Să punem (luând  $u=v=1$  ca la baza ortonormată)  $m = tg\theta$

*Cazul b1.1.* Dreapta nu este paralelă cu axa  $Oy$ , ceea ce înseamnă că unghiul  $\theta$  nu este un unghi drept. În acest caz ecuația dreptei se scrie:

|       |                        |
|-------|------------------------|
| (6.2) | $y - y_0 = m(x - x_0)$ |
|-------|------------------------|

În particular, dacă dreapta este paralelă cu axa  $Ox$ , atunci  $\theta = 0$  și în consecință  $m=0$ , iar ecuația (6.2) devine  $y = y_0$ . Ecuația este  $y = y_0$

*Cazul b1.2.* Dreapta este paralelă cu axa Oy, ceea ce înseamnă că  $\theta$  este un unghi drept. În acest caz, în locul ecuației (6.2) trebuie considerată ecuația  $x = x_0$ . Ecuația este  $x = x_0$ . Aceasta înseamnă că orice punct al dreptei are abscisa egală cu  $x_0$  și reciproc, orice punct  $M$  a cărui abscisă este egală cu  $x_0$  aparține dreptei.

**b2.** Ecuația unei drepte care trece prin două puncte date, distincte,  $M_1(x_1, y_1), M_2(x_2, y_2)$ . Și aici avem subcazuri.

*b2.1. Cazul  $x_1 \neq x_2$  (fig.6.2).* În acest caz avem că  $\operatorname{tg} \theta = (y_2 - y_1) \cdot \frac{v}{(x_2 - x_1)u}$  și atunci  $\frac{u}{v} \operatorname{tg} \theta = \frac{y_2 - y_1}{x_2 - x_1}$ . Sa punem  $\operatorname{tg} \theta = \frac{y_2 - y_1}{x_2 - x_1}$

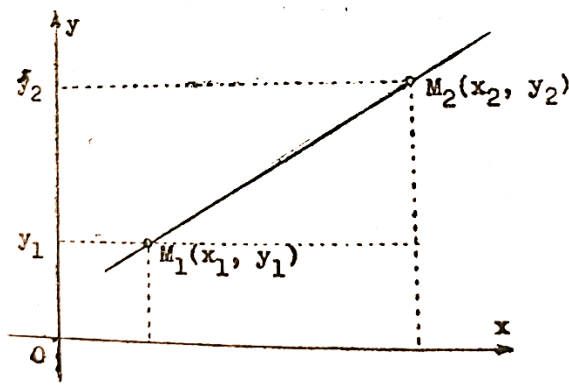


Fig.6.2

Înlocuind în relația (6.2) pe  $m$  cu această expresie și considerând  $M_0 = M_1$  obținem ecuația:

|       |                                                   |
|-------|---------------------------------------------------|
| (6.3) | $y - y_1 = \frac{y_2 - y_1}{x_2 - x_1} (x - x_1)$ |
|-------|---------------------------------------------------|

*b2.2. Cazul  $x_1 = x_2$  și  $y_2 \neq y_1$*  În acest caz dreapta este paralelă cu axa Oy și în consecință ecuația ei se scrie  $x = x_1$ .

### c. Proprietatea fundamentală a funcțiilor afine

După cum se poate observa din cele de mai sus, în cazul oricărei funcții liniare, variabilele  $x$  și  $y$  sunt mărimi direct proporționale, ceea ce

matematic se notează  $x \sim y$ . Cazul funcțiilor afine neomogene, adică al funcțiilor (6.1) cu  $n \neq 0$  este însă diferit. Este vorba de o proprietate referitoare la creșterile (variațiile) variabilelor  $x$  și  $y$ . Detaliem aceasta în cele ce urmează.

Fie funcția oarecare  $y = f(x), x \in (a, b)$  și fie  $x_0$  o valoare fixată a variabilei independente iar  $y_0$  valoarea corespunzătoare a funcției. Să atribuim valorii  $x_0$  o “creștere” (variație)  $\Delta x$ . Vom obține valoarea “crescută”  $x + \Delta x$ . (Fig.6.3) Variației  $\Delta x$  îi va corespunde o variație  $\Delta y$  a valorii  $y_0$  a funcției  $f$ , după relația următoare:

|       |                                         |
|-------|-----------------------------------------|
| (6.4) | $\Delta y = f(x_0 + \Delta x) - f(x_0)$ |
|-------|-----------------------------------------|

Această valoare se numește “creșterea valorii funcției  $f$ , în punctul  $x_0$ ”.

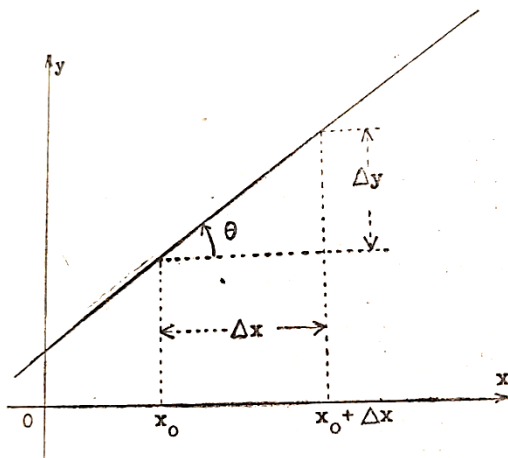


Fig. 6.3

În cazul particular în care funcție  $f$  este afină, adică de forma (6.1), creșterea  $\Delta y$  devine:

|       |                                                               |
|-------|---------------------------------------------------------------|
| (6.5) | $\Delta y = [m(x_0 + \Delta x) + n] - [mx_0 + n] = m\Delta x$ |
|-------|---------------------------------------------------------------|

Egalitatea de mai sus exprimă de fapt următoarea proprietate fundamentală a funcțiilor afine [2]

**Proprietatea 6.1.** Pentru o funcție afină, creșterea  $\Delta y$  a valorii funcției  $f$  este direct proporțională cu creșterea  $\Delta x$  a valorii variabilei independente  $x$ .

Factorul de proporționalitate este independent de punctul  $x_0$  și coincide cu coeficientul unghiular “m” al dreptei care reprezintă grafic funcția în cauză.

**Observația 6.1.** Propoziția de mai sus admite și o reciprocă, la fel de importantă în aplicații. Dacă creșterea  $\Delta y$  a valorii  $y_0$  a unei funcții date  $f$  este direct proporțională cu creșterea  $\Delta x$  a valorii  $x_0$  a variabilei independente  $x$ , adică,  $\frac{\Delta y}{\Delta x} = m = \text{const}$ , atunci funcția este afină pe intervalul ei de definiție, adică este de forma  $y = mx + n$ ,  $m, n = \text{const}$

Proprietatea de mai sus este foarte importantă și are aplicații variate în practică. În secțiunile următoare vom expune aplicații în interpolarea liniară a funcțiilor definite tabelar.

### 6.1.2. Interpolarea liniară

**6.1.2.1.** Pornim de la următoarea problemă, des întâlnită în practică.

**Problema 6.1.** Să considerăm  $y = f(x)$  o funcție continuă pe un interval  $(a, b)$ . Să presupunem că nu se cunoaște efectiv legea de corespondență  $x \rightarrow y$  decât referitor la o mulțime discretă de valori ale variabilei independente  $x$  (ca și în cazul funcțiilor definite tabelar).

Fie  $x_1, x_2$ ,  $x_1 < x_2$ , două astfel de valori presupuse consecutive și fie  $y_1, y_2$  valorile corespunzătoare ale funcției  $f$ .

Se cere să se calculeze cu aproximație, pe baza datelor menționate, valoarea funcției  $f$  într-un punct oarecare dat,  $x$ , din intervalul  $(x_1, x_2)$ .

**Rezolvare.** Procedeu care se aplică în mod curent la rezolvarea unor probleme de acest gen se numește *interpolare liniară* și se descrie (în cazul de față) după cum urmează. [2]

De fapt  $f$  nu e liniară ci “afină”, așa cum este definită mai sus. Interpolarea se numește liniară pentru că aproximările de fac prin drepte, adică prin “linii”.

i. Se interpretează funcția  $f$  ca o funcție liniară pe intervalul  $[x_1, x_2]$  ceea ce înseamnă că presupunem că fenomenul pe care îl descrie se desfășoară *uniform* pe intervalul  $[x_1, x_2]$ . Acest lucru este legitim dacă luăm în considerare ipoteza că funcția  $f$  este continuă și derivabilă pe  $(a, b)$  și punctele  $x_1, x_2$ ,  $x_1 < x_2$ , sunt relativ apropiate. Presupunând îndeplinite aceste condiții, creșterea valorii variabilei independente  $x$  și creșterea valorii variabilei dependente  $y$  vor fi mărimi direct proporționale, conform proprietății fundamentale de mai sus.

ii. Să considerăm creșterile  $\Delta x = x_2 - x_1$ ,  $\delta x = x - x_1$ . Creșterile corespunzătoare ale valorii variabilei dependente  $y$  vor fi:  $\Delta y = y_2 - y_1$ ,  $\delta y = y - y_1$ . Conform proprietății 6.1 acestea vor fi direct proporționale cu primele. De aceea, pentru determinarea creșterii  $\delta y$  se poate aplica regula de trei simplă conform schemei:

|       |                                                                                                                                                                                     |
|-------|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| (6.6) | $\Delta x = x_2 - x_1 \cdots \Delta y = y_2 - y_1$ $\delta x = x - x_1 \cdots \delta y = ?$ $\delta y = \frac{\Delta y}{\Delta x} \delta x = \frac{y_2 - y_1}{x_2 - x_1} (x - x_1)$ |
|-------|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|

iii. Odată determinată creșterea  $\delta y$ , se trece la determinarea valorii  $y$  solicitate în enunțul problemei. Pentru aceasta se ține cont de relația de definire a lui  $\delta y$ , din care se deduce  $y = y_1 + \delta y$ . Înlocuind aici pe  $\delta y$  cu valoarea determinată în (6) vom obține pentru  $y$  expresia :

|       |                                                   |
|-------|---------------------------------------------------|
| (6.7) | $y = y_1 + \frac{y_2 - y_1}{x_2 - x_1} (x - x_1)$ |
|-------|---------------------------------------------------|

**Observația 6.2.** Valoarea determinată în (6.7) reprezintă o valoare *aproximativă* a funcției  $f$ . Acest lucru se observă bine și din interpretarea geometrică.

Determinarea se face în relația (6.7)

iv. *Interpretare geometrică.* Fie  $M_1$  și  $M_2$  punctele din reperul cartezian  $xOy$  care au ca și coordonate perechile  $(x_1, y_1), (x_2, y_2)$ . Prin aceste puncte trece graficul funcției  $f$  din enunțul nostru (fig.6.4). Valoarea acestei funcții în punctul intermediar dat,  $x$ , este reprezentată prin mărimea algebrică a segmentului orientat  $\overrightarrow{LM}$ .

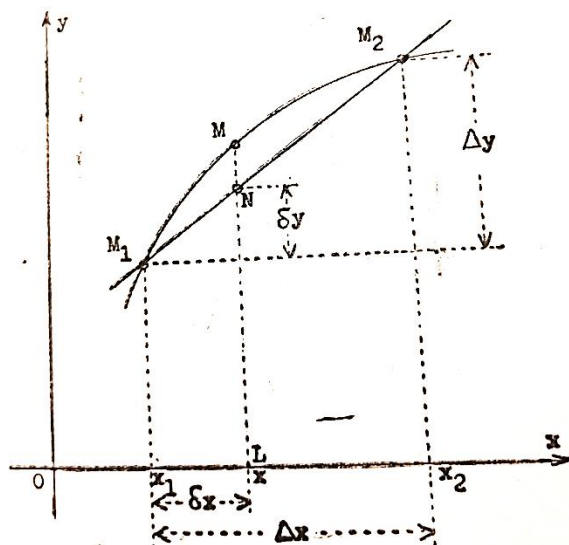


Fig. 6.4.



Așa cum se observă din fig. 6.4, dacă funcția  $f$  este continuă pe intervalul  $(a,b)$  și dacă punctele  $x_1, x_2$ ,  $x_1 < x_2$ , sunt relativ apropiate, atunci arcul de curba  $M_1M_2$  va fi apropiat de coarda care îl subintinde, iar segmentul  $\overline{LM}$  va fi apropiat de segmentul  $\overline{LN}$ ,  $N$  fiind punctul de intersecție al coardei  $M_1M_2$  cu paralela prin  $L$  la axa  $Oy$ .

#### 6.1.2.2. Interpolarea funcțiilor tabelare

Pentru a se putea obține în mod eficient valorile unei funcții oarecare nominalizate, corespunzătoare diverselor valori ale variabilei independente, *se tabelează funcția* respectivă, adică se alcătuește un tabel cu două rubrici, în prima rubrică înscriindu-se valorile variabilei independente în ordine crescătoare, iar în a doua – valorile corespunzătoare ale funcției (determinate cu o precizie adecvată).

Există foarte multe exemple de tabele de acest gen, amintim aici dintre cele mai importante și totodată utilizate, tabelele de logaritmi, tabelele de valori ale funcțiilor trigonometrice, tabele pentru variația solubilității în apă a unei substanțe menționate în raport cu temperatura, tabele pentru funcții experimentale, etc. [2]

În cazul în care o valoare dată a variabilei independente nu figurează în tabel, determinarea cu aproximație a valorii corespunzătoare a funcției se efectuează în general prin interpolare liniară. Aplicarea interpolării liniare este însă legitimă doar dacă sunt îndeplinite următoarele două condiții.

i. Graficul funcției în cauză este continuu și “neted”, în sensul că nu prezintă puncte unghiulare. Aceasta înseamnă că în fiecare punct al graficului există o tangenta unică, care variază continuu, atunci când punctul respectiv variază continuu pe grafic.

ii. Valorile argumentului înscrise în tabel sunt suficient de “dese” astfel încât în orice subinterval cuprins între două valori consecutive, arcul de curbă corespunzător să poată fi aproximat “suficient de bine”, prin coarda pe care o subintinde.

Ca exemple tipice de curbe care nu respectă condiția i pot fi menționate “curbele de solubilitate” ale unor substanțe, adică acele curbe care descriu variația solubilității substanțelor respective în apă, funcție de temperatură [2]

**Exemplu 6.1.** Ne putem referi pentru concretizare, la curba de solubilitate a sulfatului de zinc. Această curbă prezintă două puncte unghiulare corespunzătoare temperaturilor de  $38^{\circ}\text{C}$  și  $55,5^{\circ}\text{C}$  [2,9]. Prezența acestor puncte se explică prin faptul că, la temperaturile respective, sulfatul de zinc își schimbă structura moleculară.

În tabelul 6.1 se indică valorile solubilității sulfatului de zinc, S (grame  $\text{ZnSO}_4/100$  grame  $\text{H}_2\text{O}$ ), la diverse temperaturi T (grade C).

|          |      |      |      |      |      |      |
|----------|------|------|------|------|------|------|
| <b>T</b> | 0    | 10   | 20   | 25   | 30   | 38   |
| <b>S</b> | 41.6 | 47.1 | 53.8 | 57.7 | 61.3 | 69.5 |

Tabelul 6.1

Datele din tabelul 6.1 au fost preluate din [17].

Se cere ca pe baza acestor date să se calculeze cu aproximație solubilitatea sulfatului de zinc la temperatura  $T=23^0\text{C}$ .

*Rezolvare.* Deoarece valoarea  $T=23$  nu figurează în tabel, se intercalează această valoare între două valori consecutive  $T_1=20$  și  $T_2=25$  din tabel și se aplică metoda interpolării liniare.

Astfel, se calculează întâi creșterea  $\delta S = S - S_1$ . Aplicăm regula de trei simplă conform schemei prezentate anterior și obținem  $\delta S \approx \frac{3.9}{3.5} = 2.34$ . Calculăm apoi pe S cu ajutorul formulei  $S = S_1 + \delta S$ . Obținem valoarea aproximativă  $S \approx 56.14$ .

### 6.1.3. Extrapolarea liniară

În practică intervin adesea probleme analoage celei expuse în secțiunea precedentă, cu deosebirea că valoarea dată x, pentru care se cere să se calculeze valoarea corespunzătoare a funcției f, *se situează în exteriorul intervalului*  $[x_1, x_2]$ . Astfel de situații intervin cu precadere în probleme de prognoză.

Pentru determinarea valorii aproximative solicitate,  $f(x)$ , există diferite metode numite *metode de extrapolare*. Cel mai simplu procedeu îl constituie *extrapolarea liniară*, care constă în a aproxima întâi graficul funcției f, în *interiorul* intervalului  $[x_1, x_2]$  prin coarda care unește punctele experimentale  $M_1, M_2$  (sau prin dreapta “de regresie” în cazul mai multor astfel de puncte) și a considera apoi ca valoare aproximativă pentru  $f(x)$  ordonata y a punctului corespunzător N de pe *prelungirea* respectivei coarde (fig. 6.5).

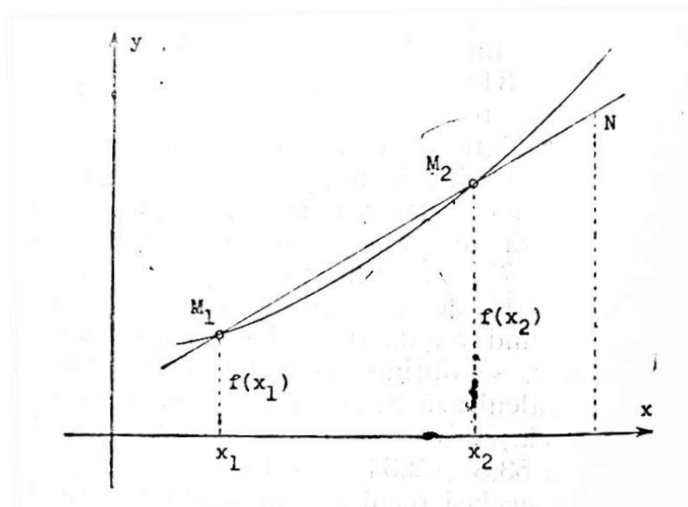


Fig. 6.5

Trebuie menționat faptul că aplicarea extrapolării liniare este legitimă numai în cazul în care fenomenul în cauză se desfășoară *uniform sau aproape uniform* atât pe intervalul  $[x_1, x_2]$  cât și în exteriorul acestui interval.

Dacă această condiție este îndeplinită, atunci procedând analog ca în cazul interpolării liniare, se obține formula (6.7), cu ajutorul căreia se poate calcula cu aproximație valoarea solicitată  $f(x)$ .

Dacă fenomenul în cauză nu se desfășoară uniform, atunci pentru calculul aproximativ al valorii  $f(x)$  se folosește *procedeul extrapolării neliniare*. Deoarece atât extrapolarea liniară cât și cea neliniară depășesc obiectivele didactice ale lucrării de față, indicăm pentru detalii suplimentare [2].

## 6.2. Funcția de gradul al doilea

### 6.2.1. Funcții polinomiale

**Definiția 6.2.** Funcția reală de variabilă reală definită prin relația

$$(6.8) \quad y = P(x) = a_0 x^n + a_1 x^{n-1} + \dots + a_{n-1} x + a_n, x \in R$$

în care  $n$  este un număr natural, și  $a_0 \neq 0, a_1, a_2, \dots, a_n \in R$ , se numește *funcție polinomială*, iar  $P(x)$  – *polinom*. Exponentul maximal  $n$  al variabilei independente definește *gradul* polinomului  $P$ , iar numerele  $a_i, i=0, 1, \dots, n$  sunt *coeficienții* polinomului.

Polinoamele pot fi considerate funcțiile reale cele mai simple, pentru calculul valorilor acestora fiind necesare operații matematice elementare.

Dintre polinoamele de diferite grade se remarcă prin simplitate dar și prin numeroasele aplicații, *polinomul de gradul al doilea*, adică polinomul definit prin

|       |                                                                    |
|-------|--------------------------------------------------------------------|
| (6.9) | $y = P(x) = ax^2 + bx + c, \quad a \neq 0, a, b, c \in R, x \in R$ |
|-------|--------------------------------------------------------------------|

**a. Funcția ”monom de gradul al doilea”**

O astfel de funcție este definită printr-o relație de forma  $y = ax^2, x \in R$  în care  $a$  este un număr real nenul. Graficul corespunzător se numește parabolă care trece prin origine și este simetrică față de axa Oy (fig.6.6).

Parabola este situată în semiplanul superior sau inferior, după cum  $a > 0$  respectiv  $a < 0$ .

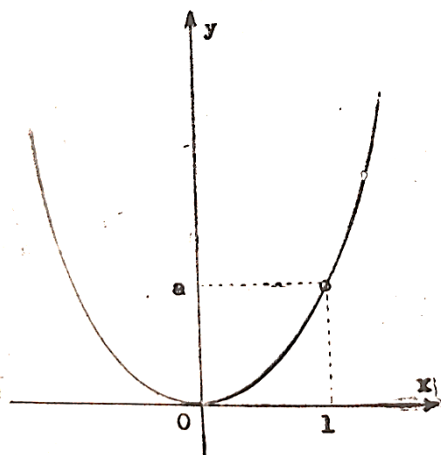


Fig. 6.6

Axa de simetrie a parabolei constituie prin definiție, *axa parabolei*, iar punctul de intersecție al parabolei cu axa sa se numește *vârful parabolei*. În cazul particular considerat, axa parabolei coincide cu axa Oy iar vârful parabolei, cu originea axelor de coordonate.

Are loc și reciproca: orice parabolă care are proprietățile menționate, poate fi interpretată ca graficul unei funcții – monom de gradul al doilea,  $y = ax^2, x \in R$ , această relație constituind prin definiție, “ecuația parabolei”.

**b. Funcția “trinom de gradul al doilea”**

O astfel de funcție se definește printr-o relație de forma (6.9).

Pentru construirea curbei reprezentative, se reduce ecuația (6.9) la forma simplă  $Y = AX^2$  cu ajutorul unei translații convenabile a axelor de coordonate. Formulele care definesc translația au forma generală:  $x = \alpha + X, y = \beta + Y$ ,  $X$  și  $Y$  reprezentând noile coordonate iar  $\alpha, \beta$  parametrii de translație (fig.6.7).

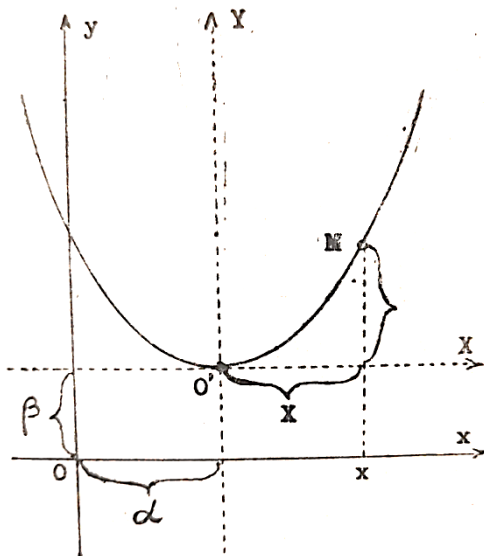


Fig. 6.7

În baza acestor formule, ecuația (6.9) în noul sistem de coordonate devine (după gruparea termenilor asemenea):

|        |                                                                      |
|--------|----------------------------------------------------------------------|
| (6.10) | $Y = aX^2 + (2a\alpha + \beta)X + (a\alpha^2 + b\alpha + c - \beta)$ |
|--------|----------------------------------------------------------------------|

Pentru ca această ecuație să se reducă la forma  $Y = AX^2$  este necesar ca atât coeficientul lui  $X^2$  cât și termenul liber să fie nuli. Impunând această condiție, vom obține un sistem de ecuații în necunoscutele  $\alpha, \beta$  astfel:  $2\alpha + \beta = 0, a\alpha^2 + b\alpha + c = 0$ . Prin rezolvarea acestui sistem găsim pentru  $\alpha, \beta$  valorile:

|        |                                                         |
|--------|---------------------------------------------------------|
| (6.11) | $\alpha = -\frac{b}{2a}, \beta = -\frac{b^2 - 4ac}{4a}$ |
|--------|---------------------------------------------------------|

Alegând pentru parametrii  $\alpha, \beta$  aceste valori, ecuația curbei devine  $Y = AX^2$ . Graficul ei în noul sistem de coordonate (adică în sistemul  $XO'Y$ ) este o parabolă care trece prin originea  $O'$  și are ca axă de simetrie axa  $O'Y$ .

(fig.6.7). În sistemul inițial de coordonate, ecuația axei parabolei va fi  $x = \alpha$ , iar coordonatele vârfului  $O'$  al parabolei vor fi  $x = \alpha, y = \beta$ , cu  $\alpha, \beta$  definite prin (6.11).

## 6.2.2. Polinoame de tip Lagrange

Polinoamele de tip Lagrange sunt folosite pentru aproximarea valorilor unei funcții, atunci când sunt cunoscute valorile acesteia  $f(x_1), f(x_2), \dots, f(x_n)$  în punctele  $x_1, x_2, \dots, x_n$ .

**6.2.2.1.** Ne vom raporta la interpolarea liniară descrisă în secțiunea 6.1 și vom considera relația (6.7). Grupând termenii care conțin ca factor pe  $y_1$  și pe cei care conțin ca factor pe  $y_2$  și ținând seama de semnificațiile acestor factori, anume  $y_1 = f(x_1), y_2 = f(x_2)$  vom obține formula echivalentă:

|        |                                                                           |
|--------|---------------------------------------------------------------------------|
| (6.12) | $y = \frac{x - x_2}{x_1 - x_2} f(x_1) + \frac{x - x_1}{x_2 - x_1} f(x_2)$ |
|--------|---------------------------------------------------------------------------|

Polinomul care intervine în membrul drept al acestei relații se numește *polinomul de interpolare al lui Lagrange, relativ la funcția  $f$  și nodurile  $x_1, x_2$* .

Să notăm cu  $l_1(x), l_2(x)$  coeficienții lui  $(x_1)$ , respectiv  $f(x_2)$  din expresia polinomului lui Lagrange, adică:

|        |                                                                          |
|--------|--------------------------------------------------------------------------|
| (6.13) | $l_1(x) = \frac{x - x_2}{x_1 - x_2}, l_2(x) = \frac{x - x_1}{x_2 - x_1}$ |
|--------|--------------------------------------------------------------------------|

Funcțiile  $l_1$  și  $l_2$  sunt polinoame de gradul întâi, care verifică condițiile:

|        |                                                          |
|--------|----------------------------------------------------------|
| (6.14) | $l_1(x_1) = 1, l_1(x_2) = 0, l_2(x_1) = 0, l_2(x_2) = 1$ |
|--------|----------------------------------------------------------|

Aceste polinoame se numesc *polinoame fundamentale de interpolare, pe nodurile  $x_1, x_2$* .

Cu ajutorul polinoamelor fundamentale, polinomul de interpolare al lui Lagrange poate fi scris sub forma mai simplă:

|        |                                   |
|--------|-----------------------------------|
| (6.15) | $y = l_1(x)f(x_1) + l_2(x)f(x_2)$ |
|--------|-----------------------------------|

Desigur ca formulele (6.12), (6.15) se pot extinde pentru un număr oarecare, finit, de noduri. Detalii se găsesc în [2].

Pentru cazul  $n=3$  interpolarea este dată cu ajutorul unei parabole (deci polinomul Lagrange are gradul 2):

|        |                                                                                                                                                                                                                                                            |
|--------|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| (6.16) | $y = l_1(x)f(x_1) + l_2(x)f(x_2) + l_3(x)f(x_3) \text{ unde}$ $l_1(x) = \frac{(x - x_2)(x - x_3)}{(x_1 - x_2)(x_1 - x_3)}, \quad l_2(x) = \frac{(x - x_1)(x - x_3)}{(x_2 - x_1)(x_2 - x_3)},$ $l_3(x) = \frac{(x - x_2)(x - x_1)}{(x_3 - x_2)(x_3 - x_1)}$ |
|--------|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|

### 6.2.2.2. Diferențe divizate

Să considerăm o funcție oarecare  $f: (a, b) \rightarrow R$  și  $x_1 < x_2$  două puncte oarecare distincte, în acest interval. Considerăm mai întâi creșterea  $\Delta x = x_2 - x_1$  pe care o înregistrează valoarea variabilei independente  $x$ , atunci când trece de la  $x_1$  la  $x_2$ , apoi creșterea corespunzătoare a valorii funcției  $f$  (variația sa):  $\Delta y = f(x_2) - f(x_1)$ .

**Definiția 6.3.** Prin *diferența divizată de ordinul întâi* a funcției  $f$ , pe punctele (nodurile)  $x_1, x_2$ , se înțelege raportul:

|        |                                                                                 |
|--------|---------------------------------------------------------------------------------|
| (6.17) | $[x_1, x_2; f] = \frac{\Delta y}{\Delta x} = \frac{f(x_2) - f(x_1)}{x_2 - x_1}$ |
|--------|---------------------------------------------------------------------------------|

Acest raport reprezintă viteza medie de creștere a valorilor funcției  $f$ , pe intervalul  $[x_1, x_2]$ .

În continuare se poate defini diferența divizată de ordinul al doilea a funcției  $f$ , iar pentru aceasta este nevoie de trei puncte distincte  $x_1 < x_2 < x_3$  din intervalul  $(a, b)$ .

Relativ la câte două puncte consecutive din cele trei considerate, se calculează diferențele divizate de ordinul întâi:  $[x_1, x_2; f]$ ,  $[x_2, x_3; f]$ . Procedând ca mai sus, se raportează creșterea pe care o înregistrează diferența divizată de ordinul întâi, când se trece de la sistemul de puncte  $\{x_1, x_2\}$  la sistemul  $\{x_2, x_3\}$ , la creșterea pe care o înregistrează valoarea variabilei independente  $x$  când trece de la  $x_1$  la  $x_2$ . Frația astfel obținută se va numi diferența divizată de ordinul al doilea a funcției  $f$  pe punctele  $x_1 < x_2 < x_3$  și se notează astfel:

|        |                                                                        |
|--------|------------------------------------------------------------------------|
| (6.18) | $[x_1, x_2, x_3; f] = \frac{[x_2, x_3; f] - [x_1, x_2; f]}{x_3 - x_1}$ |
|--------|------------------------------------------------------------------------|

În mod analog putem defini diferența divizată de ordinul 4 a funcției  $f$  pe punctele  $x_1 < x_2 < x_3 < x_4$ , anume are loc relația:

$$(6.19) \quad [x_1, x_2, x_3, x_4; f] = \frac{[x_2, x_3, x_4; f] - [x_1, x_2, x_3; f]}{x_4 - x_1}$$

Desigur că acest procedeu de construire a diferențelor finite poate continua până la ordine din ce în ce mai mari, ajungând până la diferența divizată de ordinul  $n$ ,  $n$  oricât de mare, pentru  $n$  puncte  $x_1 < x_2 < x_3 < \dots < x_n < x_{n+1}$  din intervalul  $(a, b)$ .

**Exemplu 6.2.** Se consideră funcția  $\rho_{apa}^T = f(T), T \in (19, 26)$ , care exprimă legea de variație a densității absolute -  $\rho \left( \frac{g}{ml} \right)$  în raport cu temperatura  $T$  ( $^{\circ}C$ ). Se cere să se calculeze diferența divizată de ordinul 7 a funcției  $\rho$  pe punctele  $T_1 = 19, T_2 = 20, \dots, T_8 = 26$  (8 puncte) utilizându-se în acest scop datele experimentale indicate în coloana a doua a tabelului 6.2 de mai jos. Aceste date au fost preluate din [17].

*Rezolvare.*

Calculăm mai întâi toate diferențele divizate de ordinul 1, pe câte 2 puncte consecutive din cele 8 puncte date; apoi toate diferențele divizate de ordinul 2, pe câte 3 puncte consecutive din cele 8, etc. Calculele sunt sistematizate în tabelul 6.2 de mai jos [2]

| $T(^{\circ}C)$ | $f(T)$   | Diferențe divizate de ordinul : |                    |   |   |   |   |   |
|----------------|----------|---------------------------------|--------------------|---|---|---|---|---|
|                |          | 1                               | 2                  | 3 | 4 | 5 | 6 | 7 |
| 19             | 0,998433 | $-202 \cdot 10^{-6}$            |                    |   |   |   |   |   |
| 20             | 0,998231 | $-212 \cdot 10^{-6}$            | $-5 \cdot 10^{-6}$ |   |   |   |   |   |
| 21             | 0,998019 | $-222 \cdot 10^{-6}$            | $-5 \cdot 10^{-6}$ | 0 |   |   |   |   |
| 22             | 0,997797 | $-232 \cdot 10^{-6}$            | $-5 \cdot 10^{-6}$ | 0 | 0 |   |   |   |
| 23             | 0,997565 | $-242 \cdot 10^{-6}$            | $-5 \cdot 10^{-6}$ | 0 | 0 | 0 |   |   |
| 24             | 0,997323 | $-252 \cdot 10^{-6}$            | $-5 \cdot 10^{-6}$ | 0 | 0 | 0 | 0 |   |
| 25             | 0,997071 | $-262 \cdot 10^{-6}$            | $-5 \cdot 10^{-6}$ | 0 | 0 |   |   |   |
| 26             | 0,996809 |                                 |                    |   |   |   |   |   |

Tabel 6.2



Din acest tabel se constată că începând de la ordinul 3 inclusiv, toate diferențele divizate sunt nule.

### 6.2.3. Formula lui Newton referitoare la polinomul de interpolare al lui Lagrange

Fie  $f$  o funcție  $f: (a, b) \rightarrow R$  și  $n$  puncte distincte din acest interval,  $x_1 < x_2 < \dots < x_n$ . Vom numi aceste puncte *noduri de interpolare*. Reluând problema interpolării de la începutul secțiunii 6.2.2, se cere să se determine un polinom de grad cât mai mic posibil, care să ia pe nodurile date,  $x_1, x_2, \dots, x_n$  aceleași valori ca și funcția  $f$ . După cum am arătat mai sus, Lagrange a propus un polinom de forma (6.12) pentru acest scop.

Pentru rezolvarea aceleiași probleme, Newton a propus polinomul:

|        |                                                                                                                                                                                                                            |
|--------|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| (6.20) | $  \begin{aligned}  N(x) = & f(x_1) + (x - x_1)[x_1, x_2; f] \\  & + (x - x_1)(x - x_2)[x_1, x_2, x_3; f] + \dots \\  & + (x - x_1)(x - x_2) \dots (x \\  & - x_{n-1})[x_1, x_2, \dots, x_{n-1}, x_n; f]  \end{aligned}  $ |
|--------|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|

Polinomul de mai sus are evident gradul  $n-1$ . Se verifică cu ușurință că  $N$  ia pe nodurile  $x_1, x_2, \dots, x_n$  aceleași valori ca și  $f$ , adică [8]:

|        |                                                            |
|--------|------------------------------------------------------------|
| (6.21) | $N(x_1) = f(x_1), N(x_2) = f(x_2), \dots, N(x_n) = f(x_n)$ |
|--------|------------------------------------------------------------|

Se pune în mod firesc întrebarea ce legătură există între polinoamele  $L$  și  $N$ , definite prin formulele (6.12), respectiv (6.20) ?

Constatăm întâi că ambele sunt de grad cel mult  $n-1$  și îndeplinesc aceleași condiții de interpolare. În consecință, diferența lor este un polinom de grad cel mult  $n-1$ , care se anulează pe punctele distincte  $x_1, x_2, \dots, x_n$  (în număr mai mare decât gradul polinomului). În consecință obținem identitatea  $L(x) \equiv N(x)$ .

**Exemplu 6.3.** Să se determine polinomul de grad minim, care interpoalează funcția  $\rho = f(T)$ , considerată în exemplul 6.2 de mai sus, pe nodurile  $T_1 = 19, T_2 = 20, \dots, T_8 = 26$ . Apoi, cu ajutorul polinomului respectiv, să se calculeze valoarea aproximativă a densității (absolute) a apei, corespunzătoare temperaturii  $T=21.7^\circ\text{C}$ .

*Rezolvare.* Aplicăm formula lui Newton (6.20), pentru  $n=8$ , înlocuind diferențele divizate aferente cu valorile corespunzătoare din tabelul 6.2. După toate înlocuirile obținem polinomul:

$$N(T) = 0.998433 - 202 \cdot 10^{-6}(T - 19) - 5 \cdot 10^{-6}(T - 19)(T - 20) \\ = 10^{-6}(1000371 - 7T - 5T^2)$$

Gradul acestui polinom este 2 în loc de  $8-1=7$ , deoarece toate diferențele divizate de ordine mai mari decât 2, din tabel, sunt nule.

Apoi înlocuim în expresia polinomului  $N$ , pe  $T$  cu valoarea indicată, 21.7 și efectuăm calculele necesare. Obținem valoarea aproximativă  $N(21.7) = 0.997865$

### 6.3. Probleme propuse

**6.3.1.** Pentru o funcție oarecare  $f$ ,  $f: (a, b) \rightarrow R$  pentru care se dă tabelul valorilor în trei noduri:

|                      |     |   |   |
|----------------------|-----|---|---|
| <b>x<sub>i</sub></b> | -1  | 0 | 1 |
| <b>f<sub>i</sub></b> | 1/2 | 1 | 2 |

Se cere să se construiască polinomul de interpolare Newton.

**6.3.2.** Pentru o funcție oarecare  $f$ ,  $f: (a, b) \rightarrow R$  pentru care se dă tabelul valorilor în trei noduri:

|                      |    |   |   |
|----------------------|----|---|---|
| <b>x<sub>i</sub></b> | -1 | 1 | 2 |
| <b>f<sub>i</sub></b> | 2  | 1 | 1 |

Se cere să se construiască polinomul de interpolare Lagrange asociat.

**6.3.3.** Se dă tabelul de valori asociat unei funcții oarecare  $f$ :

|                      |   |   |   |   |
|----------------------|---|---|---|---|
| <b>x<sub>i</sub></b> | 0 | 1 | 2 | 3 |
| <b>f<sub>i</sub></b> | 2 | 1 | 2 | 3 |

Construiți polinomul care interpoalează aceste puncte prin metodele Lagrange și Newton.

## TEMA 7. FUNCȚII DE TIP EXPONENȚIAL ȘI LOGARITMIC. APLICAȚII

### 7.1. Funcția exponențială

#### 7.1.1. Introducere

Presupunem cunoscută operația de ridicare la putere oarecare a numerelor reale și pozitive. Paralel cu “funcțiile putere” se definesc funcțiile de tip exponențial.

**Definiția 7.1.** Fie  $a$  un număr real, pozitiv și diferit de 1, dat. Prin *funcție exponențială în baza  $a$*  înțelegem funcția definită prin formula

|       |                                    |
|-------|------------------------------------|
| (7.1) | $y = f(x) = a^x, x \in \mathbb{R}$ |
|-------|------------------------------------|

Conform acestei definiții, fiecărei baze date  $a$  îi corespunde o funcție exponențială. Întrucât baza poate fi aleasă într-o infinitate de moduri, și mulțimea funcțiilor exponențiale va fi infinită.

**Observația 7.1.** Funcțiile exponențiale se deosebesc de funcțiile putere prin aceea că variabila independentă figurează la exponent, ceea ce justifică de altfel și denumirea.

În studiul funcțiilor exponențiale se deosebesc două cazuri, după cum baza este supraunitară sau subunitară.

**Cazul i)** Baza este supraunitară, adică  $a > 1$ . Atunci au loc următoarele proprietăți.

**P1.**  $f(0) = 1, f(1) = a$ . Prima egalitate înseamnă că punctul de intersecție al graficului cu axa Oy are ordonata  $y=1$ , și a doua semnifică faptul că graficul trece și prin punctul de coordonate  $x = 1, y = a$

**P2.** Funcția este continuă și crescătoare pe întregul ei interval de definiție, ceea ce din punct de vedere geometric înseamnă că graficul corespunzător este o curbă continuă, ascendentă. Acest lucru se observă din figura 7.1.

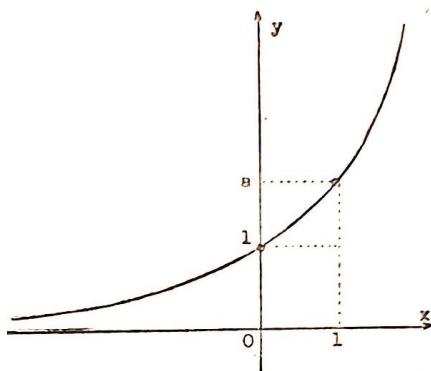


Fig. 7.1

**P3.** Au loc egalitățile asimptotice:  $\lim_{x \rightarrow \infty} f(x) = a^\infty = \infty$ ,  $\lim_{x \rightarrow -\infty} f(x) = a^{-\infty} = \frac{1}{a^\infty} = \frac{1}{\infty} = 0$ .

Aceasta semnifică faptul că graficul funcției  $f$  nu este “plafonat”, și pe de altă parte dreapta de ecuație  $y=0$  constituie pentru grafic o asimptotă orizontală în direcția negativă a respectivei axe (fig. 7.1).

**Consecința 7.1.** Din faptul că funcția  $f$  este crescătoare pe întreg intervalul ei de definiție (în ipoteza  $a > 1$ ) și din faptul că limita ei către  $-\infty$  este zero, rezultă inegalitatea  $f(x) > 0 \forall x \in R$

Important de menționat că funcția *nu se anulează* pentru nici o valoare reală a variabilei independente.

**Cazul ii).** Baza este subunitară, adică  $a < 1$ . În acest caz, construcția graficului funcției poate fi redusă la cazul precedent, scriind baza a sub forma  $a = \frac{1}{b}$ ,  $b > 1$  și atunci vom avea formula de definiție a funcției  $f$  sub forma echivalentă:

|       |                              |
|-------|------------------------------|
| (7.2) | $y = f(x) = b^{-x}, x \in R$ |
|-------|------------------------------|

Ținând seama de această reprezentare, vom construi întâi graficul funcției auxiliare  $y = \varphi(\xi) = b^\xi, \xi \in R$  într-un plan de coordonate carteziene ortogonale  $\xi Oy$ , iar apoi efectuăm în planul respectiv, schimbarea de variabilă (schimbarea de notație)  $\xi = -x$ . Prin această schimbare, axa  $O\xi$  se transformă într-o axă  $Ox$  orientată invers. Apoi pentru a aduce axa noii variabile  $x$  în poziția sa normală, se efectuează o rotație de  $180^\circ$  a planului  $xOy$  în jurul axei  $Oy$ , ceea ce echivalează, în planul  $\xi Oy$ , cu o simetrie în jurul axei  $Oy$ . Se obține astfel graficul din figura 7.2, simetric cu cel din fig. 7.1 în raport cu axa  $Oy$ .

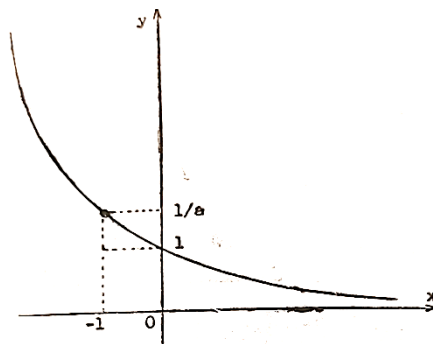


Fig. 7.2.

### 7.1.2. Monoame exponențiale

În aplicațiile teoretice și practice, funcțiile exponențiale intervin de cele mai multe ori prin polinoame exponențiale, varianta cea mai simplă a acestora constituind-o monoamele exponențiale. Acestea sunt interpretate ca funcții de variabilă independentă  $x$ , și se definesc prin relații de forma:

$$(7.3) \quad y = F(x) = A \cdot a^{\pm kx}, x \in R$$

în care  $a$  reprezintă un număr real și pozitiv, diferit de 1, numit *bază*,  $\pm k$  ( $k > 0$ ) reprezintă un număr real (pozitiv sau negativ) numit *coeficient exponențial*, iar  $A$  un număr real nenul, numit *factor preexponențial*.

În studiul acestor funcții vom putea presupune totdeauna că  $a > 1$ , întrucât în caz contrar ( $a < 1$ ), scriind pe  $a$  sub forma  $\frac{1}{b}$ ,  $b > 1$ , s-ar obține pentru (7.3) expresia  $y = A \cdot b^{\mp kx}$ ,  $b > 1$ . Pentru aplicațiile pe care le vom prezenta în continuare, vom mai presupune de asemenea  $A > 0$ .

În aceste ipoteze, pentru caracterizarea graficului unei funcții de tip monom exponențial vom distinge două cazuri, după cum coeficientul exponențial  $\pm k$  este pozitiv sau negativ.

*Cazul i)* Coeficientul exponențial este pozitiv. În acest caz formula definitorie a funcției exponențiale este

$$(7.4) \quad y = F_+(x) = A \cdot a^{+kx}, x \in R, a > 1, K > 0, A > 0$$

Notând  $a^k = b$  și ținând cont de proprietățile P1 și P2 cu  $a > 1$ , rezultă că  $b > 1$ , iar relația de mai sus devine:

$$y = F_+(x) = A \cdot b^x, x \in R, b > 1, A > 0$$

Graficul într-o astfel de situație este similar celui din fig.6.1. [2]

*Cazul ii).* Coeficientul exponențial este negativ. În acest caz formula definitorie a funcției exponențiale este :

|       |                                                              |
|-------|--------------------------------------------------------------|
| (7.5) | $y = F_-(x) = A \cdot a^{-kx}, x \in R, a > 1, k > 0, A > 0$ |
|-------|--------------------------------------------------------------|

Graficul în acest caz va avea o formă similară celui din fig.7.2.

**Observația 7.2.** Să presupunem acum că se variază valoarea parametrului exponențial  $k$ , menținând ceilalți parametri ( $a$  și  $A$ ) constanți. În această circumstanță, oricărei valori atribuite lui  $k$  îi va corespunde o curbă exponențială de forma celei trasate în fig.7.2. Se constată cu ușurință următoarea “proprietate de convergență” a familiei de curbe (7.5).

**Proprietatea 7.1.** Dacă  $k$  variază, crescând către  $+\infty$ , atunci curbele corespunzătoare “converg” pe intervalul  $(0, +\infty)$ , monoton către dreapta suport a axei  $Ox$ .

### 7.1.3. Aplicație a monomului exponențial cu coeficient exponențial pozitiv

Creșterea numerică a unor populații biologice (bacteriene, microbiene, etc) se conformează în general legii malthusiene [2]. Conform acestei legi, viteza de creștere a populației, la un moment curent  $t$ , este direct proporțională cu numărul de indivizi existenți în cadrul populației la momentul respectiv. Expresia matematică a acestei legi o constituie ecuația diferențială  $\frac{dx}{dt} = kx$ , în care  $x=x(t)$  reprezintă  $v$ =biomasa culturii bacteriene la momentul  $t$ ,  $dx/dt$  viteza de creștere la momentul respectiv, iar  $k$  este o constantă pozitivă numită “*constantă de viteză*”. Prin integrarea ecuației diferențiale (detalii despre rezolvarea ecuațiilor diferențiale se găsesc în tema dedicată acestui subiect), în condiția inițială  $x(0) = x_0$  ( $x_0 > 0$ ) se obține relația

|       |                                  |
|-------|----------------------------------|
| (7.6) | $x = x_0 \cdot e^{kt}, t \geq 0$ |
|-------|----------------------------------|

în care  $e=2.718\dots$  reprezintă baza logaritmilor naturali.

Graficul acestei funcții este o curbă exponențială cu creștere nelimitată (adică fără “plafon”) de forma celei din fig.7.1.

#### 7.1.4. Aplicații ale monomului exponențial cu coeficient exponențial negativ

Ne vom referi doar la cinetica reacțiilor macromoleculare de ordinul 1, ireversibile.

Fie  $A \rightarrow$  produși de reacție, o reacție monomoleculară. Conform variantei cinetice a “legii acțiunii maselor”, viteza de transformare a substanței A la un moment curent,  $t$ , este, în absența unor eventuali catalizatori, direct proporțională cu o anumită putere a măsurii cantității de substanță A rămasă netransformată până la momentul respectiv, în cadrul sistemului considerat.

Matematic, această lege se exprimă, în cazul de față, prin ecuația diferențială [2]:

|       |                             |
|-------|-----------------------------|
| (7.7) | $-\frac{d[A]}{dt} = k[A]^m$ |
|-------|-----------------------------|

În această relație  $[A] = f(t)$  reprezintă măsura în moli a cantității de substanță A existente netransformată la momentul  $t$ , iar  $k$  – o constantă, denumită *constantă de viteză*, care depinde numai de natura chimică a substanței A și de temperatură. Exponentul  $m$  constituie ordinul reacției în cauză.

Presupunând, pentru fixarea ideilor,  $m=1$ , prin integrarea ecuației diferențiale, în condiția inițială  $f(0) = [A]_0$ , se obține relația exponențială

|       |                                       |
|-------|---------------------------------------|
| (7.8) | $[A] = [A]_0 \cdot e^{-kt}, t \geq 0$ |
|-------|---------------------------------------|

unde  $[A]_0$  reprezintă măsura în moli a cantității de substanță A existente la momentul inițial  $t=0$  (momentul începerii reacției).

Dacă reacția se desfășoară în cadrul unei soluții, se convine să se raporteze cantitățile menționate la 1litru de soluție. Atunci  $[A]_0$ ,  $[A]$  vor reprezenta concentrațiile molare ale substanței A la momentul  $t=0$ , respectiv la momentul  $t$ .

**Observația 7.3.** Din relația care exprimă soluția ecuației diferențiale, se constată că mărimea  $[A]$  descrește, tinzând către zero, atunci când valoarea variabilei temporale  $t$  tinde la infinit.

În [2] este abordat modul cum apare curba exponențială, ascendentă sau descendentă, într-o categorie de aplicații specifice chimiei, cum ar fi

variația coeficientului de activitate al unei specii de ioni într-o soluție de electroliți, funcție de tăria ionică a soluției.

### 7.1.5. Curbe exponențiale ascendente, “cu plafon”

În strânsă legătură cu funcția  $y = f(x) = Ae^{-kx}$ ,  $x \geq 0$  se definește funcția

|       |                                                  |
|-------|--------------------------------------------------|
| (7.9) | $y = F(x) = A - f(x) = A(1 - e^{-kx}), x \geq 0$ |
|-------|--------------------------------------------------|

în care  $A$  și  $k$  sunt constante pozitive date. Se constată cu ușurință că graficul acestei funcții este simetric cu graficul funcției inițiale,  $Ae^{-kx}$ , axa de simetrie fiind dreapta de ecuație  $y = \frac{A}{2}$ .

Rezultă de aici un procedeu simplu de construcție a graficului funcției  $F$ , pe baza graficului funcției  $f$  (Fig.7.3).

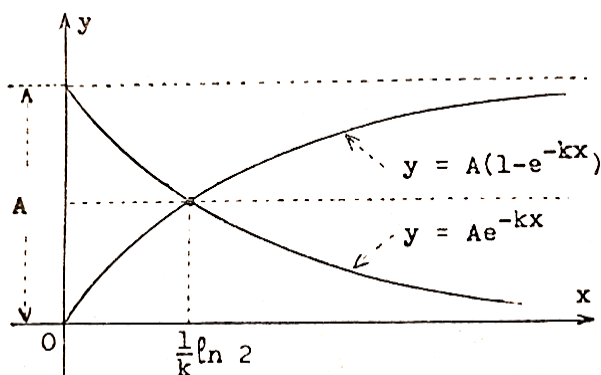


Fig. 7.3

Aplicând acest procedeu, se obține o curbă ascendentă, care admite ca asimptotă în direcția pozitivă a axei  $Ox$ , dreapta de ecuație  $y=A$ . O astfel de curbă se spune că este “cu creștere limitată”, sau mai simplu, “cu plafon”.

## 7.2. Funcția logaritmică

### 7.2.1. Logaritmi. Definiție, reguli de calcul

Fie  $a$  un număr real pozitiv diferit de unitate, iar  $x_0$  un număr pozitiv oarecare, dat.



**Definiția 7.2.** Prin logaritmul numărului  $x_0$  în baza  $a$  se înțelege un număr (real)  $y_0$  astfel încât  $a^{y_0} = x_0$ . Numărul respectiv  $y_0$  se notează simbolic prin  $\log_a x_0$

**Exemplu.**  $\log_2 32 = 5$ , deoarece  $2^5 = 32$ .  $\log_{10} 0.01 = 2$ , deoarece  $10^{-2} = 0.01$ .

Din definiția precedentă rezultă că numărul  $y_0 = \log_a x_0$  reprezintă rădăcina ecuației exponențiale  $a^y = x_0$ , în necunoscuta  $y$ .

Această rădăcină se poate determina grafic trasând graficul funcției exponențiale  $x = f^{-1}(y) = a^y, y \in (-\infty, +\infty)$ . În figura 7.4 este considerat cazul  $a > 1$ .

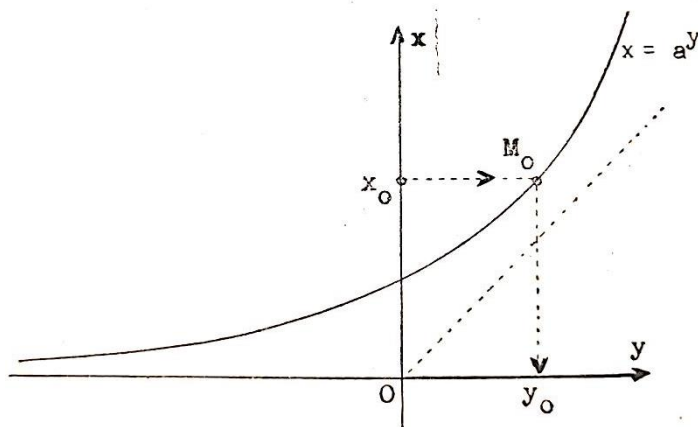


Fig. 7.4

Existența și unicitatea numărului  $y_0 = \log_a x_0$  rezultă din continuitatea precum și din următoarele proprietăți ale funcției exponențiale.

**Proprietatea 7.2.** Dacă  $a > 1$  (respectiv  $a < 1$ ) atunci funcția exponențială  $f^{-1}$  este strict crescătoare (respectiv descrescătoare) și verifică egalitățile asimptotice  $\lim_{y \rightarrow -\infty} f^{-1}(y) = 0$ ,  $\lim_{y \rightarrow +\infty} f^{-1}(y) = +\infty$ , respectiv  $\lim_{y \rightarrow -\infty} f^{-1}(y) = \infty$ ,  $\lim_{y \rightarrow +\infty} f^{-1}(y) = 0$

**Proprietatea 7.3.** Mai jos urmează câteva reguli fundamentale de calcul.

Oricare ar fi numerele reale pozitive  $M, N, P$  au loc egalitățile:

1.  $\log_a (M \cdot N \cdot P) = \log_a M + \log_a N + \log_a P$ ;

2.  $\log_a \left(\frac{M}{N}\right) = \log_a M - \log_a N$ ;
3.  $\log_a M^r = r \cdot \log_a M, \forall r \in R$

### 7.2.2. Funcția logaritmică

**Definiția 7.3.** Funcția logaritmică în baza  $a$  ( $a > 0, a \neq 1$ ) se definește prin formula

|        |                                           |
|--------|-------------------------------------------|
| (7.10) | $y = f(x) = \log_a x, x \in (0, +\infty)$ |
|--------|-------------------------------------------|

Pentru a obține graficul acestei funcții, se consideră relația echivalentă  $x = a^y, y \in R$ . Se reprezintă grafic această funcție într-un plan raportat la un sistem de coordonate carteziane ortogonale  $xOy$  (fig.7.4) și apoi se efectuează o rotație a planului, de  $180^\circ$ , în jurul primei bisectoare, pentru a se aduce axele de coordonate în poziția normală. Dacă presupunem (pentru fixarea ideilor) că baza  $a$  este supraunitară,  $a > 1$ , se va obține graficul din fig. 7.5.

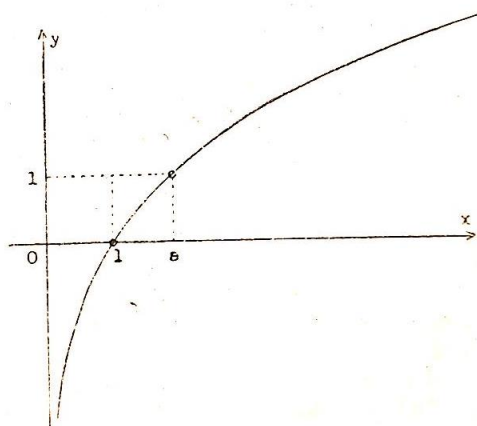


Fig. 7.5

Din acest grafic constatăm vizual următoarele proprietăți.

- 1)  $\log_a 1 = 0, \log_a a = 1$ ;
- 2) Funcția este continuă și descrescătoare pe întregul ei interval de definiție,  $(0, +\infty)$ . Anume, este puternic crescătoare pe subintervalul  $(0, 1)$  și lent crescătoare pe subintervalul  $(1, +\infty)$ .
- 3) Are loc egalitatea asimptotică  $\lim_{x \rightarrow \infty} \log_a x = +\infty$ ;

**Consecința 7.1.** Din proprietățile 1) și 2) rezultă că dacă  $a > 1$ , atunci funcția logaritmică corespunzătoare verifică următoarele inegalități:

- i)  $\log_a x < 0 \forall 0 < x < 1$  ;
- ii)  $0 < \log_a x < 1 \forall 1 < x < a$  ;
- iii)  $\log_a x > 1 \forall x > a$ .

Pe consecința 2 se bazează procedeul de reducere a calculului logaritmilor zecimali, la acela al “caracteristicilor” și “mantiselor” acestor logaritmi. Detalii se pot găsi în [2, 12]

### 7.2.3. Sisteme de logaritmi. Schimbarea bazei logaritmilor

În aplicații teoretice referitoare la studiul fenomenelor naturii se preferă să se opereze cu logaritmi “în baza e”, avându-se în vedere simplitatea formulei de derivare a funcției logaritmice corespunzătoare.

Într-adevăr, se știe că derivata unei funcții date,  $y = f(x)$ ,  $x \in (\alpha, \beta)$ , într-un punct  $x_0$  al intervalului ei de definiție, este limita raportului  $\lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{\Delta y}{\Delta x}$ . Aici  $\Delta x$  reprezintă o “creștere” arbitrară (suficient de mică în modul) a valorii  $x_0$  (a variabilei independente  $x$ ), iar  $\Delta y = f(x_0 + \Delta x) - f(x_0)$  “creșterea” corespunzătoare a valorii  $y_0 = f(x_0)$  a funcției  $f$ .

În cazul funcției logaritmice cu baza  $a$ , adică în cazul ecuației  $y = \log_a x$ ,  $x \in (0, +\infty)$ , aplicând regulile de calcul din Prop 7.3, pentru raportul  $\frac{\Delta y}{\Delta x}$  se obține următoarea formă restrânsă [2]:

|        |                                                                                                     |
|--------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------|
| (7.11) | $\frac{\Delta y}{\Delta x} = \log_a \left( 1 + \frac{1}{x_0} \Delta x \right)^{\frac{1}{\Delta x}}$ |
|--------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------|

Apoi trecând la limită și ținând seama de formulele asimptotice [12,14] se obține pentru derivata funcției considerate, expresia

|        |                                    |
|--------|------------------------------------|
| (7.12) | $f'(x_0) = \frac{1}{x_0} \log_a e$ |
|--------|------------------------------------|

în care e reprezintă numărul real menționat mai sus. Pentru ca această expresie să fie cât mai simplă, se pune condiția  $\log_a e = 1$  , ceea ce implică  $a=e$ .

Logaritmii în baza  $e$  se numesc *logaritmi naturali* și se notează prin simbolul  $\ln x$ . Ei sunt destul de folosiți în practică, dar la fel de căutați în calculele numerice sunt și *logaritmii în baza zece*. Ei se numesc logaritmi zecimali și se notează  $\lg x$ , în această situație avem  $a=10$ .

Apare astfel întrebarea: ce se întâmplă dacă în calcule avem nevoie să trecem de la o bază la alta în calculele cu logaritmi? Acest lucru a fost rezolvat [12] și avem de fapt un set de proprietăți algebrice de bază în calculul cu logaritmi. Le sintetizăm în următoarea:

**Proprietatea 7.4.** Dacă  $f: R \rightarrow (0, +\infty)$  este o funcție exponențială, atunci notând  $f^{-1}(y) = \log_a y$  obținem inversa funcției exponențiale, anume funcția logaritmică:  $\log_a: (0, +\infty) \rightarrow R$ . Au loc următoarele relații:

- a)  $a^{\log_a x} = x, \forall x > 0$ ;
- b)  $\log_a a^x = x, \forall x \in R$ ;
- c)  $\log_a a = 1, \log_a 1 = 0$
- d)  $\log_a (x \cdot y) = \log_a x + \log_a y$ ;
- e)  $\log_a \frac{x}{y} = \log_a x - \log_a y$ ;
- f)  $\log_a \frac{1}{x} = -\log_a x$ ;
- g)  $\log_a x = \frac{\log_b x}{\log_b a}$ .

### 7.3. Problema fundamentală a controlului biologic cantitativ al medicamentelor

Metodele biologice de control al medicamentelor constau de regulă în compararea acestora cu “preparate standard” de concentrație și activitate biologică cunoscută, compararea efectuându-se din punct de vedere al acțiunilor pe care le exercită asupra unor sisteme biologice precizate.

Fie T medicamentul de testat (controlat) și S preparatul standard (etalon) utilizat în comparare. Pentru simplitate, se va presupune ca atât T cât și S sunt soluții pure de o aceeași substanță activă A, dizolvată într-un același solvent D. Fie  $c_s$  concentrația (cunoscută) a substanței A în cadrul soluției S iar  $c_T$  concentrația (necunoscută) a aceleiași substanțe A în cadrul soluției T. Problema fundamentală în cadrul controlului biologic al medicamentului T, constă în determinarea raportului  $r = \frac{c_T}{c_s}$ , pe baza unor teste biologice adecvate. Acest raport, denumit “coeficient de activitate” [2] exprimă fracțiunea din concentrația soluției etalon pe care o reprezintă concentrația soluției de testat. Astfel, cunoașterea coeficientului  $r$  este echivalentă cu cunoașterea concentrației  $c_T$  a soluției de testat, întrucât din relația de definiție rezultă  $c_T = r \cdot c_s$  și reciproc. Determinarea experimentală a valorii menționate se bazează pe un criteriu important [2].

**Criteriu de echivalență.** Fie  $v_T$  (ml) o doză de soluție T, iar  $v_S$  (ml) o doză de soluție S. Condiția necesară și suficientă ca aceste doze să fie echivalente din punct de vedere al efectului biologic (adică echiactive) este ca ele să fie invers proporționale cu concentrațiile soluțiilor din care provin, adică să aibă loc relația

|        |                     |
|--------|---------------------|
| (7.13) | $c_T v_T = c_S v_S$ |
|--------|---------------------|

Există și o consecință imediată a acestui criteriu important.

**Consecință practică.** Din enunțul criteriului de mai sus reiese ușor că raportul  $r = \frac{c_T}{c_S}$  al concentrațiilor a două soluții asemenea T și S este egal cu inversul raportului a două doze *echiactive*  $v_T$  ml de soluție T, respectiv  $v_S$  ml de soluție S, adică

|        |                                     |
|--------|-------------------------------------|
| (7.14) | $\frac{c_T}{c_S} = \frac{v_S}{v_T}$ |
|--------|-------------------------------------|

Pornind de la acest criteriu de bază, se pot elabora scheme de prelucrare și interpretare matematică a rezultatelor pentru diferite testări biologice, în cazul în care răspunsul este de natură cantitativă. Trebuie menționat faptul că răspunsul biologic depinde liniar de logaritmul cantității de substanță activă administrate. Detalii specifice suplimentare, pot fi găsite în [2].

## 7.4. Aplicații în chimie. Câteva exemple rezolvate

**7.4.1.** Etanul se descompune termic după ecuația:  $C_2H_6 \rightarrow C_2H_4 + H_2$ , urmând o cinetică de ordinul întâi.

La început vasul de reacție conține etan și hidrogen, ultimul fiind în proporție de 10% în volume. După 1.5h de la începutul reacției se observă că volumul inițial crește de 1.5 ori la presiune constantă. Să se determine timpul de înjumătățire, constanta de viteză și compoziția amestecului la 3h de la începutul reacției.

*Rezolvare.* Pentru calculul constantei de viteză de ordinul întâi se pornește de la ecuația integrată pentru ordinul întâi [10, F.6.12] :

|  |                                    |
|--|------------------------------------|
|  | $k_1 t = 2.303 \log \frac{a}{a-x}$ |
|--|------------------------------------|

În cele ce urmează vom folosi notația “log” pentru logaritmul zecimal, și nu lg, cum a fost notat anterior acesta.

Raportul  $\frac{a}{a-x}$  se va exprima în funcție de volum, reacția desfășurându-se la presiune constantă. Indiferent că este vorba sau nu de un gaz inert (în cazul nostru 10% din volumul la timpul zero este ocupat de către unul din produșii de reacție) raportul  $\frac{a}{a-x}$  se poate scrie în funcție de volum. Acest lucru se înțelege bine din următoarea schemă [10 P.6.1.10]:

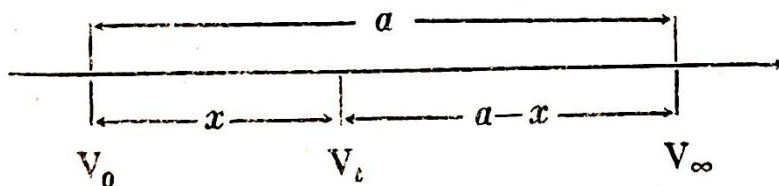


Fig. 7.6

Mărima  $V_\infty - V_0$  este proporțională cu concentrația inițială a reactantului, iar mărimea  $V_\infty - V_t$  cu concentrația de reactant rămasă netransformată la timpul  $t$ . Atunci:

|  |                                                            |
|--|------------------------------------------------------------|
|  | $k_1 t = 2.303 \log \frac{V_\infty - V_0}{V_\infty - V_t}$ |
|--|------------------------------------------------------------|

Conform stoechiometriei de reacție avem [10] :  $V_\infty = 2V_{etan}^0 + V_{inert}^0 = 0.9 \cdot V \cdot 2 + 0.1 \cdot V_0 = 1.9 \cdot V_0$ . Înlocuind vom obține:

|  |                                                                                                                                                                                            |
|--|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
|  | $  \begin{aligned}  k_1 &= \frac{2.303}{t} \log \frac{1.9V_0 - V_0}{1.9V_0 - 1.5V_0} \\  &= \frac{2.303}{90} \log \frac{0.9}{0.4} = 9.01 \times 10^{-3} \text{ min}^{-1}  \end{aligned}  $ |
|--|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|

Apoi timpul de înjumătățire se calculează cu relația cunoscută:

|  |                                                  |
|--|--------------------------------------------------|
|  | $t_{1/2} = \frac{\ln 2}{k_1} = 76.9 \text{ min}$ |
|--|--------------------------------------------------|

În continuare, pentru calculul compoziției amestecului de gaze la 3 ore de la începutul reacției, trebuie calculat volumul atins la acest timp:

$$\log \frac{V_{\infty} - V_0}{V_{\infty} - V_t} = \log \frac{0.9V_0}{y} = \frac{k_1 t}{2.303} = \frac{9.01 \cdot 10^{-3} \cdot 180}{2.303} = 0.7042$$

$$\log \frac{0.9V_0}{y} = 0.7042; \frac{0.9V_0}{y} = 5.061; y = V_{\infty} - V_t = 0.178V_0; V_t = 1.722V_0$$

Mărimea  $y$  este volumul de etan nereacționat la acest timp. Conform stoechiometriei, surplusul de volum față de  $V_0$  este tocmai volumul ocupat de etan și este de  $0.722V_0$ . Volumul ocupat de hidrogen este  $0.722V_0 + 0.1V_0 = 0.822V_0$ .

Atunci compoziția % de volum a amestecului este:

$$V_{etan} \% = 100 \cdot \frac{0.178V_0}{1.722V_0} = 10.33\% \quad ; \quad V_{C_2H_4} \% = 100 \cdot \frac{0.722}{1.722} = 42\%; V_{H_2} \% = 100 \cdot \frac{0.822}{1.722} = 47.66\%$$

**7.4.2.** Reacția dintre hidroperoxizi organici și tetranitrometan [10] formează ionul nitroform  $C(NO_2)_4$  – colorat. Lucrând în exces de hidroperoxid ( $2.43 \times 10^{-3} M$ ) și tetranitrometan  $10^{-5}$  s-au obținut următoarele valori ale extincțiilor în funcție de timp [13 pg444]:

|        |   |       |       |       |       |          |
|--------|---|-------|-------|-------|-------|----------|
| t, min | 0 | 4.11  | 39.05 | 104.9 | 147.9 | $\infty$ |
| E      | 0 | 0.034 | 0.239 | 0.431 | 0.489 | 0.559    |

Să se determine valoarea concentrației pseudo-monomoleculare.

*Rezolvare.* Toate speciile reactante sunt transparente. Dintre produșii de reacție doar ionul nitroform  $C(NO_2)_3$  este colorat. De aceea, extincția soluției este proporțională cu concentrația acestuia; extincția este deci proporțională cu  $x$ .

Enunțul problemei indică ordinul întâi în raport cu tetranitrometanul. În exces de peroxid, se va putea determina constanta de viteză pseudo-monomoleculară fie prin procedee grafice, fie prin calcul, utilizând ecuația integrată pentru ordinul întâi:

$$\log \frac{a}{a-x} = \frac{k}{2.303} t$$

Raportul  $a/(a-x)$  se poate exprima în funcție de extincție:

$$\frac{a}{a-x} = \frac{E_{\infty} - E_0}{E_{\infty} - E_t}$$

Atunci:

$$\log \frac{E_{\infty} - E_0}{E_{\infty} - E_t} = \frac{k}{2.303} t$$

Dacă se reprezintă grafic  $\log(E_{\infty}-E_t)$  funcție de timp se obține o dreaptă din a cărei pantă se poate calcula constanta de viteză  $k$ . Dreapta este prezentată mai jos, în fig. 7.7

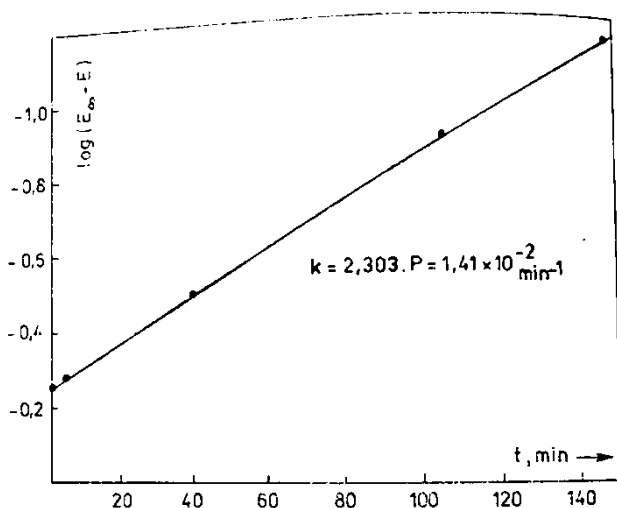


Fig.7.7

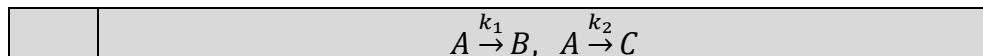
Valoarea constantei poate fi obținută prin calcul, alegând câteva valori și făcând media rezultatelor obținute. Iată câteva dintre ele:

|  |                                                                                           |
|--|-------------------------------------------------------------------------------------------|
|  | $k = \frac{2.303}{4.11} \log \frac{0.559}{0.525} = 1.53 \times 10^{-2} \text{ min}^{-1}$  |
|  | $k = \frac{2.303}{39.05} \log \frac{0.559}{0.320} = 1.43 \times 10^{-2} \text{ min}^{-1}$ |
|  | $k = \frac{2.303}{104.9} \log \frac{0.559}{0.128} = 1.41 \times 10^{-2} \text{ min}^{-1}$ |
|  | $k = \frac{2.303}{147.9} \log \frac{0.559}{0.070} = 1.40 \times 10^{-2} \text{ min}^{-1}$ |



Valoarea medie a constantei este  $1.44 \times 10^{-2} \text{ min}^{-1}$ . Din panta reprezentării liniare s-a obținut valoarea de  $1.41 \times 10^{-2} \text{ min}^{-1}$ .

**7.4.3.** Un compus se descompune monomolecular formând doi parametri:



Factorii de frecvență Arrhenius pentru cele două căi [6,7] sunt  $10^{11}$  și respectiv  $10^{12}$  s. Energiile de activare ale celor două procese sunt  $E_1=14.8$  kcal și  $E_2=16.7$  kcal. Să se calculeze temperatura la care cei doi produși se formează în cantități egale și la care raportul este de 10:1.

*Rezolvare.* Se știe că raportul maselor de produși sau al concentrațiilor acestora este egal cu raportul constantelor de viteză pentru reacții de ordinul întâi, anume

|  |                                                                                                |
|--|------------------------------------------------------------------------------------------------|
|  | $\frac{[B]}{[C]} = \frac{k_1}{k_2} = \frac{A_1}{A_2} \exp \left[ \frac{E_2 - E_1}{RT} \right]$ |
|--|------------------------------------------------------------------------------------------------|

$A_1$  și  $A_2$  sunt cantitățile inițiale de substanță. Pentru determinarea temperaturii la care se obține un anumit raport al produșilor de reacție să logaritmăm această expresie:

|  |                                                                                      |
|--|--------------------------------------------------------------------------------------|
|  | $\ln \frac{k_1}{k_2} = \ln \frac{B}{C} = \ln \frac{A_1}{A_2} + \frac{E_2 - E_1}{RT}$ |
|--|--------------------------------------------------------------------------------------|

De aici se poate explicita temperatura:

|  |                                                                                                                                                                   |
|--|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
|  | $T = \frac{E_2 - E_1}{R \left[ \ln \frac{k_1}{k_2} + \ln \frac{A_2}{A_1} \right]} = \frac{E_2 - E_1}{R \left[ \ln \frac{[B]}{[C]} + \ln \frac{A_2}{A_1} \right]}$ |
|--|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|

În această relație  $R=1.987$  cal/Kmol.

Dacă  $A_2 = 10A_1$ , atunci

Pentru raportul de 1:1 (adică  $B=C$ ) avem:

$$T_1 = \frac{(16.7 - 14.8)10^3}{1.987(0 + 2.303)} = 415.2 \text{ K}, \quad \text{adică } t_1 = 142^\circ \text{ C}$$

Pentru raportul de 10:1 (adică  $B=10C$ ) avem:

$$T_2 = \frac{(16.7 - 14.8)10^3}{1.987 \cdot 2.303(\lg 10 + \lg 10)} = 207.6 \text{ K}, \quad \text{adica } t_2 = -65.6^\circ\text{C}$$

## TEMA 8. CALCUL DIFERENȚIAL ȘI APLICAȚII

### 8.1. Elemente de teorie

#### 8.1.1. Originea noțiunii de derivată a unei funcții

##### Problema vitezei instantanee a unui mobil.

Această problemă a fost pusă pentru prima dată de renumitul om de știință englez Isaac Newton (1643-1727).

*Să considerăm un mobil ce se deplasează neuniform pe o traiectorie rectilie după o lege de mișcare  $s=s(t)$ , care caracterizează spațiul parcurs de mobil ca funcție de timp. În aceste condiții se pune problema determinării vitezei medii într-un moment fixat  $t_0$ .*

Pentru aceasta se consideră intervale de timp  $[t_0, t]$  din ce în ce mai mici, pe care mișcarea mobilului tinde să devină uniformă. În acest fel, viteza medie a mobilului în intervalul de timp  $[t_0, t]$  va fi dată de relația:  $v_m = \frac{s(t)-s(t_0)}{t-t_0}$

Se obține astfel definiția **vitezei instantanee** a mobilului la momentul  $t_0$  (fixat),  $t_0 > 0$ , ca fiind limita vitezei medii când  $t \rightarrow t_0$ :

|       |                                                                   |
|-------|-------------------------------------------------------------------|
| (8.1) | $v(t_0) = \lim_{t \rightarrow t_0} \frac{s(t) - s(t_0)}{t - t_0}$ |
|-------|-------------------------------------------------------------------|

Din punct de vedere matematic, această limită, dacă există, se va numi *derivata* în punctul  $t_0$  a funcției spațiu „s”, notată  $s'(t_0)$ .

Viteza instantanee la momentul  $t_0$  va reprezenta derivata „spațiului” în punctul  $t_0$ :

$$v(t_0) = s'(t_0).$$

În mod asemănător, dacă  $v(t)$  este viteza unui mobil la momentul oarecare  $t$ , atunci **accelerația** mobilului la momentul  $t_0$  fixat va fi:

|       |                                                                   |
|-------|-------------------------------------------------------------------|
| (8.2) | $a(t_0) = \lim_{t \rightarrow t_0} \frac{v(t) - v(t_0)}{t - t_0}$ |
|-------|-------------------------------------------------------------------|

în ipoteza că această limită există.

### 8.1.2. Definiția derivatei într-un punct

Fie funcția  $f: D \subseteq \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$  și  $x_0 \in D$  un punct de acumulare în  $D$ .

#### Definiția 8.1.

- Se spune că **funcția  $f$  are derivată în punctul  $x_0 \in D$**  dacă există limita  $\lim_{x \rightarrow x_0} \frac{f(x) - f(x_0)}{x - x_0}$  în  $\bar{\mathbb{R}}$ . Această limită se numește **derivata funcției  $f$  în punctul  $x_0$**  și se notează

|       |                                                                    |
|-------|--------------------------------------------------------------------|
| (8.3) | $f'(x_0) = \lim_{x \rightarrow x_0} \frac{f(x) - f(x_0)}{x - x_0}$ |
|-------|--------------------------------------------------------------------|

- Se spune că funcția  **$f$  este derivabilă în punctul  $x_0 \in D$**  dacă limita (8.3) există și este finită [3]

#### Exemple.

**Exemplul 8.1.** Să se arate că următoarele funcții au derivată în punctele specificate și sunt derivabile în aceste puncte:

a)  $f(x) = x^2 + 2, x_0 = 3$

Arătăm că există

$$f'(x_0) = \lim_{x \rightarrow x_0} \frac{f(x) - f(x_0)}{x - x_0}$$

$$\text{Într-adevăr, } f'(3) = \lim_{x \rightarrow 3} \frac{(x+2)^2 - 11}{x - 3} = \lim_{x \rightarrow 3} \frac{(x-3)(x+3)}{x - 3} = 6 \in \mathbb{R}$$

Funcția  $f$  are derivată în  $x_0 = 3$ ,  $f'(3) = 6$  și este derivabilă în  $x_0 = 3$

b)  $f(x) = \frac{x+1}{x+4}, x_0 = -2$

Calculăm în mod asemănător și obținem:

$$f'(-2) = \lim_{x \rightarrow -2} \frac{\frac{x+1}{x+4} - \left(-\frac{1}{2}\right)}{x + 2} = \lim_{x \rightarrow -2} \frac{3}{2(x+4)} = \frac{3}{4} \in \mathbb{R}$$

Funcția  $f$  are derivată în  $x_0 = -2$ ,  $f'(-2) = \frac{3}{4}$  și este derivabilă în  $x_0 = -2$ .

**Exemplul 8.2.** Să se studieze dacă funcția  $f: R \rightarrow R, f(x) = \sqrt[3]{x+5}$  are derivată în punctul  $x_0 = -5$  și să se precizeze dacă este derivabilă în acest punct.

Calculăm  $f'(-5) = \lim_{x \rightarrow -5} \frac{f(x)-f(-5)}{x+5} = \lim_{x \rightarrow -5} \frac{\sqrt[3]{x+5}}{x+5} = \lim_{x \rightarrow -5} \frac{1}{\sqrt[3]{(x+5)^2}} = +\infty$

Astfel,  $f'(-5) = +\infty$ , ca urmare,  $f$  are derivată în  $x_0 = -5$ , dar  $f$  nu este derivabilă în acest punct.

### 8.1.3. Derivate laterale

S-a observat că pentru funcția modul  $f: R \rightarrow R, f(x) = |x|$ , limita raportului  $\frac{f(x)-f(0)}{x-0}$  în punctul  $x_0=0$  nu există, în schimb există limitele laterale în acest punct. Aceste limite laterale vor fi denumite **derivatele laterale** în punctul  $x_0=0$ .

#### Definiția 8.2.

a. Fie  $f: D \subseteq R \rightarrow R$  o funcție și  $x_0 \in D, D \cap (-\infty, x_0) \neq \emptyset$ . Spunem că  $f$  are derivată la stânga în punctul  $x_0$  dacă limita  $\lim_{\substack{x \rightarrow x_0 \\ x < x_0}} \frac{f(x)-f(x_0)}{x-x_0}$  există în  $\bar{R}$ .

Pentru a întări definiția de mai sus, este mai bine ca  $D$  să conțină un interval  $(a, x_0)$ , încât să avem condiția  $D \cap (a, x_0) \neq \emptyset$ .

Această limită se numește *derivata la stânga* a funcției  $f$  în punctul  $x_0$  și se notează  $f'_s(x_0)$ .

Funcția  $f$  este *derivabilă la stânga* în punctul  $x_0$  dacă derivata la stânga în  $x_0$  există și este finită. [3]

b. Pentru  $f: D \subseteq R \rightarrow R$  și  $x_0 \in D, D \cap (x_0, +\infty) \neq \emptyset$ , spunem că  $f$  are derivată la dreapta în punctul  $x_0$  dacă limita  $\lim_{\substack{x \rightarrow x_0 \\ x > x_0}} \frac{f(x)-f(x_0)}{x-x_0}$  există în  $\bar{R}$ .

Aceeași precizare se impune și aici, este mai bine ca  $D$  să conțină un interval  $(x_0, a)$  așa încât  $D \cap (x_0, a) \neq \emptyset$ .

Această limită se numește *derivata la dreapta* a funcției  $f$  în punctul  $x_0$  și se notează  $f'_d(x_0)$ .

Funcția  $f$  este *derivabilă la dreapta* în punctul  $x_0$  dacă derivata la dreapta în  $x_0$  există și este finită.

Folosind derivatele laterale într-un punct, se poate da o caracterizare a existenței derivatei unei funcții într-un punct, respectiv a derivabilității acesteia în punctul considerat.

**Teorema 8.1.** Fie funcția  $f: D \subseteq \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$  și  $x_0 \in D$  trebuie  $x_0 \in D \cap D'$  [3]

- a) Funcția  $f$  are derivată în  $x_0$  dacă și numai dacă  $f$  are derivate laterale în  $x_0$  și  $f'_s(x_0) = f'_d(x_0) = f'(x_0)$ .
- b) Funcția  $f$  este derivabilă în  $x_0$  dacă și numai dacă este derivabilă la stânga și la dreapta în  $x_0$  și  $f'_s(x_0) = f'_d(x_0) = f'(x_0)$ .

Ca o consecință, trebuie precizat că dacă avem funcția  $f: [a, b] \rightarrow \mathbb{R}$ , atunci:

- a) Dacă  $f$  are derivată în  $x_0 = a$ , atunci aceasta este  $f'(a) = f'_d(a)$
- b) Dacă  $f$  are derivată în  $x_0 = b$ , atunci aceasta este  $f'(b) = f'_s(b)$
- c) Funcția  $f$  este derivabilă în punctul  $a$  (respectiv în punctul  $b$ ) dacă este derivabilă la dreapta în punctul  $a$  (respectiv la stânga în punctul  $b$ )

**Exemplul 8.3.** Să se studieze derivabilitatea funcției  $f: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ ,  $f(x) = x|x - 1|$ , în  $x_0 = 1$ .

*Soluție.* Funcția  $f$  are legea de corespondență

$$f(x) = \begin{cases} -x^2 + x, & x \leq 1 \\ x^2 - x, & x > 1 \end{cases}$$

Calculăm derivatele laterale în punctul  $x_0 = 1$ . Avem:

$$f'_s(1) = \lim_{\substack{x \rightarrow 1 \\ x < 1}} \frac{f(x) - f(1)}{x - 1} = \lim_{\substack{x \rightarrow 1 \\ x < 1}} \frac{-x^2 + x}{x - 1} = \lim_{\substack{x \rightarrow 1 \\ x < 1}} (-x) = -1$$

$$f'_d(1) = \lim_{\substack{x \rightarrow 1 \\ x > 1}} \frac{f(x) - f(1)}{x - 1} = \lim_{\substack{x \rightarrow 1 \\ x > 1}} \frac{x^2 - x}{x - 1} = \lim_{\substack{x \rightarrow 1 \\ x > 1}} (x) = 1$$

Deoarece  $f'_s(1) \neq f'_d(1)$  rezultă ca  $f$  nu este derivabilă în punctul  $x_0 = 1$ .

#### 8.1.4. Diferențiala funcțiilor reale de variabilă reală

Definițiile expuse mai sus ne conduc la necesitatea evaluării aproximative a creșterii unei anumite mărimi în raport cu creșterea alteia. Pentru simplitatea ei este preferată aproximarea liniară.

Fiind dată o funcție  $f: (a, b) \rightarrow \mathbb{R}$  și un punct fixat  $x_0 \in (a, b)$  se caută o funcție liniară  $L_{x_0}$  astfel încât creșterea funcției  $f$  în punctul  $x_0$ , relativă la creșterea  $h$  a argumentului, să poată fi aproximată cu  $L_{x_0}(h)$ , adică:

$$f(x_0 + h) - f(x_0) \approx L_{x_0}(h)$$

pentru  $h$  suficient de mic. Pentru ca o asemenea formulă aproximativă să poată fi acceptată este necesar ca: [3,12,14]

|       |                                                                         |
|-------|-------------------------------------------------------------------------|
| (8.4) | $\lim_{h \rightarrow 0} \frac{f(x_0 + h) - f(x_0) - L_{x_0}(h)}{h} = 0$ |
|-------|-------------------------------------------------------------------------|

ceea ce asigură că eroarea în formula de aproximare poate fi făcută oricât de mică pentru variații din ce în ce mai mici ale argumentului.

Apar în mod natural o serie de probleme, cum ar fi: existența și unicitatea aplicației liniare  $L_{x_0}$  precum și caracterizarea funcțiilor  $f$  pentru care pot fi considerate asemenea aproximări liniare.

Din liceu se știe că pentru o funcție  $f: (a, b) \rightarrow \mathbb{R}$  derivabilă în punctul  $x_0 \in (a, b)$ , poate fi considerată formula de aproximare

$$f(x_0 + h) - f(x_0) \approx f'(x_0) \cdot h$$

pentru  $h$  suficient de mic.

Aceste considerații conduc, în mod natural, la următoarea definiție.

**Definiția 8.3.** Fie  $A \subseteq \mathbb{R}$  o mulțime deschisă,  $f: A \rightarrow \mathbb{R}$  o funcție arbitrară, și  $x_0 \in A$  un punct fixat. Funcția  $f$  se numește *diferențiabilă în punctul  $x_0$*  dacă există o aplicație liniară  $L_{x_0}: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$  astfel încât

$$\lim_{h \rightarrow 0} \frac{f(x_0 + h) - f(x_0) - L_{x_0}(h)}{h} = 0$$

### Observația 8.1.

a) Orice funcție liniară  $L: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$  este de forma  $L(x) = c \cdot x$ ,  $x \in \mathbb{R}$ , unde  $c = L(1)$ ; reciproc, oricare ar fi  $c \in \mathbb{R}$ , fixat, egalitatea  $L(x) = c \cdot x$ , pentru orice  $x \in \mathbb{R}$ , definește o funcție liniară  $L: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ . Prin urmare, orice aplicație liniară de la  $\mathbb{R}$  la  $\mathbb{R}$  este bine determinată de o constantă reală. Deducem astfel că funcția  $f$  este diferențiabilă în punctul  $x_0$  dacă și numai dacă există  $c_{x_0} \in \mathbb{R}$  așa încât

$$\lim_{h \rightarrow 0} \frac{f(x_0 + h) - f(x_0) - c_{x_0} \cdot h}{h} = 0$$

b) Egalitatea (4) poate fi scrisă echivalent

$$\lim_{|h| \rightarrow 0} \frac{|f(x_0 + h) - f(x_0) - L_{x_0}(h)|}{|h|} = 0$$

Ultima egalitate are avantajul că poate fi ușor transcrisă pentru funcții în dimensiuni superioare, înlocuind modulul cu norma spațiului corespunzător.

Teorema următoare stabilește faptul că o funcție reală de o variabilă reală este diferențiabilă într-un punct fixat  $x_0$  dacă și numai dacă ea este derivabilă în acest punct.

**Teorema 8.2.** . Fie  $A \subseteq \mathbb{R}$  o mulțime deschisă,  $f: A \rightarrow \mathbb{R}$  o funcție arbitrară,  $x_0 \in A$  un punct fixat. Dacă  $f$  este diferențiabilă în  $x_0$ , atunci  $f$  este derivabilă în  $x_0$  și  $f'(x_0) = L_{x_0}(1)$ . Dacă  $f$  este derivabilă în  $x_0$ , atunci  $f$  este diferențiabilă în  $x_0$  și

|       |                                                                            |
|-------|----------------------------------------------------------------------------|
| (8.5) | $L_{x_0}: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}, L_{x_0}(h) = f'(x_0) \cdot h$ |
|-------|----------------------------------------------------------------------------|

**Observația 8.2.** Din această teoremă se deduce imediat că aplicația liniară  $L_{x_0}$  din definiția precedentă este unic determinată de  $f$  și  $x_0$ .

**Definiția 8.4.** [12,14] Fie  $A \subseteq \mathbb{R}$  o mulțime deschisă,  $f: A \rightarrow \mathbb{R}$  o funcție arbitrară. Dacă funcția  $f$  este diferențiabilă în punctul fixat  $x_0 \in A$ , aplicația liniară  $L_{x_0}$  se numește *diferențiala funcției în punctul  $x_0$*  și se notează  $df_{x_0}$ . Funcția  $f$  se numește *diferențiabilă pe mulțimea  $A$*  dacă este diferențiabilă în fiecare punct  $x \in A$ . În acest caz, notând prin  $L(\mathbb{R}, \mathbb{R})$  mulțimea tuturor aplicațiilor liniare de la  $\mathbb{R}$  la  $\mathbb{R}$ , funcția  $df: A \rightarrow L(\mathbb{R}, \mathbb{R})$ ,  $(df)(x) = df_x$  se numește *diferențiala funcției  $f$  pe mulțimea  $A$* .

**Observația 8.3.**

a) Cunoașterea funcției  $df: A \rightarrow L(\mathbb{R}, \mathbb{R})$  revine la cunoașterea funcției  $df_x \in L(\mathbb{R}, \mathbb{R})$  pentru orice  $x \in A$ . Din Teorema 5.1. deducem că pentru orice  $x \in A$  și orice  $h \in \mathbb{R}$  avem:



|       |                                        |
|-------|----------------------------------------|
| (8.6) | $(df)(x)(h) = df_x(h) = f'(x) \cdot h$ |
|-------|----------------------------------------|

b) Funcția identitate pe  $A$  este  $I_A: A \rightarrow A, I_A(x) = x, \forall x \in A$ . Ea este diferențiabilă pe  $A$  și diferențiala sa, notată cu  $dx$ , este funcția identitate pe  $R$ . Prin urmare,  $dx: A \rightarrow L(R, R), dx(x) = 1_R \forall x \in A$ , adică, pentru oricare  $x \in A$  și orice  $h \in R, (dx)(x)(h) = h$ .

c) Cu ajutorul diferențialei funcției identitate pe  $A$  putem exprima diferențiala funcției  $f$  diferențiabile pe  $A$ , astfel

|       |              |
|-------|--------------|
| (8.7) | $df = f' dx$ |
|-------|--------------|

Este evident că studiul funcțiilor reale de o variabilă reală, diferențiabile, se reduce la studiul funcțiilor derivabile, cunoscut din liceu.

## 8.2. Aplicații ale noțiunii de derivată

### 8.2.1. Interpretarea geometrică a derivatei. Trasarea graficului unei funcții

a) Tangenta la o curbă

Să considerăm funcția  $f: (a, b) \rightarrow R$  o funcție continuă și punctul fix  $M_0(x_0, f(x_0))$  pe imaginea geometrică  $Gf$  a graficului funcției. Se pune problema determinării tangentei în punctul  $M_0$  la curba  $Gf$ , determinare care impune găsirea pantei (coeficientului unghiular) (fig. 8.1).

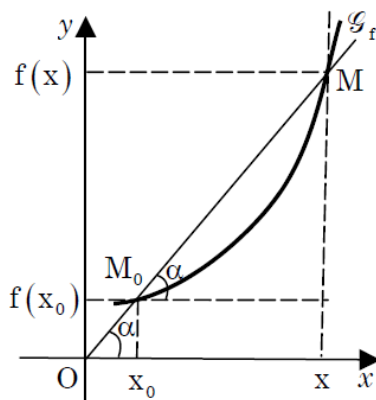


Fig. 8.1

Vom gândi tangenta  $M_0T$  ca fiind o „poziție limită“ a unei secante  $M_0M$  atunci când punctul  $M(x, f(x))$  se apropie oricât de mult de punctul  $M_0$ ,

rămânând permanent pe curba  $Gf$ . În acest mod, panta secantei  $M_0M$  tinde să aproximeze panta tangentei la curbă în punctul  $M_0$ .

Se știe că panta secantei  $M_0M$  reprezintă tangenta trigonometrică a unghiului  $\alpha$  format de aceasta cu sensul pozitiv al axei  $Ox$ . Ca urmare, are loc egalitatea:

$$tg\alpha = \frac{f(x) - f(x_0)}{x - x_0}$$

Presupunând că există limita  $m = \lim_{x \rightarrow x_0} \frac{f(x) - f(x_0)}{x - x_0}$ , care este tocmai limita (3), aceasta este prin definiție *panta sau coeficientul unghiular* al tangentei în punctul  $M_0$  la  $Gf$ . Astfel, tangenta în punctul  $M_0(x_0, f(x_0))$  este bine determinată de ecuația  $(x) - f(x_0) = m(x - x_0)$

Astfel ecuația tangentei are expresia:

$$(t): y - f(x_0) = f'(x_0)(x - x_0)$$

Dacă  $m = \pm\infty$  atunci tangenta în punctul  $M_0$  este o dreaptă cu aceeași direcție cu axa  $Oy$ .

Ecuația ei este  $(t): x = x_0$

Regăsim astfel prin cele de mai sus, interpretarea geometrică a derivatei prin coeficientul unghiular al tangentei la graficul funcției în punctul studiat.

#### b) Trasarea graficului unei funcții

Coeficientul unghiular este unul din elementele de bază în construcția și analiza graficului unei funcții. Așa cum este cunoscut din liceu [3] numim grafic al unei funcții reale  $: D \subseteq R \rightarrow R$ , totalitatea punctelor sub forma  $Gf = \{(x, f(x)) \mid x \in D\}$ .

Atunci, pentru construirea graficului  $Gf$  avem nevoie de:

- i) Intervalele de monotonie;
- ii) Determinarea punctelor de extrem;
- iii) Determinarea asimptotelor.

Primele două cerințe se pot sintetiza într-un rezultat ca cel de mai jos [3]:

**Teorema 8.3.** Fie  $f: D \subseteq R \rightarrow R$  o funcție reală și  $x_0, x_1 \in D$  două puncte oarecare.

- a)  $x_0$  este punct de maxim dacă  $f'(x_0) = 0$  și

|       |                                                              |
|-------|--------------------------------------------------------------|
| (8.8) | $f'(x) > 0 \forall x < x_0, \quad f'(x) < 0 \forall x > x_0$ |
|-------|--------------------------------------------------------------|

b)  $x_1$  este punct de minim dacă  $f'(x_0) = 0$  și

|       |                                                              |
|-------|--------------------------------------------------------------|
| (8.9) | $f'(x) < 0 \forall x < x_1, \quad f'(x) > 0 \forall x > x_1$ |
|-------|--------------------------------------------------------------|

Aceasta se întâmplă doar dacă  $x_0, x_1 \in D$ ,  $D$  fiind interval.

### 8.2.2. Derivatele unor funcții elementare

Fie funcția reală  $f: D \subseteq \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ , derivabilă pe mulțimea  $D$ . Derivata sa este funcția  $f': D_{f'} \rightarrow \mathbb{R}$ ,  $f'(x) = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{f(x+h)-f(x)}{h}$ , unde  $D_{f'}$  este domeniul de derivabilitate al funcției  $f$ . Cu ajutorul acestei formule se demonstrează ușor [3] formulele derivatelor unor funcții elementare. Le vom aminti pe cele mai importante în tabelul 8.1 de mai jos.

| FUNCȚIA                                                                                     | DERIVATA            |
|---------------------------------------------------------------------------------------------|---------------------|
| $f(x)=C, f: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$                                              | 0                   |
| $x f: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$                                                    | 1                   |
| $x^n f: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$                                                  | $n \cdot x^{n-1}$   |
| $e^x f: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$                                                  | $e^x$               |
| $a^x f: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$                                                  | $a^x \cdot \ln a$   |
| $\ln x f: (0, +\infty) \rightarrow \mathbb{R}$                                              | $1/x$               |
| $\log_a x f: (0, +\infty) \rightarrow \mathbb{R}$                                           | $1/(x \cdot \ln a)$ |
| $\sin x f: (-\pi, \pi) \rightarrow \mathbb{R}$                                              | $\cos x$            |
| $\cos x f: (-\pi, \pi) \rightarrow \mathbb{R}$                                              | $-\sin x$           |
| $\operatorname{tg} x f: \left(-\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2}\right) \rightarrow \mathbb{R}$  | $1/\cos^2 x$        |
| $\operatorname{ctg} x f: \left(-\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2}\right) \rightarrow \mathbb{R}$ | $-1/\sin^2 x$       |

Tabelul 8.1. Derivatele unor funcții elementare

### 8.2.3. Operații cu funcții derivabile. Reguli de derivare

Acestea se sintetizează în următorul rezultat [3].

#### Teorema 8.4.

a) Fie funcțiile  $f, g, f, g: D \subseteq \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$  și  $x_0$  un punct interior al lui  $D$ . Dacă funcțiile  $f$  și  $g$  sunt derivabile în punctul  $x_0 \in D$ , atunci funcțiile  $f + g$  și  $f \cdot g$  sunt derivabile în punctul  $x_0$ , și au loc următoarele reguli de derivare:

|        |                                                                                                        |
|--------|--------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| (8.10) | $(f + g)'(x_0) = f'(x_0) + g'(x_0),$ $(f \cdot g)'(x_0) = f'(x_0) \cdot g(x_0) + f(x_0) \cdot g'(x_0)$ |
|--------|--------------------------------------------------------------------------------------------------------|

b) Fie funcțiile  $f, g, f, g: D \subseteq \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$  și  $x_0$  un punct interior al lui  $D$ . Dacă funcțiile  $f$  și  $g$  sunt derivabile în punctul  $x_0 \in D$  și  $g(x_0) \neq 0$ , atunci funcția  $c \cdot f/g$  este derivabilă în punctul  $x_0$  și are loc egalitatea:

|        |                                                                                                 |
|--------|-------------------------------------------------------------------------------------------------|
| (8.11) | $\left(\frac{f}{g}\right)'(x_0) = \frac{f'(x_0) \cdot g(x_0) - f(x_0) \cdot g'(x_0)}{g^2(x_0)}$ |
|--------|-------------------------------------------------------------------------------------------------|

**Observația 8.4.** Ca o consecință imediată a teoremei de mai sus reținem și următoarele reguli de derivare:

$$\boxed{(c \cdot f)' = c \cdot f'} \quad \text{și} \quad \boxed{(f - g)' = f' - g'}$$

Un rezultat important este legat de derivarea funcțiilor compuse. Pentru aceasta avem următoarea teoremă [3].

**Teorema 8.5.** Fie  $I$  și  $J$  intervale de numere reale și funcțiile  $I \xrightarrow{u} J \xrightarrow{f} \mathbb{R}$ . Dacă  $u$  este derivabilă în punctul  $x_0 \in I$  iar  $f$  este derivabilă în punctul  $u(x_0) = y_0 \in J$ , atunci funcția compusă  $(f \circ u): I \rightarrow \mathbb{R}$  este derivabilă în punctul  $x_0$  și are loc relația

|        |                                                |
|--------|------------------------------------------------|
| (8.12) | $(f \circ u)'(x_0) = f'(u(x_0)) \cdot u'(x_0)$ |
|--------|------------------------------------------------|

Derivarea funcțiilor compuse este, alături de derivarea în sine, foarte aplicată în problemele practice. Dăm mai jos doar două exemple simple:

**Exemplu 8.4.**  $(10 \cdot x + 5 \cdot e^x + \cos(2x))' = 10 + 5 \cdot e^x - 2 \cdot \sin(2x)$

**Exemplu 8.5.**  $(\ln(2x^2 + 1) + 3^{x^2+1})' = \frac{4x}{2x^2+1} + 3^{x^2+1} \ln 3 \cdot (2x)$

### 8.3. Probleme rezolvate

1. Să se determine derivatele funcțiilor  $f$  și valoarea  $f'(x_0)$  a derivatei în punctele specificate:

a)  $f: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}, f(x) = x^3 + x + \cos(x), x_0 = 0$

b)  $f: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}, f(x) = \sqrt[3]{x} + \frac{1}{x^2}, x_0 = 1$

c)  $f: (0, +\infty) \rightarrow \mathbb{R}, f(x) = \ln x + 2^x - \sin \frac{\pi}{2}, x_0 = 1$

a) Funcția  $f$  este derivabilă pe  $\mathbb{R}$  ca sumă de funcții derivabile pe  $\mathbb{R}$  și  $f'(x) = (x^3)' + x' + \cos'(x) = 3x^2 + 1 - \sin(x)$ . În continuare în punctul indicat vom avea:  $f'(0) = 3 \cdot 0 + 1 - \sin(0) = 1$

b) Funcția  $f$  este derivabilă pe  $\mathbb{R}$  ca sumă de funcții derivabile pe  $\mathbb{R}$  și  $f'(x) = (\sqrt[3]{x})' + (\frac{1}{x^2})' = \frac{1}{3\sqrt[3]{x^2}} + (x^{-2})' = \frac{1}{3\sqrt[3]{x^2}} - 2x^{-3}, \forall x \neq 0$ . Apoi  $f'(1) = \frac{1}{3} - 2 = -\frac{5}{3}$

c) Funcția  $f$  este derivabilă pe  $(0, +\infty)$  ca sumă de funcții derivabile pe  $(0, +\infty)$  și  $f'(x) = \ln'(x) + (2^x)' - (\sin \frac{\pi}{2})' = \frac{1}{x} + \ln 2 \cdot 2^x - 0, \forall x > 0$ , apoi  $f'(1) = 1 + 2\ln 2$ .

2. Folosind regulile de derivare a sumei și a produsului, să se determine  $f'$  pentru următoarele funcții:

a)  $f: (0, +\infty) \rightarrow \mathbb{R}, f(x) = x^2 \ln x + x\sqrt{x}$ ;

b)  $f: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}, f(x) = x \sin x - 2 \cos x$

a)  $f'(x) = (x^2 \ln x)' + (x\sqrt{x})' = (x^2)' \ln x + x^2 (\ln x)' + x' \sqrt{x} + x(\sqrt{x})' = 2x \ln x + x^2 \frac{1}{x} + \sqrt{x} + x \frac{1}{2\sqrt{x}} = 2x \ln x + x + \frac{3}{2} \sqrt{x}$

b)  $f'(x) = (x \sin x)' - (2 \cos x)' = x' \sin x + x (\sin x)' - 2' \cos x - 2 (\cos x)' = \sin x + x \cos x - 0 + 2 \sin x = \sin x + x \cos x + 2 \sin x = x \cos x + 3 \sin x$

3. Folosind regula de derivare a funcțiilor compuse, să se determine derivatele funcției:

$$h: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}, h(x) = (3x^2 - 2x)^5;$$

Să considerăm funcțiile  $u, f: R \rightarrow R, u(x) = (3x^2 - 2x), f(u) = u^5$ , funcții derivabile pe  $R$ , pentru care  $u'(x) = 6x - 2, \forall x \in R, f'(u) = 5u^4, u \in R$ . Rezultă că funcția  $f \circ u$  este derivabilă pe  $R$ . Observăm că  $(f \circ u)(x) = f(u(x)) = (3x^2 - 2x)^5 = h(x), x \in R$ . Așadar  $h$  este derivabilă pe  $R$  și  $h'(x) = (f \circ u)'(x) = f'(u(x)) \cdot u'(x) = 5(3x^2 - 2x)^4 \cdot (6x - 2), x \in R$ .

#### 8.4. Probleme propuse

1. Să se determine derivatele funcțiilor  $f$  și apoi să se calculeze  $f'(x_0)$  unde  $x_0$  este specificat pentru fiecare funcție.

a)  $f: R \rightarrow R, f(x) = \sqrt{3} + x^2 + x^3 - x^4, x_0 = -2$

b)  $f: R \rightarrow R, f(x) = \frac{1}{x^4} + \frac{1}{x^2} - \frac{1}{x} + \ln 5, x_0 = -1$

c)  $f: (0, +\infty) \rightarrow R, f(x) = \sqrt{x} + \sqrt[3]{x} - \sqrt[5]{5}, x_0 = 1$

d)  $f: R \rightarrow R, f(x) = 5^x - e^{-x}, x_0 = 0$

e)  $f: (0, +\infty) \rightarrow R, f(x) = x \ln(x), x_0 = e$

f)  $f: R \rightarrow R, f(x) = e^x(x^2 + 5x - 1), x_0 = -1$

2. Să se rezolve ecuația  $f'(x) = 0$  precizând domeniul de definiție și domeniul de derivabilitate al funcției  $f$ . Să se găsească punctele de extrem pentru funcțiile următoare.

a)  $f(x) = x^4 - 4x^3$

b)  $f(x) = x^3 e^x$

c)  $f(x) = e^x(x^2 + 6x - 15)$

d)  $f(x) = \frac{x\sqrt{x}}{x+1}$

3. Să se scrie ecuația tangentei la graficul funcției  $f: D \rightarrow R$ , în punctul specificat, dacă:

- a)  $f(x) = x^4, x_0 = -1$
- b)  $f(x) = x \ln(x), x_0 = e$
- c)  $f(x) = \frac{x+1}{x^2+3}, x_0 = -1$
- d)  $f(x) = \tan(x), x_0 = \frac{\pi}{3}$
- e)  $f(x) = (x+1)e^x, x_0 = 0, x_0 = 1$

4. Să se calculeze derivatele laterale ale funcțiilor următoare  $f: D \rightarrow R$  în punctul  $x_0$  specificat și să se precizeze dacă  $f$  este sau nu derivabilă în acest punct:

- a)  $f(x) = \begin{cases} 3x + 4, & x \leq 1 \\ -x^2 + 5x, & x > 1 \end{cases}, x_0 = 1$
- b)  $f(x) = |2x - 1| + x, x_0 = \frac{1}{2}$
- c)  $f(x) = |x + 3| - 2, x_0 = -3$
- d)  $f(x) = \begin{cases} x^2, & x \leq 1 \\ 2x - 1, & x > 1 \end{cases}, x_0 = 1$

## TEMA 9. INTEGRALA FUNCȚIILOR REALE DE O VARIABILĂ REALĂ. APLICAȚII

### 9.1. Elemente de teorie

Bazele calculului integral au fost puse de către Isaac Newton, în 1666, pornind de la probleme de natură cinematică. Pentru Newton, calculul integral însemna găsirea „fluenților” atunci când sunt cunoscute „fluxiunile” (derivatele), obiectivul principal fiind determinarea legii de mișcare a unui punct material atunci când este cunoscută permanent viteza sa. Din motive conjuncturale, tratatul respectiv nu a fost publicat în mod formal decât după mai mult timp de la redactarea sa, deși conținutul devenise cunoscut matematicienilor vremii.

În vreme ce punctul de vedere al lui Newton era, într-un fel, de natură geometrică, Gottfried Wilhelm von Leibniz a contribuit la punerea bazelor calculului integral cu un punct de vedere ceva mai apropiat de cel al analizei de azi și sistematizat mai convenabil din punct de vedere analitic. Abordarea propusă de Leibniz constă în utilizarea proprietăților seriilor convergente (în fapt, Leibniz și-a numit abordarea „calculus summatorius”, numele de calcul integral fiind sugerat ulterior de Jacob Bernoulli, în 1690). Tot lui Leibniz i se datorează utilizarea cantităților infinitezimale  $dx$  și  $dy$  și notațiile pentru acestea, precum și introducerea semnului  $\int$  pentru operația de integrare.

Definiția actuală a noțiunii de integrală i se datorează lui Bernhard Riemann (1854), extinderi ale acestei noțiuni fiind introduse, între alții, de Thomas Joannes Stieltjes (1894, integrala Riemann-Stieltjes) și Henri Lebesgue (1904, integrala Lebesgue).

#### 9.1.1. Diviziune a unui interval. Suma Riemann. Integrala definită (Riemann)

Fiind dat un interval mărginit  $[a, b]$ , numim **diviziune** a sa o mulțime ordonată

|       |                                                                                |
|-------|--------------------------------------------------------------------------------|
| (9.1) | $\Delta = \{x_0, x_1, \dots, x_n \mid a = x_0 < x_1 < x_2 < \dots < x_n = b\}$ |
|-------|--------------------------------------------------------------------------------|

Punctele  $x_0, x_1, \dots, x_n$  se numesc *nodurile* diviziunii, iar lungimea maximă a *intervalelor elementare* astfel determinate,  $[x_0, x_1], [x_1, x_2], \dots, [x_{n-1}, x_n]$  adică mărimea



$$\|\Delta\| = \max_{0 \leq i \leq n-1} (x_{i+1} - x_i)$$

se numește *norma* diviziunii  $\Delta$ . În situația în care toate intervalele elementare ale diviziunii  $\Delta$  au aceeași lungime, egală cu  $\frac{1}{n}(b - a)$ , diviziunea se numește *echidistantă*.

**Exemplu 9.1.** Mulțimea

$$\Delta_1 = \left\{0, \frac{1}{3}, \frac{1}{2}, \frac{3}{5}, 1\right\}$$

este o diviziune a intervalului  $[0,1]$  cu norma  $\|\Delta_1\| = \max\left\{\frac{1}{3}, \frac{1}{6}, \frac{1}{10}, \frac{2}{5}\right\} = \frac{2}{5}$ , fără a fi echidistantă. Însă mulțimea  $\Delta_2 = \left\{0, \frac{1}{5}, \frac{2}{5}, \frac{3}{5}, \frac{4}{5}, 1\right\}$  este o diviziune echidistantă a intervalului  $[0,1]$ , toate intervalele elementare ale diviziunii având lungimea  $1/5$ .

**Notăție.** Să notăm cu  $D_{[a,b]}$  mulțimea diviziunilor unui interval  $[a,b]$ .

**Definiția 9.1.** Fiind dată o diviziune  $\Delta = \{x_0, x_1, \dots, x_n\}$  vom numi *sistem de puncte intermediare* asociat diviziunii  $\Delta$ , o mulțime ordonată

$$C = \{c_1, c_2, \dots, c_n\}$$

Așa încât  $c_i \in [x_{i-1}, x_i]$ ,  $1 \leq i \leq n$  – adică în fiecare interval elementar se află câte un punct intermediar.

**Definiția 9.2.** Fiind dată funcția  $f : [a, b] \rightarrow \mathbb{R}$ , diviziunea  $\Delta = \{x_0, x_1, \dots, x_n\}$  a intervalului și  $C = \{c_1, c_2, \dots, c_n\}$  un sistem de puncte intermediare asociat diviziunii  $\Delta$ . Se numește *suma Riemann asociată diviziunii  $\Delta$  și sistemului de puncte intermediare  $C$* , suma

|       |                                                                                                                                                     |
|-------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| (9.2) | $\begin{aligned} \sigma_{\Delta}(f, C) &= \sum_{i=1}^n f(c_i)(x_i - x_{i-1}) \\ &= f(c_1)(x_1 - x_0) + \dots + f(c_n)(x_n - x_{n-1}) \end{aligned}$ |
|-------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|

Pentru fixarea ideilor, să presupunem că  $f(x) \geq 0$  pentru orice  $x \in [a, b]$ , graficul funcției  $f$  fiind atunci situat în întregime deasupra axei  $Ox$ . Atunci  $f(c_1)(x_1 - x_0)$  reprezintă aria unui dreptunghi care aproximează aria trapezului curbiliniu delimitat de graficul funcției  $f$ , dreptele  $x = x_0, x = x_1$  și axa  $Ox$  – adică primul trapez curbiliniu din cele  $n$  din figura 9.1 de mai jos.

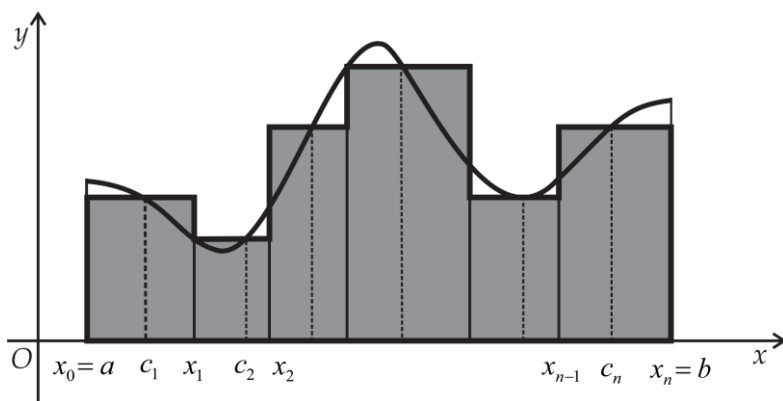


Fig. 9.1. Interpretarea geometrică a sumei Riemann

Ceilalți termeni ai sumei Riemann având interpretări similare, obținem că suma Riemann reprezintă o aproximare pentru aria porțiunii dintre graficul funcției  $f$ , axa  $Ox$ , paralela „inițială” la  $Oy$ ,  $x = a$ , și paralela „finală” la  $Oy$ ,  $x = b$ .

Această aproximare este cu atât mai bună cu cât **toate** lungimile de intervale elementare  $x_1 - x_0, x_2 - x_1, \dots, x_n - x_{n-1}$  sunt mai mici.

**Definiția 9.3.** Fie funcția  $f: [a, b] \rightarrow \mathbb{R}$ . Vom spune că  $f$  este *integrabilă Riemann* pe  $[a, b]$  (pe scurt *integrabilă* pe  $[a, b]$ ) dacă există un număr real  $I$  astfel încât oricare ar fi  $\varepsilon > 0$  există  $\delta_\varepsilon > 0$  așa încât  $\forall \Delta \in D_{[a, b]}, \|\Delta\| < \delta_\varepsilon$ , și orice sistem  $C$  de puncte intermediare asociat lui  $\Delta$ , are loc relația

|       |                                           |
|-------|-------------------------------------------|
| (9.3) | $ \sigma_\Delta(f, C) - I  < \varepsilon$ |
|-------|-------------------------------------------|

Astfel, pentru o normă a diviziunii  $\Delta$  suficient de mică, suma Riemann  $\sigma_\Delta(f, C)$  reprezintă o aproximare „suficient de bună” a lui  $I$ , indiferent de alegerea sistemului de puncte intermediare  $C$ .

Numărul  $I$  de mai sus se numește *integrala definită*, sau *integrala Riemann*, a funcției  $f$  pe intervalul  $[a, b]$ , și se notează

$$I = \int_a^b f(x) dx$$

Să observăm că  $I$ , dacă există, este unic determinat.

Numerele  $a$  și  $b$  se numesc *limitele de integrare*, intervalul  $[a, b]$  se numește *interval de integrare*, iar variabila  $x$  se numește *variabila de integrare*.

Are loc următoarea echivalență, importantă din punct de vedere matematic, cea de-a doua afirmație putând fi utilizată de asemenea ca definiție a integrabilității Riemann.

**Teorema 9.1.** Fie funcția  $f: [a, b] \rightarrow \mathbb{R}$ . Următoarele afirmații sunt echivalente.[12,14]

1.  $f$  este integrabilă pe  $[a, b]$ ;
2. oricare ar fi un șir de diviziuni  $(\Delta_n)_{n \geq 0}$  ale intervalului  $[a, b]$ , cu  $\|\Delta_n\| \rightarrow 0$ , împreună cu un șir de sisteme de puncte intermediare asociate  $(C_n)_{n \geq 0}$ , șirul sumelor Riemann  $(\sigma_{\Delta_n}(f, C_n))_{n \geq 0}$  este convergent.

Cea de-a doua afirmație pare, la prima vedere, imprecisă. Mai precis, se cere doar ca limita unui șir de sume Riemann să fie finită, apărând, la prima vedere, posibilitatea ca șiruri diferite de sume Riemann să tindă la limite diferite, adică să existe „candidați” diferiți pentru

$$\int_a^b f(x)dx$$

În fapt, se poate demonstra că limita unui astfel de șir de sume Riemann nu depinde nici de alegerea șirului de diviziuni  $(\Delta_n)_{n \geq 0}$ , nici de alegerea sistemului de puncte intermediare asociate  $(C_n)_{n \geq 0}$ . Valoarea comună a acestor limite reprezintă  $\int_a^b f(x)dx$ .

Se impun în acest context câteva observații.

### Observații.

9.1. Integrala nedefinită a unei funcții  $f$  este o *mulțime de funcții*, pe când integrala sa definită este un *număr*.

Amintim că se numește primitivă sau integrala nedefinită a unei funcții  $f$ , funcția  $F$  a cărei derivată este egală cu  $f$ , adică  $F' = f$ . Notăția este  $F = \int f(x)dx$

9.2. Legat de inversarea limitelor de integrare. Observăm din cele de mai sus că nu este necesar neapărat ca  $a < b$ . Comparând sumele Riemann obținute pentru intervalele  $[a, b]$  și  $[b, a]$  (și aceeași diviziune  $\Delta$  și același sistem de puncte intermediare  $C$ ), observăm că a doua este opusă primei, întrucât  $(x_i - x_{i-1})$  se transformă în  $(x_{i-1} - x_i) = -(x_i - x_{i-1})$ . Urmează imediat că

|       |                                       |
|-------|---------------------------------------|
| (9.4) | $\int_a^b f(x)dx = - \int_b^a f(x)dx$ |
|-------|---------------------------------------|

Adică: *inversarea limitelor integralei are ca efect inversarea semnelui integralei.*

### 9.3. Cazul intervalului redus la un punct.

Prin definiție (consistentă cu observația de mai sus și cu interpretarea geometrică a integralei definite) avem că

$$\int_a^a f(x) dx = 0$$

Adică: *dacă lungimea intervalului de integrare este 0, atunci și valoarea integralei este 0*

### 9.4. Integrala funcției nule

Cu ajutorul definiției putem observa că dacă  $f(x) = 0 \forall x \in [a, b]$ , atunci  $\int_a^b f(x)dx = 0$ ,  
întrucât toate sumele Riemann asociate sunt nule.

## 9.1.2. Proprietăți fundamentale ale integralei definite

După definirea noțiunii de funcție integrabilă, este natural să căutăm legăturile între integrabilitate și alte proprietăți uzuale ale unor funcții (continuitate, monotonie, mărginire). Enunțăm în cele ce urmează câteva proprietăți fundamentale, și pentru simplificarea expunerii omitem demonstrațiile teoremelor. [12,14]

**Teorema 9.2.** Fie  $f: [a, b] \rightarrow R$  o funcție continuă pe  $[a, b]$ . Atunci  $f$  este integrabilă pe  $[a, b]$ .

**Teorema 9.3.** Fie  $f: [a, b] \rightarrow R$  o funcție integrabilă pe  $[a, b]$ . Atunci  $f$  este mărginită pe  $[a, b]$ .

De fapt are loc o formulare mai generală, anume în

**Teorema 9.4.** Fie  $f: [a, b] \rightarrow R$ . Atunci  $f$  este integrabilă pe  $[a, b]$  dacă și numai dacă  $f$  este mărginită și continuă „aproape peste tot” pe  $[a, b]$ .

Aici, *continuă „aproape peste tot”* înseamnă faptul că mulțimea punctelor de discontinuitate ale lui  $f$  are măsura Lebesgue 0, în sensul că poate

fi acoperită cu o reuniune numărabilă de intervale cu sumă a lungimilor oricât de mică. Avem aici o consecință importantă.

**Consecința 9.1.** Orice funcție  $f: [a, b] \rightarrow R$  care are un număr finit de puncte de discontinuitate de speța întâi este integrabilă pe  $[a, b]$ .

Reamintim că punctele de discontinuitate de speța întâi sunt cele în care limitele laterale există și sunt diferite.

**Teorema 9.5.** Fie  $f: [a, b] \rightarrow R$ ,  $f$  monotonă și mărginită pe  $[a, b]$ . Atunci  $f$  este integrabilă pe  $[a, b]$ .

**Propoziția 9.1.** Fie  $f, g: [a, b] \rightarrow R$  o funcții integrabile pe  $[a, b]$ . Atunci următoarele proprietăți sunt valabile.

a) Liniaritate. 
$$\int_a^b (\alpha f(x) + \beta g(x)) dx = \alpha \int_a^b f(x) dx + \beta \int_a^b g(x) dx, \quad \forall \alpha, \beta \in R$$

b) Pozitivitate. Dacă  $f(x) \geq 0 \quad \forall x \in [a, b]$ , atunci  $\int_a^b f(x) dx \geq 0$

c) Monotonie. Dacă  $f(x) \leq g(x) \quad \forall x \in [a, b]$ , atunci  $\int_a^b f(x) dx \leq \int_a^b g(x) dx$

d) Mărginire. Dacă  $m = \min\{f(x), x \in [a, b]\}$ ,  $M = \max\{f(x), x \in [a, b]\}$  atunci

|       |                                                |
|-------|------------------------------------------------|
| (9.5) | $m(b - a) \leq \int_a^b f(x) dx \leq M(b - a)$ |
|-------|------------------------------------------------|

e) Inegalitate în valoare absolută.  $\left| \int_a^b f(x) dx \right| \leq \int_a^b |f(x)| dx$

f) Dacă  $f$  este continuă pe  $[a, b]$  și  $g$  pozitivă și integrabilă pe  $[a, b]$ , atunci există  $\xi$  în  $[a, b]$  așa încât

|       |                                                  |
|-------|--------------------------------------------------|
| (9.6) | $\int_a^b f(x)g(x) dx = f(\xi) \int_a^b g(x) dx$ |
|-------|--------------------------------------------------|

**Observație 9.5.** Dacă  $g(x) = 1 \forall x \in [a, b]$  atunci există  $\xi$  în  $[a, b]$  așa încât

$$\int_a^b f(x)dx = f(\xi)(b - a)$$

### 9.1.3. Metode de calcul

#### 9.1.3.1. Formula Leibniz Newton

Vom prezenta în această secțiune principalele formule de calcul și operare cu integrala definită. Rezultatele sunt conținute în teoreme pentru care, pentru scopul de față, ometem demonstrațiile [12,14]

Formula următoare reprezintă legătura dintre noțiunile de integrală definită și respectiv nedefinită.

Amintim că  $F$  se numește *primitivă* a lui  $f$  pe  $[a, b]$  dacă :

- $F$  este derivabilă pe  $[a, b]$ ;
- $F'(x) = f(x)$ , pentru orice  $x$  din  $[a, b]$

**Teorema 9.6.** Fie  $f: [a, b] \rightarrow \mathbb{R}$  o funcție așa încât  $f$  integrabilă pe  $[a, b]$  și  $f$  admite primitive pe  $[a, b]$ . Atunci are loc formula

|       |                                             |
|-------|---------------------------------------------|
| (9.7) | $\int_a^b f(x)dx = F(b) - F(a) = F(x) _a^b$ |
|-------|---------------------------------------------|

unde  $F$  este o primitivă oarecare a lui  $f$ .

Astfel, prin intermediul *formulei Leibniz-Newton* de mai sus, calculul unei integrale definite se reduce la calculul unei primitive și la scăderea valorilor acestei primitive în capetele intervalului de integrare, mai precis din valoarea în capătul superior scăzându-se valoarea în capătul inferior.

Formula Leibniz-Newton se mai numește și *formula fundamentală a calculului integral*. Ea este de bază în tot ceea ce înseamnă calcul integral. Se pot deduce proprietăți importante ale operațiilor cu funcții integrabile, amintim aici proprietatea de liniaritate – aditivitate și omogenitate conținută în proprietatea 9.1 a) și care se demonstrează cu ajutorul formulei Leibniz-Newton.

**Exemplu 9.2.**  $\int_0^{\pi/4} \frac{1}{\cos^2(x)} dx = tg(x)|_0^{\pi/4} = tg\left(\frac{\pi}{4}\right) - tg(0) = 1 - 0 = 1$

Deoarece  $\int \frac{1}{\cos^2(x)} dx = \operatorname{tg}(x) + C$ , o primitivă a funcției  $\frac{1}{\cos^2(x)}$  fiind  $\operatorname{tg}(x)$ .

Este util de avut la îndemână tabelul cu primitivele unor funcții matematice uzuale și în același timp fundamentale. Acestea sunt prezentate în tabelul 9.1. de mai jos.

| Nr. crt | Funcția                                                                | Primitiva                                                         |
|---------|------------------------------------------------------------------------|-------------------------------------------------------------------|
| 1       | $\int 0 dx$                                                            | $C$ (const)                                                       |
| 2       | $\int dx$                                                              | $x + C$                                                           |
| 3       | $\int x^n dx$                                                          | $\frac{x^{n+1}}{n+1} + C, n \neq -1$                              |
| 4       | $\int \frac{1}{x^n} dx$                                                | $-\frac{1}{(n-1)x^{n-1}} + C, n \neq 1$                           |
| 5       | $\int x^\alpha dx$                                                     | $\frac{x^{\alpha+1}}{\alpha+1} + C, \alpha \neq -1$               |
| 6       | $\int \frac{1}{x} dx$                                                  | $\ln x  + C$                                                      |
| 7       | $\int \frac{1}{\sqrt{x}} dx$                                           | $2\sqrt{x} + C$                                                   |
| 8       | $\int \frac{1}{1+x^2} dx$<br>$\int \frac{1}{a^2+x^2} dx$               | $\arctg(x) + C$<br>$\frac{1}{a} \arctg \frac{x}{a} + C, a \neq 0$ |
| 9       | $\int \frac{1}{x^2-a^2} dx$                                            | $\frac{1}{2a} \ln \left  \frac{x-a}{x+a} \right  + C, a \neq 0$   |
| 10      | $\int \frac{1}{\sqrt{1-x^2}} dx$<br>$\int \frac{1}{\sqrt{a^2-x^2}} dx$ | $\arcsin(x) + C$<br>$\arcsin\left(\frac{x}{a}\right) + C$         |
| 11      | $\int \frac{1}{\sqrt{1+x^2}} dx$                                       | $\ln\left(x + \sqrt{1+x^2}\right) + C$                            |
| 12      | $\int e^x dx$                                                          | $e^x + C$                                                         |

|    |                               |                                                |
|----|-------------------------------|------------------------------------------------|
|    | $\int a^x dx$                 | $\frac{a^x}{\ln a} + C, \quad a > 0, a \neq 1$ |
| 13 | $\int \sin(x) dx$             | $-\cos(x) + C$                                 |
| 14 | $\int \cos(x) dx$             | $\sin(x) + C$                                  |
| 15 | $\int \frac{1}{\cos^2(x)} dx$ | $tg(x) + C$                                    |
| 16 | $\int \frac{1}{\sin^2(x)} dx$ | $-ctg(x) + C$                                  |

Tabelul 9.1. Primitivele unor funcții matematice uzuale

### 9.1.3.2. Metoda de integrare prin părți

**Teorema 9.7.** Fie funcțiile  $f, g: [a, b] \rightarrow R$  derivabile, cu derivatele continue. Atunci  $f'g$  și  $fg'$  sunt integrabile pe  $[a, b]$  și are loc relația [12,14]

|       |                                                               |
|-------|---------------------------------------------------------------|
| (9.8) | $\int_a^b f'(x)g(x)dx = f(x)g(x) _a^b - \int_a^b f(x)g'(x)dx$ |
|-------|---------------------------------------------------------------|

Relația (9.8) de mai sus este eficientă și ușor de aplicat cu condiția ca utilizatorul să aleagă potrivit funcțiile  $f$  respectiv  $g$ .

**Exemplu 9.3.** Determinați  $\int_0^\pi x \cos(x) dx$

Întrucât  $x$  este o funcție polinomială, încercăm să scriem cealaltă funcție de sub radical ca provenind dintr-o derivată, deci sub forma  $\cos(x) = \sin(x)'$ . Urmează că

$$\begin{aligned}
 \int_0^\pi x \cos(x) dx &= \int_0^\pi x (\sin x)' dx \\
 &= x \sin(x) \Big|_0^\pi \\
 &\quad - \int_0^\pi x' \sin(x) dx \\
 &= x \sin(x) \Big|_0^\pi \\
 &\quad - \int_0^\pi \sin(x) dx = x \sin(x) \Big|_0^\pi - (-\cos(x)) \Big|_0^\pi = x \sin(x) \Big|_0^\pi \\
 &\quad + \cos(x) \Big|_0^\pi = 0 - 2 = -2
 \end{aligned}$$



### 9.1.3.3. Schimbarea de variabilă

#### **Teorema 9.8. (Prima schimbare de variabilă)**

Fie  $[a,b]$ ,  $[c, d]$  intervale și  $[a,b] \xrightarrow{u} [c,d] \xrightarrow{f} R$  funcții care satisfac următoarele proprietăți: [12,14]

1.  $u$  este derivabilă cu derivata continuă pe  $[a,b]$ ;
2.  $f$  este continuă pe  $[c,d]$ .

Atunci  $(f \circ u)u'$  este integrabilă pe  $[a,b]$  și are loc relația

|       |                                                              |
|-------|--------------------------------------------------------------|
| (9.9) | $\int_a^b (f \circ u)(x)u'(x)dx = \int_{u(a)}^{u(b)} f(u)du$ |
|-------|--------------------------------------------------------------|

Trebuie remarcat faptul că atunci când se schimbă variabila de integrare se schimbă și limitele de integrare.

**Exemplu 9.4.** Să considerăm integrala  $\int_0^1 \frac{\arctg x}{1+x^2} dx$

$$\text{Avem } \int_0^1 \frac{\arctg x}{1+x^2} dx = \int_0^1 \arctg x \cdot \frac{1}{1+x^2} dx = \int_0^1 \arctg x (\arctg x)'$$

Să notăm  $u = \arctg x$ .

$$\text{Obținem ca: } = (\arctg x)' dx; du = \frac{1}{1+x^2} dx .$$

Calculăm noile limite de integrare, înlocuindu-le pe cele vechi în schimbarea de variabilă. Astfel:

$$x = 0 \rightarrow u = \arctg 0 = 0$$

$$x = 1 \rightarrow u = \arctg 1 = \frac{\pi}{4}$$

Înlocuind  $du$  și  $u$  - în această ordine! - urmează că

$$\int_0^1 \frac{\arctg x}{1+x^2} dx = \int_0^{\pi/4} u du = \frac{u^2}{2} \Big|_0^{\pi/4} = \frac{1}{2} \left(\frac{\pi}{4}\right)^2 - \frac{1}{2} 0^2 = \frac{\pi^2}{32}$$

#### **Teorema 9.9. (A doua schimbare de variabilă)**

Fie  $[a,b]$ ,  $[c, d]$  intervale și  $[a,b] \xrightarrow{u} [c,d] \xrightarrow{f} R$  funcții care satisfac următoarele proprietăți:

1.  $u$  este derivabilă și inversabilă, iar  $v = u^{-1}$  este derivabilă cu derivata continuă pe  $[c,d]$ ;
2.  $f$  este continuă pe  $[c,d]$ .

Atunci  $(f * u)$  este integrabilă pe  $[a,b]$  și are loc relația

|        |                                                                   |
|--------|-------------------------------------------------------------------|
| (9.10) | $\int_a^b (f * u)(x) dx = \int_{u(a)}^{u(b)} f(u) \cdot v'(u) du$ |
|--------|-------------------------------------------------------------------|

Trebuie remarcat aici căci ca și în cazul integralelor nedefinite, cea de a doua metodă de schimbare de variabilă corespunde situației în care nu se poate pune în evidență sub integrala inițială, derivata schimbării de variabilă.

## 9.2. Exemple rezolvate

**9.2.1.** Să se calculeze integrala  $\int_{-1}^2 x^2 dx$ .

*Rezolvare.* Funcția  $f: [-1, 2] \rightarrow R, f(x) = x^2$  este continuă pe intervalul  $[-1, 2]$  deci admite primitiva  $F(x) = \frac{1}{3}x^3, x \in [-1, 2]$ .

Aplicând formula Leibniz-Newton obținem:

$$\int_{-1}^2 x^2 dx = \left. \frac{1}{3}x^3 \right|_{-1}^2 = \frac{2^3}{3} - \frac{(-1)^3}{3} = 3$$

**9.2.2.** Să se calculeze integrala  $\int_2^3 \frac{dy}{y^2}$ .

*Rezolvare.* Funcția  $f: [2,3] \rightarrow R, f(y) = \frac{1}{y^2}$  este continuă și deci admite primitiva  $F(y) = -\frac{1}{y}, y \in [2,3]$ . În baza formulei Leibniz-Newton avem:

$$\int_2^3 \frac{dy}{y^2} = \left. -\frac{1}{y} \right|_2^3 = -\frac{1}{3} - \left( -\frac{1}{2} \right) = \frac{1}{6}$$

**9.2.3.** Să se calculeze integrala  $\int_{-\pi/2}^{\pi/6} (2\cos x - \sin(3x)) dx$ .

*Rezolvare.*

$$\int_{-\pi/2}^{\pi/6} (2\cos x - \sin(3x))dx = \left(2\sin x + \frac{1}{3}\cos(3x)\right)\Big|_{-\pi/2}^{\pi/6} = \left(2\sin \frac{\pi}{6} + \frac{1}{3}\cos \frac{\pi}{2}\right) - \left(2\sin\left(-\frac{\pi}{2}\right) + \frac{1}{3}\cos\left(-\frac{3\pi}{2}\right)\right) = 3.$$

**9.2.4.** Să se calculeze integrala  $\int_0^1 (2^{3x} - 4^{x+1})dx$ .

*Rezolvare.* Notând cu  $F$  primitiva funcției de sub integrală, avem

$$F(x) = \int 2^{3x} dx - 4 \int 4^x dx = \frac{1}{3} \frac{2^{3x}}{\ln 2} - 4 \frac{4^x}{\ln 4} = \frac{2^{3x}}{3 \ln 2} - \frac{2 \cdot 4^x}{\ln 2}$$

Atunci, revenind la integrala definită și înlocuind, vom avea:

$$\int_0^1 (2^{3x} - 4^{x+1})dx = F(1) - F(0) = -\frac{11}{3 \ln 2}$$

**9.2.5.** Să se calculeze integrala  $\int_0^1 (x+1)e^{2x} dx$ .

*Rezolvare.* Acest exemplu se rezolvă folosind metoda integrării prin părți.

Pentru a obține o primitivă a funcției continue:  $f: [0,1] \rightarrow \mathbb{R}, f(x) = \int_0^1 (x+1)e^{2x}$ , calculăm integrala nedefinită a funcției  $f$ , utilizând metoda integrării prin părți. Fie  $u = x + 1, dv = e^{2x} dx$ . Atunci  $du = (x+1)'dx = dx$  și  $v = \int e^{2x} dx = \frac{1}{2}e^{2x}$ .

Folosim în continuare formula de integrare prin părți și obținem:

$$\begin{aligned} \int (x+1)e^{2x} dx &= uv - \int v du = \frac{1}{2}(x+1)e^{2x} \\ &\quad - \frac{1}{2} \int e^{2x} dx = \frac{1}{4}(2x+1)e^{2x} + C \end{aligned}$$

Așadar una din primitivele funcției  $f: [0,1] \rightarrow \mathbb{R}, f(x) = \int_0^1 (x+1)e^{2x}$  este funcția  $[0,1] \rightarrow \mathbb{R}, F(x) = \frac{1}{4}(2x+1)e^{2x} + C$ . Deoarece  $F(1) = \frac{3}{4}e^2, F(0) = \frac{1}{4}$ , din formula Leibniz-Newton rezultă:

$$\int_0^1 (x+1)e^{2x} = F(1) - F(0) = \frac{1}{4}(3e^2 - 1)$$

**9.2.6.** Să se calculeze integrala  $\int_0^\pi (x^2 + x + 1)\cos x dx$ .

*Rezolvare.* Avem de aplicat și aici tot metoda integrării prin părți. Vom integra de două ori prin părți pentru a obține o primitivă a funcției continue  $f: [0, \pi] \rightarrow R$ ,  $f(x) = (x^2 + x + 1)\cos x$ . Considerând notațiile :

$$\begin{cases} u = x^2 + x + 1 \\ du = (x^2 + x + 1)' dx, \\ du = (2x + 1) dx \end{cases} \begin{cases} dv = \cos x dx \\ v = \int \cos x dx \\ v = \sin x \end{cases}$$

Obținem, făcând înlocuirile, că

$$F(x) = \int (x^2 + x + 1)\cos x dx = (x^2 + x - 1)\sin x + (2x + 1)\cos x$$

Calculăm în continuare  $F$  în capetele intervalului  $[0, \pi]$  și obținem  $F(\pi) = -(2\pi + 1)$ ,  $F(0) = 1$

Deci putem aplica formula Leibniz-Newton și găsim

$$\int_0^\pi (x^2 + x + 1)\cos x dx = -2(\pi + 1)$$

**9.2.7.** Să se calculeze integrala  $\int_0^1 x(2x - 1)^5 dx$ .

*Rezolvare.* Vom aplica metoda substituției. Efectuăm substituția  $t = 2x - 1$ . Exprimând din notație  $x$  funcție de  $t$ , obținem schimbarea de variabilă  $x = \frac{1}{2}(t + 1)$  și deci  $dx = \frac{1}{2}(t + 1)' dt$ ,  $dx = \frac{1}{2} dt$ .

În continuare înlocuim  $x$  și  $dx$  în integrala nedefinită  $\int x(2x - 1)^5 dx$ , și obținem

$$\int \frac{1}{2}(t + 1)t^5 \frac{1}{2} dt = \frac{1}{4} \int (t^6 + t^5) dt = \frac{1}{4} \left( \frac{t^7}{7} + \frac{t^6}{6} \right)$$

Revenind la substituția inițială  $t = 2x - 1$ , obținem că una din primitivele funcției  $f: [0, 1] \rightarrow R$ ,  $f(x) = x(2x - 1)^5$  este funcția  $F: [0, 1] \rightarrow R$ ,  $F(x) = \frac{1}{4} \left( \frac{(2x-1)^7}{7} + \frac{(2x-1)^6}{6} \right) = \frac{1}{168} (12x + 1)(2x - 1)^6$ .

Conform formulei Leibniz-Newton obținem în final:

$$I = F(1) - F(0) = \frac{1}{14}$$

### 9.3. Aplicații ale integralei în chimie

Integrala ca instrument de măsurare, are variate aplicații în chimie. Expunem în cele ce urmează câteva exemple notabile.

**9.3.1.** Să se determine legea de descompunere a unei substanțe radioactive [4,10].

*Rezolvare.* Acest lucru se rezolvă foarte ușor cu ajutorul conceptului de integrală. Să notăm cu  $x(t)$  cantitatea de substanță radioactivă la momentul  $t$ , iar cu  $x_0$  cantitatea de substanță radioactivă la momentul inițial  $t_0=0$ . În intervalul de timp  $[t, t+\Delta t]$ , cantitatea de substanță descompusă  $x(t) - x(t + \Delta t) = \beta x(t)\Delta t$ , sau

|        |                                                      |
|--------|------------------------------------------------------|
| (9.11) | $\Delta x(t) = -\beta x(t)\Delta t, \quad \beta > 0$ |
|--------|------------------------------------------------------|

unde  $\beta$  este coeficient de proporționalitate care depinde de natura substanței.

Împărțind (9.11) la  $\Delta t$  și trecând la limită cu  $\Delta t \rightarrow 0$  obținem  $x'(t) = -\beta x(t)$  și de aici  $\frac{dx(t)}{dt} = -\beta x(t) \Leftrightarrow \frac{dx(t)}{x(t)} = -\beta dt$ . De aici, urmează că  $\int \frac{dx(t)}{x(t)} = \int (-\beta) dt$ . Deci integrând, obținem că  $\ln|x(t)| = -\beta t + \ln C$   
 $\Leftrightarrow x(t) = C e^{-\beta t}$ .

În continuare din condiția inițială  $x(0) = x_0$  obținem valoarea constantei  $C = x_0$ .

Soluția problemei Cauchy și deci legea de descompunere a unei substanțe radioactive este

|        |                           |
|--------|---------------------------|
| (9.12) | $x(t) = x_0 e^{-\beta t}$ |
|--------|---------------------------|

**Problema Cauchy**, cunoscută și ca **problema valorii inițiale**, sau doar **problemă inițială**, este o problemă referitoare la o ecuație diferențială ordinară, împreună cu o condiție inițială, care specifică valoarea funcției pentru un anumit argument din domeniul său de definiție. Modelarea unui fenomen în fizică, chimie sau în alte științe echivalează frecvent cu rezolvarea

unei probleme cu condiție inițială. În acest context ecuația diferențială specifică modul în care acesta evoluează în timp, având în vedere condițiile inițiale ale problemei.

Această problemă va fi abordată în secțiunea imediat următoare.

**9.3.2.** Într-un vas se află  $a$  litri de soluție omogenă care conține  $b$  kg de sare. În fiecare minut din vas se iau  $c$  litri de soluție omogenă și se adaugă  $c$  litri de dizolvant. Să se determine legea de variație a cantității de sare  $x(t)$  din soluția omogenă în fiecare moment de timp. [10]

*Rezolvare.* În intervalul de timp  $[t, t+\Delta t]$ , din vas se iau  $c\Delta t$  litri de soluție omogenă. Această cantitate de soluție omogenă se înlocuiește în intervalul indicat de timp cu  $c\Delta t$  litri de dizolvant. Să determinăm cantitatea de sare care se ia din vas.

Concentrația sării din soluție în momentul de timp  $t$  este  $\frac{x(t)}{a}$  kg/l. Deci, în volumul de  $c\Delta t$  litri de soluție omogenă se conține o cantitate de sare

|        |                                                         |
|--------|---------------------------------------------------------|
| (9.13) | $\Delta x(t) = -\frac{x(t)}{a} c \Delta t \text{ (kg)}$ |
|--------|---------------------------------------------------------|

Semnul minus indică micșorarea cantității de sare în soluția omogenă. Împărțind ecuația (9.13) la  $\Delta t$  și trecând la limită cu  $\Delta t \rightarrow 0$  obținem ecuația

$$\frac{dx(t)}{dt} = -\frac{c}{a} x(t) \Leftrightarrow \frac{dx(t)}{x(t)} = -\frac{c}{a} dt.$$

Atunci  $\int \frac{dx(t)}{x(t)} = \int -\frac{c}{a} dt$ . Integrând obținem că  $|x(t)| = -\frac{c}{a} t + \ln C \Leftrightarrow x(t) = C e^{-\frac{c}{a} t}$ .

Din condiția inițială  $x(0) = b$  obținem  $b = C e^0 = C$ .

Astfel, soluția problemei Cauchy și deci legea de variație a cantității de sare din soluția omogenă în momentul de timp  $t$  este  $x(t) = b e^{-\frac{c}{a} t}$ .

## 9.4. Probleme propuse

**9.4.1.** Aplicând formula Leibniz-Newton să se calculeze integralele următoare:

|                           |                                      |                           |
|---------------------------|--------------------------------------|---------------------------|
| a) $\int_1^4 \sqrt{x} dx$ | b) $\int_1^9 \frac{1}{x\sqrt{x}} dx$ | c) $\int_0^1 x(x-1)^2 dx$ |
|---------------------------|--------------------------------------|---------------------------|

|                               |                            |                                        |
|-------------------------------|----------------------------|----------------------------------------|
| d) $\int_0^4 \frac{dx}{2x+1}$ | e) $\int_{-1}^1 e^{-x} dx$ | f) $\int_0^\pi (\sin x + \cos x)^2 dx$ |
|-------------------------------|----------------------------|----------------------------------------|

**9.4.2.** Utilizând metoda integrării prin părți să se calculeze următoarele integrale definite:

|                             |                                      |                                   |
|-----------------------------|--------------------------------------|-----------------------------------|
| a) $\int_0^\pi x \cos x dx$ | b) $\int_0^1 x e^x dx$               | c) $\int_0^\pi (x+1) \cos(2x) dx$ |
| d) $\int_1^e x^2 \ln x dx$  | e) $\int_{-3/2}^0 (3x+1) e^{-2x} dx$ | f) $\int_0^1 x^2 e^x dx$          |

**9.4.3.** Utilizând substituția indicată pentru calculul unei primitive, să se calculeze următoarele integrale definite:

|                                      |                                                                     |                                                                          |
|--------------------------------------|---------------------------------------------------------------------|--------------------------------------------------------------------------|
| a) $\int_{-1}^1 x(1+x)^4 dx, 1+x=t$  | b) $\int_{-1}^0 \frac{x dx}{(2+x)^3}, 2+x=t$                        | c) $\int_1^4 \frac{dx}{2x+1}, 2x+1=t$                                    |
| d) $\int_0^1 \sqrt{4+5x} dx, 4+5x=t$ | e) $\int_{-\pi}^\pi \cos\left(\frac{x}{2}\right) dx, \frac{x}{2}=t$ | f) $\int_0^\pi \frac{dx}{\cos^2\left(\frac{x}{3}\right)}, \frac{x}{3}=t$ |

## TEMA 10. ECUAȚII DIFERENȚIALE ORDINARE DE ORDINUL ÎNTÂI. APLICAȚII ÎN CHIMIE

### 10.1. Introducere

Studiul ecuațiilor diferențiale formează obiectul unui capitol foarte important al matematicii, atât datorită rezultatelor teoretice deosebit de interesante cât și pentru că ele au nenumărate aplicații în cele mai diverse domenii.

Ceea ce deosebește o ecuație diferențială de o ecuație algebrică este faptul că necunoscuta nu este un număr ci o funcție care satisface o anumită egalitate și care trebuie determinată.

Multe fenomene sunt descrise cu ajutorul ecuațiilor diferențiale obținute prin metoda cunoscută sub numele de “metoda diferențialelor”. Aceasta constă în înlocuirea unor relații ce apar între creșterile infinit de mici ale unor cantități care variază în timp prin relații între diferențialele (derivatele) lor.

#### 10.1.1. Viteza instantanee de deplasare a unui corp

Viteza instantanee de deplasare a unui mobil care la momentul  $t$  a parcurs distanța  $s(t)$  este :

|        |                                                                 |
|--------|-----------------------------------------------------------------|
| (10.1) | $v(t) = \lim_{t \rightarrow t_0} \frac{s(t) - s(t_0)}{t - t_0}$ |
|--------|-----------------------------------------------------------------|

La rândul său accelerația corpului la momentul  $t_0$  este

|        |                                                                                      |
|--------|--------------------------------------------------------------------------------------|
| (10.2) | $a(t) = \lim_{t \rightarrow t_0} \frac{v(t) - v(t_0)}{t - t_0} = v'(t_0) = a''(t_0)$ |
|--------|--------------------------------------------------------------------------------------|

În relațiile ce descriu mișcarea, viteza se va considera  $v(t) = s'(t)$  și  $a(t) = v'(t) = s''(t)$ .

Ecuația care descrie mișcarea corpului se obține folosind legile care o guvernează.

*Exemplu. Mișcarea unui corp sub acțiunea greutății sale și întâmpinând o rezistență a aerului proporțională cu viteza sa (acest caz corespunde vitezelor mici) poate fi descrisă cu ajutorul unei ecuații diferențiale.*



Se notează cu  $v(t)$  viteza instantanee a corpului la momentul de timp  $t > 0$ . Rezistența aerului va fi  $R(t) = kv(t)$ . Legea fundamentală a mecanicii ( $F = m\vec{a}$ ) conduce la relația  $mg - kv(t) = mv'(t)$ , care reprezintă o ecuație diferențială cu necunoscuta  $v=v(t)$ . Pentru a determina viteza instantanee a corpului trebuie rezolvată această ecuație.

În chimie se definește viteza de reacție ca fiind variația cantității de substanță într-un interval de timp.

### 10.1.2. Viteza de reacție chimică

Dacă un reactant are la momentul “ $t$ ” masa “ $m(t)$ ”, atunci viteza sa de reacție, măsurând variația masei în intervalul de timp în care ea se produce, este

|        |                                         |
|--------|-----------------------------------------|
| (10.3) | $v(t) = \pm m'(t) := \pm \frac{dm}{dt}$ |
|--------|-----------------------------------------|

Semnul “+” se folosește pentru substanțele rezultate, iar semnul “-” pentru cele consumate.

*Exemplu : Într-o reacție chimică izolată masa inițială de substanță este “ $a$ ”. Dacă notăm  $m(t)$  masa de substanță consumată la momentul “ $t$ ” și dacă viteza de reacție este proporțională cu masa rămasă, atunci fenomenul e descris de următoarea problemă Cauchy:*

$$\begin{cases} m'(t) = -k(a - m(t)) \\ m(0) = 0 \end{cases}$$

**10.1.3 În cinetica eterogenă** – dacă ne referim la mecanismul Langmuir-Hinshelwood pentru reacții superficiale, cinetica observată prin modificarea presiunii este dată de ecuația [6,7]

|        |                                        |
|--------|----------------------------------------|
| (10.4) | $p'(t) = -k \frac{p}{\frac{1}{b} + p}$ |
|--------|----------------------------------------|

În cazul recombinației atomilor sau radicalilor liberi de același fel pe pereții vasului de reacție, ecuația este

|        |                                          |
|--------|------------------------------------------|
| (10.5) | $p'(t) = -k \frac{p^2}{\frac{1}{b} + p}$ |
|--------|------------------------------------------|

Ecuatiile diferențiale joacă un rol esențial în explicarea fenomenelor din prisma cineticii chimice, după cum se va vedea din exemplele următoare.

Probleme fundamentale în teoria ecuațiilor (în general) sunt determinarea soluțiilor lor sau aproximarea acestor soluții dacă determinarea analitică nu este posibilă.

Teoria ecuațiilor diferențiale are mai multe ramuri. Menționăm aici:

- **teoria cantitativă** - se ocupă de rezolvarea analitică a ecuațiilor. Sunt precizate tipurile de ecuații ale căror soluții se pot obține analitic și tehnicile de rezolvare a lor.

- **teoria calitativă** - încearcă să deducă proprietățile soluțiilor, chiar dacă expresia lor analitică nu poate fi cunoscută.

- **aplicarea metodelor numerice pentru aproximarea soluțiilor** [8].

## 10.2. Considerații generale

**Definiția 10.1.** Se numește **ecuație diferențială** cu variabila independentă  $t$ , și funcția necunoscută  $x=x(t)$ , o egalitate de forma

|        |                                       |
|--------|---------------------------------------|
| (10.6) | $F(t, x, x', x'', \dots x^{(n)}) = 0$ |
|--------|---------------------------------------|

unde  $F: D \subseteq R^{n+1} \rightarrow R$  este o funcție dată, continuă pe domeniul său de definiție, iar  $x', x'', \dots x^{(n)}$  sunt derivatele lui  $x$ .

Dacă ecuația precedentă este scrisă sub forma

|        |                                                           |
|--------|-----------------------------------------------------------|
| (10.7) | $x^{(n)} = f(t, x(t), x'(t), x''(t), \dots x^{(n-1)}(t))$ |
|--------|-----------------------------------------------------------|

atunci spunem că este dată în forma explicită.

Ecuația diferențială are ordinul “ $n$ ” dacă derivata de ordin maxim care apare în ecuație este  $x^{(n)}$ .

Există trei tipuri de soluții:

- **Soluția generală** a ecuației (10.6) este soluția care depinde de  $t$  și de  $n$  constante arbitrare  $C_1, C_2, \dots, C_n$  (exact atâtea cât este ordinul ecuației), adică este de forma  $x = x(t, C_1, C_2, \dots C_n)$ . Aceasta este *forma explicită a soluției* pentru că se precizează modul în care funcția necunoscută  $x$  depinde de variabila independentă  $t$ .

Uneori soluția generală este prezentată în *formă implicită* (integrala generală a ecuației), adică  $\Omega(x, y, C_1, C_2, \dots C_n) = 0$

- Orice soluție care se obține din soluția generală pentru anumite valori particulare ale constantelor se numește **soluție particulară**.
- Soluțiile ecuației care nu se pot obține prin acest procedeu din soluția generală se numesc **soluții singulare**.

### 10.3. Ecuații diferențiale de ordinul întâi

Ecuațiile diferențiale de ordinul I au forma

|        |                   |
|--------|-------------------|
| (10.8) | $F(t, x, x') = 0$ |
|--------|-------------------|

Cel mai adesea ele sunt scrise în forma explicită  $x' = f(x, t)$ . În această ecuație „x” este variabila independentă și y(x) este funcția necunoscută, ce trebuie determinată prin rezolvarea ecuației. Soluția lor generală depinde de o singură constantă.

O **problemă Cauchy de ordinul I** este alcătuită dintr-o ecuație diferențială și o condiție inițială:

|        |                                  |
|--------|----------------------------------|
| (10.9) | $F(t, x, x') = 0$ $x(t_0) = x_0$ |
|--------|----------------------------------|

Metoda de rezolvare a **problemelor Cauchy** este următoarea:

- Se determină soluția generală a ecuației diferențiale (soluție care depinde de o constantă);
- Se determină constanta folosind condiția inițială.

Din punctul de vedere al rezolvării analitice există două categorii importante de ecuații :

- ecuații fundamentale (ecuațiile cu variabile separabile, ecuațiile liniare, ecuații cu diferențiale totale);
- ecuații reductibile la ecuații fundamentale (ecuații omogene si reductibile la ecuații omogene, ecuații care admit factor integrant, ecuații de tip Bernoulli, de tip Riccati, de tip Lagrange, de tip Clairaut etc).

Este foarte importantă cunoașterea algoritmului de rezolvare a ecuațiilor fundamentale precum și a metodelor de reducere a celorlalte ecuații la ecuații fundamentale.

### 10.3.1. Ecuații cu variabile separabile

Forma generală a ecuației este

|         |                        |
|---------|------------------------|
| (10.10) | $x' = f(t) \cdot g(x)$ |
|---------|------------------------|

unde  $f, g$  sunt funcții reale date, continue pe domeniul lor de definiție.

Soluțiile ecuației  $g(x)=0$  sunt soluții, de obicei singulare, ale ecuației (10.10).

Dacă  $g(x) \neq 0$ , rezolvarea constă în separarea variabilelor urmată de integrare.

#### Metoda de rezolvare:

- Se rezolvă ecuația  $g(x) = 0$  cu soluțiile  $x_1, x_2, \dots, x_n$ .
- Se scriu soluțiile singulare ale ecuațiilor  $x_1(t) = x_1, \dots, x_n(t) = x_n$ . Domeniul lor de definiție este domeniul de definiție al funcției  $f$ .
- Se scrie ecuația sub forma  $\frac{x'}{g(x)} = f(t)$  (ceea ce este posibil pentru că  $g(x) \neq 0$ ) și se obține integrala generală a ecuației:  $\int \frac{dx}{g(x)} = \int f(t)dt + C$ , adică forma implicită a soluției.
- Din integrala generală se calculează (dacă este posibil)  $x$  și se obține forma explicită a soluției.

#### Exemple

##### 1. Să se rezolve problema Cauchy

$$\begin{cases} x' = k \\ x(0) = 0 \end{cases} \quad (\text{reacție chimică izolată de ordinul 0}).$$

Soluția generală a ecuației diferențiale  $x' = k$ , obținută prin integrare directă este  $x(t) = \int k dt = kt + C$ .

Din condiția inițială  $x(0) = 0$  se obține  $k \cdot 0 + C = 0$ ,  $C = 0$ .

Soluția problemei este  $x(t) = kt$ .

##### 2. Să se rezolve problema Cauchy

$$\begin{cases} x' = k(a - x)(c + x) \\ x(0) = 0 \end{cases} \quad (\text{reacție izolată autocatalitică}).$$

În acest caz avem  $f(t) = k$ ,  $g(x) = (a - x)(c + x)$ .

Soluții singulare se obțin din egalitatea  $(a - x)(c + x) = 0$ . Ele sunt  $x_1(t) = a, x_2(t) = -c$ .

Deoarece ele nu verifică condiția inițială  $x(0) = 0$ , rezultă că ele nu sunt soluții ale problemei Cauchy.

Ecuția se scrie sub forma  $\frac{x'}{(a-x)(c+x)} = k$ . Prin integrare obținem  $\int \frac{dx}{(a-x)(c+x)} = \int k dt$ .

Pentru calculul integralei se descompune fracția de integrat în fracții simple

$$\begin{aligned} \int \frac{dx}{(a-x)(c+x)} &= \int \frac{1}{a+c} \left( \frac{1}{a-x} + \frac{1}{c+x} \right) dx \\ &= \frac{1}{a+c} (\ln(c+x) - \ln(a-x)) = \frac{1}{a+c} \ln \frac{c+x}{a-x} \end{aligned}$$

Soluția generală dată în formă implicită este:  $\frac{1}{a+c} \ln \frac{c+x}{a-x} = kt + C$

Din condiția  $x(0) = 0$  rezultă  $C = \frac{1}{a+c} \ln \frac{c}{a}$

Astfel, soluția problemei Cauchy sub forma implicită este

$$\frac{1}{a+c} \ln \frac{c+x}{a-x} - \frac{1}{a+c} \ln \frac{c}{a} = kt$$

Adică

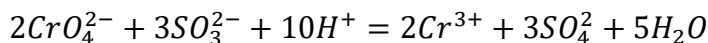
$$\frac{1}{a+c} \ln \frac{a(c+x)}{c(a-x)} = kt$$

Din această relație se poate calcula  $x=x(t)$  și afla soluția problemei scrisă în formă explicită:

$$x(t) = ac \frac{e^{(a+c)kt} - 1}{a + ce^{(a+c)kt}}$$

### 3. Un exemplu din cinetica chimică

Reacția de oxidare a sulfitului cu cromat decurge după ecuația stoechiometrică [6,10 pb 6.1.35]



La aciditate constanta ecuația vitezei este

$$-\frac{d[CrO_4^{2-}]}{dt} = k[CrO_4^{2-}][SO_3^{2-}]$$

Să se integreze ecuația de viteză ținând seama de stoechiometria reacției pentru:

- Cazul când concentrațiile inițiale sunt diferite;
- Cazul când concentrațiile inițiale sunt egale;
- Cazul când concentrațiile sunt stoechiometrice.

*Rezolvare.* Să folosim variabila de reacție  $x$ . Notăm  $[CrO_4^{2-}]_0 = a$ ,  $[CrO_4^{2-}] = a - 2x$ ,  $[SO_3^{2-}]_0 = b$ ,  $[SO_3^{2-}] = b - 3x$ . Legea de viteză se va scrie

$$\frac{dx}{dt} = k(a - 2x)(b - 3x)$$

Prin separarea variabilelor se obține

$$\frac{dx}{(a - 2x)(b - 3x)} = kdt$$

În continuare pentru integrare procedăm astfel:

$$\int_0^x \frac{dx}{(a - 2x)(b - 3x)} = \int_0^x \frac{pdx}{a - 2x} + \int_0^x \frac{qdx}{b - 3x} = kt$$

Pentru determinarea parametrilor  $p$  și  $q$  scriem identitatea

$$\frac{1}{(a - 2x)(b - 3x)} = \frac{p}{a - 2x} + \frac{q}{b - 3x}$$

Rezolvând această identitate obținem  $p$  și  $q$ :  $p = \frac{2}{2b - 3a}$ ,  $q = \frac{3}{3a - 2b}$ .

Înlocuind valorile lui  $p$  și  $q$  și efectuând calculele, obținem:

$$\frac{1}{2b - 3a} \ln \frac{a}{a - 2x} + \frac{1}{2b - 3a} \ln \frac{b - 3x}{b} = kt$$

Dând factor comun  $1/(2b - 3a)$  vom obține expresia finală, valabilă pentru concentrații diferite de  $a$  și  $b$  și diferite de concentrațiile stoechiometrice:

$$kt = \frac{1}{2b - 3a} \ln \frac{a(b - 3x)}{b(a - 2x)}$$

Pentru situația  $a=b$  avem:

$$kt = \frac{1}{-a} \ln \frac{a(a - 3x)}{a(a - 2x)} = \frac{1}{a} \ln \frac{a - 2x}{a - 3x}$$

Pentru situația concentrațiilor stoechiometrice  $\frac{CrO_4^{2-}}{SO_3^{2-}} = 2:3$  ecuația de viteză poate fi scrisă:

$$\frac{dx}{dt} = k(a - 2x) \left( \frac{3a}{2} - 3x \right) = \frac{k}{2} (a - 2x)(3a - 6x) = \frac{3k}{2} (a - 2x)^2$$

După separarea variabilelor și integrare obținem:

$$\int_0^x \frac{dx}{(a - 2x)^2} = \frac{3k}{2} t; \quad \frac{1}{a - 2x} - \frac{1}{a} = 3kt$$

### 10.3.2. Ecuații liniare

Forma generală a unei ecuații liniare este

|         |                     |
|---------|---------------------|
| (10.11) | $x' = P(t)x + Q(t)$ |
|---------|---------------------|

unde  $P, Q : I \rightarrow R$  sunt funcții date, continue pe domeniul de definiție.

Aceste ecuații se rezolvă prin metoda variației constantei.

**Metoda de rezolvare** (metoda variației constantei)

- Se rezolvă ecuația omogenă  $x' = P(t)x$  care este o ecuație cu variabile separabile și se obține soluția nenulă  $x = C \cdot f(t)$
- se consideră constanta  $C$  ca fiind funcție de  $t$ , adică se scrie  $x(t) = C(t)f(t)$
- se calculează  $x'(t) = C'(t)f(t) + C(t)f'(t)$  și se introduce în ecuația (10.11); se reduc termenii care conțin pe  $C(t)$  și se obține o ecuație mai simplă de forma  $C'(t) = g(t)$ ;

- se rezolvă ecuația  $C'(t) = g(t)$  și se obține soluția  $C(t) = \int g(t)dt + K$
- se introduce expresia lui  $C(t)$  în  $x(t) = C(t)f(t)$  și se obține forma explicită a soluției ecuației (10.11)

### Exemple

#### 4. Să se rezolve problema Cauchy

$$\begin{cases} x' = k(a - x) \\ x(0) = 0 \end{cases} \quad (\text{reacție chimică izolată de ordinul întâi})$$

Ecuația se scrie sub forma  $x' = -kx + ka$ , deci  $P(t) = -k$ ,  $Q(t) = ka$

a) Se rezolvă ecuația omogenă.

Ecuația omogenă  $x' = -kx$  poate fi considerată o ecuație cu variabile separabile. Avem în continuare  $\int \frac{dx}{x} = \int -kdt$ , deci  $\ln x = -kt + C$ , adică  $x(t) = C \cdot e^{-kt}$

b) Se aplică metoda variației constantei.

Se consideră  $x(t) = C(t) \cdot e^{-kt}$ .

Atunci  $x'(t) = C'(t)e^{-kt} - kC(t)e^{-kt}$ .

Se introduc expresiile în ecuația inițială  $x' = -kx + ka$  și se obține

$$C'(t)e^{-kt} - kC(t)e^{-kt} = -kC(t)e^{-kt} + ka.$$

De aici rezultă  $C'(t) = ka e^{kt}$ , adică  $C(t) = a e^{kt} + A$ .

Înlocuind în expresia lui  $x(t)$  obținem

$$x(t) = a + A e^{-kt}$$

Din condiția inițială  $x(0)=0$  obținem  $A=-a$ , deci soluția problemei Cauchy este

$$x(t) = a(1 - e^{-kt}).$$

#### 10.4. Aplicații în chimie

Dintre aplicațiile ecuațiilor diferențiale, foarte utile sunt cele din cinetica chimică.



Există tabele specifice conținând informații despre soluțiile celor mai importante ecuații, care pot fi aplicate direct, fără a mai rezolva ecuația [10]. Rezultatele din tabele se obțin din rezolvarea problemei Cauchy

|         |                                                   |
|---------|---------------------------------------------------|
| (10.12) | $\begin{cases} x' = f(x) \\ x(0) = 0 \end{cases}$ |
|---------|---------------------------------------------------|

În cazul reacțiilor izolate, în tabele se găsesc coloane pentru:

1. Ordinul reacției;

2. Legea vitezei ( $x' = f(x)$ ). Această lege trebuie obținută din considerente practice, de obicei coeficienții se determină prin multe măsurători și folosirea unor metode statistice. Aici  $x=x(t)$  reprezintă substanța consumată până la momentul “t”

3. Ecuația cinetica integrală. Are trei subcoloane:

3.1. Se precizează valoarea lui  $kt$  integrând ecuația de la 2 și calculând  $a-x(t)$ ;

3.2. Se precizează forma liniarizată folosind tot ecuația de la 2.

3.3. Se precizează expresia lui  $a-x(t)$ , care se obține din soluția problemei Cauchy;

4. Timpul de reacție parțială:  $t_f$  este momentul în care masa substanței rămase reprezintă fracția  $f$  din masa substanței inițiale ( $f$  este totdeauna subunitar).

5. Timpul de înjumătățire:  $t_{1/2}$  este momentul în care a rămas jumătate din masa inițială de substanță

6. Expresia analitică a vitezei de reacție, care se obține derivând expresia lui  $x(t)$ .

## Exemple

### 10.4.1. Reacția de ordin 0 este caracterizată de problema Cauchy

$$\begin{cases} x'(t) = k \\ x(0) = 0 \end{cases}$$

Din integrarea ecuației  $x'(t) = k$  se obține  $\int x'(t)dt = \int kdt$ , adică  $x(t) = kt + C$ .

Din condiția inițială  $x(0) = 0$  se obține  $C=0$ . Soluția problemei este deci  $x(t) = kt$ .

Urmând modul de completare de tabel expus mai sus pentru reacțiile izolate (pașii 1-6), coloanele din tabel se completează astfel:

3.1. avem  $kt = x = a - (a - x)$

3.2. avem  $a - x = a - kt$

3.3. avem  $a - x(t) = a - kt$ .

4. Timpul de reacție parțială este dat de relația  $a - x(t_f) = f \cdot a$ . Se obține  $a - kt_f = f \cdot a$ , de unde obținem  $t_f = a(1 - f) \frac{1}{k}$ .

5. Timpul de înjumătățire este  $t_{1/2} = a \left(1 - \frac{1}{2}\right) \frac{1}{k} = \frac{a}{2k}$ .

6. Expresia vitezei este  $x' = k$ .

#### 10.4.2. Reacția de ordinul I este caracterizată de problema Cauchy

$$\begin{cases} x' = k(a - x) \\ x(0) = 0 \end{cases}$$

Pe coloana 2 apare deci ecuația  $x' = k(a - x)$ .

Ea este o ecuație cu variabile separabile, se scrie sub forma  $\frac{x'}{a-x} = k$ .

Din integrare se obține  $\int \frac{dx}{a-x} = \int k dt$ , adică  $-\ln(a - x(t)) = kt + C$ .

Din condiția inițială  $x(0) = 0$  se obține  $C = -\ln a$ , deci  $kt = \ln a - \ln(a - x) = \ln \frac{a}{a-x}$ .

Soluția problemei Cauchy, obținută anterior la exemplul 4 este  $x(t) = a(1 - e^{-kt})$ .

Coloanele din tabel se completează astfel:

3.1. avem  $kt = \ln \frac{a}{a-x}$ ;

3.2. avem  $\lg(a - x) = \lg a - \frac{kt}{\lg e} = \lg a - \frac{kt}{2.3}$

3.3. avem  $a - x(t) = a - a(1 - e^{-kt}) = ae^{-kt}$

4. Timpul de reacție parțială este dat de relația  $-x(t_f) = f \cdot a$ . În cazul acesta  $a - a(1 - e^{-kt_f}) = f \cdot a$  conduce la  $e^{-kt_f} = f$ . Prin logaritmare se obține  $t_f = -\frac{\ln f}{k}$ .

5. Timpul de înjumătățire este  $t_{1/2} = -\frac{\ln(\frac{1}{2})}{k} = \frac{\ln 2}{k} = \frac{0.693}{k}$ .
6. Viteza de reacție este  $x'(t) = (a - ae^{-kt})' = kae^{-kt}$ .

Toate aceste rezultate pot fi găsite în tabelul prezentat în [10]

### 10.5. Probleme propuse

Să se găsească soluțiile pentru următoarele probleme Cauchy. Realizați calculele aferente problemelor de mai jos și completați coloanele din tabel.

10.5.1. 
$$\begin{cases} x' = k(a - x)^{1/2} \\ x(0) = 0 \end{cases}$$

10.5.2. 
$$\begin{cases} x' = k(a - x) \\ x(0) = 0 \end{cases}$$

10.5.3. 
$$\begin{cases} x' = k(a - x)^{3/2} \\ x(0) = 0 \end{cases}$$

10.5.4. 
$$\begin{cases} x' = k(a - x)^2 \\ x(0) = 0 \end{cases}$$

10.5.5. 
$$\begin{cases} x' = k(a - x)(b - x) \\ x(0) = 0 \end{cases}$$

10.5.6. 
$$\begin{cases} x' = k(a - x)^3 \\ x(0) = 0 \end{cases}$$

10.5.7. 
$$\begin{cases} x' = k(a - 2x^2)(b - x) \\ x(0) = 0 \end{cases}$$

## TEMA 11. SISTEME DE ECUAȚII DIFERENȚIALE DE ORDINUL ÎNTÂI. APLICAȚII ÎN CHIMIE

### 11.1. Considerații generale

Forma explicită a unui sistem de ecuații diferențiale de ordinul I este

$$\begin{cases} y_1' = f_1(t, y_1, y_2, \dots, y_n) \\ y_2' = f_2(t, y_1, y_2, \dots, y_n) \\ \dots\dots\dots \\ y_n' = f_n(t, y_1, y_2, \dots, y_n) \end{cases}$$

unde  $f_1, f_2, \dots, f_n$  sunt funcții date, continue pe un domeniu din  $R^{n+1}$ .

O problemă Cauchy este formată dintr-un sistem de ecuații diferențiale și un set de condiții inițiale,

$$y_1(t_0) = a_1, y_2(t_0) = a_2, \dots, y_n(t_0) = a_n,$$

O soluție a sistemului este formată din funcțiile  $y_1, y_2, \dots, y_n$  care verifică sistemul. Ea depinde în general de “n” constant. Acestea se determină din condițiile inițiale, în cazul rezolvării unei probleme Cauchy.

Nu există metode generale pentru rezolvarea sistemelor de ecuații diferențiale, doar pentru cazul sistemelor liniare fiind elaborate o tehnică generală (care este prezentată în paragraful 11.3).

Multe sisteme însă, cum sunt cele din paragraful următor, se pot rezolva prin metode specifice.

### 11.2. Probleme de cinetica chimică modelate prin sisteme de ecuații diferențiale

Cinetica reacțiilor paralele de ordinul I este caracterizată prin sistemele de ecuații de mai jos, unde sunt notate cu litere mici ( $a, b$ , etc.) cantitățile inițiale ale reactanților. Funcțiile necunoscute în aceste sisteme

sunt  $x = x(t)$ ,  $y = y(t)$ , ..., care reprezintă cantitatea de substanță consumată pentru obținerea substanței X, respectiv Y, Z, ... .

Parametrii sistemelor sunt constantele de viteză  $k_x, k_y, k_z, \dots$ .

### 11.2.1. Reacții paralele (gemene) de ordinul I

Acest tip de reacții prezintă transformarea unui singur reactant A pe două căi paralele și independente în doi produși de reacție. Astfel de reacții apar, spre exemplu, în cazul transformărilor radioactive ale unor nuclee.

Schema de reacții elementare  $A \xrightarrow{k_x} X, A \xrightarrow{k_y} Y$  are drept model sistemul [10]

$$(11.1) \quad \begin{cases} x' = k_x(a - x - y) \\ y' = k_y(a - x - y) \\ x(0) = 0 \\ y(0) = 0 \end{cases}$$

Între constantele de viteză și masele produșilor formați există relațiile

$$\frac{k_x}{k_x + k_y} = \frac{m_x}{m_x + m_y}, \quad \frac{k_y}{k_x + k_y} = \frac{m_y}{m_x + m_y}$$

Pentru rezolvare se observă că dacă adunăm cele două ecuații obținem

$$(x + y)' = (k_x + k_y)(a - x - y).$$

Notând  $u = x + y$ , ecuația devine

$$u' = (k_x + k_y)(a - u)$$

care poate fi privită ca o ecuație cu variabile separabile, sau ca o ecuație liniară.

Rezolvăm ecuația ca o ecuație cu variabile separabile.

- separăm variabilele:  $\frac{u'}{a - u} = (k_x + k_y)$

- integrăm ecuația de mai sus:  $\int \frac{du}{a-u} = \int (k_x + k_y) dt$  și obținem

$$\ln \frac{1}{a-u} = C + (k_x + k_y)t.$$

- din condiția inițială  $u(0) = x(0) + y(0) = 0$  rezultă  $C = \ln \frac{1}{a} = -\ln a$ .

Soluția ecuației satisface

$$k_x + k_y = \frac{1}{t} \ln \frac{a}{a-u}.$$

Aceasta este ecuația cinetică integrală a sistemului.

Pornind de la aceasta ecuație se calculează  $u(t) = a(1 - e^{-t(k_x + k_y)})$ .

Înlocuind în sistemul inițial obținem

$$\begin{cases} x' = k_x a \cdot e^{-t(k_x + k_y)} \\ y' = k_y a \cdot e^{-t(k_x + k_y)} \\ x(0) = 0 \\ y(0) = 0 \end{cases}.$$

Prin integrare directă obținem

$$\begin{cases} x(t) = \frac{ak_x}{k_x + k_y} (1 - e^{-t(k_x + k_y)}) \\ y(t) = \frac{ak_y}{k_x + k_y} (1 - e^{-t(k_x + k_y)}) \end{cases}.$$

Acestea sunt cantitățile din substanța “A”, consumate după “t” secunde pentru a obține substanțele X, respectiv Y.

### 11.2.2. Reacții paralele (gemene) de ordinul II

Pentru schema de reacție  $A + B \xrightarrow{k_x} X$ ,  $A + B \xrightarrow{k_y} Y$  sistemul de ecuații diferențiale este [10]

|        |                                                                                                                 |
|--------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| (11.2) | $\begin{cases} x' = k_x(a - x - y)(b - x - y) \\ y' = k_y(a - x - y)(b - x - y) \\ x(0) = y(0) = 0 \end{cases}$ |
|--------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------|

Între constantele de viteză și masele produșilor formați există relațiile

$$\frac{k_x}{k_x + k_y} = \frac{m_x}{m_x + m_y}, \quad \frac{k_y}{k_x + k_y} = \frac{m_y}{m_x + m_y}$$

Folosind o metodă asemănătoare cu cea din exemplul anterior și notând  $u = x + y$  se obține ecuația cu variabile separabile  $u' = (k_x + k_y)(a - u)(b - u)$  cu condiția inițială  $u(0) = 0$ .

Metoda de rezolvare este cea cunoscută:

- se separă variabilele:  $\frac{u'}{(a - u)(b - u)} = k_x + k_y$

- se scrie ecuația obținută prin integrare  $\int \frac{du}{(a - u)(b - u)} = \int (k_x + k_y) dt$

- se calculează integralele:

$$\int \frac{du}{(a - u)(b - u)} = \int \frac{1}{b - a} \left( \frac{1}{a - u} - \frac{1}{b - u} \right) du = \frac{1}{b - a} \ln \frac{a - u}{b - u} = (k_x + k_y)t + C$$

- din condiția inițială  $x(0) = y(0) = 0$  se obține  $u(0) = 0$ . Rezultă

$$C = \frac{1}{b - a} \ln \frac{a}{b}.$$

Ecuația cinetică integrală a sistemului este

$$k_x + k_y = \frac{1}{t} \frac{1}{b - a} \ln \frac{b(a - u)}{a(b - u)}$$

Pornind de la această ecuație se pot obține expresiile analitice pentru  $x(t)$  și  $y(t)$ , printr-un procedeu asemănător cu cel prezentat în paragraful anterior.

### 11.2.3. Alte reacții paralele (gemene) de ordinul II

Pentru schema de reacții  $A + B \xrightarrow{k_x} X$ ,  $A + B \xrightarrow{k_y} Y$ ,  $A + B \xrightarrow{k_z} Z$  sistemul este

$$\begin{cases} x' = k_x(a - x - y - z)(b - x - y - z) \\ y' = k_y(a - x - y - z)(b - x - y - z) \\ z' = k_z(a - x - y - z)(b - x - y - z) \\ x(0) = y(0) = z(0) = 0 \end{cases}$$

Notând  $u(t) = x(t) + y(t) + z(t)$  și adunând cele trei ecuații se obține aceeași ecuație cu variabile separabile  $u' = (k_x + k_y + k_z)(a - u)(b - u)$  cu condiția inițială  $u(0) = 0$ .

Folosind metoda din paragraful anterior se obține ecuația cinetică integrală a sistemului:

$$k_x + k_y + k_z = \frac{1}{t} \frac{1}{b - a} \ln \frac{b(a - u)}{a(b - u)}.$$

### 11.2.4. Reacții succesive de ordinul I

Schema de reacții  $A \xrightarrow{k_1} B \xrightarrow{k_2} C$  este descrisă de sistemul [10]:

|        |                                                                                    |
|--------|------------------------------------------------------------------------------------|
| (11.3) | $\begin{cases} x' = k_1(a - x) \\ y' = k_1(a - x) - k_2y \\ z' = k_2y \end{cases}$ |
|--------|------------------------------------------------------------------------------------|

Prima ecuație este o ecuație cu variabile separabile cu necunoscuta  $x = x(t)$ .

Soluție acestei ecuații este, conform rezultatelor din Tema 10,  $x(t) = a(1 - e^{-k_1 t})$ .

Înlocuind pe  $x(t)$  în a doua ecuație, obținem ecuația liniară cu necunoscuta  $y = y(t)$ :

$$y' = -k_2y + k_1ae^{-k_1 t}$$



Soluția acestei ecuații este (conform rezolvării din Tema 10)

$$y(t) = \frac{k_1 a}{k_2 - k_1} [e^{-k_1 t} - e^{-k_2 t}].$$

Din ecuația a treia se obține prin integrare directă

$$z(t) = \int_0^t k_2 y(s) ds = a \left[ 1 - \frac{k_2}{k_2 - k_1} e^{-k_1 t} - \frac{k_1}{k_2 - k_1} e^{-k_2 t} \right].$$

Se poate observa că  $x = x(t)$  este o funcție crescătoare (deoarece  $x'(t) > 0$  pentru orice  $t > 0$ ) și  $\lim_{t \rightarrow \infty} x(t) = a$ . Aceasta arată că substanța “A” va fi consumată în întregime dacă reacția se desfășoară pe o durată infinită de timp. Se poate considera însă că reacția ia sfârșit dacă s-a consumat 90% din substanță, adică  $a - x(t) = a e^{-k_1 t_f} = \frac{10}{100} a$ . Rezultă că  $t_f = \frac{\ln 10}{k_1}$ .

Funcția  $y = y(t)$  are valoare maximă în  $t_m = \frac{\ln(k_2) - \ln(k_1)}{k_2 - k_1}$  deoarece în acest punct se anulează  $y'$ .

Valoarea maximă a cantității de produs intermediar care se obține este

$$y_m = y(t_m) = a \cdot e^{\frac{k_2}{k_2 - k_1} \ln\left(\frac{k_2}{k_1}\right)}$$

Deci, în cursul reacției cantitatea de produs intermediar crește, trece printr-un punct de maxim, apoi descrește spre 0, deoarece  $\lim_{t \rightarrow \infty} y(t) = 0$ .

Cantitatea de produs final  $z = z(t)$  crește. În momentul terminării reacției,  $t = t_f$ ,

$$\text{a fost obținut } z_f = z(t_f) = a \left[ 1 - \frac{k_2}{k_2 - k_1} e^{-k_1 t_f} - \frac{k_1}{k_2 - k_1} e^{-k_2 t_f} \right] \text{ produs final.}$$

Seriile radioactive constituie exemple de astfel de procese. Elementele naturale cu numere atomice cuprinse în intervalul 82-89 se dezintegrează spontan, trecând în produși stabili. Vezi [10, pag 75].

### 11.3. Sisteme de ecuații liniare cu coeficienți constanți

Sunt sistemele cele mai simple, în membrul drept existând numai monoame de gradul întâi.

Exemple și contraexemple:

a) Sistemul 
$$\begin{cases} x' = k_x(a - x - y) \\ y' = k_y(a - x - y) \end{cases},$$

analizat în paragraful 11.2.1, este un sistem liniar cu coeficienți constanți. Ele se poate scrie sub forma 
$$\begin{cases} x' = -k_x x - k_y y + k_x a \\ y' = -k_y x - k_y y + k_y a \end{cases}.$$
 Sub formă matriceală el se scrie astfel:

$$\begin{pmatrix} x' \\ y' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -k_x & -k_y \\ -k_y & -k_y \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} k_x a \\ k_y a \end{pmatrix}.$$

b) Sistemul 
$$\begin{cases} x' = k_x(a - x - y)(b - x - y) \\ y' = k_y(a - x - y)(b - x - y) \\ x(0) = y(0) = 0 \end{cases},$$

analizat în paragraful 11.2.2, nu este un sistem linear deoarece în membrul drept apar produsele necunoscutelor, adică monoame de gradul 2.

c) Sistemul 
$$\begin{cases} x' = k_1(a - x) \\ y' = k_1(a - x) - k_2 y \\ z' = k_2 y \end{cases},$$

analizat în paragraful 11.2.4 este un sistem liniar. Sub formă matriceală el se scrie astfel:

$$\begin{pmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} k_1 & 0 & 0 \\ k_1 & -k_2 & 0 \\ 0 & k_2 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} k_1 a \\ k_1 a \\ 0 \end{pmatrix}.$$

### 11.3.1. Sisteme liniare și omogene de ecuații diferențiale cu coeficienți constanți

Forma generală a sistemului este

[illegible]

Sistemului de mai sus i se asociază matricea coeficienților, anume

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} \dots a_{1n} \\ \dots \dots \dots \\ a_{n1} \dots a_{nn} \end{pmatrix}.$$

Dacă notăm  $Y = (y_1, y_2, \dots, y_n)^T$  și  $Y' = (y_1', y_2', \dots, y_n')^T$  atunci sistemul se scrie în forma matriceală

$$Y' = A \cdot Y$$

și rezultatele prezentate la ecuații diferențiale liniare de ordin  $n$  arată că mulțimea soluțiilor sistemului reprezintă un spațiu vectorial de dimensiune «  $n$  ».

Soluțiile fundamentale ale sistemului vor fi căutate sub forma  $Y_i = (\alpha_{1i} \alpha_{2i} \dots \alpha_{ni})^T e^{\lambda_i x}$  unde  $\lambda_i$  sunt valori proprii a matricii  $A$ , adică soluțiile ecuației caracteristice a sistemului :

$$(11.5) \quad \begin{vmatrix} a_{11} - \lambda & a_{12} & \dots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} - \lambda & \dots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \dots & a_{nn} - \lambda \end{vmatrix} = 0$$

iar constantele  $\alpha_{ij}$  trebuie determinate din sistem.

Dacă  $Y_1, Y_2, \dots, Y_n$  sunt  $n$  soluții liniar independente atunci soluția generală a sistemului este

$$Y = C_1 Y_1 + C_2 Y_2 + \dots + C_n Y_n$$

Există următoarele situații importante :

- Dacă ecuația caracteristică are soluțiile reale și distincte  $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n$  și  $V_1, V_2, \dots, V_n$  sunt vectorii corespunzători acestor valori atunci soluția sistemului este

$$Y(x) = C_1 V_1 e^{\lambda_1 x} + C_2 V_2 e^{\lambda_2 x} + \dots + C_n V_n e^{\lambda_n x}$$

- Dacă ecuația caracteristică are soluții multiple (reale sau complexe), fiecare soluție  $\lambda$  cu ordinul de multiplicitate  $p$  contribuie în sumă cu termenii

$$Y_1 = V_1 e^{\lambda x}, Y_2 = e^{\lambda x} \left( \frac{x}{1!} V_1 + V_2 \right), \dots, \\ Y_p = e^{\lambda x} \left( \frac{x^{p-1}}{(p-1)!} V_1 + \frac{x^{p-2}}{(p-2)!} V_2 + \dots + \frac{x}{1!} V_{p-1} + V_p \right)$$

unde  $V_1, V_2, \dots, V_p$  sunt vectorii proprii corespunzători valorii proprii  $\lambda$ .

Problema rezolvării sistemului se reduce deci la determinarea valorilor proprii pentru matricea  $A$  și a vectorilor proprii corespunzători acestor valori.

### Metoda de rezolvare:

- Se scrie matricea  $A$  a sistemului;
- Se determină valorile proprii ale matricii rezolvând ecuația (11.5);
- Pentru fiecare valoare proprie  $\lambda_i$  se determină vectorii proprii (atâția cât e ordinul de multiplicitate al lui  $\lambda_i$  și se scriu soluțiile corespunzătoare lui  $\lambda_i$ ;
- Se scrie sistemul fundamental de soluții al sistemului;
- Se scrie soluția generală.

**Exemple: Să se determine soluția generală a sistemelor următoare**

$$1. \begin{cases} y_1' = 3y_1 - y_2 + y_3 \\ y_2' = -y_1 + 5y_2 - y_3 \\ y_3' = y_1 - y_2 + 3y_3 \end{cases}$$

a) Matricea sistemului este  $A = \begin{pmatrix} 3 & -1 & 1 \\ -1 & 5 & -1 \\ 1 & -1 & 3 \end{pmatrix}$

b) Valorile proprii ale matricii  $A$  sunt  $\lambda_1 = 2$ ,  $\lambda_2 = 3$  și  $\lambda_3 = 6$ , adică soluțiile ecuației

$$\begin{vmatrix} 3-\lambda & -1 & 1 \\ -1 & 5-\lambda & \\ 1 & -1 & 3-\lambda \end{vmatrix} = 0$$

c) Valoarea  $\lambda_1$  are ordinul de multiplicitate 1, deci va avea un singur vector propriu  $V_1 = (\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3)$  care verifică ecuația

$$\begin{pmatrix} 3 & -1 & 1 \\ -1 & 5 & -1 \\ 1 & -1 & 3 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \alpha_3 \end{pmatrix} = 2 \cdot \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \alpha_3 \end{pmatrix}.$$

Din rezolvarea sistemului compatibil nedeterminat cu un grad de libertate

$$\begin{cases} 3\alpha_1 - \alpha_2 + \alpha_3 = 2\alpha_1 \\ -\alpha_1 + 5\alpha_2 - 3\alpha_3 = 2\alpha_2 \\ \alpha_1 - \alpha_2 + 3\alpha_3 = 2\alpha_3 \end{cases}$$

se obține soluția  $\begin{pmatrix} \alpha \\ 0 \\ -\alpha \end{pmatrix}$ . Se dă lui  $\alpha$  o valoare particulară, de exemplu  $\alpha = 1$

și obținem  $V_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix}$ . În mod asemănător obținem  $V_2 = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}$  și  $V_3 = \begin{pmatrix} 1 \\ -2 \\ 1 \end{pmatrix}$

corespunzând valorilor  $\lambda_2$  și  $\lambda_3$ .

d) Sistemul fundamental este  $Y_1 = e^{2x} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{2x} \\ 0 \\ -e^{2x} \end{pmatrix}, \quad Y_2 = \begin{pmatrix} e^{3x} \\ e^{3x} \\ e^{3x} \end{pmatrix},$

$$Y_3 = \begin{pmatrix} e^{6x} \\ -2e^{6x} \\ e^{6x} \end{pmatrix}.$$

e) Soluția generală este  $\begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \end{pmatrix} = C_1 Y_1 + C_2 Y_2 + C_3 Y_3,$  adică

$$\begin{cases} y_1 = C_1 e^{2x} + C_2 e^{3x} + C_3 e^{6x} \\ y_2 = C_2 e^{3x} - 2C_3 e^{6x} \\ y_3 = C_1 e^{2x} + C_2 e^{3x} + C_3 e^{6x} \end{cases}$$

2.  $\begin{cases} y_1' = y_2 + y_3 \\ y_2' = y_3 + y_1 \\ y_3' = y_1 + y_2 \end{cases}.$

Matricea sistemului este  $A = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 0 \end{pmatrix}.$  Ecuația caracteristică,

$\lambda^3 - 3\lambda - 2 = 0$  are rădăcinile  $\lambda_1 = 2$  și  $\lambda_2 = \lambda_3 = -1$ . Un vector propriu al lui  $\lambda_1$

este  $V_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}.$

Subspațiul valorii proprii  $\lambda_2 = \lambda_3$  are dimensiunea 2.

Vectorii proprii satisfac ecuația  $\begin{pmatrix} 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \alpha_3 \end{pmatrix} = -1 \cdot \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \alpha_3 \end{pmatrix}$ , adică

sistemul cu două grade de nedeterminare  $\begin{cases} \alpha_1 + \alpha_2 + \alpha_3 = 0 \\ \alpha_1 + \alpha_2 + \alpha_3 = 0 \\ \alpha_1 + \alpha_2 + \alpha_3 = 0 \end{cases}$ . Alegând

$\alpha_1 = -1, \alpha_2 = 0$  se obține  $\alpha_3 = 1$  și pentru  $\alpha_1^* = 0, \alpha_2^* = 1$  se obține  $\alpha_3^* = -1$ .

Cei doi vectori proprii principali vor fi  $V_2 = \begin{pmatrix} -1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$  și  $V_3 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ -1 \end{pmatrix}$ .

Valorile  $\alpha_1, \alpha_2, \alpha_1^*, \alpha_2^*$  se aleg astfel încât  $\begin{vmatrix} \alpha_1 & \alpha_2 \\ \alpha_1^* & \alpha_2^* \end{vmatrix} = \alpha_1 \alpha_2^* - \alpha_2 \alpha_1^* \neq 0$ .

Soluția generală a sistemului este  
 $Y = C_1 V_1 e^{2x} + C_2 V_2 e^{-x} + C_3 (x V_2 + V_3) e^{-x}$  adică

$$\begin{cases} y_1 = C_1 e^{2x} - C_2 e^{-x} - C_3 x e^{-x} \\ y_2 = C_1 e^{2x} + C_3 e^{-x} \\ y_3 = C_1 e^{2x} + C_2 e^{-x} + C_3 (x-1) e^{-x} \end{cases}.$$

### 11.3.2. Sisteme liniare neomogene cu coeficienți constanți

Forma generală este

|        |                               |
|--------|-------------------------------|
| (11.6) | $Y'(x) = A \cdot Y(x) + F(x)$ |
|--------|-------------------------------|

Ca și în cazul ecuațiilor liniare neomogene, soluția generală a sistemului neomogen este suma dintre soluția generală a sistemului omogen și o soluție particulară a sistemului neomogen.

Pentru determinarea soluției particulare se poate folosi metoda variației constantelor.

**Teoremă:** Dacă  $Y = C_1 Y_1 + \dots + C_n Y_n$  este soluția sistemului omogen asociat lui (11.6) atunci o soluție particulară a acestuia este  $Y_p = C_1(x)Y_1 + \dots + C_n(x)Y_n$  unde funcțiile  $C_1(x), \dots, C_n(x)$  satisfac ecuația

$$C_1'(x)Y_1 + C_2'(x)Y_2 + \dots + C_n'(x)Y_n = F(x)$$

Din ecuația de mai sus se calculează  $C_1'(x), \dots, C_n'(x)$  și apoi, prin integrare se obțin  $C_1, C_2, \dots, C_n$ .

**Exemplul 1:** Să se rezolve sistemul 
$$\begin{cases} x' = 5x - 3y + 2e^{3t} \\ y' = x + y + 5e^{-t} \end{cases}$$

Sistemul omogen  $\begin{cases} x' = 5x - 3y \\ y' = x + y \end{cases}$  are matricea coeficienților dată de 
$$A = \begin{pmatrix} 5 & -3 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}.$$

Valorile sale proprii sunt  $\lambda_1 = 4$  și  $\lambda_2 = 2$ , vectorii proprii corespunzători acestora sunt  $V_1 = \begin{pmatrix} 3 \\ 1 \end{pmatrix}$ , respectiv  $V_2 = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$  iar soluția generală a sistemului este

$$\begin{pmatrix} x_G \\ y_G \end{pmatrix} = C_1 \cdot V_1 \cdot e^{4t} + C_2 \cdot V_2 \cdot e^{2t} = \begin{pmatrix} 3C_1 e^{4t} + C_2 e^{2t} \\ C_1 e^{4t} + C_2 e^{2t} \end{pmatrix}$$

Expresiile pentru  $C_1$  și  $C_2$  se determină din sistemul

$$\begin{cases} 3C_1' e^{4t} + C_2' e^{2t} = 2e^{3t} \\ C_1' e^{4t} + C_2' e^{2t} = 5e^{-t} \end{cases}.$$

Soluții ale acestui sistem sunt

$$C_1 = e^{-5t} / 2 - e^{-t}, \quad C_2 = -e^t - 5e^{-3t} / 2$$



O soluție particulară a sistemului neomogen este

$$\begin{pmatrix} x_p \\ y_p \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -e^{-t} - 4e^{3t} \\ -2e^{-t} - 2e^{3t} \end{pmatrix}$$

Rezultă că soluția generală a sistemului este

$$\begin{cases} x = 3C_1e^{4t} + C_2e^{2t} - e^{-t} - 4e^{3t} \\ y = C_1e^{4t} + C_2e^{2t} - 2e^{-t} - 2e^{3t} \end{cases}$$

**Exemplul 2:** Rezolvarea sistemului studiat în paragraful 11.2.1 folosind metoda explicată anterior (el a fost rezolvat printr-un artificiu de calcul).

**În general.** Sistemul  $\begin{cases} x' = -k_x x - k_y y + k_x a \\ y' = -k_y x - k_y y + k_y a \end{cases}$  scris sub formă matriceală este  $\begin{pmatrix} x' \\ y' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -k_x & -k_y \\ -k_y & -k_y \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} k_x a \\ k_y a \end{pmatrix}$

### Metoda de rezolvare:

a) Se scrie matricea  $A$  a sistemului:  $A = \begin{pmatrix} -k_x & -k_y \\ -k_y & -k_y \end{pmatrix}$

b) Se determină valorile proprii ale matricii rezolvând ecuația  $\begin{vmatrix} k_x - \lambda & -k_x \\ -k_y & -k_x - \lambda \end{vmatrix} = 0$ .

Valorile proprii sunt  $\lambda_1 = 0$  și  $\lambda_2 = -(k_x + k_y)$ .

c) Pentru fiecare valoare proprie  $\lambda_i$  se determină vectorii proprii.

Pentru  $\lambda_1 = 0$ , vectorul propriu  $v = \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}$  satisface relația

$$\begin{pmatrix} -k_x & -k_x \\ -k_y & -k_y \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = 0 \cdot \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}.$$

Sistemul care rezultă din compararea componentelor este sistemul  
 liniar 
$$\begin{cases} -k_x\alpha - k_y\beta = 0 \\ -k_y\alpha - k_x\beta = 0 \end{cases}.$$

Rezultă  $\alpha + \beta = 0$ , adică  $\beta = -\alpha$ . Vectorii proprii vor avea forma  $v = \begin{pmatrix} \alpha \\ -\alpha \end{pmatrix}$ . Pentru  $\alpha = 1$  se obține vectorul propriu  $v_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}$ . Să observăm că se pot alege și alte valori ale lui  $\alpha$ , această alegere nu influențează rezultatele finale, ci doar calculele intermediare. De obicei se alege o valoare pentru care calculele sunt simple

Pentru  $\lambda_2 = -(k_x + k_y)$  vectorul propriu  $v = \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}$  satisface relația

$$\begin{pmatrix} -k_x & -k_x \\ -k_y & -k_y \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = -(k_x + k_y) \cdot \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}.$$

Sistemul obținut din identificarea componentelor din cei doi membri este 
$$\begin{cases} -k_x\alpha - k_y\beta = -(k_x + k_y)\alpha \\ -k_y\alpha - k_x\beta = -(k_x + k_y)\beta \end{cases}.$$
 El este un sistem nedeterminat cu soluția

$\alpha = \frac{k_x}{k_y}\beta$ . Vectorii proprii vor avea forma  $V = \begin{pmatrix} \frac{k_x}{k_y}\beta \\ \beta \end{pmatrix}$ . Pentru  $\beta = 1$  se

obține  $v_2 = \begin{pmatrix} \frac{k_x}{k_y} \\ 1 \end{pmatrix}$ .

d) Se scrie soluția generală 
$$\begin{pmatrix} x(t) \\ y(t) \end{pmatrix} = C_1 \cdot e^0 \cdot \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} + C_2 \cdot e^{-(k_x + k_y)t} \cdot \begin{pmatrix} \frac{k_x}{k_y} \\ 1 \end{pmatrix}$$

e) Se folosește metoda variației constantelor: se scrie soluția sub forma

$$\begin{pmatrix} x(t) \\ y(t) \end{pmatrix} = C_1(t) \cdot e^0 \cdot \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} + C_2(t) \cdot e^{-(k_x+k_y)t} \cdot \begin{pmatrix} \frac{k_x}{k_y} \\ 1 \end{pmatrix}, \text{ iar } C_1(t), C_2(t) \text{ din}$$
 relația

$$C_1'(t) \cdot e^0 \cdot \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} + C_2'(t) \cdot e^{-(k_x+k_y)t} \cdot \begin{pmatrix} \frac{k_x}{k_y} \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} k_x a \\ k_y a \end{pmatrix}. \text{ Sistemul obținut}$$

prin identificarea componentelor vectorilor din cei doi membri este

$$\begin{cases} C_1'(t) + C_2'(t) \frac{k_x}{k_y} e^{-(k_x+k_y)t} = k_x a \\ -C_1'(t) + C_2'(t) e^{-(k_x+k_y)t} = k_y a \end{cases}. \text{ Soluția sistemului este}$$

$$\begin{cases} C_1'(t) = 0 \\ C_2'(t) = k_y a e^{(k_x+k_y)t} \end{cases}$$

$$\text{Rezultă } \begin{cases} C_1(t) = M_1 \\ C_2(t) = \frac{k_y a}{k_x + k_y} e^{(k_x+k_y)t} + M_2 \end{cases}, \text{ unde } M_1, M_2 \text{ sunt constante}$$

de integrare ce se determină din condițiile inițiale.

$$\text{Avem } \begin{cases} x(t) = M_1 + \frac{k_x}{k_y} \left[ \frac{k_y a}{k_x + k_y} + M_2 e^{-(k_x+k_y)t} \right] \\ y(t) = -M_1 + \frac{k_y a}{k_x + k_y} + M_2 e^{-(k_x+k_y)t} \end{cases},$$

$$\text{iar condițiile inițiale } \begin{cases} x(0) = 0 \\ y(0) = 0 \end{cases} \text{ ne dau}$$

$$\begin{cases} M_1 + \frac{k_x a}{k_x + k_y} + M_2 \frac{k_x}{k_y} = 0 \\ -M_1 + \frac{k_y a}{k_x + k_y} + M_2 = 0 \end{cases}.$$

*Rezultă*  $\begin{cases} M_1 = 0 \\ M_2 = -\frac{k_y a}{k_x + k_y} \end{cases}$ , iar soluția sistemului de ecuații diferențiale

este  $\begin{cases} x(t) = \frac{ak_x}{k_x + k_y} (1 - e^{-t(k_x + k_y)}) \\ y(t) = \frac{ak_y}{k_x + k_y} (1 - e^{-t(k_x + k_y)}) \end{cases}.$

Este exact soluția care a fost obținută în mod mai simplu în paragraful 11.2.1, folosind un artificiu de calcul.

#### 11.4. Exerciții propuse

Să se rezolve sistemele următoare:

1.  $\begin{cases} y' + 2y + 4z = 1 + 4x \\ z' + y - z = 3x^2 / 2 \end{cases} \quad \mathbf{R:} \quad \begin{aligned} y(x) &= C_1 e^{2x} + C_2 e^{-3x} + x^2 + x, \\ z &= -C_1 e^{2x} + C_2 e^{-3x} / 4 - x^2 / 2 \end{aligned}$

2.  $\begin{cases} y' + 2y + z = \sin x \\ z' - 4y - 2z = \cos x \end{cases} \quad \mathbf{R:} \quad \begin{aligned} y(x) &= C_1 e^x + C_2 e^{-2x} - \frac{3}{8} \cos x - \frac{1}{8} \sin x, \\ z(x) &= \sin x - y' - 2y \end{aligned}$

3.  $\begin{cases} y' = z \\ z' = u \\ u' = y \end{cases} \quad \mathbf{R:} \quad \begin{aligned} y(x) &= C_1 e^x + C_2 e^{-x/2} \cos \frac{x\sqrt{3}}{2} + C_3 e^{-x/2} \sin \frac{x\sqrt{3}}{2} \\ z(x) &= y'(x) \\ u(x) &= z'(x) \end{aligned}$

$$4. \begin{cases} x' = -x + 2y \\ y' = 2x - y \end{cases}$$

$$\mathbf{R}: \begin{cases} x(t) = C_1 e^t + C_2 e^{-3t} \\ y(t) = C_1 e^t - C_2 e^{-3t} \end{cases}$$

$$5. \begin{cases} x' = x + y \\ y' = x - y + t \end{cases}$$

$$\mathbf{R}: \begin{cases} x(t) = C_1 + C_2 e^{2t} - \frac{t^2}{4} - \frac{t}{4} - \frac{1}{8} \\ y(t) = -C_1 + C_2 e^{2t} + \frac{t^2}{4} - \frac{t}{4} - \frac{1}{8} \end{cases}$$

$$6. \begin{cases} y' = z + u \\ z' = y + u \\ u' = y + z \end{cases}$$

$$\mathbf{R}: \begin{cases} y(x) = C_1 e^{2x} - (C_2 + C_3) e^{-x} \\ z(x) = C_1 e^{2x} + C_3 e^{-x} \\ u(x) = C_1 e^{2x} + (x C_3 + C_2 - C_3) e^{-x} \end{cases}$$

$$7. \begin{cases} x' = 4x - y + z \\ y' = x + 3y - z \\ z' = y + z \end{cases}$$

$$\mathbf{R}: \begin{cases} x = [C_2 + C_3(t+2)]e^{3t} \\ y = C_1 e^{2t} + [2C_2 + C_3(2t+1)]e^{3t} \\ z = C_1 e^{2t} + (C_2 + C_3 t)e^{3t} \end{cases}$$

$$^{\dagger} 8. \begin{cases} y_1' = 3y_1 - 8y_2 + 4y_3 \\ y_2' = -y_1 + 5y_2 - 2y_3 \\ y_3' = -3y_1 + 14y_2 - 6y_3 \end{cases}$$

$$\mathbf{R}: \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \end{pmatrix} = C_1 \begin{pmatrix} -2 \\ 1 \\ 4 \end{pmatrix} \cdot e^{-x} + C_2 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 2 \end{pmatrix} \cdot e^x + C_3 \begin{pmatrix} 4 \\ -2 \\ -5 \end{pmatrix} \cdot e^{-x}$$

$$9. \begin{cases} x' = y + t g^2 t - 1 \\ y' = -x + t g t \end{cases}$$

$$\mathbf{R}: \begin{cases} x = C_1 \cos t + C_2 \sin t + t g t \\ y = -C_1 \sin t + C_2 \cos t + 2 \end{cases}$$

$$10. \begin{cases} x' = 2x - y \\ y' = x + 2e^t \end{cases}$$

$$\mathbf{R}: \begin{cases} x = (C_1 + C_2 t + C_2 - t^2) e^t \\ y = (C_1 + C_2 t + 2t - t^2) e^t \end{cases}$$

## TEMA 12. APLICAȚII ALE INTEGRALEI DEFINITE

Acest capitol este dedicat prezentării utilității integralei definite, prin evidențierea aplicațiilor sale geometrice, cu o mare importanță în rezolvarea diferitelor aplicații practice în fizică, chimie și nu numai. [1,12]

### 12.1. Aria subgraficului unei funcții.

#### 12.1.1. Interpretarea geometrică a sumei Riemann.

Dacă  $f: [a, b] \rightarrow [0, +\infty)$  este o funcție continuă pe  $[a, b]$ , atunci produsul  $f(\xi_k)\Delta x_k$  reprezintă din punct de vedere geometric aria dreptunghiului  $D_k$  cu baza  $\Delta x_k$  și înălțimea  $f(\xi_k)$ . Prin urmare, suma Riemann  $\sigma(T, \xi) = \sum_{k=0}^{n-1} f(\xi_k)\Delta x_k$  reprezintă aria figurii  $S = \bigcup_{k=0}^{n-1} D_k$ , alcătuită din dreptunghiurile  $D_0, D_1, \dots, D_{n-1}$ , așa cum se poate vedea în fig. 12.1 de mai jos.

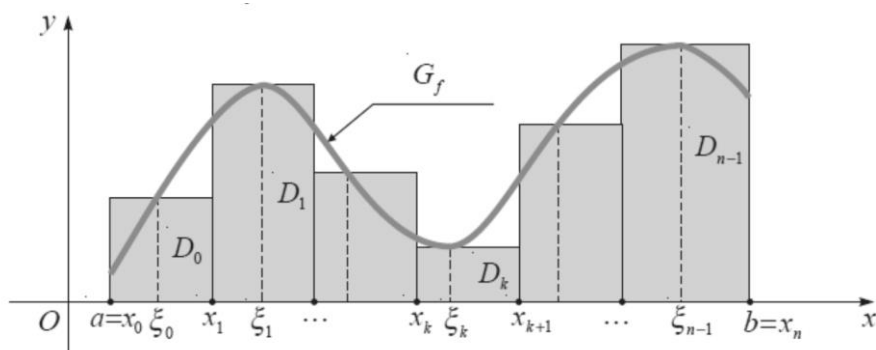


Fig. 12.1

Sumele Riemann au fost descrise amănunțit în Tema 9. Este evident că această arie  $\sigma(T, \xi)$  aproximează aria dreptunghiului plan mărginit de dreptele  $x = a$ ,  $x = b$ , axa  $Ox$  și de graficul funcției  $f: [a, b] \rightarrow [0, +\infty)$ . Aproximarea va fi cu atât mai exactă cu cât bazele dreptunghiurilor  $D_0, D_1, \dots, D_{n-1}$  vor fi mai mici, adică norma  $\|T\|$  va fi din ce în ce mai mică.

#### 12.1.2. Interpretarea geometrică a integralei definite

**Definiția 12.1.** Fie numerele reale  $a < b$  cu valori pozitive, și funcția continuă și pozitivă  $f: [a, b] \rightarrow \mathbb{R}$ . Domeniul plan mărginit de graficul

funcției  $f$ , axa abscisei  $Ox$  și dreptele verticale  $x = a, x = b$  se numește **subgrăfic al funcției  $f$**  ( fig. 12.2).

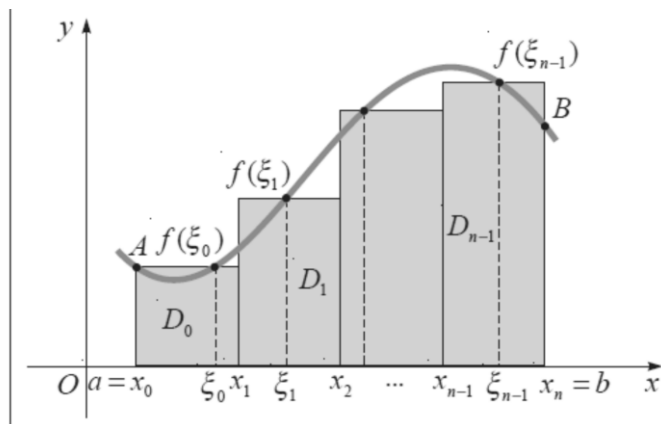


Fig. 12.2

Așa cum am menționat mai sus, sumele integrale  $\sigma(T, \xi) = \sum_{k=0}^{n-1} f(\xi_k) \Delta x_k$  aproximează cu o anumită eroare aria  $\bar{A}$  a subgrăficului funcției  $f$ . Întrucât egalitatea aproximativă  $\bar{A} \approx \sum_{k=0}^{n-1} f(\xi_k) \Delta x_k$  este cu atât mai exactă cu cât norma  $\|T\|$  este mai mică, trecând la limită în această egalitate aproximativă, când  $\|T\| \rightarrow 0$ , ea va deveni o egalitate exactă [1]:

|        |                                                                                                |
|--------|------------------------------------------------------------------------------------------------|
| (12.1) | $\bar{A} = \lim_{\ T\  \rightarrow 0} \sum_{k=0}^{n-1} f(\xi_k) \Delta x_k = \int_a^b f(x) dx$ |
|--------|------------------------------------------------------------------------------------------------|

**Exemplu 12.1.** Să se determine aria subgrăficului funcției  $f: [0,3] \rightarrow \mathbb{R}, f(x) = \sqrt{x+1}$ .

*Rezolvare.* În fig. 12.3 este desenată aria căutată.

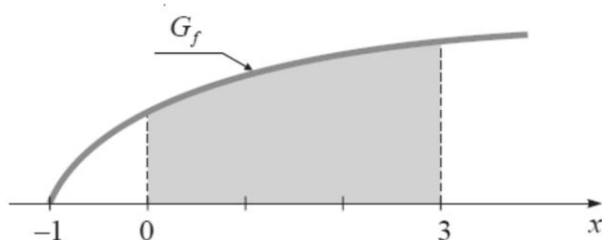


Fig. 12.3

Avem deci că  $\bar{A} = \frac{(x+1)^{\frac{1}{2}+1}}{\frac{1}{2}+1} \Big|_0^3 = \frac{2}{3} \sqrt{(x+1)^3} \Big|_0^3 = \frac{2}{3} (\sqrt{4^3} - \sqrt{1^3}) = \frac{14}{3}$ .

**Exemplu 12.2.** Să se afle aria subgraficului funcției  $f: [-1, 3] \rightarrow \mathbb{R}$ ,  $f(x) = (x+1)(3-x)$ , reprezentat în fig. 12.4.

*Rezolvare.* Aplicând din nou formula (12.1) avem că:

$$\begin{aligned} \bar{A} &= \int_{-1}^3 (x+1)(3-x) dx \\ &= \int_{-1}^3 (3 + 2x - x^2) dx = \left( 3x + x^2 - \frac{x^3}{3} \right) \Big|_{-1}^3 = 10 \frac{2}{3} \end{aligned}$$

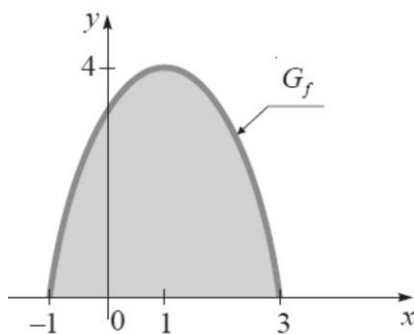


Fig. 12.4.

## 12.2. Aria unei suprafețe plane

În secțiunea precedentă s-a arătat că integrala definită  $\int_a^b |f(x)| dx$  reprezintă din punct de vedere geometric aria domeniului plan delimitat de graficul funcției  $f: [a, b] \rightarrow \mathbb{R}$ , de axa absciselor și de dreptele  $x = a$ ,  $x = b$ . Mulțimea punctelor acestui domeniu plan se numește **subgraficul funcției f** și se notează

|        |                                                                                                                                |
|--------|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| (12.2) | $\Gamma_f = \{(x, y) \in \mathbb{R}^2 \mid a \leq x \leq b, 0 \leq y \leq f(x)\}, \mathbb{R}^2 = \mathbb{R} \times \mathbb{R}$ |
|--------|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|

Așa cum am văzut în formula (12.1) aria acestei mulțimi este



|        |                                       |
|--------|---------------------------------------|
| (12.3) | $\bar{A}(\Gamma_f) = \int_a^b f(x)dx$ |
|--------|---------------------------------------|

Relația privind aria unei mulțimi definite ca mai sus din punct de vedere geometric are consecințe importante și utile în practică.

**12.2.1.** Să considerăm funcțiile continue  $f, g: [a, b] \rightarrow R$  cu proprietatea  $0 \leq f(x) \leq g(x)$ . Atunci mulțimea  $\Gamma_{f,g} = \{(x, y) \in R^2 \mid a \leq x \leq b, f(x) \leq y \leq g(x)\}$  delimitată de graficele funcțiilor  $f, g$  și de dreptele  $x = a, x = b$  paralele cu axa Oy (Fig. 12.5) are arie și această arie se obține cu relația

|        |                                                    |
|--------|----------------------------------------------------|
| (12.4) | $\bar{A}(\Gamma_{f,g}) = \int_a^b (g(x) - f(x))dx$ |
|--------|----------------------------------------------------|

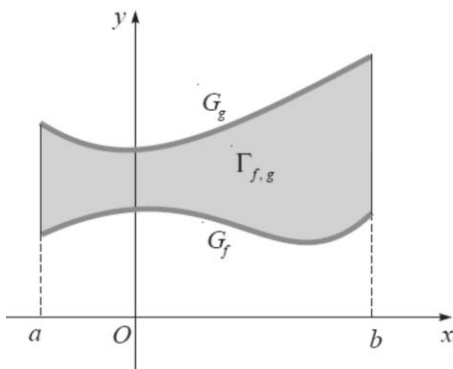


Fig. 12.5.

Relația (12.4) se obține imediat din relația (12.3) datorită faptului că  $\bar{A}(\Gamma_{f,g}) = \bar{A}(\Gamma_g) - \bar{A}(\Gamma_f)$ .

**12.2.2.** Dacă funcția continuă  $f$  este negativă,  $f(x) < 0, \forall x \in [a, b]$ , atunci graficul ei este situat sub axa Ox (fig. 12.6). Să notăm subgraficul ei cu

$$\Gamma_f = \{(x, y) \in R^2 \mid a \leq x \leq b, f(x) \leq y \leq 0\}$$

Graficul funcției  $-f$  este situat deasupra axei Ox, deoarece  $-f(x) = |f(x)| > 0$ .

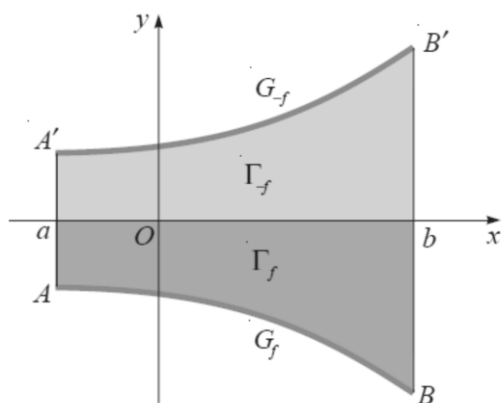


Fig. 12.6

Graficele funcțiilor  $f$  și  $-f$  sunt simetrice față de axa  $Ox$ , de aceea ariile celor două suprafețe din fig. 12.6 vor fi egale. Obținem astfel,

|        |                                                               |
|--------|---------------------------------------------------------------|
| (12.5) | $\bar{A}(\Gamma_f) = \int_a^b  f(x)  dx = - \int_a^b f(x) dx$ |
|--------|---------------------------------------------------------------|

**Exemplu 12.3.** Să se determine aria triunghiului  $OAB$  cu vârfurile  $O(0,0), A(a,b), B(a,b'), b' > b$ .

*Rezolvare.*

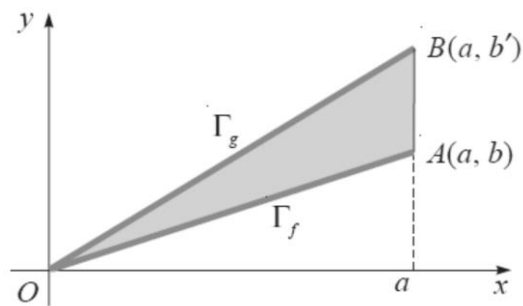


Fig. 12.7.

Așa cum se observă în fig. 12.7, constatăm că dreapta  $OA$  este graficul funcției  $f: [0, a] \rightarrow R, f(x) = \frac{b}{a}x$ , iar dreapta  $OB$  - graficul funcției  $g: [0, a] \rightarrow R, g(x) = \frac{b'}{a}x$ . Folosim formula (12.4) și obținem  $\bar{A}(\Delta AOB) = \int_0^a \left( \frac{b'}{a}x - \frac{b}{a}x \right) dx = \frac{b'-b}{a} \cdot \frac{a^2}{2} = \frac{b'-b}{2}a$ .

**Exemplu 12.4.** Să se afle aria figurii delimitate de dreptele  $x = 0, y = \frac{1}{3}x, x = 1, x = 3$ .

*Rezolvare.* Figura obținută este trapezul ABCD cu  $BC=1, AD=1/3, AB=2$  (Fig. 12.8)

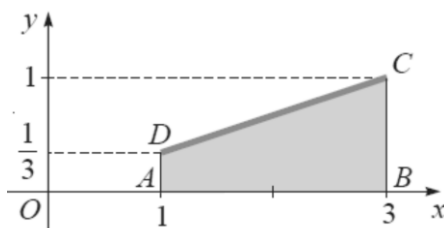


Fig. 12.8

Atunci aria trapezului ABCD este  $\bar{A}(ABCD) = \int_1^3 \frac{1}{3}x dx = \frac{x^2}{3 \cdot 2} \Big|_1^3 = \frac{4}{3}$ .

**Exemplu 12.5.** Să se determine aria figurii delimitate de graficele funcțiilor  $f, g: [0, 2] \rightarrow \mathbb{R}, f(x) = x^2 - 3x + 2, g(x) = x^3 - x^2 + x - 1$ .

*Rezolvare.* Calculăm abscisele punctelor de intersecție ale graficelor și stabilim intervalele pe care  $f(x) > g(x)$  și intervalele pe care  $f(x) < g(x), x \in [0, 2]$ .

Rezolvăm ecuația  $x^2 - 3x + 2 = x^3 - x^2 + x - 1, x \in [0, 2]$  și obținem soluția  $x = 1$ .

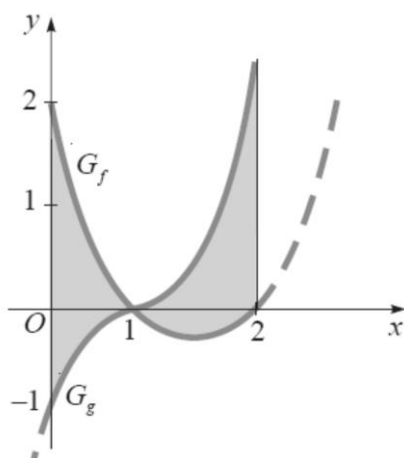


Fig. 12.9

Din fig. 12.9 observăm că  $f(x) > g(x)$  pe intervalul  $(0,1)$  și  $f(x) < g(x)$  pe intervalul  $(1,2)$ . Prin urmare, aplicând formula (4) obținem:

$$\begin{aligned}\bar{A} &= \int_0^2 (f(x) - g(x)) dx = \int_0^1 [(x^2 - 3x + 2) - (x^3 - x^2 + x - 1)] dx + \\ &\int_1^2 [(x^3 - x^2 + x - 1) - (x^2 - 3x + 2)] dx = \int_0^1 (-x^3 + 2x^2 - 4x + 3) dx + \\ &\int_1^2 (x^3 - 2x^2 + 4x - 3) dx = \frac{7}{2}.\end{aligned}$$

### 12.3. Centrul de greutate al plăcilor omogene

Ca o consecință a utilității noțiunii de arie a subgraficului unei funcții, să considerăm în cele ce urmează o placă plană omogenă. Este vorba de un corp a cărui grosime se poate neglija și care are masa proporțională cu aria sa.

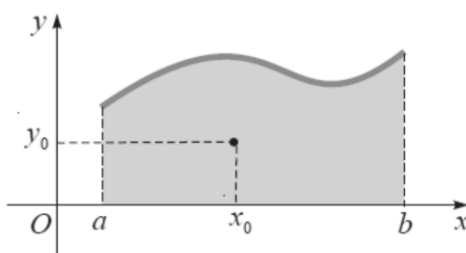


Fig. 12.10

Dacă placa este determinată de graficul funcției  $f: [a, b] \rightarrow R$  (coincide cu subgraficul  $\Gamma_f$ ) atunci coordonatele centrului de greutate  $(x_0, y_0)$  al acestei plăci (Fig. 12.10) sunt date de relațiile:

|        |                                                                                                 |
|--------|-------------------------------------------------------------------------------------------------|
| (12.6) | $x_0 = \frac{1}{\bar{A}} \int_a^b x f(x) dx, \quad y_0 = \frac{1}{2\bar{A}} \int_a^b f^2(x) dx$ |
|--------|-------------------------------------------------------------------------------------------------|

unde  $\bar{A} = \int_a^b f(x) dx$  este aria subgraficului funcției  $f$ .

**Exemplu 12.6.** Să se determine coordonatele centrului de greutate al plăcii omogene care coincide cu subgraficul funcției  $f: [0, a] \rightarrow R, f(x) = \sqrt{ax}, a > 0$  (Fig. 12.11)

Rezolvare.

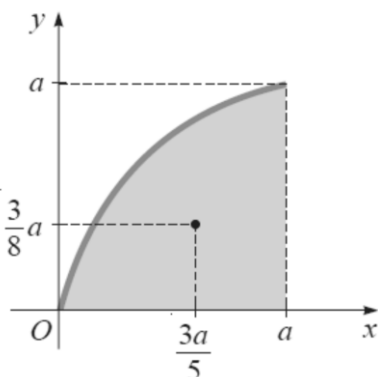


Fig. 12.11

Calculăm mai întâi aria subgraficului lui  $f$ .

$$\bar{A} = \int_0^a \sqrt{ax} dx = \frac{2}{3} a^{\frac{1}{2}} x^{\frac{3}{2}} \Big|_0^a = \frac{2}{3} a^2$$

Calculăm integralele:

$$\int_0^a x f(x) dx = \int_0^a x \sqrt{ax} dx = \frac{2}{5} a^{\frac{1}{2}} x^{\frac{5}{2}} \Big|_0^a = \frac{2}{5} a^3$$

$$\int_0^a f^2(x) dx = \int_0^a ax dx = \frac{a}{2} x^2 \Big|_0^a = \frac{a^3}{2}$$

Aplicăm acum formulele (6) pentru centrul de greutate și obținem:

$$x_0 = \frac{\frac{2}{5} a^3}{\frac{2}{3} a^2} = \frac{3}{5} a, \quad y_0 = \frac{\frac{a^3}{2}}{\frac{2}{3} a^2} = \frac{3}{8} a$$

Răspuns  $\left(\frac{3}{5} a, \frac{3}{8} a\right)$

## 12.4. Volumul unui corp de rotație

Un corp de rotație este descris de o axă de rotație și de o generatoare. Considerăm în cele ce urmează corpurile de rotație cu axa de rotație  $Ox$  și generatoarea dată de graficul unei funcții  $f: [a, b] \rightarrow R$

**Definiția 10.2.** Fie  $f: [a, b] \rightarrow [0, +\infty)$  o funcție continuă. Mulțimea

|        |                                                                              |
|--------|------------------------------------------------------------------------------|
| (12.7) | $C_f = \{(x, y, z) \in R^3   y^2 + z^2 \leq f^2(x), \quad a \leq x \leq b\}$ |
|--------|------------------------------------------------------------------------------|

se numește *corp de rotație determinat de funcția  $f$ , sau, corpul obținut prin rotirea subgraficului funcției  $f$  în jurul axei  $Ox$*  (Fig. 12.12)

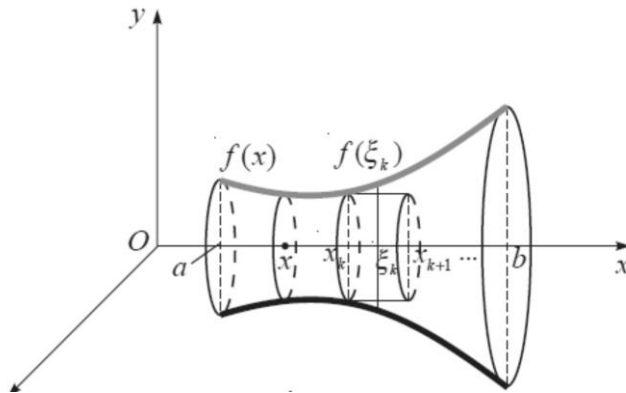


Fig. 12.12

Așa cum se observă analizând figura de mai sus, orice punct  $(x, f(x))$  al graficului funcției  $f$  descrie un cerc cu centrul în punctul  $x$  și raza  $f(x)$ .

Considerând o diviziune arbitrară  $T = (x_0, x_1, \dots, x_n)$  a intervalului  $[a, b]$  și un sistem de puncte intermediare  $\xi_k, k = 1, 2, \dots, n$  necesare pentru construirea sumelor Riemann, considerând apoi (tot ca la analiza sumelor Riemann) că norma diviziunii  $T$  devine din ce în ce mai mică, găsim că volumul corpului de rotație  $C_f$  poate fi calculat cu formula [1]:

|        |                                         |
|--------|-----------------------------------------|
| (12.8) | $\bar{V}(C_f) = \pi \int_a^b f^2(x) dx$ |
|--------|-----------------------------------------|

**Exemplu 12.7.** Să se determine volumul unui corp sferic de rază  $r$  ( $r > 0$ ).

*Rezolvare.* Să considerăm funcția  $f: [-r, r] \rightarrow \mathbb{R}, f(x) = \sqrt{r^2 - x^2}$

Prin rotirea subgraficului  $G_f$  al funcției  $f$  în jurul axei  $Ox$  obținem un corp sferic cu centrul în originea sistemului de axe ortogonale  $xOy$  și de rază  $r$ . (Fig.12.13)

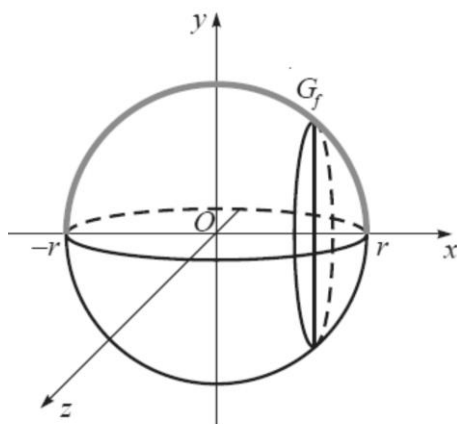


Fig. 12.13

Evident funcția  $f$  este continuă deci integrabilă. Atunci, conform formulei (8), avem:

$$\bar{V}(C_f) = \pi \int_{-r}^r (r^2 - x^2) dx = \pi \left( r^2 x - \frac{x^3}{3} \right) \Big|_{-r}^r = 4\pi \frac{r^3}{3}$$

Remarcăm că am regăsit practic volumul sferei.

**Exemplu 12.8.** Un cazan de formă cilindrică se termină cu un segment al corpului obținut prin rotirea în jurul axei  $Oy$  a parabolei  $y = \frac{h}{d^2} x^2$ . Secțiunea axială a cazanului este prezentată în figura 12.14. Să se determine:

- Lungimea  $a$  a părții cilindrice a cazanului;
- Aria secțiunii axiale  $S$  a cazanului;
- Volumul cazanului, pentru  $h=4\text{m}$  și  $d=1\text{m}$

*Rezolvare.* Avem de a face cu o problemă a cărei utilitate o putem regăsi în diverse situații în practică [1]





c) Să notăm cu  $\bar{V}_1$  volumul corpului obținut prin rotirea parabolei  $y = \frac{h}{d^2}x^2$  în jurul axei Oy și cu  $\bar{V}_2$  volumul cilindrului cu secțiunea axială ABCD.

$\bar{V}_1$  reprezintă volumul corpului care se obține prin rotirea subgraficului funcției  $\varphi: \left[0, \frac{h}{4}\right] \rightarrow R, \varphi(y) = d\sqrt{\frac{y}{h}}$ , în jurul axei Oy.

În consecință avem că:

$$\bar{V}_1 = \pi \int_0^{\frac{h}{4}} \varphi^2(y) dy = \pi \frac{d^2}{h} \int_0^{\frac{h}{4}} y dy = \frac{\pi d^2 h}{32}, \bar{V}_2 = \frac{3\pi d^2 h}{16}, \text{ iar}$$

$$\bar{V} = \bar{V}_1 + \bar{V}_2 = \frac{7\pi d^2 h}{32}$$

Pentru  $h = 4m$  și  $d = 1m$  obținem  $a = 3m, \bar{A}(S) = \frac{11}{3}m^2, \bar{V} = 2.747m^3$

## 12.5. Calculul lungimii graficului unei funcții și al ariei unei suprafețe de rotație

### 12.5.1. Lungimea graficului unei funcții derivabile cu derivata continuă

Fie  $f: [a, b] \rightarrow R$  o funcție derivabilă cu derivata continuă  $f'$  și fie graficul său:

$$G_f = \{(x, y) \in R^2 | y = f(x), x \in [a, b]\}$$

În acest caz se poate demonstra [1] că graficul  $G_f$  are lungime și aceasta este dată de relația

|        |                                           |
|--------|-------------------------------------------|
| (12.9) | $l(f) = \int_a^b \sqrt{1 + (f'(x))^2} dx$ |
|--------|-------------------------------------------|

**Exemplu 12.9.** Să se determine lungimea cercului de rază  $r$ .

*Rezolvare.* Să considerăm cercul de rază  $r$  cu centrul în originea sistemului xOy al axelor de coordonate (Fig. 10.15), adică cercul de ecuație  $x^2 + y^2 = r^2$ .

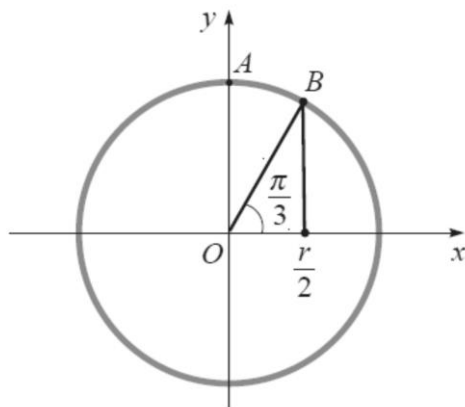


Fig. 12.15

Deoarece funcția  $g: [-r, r] \rightarrow R, g(x) = \sqrt{r^2 - x^2}$ , nu este derivabilă în punctele  $-r$  și  $r$ , formula (12.9) nu poate fi aplicată.

Să folosim notațiile din figura 12.15 și să calculăm lungimea arcului mic AB, care este egală cu a douăsprezecea parte din lungimea cercului. Arcul AB este graficul funcției  $f: \left[0, \frac{r}{\sqrt{2}}\right] \rightarrow R, f(x) = \sqrt{r^2 - x^2}$ . Deoarece  $f'(x) = -\frac{x}{\sqrt{r^2 - x^2}}$ , vom obține lungimea cercului, adică:

$$\begin{aligned} \mathcal{L}(f) &= 12l(f) = 12 \int_0^{\frac{r}{\sqrt{2}}} \sqrt{1 + (f'(x))^2} dx = 12 \int_0^{\frac{r}{\sqrt{2}}} \sqrt{1 + \frac{x^2}{r^2 - x^2}} dx \\ &= 12r \int_0^{\frac{r}{\sqrt{2}}} \frac{dx}{\sqrt{r^2 - x^2}} = 12r \arcsin \frac{x}{r} \Big|_0^{\frac{r}{\sqrt{2}}} = 12r \arcsin \frac{1}{\sqrt{2}} \\ &= 12r \frac{\pi}{6} = 2\pi r \end{aligned}$$

Am regăsit practic lungimea cercului de rază  $r$ , știută din noțiunile de matematică din liceu.

### 12.5.2. Aria unei suprafețe de rotație

Fie  $f: [a, b] \rightarrow R$  o funcție continuă și pozitivă. Rotind graficul funcției în jurul axei Ox, obținem o suprafață de rotație  $S_f$  (Fig. 12.16)

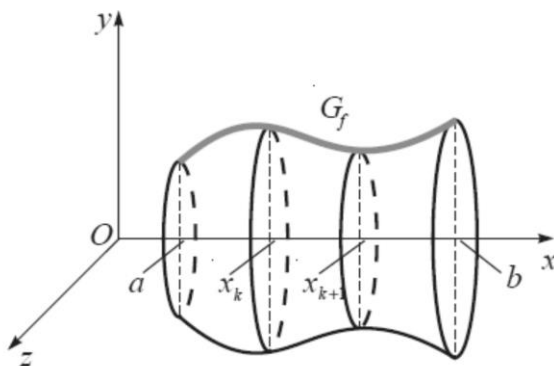


Fig. 12.16

Definim analitic această suprafață, astfel:

$$S_f = \{(x, y, z) \in R^3 \mid \sqrt{y^2 + z^2} = f(x), x \in [a, b]\}$$

În acest context aria pe care o căutăm este dată de următoarea teoremă [1]:

**Teorema 12.1.** Fie  $f: [a, b] \rightarrow [0, +\infty)$  o funcție derivabilă cu derivata continuă. Atunci suprafața de rotație obținută prin rotirea în jurul axei Ox a graficului funcției  $f$  are o arie care se calculează prin formula:

|         |                                                           |
|---------|-----------------------------------------------------------|
| (12.10) | $\bar{A}(f) = 2\pi \int_a^b f(x) \sqrt{1 + (f'(x))^2} dx$ |
|---------|-----------------------------------------------------------|

**Exemplu 10.10.** Să se afle aria oglinzii parabolice obținute prin rotirea parabolei  $y^2 = \frac{9}{4}x, x \in [0, 1]$  în jurul axei Ox (fig. 12.17)

Rezolvare.

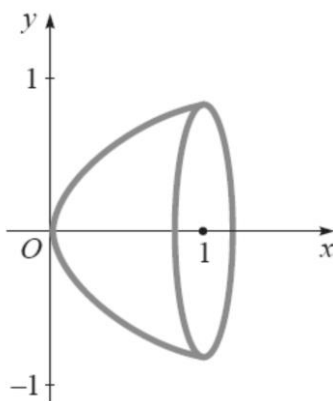


Fig. 12.17

Avem  $f(x) = \frac{3}{2}\sqrt{x}, x \in [0,1]$ . Apoi  $f'(x) = \frac{3}{4\sqrt{x}}, \sqrt{1 + (f'(x))^2} = \sqrt{1 + \frac{9}{16x}}$ .

Deci putem afla aria oglinzii parabolice:

$$\bar{A}(f) = 2\pi \int_0^1 f(x) \sqrt{1 + (f'(x))^2} dx = \frac{3\pi}{4} \int_0^1 \sqrt{16x + 9} dx$$

Facem schimbarea de variabilă:  $16x + 9 = t; x = \frac{t-9}{16}; dx = \frac{1}{16} dt; x = 0 \Rightarrow t = 9; x = 1 \Rightarrow t = 25$ . Atunci obținem:

$$\bar{A}(f) = \frac{3\pi}{4} \frac{1}{16} \int_9^{25} t^{\frac{1}{2}} dt = \frac{3\pi}{4} \frac{1}{16} \frac{2}{3} t^{\frac{3}{2}} \Big|_9^{25} = \frac{49}{16} \pi$$

## 12.6. Probleme propuse

**12.6.1.** Să se calculeze aria subgraficului funcțiilor:

|                                                                  |                                                            |
|------------------------------------------------------------------|------------------------------------------------------------|
| a) $f: [0,1] \rightarrow \mathbb{R}, f(x) = x^2 - 2x + 4$        | b) $f: [0, \pi] \rightarrow \mathbb{R}, f(x) = x + \cos x$ |
| c) $f: [1,4] \rightarrow \mathbb{R}, f(x) = \frac{3}{2}\sqrt{x}$ | d) $f: [0,1] \rightarrow \mathbb{R}, f(x) = (x-1)^2 + 1$   |

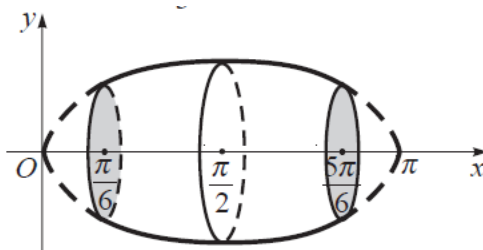
**12.6.2.** Să se determine aria figurii delimitate de graficele funcțiilor:

|                                                                                 |                                                                      |
|---------------------------------------------------------------------------------|----------------------------------------------------------------------|
| a) $f, g: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}, f(x) = 16 - x^2,$<br>$g(x) = 0$    | b) $f, g: [0, 2] \rightarrow \mathbb{R}, f(x) = x^4,$<br>$g(x) = 0$  |
| c) $f, g: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}, f(x) = x^2 - 1,$<br>$g(x) = 5 - x$ | d) $f, g: [-1, 1] \rightarrow \mathbb{R}, f(x) =  x ,$<br>$g(x) = 1$ |

**12.6.3.** Să se determine coordonatele centrului de greutate al plăcii plane omogene care coincide cu subgraficul funcției:

|                                                      |                                                                             |
|------------------------------------------------------|-----------------------------------------------------------------------------|
| a) $f: [0, 1] \rightarrow \mathbb{R}, f(x) = e^{2x}$ | b) $f: \left[0, \frac{\pi}{2}\right] \rightarrow \mathbb{R}, f(x) = \sin x$ |
| c) $f: [-2, 1] \rightarrow \mathbb{R}, f(x) = x^2$   | d) $f: [0, 3] \rightarrow \mathbb{R}, f(x) = x^3$                           |

**12.6.4.** Să se afle volumul unui butoi, știind că doagele lui au forma unui arc de sinusoidă,  $f(x) = a \sin x$ ,  $a > 0$ , iar lungimea butoiului este  $\frac{2\pi}{3}$



**12.6.5.** Să se determine capacitatea (volumul) unei pâlnii generate prin rotirea subgraficului funcției  $f: [1, e] \rightarrow \mathbb{R}, f(x) = x \ln x$ , în jurul axei Ox.



**12.6.6.** Să se determine volumul corpului de rotație  $G_f$  determinat de funcția:

|                                                              |                                                                            |
|--------------------------------------------------------------|----------------------------------------------------------------------------|
| a) $f: [0, 1] \rightarrow \mathbb{R}, f(x) = x^2 - \sqrt{x}$ | b) $f: [-1, 2] \rightarrow \mathbb{R}, f(x) = (x + 1)e^x$                  |
| c) $f: [0, 1] \rightarrow \mathbb{R}, f(x) = e^x \sqrt{x}$   | d) $f: (0, +\infty) \rightarrow \mathbb{R}, f(x) = 3 \sqrt{\frac{x}{\pi}}$ |

**12.6.7.** Să se determine lungimea graficului funcției:

|                                                           |                                                                   |
|-----------------------------------------------------------|-------------------------------------------------------------------|
| a) $f: [-1,1] \rightarrow R, f(x) = x^2$                  | b) $f: [0,3] \rightarrow R, f(x) = x + 1$                         |
| c) $f: [\sqrt{8}, \sqrt{24}] \rightarrow R, f(x) = \ln x$ | d) $f: [-1,1] \rightarrow R, f(x) = -\frac{x^2}{2} + \frac{3}{2}$ |

**12.6.8.** Să se afle aria suprafeței de rotație obținută prin rotirea în jurul axei Ox a graficului funcției:

|                                                             |                                                               |
|-------------------------------------------------------------|---------------------------------------------------------------|
| a) $f: [0,1] \rightarrow R, f(x) = x^3$                     | b) $f: [0,1] \rightarrow R, f(x) = \frac{1}{2}(e^x + e^{-x})$ |
| c) $f: [0,4] \rightarrow R, f(x) = x^{\frac{3}{2}}\sqrt{x}$ | d) $f: [0, a] \rightarrow R, f(x) = f(x) = e^{-2x}$           |

## TEMA 13. FUNCȚII DE MAI MULTE VARIABLE. DERIVATE PARȚIALE, APLICAȚII

### 13.1. Elemente de teorie

În capitolele precedente am discutat numai despre funcții  $f$  de o singură variabilă  $x$ , care se scriau  $f(x)$ . În definiția unei funcții  $f$  mai apăreau uneori constante și parametri, e.g. funcția  $f(x) = ax + 2$ , care conține constanta 2 și parametrul  $a$ . În această funcție  $x$  este considerat variabilă și  $a$  parametru, și pot fi definite și derivate de ordin superior.

Totuși putem considera funcții care depind de mai multe variabile, e.g. funcția  $f(x, y) = x^2 + 3xy$  care depinde de două variabile  $x$  și  $y$ . Pentru orice pereche de valori  $x, y$ , funcția  $f(x, y)$  are o valoare bine definită, e.g.  $f(2, 3) = 22$ . Această notație poate fi extinsă la funcții care depind de mai mult de două variabile. Pentru cazul  $n$ -variabile, scriem  $f(x_1, x_2, \dots, x_n)$  pentru o funcție care depinde de variabilele  $x_1, x_2, \dots, x_n$ . Când  $n=2$ ,  $x_1, x_2$  corespund variabilelor  $x$  și  $y$  de mai sus.

Funcțiile de o singură variabilă, ca  $f(x)$ , pot fi reprezentate printr-un grafic pe o hârtie plană, și este evident că funcțiile de două variabile pot fi reprezentate cu puțin efort, printr-o suprafață într-un spațiu tridimensional. Astfel, putem să ne imaginăm  $f(x, y)$  ca descriind variația înălțimii cu poziția într-un peisaj de munte. Funcțiile de mai multe variabile sunt dificil de vizualizat și astfel discuțiile preliminare din acest capitol se vor concentra pe funcții de două variabile.

Funcțiile de mai multe variabile sunt folosite pentru descrierea unor fenomene ce se petrec în plan (două variabile), spațiu (trei variabile) sau într-un spațiu general ( $n$  variabile).

Există două tipuri de funcții de mai multe variabile:

- funcții reale de mai multe variabile, de exemplu  $f: D \subset \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}, f = f(x, y)$  sau  $g: D \subset \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}, g = g(x, y, z)$ ;
- funcții vectoriale de mai multe variabile, de exemplu  $\vec{F}: D \subset \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}^2, \vec{F}(x, y) = F_1(x, y)\vec{i} + F_2(x, y)\vec{j}$ .

Funcțiile reale de mai multe variabile descriu caracteristici ale obiectelor. Spre exemplu  $T(x, y)$  poate fi temperatura unei plăci plane în

punctul de coordonate  $(x,y)$  sau  $\rho(x,y,z)$  poate fi densitatea materialului din care e fabricat un corp în punctul de coordonate  $(x,y,z)$ .

Funcțiile vectoriale de mai multe variabile sunt folosite pentru a descrie mărimi fizice reprezentate prin vectori. Viteza, accelerația și forța sunt cele mai cunoscute exemple de funcții vectoriale. Spre exemplu poate fi viteza cu care se mișcă punctul material de coordonate  $(x,y,z)$  sub acțiunea forței  $\vec{V}(x,y,z) = V_1(x,y,z)\vec{i} + V_2(x,y,z)\vec{j} + V_3(x,y,z)\vec{k}$ .

Pentru funcțiile de mai multe variabile s-au elaborat elemente de analiză matematică asemănătoare celor cunoscute pentru funcții reale de o singură variabilă. Ne vom referi în continuare la noțiunea de *distanță* între două puncte. Pentru  $p \in \mathbf{N}^*$ ,  $p \geq 2$  se definește  $\mathbf{R}^p = R * R * R * \dots * R = \{(x_1, x_2, \dots, x_p) \mid x_1, x_2, \dots, x_p \in R\}$  ca fiind produsul cartezian al mulțimii numerelor reale  $R$  cu ea însăși, de  $p$  ori.

De exemplu  $\mathbf{R}^2 = \{(x,y) \mid x,y \in R\}$ ,  $\mathbf{R}^3 = \{(x,y,z) \mid x,y,z \in R\}$ .

În timp ce mulțimea numerelor reale este total ordonată, între elementele mulțimii  $\mathbf{R}^p$  nu poate fi definită o relație de ordine totală compatibilă cu structura algebrică, de aceea unele proprietăți ale funcțiilor reale de o variabilă reală (legate de monotonie, spre exemplu) nu se pot enunța în cazul funcțiilor reale de mai multe variabile reale (funcții definite pe o parte  $A \subseteq \mathbf{R}^p$  cu valori în  $\mathbf{R}$ ).

În  $\mathbf{R}^2$  se definește distanța între două puncte prin formula

|        |                                                                    |
|--------|--------------------------------------------------------------------|
| (13.1) | $d((x_1, y_1), (x_2, y_2)) = \sqrt{(x_2 - x_1)^2 + (y_2 - y_1)^2}$ |
|--------|--------------------------------------------------------------------|

Această distanță se numește distanță euclidiană pentru că e de fapt lungimea segmentului ce unește punctele  $(x_1, y_1), (x_2, y_2)$ , adică este distanța folosită în geometrie (care se numește și geometrie euclidiană, după numele lui Euclid, matematician din antichitate, care a pus bazele geometriei moderne).

Apoi distanța similară între două puncte în  $\mathbf{R}^3$  se definește prin

|        |                                                                                              |
|--------|----------------------------------------------------------------------------------------------|
| (13.2) | $d((x_1, y_1, z_1), (x_2, y_2, z_2)) = \sqrt{(x_2 - x_1)^2 + (y_2 - y_1)^2 + (z_2 - z_1)^2}$ |
|--------|----------------------------------------------------------------------------------------------|



Și această distanță se numește euclidiană, deoarece e lungimea segmentului ce unește punctele  $(x_1, y_1, z_1), (x_2, y_2, z_2)$ .

În general, în  $R^p$  se definește distanța între două puncte prin formula

|        |                                                                                                                               |
|--------|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| (13.3) | $d\left((x_1, x_2, \dots, x_p), (y_1, y_2, \dots, y_p)\right) = \sqrt{(y_1 - x_1)^2 + (y_2 - x_2)^2 + \dots + (y_p - x_p)^2}$ |
|--------|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|

Spațiul vectorial  $R^p$ , împreună cu distanța euclidiană formează un spațiu euclidian. Spațiul euclidian are o structură algebrică (de spațiu vectorial) și una topologică (generată de distanța euclidiană. Structura topologică este cea care permite dezvoltarea conceptelor de analiză matematică.

### 13.1.1. Definiția derivatei parțiale

O funcție de două variabile  $f(x, y)$  va avea un gradient în toate direcțiile din planul  $xy$ . Poate fi determinată o expresie generală a ratei de modificare a funcției. Dar, la început considerăm cazul mai simplu al determinării vitezei de modificare a lui  $f(x, y)$  în direcția pozitivă a lui  $x$  și direcția pozitivă a lui  $y$ . Aceste rate de modificare se numesc *derivate parțiale* în raport cu  $x$  și  $y$  respectiv, și sunt extrem de importante în diverse aplicații din fizică.

Pentru o funcție de două variabile  $f(x, y)$  putem defini derivata în raport cu  $x$ , de exemplu, spunând că este derivata unei funcții de o variabilă când  $y$  este fixat și tratat ca o constantă. Pentru a specifica că o derivată este calculată în raport cu  $x$ , dar în același timp să admitem că există și derivata în raport cu  $y$ , prima este notată cu  $\frac{\partial f}{\partial x}$  și este *derivata parțială a lui  $f(x, y)$  în raport cu  $x$* . Similar, derivata parțială în raport cu  $y$  se notează  $\frac{\partial f}{\partial y}$ .

Definiția formală a derivatei parțiale a lui  $f(x, y)$  în raport cu  $x$  este dată de raportul :

|        |                                                                                                               |
|--------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| (13.4) | $\frac{\partial f}{\partial x} = \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{f(x + \Delta x, y) - f(x, y)}{\Delta x}$ |
|--------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------|

cu condiția ca limita să existe și să fie finită. Această definiție seamănă mult cu cea a derivatei unei funcții de o singură variabilă. Cealaltă derivată parțială a lui  $f(x, y)$  se definește în mod similar ca o limită:

|        |                                                                                                               |
|--------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| (13.5) | $\frac{\partial f}{\partial y} = \lim_{\Delta y \rightarrow 0} \frac{f(x, y + \Delta y) - f(x, y)}{\Delta y}$ |
|--------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------|

La scrierea derivatelor parțiale, se practică indicarea variabilelor care se mențin constante, scriindu-le ca indici la simbolul derivatei. Astfel, o notație compactă pentru derivatele parțiale (4) și (5) este:  $f'_x$ , respectiv  $f'_y$ . În această formă, indicele arată în mod explicit care variabilă să fie păstrată constantă și care trebuie variată. Totuși, este extrem de important ca atunci când folosim derivate parțiale să amintim care variabile sunt păstrate constante și este bine să scriem derivatele parțiale cât mai explicit pentru a evita confuziile.

Definițiile (4) și (5) au extensii simple la cazul a  $n$  variabile.

Ca și în cazul funcțiilor de o singură variabilă, se pot defini *derivate parțiale de ordin secund* sau de ordin mai mare, în mod similar. Pentru o funcție de două variabile  $f(x, y)$  acestea sunt:

|        |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                          |
|--------|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| (13.6) | $\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x} \left( \frac{\partial f}{\partial x} \right) &= \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} = f''_{xx}, & \frac{\partial}{\partial y} \left( \frac{\partial f}{\partial y} \right) &= \frac{\partial^2 f}{\partial y^2} = f''_{yy} \\ \frac{\partial}{\partial x} \left( \frac{\partial f}{\partial y} \right) &= \frac{\partial^2 f}{\partial x \partial y}, & \frac{\partial}{\partial y} \left( \frac{\partial f}{\partial x} \right) &= \frac{\partial^2 f}{\partial y \partial x} \end{aligned}$ |
|--------|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|

Numai trei dintre derivatele secunde sunt independente deoarece are loc relația

$$\frac{\partial^2 f}{\partial x \partial y} = \frac{\partial^2 f}{\partial y \partial x}$$

cu condiția ca derivatele parțiale secunde să fie continue în punctul considerat. Această relație, adesea se dovedește utilă în evaluarea unor derivate complicate. Se poate arăta că pentru o funcție de  $n$  variabile  $f(x_1, x_2, \dots, x_n)$  în aceleași condiții are loc relația:

$$\frac{\partial^2 f}{\partial x_i \partial x_j} = \frac{\partial^2 f}{\partial x_j \partial x_i}$$

**Exemplu 13.1.** Calculați derivatele parțiale de ordinul întâi și al doilea pentru funcția

$$f(x, y) = 2x^3y^2 + y^3.$$

În urma calculelor găsim succesiv:

$$\frac{\partial f}{\partial x} = 6x^2y^2; \quad \frac{\partial f}{\partial y} = 4x^3y + 3y^2$$

$$\frac{\partial^2 f}{\partial x^2} = 12xy^2, \quad \frac{\partial^2 f}{\partial x \partial y} = \frac{\partial^2 f}{\partial y \partial x} = 12x^2y, \quad \frac{\partial^2 f}{\partial y^2} = 4x^3 + 6y$$

### 13.1.2. Diferențiala totală și derivata totală

Derivatele parțiale ale funcției  $f(x, y)$  ne dau rata de modificare a funcției  $f$  în direcția pozitivă a axei  $x$  și a axei  $y$ , și vom considera în cele ce urmează rata de modificare a funcției  $f(x, y)$  într-o direcție arbitrară. Presupunem că facem mici modificări simultane  $\Delta x$  în  $x$  și  $\Delta y$  în  $y$  și ca rezultat funcția  $f$  se modifică în  $f + \Delta f$ . Astfel, avem relațiile succesive:

|        |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                     |
|--------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| (13.7) | $\begin{aligned} \Delta f &= f(x + \Delta x, y + \Delta y) - f(x, y) = \\ &= f(x + \Delta x, y + \Delta y) - f(x, y + \Delta y) + f(x, y + \Delta y) - f(x, y) = \\ &= \left[ \frac{f(x + \Delta x, y + \Delta y) - f(x, y + \Delta y)}{\Delta x} \right] \Delta x \\ &\quad + \left[ \frac{f(x, y + \Delta y) - f(x, y)}{\Delta y} \right] \Delta y \end{aligned}$ |
|--------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|

În ultima linie cantitățile din paranteze sunt similare celor din definițiile (13.4), (13.5) ale derivatelor parțiale. Pentru a avea egalitate strictă cu derivatele parțiale,  $\Delta x$  și  $\Delta y$  ar trebui să fie infinitesimal de mici. Dar, chiar și cu  $\Delta x$  și  $\Delta y$  finite (dar nu prea mari), putem scrie formula aproximativă

|        |                                                                                                                |
|--------|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| (13.8) | $\Delta f \approx \frac{\partial f(x, y)}{\partial x} \Delta x + \frac{\partial f(x, y)}{\partial y} \Delta y$ |
|--------|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------|

Notăm că prima paranteză din (13.7) aproximează de fapt  $\frac{\partial f(x,y+\Delta y)}{\partial x}$ , dar această derivată a fost înlocuită cu  $\frac{\partial f(x,y)}{\partial x}$  în (13.8).

Cât de bună este aproximația (13.8) pentru relația (13.7) depinde nu numai de cât de mici sunt  $\Delta x$  și  $\Delta y$  dar și de mărimile derivatelor parțiale de ordin superior. Acest lucru se abordează cu ajutorul funcțiilor Taylor pentru funcții de două și mai multe variabile [12,14].

Cu toate acestea, facem modificările  $\Delta x$  și  $\Delta y$  infinitezimale în (13.8) și putem defini *diferențiala totală*  $df$  a funcției  $f(x,y)$  fără nici o aproximație, ca fiind

|        |                                                                            |
|--------|----------------------------------------------------------------------------|
| (13.9) | $df = \frac{\partial f}{\partial x} dx + \frac{\partial f}{\partial y} dy$ |
|--------|----------------------------------------------------------------------------|

Ecuția (13.9) poate fi extinsă la cazul unei funcții de  $n$  variabile  $f(x_1, x_2, \dots, x_n)$

$$df = \frac{\partial f}{\partial x_1} dx_1 + \frac{\partial f}{\partial x_2} dx_2 + \dots + \frac{\partial f}{\partial x_n} dx_n$$

**Exemplu 13.2.** Calculați diferențiala totală a funcției  $f(x,y) = ye^{x+y}$

$$\begin{aligned} \frac{\partial f}{\partial x} &= ye^{x+y}, \frac{\partial f}{\partial y} = e^{x+y} + ye^{x+y} \\ df &= (ye^{x+y})dx + (e^{x+y} + ye^{x+y})dy \\ df &= (ye^{x+y})dx + (1+y)e^{x+y}dy \end{aligned}$$

### 13.1.3. Derivarea funcțiilor compuse. Regula lanțului - “chain rule”

Există și situații când la o funcție de două variabile  $f = f(x,y)$ ,  $x$  și  $y$  sunt funcții de altă variabilă, să spunem  $u$ . Dacă vrem să calculăm derivata  $\frac{df}{du}$ , putem să substituim în  $f(x,y)$  expresiile pentru  $x(u)$  și  $y(u)$  și apoi să derivăm funcția de  $u$  obținută. Astfel de substituții ne vor da rezultatul dorit doar în cazuri simple, însă în exemple mai complicate este mai ușor să folosim diferențiala totală.

Din ecuația (9), diferențiala totală a funcției  $f(x,y)$  este

$$df = \frac{\partial f}{\partial x} dx + \frac{\partial f}{\partial y} dy$$

Împărțim formal relația cu  $du$ , și obținem relația

$$\frac{df}{du} = \frac{\partial f}{\partial x} \frac{dx}{du} + \frac{\partial f}{\partial y} \frac{dy}{du}$$

care se numește *regula lanțului* (chain rule) pentru derivarea parțială. Această expresie furnizează o metodă directă de calculare a derivatei totale a lui  $f$  în raport cu  $u$  și este folositoare când o ecuație este exprimată în formă parametrică.

**Exemplu 13.3.** Se dau  $x(u) = 1 + au$ ,  $y(u) = bu^3$ . Să se găsească rata de modificare a funcției  $f(x, y) = xe^{-y}$  în raport cu  $u$ .

*Rezolvare.* Așa cum am menționat, această problemă poate fi rezolvată înlocuind  $x$  și  $y$  pentru a obține o funcție  $f$  care depinde numai de  $u$  și apoi o derivăm în raport cu  $u$ . Totuși cu regula lanțului obținem direct

$$\frac{df}{du} = \frac{\partial f}{\partial x} \frac{dx}{du} + \frac{\partial f}{\partial y} \frac{dy}{du} = e^{-y} \cdot a - xe^{-y} \cdot 3bu^2$$

în care substituim  $x$  și  $y$ :

$$\frac{df}{du} = e^{-bu^3} \cdot a + (-1 - au)e^{-bu^3} \cdot 3bu^2 = e^{-bu^3}(a - 3bu^2 - 3abu^3)$$

Ecuația de mai sus este un exemplu de *chain rule* pentru o funcție de două variabile fiecare depinzând de o singură variabilă. Chain rule poate fi extinsă însă la funcții de mai multe variabile, fiecare din ele fiind o funcție de o variabilă  $u$ , adică la funcții  $(x_1, x_2, \dots, x_n)$ ,  $x_i = x_i(u)$ . Detalii suplimentare pot fi găsite în [12,14].

## 13.2. Extremele locale ale funcțiilor reale de mai multe variabile reale

### 13.2.1. Matricea hessiană

Instrumentul de bază în analiza extremelor funcțiilor reale de mai multe variabile reale este matricea care se construiește cu ajutorul derivatelor parțiale de ordin superior. Anume este vorba despre *matricea hessiană*, care conține derivatele parțiale de ordinul al doilea ale funcției în studiu. Aceasta este o matrice simetrică (adică are derivatele parțiale mixte egale), pătratică

de ordinul  $n \times n$ , unde  $n$  este numărul variabilelor reale ale funcției date. Astfel, în cazul unei funcții de două variabile reale, matricea hessiană va avea ordinul  $2 \times 2 = 4$ , iar în cazul a trei variabile reale aceasta va avea ordinul  $3 \times 3 = 9$ . Avem deci definiția matricii hessiene:

|         |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                       |
|---------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| (13.10) | $Hf_{(x,y)} = \begin{pmatrix} \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} & \frac{\partial^2 f}{\partial x \partial y} \\ \frac{\partial^2 f}{\partial y \partial x} & \frac{\partial^2 f}{\partial y^2} \end{pmatrix}, \text{daca } n = 2 \text{ variabile}$<br>$Hf_{(x,y,z)} = \begin{pmatrix} \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} & \frac{\partial^2 f}{\partial x \partial y} & \frac{\partial^2 f}{\partial x \partial z} \\ \frac{\partial^2 f}{\partial y \partial x} & \frac{\partial^2 f}{\partial y^2} & \frac{\partial^2 f}{\partial y \partial z} \\ \frac{\partial^2 f}{\partial z \partial x} & \frac{\partial^2 f}{\partial z \partial y} & \frac{\partial^2 f}{\partial z^2} \end{pmatrix}, \text{daca } n = 3 \text{ variabile}$ |
|---------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|

**Exemplu 13.4.** Pentru funcția  $f: \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}, f(x, y) = x^2y + 3xy^2$  să calculăm matricea hessiană. Mai întâi derivatele parțiale successive (de ordin 1 apoi 2) sunt:

$$\frac{\partial f}{\partial x} = 2xy + 3y^2, \frac{\partial f}{\partial y} = x^2 + 6xy$$

$$\frac{\partial^2 f}{\partial x^2} = 2y, \frac{\partial^2 f}{\partial x \partial y} = 2x + 6y = \frac{\partial^2 f}{\partial y \partial x}, \quad \frac{\partial^2 f}{\partial y^2} = 6x$$

Introducând derivatele parțiale în matricea hessiană obținem

$$Hf_{(x,y)} = \begin{pmatrix} 2y & 2x + 6y \\ 2x + 6y & 6x \end{pmatrix}$$

Dacă am avea, de exemplu, cerința suplimentară să calculăm matricea hessiană într-un punct cu valori concrete, să zicem  $M(1,2)$ , atunci înlocuim valorile  $x=1$  și  $y=2$  în matricea de mai sus și după efectuarea calculelor găsim o matrice simetrică de numere reale:

$$Hf_{(1,2)} = \begin{pmatrix} 4 & 14 \\ 14 & 6 \end{pmatrix}$$

Definirea noțiunii de punct de extrem al unei funcții de mai multe variabile reale urmează desigur definiția din cazul unei singure variabile reale. Astfel avem următoarea

**Definiție 13.1.** Fie  $A \subseteq R^p$  o mulțime deschisă,  $f: A \rightarrow R$  o funcție oarecare. Un punct  $x_0 \in A$  se numește *punct de extrem local* al funcției  $f$  dacă există o vecinătate  $V$  a lui  $x_0$  în care diferența  $f(x) - f(x_0)$  are semn constant. Mai precis, punctul  $x_0$  se numește *punct de maxim* (respectiv de *minim*) *local* al lui  $f$  dacă pentru orice  $x \in V$  avem  $f(x) - f(x_0) \leq 0$  respectiv  $f(x) - f(x_0) \geq 0$ .

Amintim aici că numim *vecinătate* a unui punct  $x_0$  un interval deschis centrat în  $x_0$ . De fapt este vorba despre o sferă deschisă centrată în  $x_0$ , cazul intervalului fiind cel unu-dimensional. Adică, la fel ca în cazul unei singure variabile reale, și când ne situăm în  $R^p$ ,  $p > 1$ , pentru  $x_0 \in R^p$ , avem  $V_{x_0} = (x_0 - \varepsilon, x_0 + \varepsilon)$ ,  $\varepsilon > 0$ ,  $\varepsilon \in R$ .

Specific cazului mai multor variabile reale este următoarea teoremă.

**Teorema 13.1. (Fermat).**

Fie  $A \subseteq R^p$  o mulțime deschisă. Dacă funcția  $f: A \rightarrow R$  are derivate parțiale de ordinal doi în punctul de extrem local  $x_0 \in A$ , atunci  $x_0$  este punct critic (staționar) pentru  $f$ , adică:

|         |                                                                                 |
|---------|---------------------------------------------------------------------------------|
| (13.11) | $\frac{\partial f}{\partial x_i}(x_1, x_2, \dots, x_p) = 0, i = 1, 2, \dots, p$ |
|---------|---------------------------------------------------------------------------------|

**Observație 13.1.** Nu este suficient ca toate derivatele parțiale să se anuleze în  $x_0$  pentru ca acesta să fie punct de extrem local. De exemplu, pentru funcția  $f(x, y) = x^3 - y^3$ ,  $(x, y) \in R^2$ , singurul punct critic este  $(0, 0)$ , dar  $f(x, y) - f(0, 0)$  nu păstrează semn constant în nici o vecinătate a originii. Prin urmare,  $(0, 0)$  este punct critic, dar nu este punct de extrem pentru  $f$ .

Următoarea teoremă autorizează metoda de găsim a punctelor de extrem pentru funcțiile de mai multe variabile.

**Teorema 13.2.** Fie  $A \subseteq R^p$  o mulțime deschisă și convexă,  $f: A \rightarrow R$  o funcție de clasă  $C^2$  pe  $A$ . Atunci au loc următoarele.

i) Dacă  $x_0 \in A$  este un punct critic al funcției  $f$  și matricea hessiană  $H_f(x_0)$  are toate valorile proprii strict negative atunci  $x_0$  este punct de maxim local pentru funcția  $f$ ;

ii) Dacă  $x_0 \in A$  este un punct critic al funcției  $f$  și matricea hessiană  $H_f(x_0)$  are toate valorile proprii strict pozitive atunci  $x_0$  este punct de minim local pentru funcția  $f$ .

Observație importantă: Deoarece valorile proprii ale matricii hessiene devin greu de calculat pentru funcții ce au mai mult de două variabile, se poate folosi următorul criteriu.

**Teorema 13.3. (Criteriul lui Sylvester).** În condițiile teoremei de mai sus au loc următoarele situații.

- a) dacă minorii principali  $\Delta_1, \Delta_2, \dots, \Delta_p$  ai matricii hessiene sunt strict pozitivi atunci  $x_0$  este punct de minim local;
- b) dacă:  $\Delta_1 < 0, \Delta_2 > 0, \Delta_3 < 0, \dots, (-1)^p \Delta_p > 0$  atunci  $x_0$  este punct de maxim local.

### 13.2.2. Metoda de determinare a punctelor de extrem local pentru funcții de două variabile

Criteriul lui Sylvester oferă metoda de găsim a punctelor de extrem pentru funcții reale, și în cazul a două variabile acest lucru este destul de simplu. În cele ce urmează expunem pașii ce trebuiesc urmați.

- 1) Se calculează derivatele parțiale de ordinul I ale lui  $f$ :  $\frac{\partial f}{\partial x}(x, y), \frac{\partial f}{\partial y}(x, y)$
- 2) Se determină punctele staționare ale funcției rezolvând sistemul

$$\begin{cases} \frac{\partial f}{\partial x}(x, y) = 0 \\ \frac{\partial f}{\partial y}(x, y) = 0 \end{cases}$$

Soluțiile  $(x_0, y_0), (x_1, y_1), \dots$  sunt punctele staționare ale sistemului.

- 3) Se calculează derivatele parțiale de ordinul II și matricea hessiană a lui  $f$ :

$$H_{f(x,y)} = \begin{pmatrix} \frac{\partial^2 f}{\partial x^2}(x, y) & \frac{\partial^2 f}{\partial x \partial y}(x, y) \\ \frac{\partial^2 f}{\partial y \partial x}(x, y) & \frac{\partial^2 f}{\partial y^2}(x, y) \end{pmatrix}$$

- 4) Se calculează matricea Hessiană în punctul  $(x_0, y_0)$



$$Hf_{(x_0, y_0)} = \begin{pmatrix} \frac{\partial^2 f}{\partial x^2}(x_0, y_0) & \frac{\partial^2 f}{\partial x \partial y}(x_0, y_0) \\ \frac{\partial^2 f}{\partial y \partial x}(x_0, y_0) & \frac{\partial^2 f}{\partial y^2}(x_0, y_0) \end{pmatrix}$$

5) Se calculează valorile proprii ale matricii hessiene în punctul  $(x_0, y_0)$  rezolvând ecuația:

$$\begin{vmatrix} \frac{\partial^2 f}{\partial x^2}(x_0, y_0) - \lambda & \frac{\partial^2 f}{\partial x \partial y}(x_0, y_0) \\ \frac{\partial^2 f}{\partial y \partial x}(x_0, y_0) & \frac{\partial^2 f}{\partial y^2}(x_0, y_0) - \lambda \end{vmatrix} = 0$$

Ecuația de gradul al doilea ce trebuie rezolvată este:

$$\left( \frac{\partial^2 f}{\partial x^2}(x_0, y_0) - \lambda \right) \left( \frac{\partial^2 f}{\partial y^2}(x_0, y_0) - \lambda \right) - \left( \frac{\partial^2 f}{\partial x \partial y}(x_0, y_0) \right) \left( \frac{\partial^2 f}{\partial y \partial x}(x_0, y_0) \right) = 0$$

Aceasta are două soluții,  $\lambda_1, \lambda_2$ .

6) Dacă avem  $\lambda_1 > 0, \lambda_2 > 0$  atunci punctul  $(x_0, y_0)$  este punct de minim local și valoarea minimă a lui  $f$  este  $(x_0, y_0)$ .

7) Dacă ambele valori proprii sunt negative,  $\lambda_1 < 0, \lambda_2 < 0$  atunci punctul  $(x_0, y_0)$  este punct de maxim local și valoarea maximă a lui  $f$  este  $(x_0, y_0)$ .

În restul cazurilor punctul  $(x_0, y_0)$  nu este punct de extrem.

### 13.3. Exemple rezolvate

Să se determine punctele de extrem local ale următoarelor funcții:

**13.3.1.**  $f(x, y) = x^2 + y^2 + 1$

a) Se calculează derivatele parțiale de ordinul întâi ale funcției:  $\frac{\partial f}{\partial x} = 2x$ ,

$$\frac{\partial f}{\partial y} = 2y$$

b) Se determină punctele staționare ale funcției rezolvând sistemul

$$\begin{cases} \frac{\partial f}{\partial x} = 2x = 0 \\ \frac{\partial f}{\partial y} = 2y = 0 \end{cases}$$

Punctul staționar este  $(0,0)$

c) Se calculează derivatele parțiale de ordiul al II lea ale lui  $f$  și matricea Hessiană

$$Hf_{(x,y)} = \begin{pmatrix} \frac{\partial^2 f}{\partial x^2}(x,y) & \frac{\partial^2 f}{\partial x \partial y}(x,y) \\ \frac{\partial^2 f}{\partial y \partial x}(x,y) & \frac{\partial^2 f}{\partial y^2}(x,y) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 2 \end{pmatrix}$$

d) Se calculează matricea Hessiană în punctul  $(x_0, y_0) = (0,0)$

$$Hf_{(0,0)} = \begin{pmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 2 \end{pmatrix}$$

e) Se calculează valorile proprii ale matricii Hessiene în punctul  $(x_0, y_0)$  rezolvând ecuația

$$\begin{vmatrix} 2 - \lambda & 0 \\ 0 & 2 - \lambda \end{vmatrix} = 0$$

Ele sunt  $\lambda_1 = \lambda_2 = 2$

f) Deoarece avem  $\lambda_1 > 0, \lambda_2 > 0$  rezultă că punctul  $(0,0)$  este punct de minim local.

Valoarea minimă a funcției este  $f(0,0) = 1$ .

**13.3.2.**  $f(x, y) = x^2 + 2y^2 + 2xy + 1$

a) Se calculează derivatele parțiale de ordinul întâi ale funcției  $\frac{\partial f}{\partial x} = 2x + 2y, \frac{\partial f}{\partial y} = 4y + 2x$

b) Se determină punctele staționare ale funcției rezolvând sistemul

$$\begin{cases} \frac{\partial f}{\partial x} = 2x + 2y = 0 \\ \frac{\partial f}{\partial y} = 4y + 2x = 0 \end{cases}$$

Sistemul are soluția unică (0,0). Punctul staționar este (0,0).

c) Se calculează derivatele parțiale de ordiul al II lea ale lui f și matricea Hessiană

$$Hf_{(x,y)} = \begin{pmatrix} \frac{\partial^2 f}{\partial x^2}(x,y) & \frac{\partial^2 f}{\partial x \partial y}(x,y) \\ \frac{\partial^2 f}{\partial y \partial x}(x,y) & \frac{\partial^2 f}{\partial y^2}(x,y) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 & 2 \\ 2 & 4 \end{pmatrix}$$

d) Se calculează matricea Hessiană în punctul  $(x_0, y_0) = (0,0)$

$$Hf_{(0,0)} = \begin{pmatrix} 2 & 2 \\ 2 & 4 \end{pmatrix}$$

e) Se calculează valorile proprii ale matricii Hessiene în punctul  $(x_0, y_0)$  rezolvând ecuația

$$\begin{vmatrix} 2 - \lambda & 2 \\ 2 & 4 - \lambda \end{vmatrix} = 0$$

Ecuația  $\lambda^2 - 6\lambda - 4 = 0$  are soluțiile  $\lambda_1 = 3 + \sqrt{5}$ ,  $\lambda_2 = 3 - \sqrt{5}$ .

f) Deoarece avem  $\lambda_1 > 0$ ,  $\lambda_2 > 0$  rezultă că punctul (0,0) este punct de minim local.

Valoarea minimă a funcției este  $f(0,0)=1$ .

### 13.4. Probleme propuse

1) Să se calculeze derivatele parțiale ale următoarelor funcții, precizând și domeniul lor de definiție:

a)  $f(x, y) = x^2 + y^2 - 3axy$ ,  $a \in \mathbb{R}$

b)  $f(x, y) = \frac{x-y}{x+y}$

2) Să se determine punctele de extrem local pentru următoarele funcții de două variabile:

a)  $f(x, y) = x^3 + y^3 - 3xy$

b)  $f(x, y) = x^3 + 8y^3 - 6xy + 1$

c)  $f(x, y) = 2x^3 - xy^2 + 5x^2 + y^2$

3) Să se determine punctele de extrem local pentru următoarele funcții de trei variabile:

a)  $f(x, y, z) = 3x^2 + y^2 + 2z^2 - 2xy + 2yz$

b)  $f(x, y, z) = x^2 + y^2 + 4z^2 - xy + xz + 2yz$

## TEMA 14. APLICAȚII ALE CALCULULUI DIFERENȚIAL ÎN CHIMIE

Funcțiile de una, două sau mai multe variabile își găsesc o aplicabilitate interesantă și deosebit de utilă în modelarea proceselor biochimice. Dacă ne gândim numai la operațiile fundamentale de derivare în contextul mai multor variabile, găsim o paletă extrem de largă de modele unde derivatele parțiale din matematică joacă un rol cheie.

Vom ilustra în această secțiune aplicarea unui concept fundamental din matematică, anume derivarea, în modelarea problemelor din chimie. Dacă în secțiunea precedentă destinată calculului diferențial a fost vorba de elemente de bază ale derivării, în cele ce urmează vom arăta cât de strâns legate sunt cele două concepte matematice – derivarea și integrarea, pe de o parte, și cum existența derivatelor parțiale se dovedește fundamentală. Pe de altă parte, este interesant cum suntem conduși, în procesul de modelare matematică, la sisteme de două ecuații cu două necunoscute, precum și la mânuirea unora din funcțiile elementare (prezentate și ele în secțiunile precedente), precum funcția exponențială și logaritmică. Termodinamica este doar unul din domeniile chimiei (și fizicii) aplicate în care nu se pot obține soluții la diferitele modele fără matematică. La fel de abundentă în exemple este și cinetica chimică.

### 14.1. Termodinamica

#### 14.1.1. Ecuația Van der Waals

Dacă luăm în calcul doar transformările de fază sau *tranzițiile de fază*, procese larg răspândite în chimia și chimia fizică, regăsim imediat funcțiile de două sau mai multe variabile ca instrument de bază în modelarea matematică a acestor procese. Acest lucru l-am abordat parțial și în secțiunea precedentă.

Orice parte omogenă a unui sistem macroscopic este numită *fază*, iar trecerea substanței dintr-o fază în alta prin modificarea stării sale se numește *transformare* sau *tranziție de fază*, fiind provocată de variația parametrilor care descriu starea sistemului termodinamic. Calitativ, se numește *stare* a unui sistem (într-un moment dat) totalitatea proprietăților lui (în acel moment). Pentru precizarea cantitativă a acestei noțiuni, se recurge la valorile pe care le au diferite mărimi fizice în starea respectivă. Între mărimile care

exprimă proprietăți ale unui sistem există relații cantitative bine determinate; există însă un număr limitat de mărimi fizice independente care caracterizează complet starea sa, alte proprietăți ale sistemului putând fi derivate din acestea. Alegerea mărimilor care să servească drept variabile independente este un pas preliminar necesar în studiul oricărui sistem.

În cele ce urmează “ $P$ ” reprezintă presiunea iar “ $V$ ” și “ $T$ ” reprezintă volumul, respectiv temperatura sistemului.

În general, ecuația de stare a sistemului termodinamic are forma

|        |                       |
|--------|-----------------------|
| (14.1) | $f(P, V, T, \xi) = 0$ |
|--------|-----------------------|

unde  $\xi$  este un vector al parametrilor sistemului. Astfel, ecuația termodinamică de stare reprezintă din punct de vedere matematic o ecuație ce implică un set complet de parametri fizici măsurabili. În cazul unui sistem termodinamic simplu avem

$$f(P, V, T) = 0$$

și orice variabilă depinde de celelalte două. De exemplu  $P = P(V, T)$ . Diferențiala totală a acestei funcții este

|        |                                                                                                          |
|--------|----------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| (14.2) | $dP = \left(\frac{\partial P}{\partial V}\right)_T dV + \left(\frac{\partial P}{\partial T}\right)_V dT$ |
|--------|----------------------------------------------------------------------------------------------------------|

În ecuația (14.2), ca și în cele care urmează, notația  $\left(\frac{\partial P}{\partial V}\right)_T$  reprezintă variația presiunii în raport cu volumul atunci când temperatura este constantă (această regulă se păstrează pentru toate notațiile).

Din ecuația (14.1), folosind regula de derivare a funcțiilor implicite, se obține corelația dintre derivatele parțiale:

|        |                                                                                                                                               |
|--------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| (14.3) | $\left(\frac{\partial T}{\partial P}\right)_V \left(\frac{\partial P}{\partial V}\right)_T \left(\frac{\partial V}{\partial T}\right)_P = -1$ |
|--------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|

Ecuația (14.3) reprezintă *ecuația de stare în formă diferențială*.

Cunoașterea ecuației de stare (14.1) permite evaluarea unui grup de parametri ai *sistemului microscopic*, cum ar fi coeficienții de compresibilitate, dilatare și presiune, care au următoarele expresii:

|        |                                                                                                                           |
|--------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| (14.4) | <i>Coeficientul de compresibilitate izoterma</i><br>$K_T = -\frac{1}{V} \left( \frac{\partial V}{\partial P} \right)_T$   |
| (14.5) | <i>Coeficientul izobar de dilatare termica</i><br>$\alpha_P = \frac{1}{V} \left( \frac{\partial V}{\partial T} \right)_P$ |
| (14.6) | <i>Coeficientul izocor al presiunii</i><br>$\beta_V = \frac{1}{P} \left( \frac{\partial P}{\partial T} \right)_V$         |

Fiecărui sistem fizic îi corespunde o anumită ecuație de stare, cea mai simplă fiind *ecuația de stare a gazului ideal*, adică a gazului format din particule individuale aflate în mișcare aleatorie care nu interacționează între ele și dimensiunile cărora sunt neglijate. Aceasta este *ecuația lui Clapeyron-Mendeleev*:

|        |                         |
|--------|-------------------------|
| (14.7) | $PV = \frac{m}{\mu} RT$ |
|--------|-------------------------|

unde  $m$  este masa gazului,  $\mu$  este masa lui molară, iar  $R$  este constanta universală a gazelor :  $R = 8.3143 \cdot 10^3 \text{ J kmol}^{-1} \text{K}^{-1}$ .

Pentru gazul ideal este valabilă *relația lui Robert Mayer* sau ecuația calorică de stare cunoscută, în care *capacitățile termice molare* la presiune constantă,  $C_P$ , și la volum constant,  $C_V$ , sunt legate prin formula

|        |                 |
|--------|-----------------|
| (14.8) | $C_P - C_V = R$ |
|--------|-----------------|

Relația lui Mayer (14.8) este valabilă, indiferent de faptul că moleculele au sau nu mișcare de rotație sau vibrație. De asemenea, toate relațiile care descriu procesele termodinamice prin care poate trece o cantitate de gaz ideal sunt valabile indiferent dacă capacitățile termice molare  $C_P$  și  $C_V$  sunt constante sau nu, în funcție de parametrii sistemului termodinamic. În practică, se folosesc doar tabele care indică variația acestor mărimi cu temperatura, ca urmare comportarea acestora se confundă cu a gazului semiperfect.

Pentru *gazele reale* și *lichide* s-au propus mai multe ecuații termice de stare, printre care figurează și *ecuația van der Waals*, care ține cont de interacțiunea perechilor de molecule într-un volum  $V$  de substanță:

(14.9)

$$\left(P + \frac{n^2 a}{V^2}\right)(V - nb) = nRT$$

unde  $n$  este numărul de moli,  $a$  constanta care caracterizează interacțiunile moleculare perechi din interiorul substanței - forțele Van der Waals, iar  $b$  reprezintă volumul moleculelor într-un mol de gaz sau lichid.

Prezentăm în cele ce urmează exemple de bază din chimie, care ilustrează utilitatea derivatelor parțiale în rezolvarea modelelor concrete [10]

#### Exemplu 14.1. [10 pb.3.3.7]

Ce valoare are diferența  $C_P - C_V$  pentru un mol de gaz la care este valabilă ecuația de stare a lui Van der Waals? Dar în cazul unui gaz perfect?

*Rezolvare.* Ecuația de stare a lui Van der Waals pentru un mol de gaz este ecuația (14.9) sub forma

$$\left(P + \frac{a}{V^2}\right)(V - b) = RT$$

unde  $a$  și  $b$  reprezintă corecții pentru presiune, respectiv volum.

Diferența  $C_P - C_V$  are valoarea [10, F.3.115]

$$C_P - C_V = T \left(\frac{\partial P}{\partial T}\right)_V \cdot \left(\frac{\partial V}{\partial T}\right)_P$$

Derivatele  $\left(\frac{\partial P}{\partial T}\right)_V$ ,  $\left(\frac{\partial V}{\partial T}\right)_P$  se obțin folosind ecuația lui Van der Waals.

Ea se poate scrie

$$P = \frac{RT}{V-b} - \frac{a}{V^2}.$$

Prin derivare în raport cu  $T$  se obține

$$\left(P + \frac{a}{V^2}\right) \left(\frac{\partial V}{\partial T}\right)_P - \frac{2a}{V^2}(V - b) \left(\frac{\partial V}{\partial T}\right)_P = R.$$

Prin derivare în raport cu  $V$  se obține

$$\left(\frac{\partial V}{\partial T}\right)_P = \frac{R}{P + \frac{a}{V^2} - 2a \frac{V-b}{V^3}} = \frac{R}{P - \frac{a}{V^2} + 2 \frac{ab}{V^3}}.$$



Introducând expresiile derivatelor în diferența  $C_P - C_V$  se obține

$$C_P - C_V = R \frac{P + a/V^2}{P - a/V^2 + 2ab/V^3}.$$

Corecțiile a și b fiind mici produsul  $ab$  este și mai mic, iar volumul molar  $V$  suficient de mare, încât ultimul termen de la numitor se poate neglija.

$$C_P - C_V = R \frac{P + a/V^2}{P - a/V^2}$$

Și după împărțire

$$C_P - C_V = R \left( 1 + \frac{2a}{PV^2} \right)$$

În expresia diferenței  $C_P - C_V$  apare corecția “a”. La gazul perfect avem  $C_P - C_V = R$ .

#### 14.1.2. Principiul I al termodinamicii

Principiul I al termodinamicii reprezintă extinderea principiului echivalenței asupra tuturor formelor de energie. Poate fi enunțat ca principiul conservării energiei în procesele termodinamice care sunt însoțite de transfer de căldură, datorită degajării, absorbției și transferului energiei termice. Principiul I are la bază următorul postulat: energia unui sistem izolat este constantă.

Fie cantitatea de căldură  $Q$  și lucrul mecanic  $W$  schimbat de sistem cu mediul. Semnul energiei absorbită sau cedată de sistem se stabilește conform următoarei convenții: lucrul mecanic cedat de sistem este negativ când direcția forței coincide cu direcția mișcării.

##### a) *Funcții de stare și diferențiale exacte.*

Proprietățile unei probe independente de modul în care se obține proba se numesc *funcții de stare*. Ele pot fi privite ca funcție de alți parametri fundamentali, ca presiunea, temperatura și volumul, care descriu starea curentă a sistemului. Energia internă, entalpia și capacitatea calorică sunt funcții de stare.

Proprietățile legate de prepararea stării se numesc *funcții de drum*.

Lucrul efectuat pentru prepararea unei stări, energia transferată sub formă de căldură sunt funcții de drum.

Fie două stări  $\langle 1 \rangle = (V_1, T_1, U_1)$  și  $\langle 2 \rangle = (V_2, T_2, U_2)$  ale unui sistem și două procese care variază pe două căi (drumuri) între cele două stări: unul oarecare (calea 1) și unul adiabatic (calea 2) (fig. 14.1). Energiile interne atinse de sistem pe cele doua căi pentru a ajunge din starea  $\langle 1 \rangle$  în starea  $\langle 2 \rangle$  sunt aceleași,  $U_{\langle 1 \rangle}$  respectiv  $U_{\langle 2 \rangle}$  [6,7]

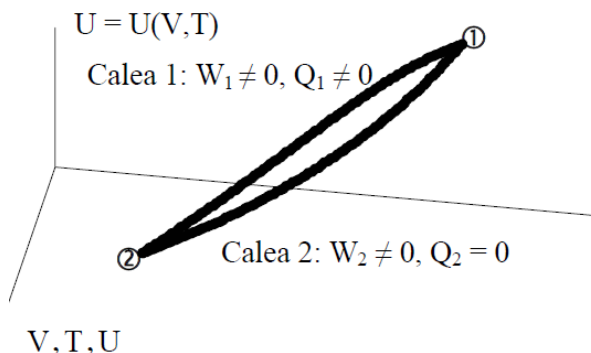


Fig. 14.1. Două transformări ale unui sistem.  
Calea  $\langle 1 \rangle$  este oarecare și calea  $\langle 2 \rangle$  este adiabatică

|         |                                                                                                                                                                                                                   |
|---------|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| (14.10) | $\Delta U = \int_{\langle 1 \rangle}^{\langle 2 \rangle} dU = U_2 - U_1, \text{ dU diferențială exactă,}$ $\Delta H = \int_{\langle 1 \rangle}^{\langle 2 \rangle} dH = H_2 - H_1 \text{ dH diferențială exactă}$ |
|---------|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|

În relația de mai sus  $H$  notează entalpia.

Prin *diferențială exactă* înțelegem o mărime infinitezimală care prin integrare conduce la un rezultat independent de drumul dintre starea inițială și finală.

Lucrul mecanic și căldura sunt funcții de proces, care depind de drumul parcurs. Exprimând matematic această afirmație, avem:

|         |                                                                                                                                                                                               |
|---------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| (14.11) | $Q = \int_{\gamma[\langle 1 \rangle, \langle 2 \rangle]} dQ, \text{ dQ diferențială inexactă}$ $W = \int_{\gamma[\langle 1 \rangle, \langle 2 \rangle]} dW, \text{ dW diferențială inexactă}$ |
|---------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|

Prin *diferențială inexactă* înțelegem o mărime infinitezimală care prin integrare conduce la un rezultat care depinde de drumul dintre starea inițială și finală.

**b) Variații de energie internă în funcție de diferențialele totale exacte**

$U = U(p, V, T)$ , dar există o ecuație de stare care leagă cele trei variabile, astfel încât pot fi alese oricare două variabile independente. Fie acestea  $V$  și  $T$ :  $U = U(V, T)$ .

Dacă volumul variază infinitesimal de la  $V$  la  $V + dV$  când  $T = \text{const.}$ , atunci  $U$  variază la  $U'$

|         |                                                            |
|---------|------------------------------------------------------------|
| (14.12) | $U' = U + \left(\frac{\partial U}{\partial V}\right)_T dV$ |
|---------|------------------------------------------------------------|

Dacă acum temperatura variază infinitesimal de la  $T$  la  $T + dT$  când  $V = \text{const.}$ , atunci  $U$  variază de la  $U'$  la  $U''$ , care este dat de expresia următoare [7]:

|         |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                   |
|---------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| (14.13) | $U + \left(\frac{\partial U}{\partial V}\right)_T dV + \left(\frac{\partial \left( U + \left(\frac{\partial U}{\partial V}\right)_T dV \right)}{\partial T}\right)_V dT = U + \left(\frac{\partial U}{\partial V}\right)_T dV +$ $\left(\frac{\partial U}{\partial T}\right)_V dT + \left(\frac{\partial \left( \left(\frac{\partial U}{\partial V}\right)_T \right)}{\partial T}\right)_V dV dT$ |
|---------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|

Pentru a exprima variația lui  $U$  când ambele variabile variază infinitesimal, se neglijează termenul  $dV \cdot dT$  care la o integrare simplă e nul, și se obține:

|         |                                                                                                          |
|---------|----------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| (14.14) | $dU = \left(\frac{\partial U}{\partial V}\right)_T dV + \left(\frac{\partial U}{\partial T}\right)_V dT$ |
|---------|----------------------------------------------------------------------------------------------------------|

Înlocuind în (14.14) cu  $C_V$  termenul de variație în raport cu volumul, obținem:

|         |                                                                                      |
|---------|--------------------------------------------------------------------------------------|
| (14.15) | $dU = \pi_T dV + C_V dT, \quad \pi_T = \left(\frac{\partial U}{\partial V}\right)_T$ |
|---------|--------------------------------------------------------------------------------------|

$\pi_T$  măsoară variația lui  $U$  cu volumul la temperatură constantă și are aceleași dimensiuni cu presiunea.

**Exemplu 14.2.** [7] Din ecuația Van der Waals pentru amoniac se poate evalua că pentru o probă de  $\text{NH}_3$ ,  $\pi_T = 840 \text{ Pa}$  la  $300 \text{ K}$  și se cunoaște

experimental că  $C_{v,m} = 27,32 \text{ J/mol}\cdot\text{K}$ . Care este variația de energie internă pentru 1 mol  $\text{NH}_3$ , când s-a încălzit cu 2K și s-a comprimat cu  $100 \text{ cm}^3$ .

*Rezolvare.* Variația infinitesimală de volum și temperatură conduce la variație infinitesimală de energie internă. Pentru variații mici, se poate aproxima  $\Delta U$  prin:

$$\Delta U \approx \pi_T \Delta V + C_V \Delta T$$

*Rezolvare:*  $\Delta U = -840 \text{ Jm}^{-3} \cdot (100 \cdot 10^{-6} \text{ m}^3) + (1 \text{ mol} \cdot 27,32 \text{ J/mol}\cdot\text{K}) \cdot 2\text{K} = -0,084\text{J} + 55 \text{ J} \approx 55 \text{ J}$ .

*Observație 14.1:* Variația energiei interne este dominată de efectul temperaturii. Dacă amoniacul s-ar comporta ca un gaz perfect,  $\pi_T$  ar fi 0 și variația de volum nu ar influența valoarea energiei interne.

### 14.1.3. Principiul al II lea al termodinamicii

Sensul transformărilor *spontane* este sensul care nu necesită efectuarea unui lucru mecanic pentru realizarea procesului. Se poate aduce un gaz la volum mai mic, se poate răci și se pot aduce unele reacții să decurgă în sens invers (electroliza apei) dar nici unul dintre aceste procese nu are loc spontan; fiecare se poate produce numai prin efectuarea unui lucru mecanic.

Distincția între cele două *tipuri de procese, spontane și nespontane* formează obiectul *principiului al doilea al termodinamicii*.

*Principiul al doilea* exprima faptul ca nu este posibil un proces al cărui unic rezultat este absorbția de căldură de la un rezervor și transformarea sa completă în lucru mecanic.

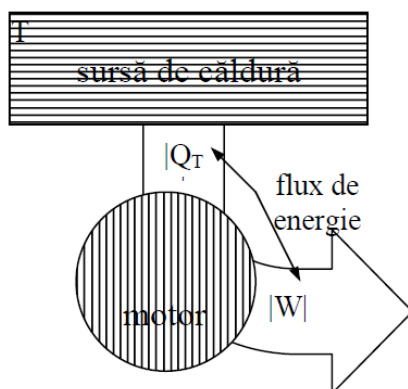


Fig. 14.2. Perpetuum mobile de speța a 2a

Principiul I a condus la introducerea energiei interne  $U$ . Energia internă ca funcție de stare ne permite să stabilim dacă un proces este posibil; într-un sistem izolat pot avea loc numai acele procese (reprezentate în

diagrama energetică  $U = U(T, V)$ , de exemplu) în care energia internă rămâne constantă (suprafața de energie internă  $U$  constantă).

Principiul al II-lea care permite aprecierea sensului proceselor spontane, poate fi formulat printr-o altă funcție de stare, *entropia*  $S$ .

Entropia arată dacă o stare a unui sistem este accesibilă din alta în mod spontan.

Principiul I a folosit energia internă  $U$  pentru a identifica procesele posibile ale unui sistem:

$$\Delta U = Q + W$$

Principiul al II-lea folosește entropia  $S$  pentru a identifica procesele spontane dintre procesele posibile ale unui sistem:

|         |                |
|---------|----------------|
| (14.16) | $\Delta S > 0$ |
|---------|----------------|

astfel încât, reformulat pe baza noțiunii de entropie, principiul II este: *într-un sistem izolat entropia crește în procesele spontane*  $\Delta S_{\text{tot}} > 0$ , unde  $\Delta S_{\text{tot}}$  este entropia totală a sistemului izolat care conține sistemul de analizat.

Definiția riguroasă a entropiei se poate face pe baza termodinamicii statistice, detalii se găsesc în [7].

Variația entropiei cu parametrii de care depinde este strâns legată de existența derivatelor parțiale, așa cum am văzut deja mai sus și în cazul variației energiei. Redăm mai jos relațiile pentru cazul  $S = S(T, p)$ , pentru celelalte două cazuri  $S = S(T, V)$  și  $S = S(p, V)$  relațiile putându-se găsi în [10, sect 3.3]

|         |                                                                                                                                                                             |
|---------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| (14.17) | $\left(\frac{\partial S}{\partial T}\right)_p = \frac{C_p}{T} > 0; dS = \left(\frac{\partial S}{\partial T}\right)_p dT + \left(\frac{\partial S}{\partial p}\right)_T dp$  |
| (14.18) | $\left(\frac{\partial S}{\partial p}\right)_T = -\left(\frac{\partial V}{\partial T}\right)_p < 0; dS = \frac{C_p}{T} dT - \left(\frac{\partial V}{\partial T}\right)_p dp$ |

**Exemplu 14.3.** [10, pb.3.3.27]. Să se găsească cu cât scade entropia apei lichide la temperatura de  $25^\circ\text{C}$ , dacă presiunea crește cu trei atmosfere.

*Rezolvare.* Variația entropiei cu presiunea este dată de formula (14.18). Datele necesare calculului se iau din tabelele corespunzătoare proceselor din termodinamica [10]. Avem atunci:

$$V_t = V_{20}[1 - 0.06427 \cdot 10^{-3}(t - 20) + 8.5053 \cdot 10^{-6}(t - 20)^2 - 6.79 \cdot 10^{-8}(t - 20)^3]$$

$$\rho(20^\circ\text{C}) = 0.998203 \text{ g/cm}^3$$

$$\frac{\partial V_T}{\partial t} = \frac{18}{0.998203} [-0.06427 \cdot 10^{-2} + 2 \cdot 8.5053 \cdot 10^{-6}(t - 20) - 3 \cdot 6.79 \cdot 10^{-8}(t - 20)^2]$$

Pentru  $t=25^\circ\text{C}$  se obține  $\frac{\partial V_t}{\partial t} = -2.8294 \cdot 10^{-4} \text{ ml}/(\text{mol} \cdot \text{K})$

Observând că  $\frac{\partial V_t}{\partial t} = \frac{\partial V}{\partial T}$ , deoarece  $\frac{\partial T}{\partial t} = 1$ , variația entropiei cu presiunea este:

$$\left(\frac{\partial S}{\partial p}\right)_{t=25} = -2.8294 \cdot \frac{10^{-7} \text{ l}}{(\text{mol} \cdot \text{K})} = -2.8294 \cdot 24.218 \cdot 10^{-7}$$

$$= -6.85 \cdot 10^{-6} \text{ cal}/(\text{atm} \cdot \text{mol} \cdot \text{K})$$

La creșterea presiunii cu 1 atm, entropia unui mol de apă lichidă scade cu  $-6.85 \cdot 10^{-6} \text{ cal}/(\text{atm} \cdot \text{mol} \cdot \text{K})$ . Atunci pentru creșterea presiunii cu 3 atm se va obține:

$$\Delta S_T = -3 \cdot 6.85 \cdot 10^{-6} = -1.95 \cdot 10^{-5} \text{ cal}/(\text{atm} \cdot \text{mol} \cdot \text{K})$$

La creșterea presiunii entropia scade, și aceasta se întâmplă datorită faptului că creșterea presiunii favorizează apariția fazelor condensate care au dezordine mai mică și deci entropie mai mică.

**Exemplu 14.4.**[10, pb.3.3.36] Prin încălzirea izobară ( $p=1\text{atm}$ ) a metanului de la 300 la 500K, entropia crește cu o anumită valoare. De câte ori trebuie să se mărească izoterm presiunea acestuia, pentru ca variația de entropie să fie nulă?

*Rezolvare.* Creșterea entropiei cu temperatura la presiune constantă este dată de relațiile [10]

|         |                                                                                                                |
|---------|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| (14.19) | $\left(\frac{\partial S}{\partial T}\right)_p = \frac{C_p}{T}; \Delta S_p = \int_{T_1}^{T_2} \frac{C_p}{T} dT$ |
|---------|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------|

Capacitatea calorică molară a metanului se ia din tabelul T.3.1 [10] și anume:

$$C_p^0 = 17.45 + 60.46 \cdot 10^{-3} \cdot T + 1.117 \cdot 10^{-6} \cdot T^2 - 7.20 \cdot 10^{-9} \cdot T^3 \text{ J/(mol} \cdot \text{K)}$$

Sau

$$C_p^0 = 4.17 + 17.45 \cdot 10^{-3} \cdot T + 0.267 \cdot 10^{-6} \cdot T^2 - 1.722 \cdot 10^{-9} \cdot T^3 \text{ cal/(mol} \cdot \text{K)}$$

Atunci creșterea entropiei cu temperatura are valoarea:

$$\Delta S^0 = \int_{300}^{500} \left( \frac{17.45}{T} + 60.46 \cdot 10^{-3} + 1.117 \cdot 10^{-6} \cdot T - 7.20 \cdot 10^{-9} \cdot T^2 \right) dT = 20.862 \frac{\text{J}}{(\text{mol} \cdot \text{K})} = 4.896 \text{ cal/(mol} \cdot \text{K)}$$

Mărind izoterm ( $T=500\text{K}$ ) presiunea gazului, entropia acestuia scade. Variația entropiei cu presiunea este dată de [10, F.3.7.1]

$$\begin{aligned} \left( \frac{\partial S}{\partial p} \right)_T &= - \left( \frac{\partial V}{\partial T} \right)_p; V = \frac{RT}{p}; \left( \frac{\partial S}{\partial p} \right)_T = - \frac{R}{p}; \Delta S_T \\ &= -R \int_{p_1}^{p_2} \frac{dp}{p} = -R \cdot \ln \frac{p_2}{p_1} \end{aligned}$$

Valoarea raportului  $\frac{p_2}{p_1}$  pentru care cele două efecte se compensează, rezultă din ecuația

$$-2.303 \cdot 8.314 \cdot \lg \frac{p_2}{p_1} + 20.862 = 0$$

Rezolvând se obține  $\frac{p_2}{p_1} = 12.3$

Următorul exemplu este tipic pentru un sistem cu două componente.

#### **Exemplu 14.5.** [10, pb.3.5.41]

Să se arate că pentru o soluție binară, volumele molare parțiale ale celor doi componenți depind de concentrația și densitatea soluției (conform F.3.261 și F.3.262 [10])

*Rezolvare.* Volumul unei soluții binare este dat de relația  $V = (n_1 M_1 + n_2 M_2) / \rho$ , unde  $M_1$  și  $M_2$  sunt masele moleculare ale celor doi componenți, iar  $n_1$  și  $n_2$  numerele corespunzătoare de moli.

Prin definiție avem că

$$V'_2 = \left( \frac{\partial V}{\partial n_2} \right)_{n_1} = \frac{M_2}{\rho} - (n_1 M_1 + n_2 M_2) \frac{1}{\rho^2} \left( \frac{\partial \rho}{\partial n_2} \right)_{n_1}$$

Considerăm  $x_1 = \frac{n_1}{n_1 + n_2}$  și  $x_2 = \frac{n_2}{n_1 + n_2}$ . Avem  $\left( \frac{\partial x_2}{\partial n_2} \right)_{n_1} = \frac{n_1}{(n_1 + n_2)^2}$

Exprimând derivata  $\left( \frac{\partial \rho}{\partial n_2} \right)_{n_1}$  prin  $\frac{\partial \rho}{\partial x_2}$  se obține

$$\left( \frac{\partial \rho}{\partial n_2} \right)_{n_1} = \frac{\partial \rho}{\partial x_2} \left( \frac{\partial x_2}{\partial n_2} \right)_{n_1} = \frac{n_1}{(n_1 + n_2)^2} \frac{\partial \rho}{\partial x_2}$$

Apoi avem că:

$$\begin{aligned} V'_2 &= \frac{M_2}{\rho} - (n_1 M_1 + n_2 M_2) \frac{1}{\rho^2} \frac{n_1}{(n_1 + n_2)^2} \frac{\partial \rho}{\partial x_2} \\ &= \frac{M_2}{\rho} - (x_1 M_1 + x_2 M_2) \frac{x_1}{\rho^2} \frac{\partial \rho}{\partial x_2} \end{aligned}$$

În mod analog, pentru primul component ultima relație se scrie:

$$V'_1 = \frac{M_1}{\rho} - (x_1 M_1 + x_2 M_2) \frac{x_2}{\rho^2} \frac{\partial \rho}{\partial x_1}$$

## 14.2. Cinetica chimică

Dacă în subsecțiunea precedentă atenția a fost asupra modelelor în care apar derivatele parțiale, în această subsecțiune prezentăm câteva exemple de probleme din cinetica chimică în a căror rezolvare intervin funcțiile elementare exp și log.

În secțiunile 10 și 11 au fost prezentate mai multe exemple referitoare la modul în care se rezolvă problemele din cinetica chimică, anume ecuații



diferențiale și sisteme de ecuații diferențiale. În exemplele care urmează vom vedea cum funcția exponențială și logaritmică sunt implicate natural în găsirea soluțiilor problemelor din această ramură.

**Exemplu 14.6.** Acidul camfocarbonic în etanol absolut suferă o decarboxilare și esterificare simultana. Schema completă a reacției este dată în fig. 14.3 de mai jos [10, pb 6.2.1]

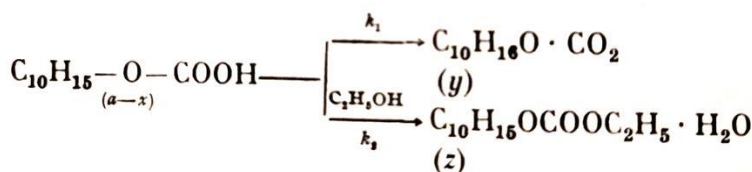


Fig. 14.3

Reacția a fost urmărită prin dozarea la diferite momente de timp a acidului rămas, iar esterul s-a determinat în urma saponificării. S-au determinat următoarele valori:

| t min | a-x<br>(unit relat) | y    | z    |
|-------|---------------------|------|------|
| 0     | 20                  | -    | -    |
| 10    | 16.26               | 1.83 | 1.91 |
| 20    | 13.25               | 3.24 | 3.51 |
| 30    | 10.68               | 4.58 | 4.76 |
| 40    | 8.74                | 5.62 | 5.64 |
| 60    | 5.88                | 7.20 | 6.92 |
| 80    | 3.99                | 7.93 | 8.08 |

Să se determine constantele  $k_1$  și  $k_2$ , ambele căi de reacție fiind de ordinul întâi.

*Rezolvare.* În etanol ca solvent, procesul de esterificare se desfășoară după o cinetică de ordinul întâi. Dacă se scrie viteza de dispariție a acidului camfocarbonic, ea va fi egală cu suma vitezelor de apariție a celor doi produși (conform tabel T.6.4.[10])

$$\frac{dx}{dt} = \frac{dy}{dt} + \frac{dz}{dt} = k_1(a-x) + k_2(a-x); \quad \frac{dx}{dt} = (k_1 + k_2)(a-x)$$

Aceasta este o expresie de viteză de ordinul întâi, constanta de viteză fiind suma celor două constante de viteză. După integrare se obține:

$$k_1 + k_2 = \frac{2.303}{t} \log \frac{a}{a-x}$$

Cu datele din problemă se poate determina suma celor două constante de viteză fie printr-o reprezentare grafică, fie prin calcul.

O reprezentare de ordinul întâi din care se determină suma constantelor  $k_1 + k_2 = 0.0202 \text{ min}^{-1}$  este prezentată în fig. 14.4 de mai jos [10].

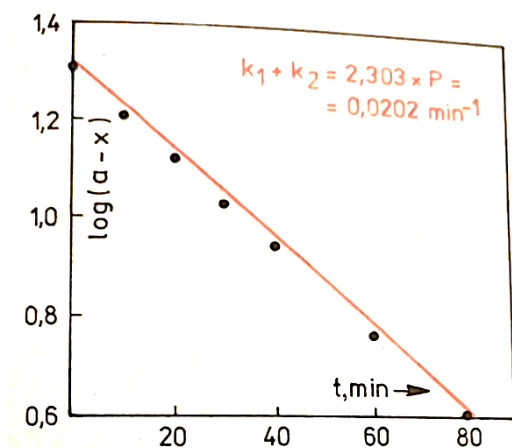


Fig. 14.4

Se observă ușor că punctele se înscriu foarte bine pe dreaptă.

Pentru calculul fiecărei constante în parte vom folosi raportul concentrațiilor  $y/z$ . Dacă se fac rapoartele diferitelor viteze:

$$\frac{r_y}{r_x} = \frac{k_1}{k_1 + k_2}; \frac{r_z}{r_x} = \frac{k_2}{k_1 + k_2}; \frac{r_y}{r_z} = \frac{k_1}{k_2} = \frac{dy}{dz} = \frac{y}{z}$$

Atunci vom obține raportul concentrațiilor de produși, egal cu raportul constantelor de viteză. Media raportului calculată cu datele problemei este  $\frac{y}{z} = 0.98$ . Asadar  $\frac{k_1}{k_2} = 0.98$ .

În continuare din suma constantelor de viteză obținută din datele cinetice și raportul lor, se va calcula fiecare constantă în parte. Obținem  $k_1 = 0.01 \text{ min}^{-1}$ ,  $k_2 = 0.0102 \text{ min}^{-1}$ .

**Exemplu 14.7.** [10, pb 6.2.13] Să se calculeze după cât timp de la începutul reacției, viteza de apariție a produsului C este maximă în procesele succesive  $A \xrightarrow{k_1} B \xrightarrow{k_2} C$  pornind de la compusul A pur și luând valorile următoare pentru constantele de reacție [10, sect 6.2]:

$$k_1 = 3.2 \cdot 10^{-3} s^{-1}, \quad k_2 = 7.5 \cdot 10^{-3} s^{-1}$$

*Rezolvare.* În cazul reacțiilor succesive de ordinul întâi, concentrația substanței intermediare va crește la început pe seama primului proces, va atinge un maxim și apoi va scădea. Corespunzător acestui maxim, și viteza de obținere a produsului final va fi maximă. Utilizând ecuația integrală pentru obținerea produsului final  $z=z(t)$  (conform formulelor din T.6.6 [10]) avem:

$$z = a \left[ 1 - \frac{k_2}{k_2 - k_1} e^{-k_1 t} + \frac{k_1}{k_2 - k_1} e^{-k_2 t} \right].$$

Se cere maximul lui  $z'$  adică punctul în care  $(z')' = 0$

După două derivări succesive și egalarea cu zero a celei de a doua derivate se va obține condiția de maxim a vitezei. Derivata a doua a funcției  $z=z(t)$  în raport cu timpul va conduce la:

$$z' = a \left( \frac{k_1 k_2}{k_2 - k_1} \right) [e^{-k_1 t} - e^{-k_2 t}]$$

$$z'' = a \left( \frac{k_1 k_2}{k_2 - k_1} \right) [-k_1 e^{-k_1 t} + k_2 e^{-k_2 t}] = 0$$

Condiția de maxim a vitezei se va scrie:

$$k_1 e^{-k_1 t} = k_2 e^{-k_2 t}$$

Prin logaritmare vom obține valoarea timpului ce corespunde atingerii maximului de viteză de apariție a produsului C:

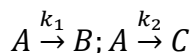
$$t(k_2 - k_1) = \ln k_2 - \ln k_1$$

$$t = \frac{\ln \frac{k_2}{k_1}}{k_2 - k_1}$$

Înlocuind valorile date în problemă se obține în final :  $t = \frac{2.303 \cdot 0.3699}{4.3} \cdot 10^3 = 198 \text{ s}$

**Exemplu 14.8.** [10 pb 6.3.18]

Un compus se descompune monomolecular formând doi produși:



Factorii de frecvență Arrhenius pentru cele două căi sunt respectiv  $10^{11}$  și  $10^{12} \text{ s}^{-1}$ . Energiile de activare ale celor două procese sunt  $E_1=14.8 \text{ kcal}$  și  $E_2=16.7 \text{ kcal}$ . Să se calculeze temperatura la care cei doi produși se formează în cantități egale și la care raportul este de 10:1.

*Rezolvare.* Se știe că raportul maselor de produși sau al concentrațiilor acestora este egal cu raportul constantelor de viteză pentru reacții de ordinul întâi [10 sect 6]:

$$\frac{[B]}{[C]} = \frac{k_1}{k_2} = \frac{A_1}{A_2} \exp \left[ \frac{E_2 - E_1}{RT} \right]$$

Pentru determinarea temperaturii la care se obține un anumit raport al produșilor de reacție vom logaritma această expresie:

$$\ln \frac{k_1}{k_2} = \ln \frac{[B]}{[C]} = \ln \frac{A_1}{A_2} + \frac{E_2 - E_1}{RT}$$

de unde vom explicita temperatura și obținem:

$$T = \frac{E_2 - E_1}{R \left[ \ln \frac{[B]}{[C]} + \ln \frac{A_2}{A_1} \right]}$$

Pentru raportul de 1:1 vom obține:

$$T_1 = \frac{(16.7 - 14.8) \cdot 10^3}{1.987(0 + 2.303)} = \frac{1.9 \cdot 10^3}{1.987 \cdot 2.303} = 415.2 \text{ K}$$

Și corespunzător  $t_1=142^\circ\text{C}$

Pentru raportul de 10:1 vom obține:

$$T_2 = \frac{(16.7 - 14.8) \cdot 10^3}{1.987 \cdot 2.303(\log 10 + \log 10)} = \frac{1.9 \cdot 10^3}{1.987 \cdot 4.606} = 207.6K$$

Și corespunzător  $t_2 = -65.6^\circ\text{C}$

## REFERINȚE BIBLIOGRAFICE

- [1] I. Achiri, V. Ciobanu ș.a., Matematica, manual pentru clasa a XII-a, Editura Prut International, Chișinău, 2017.
- [2] O. Aramă, Aplicații ale matematicii în farmacie și medicină (vol1), Ed. Dacia, Cluj Napoca, 1987.
- [3] M. Ganga, Matematica, manual pentru clasa a XI-a, Editura Mathpress, Ploiesti, 2006.
- [4] A. Gluck, Metode matematice în industria chimică, Ed. Tehnică, București 1971.
- [5] A. Ionescu, Prelucrarea informațională a datelor de măsurare, Ed Reprograph, Craiova, 2007.
- [6] L. Jantschi, Chimie fizică – teorie, aplicații și probleme. Editura Academic Direct, E ISBN 978-606-93534-0-0, Cluj Napoca, 2013.
- [7] L. Jantschi, Chimie fizică generală (curs), Cluj Napoca, 2012.
- [8] P. Năslău, R. Negrea & colectiv, Matematici asistate de calculator, Ed. Politehnică, Timișoara, 2005.
- [9] C. D. Nenițescu, Chimie generală, Ed. Didactică și Pedagogică, București 1972.
- [10] G. Niac, V. Voiculescu, I. Bâldea, M. Preda, Formule, tabele, probleme de chimie fizică. Editura Dacia, Cluj Napoca. 1984.
- [11] J. H. Milsum, Biological Control Systems Analysis, McGraw –Hill Book Company, New York London, 1966.
- [12] M. Predoi, D. Constantinescu, M. Racilă, Teme de Analiză Matematică. Teorie și Aplicații, Editura Universitaria, Craiova, 2008, ISBN 978-606-510-233-0

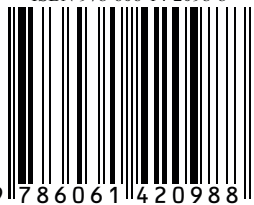
- [13] W.F. Sager, J. C. Hoffsommer, J. Phys. Chem, 73, 4155 – Kinetics and mechanism for the reaction between alkyl hydroperoxides and tetranitromethane, Editura: ACS (American Chemical Society) Publications, 1969.
- [14] Gh. Sirețchi, Calcul diferențial și integral, vol 1-2, Ed Științifică și Enciclopedică, București, 1985.
- [15] M. Țarcă, Tratat de Statistică Aplicată, Ed. Didactică și pedagogică, București, 1998.
- [16] N. Vasilescu, Statistica generală (ed a 3-a ). Metodologie, lucrări practice și programe aplicative, Ed. Reprograph, Craiova, 1998.
- [17] C.D. Nenițescu, V. Ioan, Manualul inginerului chimist, vol. 2, Ed. Tehnică, București, 1952.





Pentru comenzi și informații, contactați:  
Editura Universitaria  
Departamentul vânzări  
Str. A.I. Cuza, nr. 13, cod poștal 200585  
Tel. 0251598054, 0746088836  
Email: [editurauniversitaria@yahoo.com](mailto:editurauniversitaria@yahoo.com)  
[marian.manolea@gmail.com](mailto:marian.manolea@gmail.com)  
Magazin virtual:  
[www.editurauniversitaria.ro](http://www.editurauniversitaria.ro)

ISBN 978-606-14-2098-8



9 786061 420988