

**ET108/UEFISCSU: Procese la interfața fazelor:
Modelare matematică, Optimizare numerică,
Implementare web, cu aplicații în separarea și
caracterizarea seriilor de compuși chimici biologic activi
(MEC/5892/18.09.2006)**

RAPORT DE CERCETARE ÎN EXTENSO

Lorentz JĂNTSCHI, Sorana D. BOLBOACĂ

Cadru:

Programul:	Cercetare de Excelență (CeEx)
Modul:	II. Proiecte de Dezvoltare a Resurselor Umane pentru Cercetare (M2-RU)
Tipul:	Proiecte de cercetare de excelență pentru tinerii cercetători (ET)
Cod proiect:	ET108/2006
Denumirea proiectului:	Procese la interfața fazelor: Modelare matematică, Optimizare numerică, Implementare web, cu aplicații în separarea și caracterizarea seriilor de compuși chimici biologic activi

Amplasament:

Ministerul Educației, Cercetării și Tineretului
Universitatea Tehnică din Cluj-Napoca
Facultatea de Știința și Ingineria Materialelor
Catedra de Chimie
C501, B-dul Muncii 103-105, 400641 Cluj-Napoca, Romania, EU

Cuprins

Cadrul general al proiectului.....	3
Prevederi contractuale specifice.....	4
Cadrul specific al proiectului	5
Problematika cercetării.....	8
Activități și rezultate Etapa 1/Obiectivul 1/Activitatea 1.....	11
Activități și rezultate Etapa 1/Obiectivul 1/Activitatea 2/1	15
Activități și rezultate Etapa 1/Obiectivul 2/Activitatea 2/2	24
Activități și rezultate Etapa 1/Obiectivul 2/Activitatea 3.....	28
Activități și rezultate Etapa 1/Obiectivul 2/Activitatea 4.....	30
Activități și rezultate Etapa 2/Obiectivul 1/Activitatea 1.....	38
Activități și rezultate Etapa 2/Obiectivul 1/Activitatea 2.....	43
Activități și rezultate Etapa 2/Obiectivul 2/Activitatea 3.....	51
Activități și rezultate Etapa 2/Obiectivul 2/Activitatea 4.....	65
Activități și rezultate Etapa 2/Obiectivul 3/Activitatea 5.....	66
Activități și rezultate Etapa 2/Obiectivul 3/Activitatea 6.....	73
Activități și rezultate Etapa 2/Obiectivul 4/Activitatea 7.....	74
Activități și rezultate Etapa 2/Obiectivul 4/Activitatea 8.....	77
Activități și rezultate Etapa 2/Obiectivul 5/Activitatea 9.....	99
Activități și rezultate Etapa 2/Obiectivul 5/Activitatea 10.....	121
Activități și rezultate Etapa 2/Obiectivul 6/Activitatea 11.....	123
Activități și rezultate Etapa 2/Obiectivul 6/Activitatea 12.....	125
Activități și rezultate Etapa 3/Obiectivul 1/Activitatile 1&2	127
Activități și rezultate Etapa 3/Obiectivul 2/Activitatea 3.....	142
Activități și rezultate Etapa 3/Obiectivul 2/Activitatea 4.....	151
Activități și rezultate Etapa 3/Obiectivul 3/Activitatea 5.....	153
Activități și rezultate Etapa 3/Obiectivul 3/Activitatea 6.....	156
Activități și rezultate Etapa 3/Obiectivul 4/Activitatea 7.....	226
Activități și rezultate Etapa 3/Obiectivul 4/Activitatea 8.....	242
Concluzii	245

Cadrul general al proiectului

Proiectul intitulat *Procese la interfața fazelor: Modelare matematică, Optimizare numerică, Implementare web, cu aplicații în separarea și caracterizarea seriilor de compuși chimici biologic activi* a fost finanțat din fonduri publice în cadrul programului *Cercetare de Excelență* (acronim: CeEx) aprobat prin H.G. 368/28.04.2005 la inițiativa Ministerului Educației și Cercetării în cadrul modulului II (acronim: M2): *Proiecte de dezvoltare a resurselor umane pentru cercetare*, fiind proiect de tipul II: *Proiecte de cercetare pentru tinerii cercetători*, subtipul I: *Proiecte de cercetare de excelență pentru tinerii cercetători* (acronim: ET).

Scopul general al proiectelor ET a fost *încurajarea excelenței și originalității în creația științifică a tinerilor cercetători, doctori în științe și doctoranzi din România*. Obiectivele generale ale proiectelor ET au fost: *creșterea atractivității continuării în țară a activității de cercetare de excelență; susținerea unor echipe de cercetare cu potențial de excelență științifică la nivel internațional; creșterea producției științifice de valoare internațională*. Activitățile specifice proiectelor ET au fost: *cercetări fundamentale și aplicative cu grad ridicat de originalitate; mobilități în sprijinul participării cercetătorilor la manifestări științifice internaționale de mare vizibilitate; dobândirea de competențe complementare necesare membrilor din echipa de cercetare într-un laborator de cercetare recunoscut din institute de cercetare sau agenți economici; dezvoltarea infrastructurii de cercetare*. Criteriile de eligibilitate pentru proiectele ET au fost pentru *directorul de proiect (doctor în științe; angajat în universități sau institute de cercetare; vârsta maximă de 35 de ani)* și pentru *echipa de cercetare (doctor în științe sau doctorand; vârsta maximă de 35 de ani)*. Durata proiectelor ET a fost de *24 luni*. Nivelul de finanțare a fost de *maxim 40000 euro, echivalentul în lei*.

Prevederi contractuale specifice

Proiectele ET s-au finanțat prin intermediul unui *Contract de Finanțare* încheiat între persoane juridice *Autoritatea Contractantă* (UEFISCSU) și *Contractor* (universitatea sau institutul de cercetare în care a fost încadrat directorul de proiect, în cazul de față *Universitatea Tehnică din Cluj-Napoca* - acronim: UTCN). Lucrările efectuate în cadrul proiectului pe parcursul desfășurării acestuia au fost reglementate prin întocmirea de documente specifice, pe etape (*Raport intermediar de efectuare lucrări, Proces verbal de avizare internă a rezultatelor, State de plată, și Deviz cadru postcalcul*) și anual (*Sinteza lucrării, Proces verbal de avizare internă a rezultatelor, State de plată, Deviz cadru postcalcul și Lucrare în extenso*).

O prevedere contractuală specifică a constituit-o *încărcarea în formatul web al proiectului de cercetare, pus la dispoziție de UEFISCSU, documentele de contractare, monitorizare și raportare*.

Cadrul specific al proiectului

Scopul proiectului a fost caracterizarea proceselor la interfata fazelor și elaborarea modelelor care să servească în utilizarea și caracterizarea pe 2 serii de compusi biologic activi și pentru un metabolit cu activitate biologică (ionul de cupru): *triazine, serie de compusi cu activitate erbicida; steroizi, serie de compusi cu activitate anabolizantă; cinetica reacției dintre ionul de cupru și tiosulfat, metabolit cu activitate toxică letală.*

Obiectivele cercetării au fost: *Managementul resurselor: umane, materiale, cunoaștere; Colectarea datelor experimentale: cromatografie pe strat subțire, electroforeză, spectrofotometrie; Dezvoltarea modelelor matematice și parametrizarea variabilelor: proprietăți de suprafață ale lichidelor, repartiție și distribuție între faze; Implementarea modelelor matematice în module de calcul numeric; Obținerea parametrilor de model și de experiment prin optimizare numerică; Dezvoltarea aplicațiilor web client-server; Promovarea rezultatelor prin demers didactic de educație în cercetare.*

Activitățile desfășurate pentru atingerea obiectivelor au fost:

Achiziția datelor spectrofotometrice (intensitate luminoasă) în cinetica reacției ionilor de cupru și tiosulfat; Activități suport: implicarea studenților în cercetare prin utilizare și evaluare a aplicațiilor web client-server realizate; Colectarea cunoașterii din experimentul didactic; Calcularea parametrilor de model prin optimizare, și a parametrilor de experiment prin formule de calcul; Construirea funcțiilor obiectiv și a formulelor de iterație; Documentare folosind resursele Oxford University Press; Elaborare specificații pentru mediile de experimentare cantitativă și pentru echipamentele de achiziționat; Implementare interfață: preluare date experimentale, afisare rezultate, nucleu grafic; Implementare librării, documentare librării; Implementarea rutinelor și programelor de calcul; Înglobarea în modelul matematic al ecuațiilor de caracterizare a proprietăților de suprafață ale lichidelor; Înglobarea în modelul matematic al ecuațiilor de caracterizare a repartiției și distribuției între faze; Participari la manifestări științifice și dobândirea de competențe complementare; Promovarea cunoașterii prin publicații științifice; Separarea prin cromatografie pe strat subțire a steroizilor; Separarea prin electroforeză a triazinelor; Testarea funcțiilor obiectiv, corelarea cu experimentele, alegerea funcțiilor obiectiv optime; Transferul cunoașterii din experimentul didactic în aplicații - optimizarea accesului la resurse și crearea de tutoriale interactive.

Participanții activi la derularea activităților proiectului au fost: Lorentz JĂNTSCHI (n. 1973, dr. în Chimie Organică din 2000), în calitate de investigator principal; Sorana D. BOLBOACĂ (n. 1973, drd. în Informatică Medicală din 2001, dr. în Informatică Medicală din 2006), în calitate de co-investigator; Mihaela L. UNGUREȘAN (n. 1972, drd. în Chimie Fizică din 2000, dr. în Chimie

Fizică din 2007), în calitate de co-investigator; Camelia C. AVRAM (n. 1977, drd. în Sisteme Automate din 2001); Carmen E. STOENOIU (n. 1972, drd. în Managementul și Ingineria Sistemelor din 2006).

Activitățile efectuate s-au încadrat în obiectivele generale ale proiectelor ET astfel:

- cercetări fundamentale și aplicative cu grad ridicat de originalitate: Proiectarea și realizarea de modele, Proiectarea, implementarea și testarea de module, Integrare module și testare aplicații, Efectuarea de experimente cantitative;
- participarea la manifestări științifice internaționale de mare vizibilitate (acronim: MSIMV) și dobândirea de competențe complementare (acronim: DCC):
 1. *SizeMat: Workshop on Size-Dependent Effects in Materials for Environmental Protection and Energy Application, Specific Support Action, FP6: EC-INCO-CT-2005-016414*, Institute for General and Inorganic Chemistry, Bulgarian Academy of Sciences, 25-27.Mai.2006, Varna, Bulgaria - DCC;
 2. *Third Humboldt Conference on Computational Chemistry*, University of Sofia, Humboldt, 24-28.Iun.2006, Varna, Bulgaria - MSIMV;
 3. *XXIII International Biometric Conference*, International Biometric Society, McGill University Montreal, 16-21.Iul.2006, Montreal, Canada - DCC;
 4. *1-st European Chemistry Congress*, European Association for Chemical and Molecular Sciences, 27-31.Aug.2006, Budapest, Hungary - MSIMV;
 5. *ISCB27: 27-th Annual Conference of the International Society for Clinical Biostatistics*, International Society for Clinical Biostatistics, 27-31.Aug.2006, Geneva, Switzerland - DCC;
 6. *10-th World Multi-Conference on Systemics, Cybernetics and Informatics*, International Institute of Informatics and Systemics, 16-19.Iul.2006, Orlando, FL USA - MSIMV;
 7. *6-th European Conference on Computational Chemistry*, Working Party for Computational Chemistry, Comenius University Bratislava, Slovak Chemical Society, European Association for Chemical and Molecular Sciences, 3-7.Sept.2006, Bratislava, Slovakia - DCC;
 8. *MetEcoMat: Workshop on Ecomaterials and Processes: Characterization and Metrology, Specific Support Action, FP6: EC-INCO-CT-2005-016414*, Institute of General and Inorganic Chemistry, Bulgarian Academy of Sciences, 19-21.Apr.2007, Plovdiv, Bulgaria - MSIMV;
 9. *ECCC11: The 11th Electronic Computational Chemistry Conference*, Monmouth University New Jersey USA, 2-30.Apr.2007, online www, Internet - DCC;
 10. *Math/Chem/Comp 2007 - The 22nd International Course & Conference on the Interfaces among Mathematics, Chemistry & Computer Sciences*, Inter-University Center Dubrovnik, Rudjer Boskovic Institute Zagreb, University of Zagreb, University of Split, International

Procese la interfata fazelor: Modelare matematică, Optimizare numerică, Implementare web, cu aplicatii în separarea și caracterizarea seriilor de compusi chimici biologici activi

- Society for Mathematical Chemistry, International Society for Theoretical Chemical Physics, 11-16.Iun.2007, Dubrovnik, Croatia - MSIMV;
11. *Fourth International Conference of Applied Mathematics and Computing*, University of Chemical Technology and Metallurgy Sofia, Technical University of Plovdiv, 12-18.Aug.2007, Plovdiv, Bulgaria - DCC;
 12. *9th Annual Conference of the Yugoslav Materials Research Society*, Serbian Academy of Sciences and Arts, 10-14.Sept.2007, Herceg Novi, Montenegro - MSIMV;
 13. *BBCAC-4 4th Black Sea Basin Conference on Analytical Chemistry*, "St. Kliment Ohridski" University of Sofia, 19-23.Sept.2007, Sunny Beach, Bulgaria - MSIMV;
 14. *ChemMod 2007 - Chemical Graph Theory and Molecular Modeling Workshop*, European Society of Mathematical Chemistry (inaugural event), 23-26.Oct.2007, Cluj-Napoca, Romania - MSIMV;
 15. *Recent Advances in Synthesis & Chemical Biology VI*, Centre for Synthesis & Chemical Biology, University of Dublin, Symposium, 14.Dec.2007, Dublin, Ireland - DCC;
 16. *Workshop on Energy Conservation and Sustainable Energy*, Technical Assistance and Information Exchange Instrument of the Institution Building unit of Directorate-General Enlargement of the European Commission, TAIEX event RTP 25832, 13-14.Feb.2008, Cluj-Napoca, Romania - DCC;
 17. *HSI'08: Conference on Human System Interaction*, University of Information Technology and Management in Rzeszow, 25-27.Mai.2008, Krakow, Poland - MSIMV;
 18. *Strasbourg Summer School on Chemoinformatics 2008*, Louis Pasteur University of Strasbourg, 22-25.Jun.2008, Strasbourg, France - DCC;
 19. *Summer School on Neural Networks in Classification, Regression and Data Mining*, Instituto Superior de Engenharia do Porto, 07-11.Jul.2008, Porto, Portugal - DCC.

Problematica cercetării

Fenomenele de interfață care apar în utilizarea și caracterizarea seriilor de compuși biologici activi referă fenomene de transport [*Application of a transport-reaction model to the estimation of biogas fluxes in the Scheldt Estuary*, Vanderborght J. P., Wollast R., Loijens M., Regnier P., *Biogeochemistry*, 59, 1-2, 207-237, **2002**] și [*Simulations of unsaturated flow in multiply zoned media by green element models*, Taigbenu A., *Transport in Porous Media*, 45, 3, 387-406, **2001**], dinamica tensiunii de interfață [*Dynamic interfacial tension near critical point of a solvent-antisolvent mixture and laminar jet stabilization*, Dukhin S. S., Zhu C., Dave R., Pfeffer R., Luo J. J., Chavez F., Shen Y., *Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects*, 229, 1-3, 181-199, **2003**], difuzia [*Analysis and Interpretation of Gas Diffusion in Quiescent Reservoir, Drilling, and Completion Fluids: Equilibrium vs. Non-equilibrium Models*, Civan F., Rasmussen M. L., *Proceedings - SPE Annual Technical Conference and Exhibition*, 407-425, **2003**], distribuția [*Influence of nanoporous carbon electrode thickness on the electrochemical characteristics of a nanoporous carbon/tetraethylammonium tetrafluoroborate in acetonitrile solution interface*, Enn Lust, Alar Janes, Tanel Parn, Priit Nigu, *J Solid State Electrochem*, 8, 224–237, **2004**], repartiția [*Ionic interfaces and diphtheria toxoid interactions*, Raffaella A. Campana, Jocimara A. M. Namur, Celia S. Takata, P. Soares de Araujo and M. Helena Bueno da Costa, *Protein Expression and Purification*, 33, 2, 161-165, **2004**] și altele [*Analysis of the interface between a pulsed laser deposited calcium phosphate coating and a titanium alloy substrate*, Fernandez-Pradas J. M., Garcia-Cuenca M. V., Morenza J. L., *Appl. Phys. A*, 80, 325–331, **2005**]. Conjecția acestor fenomene într-o măsură mai mare sau mai mică diferă de la un proces studiat la altul, fapt remarcat și în [*Molecular simulation for nanotechnologies: Application to industry*, Hiwatari Y., Kaneko Y., Ishida H., *Molecular Simulation*, 30, 13-15, 819-826, **2004**].

Procesele care implică fenomene de interfață includ: utilizarea membranelor [*The impact of mass transfer and interfacial expansion rate on droplet size in membrane emulsification processes*, Marilyn Rayner, Gun Tragardh and Christian Tragardh, *Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects*, 266, 1-3, 1-17, **2005**] și electrozilor [*Kinetics of anion transfer across the liquid / liquid interface of a thin organic film modified electrode, studied by means of square-wave voltammetry*, Quentel, F., Mirceski, V., L-Her, M., *Analytical Chemistry*, 77, 7, 1940-1949, **2005**] și [*Cyclic steady-state axial temperature profiles in multilayer, bulk gas PSA - The case of oxygen VSA*, Wilson S. J., Webley P. A., *Industrial and Engineering Chemistry Research*, 41, 11, 2753-2765, **2002**], și toate metodele cromatografice (discutate în detaliu mai jos). Utilizarea [*The evaporated metal masks for chemical glass etching for BioMEMS*, Mourzina Y., Steffen A., Offenhausser A., *Microsystem Technologies*, 11, 135–140, **2005**], studiul [*Bioelectrochemistry at*

Procese la interfața fazelor: Modelare matematică, Optimizare numerică, Implementare web, cu aplicații în separarea și caracterizarea seriilor de compuși chimici biologic activi

metal water interfaces, Rolando Guidelli, Giovanni Aloisi, Lucia Becucci, Andrea Dolfi, Maria Rosa Moncelli and Francesco Tadini Buoninsegni, *Journal of Electroanalytical Chemistry*, 504, 1, 1-28, **2001**], caracterizarea [Chromatographic characterization of macroporous monolithic silica prepared via sol-gel process, Norio Ishizuka, Hiroyoshi Minakuchi, Kazuki Nakanishi, Kazuyuki Hirao and Nobuo Tanaka, *Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects*, 187-188, 273-279, **2001**] și în final modelarea [A Eulerian level set/vortex sheet method for two-phase interface dynamics, Herrmann M., *Journal of Computational Physics*, 203, 2, 539-571, **2005**] și [RPI: A remote process interface library for distributed clusters, John D. Sirola and Steinar Hauan, *Computers & Chemical Engineering*, 29, 8, 1815-1821, **2005**] proceselor de interfață este cu precădere îndreptată către obținerea de materiale și compuși cu proprietăți și activități mai bune și mai ecologice și în final către caracterizarea și utilizarea acestora în procesele tehnologice [Characterization of monoclonal antibodies raised against different structures belonging to the s-triazine group of herbicides, Leif Bruun, Claus Koch, Mogens Havsteen Jakobsen, Brian Pedersen, Michael Christiansen and Jens Aaman, *Analytica Chimica Acta*, 436, 1, 87-101, **2001**].

Necesitatea elaborării modelelor proceselor de interfață este evidențiată de lucrările [Multi-criteria decision analysis in spatial decision support: The ASSESS analytic hierarchy process and the role of quantitative methods and spatially explicit analysis, Hill, M.J., Braaten, R., Veitch, S.M., Lees, B.G., Sharma, S, *Environmental Modelling and Software*, 20, 7, 955-976, **2005**] și [Model for predicting the performance of membrane bioadsorber reactor process in water treatment applications, Tsai H.-H., Ravindran V., Pirbazari M., *Chemical Engineering Science*, 60, 20, 5620-5636, **2005**], iar metodologia este foarte bine adusă în discuție în lucrarea [Scenario inspections, Julio Cesar Sampaio do Prado Leite, Jorge Horacio Doorn, Graciela D. S. Hadad, Gladys N. Kaplan, *Requirements Eng*, 10, 1-21, **2005**].

Așa cum s-a subliniat mai sus, cromatografia este metoda analitică care izează din plin de procesele de interfață. Modele și proceduri de analiză a seriilor de compuși biologic activi sunt raportate în [Development of a tandem thin-layer chromatography–high-performance liquid chromatography method for the identification and determination of corticosteroids in cosmetic products, Luigi Gagliardi, Daniela De Orsi, Maria Rosaria Del Giudice, Franco Gatta, Rita Porra, Paola Chimenti and Domenica Tonelli, *Analytica Chimica Acta*, 457, 2, 187-198, **2002**], [Application of on-line solid-phase extraction–gas chromatography–mass spectrometry to the determination of endocrine disruptors in water samples, Brossa L., Marce R. M., Borrull F., Pocurull E., *Journal of Chromatography A*, 963, 1-2, 287-294, **2002**] și [Chromatographic and electrophoretic procedures for analyzing plant pigments of pharmacologically interests, Xiuhua Sun, Xiurong Yang and Erkang Wang, *Analytica Chimica Acta*, 547, 2, 153-157, **2005**] și așa cum rezultă și din aceste lucrări, sunt modele și proceduri specifice pentru clase de compuși biologic

activi specifice. Mai mult, aplicațiile pe care le au elaborarea modelelor proceselor de interfață includ și îmbunătățirea tehnologiilor de separare [Reduction of silanophilic interactions in liquid chromatography with the use of ionic liquids, Michal Piotr Marszall, Tomasz Baczek and Roman Kaliszan, *Analytica Chimica Acta*, 547, 2, 172-178, **2005**].

În realizarea produselor soft online care să includă modelele elaborate, se poate referi foarte bine ca element de reper rezultatele cercetărilor facute în [Bassam Alhamad, Jose A. Romagnoli, Vincent G. Gomes, On-line multi-variable predictive control of molar mass and particle size distributions in free-radical emulsion copolymerization, în: Bassam Alhamad, Jose A. Romagnoli and Vincent G. Gomes, *Chemical Engineering Science*, 60, 23, 6596-6606, **2005**].

Documentația pentru modelarea proceselor la interfața fazelor a fost actualizată. Următoarele lucrări au fost selectate din literatura de specialitate:

÷ Mathematical modelling driven by two industrial applications: A moving-boundary approach; Narimanyan, A., Muntean, A., 2006, Mathematical Modelling and Analysis, 11(3), 295-314

Rezumat

Un derivat din bacterii biodegradabile și non-toxice biopolymer poli (acid glutamic- γ) (γ -PGA) a fost evaluată ca un adsorbent de bază pentru îndepărtarea coloranților de la soluție apoasă. Sorption experimentele au fost realizate cu trei bază coloranților Auramine O (Au-o), Rhodamine B (RH-B) și Safranin O (SA-O) de către un lot Mod de la diferite concentrații inițiale de vopsitorie, agitație ori, γ -PGA doze, temperatura, pH-ului și a adăugat săruri. Sorption isotherms au fost bine descris de ecuația Redlich-Peterson, urmat îndeaproape de către Sips, în comparație cu Freundlich și Langmuir modele. Sorption capacitatea maximă a derivat din modelul Langmuir la 301 K a fost 277,29, 390,25 și 502,83 mg/g pentru Au-O, B și RH-O SA-coloranților, respectiv. The sorption cinetica a coloranților pe γ -PGA a urmat o secundă, pentru pseudo ecuație și rata de schimb a fost controlată de către chimice sorption. Un schimb de ioni model presupunând adsorption chimice pentru a fi un fenomen de asemenea, anticipat cinetica de date cu precizie. Termodinamica parametrilor (ΔH° , ΔS° și ΔG°), obținute a relevat vopsitorie sorption să fie un proces spontan și exotermică cu randomness scadere a coloranților la solide / soluție de interfață. Dye sorption crescut cu soluție de creștere a pH-ului și a ajuns la un platou la pH 5, în timp ce desorption de aproximativ 98% din coloranților de la petrecut γ -PGA a avut loc la pH 1. De încorporare a scăzut de săruri de vopsitorie sorption, sugerând obligatorie a coloranților pe γ -PGA pot implica mecanism de schimb de ioni.

÷ Modelling of entrainment in industrial flotation cells: Water recovery and degree of entrainment; Zheng, X., Johnson, N.W., Franzidis, J.-P. 2006 Minerals Engineering 19 (11), pp. 1191-1203

Rezumat

Entrainment în flotation poate fi considerat ca un proces pas-doi, inclusiv transferul de solide în suspensie în partea de sus a pulpei în regiunea de mai jos doar de pulpă de-froth interfață la faza froth și de transfer de particule de entrained în faza de a froth de concentrat. Ambele etape au un puternic caracteristic de clasificare. Gradul de entrainment descrie clasificarea efect de drenaj proces în faza froth. Acest document scurt, două comentarii existente modele de gradul de entrainment. Date experimentale au fost culese de la un Outokumpu 3 m³ rezervor de celule în Xstrata Mt. Isa Minele de cupru concentrator. Datele sunt montate pe modelele și efectul de celule

condiții de funcționare, inclusiv rata de aer și froth înălțime de gradul de entrainment este examinat pe de-o dimensiune-dimensiunea baza. În care se constată că există o puternică corelație între entrainment de apă și de recuperare, care este aproape de liniar pentru amenzi. Gradul de entrainment scade cu creșterea în mărimea particulelor. În cadrul gamei de celule normale de condițiile de funcționare, câteva particule coarser mult de 50 μm sunt recuperate de către entrainment. În general, gradul de entrainment crește cu creșterea în aer și scade cu rata de creștere în înălțime froth. Aer rata froth înălțime puternic și interacționează cu ele și afectează în principal prin intermediul procesului de entrainment modificări din froth retenție de timp, froth structura și proprietățile froth. Ca rezultat, alte mecanisme, cum ar fi entrapment pot deveni importante în recuperarea particulelor brute reținute.

- ÷ Modelling of dilational visco-elasticity of adsorbed layers with multiple kinetic processes; Ravera, F., Ferrari, M., Liggieri, L. 2006 Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects 282-283, pp. 210-216

Rezumat

În această lucrare, o generalizare unei metode de a calcula dilational visco-elasticitate a surfactantilor adsorbed straturi este prezentată. Această abordare teoretică permite ca procesele de relaxare la suprafață să fie luate în considerare, și efectul lor cinetic aspect vascos privind comportamentul de adsorbed strat este studiat. Propus metoda este destul de general, deoarece se impune doar condiția de mică abatere de la echilibrul sistemului, fiind bazat pe sistemul liniar formalism. Exemple de aplicare a acestei metode sunt prezentate surfactantilor privind schimbarea lor molar zonă și insolubile monolayer cu o reacție chimică. Expressions of visco-dilational de elasticitate față de frecvență, găsit cu metoda actuală, sunt în acord cu rezultatele obținute în lucrări teoretice anterioare și de către alte autorilor.

- ÷ Implicit penalty methods on Eulerian grids for the simulation of incompressible multiphase flows; Vincent, S., Caltagirone, J.-P., Delage, S., Lacanette, D., Lubin, P., Randrianarivelo, T.N. 2006 Houille Blanche (2), pp. 53-59

Rezumat

Modelarea numerică propusă a dezvoltat strategia codului de Aquilon pe rețele fixe Euleriene, prezentate atent prin tratarea a ecuațiilor de conservare implicită, diferite metodele folosite pentru a rezolva diferite constrângeri fiind penalizate prin algoritmi pentru interfața de urmărire (VOF, Frontul de urmărire) și automată și de adaptare a metodelor de rafinare de ochiuri (AMR). Detaliată validări vor fi propuse pentru a evidenția scopul de convergență și de coerența dintre metode numerice și de două și trei dimensiuni fizice validări va fi condus de a compara rezultatele experimentale sau teoretice. În sfârșit, câteva exemple reale din două faze fluxul de simulari va fi dat, cum ar fi moșiunile de pat fluidizat, spargere a valurilor de pe plaje, filmul wiping

Procese la interfața fazelor: Modelare matematică, Optimizare numerică, Implementare web, cu aplicații în separarea și caracterizarea seriilor de compuși chimici biologic activi

sub jet de acțiune turbulentă sau completarea proceselor de mușcăi. Rezultatele vor fi discutate cu privire la experimentale sau trimiteri industriale și a criticat, de exemplu în funcție de modelare și de turbulențe sale de cuplare cu suprafață liberă.

÷ Kinetic modelling of the facilitated transport of cadmium (II) using Cyanex 923 as ionophore; Alonso, M., López-Delgado, A., Sastre, A.M., Alguacil, F.J. 2006 Chemical Engineering Journal 118 (3), pp. 213-219

Rezumat

Posibilitatea transportului de cadmiu (II) din clorură de sodiu printr-o plat-foaie susținută de lichide membranare este studiat, utilizând Cyanex 923 (amestec de oxizi de fosfor) ionofore ca, în funcție de diferite variabile experimentale: hidrodinamice condiții, concentrația de cadmiu (II) (0.01-0.08 g l⁻¹) și HCl (0.1-5 m) în faza de alimentare, transportatorul de concentrare (2.5-40%, v / v) și solvent în faza de membrană. Un model este derivat care descrie mecanismul de transport, constând în difuzarea, printr-un strat de alimentare apoasă difuzie, o reacție rapidă chimică la interfață, precum și difuzarea de transportator, precum și complexele de metal prin membrană biologică. Difusional membrană biologică de rezistență (Δ_{org}) și rezistența apoasă de difuzie (Δ_{AQ}) au fost calculate de la modelul și valorile lor au fost 196145 și respectiv 260 cm²·s⁻¹, întrucât valorile de cea mai mare coeficient de difuzie (D_{org} , b) și difuzarea coeficient (D_{org}) de asemenea, calculate de la modelul au fost $2,4 \times 6,4 \times 10^{-7}$ și 10^{-8} cm²·s⁻¹. Separarea Cd (II), Zn împotriva (II), Fe (III), Co (II) și Cu (II) este evaluată.

÷ Numerical modelling of convection in a reactive porous medium with a mobile mush-liquid interface; Butler, S.L., Huppert, H.E., Worster, M.G. 2006 Journal of Fluid Mechanics 549, pp. 99-129

Rezumat

Ne descrie o serie de simulări numerice a condus convection-dizolvarea într-un mediu poros de reactiv încălzit de mai sus. Fizica sistem constă dintr-un mediu poros, confecționate din congelate componentă a unui amestec binar care este scufundate într-un amestec de lichide cu care este termodinamice în echilibru. Suprafața de încălzire în rezultatele de topire a materialului de sus, care a lansat densa solute unități de stocare și de compoziție convection. Dezvolta o interfață între regiune superior, în care matricea solidă a topit complet, și o regiune mai mici, în care evoluează solute congelate. Interfața coboară ca topire produsului. În timpul simulărilor numerice, scalate pentru a fi similar cu experimentele anterioare, folosind nitrat de potasiu cristale lor de saturatie și soluție apoasă (Hallworth, Huppert & Woods, J. Fluid Mech. Vol. 535, 2004, p. 255), există trei faze distincte: o faza pur conductiv; urmată de o fază cu foarte scurta, intensa, compositionally condus convection; urmată de o fază prelungită de mai multe sedate compositionally condus convection în care energia cinetica medie este de aproximativ o oră pentru a magnitudine mai puțin

intens decât în timpul fazei precoce. Domeniu ecuații numerice și metodologia sunt prezentate în plus față de un model simplu de analiză pentru rata de mișcare a interfeței. Model de analiză, valabilă în limita de foarte rapid de amestecare a solute, este dovedit a fi în stare bună de acord cu rezultatele numerice pur conductiv calculele cu un mare coeficient de difuzie. Am investiga soluții pentru diverse valori ale Rayleigh număr și să se cuantifice gradul de interfață de mișcare în funcție de acest parametru. Aceste simulări pot fi aplicabile în special la problemele asociate cu procesele de post-cumulate în camere de magmă.

÷ Modelling mass transfer in the PCA process using the Maxwell-Stefan approach; Pérez De Diego, Y., Wubbolts, F.E., Jansens, P.J. 2006 Journal of Supercritical Fluids 37 (1), pp. 53-62

Rezumat

Cele două căi de transfer de masă între un diclormetanului în lista de dioxid de carbon și la condițiile de tipice de precipitații cu un comprimat Antisolvent (APC) proces a fost modelate utilizând o modelul diferențelor finit-apropiate ale ecuațiilor Maxwell-Stefan. A fost dezvoltat un model de analize de variație de concentrare, flux de la lista de interfață și în lista cu diametrul de timp, și prezice cum diferite condiții de funcționare vor afecta în lista de dimensiune și de evaporare în lista de timp. Simulations arată că a studiat în presiune și temperatură (4-7.5 MPa și 308-328 K) de absorbție a CO₂ în faza lichida este întotdeauna mai repede decât solvent evaporare. Droplets produse ca urmare a atomisation în nozzle va swell, de îndată ce ei a lua în contact cu CO₂. În lista de viață poate fi redusă cu o creștere a emisiilor de CO₂ la socoteală și solvent molar de o scădere în lista inițială de diametru. Diferiți factori de consolidare / încetineală transfer de masă au un complex de dependența de presiune și temperatura. La presiuni ridicate temperaturi joase și în lista de viață este lungă, cauzată de un diametru mai mare, atinse de către droplets ca urmare a solubilitate ridicat de dioxid de carbon din faza lichida; la presiuni foarte mici și temperaturi ridicate în lista de viață crește datorită celor mai mică densitate în faza de vapori.

Analiza cantitativă este bazată pe măsurarea unei proprietăți care este corelată direct sau indirect, cu cantitatea de constituent ce trebuie determinată dintr-o probă. În mod ideal, nici un constituent, în afară de cel căutat, nu ar trebui să contribuie la măsurătoarea efectuată. Din nefericire, o astfel de selectivitate este rareori întâlnită.

Pentru a proceda la o analiză cantitativă, trebuie urmate o serie de etape:

1. Obținerea unei probe semnificative prin metode statistice;
2. Prepararea probei;
3. Stabilirea procedurii analitice în funcție de:
 - a. Metode:
 - i. chimice;
 - ii. fizice cu sau fără schimbări în substanță;
 - b. Condiții:
 - i. determinate de metoda de analiză aleasă;
 - ii. determinate de substanța cercetată;
 - c. Cerințe:
 - i. rapiditate, exactitate, costuri;
 - ii. posibilitatea de amortizare;
4. Evaluarea și interpretarea rezultatelor.

Practic, după natura analizei, există 7 tipuri de metode de analiză: (1) gravimetrice; (2) volumetrice; (3) optice; (4) electrice; (5) de separare; (6) termice; (7) de rezonanță. În general, (1) și (2) sunt metode chimice, iar (3-7) sunt instrumentale (bazate pe relații între o proprietate caracteristică și compoziția probei). Adeseori, în analiză se cupleză după sau mai multe dintre aceste procedee de bază. O altă clasificare a metodelor de analiză se poate face după implicarea componentilor în reacții chimice, în metode stoechiometrice și metode nestoechiometrice.

Separarea diferitelor substanțe dintr-un amestec constituie una dintre cele mai importante probleme ale chimiei analitice. Metoda cromatografică se bazează pe repetarea echilibrului de repartiție a componentelor unui amestec între o fază mobilă și una staționară. Datorită diferențelor în repartiție are loc deplasarea, cu viteză diferită, a componentelor purtate de faza mobilă de-a lungul fazei staționare.

În general, metodele de separare cromatografice se împart în două categorii: în prima intră cele care se bazează pe interacțiunea diferită a componentilor cu faza staționară (repartiție, adsorbție, schimb ionic și afinitate), iar în a doua cele care se bazează pe mărimea diferită a

componenților (excluziunea sterică). Cromatografia pe strat subțire și pe hârtie posedă două avantaje:

- sunt metode de separare cu costuri reduse;
- separarea se produce într-un mod similar cu cea de lichide de înaltă performanță (TLC - thin layer chromatography; HPLC - high pressure liquid chromatography; HPTLC - metoda integratoare - cuplarea TLC (analiza calitativă, alegerea solventilor potriviți, alegerea compoziției optime a fazei mobile) cu HPLC (analiza cantitativă folosind informația obținută prin TLC).

Documentația detaliată a fost valorificată prin publicare în lucrarea [Horea Iustin NAȘCU, Lorentz JĂNTSCHI, Chimie analitică și instrumentală, AcademicDirect & AcademicPres, Internet & Cluj-Napoca, 320 p., ISBN(10) 973-744-046-3 & ISBN(13) 978-973-744-046-4 (AcademicDirect) && ISBN (10)973-86211-4-3 & ISBN(13) 978-973-86211-4-5 (AcademicPres), 2006].

Cromatografia planară (PC) întâlnită adesea sub denumirea de cromatografie în strat subțire este cea mai *simplă și ieftină* dintre toate metodele cromatografice cunoscute. Mai este denumită și *cromatografia de lichide a săracului*. În literatura de specialitate se utilizează mai multe denumiri (cu prescurtările asociate acestora). Pe lângă termenul consacrat - cromatografia planară (planar chromatography - PC) se mai întâlnesc denumiri ca cromatografia în strat subțire de înaltă performanță (high performance thin layer chromatography - HPTLC) sau cromatografia de lichide planară (planar liquid chromatography - PLC).

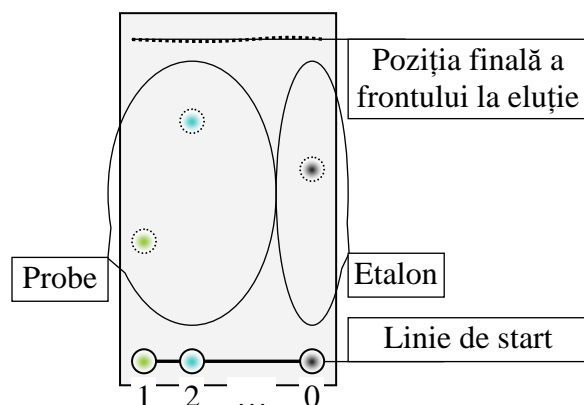


Fig. 1. Placa cromatografică și pozițiile relative ale spoturilor

În această variantă a *cromatografiei de lichide*, separarea nu mai are loc într-o coloană închisă ci pe o fază staționară similară, granulară (poroasă) dispusă într-un *strat subțire*, formând un plan (vezi fig. 1). Acest strat denumit *subțire*, se realizează dintr-un adsorbent cu grosimi cuprinse între 100-250 μm și poate fi simplu sau legat adeziv de un plan rigid, fiind pe tot parcursul separării în contact cu o fază gazoasă - mai mult sau mai puțin saturată cu vapori de eluent. Primul caz a fost mult utilizat în trecut în cazul așa-numitei cromatografii pe hârtie unde faza staționară consta dintr-o

Procese la interfața fazelor: Modelare matematică, Optimizare numerică, Implementare web, cu aplicații în separarea și caracterizarea seriilor de compuși chimici biologic activi

bandă de hârtie de filtru, confecționată din celuloză pură, sau, extrem de rar, prin folosirea unor plăci din materiale ceramice sinterizate poroase. Celălalt caz mult mai utilizat (chiar în zilele noastre) face apel la straturi subțiri realizate dintr-un adsorbent pulverulent (silicagel, celuloză, alumina, poliamidă sau derivate ale acestora) dispuse în straturi subțiri pe plăci rigide din sticlă sau, pe folii flexibile din aluminiu, poliester sau alte materiale inerte față de sistemul pe care are loc separarea. Se mai poate recurge și la straturi formate pe baghete de sticlă sau tuburi din sticlă.

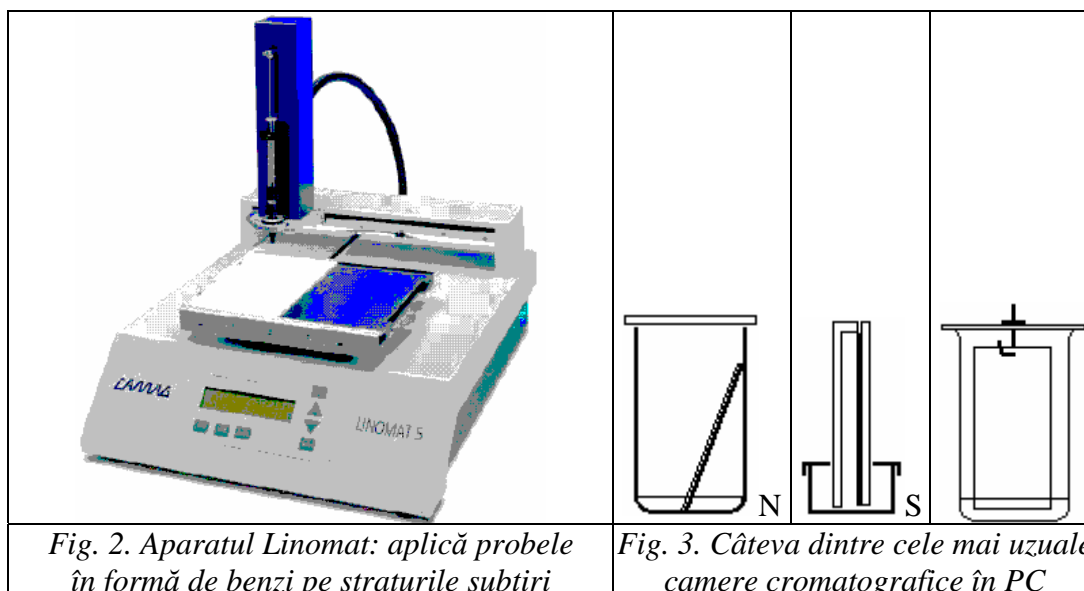
Obținerea straturilor subțiri se realizează la început în laborator, pornindu-se de la o suspensie apoasă a adsorbentului pulverulent (10-40 μ m) împreună cu un liant anorganic (de exemplu ghips, SiO₂-coloidal) sau organic (amidon, carboximetilceluloză), iar pentru aplicare se foloseau niște dispozitive mecanice simple. Straturile subțiri mai pot include și indicatori de fluorescență care în lumină UV fac posibilă vizualizarea spoturilor substanțelor care absorb în acest domeniu prin stingerea fluorescenței, adică prin apariția unor spoturi întunecate pe fond luminos. Straturile subțiri pot fi achiziționate gata preparate de la firme producătoare specializate (Camag, Cole-Parmer etc.).

Pentru a se putea demara procesul de eluție, în prealabil pe placa cu strat subțire se aplică proba. Acest lucru se realizează cu seringi sau micro-pipete, dar și alte dispozitive specializate (fig. 2), astfel încât să se obțină aliniată, pe linia de start (fig. 1), mai multe spoturi de probe, respectiv de amestecuri etalon - supuse simultan separării. Întrucât probele se aplică din soluții diluate (1-2%), în anumiți solvenți, pentru a se evita interferența acestora în procesul de eluție, plăcile se usucă înainte de introducerea în amestecul de solvenți. Astfel se pot supune separării probe care se concentrează pe zone înguste (de lungime și lățime preselectate) asigurându-se o eficiență mărită separării.

Are loc prin coloana deschisă, care acționează cu totul analog celei închise (vezi LC), are loc sub acțiunea forțelor capilare și provoacă migrarea diferențiată a componentelor amestecului de separat. Acest lucru se realizează în urma simplei scufundări (manuale) a plăcii cromatografice în eluentul potrivit. Din acest moment, eluentul irigând prin capilaritate stratul poros migrează ascendent prin stratul subțire, provocând separarea. Timpul de separare variază între 3 și 60 min.

Nu este totuși exclusă utilizarea unor dispozitive mai sofisticate de alimentare cu solvenți (minipompe) - făcându-se uneori apel chiar la gradienti de concentrație (v. par. 16.5 în cazul LC). Se poate de asemenea practica migrarea eluentului pe orizontală sau descendent. Se poate elua o placă chiar de mai multe ori sau se poate evapora solventul în timpul migrării, în acest fel mărindu-se eficiența pe seama timpului de separare.

Pentru realizarea separării (eluției) se utilizează *camere de dezvoltare*. Câteva dintre cele mai utilizate dintre acestea se prezintă în fig. 3.



Formele preferate sunt cele paralelipipedice sau cilindrice (pahare), prevăzute cu un capac și eventual cu un dispozitiv de fixare a plăcii plane (hârtie sau strat subțire) și pot fi saturate cu amestecul de solvenți din tanc, pentru a se mări viteza de eluție. Camerele paralelipipedice (fig. 3N) se numesc camere de tip N (normale) iar cele subțiri (fig. 3S) poartă numele de camere de tip S (sandwich). Ultimele prezintă avantajul unui volum mai redus al fazei gazoase având o viteză de saturare mai mare și o durată a procesului de separare cu ceva mai mică.

Eluția are loc după introducerea plăcii în camera cromatografică, până când amestecul de solvenți atinge o înălțime finală, fixată de obicei între 5 și 18 cm, sau un anumit timp stabilit, în prealabil, prin încercări preliminare. Solvenții utilizați se aleg în funcție de proprietățile de eluție ale substanțelor supuse separării (analizei). Natura acestora depinde nu numai de substanțele implicate dar și de mecanismul de separare propus, respectiv de faza staționară avută la dispoziție.

După eluție, placa se scoate, se usucă și dacă spoturile nu se văd, se trece la vizualizarea acestora (operație numită uneori revelare). Pentru aceasta, placa fie se scufundă într-un reactiv, fie se pulverizează cu acesta sau se introduce într-o atmosferă conținând gaze reactive și chiar într-o etuvă, la cald, când spoturile devin vizibile în urma unor reacții chimice (având un aspect apropiat celor din fig. 4).



Doar apoi se poate trece la etapa analizei propriu-zise. Reactivii de culoare pot fi generali, ca de exemplu acidul sulfuric la cald (120°C), care determină carbonizarea majorității substanțelor organice, sau specifici, când aceștia reacționează doar anumite substanțe sau funcțiuni organice.

Procese la interfața fazelor: Modelare matematică, Optimizare numerică, Implementare web, cu aplicații în separarea și caracterizarea seriilor de compuși chimici biologic activi

O altă variantă de a face spoturile vizibile, preferată tot mai mult în ultimul timp, este folosirea unor *straturi subțiri fluorescente* (spre exemplu materialul pulverulent conține ZnS - fluorescent). Prin examinarea cromatogramelor eluate și uscate în lumină UV, se vor observa spoturi închise la culoare sau colorate, pe fond fluorescent - luminos. Atunci când chiar substanțele separate sunt fluorescente nu mai este nevoie de fondul fluorescent și este suficientă o placă obișnuită, observată în lumină UV, spoturile devenind luminoase pe un fond întunecat (fig. 4).

O variantă și mai modernă, foarte eficientă de vizualizare, folosind tot lumină UV, constă în utilizarea unor plăci cu straturi subțiri conținând *amestecuri de luminofori*. În acest caz plăcile au o culoare compusă (de regulă lumina emanând din trei substanțe luminescente având culori diferite). Cum fiecare luminofor emite la o altă lungime de undă, iar substanțele separate absorb diferit lumina, fiecare component de pe placă va avea, în consecință, o altă culoare. În acest caz detecția este mai sigură pentru că nu diferă doar poziția relativă a spotului respectiv pe placă ci și culoarea.

Analog cu cromatografia de lichide, respectiv cu varianta HPLC [HPLC = High Performance Liquid Chromatography], în PC sunt posibile mai multe mecanisme de separare: (1) cromatografia de adsorbție, (2) cromatografia de repartitie (cu faze directe și cu faze inversate), (3) cromatografia de schimb ionic și (4) cromatografia de excluziune sterică. Aceleași faze staționare (silicagel, alumină, celuloză sau derivați ai acestora) se utilizează în granulații fine (<40μm) dar fără părțile extra fine (<1μm). În ultimul timp câștigă tot mai mult teren fazele chimice legate, pentru separări în cromatografia de repartitie cu faze inversate (solvenți polari și faze staționare nepolare). Ca și în HPLC, se utilizează tot silicagelul silanizat având grefate grupări alchilice conținând 8 sau 18 atomi de carbon - echivalente cu o peliculă subțire de fază nepolară depusă pe granula-suport.

Fazele mobile sunt adesea amestecuri de 2 până la 5 solvenți cât mai diferiți ca natură chimică, aleși prin încercări preliminare. Pentru straturi subțiri din silicagel (cele mai utilizate) prezentăm o listă cu 10 solvenți extrași din 8 grupe de selectivitate (propușe de Snyder, un cercetător american care a clasificat solvenții organici în funcție de mai mulți parametri structurali și fizici), care diferă între ele prin structura chimică: eter etilic (grupa I), izopropanol și etanol (II), tetrahidrofuran (III), acid acetic (IV), diclormetan (V), acetat de etil și dioxan (VI), toluen (VII) și cloroform (VIII). Hexanul este un solvent considerat complet nepolar și este recomandat a fi introdus în amestecuri pentru aducerea spoturilor în domeniul considerat optim, de $R_f = 0.2-0.8$ dacă mai este necesar.

Fiecare compus separat prin PC este caracterizat (calitativ) de parametrul de retenție denumit R_f (o prescurtare de la termenul din l. engl.: *retardation factor*). Acesta se calculează astfel:

$$R_f = (\text{Distanța parcursă de componentul dat, } i) / (\text{Distanța parcursă de frontul solventului})$$

sau

$$R_f = \frac{x_i}{x_0}$$

unde cu x_i , respectiv cu x_0 , s-au notat distanțele parcurse de componentul dat, respectiv de frontul solventului, până la oprirea cromatogramei. Toate mărimile calculate pentru o *coloană închisă* au o mărime corespondentă și în PC. De exemplu parametrul de retenție R devine R_f (f de la front):

$$R_f = \frac{x}{x_0} = \frac{\bar{v}}{v_0} = \frac{t_0}{t} = \frac{1}{k+1}$$

unde v reprezintă viteze de migrare, t - timpi de migrare iar k factorul de capacitate. De aici, implicit:

$$k = \frac{1}{R_f} - 1$$

Comparându-se valorile R_f ale spoturilor etaloanelor cu cele ale substanțelor din proba de analizat (lucru realizat de cele mai multe ori vizual) se spune că se face analiza calitativă. Aceasta este cea mai utilă aplicație a metodei PC. Se pot identifica pesticide din ape, sol dar și alte substanțe pentru scopuri științifice și tehnice cu o sensibilitate mult mai bună decât în eprubetă. Desigur că sensibilitatea atinsă este inferioară celei din *HPLC*. De aceea, în aplicațiile analitice de performanță, cu toată simplitatea și prețul de cost scăzut, PC nu poate înlocui întotdeauna *HPLC*.

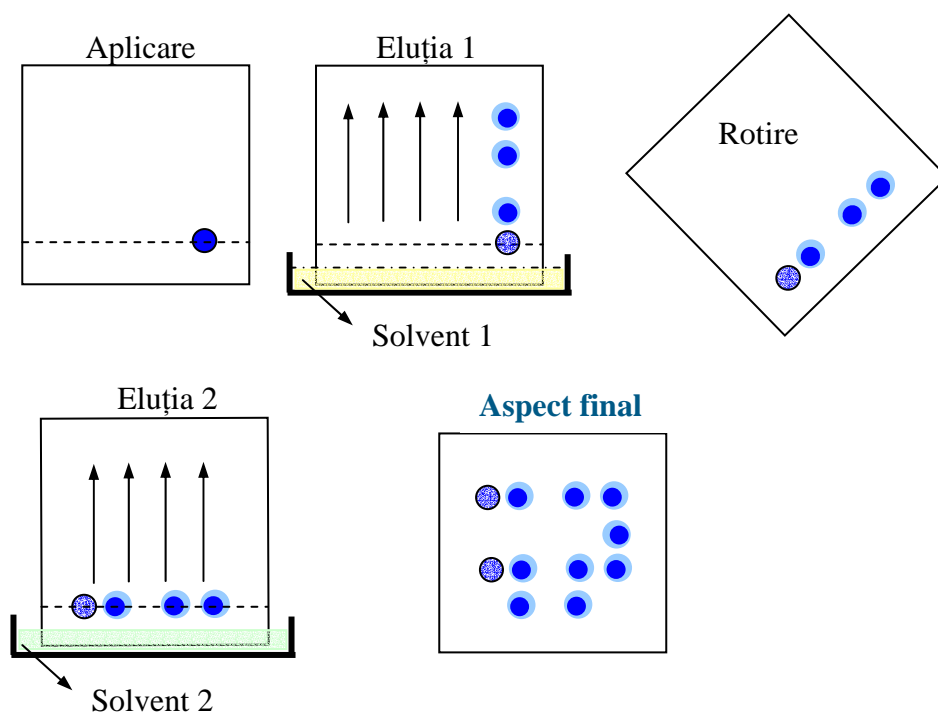


Fig. 5. Modul de executare a cromatografiei în strat subțire bidimensională

Tot în scopul realizării analizei calitative se poate practica și *cromatografia bidimensională*. În această variantă (fig. 5), se utilizează o placă pătrată, iar spotul (unul singur) se aplică într-unul dintre colțuri, de exemplu: în dreapta-jos. Se eluează cu un amestec de solvenți 1, având loc o primă separare. Apoi, după oprire se usucă placa. Se rotește placa cu 90° și se începe o nouă irigare a

Procese la interfața fazelor: Modelare matematică, Optimizare numerică, Implementare web, cu aplicații în separarea și caracterizarea seriilor de compuși chimici biologic activi

acesteia folosind un alt amestec de solvenți, 2. Doar apoi placa se vizualizează și se compară cu o placă etalon - pe care avem un amestec similar dar cunoscut.

Analiza cantitativă poate începe după efectuarea separării și vizualizării sau prin executarea unei măsurători asupra unui parametru fizic (radioactivitate) proporțional cu concentrația substanței din spotul de interes analitic. Metodele practicate pe scară largă sunt *densitometria* prin transmisie sau reflexie a spotului (spoturilor), respectiv mai recent scanarea. Densitometria se poate realiza în lumină vizibilă sau UV, în ultimul caz fiind posibilă și măsurarea radiației de fluorescență. Semnalul măsurat servește la construirea unei curbe de etalonare din semnalele măsurate pentru diferitele spoturi, conținând cantități crescătoare de component, aplicate, alături de proba necunoscută, pe aceeași placă. Se preferă *metoda curbei de etalonare* în reflexie (adică prin măsurarea reflectanței) deoarece domeniul liniar al metodei este destul de îngust și adesea curba de etalonare este neliniară. Motivul principal pentru care rezultatele analizei cantitative prin PC sunt inferioare HPLC sunt neuniformitățile stratului subțire care contribuie în mod hotărâtor la mărirea raportului semnal/zgomot, notat S/N. Astfel, conform fig. 6, unde H este înălțimea picului (semnalului) analitului iar h_n - lățimea domeniului în care variază zgomotul de fond (intervalul $\pm 2\sigma$).

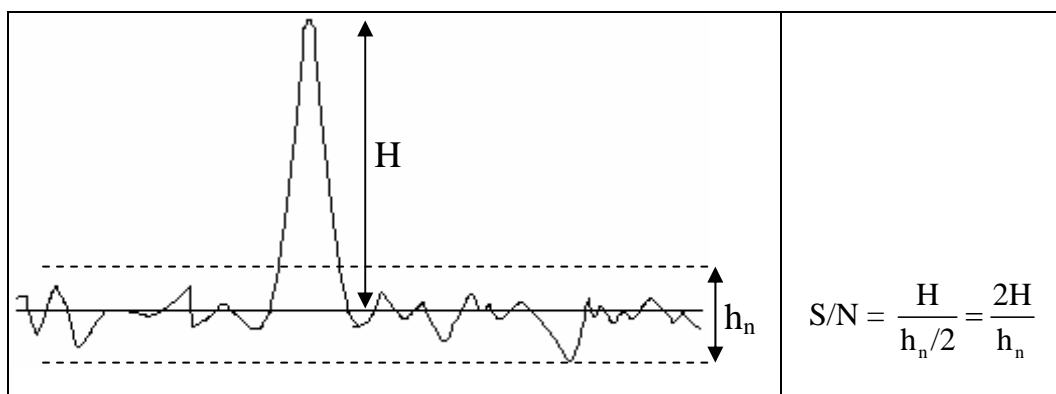


Fig. 6. Ilustrarea mărimilor care afectează raportul semnal/zgomot

O variantă mai simplă dar mai laborioasă de analiză cantitativă constă în *spălarea* zonei corespunzătoare analitului de pe suport într-un pahar, folosind un solvent adecvat și apoi determinarea, cu o altă metodă instrumentală, a concentrației soluției rezultate.

Evaluarea cu ajutorul *foto-densitometrelor* este până în prezent cea mai utilizată metodă. În aceste instrumente, placa cromatografică cu stratul pe ea, se deplasează odată cu suportul (de regulă în direcția dezvoltării), prin fața fantelor sistemului optic de iluminare, respectiv de măsurare a intensității luminii reflectate. Schema unui astfel de dispozitiv se poate observa pe fig. 7.

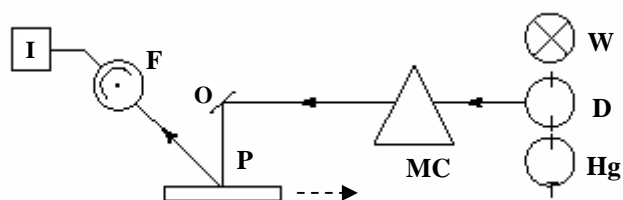


Fig. 7. Reprezentarea schematică a unui densitometru

Pe această figură se pot remarca posibilitatea de utilizare a unei lămpi cu incandescență - cu halogen - (W), pentru determinări în domeniul vizibil (400-800nm), a unei lămpi cu deuteriu (D) pentru spoturile care absorb în UV (190-400nm) sau a unei lămpi UV cu intensitate mai ridicată (cu xenon sau cu vapori de mercur), notată Hg , pentru spoturile fluorescente. Lumina monocromatică care părăsește monocromatorul MC se reflectă pe oglinda O , se reflectă pe placa cu strat subțire P iar lumina reflectată este receptată pe fotomultiplicatorul F . Semnalul obținut este înregistrat de înregistratorul I , care poate fi chiar un calculator.

După înregistrare, *densitogramele* se evaluează cantitativ, fie prin măsurarea înălțimii picurilor, fie a suprafeței acestora. Oricare dintre mărimile măsurate poate constitui semnalul analitic. Trasarea graficului semnal analitic în funcție de cantitatea de substanță din spot, duce la o *curbă de etalonare*. În cazul determinărilor de fluorescență acest grafic este liniar.

Un exemplu de determinare cantitativă din domeniul controlului poluării mediului îl constituie determinarea seleniului din ape. În acest caz înainte de aplicarea probei pe placă, aceasta se supune unei reacții chimice numită derivatizare. Derivatizarea seleniului se poate realiza cu 2,3-diaminonaftalină (DAN). Compusul rezultat este fluorescent. Pe fig. 8a se prezintă densitograma unei probe de apă conținând seleniu derivatizat. Se poate observa că reactivul de derivatizare, DAN, apare separat pe aceeași placă alături de compusul rezultat cu seleniul din apă. Repetându-se separarea cu mai multe probe cunoscute se obțin picuri cu înălțimi diferite (fig. 8b). Limita de detecție este pentru această metodă de 250fg Se. Reprezentarea grafică a înălțimilor duce la curba de etalonare (fig. 8c).

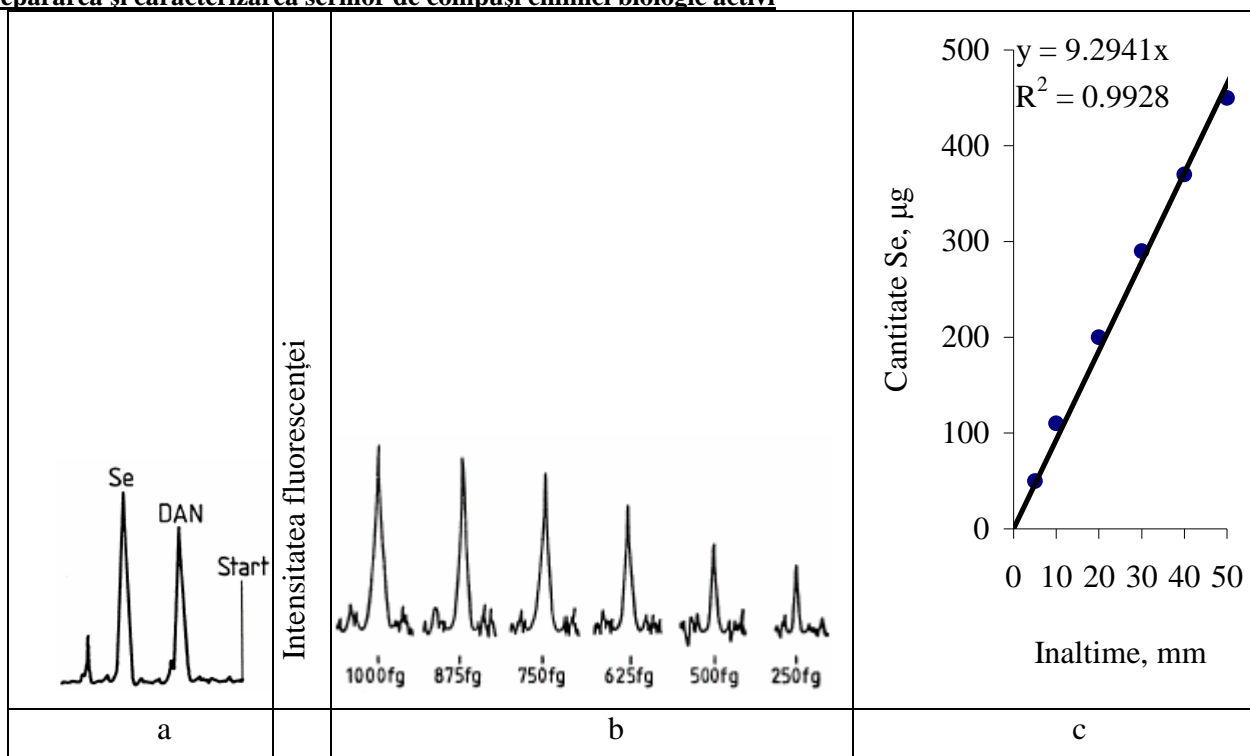


Fig. 8. (a) Aspectul unei densitograme a compusului fluorescent al seleniului DAN (1,2-diaminonaftalină); (b) Densitograme rezultate din măsurătorile de fluorescență ale produsului derivatizării seleniului din probe de apă cu 1,2-diaminonaftalină, în cantități crescătoare ($1 \text{ fg} = 10^{-12} \text{ g}$); (c) Aspectul unei curbe de etalonare în PC

Metoda PC este simplă și ieftină dar, ca precizie și exactitate, este adesea inferioară HPLC. În calitate de *metodă semicantitativă*, PC este o metodă competitivă și în lipsa unei aparaturi performante (de exemplu HPLC) rămâne uneori singura alternativă. O analiză *semicantitativă* poate răspunde la întrebarea: *Este prezentă specia X într-o concentrație mai mare decât o concentrație limită, C?* De foarte multe ori răspunsul la această întrebare este suficient în practica curentă. Dar pentru monitorizarea automată a conținutului de poluanți din ape sau sol, pentru expertize sau pentru controlul alimentelor, doar metoda PC nu este suficientă.

Activități și rezultate. Etapa I(2006). Obiectivul 2(Colectarea date experimentale cromatografie pe strat subțire). Activitatea 2/2(Elaborare specificatii echipamente de achiziționat).

Echipamente de achiziționat: calculator tip server pentru *optimizarea numerică a proceselor la interfața fazelor*. Problema majoră în situația actuală cu echipamentele existente este insuficiența memoriei de calcul. Astfel, calculatorul folosit acum pentru calcule, după ce își încarcă serviciile mai posedă foarte puțină memorie de lucru:

193.226.7.211

Up Time

7:09PM up 7 days, 2:08, 0 users, load averages: 0.02, 0.02, 0.00

System Information

Copyright (c) 1992-2005 The FreeBSD Project.

Copyright (c) 1979, 1980, 1983, 1986, 1988, 1989, 1991, 1992, 1993, 1994

The Regents of the University of California. All rights reserved.

FreeBSD 5.4-PRERELEASE #0: Mon Apr 4 10:14:55 EEST 2005

root@academicdirect.ro:/usr/src/sys/i386/compile/NS

Timecounter "i8254" frequency 1193182 Hz quality 0

CPU	user	nice	system	interrupt	idle
Pentium II/Pentium II Xeon/Celeron (400.91-MHz 686-class CPU)	0.0%	0.0%	0.4%	1.2%	98.4%

Type = "GenuineIntel" Id = 0x652 Stepping = 2

Features = [FPU, VME, DE, PSE, TSC, MSR, PAE, MCE, CX8, SEP, MTRR, PGE, MCA, CMOV, PAT, PSE36, MMX, FXSR]

cpu0: [ACPI CPU] on acpi0

npx0: [math processor] on motherboard

acpi0: [PTLTD RSDT] on motherboard

Timecounter "i8254" frequency 1193182 Hz quality 0

Timecounter "ACPI-safe" frequency 3579545 Hz quality 1000

Timecounter "TSC" frequency 400911256 Hz quality 800

Timecounters tick every 10.000 msec

RAM	Active	Inact	Wired	Cache	Buf	Free
real memory = 268435456 (256 MB)	108M	58M	68M	12M	35M	656K
avail memory = 256106496 (244 MB)						

cache	current	peak	max
mbufs	129	-	-
mbuf	128	9024	-
sbufs	-	536	2512

Soluția propusă este achiziționarea unui calculator capabil să suporte mai multă memorie, calculatorul existent (Pentium II/Pentium II Xeon/Celeron) fiind deja la capacitatea maximă de memorie suportată (256 MB). Calculatorul a fost achiziționat, sistemul de operare și serviciile au fost instalate.

193.226.7.211

CPU [100%]

Procese la interfata fazelor: Modelare matematică, Optimizare numerică, Implementare web, cu aplicatii în separarea și caracterizarea seriilor de compusi chimici biologic activi

User	Nice	System	Interrupt	Idle
0	0	0	0	100

Idle					
Mem [2007Mb]					
Active	Inact	Wired	Cache	Buf	Free
139	15	58	0	34	1761
					Free

OS:

FreeBSD 6.2-RELEASE
 Copyright (c) 1992-2007 The FreeBSD Project.
 Copyright (c) 1979, 1980, 1983, 1986, 1988, 1989, 1991, 1992, 1993, 1994
 The Regents of the University of California. All rights reserved.
 FreeBSD is a registered trademark of The FreeBSD Foundation.
 Up 52 secs

kernel:

version:
 FreeBSD 6.2-RELEASE #5

source:
 root@academicdirect.ro:/usr/src/sys/amd64/compile/LORI

borned:
 Wed Jun 4 14:02:16 EEST 2008

architecture:
 amd64

hostname:
 academicdirect.ro

CPU:
 CPU: Intel(R) Pentium(R) 4 CPU 3.20GHz (3194.56-MHz K8-class CPU)
 Logical CPUs per core: 2
 FreeBSD/SMP: Multiprocessor System Detected: 2 CPUs
 cpu0: [ACPI CPU] on acpi0
 cpu1: [ACPI CPU] on acpi0
 SMP: AP CPU #1 Launched!
 Origin = "GenuineIntel" Id = 0xf49 Stepping = 9
 Features = 0xbfebfbff [FPU, VME, DE, PSE, TSC, MSR, PAE, MCE, CX8, APIC,
 SEP, MTRR, PGE, MCA, CMOV, PAT, PSE36, CLFLUSH, DTS, ACPI, MMX,
 FXSR, SSE, SSE2, SS, HTT, TM, PBE]
 Features2 = 0x641d [SSE3, RSVD2, MON, DS_CPL, CNTX-ID, CX16, [b14]]
 AMD Features = 0x20100800 [SYSCALL, NX, LM]
 AMD Features2 = 0x1 [LAHF]

Timecounters:
 Timecounter "i8254" frequency 1193182 Hz quality 0
 Timecounter "ACPI-fast" frequency 3579545 Hz quality 1000
 Timecounters tick every 1.000 msec

memory:
 real memory = 2145320960 (2045 MB)
 avail memory = 2064551936 (1968 MB)

devices:

name	link	device

rl0	at device 3.0 on pci1	[RealTek 8139 10/100BaseTX] port 0xd100-0xd1ff mem 0xf8420000-0xf84200ff irq 23
re0	at device 2.0 on pci1	[RealTek 8169S Single-chip Gigabit Ethernet] port 0xd000-0xd0ff mem 0xf8421000-0xf84210ff irq 17
pcib1	at device 30.0 on pci0	[ACPI PCI-PCI bridge]
pcib0	on acpi0	[ACPI Host-PCI bridge] port 0xcf8-0xcff
pci1	on pcib1	[ACPI PCI bus]
pci0	at device 29.3	[serial bus, USB]
pci0	at device 29.2	[serial bus, USB]
pci0	at device 29.1	[serial bus, USB]
pci0	at device 29.0	[serial bus, USB]
pci0	at device 31.3	[serial bus, SMBus]
pci0	at device 2.0	[display, VGA]
pci0	on pcib0	[ACPI PCI bus]
isab0	at device 31.0 on pci0	[PCI-ISA bridge]
atapci1	at device 31.2 on pci0	[Intel ICH5 SATA150 controller] port 0xe500-0xe507, 0xe600-0xe603, 0xe700-0xe707, 0xe800-0xe803, 0xe900-0xe90f irq 18
atapci0	at device 31.1 on pci0	[Intel ICH5 UDMA100 controller] port 0x1f0-0x1f7, 0x3f6, 0x170-0x177, 0x376, 0xf000-0xf00f
ata3	on atapci1	[ATA channel 1]
ata2	on atapci1	[ATA channel 0]
ata1	on atapci0	[ATA channel 1]
ata0	on atapci0	[ATA channel 0]

storage:

physical	device	size	free	mount at	type
drive	ad0	476940MB [Seagate ST3500630A 3.AAE]		ata1-slave	UDMA100
slice	ad0s1d	461923 Mb	287459 Mb	/var/db/mysql/articles	file
drive	ad1	157066MB [Hitachi HDS721616PLA380 P22OA70A]		ata2-master	SATA150
slice	ad1s2b	4096 Mb	4096 Mb	none	swap
slice	ad1s2a	141344 Mb	113649 Mb	/	file

network:

Interface	Network	Address	Ipkts	Ierrs	Opkts	Oerrs	Coll
re0	[Link#1]	00:02:44:b8:33:2a	1284	0	1217	0	0
re0	fe80:1::202:4	fe80:1::202:44ff:	2	-	7	-	-
re0	193.226.7.128	academicdirect	338	-	255	-	-
re0	2001:b30:5000	2001:b30:5000:40:	31	-	32	-	-
rl0	[Link#2]	00:15:58:68:cf:7f	134	0	148	0	0
rl0	fe80:2::215:5	fe80:2::215:58ff:	0	-	1	-	-
rl0	subnet1/24	academicdirect	11	-	101	-	-

Procese la interfata fazelor: Modelare matematică, Optimizare numerică, Implementare web, cu aplicatii în separarea și caracterizarea seriilor de compusi chimici biologic activi

rl0	subnet2	192.168.211.1	0	-	0	-	-
lo0	-	[Link#3]	42	0	42	0	0
lo0	localhost.loc	::1	0	-	0	-	-
lo0	fe80:3::1	fe80:3::1	0	-	0	-	-
lo0	your-net	localhost.localdo	0	-	0	-	-

Lorentz JÄNTSCHI (principal investigator) & Sorana D. BOLBOACĂ (co-investigator)

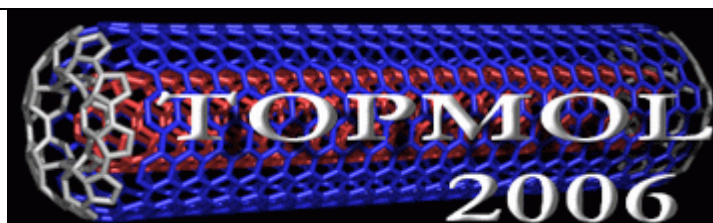
Activități și rezultate. Etapa I(2006). Obiectivul 2(Colectarea date experimentale cromatografie pe strat subtire). Activitatea 3(Participări la manifestări științifice).

Având în vedere obiectivele etapei, s-a participat cu lucrări în subiectul de cercetare al proiectului la următoarele evenimente:



6th European Conference on Computational Chemistry

Tatras, Slovakia, September 3-7, 2006



TOPMOL2006 - 20 Years Anniversary of Molecular Topology at Cluj

Cluj-Napoca, Romania, September 25-30, 2006

International Symposium on Organic Chemistry

December 9-12, 2006

Sofia, Bulgaria

<http://organic2006.innoslab.com>

International Symposium on Organic Chemistry

Sofia, Bulgaria, December 9-12, 2006

Lucrările susținute la evenimentele mai sus menționate sunt:

1. Lorentz JÄNTSCHI, Sorana-Daniela BOLBOACĂ, Mihaela Ligia UNGURESAN, *Mobile Phase Optimization in Three Solvents High Performance Thin-Layer Chromatography: Methodology and Evaluation*, 6th European Conference on Computational Chemistry,

Procese la interfata fazelor: Modelare matematică, Optimizare numerică, Implementare web, cu aplicatii în separarea și caracterizarea seriilor de compuși chimici biologic activi

European Association for Chemical and Molecular Sciences, Tale, Slovakia, September 3-7, **2006.**

2. Lorentz JÄNTSCHI, Sorana-Daniela BOLBOACĂ, *Online System for Molecular Descriptors Family on Structure-Activity Relationships: Assessment and Characterization of Biologic Active Compounds*, **6th European Conference on Computational Chemistry**, European Association for Chemical and Molecular Sciences, Tale, Slovakia, September 3-7, **2006.**
3. Lorentz JÄNTSCHI, Mircea V. DIUDEA, *Subgraphs by Pairs of Vertices*, **TOPMOL2006 - 20 Years Anniversary of Molecular Topology at Cluj**, Babes-Bolyai University, CEEEx M3 PR-D11-PT00-41, Cluj-Napoca, Romania, September 25-30, **2006.**
4. Sorana Daniela BOLBOACĂ, Lorentz JÄNTSCHI, *Activity Characterization of Triazines Analogues: Statistical Parameters for Models Assessment*, **International Symposium on Organic Chemistry**, Sofia, Bulgaria, December 9-12, **2006.**
5. Carmen Elena STOENOIU, Lorentz JÄNTSCHI, *Information Theory and Others for Steroids Separation*, **International Symposium on Organic Chemistry**, Sofia, Bulgaria, December 9-12, **2006.**
6. Lorentz JÄNTSCHI, Carmen Elena STOENOIU, Sorana Daniela BOLBOACĂ, *Use of Graph Polynomials for Characterization of Alkanes Properties*, **International Symposium on Organic Chemistry**, Sofia, Bulgaria, December 9-12, **2006.**

Activități și rezultate. Etapa I(2006). Obiectivul 2(Colectarea date experimentale cromatografie pe strat subțire). Activitatea 4(Separarea pe strat subțire a steroizilor).

Următoarele definesc experimentele efectuate:

Solvenți (substanțe)	Chloroform	Acetone	Petroleum ether
Amestecuri (%)	Chloroform	Acetone	Petroleum ether
0	33.0000	33.0000	33.0000
1	0.0000	0.0000	100.0000
2	0.0000	100.0000	0.0000
3	100.0000	0.0000	0.0000
4	50.0000	0.0000	50.0000
5	50.0000	50.0000	0.0000
6	0.0000	50.0000	50.0000
7	10.0000	10.0000	80.0000
8	80.0000	10.0000	10.0000
9	10.0000	80.0000	10.0000

distanțe de migrare (cm)	8.70	8.83	8.75	9.00	8.93	8.84	8.76	8.86	8.87	8.82
--------------------------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------

Separări (l:w, [cm])	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
5 α -androstan-3 β -ol	6.65: 0.48	0.00: 0.42	8.29: 0.37	1.21: 0.62	0.54: 0.56	6.71: 0.55	8.44: 0.36	3.49: 0.60	5.08: 0.69	8.24: 0.52
5 α -androstan-3 α -ol	7.35: 0.35	0.00: 0.44	8.49: 0.26	2.05: 0.45	0.98: 0.38	7.12: 0.31	8.56: 0.11	4.71: 0.42	6.71: 0.51	8.41: 0.24
5 α -androstan-17 β -ol	7.26: 0.23	0.00: 0.22	8.49: 0.11	1.43: 0.41	0.68: 0.27	7.05: 0.20	8.56: 0.05	4.51: 0.28	6.06: 0.34	8.46: 0.14
5 β -androstan-3 α ,17 β -diol	4.00: 0.38	0.00: 0.25	7.93: 0.28	0.05: 0.23	0.00: 0.26	5.31: 0.36	7.35: 0.31	0.53: 0.27	1.01: 0.32	7.38: 0.32
5 β -androstan-3 β ,17 β -diol	4.76: 0.98	0.00: 0.21	7.79: 0.59	0.19: 0.30	0.00: 0.25	5.56: 0.69	7.20: 1.38	0.64: 1.41	2.32: 0.63	7.27: 0.96

Se presupune într-un amestec de trei solvenți mărimea cantitativă a parametrului cromatografic ales depinde de compoziția fazei mobile printr-o ecuație de dependență de una din cele 2 forme:

$$M6(x_1, x_2, x_3) = a_1x_1 + a_2x_2 + a_3x_3 + a_4x_1x_2 + a_5x_1x_3 + a_6x_2x_3 \quad (1)$$

$$M7(x_1, x_2, x_3) = a_1x_1 + a_2x_2 + a_3x_3 + a_4x_1x_2 + a_5x_1x_3 + a_6x_2x_3 + a_7x_1x_2x_3 \quad (2)$$

unde x_1 , x_2 , x_3 sunt fracțiile molare ale celor 3 solvenți ($x_1 + x_2 + x_3 = 1$), $M6$ și $M7$ sunt estimatori și apoi predictorii ai parametrului cromatografic ales iar a_1 , a_2 , a_3 , a_4 , a_5 , a_6 și a_7 sunt coeficienții care sunt întâi determinați pe baza celei mai bune estimări a parametrului cromatografic

Procese la interfata fazelor: Modelare matematică, Optimizare numerică, Implementare web, cu aplicatii în separarea și caracterizarea seriilor de compuși chimici biologic activi

ales iar apoi sunt folosiți pentru a prezice valorile acestui parametru pentru orice compoziție a fazei mobile.

Parametrii cromatografici care au fost modelați utilizând ecuațiile (1) și (2) sunt:

$$\div RF(i,e) = l(i)/l(e) \quad (3)$$

unde i este unul din compușii de separat, e este eluentul folosit ca fază mobilă, $l(i)$ este coordonata la care a migrat în eluentul e , $l(e)$ este coordonata la care a migrat eluentul, iar RF este șirul factorilor de retenție ai compușilor de separat pentru eluentul e ;

$$\div RS(i,j,e) = 2*(l(i)-l(j))/(w(i)+w(j)) \quad (4)$$

unde i, j sunt doi compuși de separat, $w(i)$ și $w(j)$ sunt lățimile petelor compușilor, iar RS este matricea rezoluțiilor calculate pentru separarea compusului i de compusul j ;

$$\div RSO(i,e) = 2*(l_0(i)-l_0(i+1))/(w(i)+w(i+1)) \quad (5)$$

unde $l_0(i)$ este a i -a coordonată de migrare în lista ordonată a lungimilor de migrare iar RSO este matricea rezoluțiilor ordonate pentru separarea compușilor consecutivi;

$$\div Sm(e) = \sqrt{(\sum_j(\Delta RFT - \Delta RF(j,e)))/\sqrt{(n+1)}} \quad (6)$$

unde n este numărul de compuși de separat, ΔRFT este factorul de retenție ideal în separare ($1/n$), $\Delta RF(j,e)$ este diferența a i -a între 2 factori de retenție consecutivi în lista ordonată a factorilor de retenție, iar Sm este separarea medie înregistrată pentru eluentul e ;

$$\div RSA(e) = \sum_j RSO(j,e)/n \quad (7)$$

unde RSA este rezoluția medie a separării folosind eluentul e ;

$$\div RRP(e) = \prod_j RSO(j,e)/RSA(e) \quad (8)$$

unde RRP este produsul ponderat cu media rezoluțiilor în separarea folosind eluentul e ;

$$\div Inf(e,m) = \sum_k (n_k/n) \log_2(n_k/n) \quad (9)$$

unde n_k este numărul de compuși care migrează în al k -lea interval echidistant din cele m în care a fost împărțită întreaga lungime de migrare $l(e)$ iar Inf este un factor de calitate al separării calculat după metoda Logit și care se anulează pentru o separare ideală;

$$\div FOB(e,m) = \sum_j a_j F_j(Sm(e), Inf(e,m), RSA(e), RRP(e)) \quad (10)$$

unde $1 \leq j \leq 4$, F_j sunt funcții care exprimă fiecare câte o expresie de cei 4 parametrii, a_j sunt coeficienți aleși arbitrar sau printr-o relație de ponderare definită matematic, iar FOB este o funcție obiectiv ce caracterizează separarea cu eluentul e în raport cu alegerea coeficienților a_j , a funcțiilor F_j și respectiv a numărului de intervale m .

Prin aplicarea uneia dintre ecuațiile (3-10) pentru un șir de p experimente, rezultă o matrice MOB cu una (ecuațiile 6-10) sau mai multe linii (ecuațiile 3-5) și totdeauna p coloane, câte una pentru fiecare experiment, ale cărei elemente reprezintă valorile parametrului cromatografic care se modelează folosind una din ecuațiile (1) sau (2). Pentru ca algoritmul de optimizare să aibă o soluție unic determinată este necesar ca $p \geq 6$ pentru ecuația (1) și respectiv $p \geq 7$ pentru ecuația (2).

Pentru fiecare linie a matricei MOB se construiește un sistem de p ecuații liniare cu 6 sau 7 termeni (ecuația 1 și respectiv ecuația 2) în coeficienții a_i în forma:

$$\div \text{MOB}(j) = a_1x_1 + a_2x_2 + a_3x_3 + a_4x_1x_2 + \dots \quad (11)$$

unde x_i sunt fracțiile molare ale fiecărui solvent ($i = 1, 2, 3$) ce intră în compoziția eluentului e_j ($j = 1, 2, \dots, p$).

La sistemul de ecuații liniare de forma (11) se aplică metoda celor mai mici pătrate pentru construirea sistemului de ecuații cu soluție unic determinată MMCP, care se obține după formula:

$$\div \text{MMCP}(k,0) = M2(\text{MOB},A(k)), \text{MMCP}(k,1) = M2(A(k),A(1)) \quad (12)$$

unde $k,1 = 1, 2, \dots, 6$ (ecuația (1) sau 7 pentru ecuația (2)), $A(k)$ este șirul termenilor cunoscuți din ecuația (11), $M2$ calculează media pentru produsul șirurilor MOB și $A(k)$, iar MMCP este matricea extinsă a sistemului de ecuații liniare ce servește la determinarea coeficienților a_k .

Se aplică metoda Gauss pentru determinarea soluției sistemului (12). Fie $A0 = (a_{01}, a_{02}, \dots, a_{06})$ soluția acestui sistem (sau $A0 = (a_{01}, a_{02}, \dots, a_{07})$ pentru cazul ecuației (2)).

Odată determinați coeficienții $A0$ se folosesc valorile acestora pentru a efectua predicția parametrului cromatografic folosind din nou una din ecuațiile (1) și (2) și anume cea pentru care s-au determinat coeficienții.

Fie Y parametrul cromatografic ales. Dacă matricea MOB (predictorul lui Y) are mai mult de o linie, și atunci și estimatorul lui Y are mai mult de o linie. Dacă z este numărul de linii al matricei MOB (și implicit numărul de predictor) atunci putem exprima estimatorul parametrului cromatografic ales \hat{Y} sub forma unui șir:

$$\div \hat{Y} = (\hat{y}_1, \dots, \hat{y}_z) \quad (14)$$

Optimul se obține prin aplicarea unei funcții de maxim sau de minim (cum este caracterizarea unei separări de mai mulți compuși prin cea mai proastă separare a doi compuși ai acesteia):

$$\div \hat{y}_o = \text{opt}(\hat{Y}), \text{unde } \text{opt} = \text{"max"} \text{ sau } \text{opt} = \text{"min"} \quad (15)$$

Parcurgând întreg domeniul de valori posibile pentru compoziția fazei mobile se identifică punctul de optim și anume compoziția optimă a fazei mobile (x_1, x_2, x_3):

$$\div (\cdot, \cdot, \cdot) | \hat{Y}(\cdot, \cdot, \cdot) = \text{opt}\{ \hat{Y}(i/100, j/100, k/100) | i=0..100, j=0..100-i, k=100-i-j \} \quad (16)$$

Următorii parametrii cromatografici asociați experimentelor efectuate au fost calculați:

retention_factor	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
------------------	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---

Procese la interfata fazelor: Modelare matematică, Optimizare numerică, Implementare web, cu aplicatii în separarea și caracterizarea seriilor de compusi chimici biologic activi

5 α -androstane-3 β -ol	0.7644	0.0000	0.9474	0.1344	0.0605	0.7590	0.9635	0.3939	0.5727	0.9342
5 α -androstane-3 α -ol	0.8448	0.0000	0.9703	0.2278	0.1097	0.8054	0.9772	0.5316	0.7565	0.9535
5 α -androstane-17 β -ol	0.8345	0.0000	0.9703	0.1589	0.0761	0.7975	0.9772	0.5090	0.6832	0.9592
5 β -androstane-3 α ,17 β -diol	0.4598	0.0000	0.9063	0.0056	0.0000	0.6007	0.8390	0.0598	0.1139	0.8367
5 β -androstane-3 β ,17 β -diol	0.5471	0.0000	0.8903	0.0211	0.0000	0.6290	0.8219	0.0722	0.2616	0.8243

resolutions_all	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
(5 α -androstane-3 β -ol, 5 α -androstane-3 α -ol)	1.6867	0.0000	0.6349	1.5701	0.9362	0.9535	0.5106	2.3922	2.7167	0.4474
(5 α -androstane-3 β -ol, 5 α -androstane-17 β -ol)	1.7183	0.0000	0.8333	0.4272	0.3373	0.9067	0.5854	2.3182	1.9029	0.6667
(5 α -androstane-3 β -ol, 5 β -androstane-3 α ,17 β -diol)	6.1628	0.0000	1.1077	2.7294	1.3171	3.0769	3.2537	6.8046	8.0594	2.0476
(5 α -androstane-3 β -ol, 5 β -androstane-3 β ,17 β -diol)	2.5890	0.0000	1.0417	2.2174	1.3333	1.8548	1.4253	2.8358	4.1818	1.3108
(5 α -androstane-3 α -ol, 5 α -androstane-17 β -ol)	0.3103	0.0000	0.0000	1.4419	0.9231	0.2745	0.0000	0.5714	1.5294	0.2632
(5 α -androstane-3 α -ol, 5 β -androstane-3 α ,17 β -diol)	9.1781	0.0000	2.0741	5.8824	3.0625	5.4030	5.7619	12.1159	13.7349	3.6786
(5 α -androstane-3 α -ol, 5 β -androstane-3 β ,17 β -diol)	3.8947	0.0000	1.6471	4.9600	3.1111	3.1200	1.8255	4.4481	7.7018	1.9000
(5 α -androstane-17 β -ol, 5 β -androstane-3 α ,17 β -diol)	10.6885	0.0000	2.8718	4.3125	2.5660	6.2143	6.7222	14.4727	15.3030	4.6957
(5 α -androstane-17 β -ol, 5 β -androstane-3 β ,17 β -diol)	4.1322	0.0000	2.0000	3.4930	2.6154	3.3483	1.9021	4.5799	7.7113	2.1636
(5 β -androstane-3 α ,17 β -diol, 5 β -androstane-	1.1176	0.0000	0.3218	0.5283	0.0000	0.4762	0.1775	0.1310	2.7579	0.1719

3 β ,17 β -diol)										
------------------------------	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--

resolutions	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
(0, 1)	1.1176	0.0000	0.3218	0.5283	0.0000	0.4762	0.1775	0.1310	2.7579	0.1719
(1, 2)	2.5890	0.0000	1.1077	2.2174	1.3171	1.8548	3.2537	2.8358	4.1818	2.0476
(2, 3)	1.7183	0.0000	0.6349	0.4272	0.3373	0.9067	0.5106	2.3182	1.9029	0.4474
(3, 4)	0.3103	0.0000	0.0000	1.4419	0.9231	0.2745	0.0000	0.5714	1.5294	0.2632

resolutions_sort	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
(0, 1)	0.3103	0.0000	0.0000	0.4272	0.0000	0.2745	0.0000	0.1310	1.5294	0.1719
(1, 2)	1.1176	0.0000	0.3218	0.5283	0.3373	0.4762	0.1775	0.5714	1.9029	0.2632
(2, 3)	1.7183	0.0000	0.6349	1.4419	0.9231	0.9067	0.5106	2.3182	2.7579	0.4474
(3, 4)	2.5890	0.0000	1.1077	2.2174	1.3171	1.8548	3.2537	2.8358	4.1818	2.0476

f_sm	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
f_sm	6.2535	9.1287	8.4157	7.2415	8.1682	7.4585	7.9233	6.6206	4.6513	8.0126

f_rsa	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
f_rsa	1.4338	0.0000	0.5161	1.1537	0.6444	0.8781	0.9855	1.4641	2.5930	0.7325

f_rrp	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
f_rrp	1.0762	0.0000	0.0000	0.6254	0.0000	0.2504	0.0000	0.3360	12.9444	0.0566

f_inf	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
f_inf	1.9219	0.0000	0.9710	1.5219	0.9710	1.9219	1.3710	1.5219	2.3219	1.9219

Trei programe (op1.php, op2.php, op3.php) asigură interfața pentru introducerea datelor experimentale și selecția modelelor folosite.

Astfel, programul *op1.php* permite specificarea celor trei solvenți folosiți și a compușilor care se dorește a fi separați (dacă aceștia sunt cunoscuți). Aceste informații nu afectează modul de calcul pe care se bazează optimizarea, ci sunt folosiți numai pentru ușurarea manipulării interfeței programului și prezentarea rezultatelor optimizării.

Rezultatul alegerii este transmis programului *op2.php* care dintr-o listă de 10 compoziții ale fazei mobile experimente permite utilizatorului să aleagă exact acele experimente pe care le-a efectuat.

Programul *op3.php* conține ultima interfață pentru introducerea datelor măsurate. Aici pentru fiecare experiment se cere distanța pe care a migrat eluentul și pentru fiecare compus se cere distanța pe care a migrat acesta și lărgimea spotului cromatografic.

Procese la interfața fazelor: Modelare matematică, Optimizare numerică, Implementare web, cu aplicații în separarea și caracterizarea seriilor de compuși chimici biologic activi

Alegerea modelului matematic și a parametrului cromatografic folosite este posibilă în orice combinație dintre modelul cu 6 și cel cu 7 termeni și respectiv funcție obiectiv, rezoluție sau factor de retenție.

Programul *op4.php* efectuează toate calculele solicitate și afișează rezultatele în forma:

- ÷ Nume parametru cromatografic;
- ÷ Ecuația modelării parametrului cromatografic;
- ÷ Valorile parametrului cromatografic ce rezultă din experiment din aplicarea formulelor de calcul ale acestuia, pentru fiecare experiment ales și fiecare compus, pereche de compuși sau sub-funcție obiectiv (vezi modelul matematic);
- ÷ Valorile parametrului cromatografic ce rezultă din modelare în aceeași succesiune ca pentru valorile ce rezultă din experiment;
- ÷ Lista valorilor prezise de model pentru valorile parametrului cromatografic pentru toate valorile posibile ale compoziției fazei mobile cu un increment de o unitate procentuală de compoziție;
- ÷ Compoziția optimă calculată de model și valoarea prezisă a parametrului cromatografic în acest punct;
- ÷ O cale de acces către un alt program (*graph.php*) care reprezintă grafic sub formă de suprafață de nivel dependența parametrului cromatografic prezis în funcție de compoziția fazei mobile folosind 4 specificații utilizator (care doi din cei trei solvenți sunt aleși pentru a reprezenta axele O_x și O_y , care este valoarea minimă a parametrului cromatografic are să apară pe graficul rezultat, și câte nuanțe intermediare de culoare între 2 culori de bază să fie folosite pentru reprezentarea suprafeței de nivel între valoarea minimă și valoarea maximă a parametrului cromatografic prezis); programul produce un grafic în format PNG (Portable Network Graphics);
- ÷ O cale de acces către salvarea rezultatelor în format text.

Fișierele *data1.php*, *data2.php* și *data3.php* conțin tablouri uni- și bi- dimensionale a 3 experimente care pot fi folosite drept model în execuția programului de modelare.

Astfel, compușii, solvenții și distanțele de migrare ale eluenților sunt tablouri unidimensionale iar experimentele și rezultatele sunt tablouri bidimensionale. O notă aparte fac rezultatele, a căror implementare ca tablouri bidimensionale (compus *vs.* data) a fost preferată în favoarea celei naturale a acestora de tablouri tridimensionale (compus *vs.* experiment *vs.* data) pentru ușurarea manipulării acestora de către utilizator.

Transmiterea datelor între client (utilizator) și server (programe) se face cu precădere prin metoda POST, însă opțiunea de alegerea datelor model se face prin metoda GET.

Nucleul principal al aplicației de optimizare este realizat de modulul *z_HPTLC_Models.php*:

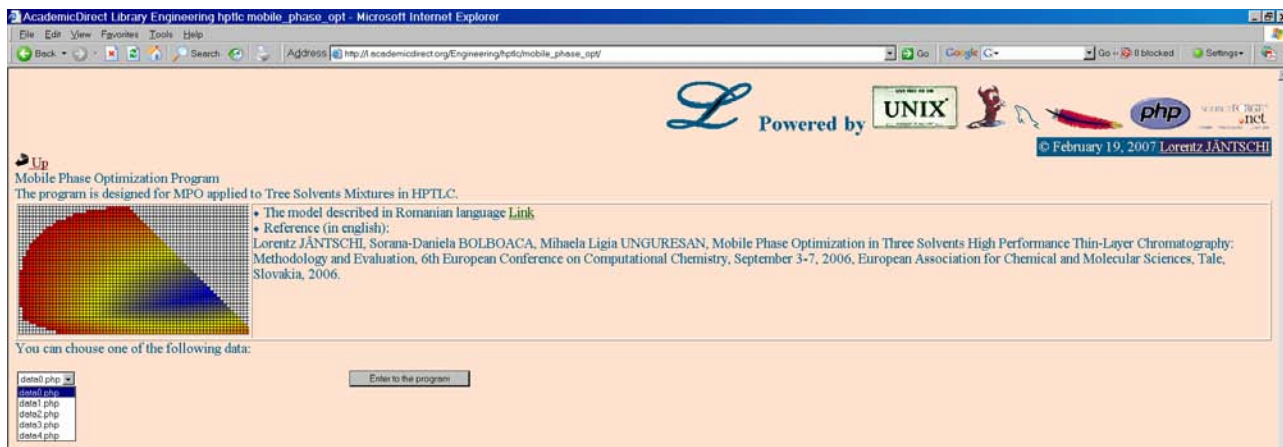
- ÷ Funcția *MX_Model* întoarce un șir ale cărui valori sunt obținute din efectuarea înmulțirilor acolo unde este necesar conform modelului dat de ecuațiile (1) și (2);
- ÷ Funcția *MX_Put* folosește rezultatul dat de funcția *MX_Model* și valorile parametrului cromatografic pentru a construi sistemul de ecuații liniare dat de ecuația (11);
- ÷ Funcția *MX_System* folosește rezultatul dat de funcția *MX_Put* pentru a construi sistemul de ecuații liniare cu soluție unic determinată (12);
- ÷ Funcția *MX_Gauss* rezolvă sistemul de ecuații liniare (12) dat de funcția *MX_System* și întoarce valorile calculate ale coeficienților modelului (ecuația 13);
- ÷ Funcția *MX_Coefs* integrează funcțiile *MX_Put*, *MX_System* și *MX_Gauss* într-un modul care primește ca și date valorile parametrului cromatografic și valorile compoziției fazei mobile și produce valorile coeficienților modelului;
- ÷ Funcția *MX_Est* efectuează predicția valorilor parametrului cromatografic folosind datele calculate ale coeficienților modelului și o compoziție dată a fazei mobile;
- ÷ Funcția *Worst_RF* definește parametrul care caracterizează o separare modelată prin factorul de retenție ca parametru cromatografic; folosește un șir de valori calculate ale factorului de retenție pentru fiecare compus și întoarce ca valoare cea mai mică diferență care se înregistrează în acest șir;
- ÷ Funcția *Worst_RS* definește parametrul care caracterizează o separare modelată prin rezoluție ca parametru cromatografic; folosește un șir de valori calculate ale rezoluției o serie de perechi de compuși și întoarce ca valoare cea mai mică valoare din acest șir;
- ÷ Funcția *Worst_OB* definește parametrul care caracterizează o separare modelată prin funcție obiectiv; are o singură dată de intrare, valoarea funcției obiectiv și o întoarce pe aceasta ca valoare;
- ÷ Funcția *f_sm* implementează calculul separării medii dat de ecuația (6);
- ÷ Funcția *f_rsa* implementează calculul rezoluției medii dat de ecuația (7);
- ÷ Funcția *f_rrp* implementează calculul produsul ponderat cu media rezoluțiilor dat de ecuația (8);
- ÷ Funcția *f_inf* implementează calculul factorului de calitate al separării calculat după metoda Logit dat de ecuația (9);
- ÷ Funcțiile *f_obX* ($X=1,2,\dots$) implementează diferite funcții obiectiv date de ecuația (10).

Pentru a implementa optimizarea fazei mobile la separarea cromatografică cu amestecuri de trei solvenți s-a creat un pachet de programe PHP (Pre Hypertext Processed) care asigură o maximă portabilitate [Lorentz JÄNTSCHI, *Free Software Development. 1. Fitting Statistical Regressions*,

Procese la interfata fazelor: Modelare matematică, Optimizare numerică, Implementare web, cu aplicatii în separarea și caracterizarea seriilor de compuși chimici biologic activi

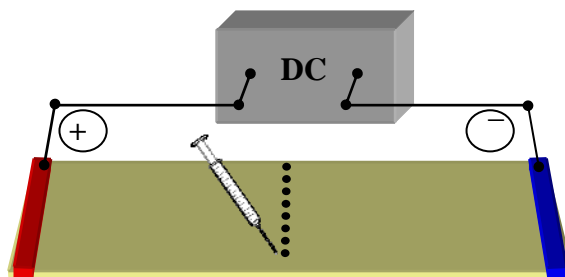
Leonardo Journal of Sciences, AcademicDirect, Issue 1, 31-52, 2002]. Astfel, programul de optimizare poate fi executat de pe orice calculator care este legat la Internet de la adresa:

http://1.academicdirect.org/Engineering/hptlc/mobile_phase_opt/



Activități și rezultate. Etapa II(2007). Obiectivul 1(Colectare date experimentale electroforeza, spectrofotometrie). Activitatea 1(Separarea prin electroforeză a triazinelor).

Electroforeza este definită ca transportul particulelor încărcate electric într-un câmp electric produs de curent electric. Particulele pot fi ioni simpli (cum este cazul triazinelor) macromolecule complexe (ca proteinele și coloizii) sau materie specifică (cum este cazul celulelor vii - eritrocite sau bacterii). Separarea electroforetică este bazată pe rata de migrare diferențiată în masa fazei lichide diferită de reacțiile care apar la electrozi. Rezoluția poate fi semnificativ îmbunătățită când un element de discontinuitate este introdus în faza lichidă (cum este un gradient de pH). Schema experimentului de electroforeză este redat în figura de mai jos:



Pentru electroforeza pe hârtie de ser, pe lângă camera de electroforeză și redresor mai sunt necesare și benzi de hârtie de filtru Whatman (25cmX2cm), soluție de tampon concentrată (66 g 5,5'-dietilbarbiturat de sodiu (medinal), 35.1 g acetat de sodiu hidratat cu 3 molecule de apă, 0.2 g mertiolat de sodiu, care se dizolvă într-un balon cotat de 1000 ml cu apă distilată și se corectează pH-ul la pH = 9 cu acid acetic glacial), soluție de tampon de lucru (obținută prin dizolvarea 1/10 a soluției tampon concentrate cu apă distilată), soluție de colorare (10 g amidoshwartz 10B, 900 ml alcool metilic, 100 ml acid acetic glacial) și soluție de spălare (100 ml acid acetic glacial, 400 ml metanol, 500 ml apă distilată) și soluție de eluare (4 g hidroxid de sodiu, 1000 ml apă distilată).

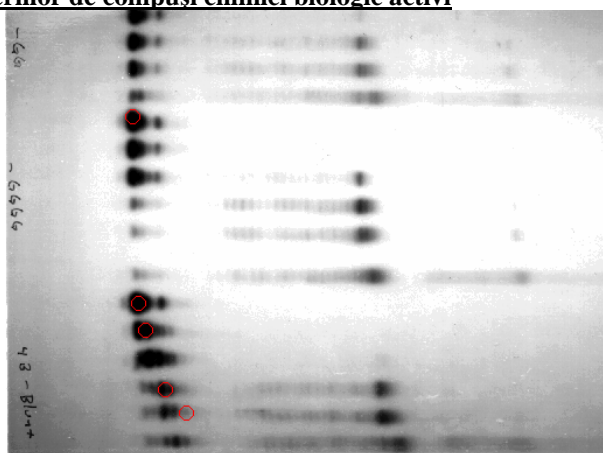
Algoritmul de lucru este redat mai jos:

1. Se prepară gelul de β -esterază în mediu de TG la pH = 8; fie acesta G1;
2. Se prepară gelul de PGM în mediu de TG la pH = 8; fie acesta G2;
3. Se prelevă 10 probe de amestecuri de triazine;
4. În 10 eprubete cu dop se pun câte 2 ml de apă distilată și se așează pe un strat de gheață;
5. Se etichetează tuburile după conținut pentru a evita confuzia;
6. Se așează pe gelul G1 câte 1 ml din fiecare probă începând cu tubul nr. 1 până la tubul nr. 10 și se așează încă o probă de 1 ml din proba nr. 1 la capătul șirului (pentru a servi la comparații la sfârșit);
7. Se conectează sursa și se reglează un curent de 2-3 mA; se cronometrează 20 min.;
8. Se deconectează curentul;

- 3.2. Se lasă în funcțiune timp de 30 min.;
- 3.3. Se întrerupe curentul electric;
4. Se aplică proba:
 - 4.1. Se aplică 5-10 μ l ser sub forma unei benzi;
 - 4.2. Se așteaptă 10 min.;
5. Se efectuează migrarea electroforetică:
 - 5.1. Se stabilește legătura la sursa de curent;
 - 5.2. Pentru migrare rapidă (4-5 ore) se reglează tensiunea la borne de 320-350 V și amperajul la 0.3-0.5 mA/ cm de lățime de bandă;
 - 5.3. Se deconectează sursa de tensiune.
6. Se efectuează determinările:
 - 6.1. Se scot benzile de hârtie din camera cromatografică;
 - 6.2. Se pun în etuvă la 100°C timp de 10-15 min. pentru uscare;
 - 6.3. Se introduc în soluția de colorare timp de 15 min.;
 - 6.4. Se îndepărtează excesul de colorant prin trecerea proteinogramei prin 3 băi de spălare (până la decolorarea benzii);
 - 6.5. Se tamponează cu hârtie de filtru uscată;
 - 6.6. Se introduc în etuvă la 80°C timp de 10-15 min.;
 - 6.7. Se pregătesc 5 eprubete;
 - 6.8. Se decupează fiecare bandă începând cu banda corespunzătoare albuminei;
 - 6.9. Se mărunțește fiecare bandă și se introduce în eprubeta corespunzătoare;
 - 6.10. Se pipetează în fiecare eprubetă câte 5 ml soluție de eluare;
 - 6.11. Se agită energic;
 - 6.12. Pentru o bună eluare se lasă 30 min.;
 - 6.13. Se citește extincția fiecărei fracțiuni față de apă distilată la $\lambda = 590$ nm folosind un spectrofotometru;
 - 6.14. Se calculează ponderea fiecărei fracțiuni în amestec prin raportarea extincției sale la suma extincțiilor (5 fracțiuni): $c_i[\%] = 100 \cdot E_i / \sum E_j$.

Un exemplu de împrăștiere obținută la electroforeza triazinelor este redat în figură următoare:

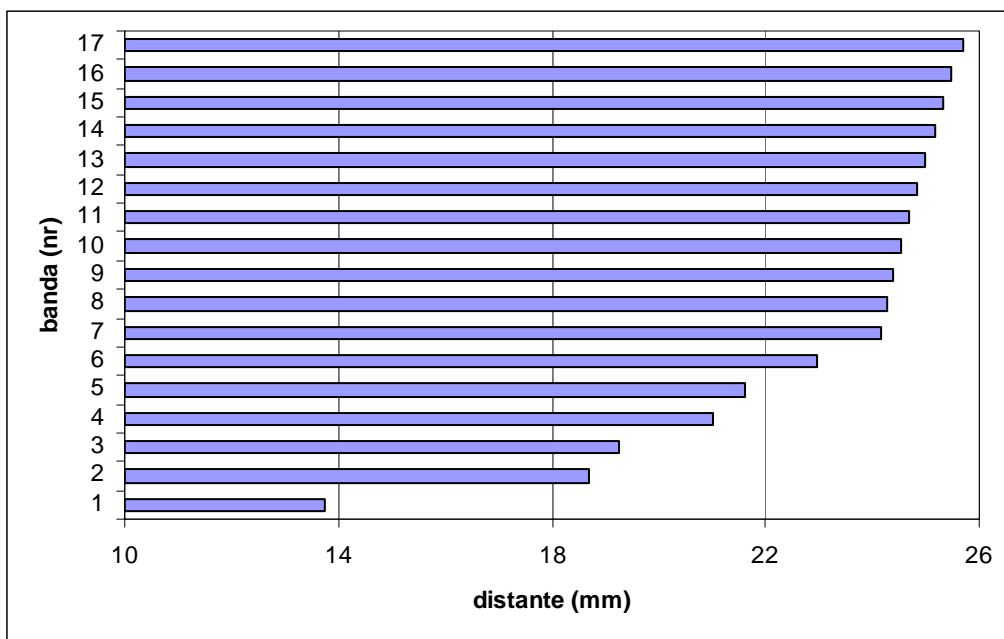
Procese la interfata fazelor: Modelare matematică, Optimizare numerică, Implementare web, cu aplicatii în separarea și caracterizarea seriilor de compuși chimici biologic activi



Rezultatele experimentale pentru cele două preparate de gel sunt redată în tabelul următor:

Deplasari	P1	P2	P3	P4	P5	P6	P7	P8	P9	P10	Medii
Banda1	13.7	13.7	13.7	13.8	13.7	13.9	13.9	13.6	13.8	13.8	13.76
Banda2	18.7	18.6	18.8	18.6	18.6	18.6	18.7	18.7	18.8	18.9	18.70
Banda3	19.1	19.3	19.3	19.1	19.3	19.3	19.4	19.2	19.3	19.1	19.24
Banda4	21.2	21.1	21.1	20.9	20.9	20.8	21.1	21.2	21	21	21.03
Banda5	21.5	21.7	21.7	21.6	21.5	21.5	21.6	21.6	21.7	21.8	21.62
Banda6	22.9	22.9	22.9	23	23.1	22.9	23	23	22.9	23	22.96
Banda7	24.2	24.2	24.3	24.1	24.1	24.2	24.3	24.1	24.1	24.2	24.18
Banda8	24.3	24.3	24.4	24.2	24.2	24.3	24.4	24.2	24.2	24.3	24.28
Banda9	24.4	24.4	24.5	24.3	24.3	24.4	24.7	24.3	24.3	24.4	24.40
Banda10	24.7	24.5	24.6	24.4	24.4	24.5	24.9	24.4	24.4	24.5	24.53
Banda11	24.8	24.6	24.7	24.5	24.5	24.7	25	24.5	24.7	24.8	24.68
Banda12	24.9	24.8	25	24.6	24.7	24.9	25.1	24.7	24.8	24.9	24.84
Banda13	25	25.1	25.1	24.7	24.9	25.1	25.2	24.8	24.9	25.1	24.99
Banda14	25.1	25.4	25.3	24.8	25	25.2	25.7	24.9	25	25.2	25.16
Banda15	25.6	25.5	25.6	25	25.2	25.3	-	25.1	25.1	25.7	25.34
Banda16	-	-	-	25.5	25.4	25.6	-	25.3	25.5	-	25.46
Banda17	-	-	-	-	-	-	-	25.7	-	-	25.70

Următorul grafic prezintă benzile medii înregistrate pentru separarea electroforetică amestecului de triazine.



Concluzii. Știind că frecvent un amestec de triazine conține peste 20 de triazine (rareori mergând până la 30), metoda de separare prin electroforeză a reușit separarea a cel puțin 57% dintre acestea și a cel mult 85% dintre acestea. Metoda electroforetică de separare a triazinilor se dovedește un foarte bun instrument în separarea triazinilor atunci când amestecul de triazine conține un număr redus de triazine (până la 15 triazine, aceasta fiind de fapt valoarea modei - cel mai frecvent număr, 4 din 10 cazuri - pentru numărul de benzi distinct identificate în separarea triazinilor). Pentru probe cu număr mare de triazine se impun metode cuplate de analiză cum ar fi metode cromatografice, la care optimizarea fazei mobile să permită o mai mare sensibilitate.

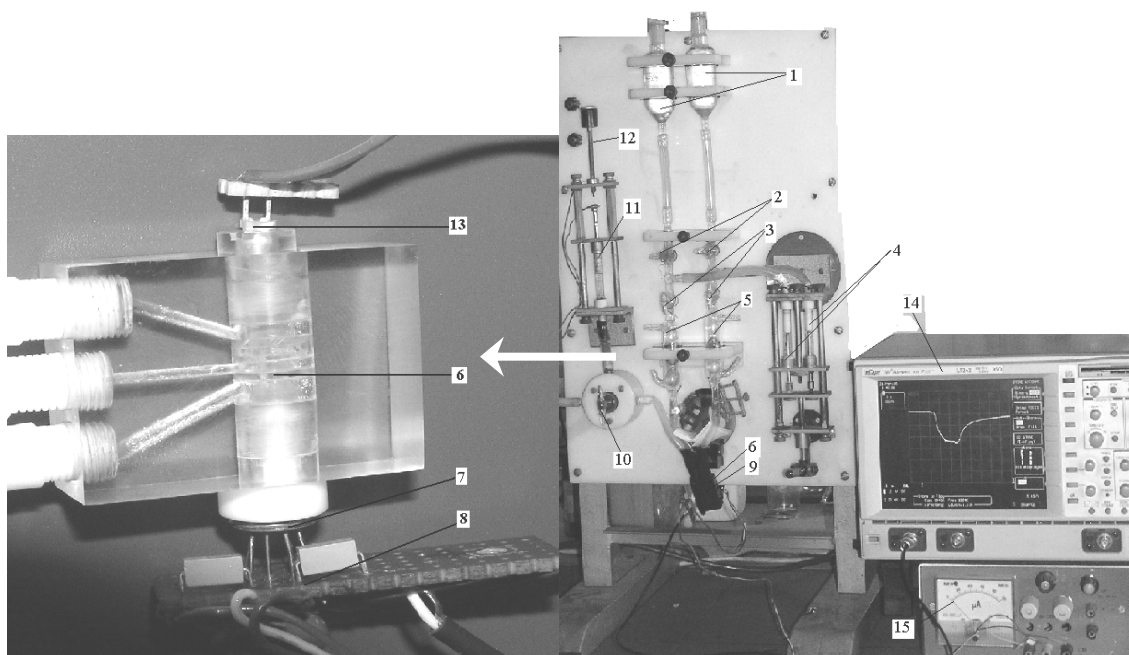
Activități și rezultate. Etapa II(2007). Obiectivul 1(Colectare date experimentale electroforeza, spectrofotometrie). Activitatea 2(Achiziție date spectrofotometrice).

Cu scopul studiului cinetic în mediu acid al reacției redox rapide a Cu(II) cu $S_2O_3^{2-}$, studiata anterior doar în mediu amoniacal [Byerley, John J., Fouda, Safaa A., Rempel, Garry L., J.C.S.Dalton, 1973, p. 889-893] (unde viteza este cu un ordin de mărime mai mica), s-a construit o instalație de curgere oprită, cu înregistrare spectrofotometrică. Aparatul urmărește evoluția reacției prin înregistrarea intensității luminoase transmise funcție de timp, intensitate care variază puternic datorita apariției aproape instantanee a unui complex colorat CuS_2O_3 și dispariția rapidă a acestuia.

Printre cei care au contribuit la perfecționarea aparaturii de urmărire cinetică a reacțiilor rapide se remarcă Wagner și Strehlow [Strehlow, H.; Krizan, M., Chem. Instrum., 5, 99, 1973] și [Wagner, I., Strehlow, H., Busse, G., Z. Physik. Chem., 123, 1, 1980], Sutin [Sutin, N., Gordon, B. M., J. Am. Chem. Soc., 83, 70, 1961], Barat [Barat, F., Gilles, L., Hickel B., Sutton J., J. Chem. Soc. (A), 1982, 1970], Goetz [Goetz, M., Ber. Bunsenges, 91, 616, 1987] și Comerford [Comerford, J., Mulgrave, Victoria, Australia, February, 1998].

Prima instalație stopped-flow construită la Facultatea de Chimie din Cluj-Napoca, s-a bazat pe antrenarea pistoanelor de către un motor electric prin fricțiune a unei roti cauciucate pe un disc metalic, fixat la capătul unei tije cu șanț elicoidal. Lumina provenea de la un spectrofotometru și se detecta cu un fotomultiplicator electronic. Aceasta instalație s-a utilizat la urmărirea cineticii reacției MnO_4^- cu $S_2O_3^{2-}$ [Niac, G., Giurgiu Marilena, Studia Universitatis Babes-Bolyai, Series Chemia, Fasciculus 1, Cluj-Napoca, 1971, p. 43-49].

Următoarea instalație (construită la Universitatea Tehnică din Cluj-Napoca - Dr. Mihaela Ligia UNGUREȘAN) a fost folosită pentru achiziția datelor spectrofotometrice [Ungureșan M.L., Niac G., Surducan E., Surducan V., *Instalație de curgere oprită pentru studiul cineticii reacțiilor rapide în soluții. Reacția dintre Cu^{2+} cu $S_2O_3^{2-}$* , **Revista de Chimie**, 58(1), 40-43, 2007]:



Legendă

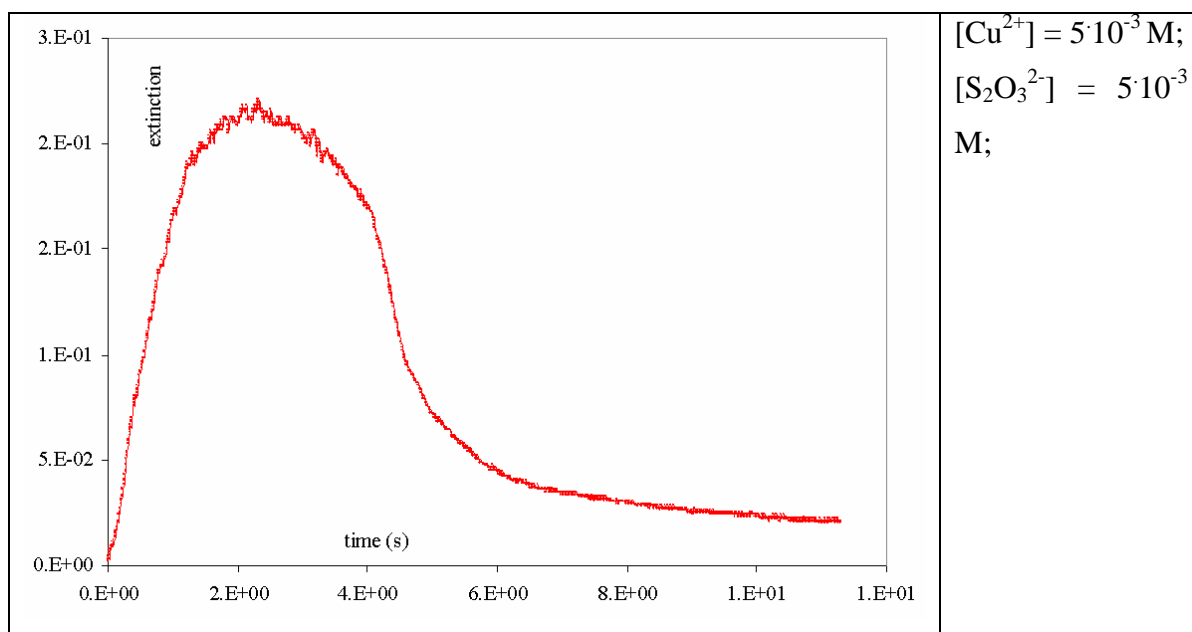
1. rezervoare cu soluțiile celor doi reactanți ($\text{Cu}(\text{ClO}_4)_2$; $\text{Na}_2\text{S}_2\text{O}_3$); 2. robineti superiori; 3. robineti inferiori; 4. sistem dozare reactanți; 5. refrigerenți; 6. celula de măsură; 7. traductor de măsură (detector cu fotodiodă); 8. circuit electronic pentru prelucrarea semnalului; 9. cameră obscură; 10. robinet cu trei căi pentru evacuarea produșilor de reacție; 11. electrod mobil; 12. electrod fix; 13. sursă de lumină monocromatică (LED); 14. osciloscop cu memorie; 15. microampermetru.

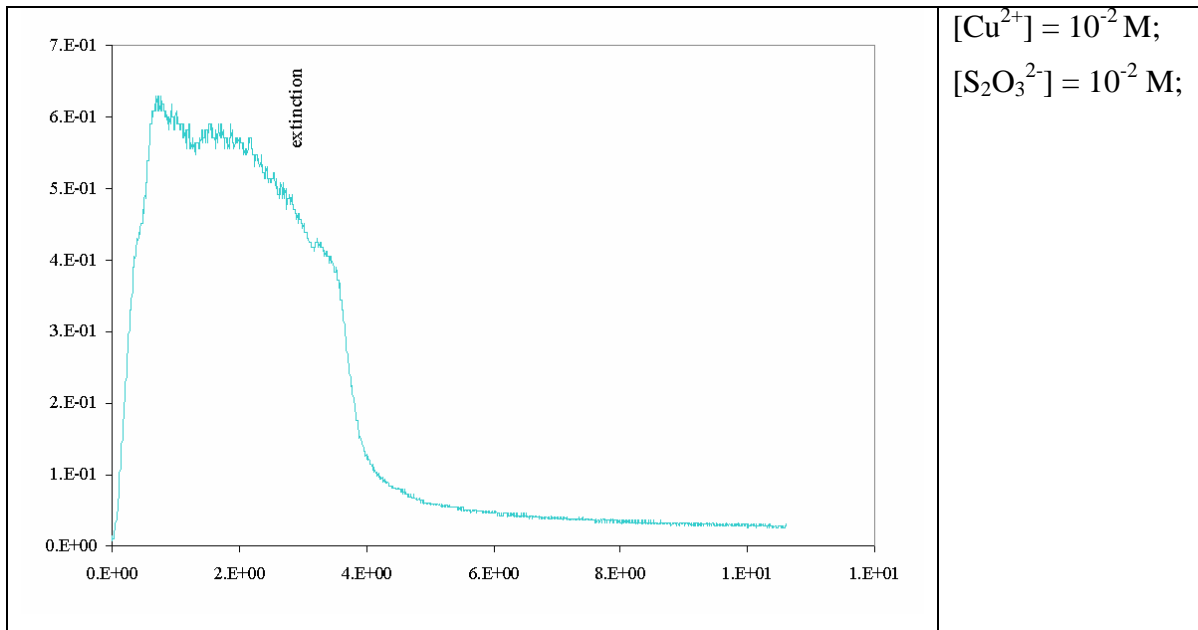
Celula de măsură din plexiglass este alcătuită din camera de amestecare CA de forma toroidală, două camere pentru intrarea celor doi reactanți prin ștuțuri și reactorul propriu-zis (camera de măsură CM) și o cameră de evacuare a produșilor de reacție prevăzută cu ștuțul de evacuare. Compartimentele de intrare comunică cu camera de amestecare prin canale oblice amplasate echidistant și decalate între ele. Astfel, se realizează o curgere turbulentă asigurând o amestecare aproape perfectă. Camera de amestecare CA are diametrul exterior $d_{\text{CAmax}} = 0,65$ cm, diametrul interior al torului $d_{\text{CAmin}} = 0,25$ cm și lungimea $L_{\text{CA}} = 0,06$ cm. În camera de măsură CM de formă cilindrică cu diametrul $d_{\text{CM}} = 0,25$ cm și lungime $L_{\text{CM}} = 0,4$ cm are loc reacția Cu^{2+} cu ioni tiosulfat, cu apariția intermediarului de reacție CuS_2O_3 al cărui studiu cinetic se urmărește. Cele două seringi identice (4) din sticla cu pistoane de teflon sunt utilizate pentru dozarea simultană a celor doi reactanți, în cantități egale, volumul pompat fiind de 3 ml reactant pe fiecare seringă în parte. Refrigerenții (5) sunt utilizați pentru termostatarea soluțiilor de reactanți la temperatura dorită necesară efectuării măsurătorilor cinetice. Camera de amestecare, în care are loc reacția dintre ionii Cu^{2+} și $\text{S}_2\text{O}_3^{2-}$, are două ferestre din cuarț care permit trecerea fluxului luminos monocromatic de la sursa de lumină spre detectorul conectat la circuitul electronic pentru prelucrarea semnalului. Ca detector s-a utilizat o fotodioda OPT 301 [Burr Brown IC, Data Book – Linear Products, 2002] care poate fi operată în domeniul $\pm 2,25$ la ± 18 V, la un curent de alimentare de $400\mu\text{A}$. Ea este

Procese la interfata fazelor: Modelare matematică, Optimizare numerică, Implementare web, cu aplicatii în separarea și caracterizarea seriilor de compuși chimici biologic activi

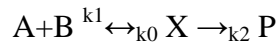
încapsulată ermetic într-un corp metalic (TO-99) prevăzut cu fereastră de sticla și putând lucra la temperaturi cuprinse în intervalul: -400°C - 850°C . Fotodioda prezintă un răspuns bun pentru lungimea de undă de interes 430 nm, egal cu 0,18 A/W și 0,18 V/ μW pentru tensiunea de ieșire. Intensitatea luminoasă a acesteia este de 6 cd. Semnalul obținut la ieșirea amplificatorului fotodiodei este aplicat unui osciloscop digital Le Croy LT 262 DSO, 350 MB, 1GS/s [Le Croy Corporation, Test & Measurement Products Catalog, 700 Chestnut Ridge Road, NY 10977, 2000] Osciloscopul lucrează în banda 0 - 350 MHz și este prevăzut cu memorie proprie și disc pentru salvarea datelor experimentale obținute. Momentul începerii înregistrării pe osciloscop a curbei variației intensității luminoase transmise funcție de timp este comandat automat de contactul electric realizat între electrodul mobil și electrodul fix. Electrodul mobil este rigid legat de pistonul din teflon al seringii în care produșii de reacție sunt evacuați. Seringa este montată invers astfel încât pistonul este deplasat pe verticală de lichidul acumulat. Momentul realizării contactului între cei doi electrozi este momentul opririi curgerii prin celula de măsură. Concomitent pistonul fiind blocat de electrodul fix, începe înregistrarea fotometrică a apariției și apoi a dispariției intermediarului de reacție colorat în albastru, cei doi electrozi având rolul unui întrerupător în circuitul osciloscopului. Robinetul cu trei căi confecționat din sticlă permite direcționarea soluției ce părăsește celula de măsură direct spre evacuare (în timpul spălării instalației) sau spre seringă cu electrodul mobil când proba este măsurată. Microampermetrul (15) permite vizualizarea continuă a curentului prin fotodioda, el având și rolul de protecție în cazul depășirii valorii maxime admise de $400\mu\text{A}$.

Următoarele grafice reprezintă datele experimentale de extincție la diferite concentrații ale reactanților:





Folosind datele obținute din 3 experimente (10^{-2} , $5 \cdot 10^{-3}$, 10^{-3} M pentru concentrațiile reactanților) și presupunând un model de cinetică de forma:



care presupune următoarele ecuații matematice între concentrațiile reactanților:

$$\frac{dX}{dt} = k_0 A^{y_0} B^{y_1} - k_1 X^{y_2} - k_2 X^{y_3} \quad \frac{dA}{dt} = -k_0 A^{y_0} B^{y_1} + k_1 X^{y_2} \quad \frac{dB}{dt} = -k_0 A^{y_0} B^{y_1} + k_2 X^{y_3} \quad \frac{dP}{dt} = k_2 X^{y_3}$$

Variabilele măsurate sunt $[X]$ (în termeni de extincție $E = \varepsilon[X]$, unde ε înglobează și constanta de experiment, lungimea camerei de amestecare și detecție) și timpul t .

Constantele necunoscute sunt ε , y_0 , y_1 , y_2 , y_3 , k_0 , k_1 , k_2 .

Scopul optimizării numerice a fost obținerea constantelor necunoscute pornind de la valorile cunoscute ale variabilelor. Expresiile diferențiale ce rezultă din ecuațiile matematice de mai sus sunt:

$$d[A] = -k_0[A]^{y_0}[B]^{y_1} dt + k_1[X]^{y_2} dt; \quad d[B] = -k_0[A]^{y_0}[B]^{y_1} dt + k_1[X]^{y_2} dt$$

$$d[X] = (k_0[A]^{y_0}[B]^{y_1} - k_1[X]^{y_2} - k_2[X]^{y_3}) dt$$

Ecuțiile de iterație numerică sunt:

$$D_{i-1} = k_0 A_{i-1}^{y_0} B_{i-1}^{y_1} dt - k_1 X_{i-1}^{y_2} dt$$

$$A_i = A_{i-1} - D_i; \quad B_i = B_{i-1} - D_i; \quad X_i = X_{i-1} + D_{i-1} - k_2 X_{i-1}^{y_3}$$

Expresia ce a fost supusă algoritmului de optimizare numerică este:

$$\hat{E} = a[X], \text{ unde } \hat{E} \text{ este estimatorul extincției experimentale}$$

Valorile de start folosite în optimizare au fost:

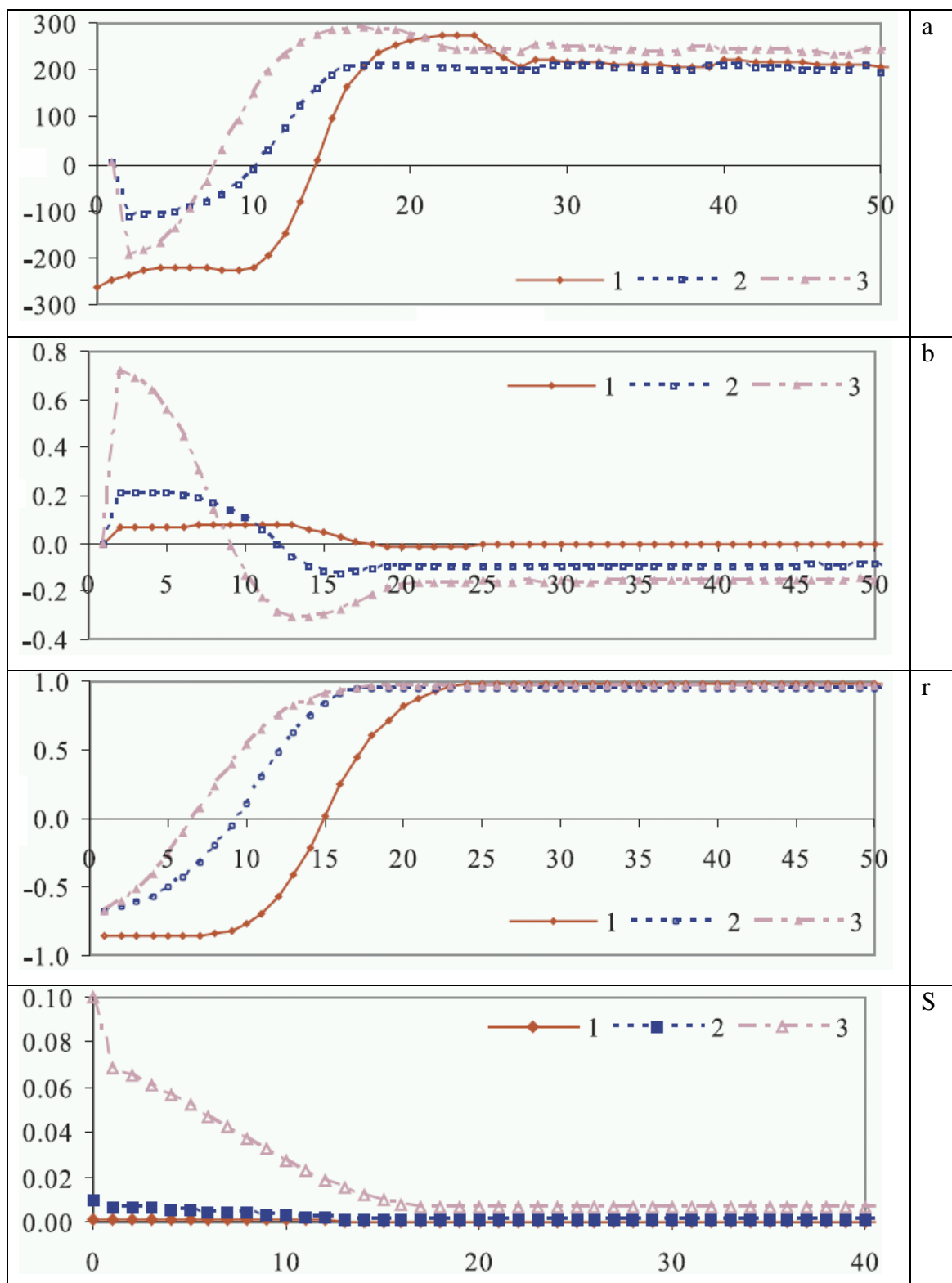
- ÷ $[A]_0 = 10^{-3}; 5 \cdot 10^{-3}; 10 \cdot 10^{-3}$ (în funcție de experiment);
- ÷ $[B]_0 = 10^{-3}; 5 \cdot 10^{-3}; 10 \cdot 10^{-3}$ (în funcție de experiment);
- ÷ $[X]_0 = 0;$

Procese la interfața fazelor: Modelare matematică, Optimizare numerică, Implementare web, cu aplicații în separarea și caracterizarea seriilor de compuși chimici biologic activi

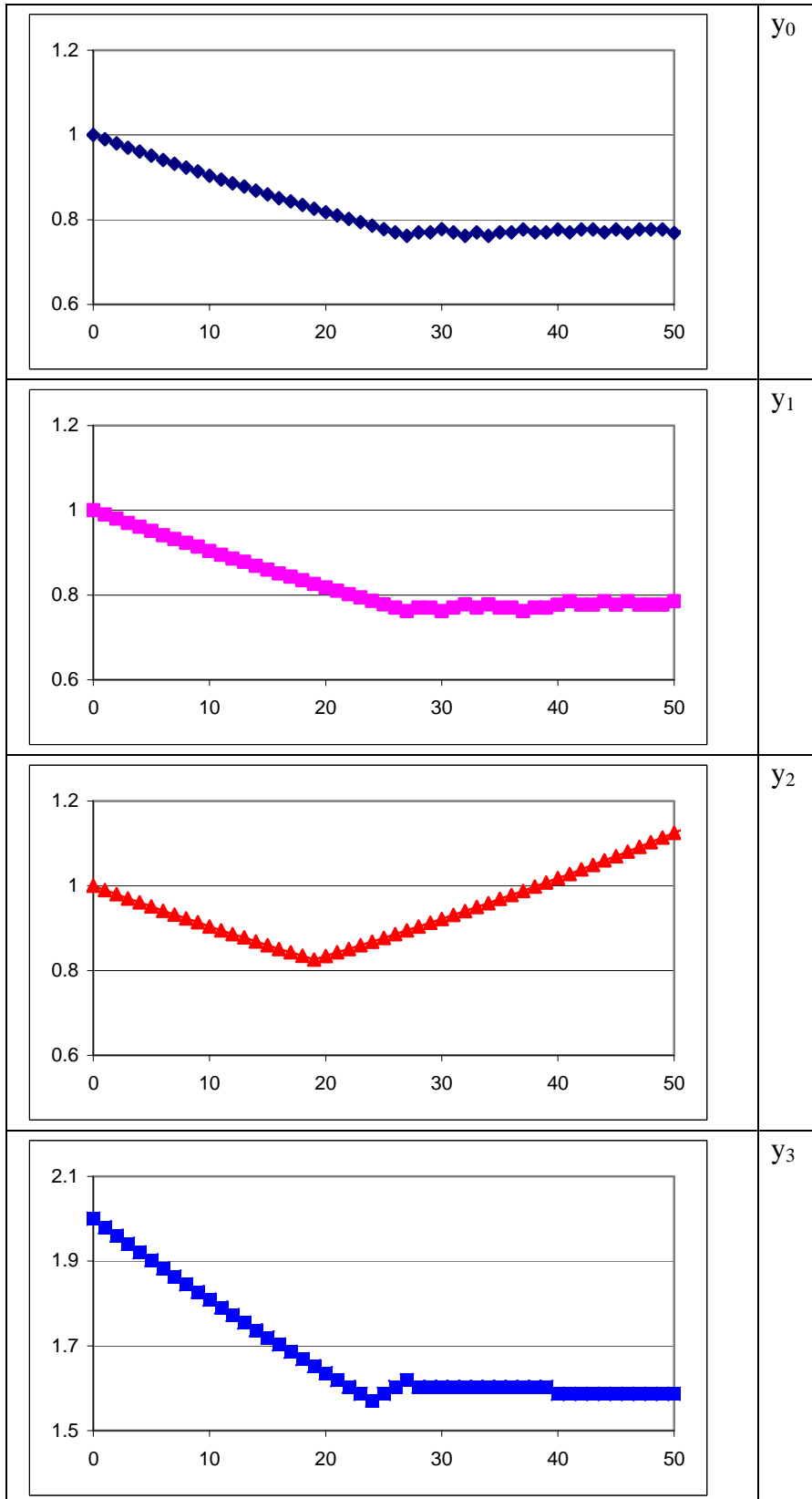
$\div k_0 = 1; k_1 = 1; k_2 = 1; y_0 = 1; y_1 = 1; y_2 = 1; y_3 = 1;$

$\div \varepsilon_0 = 200.$

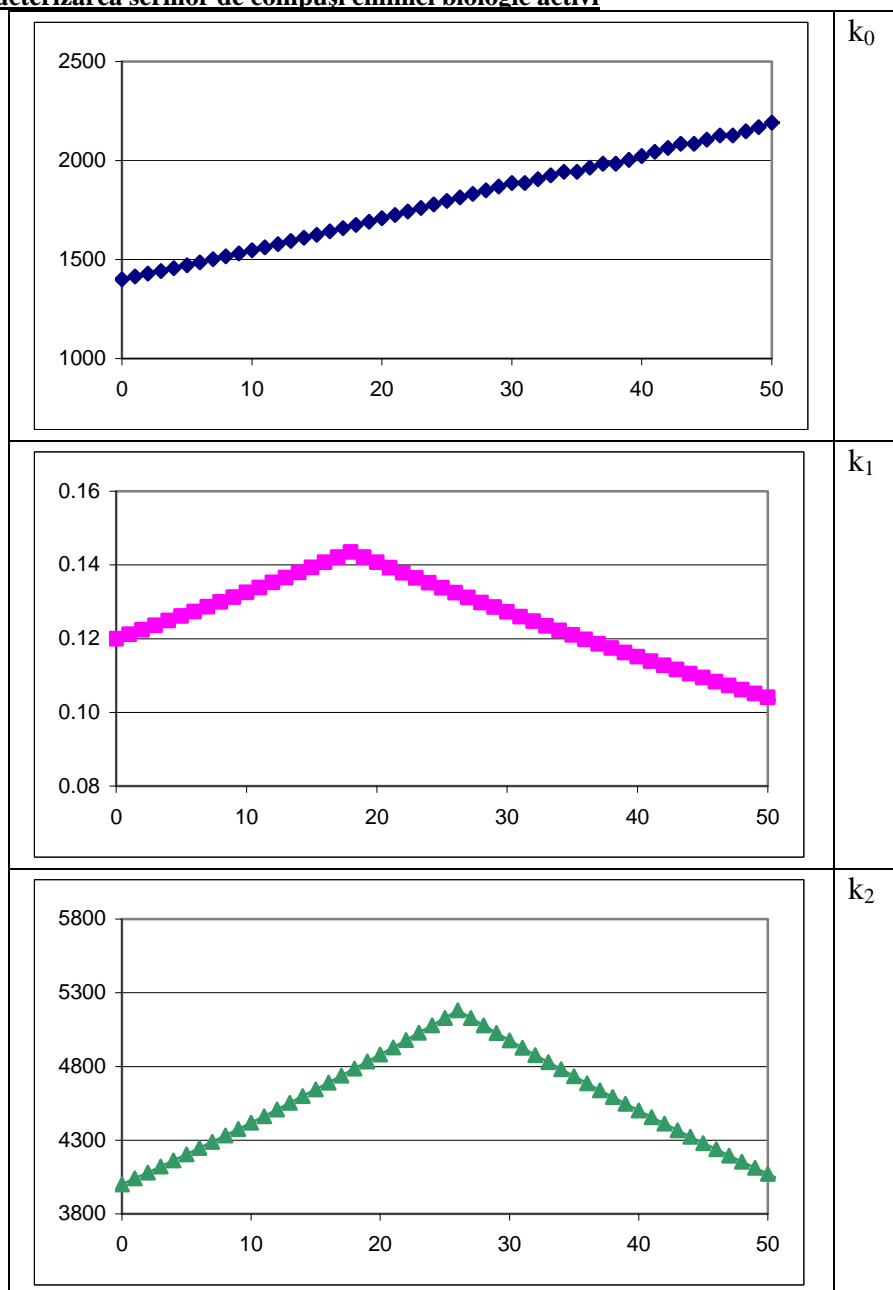
A fost aplicată procedura de optimizare pentru fiecare set de date experimentale (1100 de perechi extincție-timp pentru 10^{-3} , 1300 pentru $5 \cdot 10^{-3}$, 6500 pentru $10 \cdot 10^{-3}$) și rezultatele optimizării (în termeni de coeficienți ai ecuației de regresie a și b, corelație r și sumă de reziduuri S) sunt redată în figurile următoare în funcție de pasul de iterație:



Figurile de mai sus arată că convergența se obține pentru toate cele 3 cazuri începând cu iterația 25. Valorile constantelor necunoscute în funcție de iterație sunt redată în graficele următoare (pentru unul dintre experimente):



Procese la interfața fazelor: Modelare matematică, Optimizare numerică, Implementare web, cu aplicații în separarea și caracterizarea seriilor de compuși chimici biologic activi



Rezultatele statisticii variaționale pe cele 3 seturi de date sunt redată în tabelul de mai jos:

E	y_0	y_1	y_3	k_0	k_2	S	C_0	a	b	r	IS
1	0.82	0.81	1.51	3.46	2.30	1.81	1	219	-0.0005	0.980	107
2	0.80	0.79	1.57	1.02	2.04	66.6	5	189	-0.0821	0.955	99
3	0.75	0.75	1.57	0.82	2.10	582	10	227	-0.1300	0.962	99

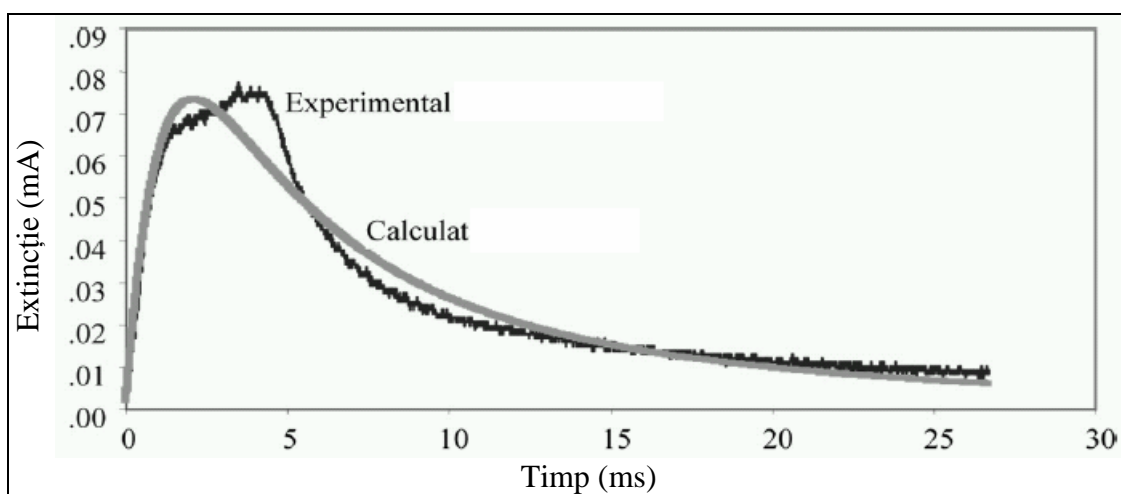
k_0 și k_2 : valori $\cdot 10^{-3}$

Așa cum arată graficele de mai sus, valorile pentru ϵ , y_0 , y_1 , y_3 , k_0 și k_2 obținute reprezintă certitudini (toate acestea stabilizându-și valoarea peste iterația 107) în timp ce valorile pentru y_2 și k_1 reprezintă incertitudini (neputând fi obținute prin procedura de optimizare). Următorul tabel redă valorile pentru certitudini împreună cu intervalele de încredere obținute:

Mărime	Simbol	Valoare
Ordin parțial de reacție reactant	y_0	0.787 ± 0.08

Ordin parțial de reacție reactant	y_1	0.787 ± 0.08
Ordin parțial de reacție intermediar	y_3	1.53 ± 0.1
Constantă de viteză a reacției de echilibru directe	k_0	$(1.8 \pm 0.2)(1 + [A]_0[B]_0 \cdot 10^4) \cdot 10^3$
Constantă de viteză a reacției ireversibile	k_2	$(2.15 \pm 0.2) \cdot 10^3$
Coeeficient de extincție	ε	211 ± 22

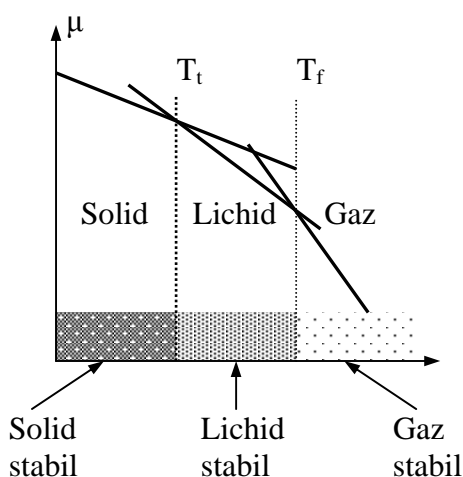
Următorul grafic redă suprapunerile ce rezultă din aplicarea constantelor necunoscute obținute pentru fiecare experiment peste valorile experimentale obținute din experimentul în care concentrațiile inițiale ale reactanților au fost de 10^{-2} (toate cele 3 curbe teoretice fiind în fapt suprapuse una peste cealaltă și peste valoarea lor medie din tabelul de mai sus):



Activități și rezultate. Etapa II(2007). Obiectivul 2(Dezvoltarea modelelor matematice). Activitatea 3(Înglobarea proprietăților de suprafață ale lichidelor).

Cele mai simple aplicații ale termodinamicii la sisteme importante din punct de vedere chimic sunt tratarea tranzițiilor de fază pe care le suferă substanțele pure. Se va arăta că o diagramă de fază este un grafic al domeniilor de presiune și temperatură în care faza unei substanțe este cea mai stabilă (adică are energia *Gibbs* minimă). O *fază* a unei substanțe este o formă de materie complet uniformă atât în compoziție cât și în starea fizică. Avem fază solidă, lichidă, gazoasă, dar avem și diferite faze solide (fosforul alb și fosforul roșu, diamantul și grafitul). O *tranziție de fază* este conversia spontană a unei faze în alta și are loc la o temperatură caracteristică pentru o presiune dată. Astfel, gheața este faza stabilă a apei sub 0°C iar peste 0°C lichidul este mai stabil. Aceasta arată că *potențialul chimic* al gheții este mai mic decât cel al apei lichide și notăm: $\mu(s) < \mu(l)$ la $t^{\circ}\text{C} < 0^{\circ}\text{C}$ și $\mu(s) > \mu(l)$ la $t^{\circ}\text{C} > 0^{\circ}\text{C}$. *Temperatura de tranziție* este temperatura la care cele două potențiale chimice corespund: $\mu(s) = \mu(l)$, $t_{\text{tranziție}}$

Figura reprezintă dependența schematică de temperatură a potențialului chimic al fazelor solidă, lichidă și gazoasă ale unei substanțe.

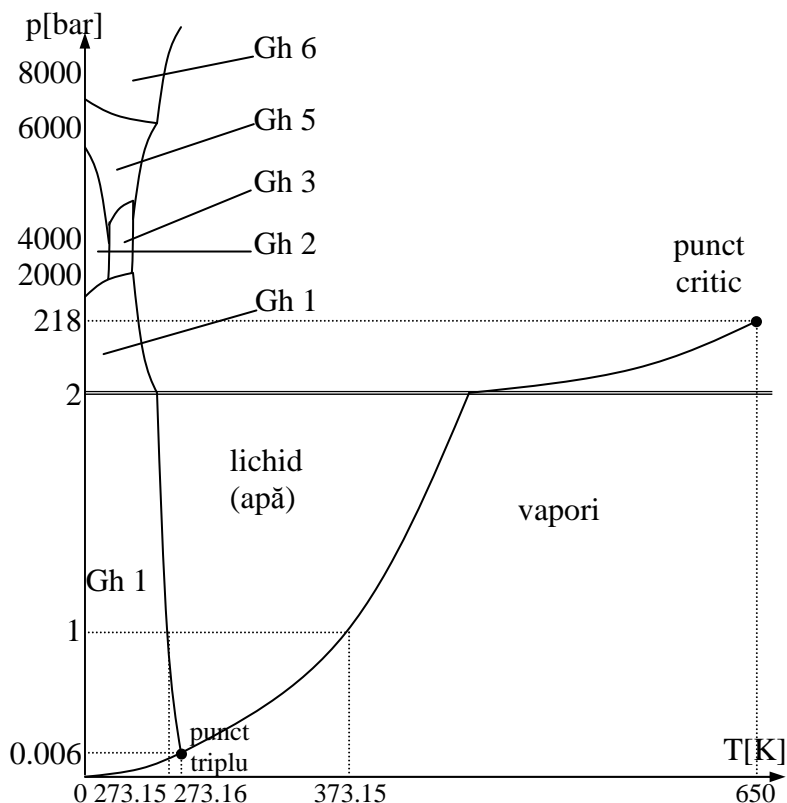


În practică liniile sunt curbe. Faza cu potențialul chimic cel mai mic la o temperatură este faza cea mai stabilă la acea temperatură. Temperaturile de tranziție, adică temperaturile de topire și de fierbere sunt temperaturile la care potențialele chimice sunt egale. La temperaturi și presiuni normale potențialul chimic al grafitului este mai mic decât al diamantului, deci există o tendință termodinamică de conversie a diamantului în grafit. Pentru ca această tranziție să se producă, atomii de C trebuie să-și schimbe locurile, proces extrem de lent într-un solid, cu excepția temperaturilor ridicate. Viteza atingerii echilibrului este o problemă de *cinetică*. Fazele instabile termodinamic, dar care persistă pentru că tranziția este împiedicată cinetic se numesc *faze metastabile*. *Diagrama de fază* a unei substanțe indică regiunile de presiune și temperatură în care diferitele faze sunt stabile termodinamic. Frontierele între regiuni, *frontierele de fază*, arată valorile p și T la care două faze coexistă în echilibru. *Frontiera de fază lichid-vapori* este o curbă a presiunii de vapori a lichidului

în funcție de temperatură. *Frontiera de fază solid-vapori* este o curbă a presiunii de vapori la sublimare în funcție de temperatură. Condiția de evaporare *liberă* (în atmosferă sau în sistem controlat) se numește fierbere. Temperatura la care presiunea de vapori a unui lichid este egală cu presiunea externă se numește *temperatură de fierbere* (la acea presiune). Pentru cazul special al presiunii de 1 atm se numește *punct de fierbere* T_f . Dacă fenomenul are loc la 1 bar atunci se numește punct de fierbere standard. Punctul normal de fierbere al apei este de 100°C iar punctul său standard de fierbere este de 99.6°C. În mod analog, temperatura la care, sub o presiune dată, lichidul și solidul coexistă în echilibru se numește *temperatură de topire*. Întrucât o substanță se topește la exact aceeași temperatură la care se solidifică, temperatura de topire este aceeași cu *temperatura de solidificare*. Există un set de condiții în care toate cele trei faze coexistă simultan în echilibru. Acesta reprezintă *punctul triplu*. Localizarea punctului triplu al unei substanțe pure este în afara controlului nostru. Punctul triplu al apei este situat la 273.16K și 611 Pa iar cele trei faze ale apei nu mai coexistă în echilibru la nici o altă pereche de presiune și temperatură. Pe această *invarianță* a punctului triplu se bazează folosirea sa în definirea scalei termodinamice de temperatură. Diagrama de fază a apei este redată în figura următoare. Câteva observații se pot face:

- ÷ Linia solid-lichid arată că sunt necesare presiuni enorme pentru a produce modificări semnificative;
- ÷ Linia are o pantă negativă până la 2 kbar - temperatura de topire scade cu creșterea presiunii.
- ÷ Motivul pentru această comportare neobișnuită este scăderea de volum care are loc la topire și deci creșterea presiunii favorizează trecerea solidului în lichid.
- ÷ Scăderea de volum este datorată structurii moleculare foarte afânate a gheții: moleculele sunt menținute la distanță (ca și împreună) prin legăturile de hidrogen dintre ele. Structura se distruge parțial la topire și lichidul este mai dens decât solidul.
- ÷ La presiuni mari, devin stabile diferite forme de gheață, întrucât legăturile dintre molecule sunt modificate de tensiune.
- ÷ Unele dintre aceste faze se topesc la temperaturi ridicate (numite gheață 1, gheață 2, gheață 3, gheață 5, gheață 6).
- ÷ Gheața 4 a fost reconsiderată ca o altă fază lichidă, numită poliapă.
- ÷ Gheața 7 se topește la 100°C, dar există numai peste 25kbar.
- ÷ Mai există încă 5 puncte triple în diagramă în afară de cel în care coexistă gheața cu lichidul și vaporii. Fiecare are loc însă la presiuni și temperaturi fixe, bine definite.

Procese la interfata fazelor: Modelare matematică, Optimizare numerică, Implementare web, cu aplicatii în separarea și caracterizarea seriilor de compuși chimici biologic activi



Dintre toate fazele unei substanțe, cea mai stabilă este faza cu potențialul chimic cel mai mic. Fie un proces de tranziție de fază ca cel reprezentat în figura de mai sus. Fie n_1 numărul de moli din faza F_1 și n_2 numărul de moli din faza F_2 . Dacă potențialele chimice ale celor două faze sunt μ_1 și μ_2 atunci energiile Gibbs ale celor două faze și ale sistemului sunt:

$$G_1 = \mu_1 \cdot n_1, G_2 = \mu_2 \cdot n_2, G = G_1 + G_2 = \mu_1 \cdot n_1 + \mu_2 \cdot n_2$$

Dacă o cantitate de substanță dn trece din faza F_1 în faza F_2 , atunci:

$$dG_1 = -\mu_1 \cdot dn, dG_2 = \mu_2 \cdot dn, dG = dG_1 + dG_2 = dn \cdot (\mu_2 - \mu_1)$$

Pentru un sistem izolat: $dG = d(H - TS) = 0$. Deoarece dn și $(\mu_2 - \mu_1)$ sunt variabile independente, trebuie ca la echilibru:

$$dn = 0; \mu_2 - \mu_1 = 0$$

La echilibru potențialele chimice ale celor două faze coincid: $\mu_2 = \mu_1$.

La echilibru, potențialul chimic al unei substanțe este același în toată proba, indiferent de numărul fazelor prezente.

Dependența de temperatură a energiei Gibbs la presiune constantă este:

$$\left(\frac{\partial G}{\partial T} \right)_p = -S$$

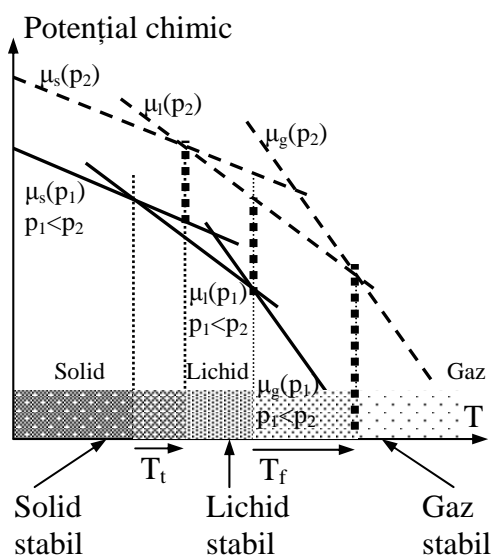
asa încât pentru o substanță pură se poate scrie $G = \mu \cdot n$ și:

$$\left(\frac{\partial \mu}{\partial T}\right)_p = -\frac{S}{n}$$

Relația exprimă dependența potențialului chimic de temperatură la presiune constantă. Ea arată că odată cu creșterea temperaturii ($S > 0$), potențialul chimic scade. După cum s-a discutat anterior, panta fazei lichide este mai abruptă decât panta fazei solide și mai puțin abruptă decât panta fazei gazoase. În mod similar cu ecuațiile anterioare avem:

$$\left(\frac{\partial G}{\partial p}\right)_T = V, \quad \left(\frac{\partial \mu}{\partial p}\right)_T = \frac{V}{n}$$

Relația de mai sus exprimă dependența potențialului chimic de presiune la temperatură constantă. Ea arată că odată cu creșterea presiunii (volumul $V > 0$), potențialul chimic crește. În majoritatea cazurilor (cu excepția apei) $V(s) < V(l)$ și deci potențialul chimic variază mai rapid în fază lichidă decât solidă. La fel, $V(l) < V(g)$ și potențialul chimic variază mai rapid în fază gazoasă decât lichidă (figura de mai jos).



Fie două faze F_1 și F_2 ale unei substanțe pure în echilibru la o presiune și temperatură date. Atunci $\mu(F_1, p, T) = \mu(F_2, p, T)$. Fie acum o variație infinitesimală a lui p și a lui T astfel încât cele două faze să rămână în echilibru (în acest caz deplasarea se face pe drumul descris de curba de echilibru de faze). De aici rezultă că: $d\mu(F_1, p, T) = d\mu(F_2, p, T)$.

Folosind ecuațiile anterioare, diferențiala totală a lui μ se poate scrie:

$$d\mu = d\mu_p + d\mu_T = -S_m \cdot dT + V_m \cdot dp$$

Dacă scriem această ecuație pentru cele două faze, și egalăm, obținem:

$$d\mu(F_1) = -S_m(F_1)dT + V_m(F_1)dp = -S_m(F_2)dT + V_m(F_2)dp = d\mu(F_2)$$

de unde rezultă *ecuația Clapeyron*:

$$\frac{dp}{dT} = \frac{S_m(F_2) - S_m(F_1)}{V_m(F_2) - V_m(F_1)} = \frac{\Delta S_m(F_1, F_2)}{\Delta V_m(F_1, F_2)}$$

Procese la interfata fazelor: Modelare matematică, Optimizare numerică, Implementare web, cu aplicații în separarea și caracterizarea seriilor de compuși chimici biologic activi

Echilibrul solid - lichid

Se știe că topirea este însoțită de o variație molară de entalpie $\Delta_{\text{top}}H$ și de o variație de entropie $\Delta_{\text{top}}H/T$. Obținem:

$$\frac{dp}{dT} = \frac{\Delta_{\text{top}}H}{T\Delta_{\text{top}}V}$$

Entalpia de topire este pozitivă (excepție doar ^3He); variația de volum este pozitivă și mică (excepție H_2O). Pe un interval suficient de mic, $\Delta_{\text{top}}H/\Delta_{\text{top}}V$ nu variază semnificativ și integrând obținem *ecuația lui James Thompson*:

$$p_2 = p_1 + \frac{\Delta_{\text{top}}H}{\Delta_{\text{top}}V} \ln\left(\frac{T_2}{T_1}\right)$$

Pentru variații mici ale temperaturii, logaritmul se aproximează prin $(T_2 - T_1)/T_1$:

$$p_2 = p_1 + \frac{\Delta_{\text{top}}H}{T_1\Delta_{\text{top}}V} \cdot (T_2 - T_1)$$

Echilibrul lichid-vapori

Analog se obține:

$$\frac{dp}{dT} = \frac{\Delta_{\text{vap}}H}{T\Delta_{\text{vap}}V}$$

unde dp/dT este pozitiv, dar mult mai mic decât pentru echilibrul solid-lichid.

În acest caz, parametrul relativ constant este $\Delta_{\text{vap}}S = \Delta_{\text{vap}}H/T \approx 85 \text{ JK}^{-1}\text{mol}^{-1}$ și se numește *constanta lui Trouton*, c_T :

$$\frac{dp}{dT} = \frac{c_T}{\Delta_{\text{vap}}V}$$

De asemenea, $\Delta_{\text{vap}}V$ se poate aproxima prin $V_m(\text{g})$ ($V_m(\text{l}) \ll V_m(\text{g})$).

Valori calculate ale presiunii funcție de temperatură la presiunea de vapori a apei

t(°C)	-5	0	5	10	20	30	70	80	90	100
p(atm)	0.004	0.006	0.009	0.012	0.024	0.044	0.32	0.48	0.70	1.00

Echilibrul solid-vapori

Analog se obține:

$$\frac{d(\ln p)}{dT} = \frac{\Delta_{\text{sub}}H}{RT^2}, p_2 = p_1 \cdot \exp\left(-\frac{\Delta_{\text{sub}}H}{R}\left(\frac{1}{T_2} - \frac{1}{T_1}\right)\right)$$

Valori calculate ale presiunii funcție de temperatură la presiunea de vapori a apei

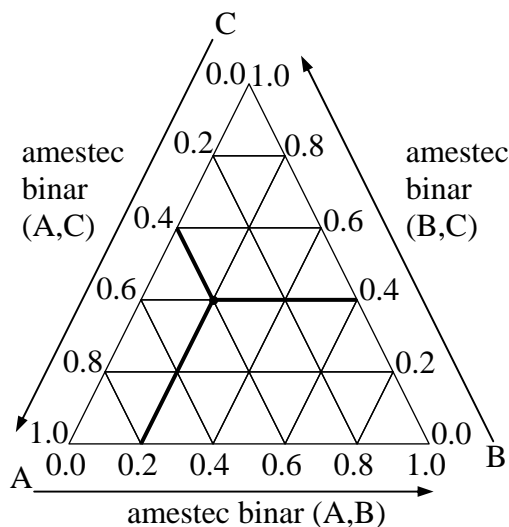
t(°C)	-10	-5	0	5
p(atm)	0.003	0.004	0.006	0.09

Numărul de faze al unui sistem îl notăm cu P . Sisteme formate dintr-o singură fază ($P = 1$) sunt: un gaz sau un amestec gazos, un cristal, două lichide total miscibile, gheața, o bucată întregă de material solid sau fărâmițată în bucăți mai mici. Sisteme cu două faze ($P = 2$) sunt: gheața cu apă, staniu topit în amestec cu staniu solid. Sisteme cu mai multe faze: carbonatul de calciu în descompunere termică ($P = 3$: $\text{CaCO}_3(\text{s})$, $\text{CaO}(\text{s})$, $\text{CO}_2(\text{g})$). Un aliaj a două metale este monofazic ($P = 1$) dacă metalele sunt miscibile și bifazic ($P = 2$) dacă metalele sunt nemiscibile. Un *constituent* al unui sistem este o specie chimică (ion sau moleculă) prezentă în acesta. Un amestec de etanol+apă are doi constituenți. Un *component* al unui sistem este un constituent chimic independent al sistemului. *Numărul de componente* C este numărul minim de specii independente necesare pentru a defini compoziția *tuturor fazelor* existente în sistem. De aici rezultă că dacă nu au loc reacții chimice, numărul de componente este egal cu numărul de constituenți. *Varianța* F a unui sistem este dată de numărul de variabile intensive care pot varia independent fără a perturba numărul de faze în echilibru. Într-un sistem monocomponent monofazic ($C = 1$, $P = 1$) presiunea și temperatura pot fi variate independent fără a schimba numărul de faze $\Rightarrow F = 2$. Un astfel de sistem este bivariant (are 2 grade de libertate). Dacă două faze sunt în echilibru atunci la o variație de temperatură este necesară o variație dată de curba de tranziție de fază pentru a păstra echilibrul fazelor, deci $F = 1$. Evident, punctul triplu are $F = 0$.

Legea fazelor exprimă relația generală între varianța F , numărul de componente C și numărul de faze la echilibru P (Figura 8.10), stabilită de Gibbs: $F = C - P + 2$. În sisteme cu trei componente ($C = 3$) legea fazelor este: $F = 5 - P$, deci varianța maximă este 4. Pentru T și p constante, rămân 2 grade de libertate, ce reprezintă fracțiile molare a 2 componente. Un mod de reprezentare a variației

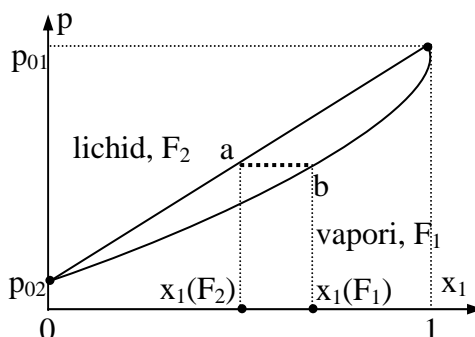
Procese la interfața fazelor: Modelare matematică, Optimizare numerică, Implementare web, cu aplicații în separarea și caracterizarea seriilor de compuși chimici biologic activi

echilibrului de fază cu compoziția unui sistem ternar este folosirea unei diagrame Snyder, ca în figura de mai jos. Frațiile molare ale celor 3 componenți satisfac relația: $x_A + x_B + x_C = 1$.



Fiecare din laturile triunghiului reprezintă compoziția unui amestec binar, în timp ce interiorul triunghiului definește amestecuri ternare. Punctul marcat pe figură reprezintă un amestec ternar în care $x_A = 0.2$, $x_B = 0.4$ și $x_C = 0.4$.

Legea lui Raoult descrie legătura între presiunile parțiale de vapori a unei soluții ideale. Fie F_1 o fază de vapori și F_2 o fază lichidă (figura de mai jos).

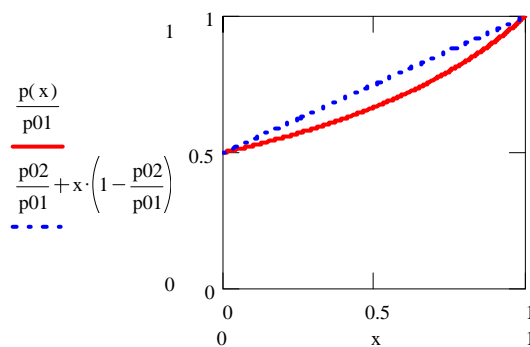


Atunci: $p_1(F_1) = x_1(F_2) \cdot p_{01}$, $p_2(F_2) = x_2(F_2) \cdot p_{02}$, $p = p_1(F_1) + p_2(F_1) = p_{02} + (p_{01} - p_{02}) \cdot x_1(F_1)$. Din ecuații rezultă că presiunea amestecului de vapori variază liniar cu compoziția de la p_{01} (presiunea de vapori a primului component dacă s-ar afla singur în întreg volumul, când $x_1 = 1$) la p_{02} (pt. $x_1 = 0$).

Legea Dalton dă presiunile parțiale în funcție de fracțiile molare și presiunea p : $p_1(F_1) = x_1(F_1) \cdot p$; $p_2(F_1) = x_2(F_1) \cdot p$. Legea Dalton se poate combina cu legea Raoult obținându-se:

$$p = \frac{p_{01}p_{02}}{p_{01} + (p_{02} - p_{01}) \cdot x_1(F_1)}$$

care se poate reprezenta grafic (figura de mai jos).



În continuare, reacțiile chimice vor fi tratate din punctul de vedere al fenomenelor care au loc la nivel molecular. Există patru modele frecvent folosite în acest tip de abordare, care de altfel vor constitui obiectul analizei în detaliu: teoria ciocnirilor, teoria difuziei, teoria complexului activat și teoria suprafețelor de potențial.

Teoria ciocnirilor este utilă pentru analiza reacțiilor dintre specii simple în fază gazoasă. Cu ajutorul ei se poate calcula constanta de viteză din parametri de stare. Să presupunem următoarea reacție:



Fie Z_{12} numărul de ciocniri dintre R_1 și R_2 din unitatea de volum și în unitatea de timp, numit *densitate de ciocniri*. Expresia densității de ciocniri se deduce succesiv din relațiile:

$$\bar{v} = \left(\frac{8kT}{\pi m_0} \right)^{1/2}, \quad \bar{v}_r = \sqrt{2} \cdot \bar{v} \text{ (viteză relativă)}, \quad z_1 = \sigma \cdot \bar{v}_r \cdot N_2/V,$$

unde z_1 - frecvența de ciocnire a unei molecule de R_2 , σ - secțiunea de ciocnire, N_2 număr de molecule R_2 din volumul V). Înmulțind cu N_1/V , numărul de molecule de R_1 din unitatea de volum, rezultă:

$$Z_{12} = N_1 z_1 = N_1 N_2 \frac{\sigma}{V^2} \cdot \sqrt{2} \cdot \left(\frac{8kT}{\pi \mu} \right)^{1/2}$$

unde s-a înlocuit masa unei molecule cu masa redusă μ ; se mai folosesc relațiile:

$$\mu = \frac{m_{01} \cdot m_{02}}{m_{01} + m_{02}}, \quad N_1 = N_A \cdot [R_1] \cdot V, \quad N_2 = N_A \cdot [R_2] \cdot V$$

și rezultă:

$$Z_{12} = N_A^2 \cdot \sigma \cdot [R_1] \cdot [R_2] \cdot \sqrt{2} \cdot \left(\frac{8kT}{\pi \mu} \right)^{1/2}$$

Nu toate aceste ciocniri sunt eficiente pentru transformarea reactanților în produși. Doar acele ciocniri în care energia implicată este suficient de mare sunt efective. Este deci necesar să evaluăm funcția de distribuție a energiilor moleculelor. Moleculele de gaz au energii cinetice cuprinse între 0 și ∞ cu variație continuă și sunt distribuite după o funcție de distribuție de tip

Procese la interfața fazelor: Modelare matematică, Optimizare numerică, Implementare web, cu aplicații în separarea și caracterizarea seriilor de compuși chimici biologic activi

Maxwell; rămâne să stabilim expresia acestei funcții de distribuție. Notăm această funcție de distribuție cu h . Folosim ecuația (3.11), care dă expresia distribuției modulului vitezei moleculelor:

$$f(s) = \alpha \cdot s^2 \cdot e^{-Ms^2/2RT}$$

Exprimând acum energia cinetică, $u(s)$, există relația:

$$f(s) = h(u(s)) = h\left(\frac{Ms^2}{2}\right)$$

deoarece este o singură funcție de distribuție a vitezelor. Această expresie încă nu rezolvă problema; trebuind identificat h . Relația se poate exprima astfel:

$$f(s) = \frac{2\alpha}{M} \cdot \frac{Ms^2}{2} \cdot e^{-\frac{Ms^2}{2} \cdot \frac{1}{RT}}$$

de unde $h(U)$ este:

$$h(U) = \frac{2\alpha}{M} \cdot u \cdot e^{-\frac{u}{RT}} = \beta \cdot U \cdot e^{-\frac{u}{RT}}$$

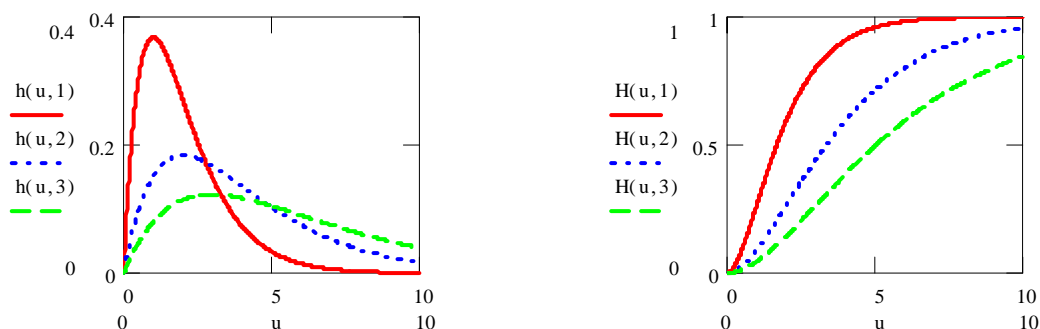
În identificarea lui β se ține seama de:

$$\int_0^{\infty} h(u) du = 1 \Rightarrow \beta = \frac{1}{(RT)^2}$$

și $h(u)$ are expresia:

$$h(u) = \frac{u}{(RT)^2} \cdot e^{-\frac{u}{RT}}$$

În figura de mai jos sunt reprezentate funcția de distribuție $h(U,RT)$ și funcția de probabilitate $H(U,RT) = \int_{[0,U]} h(x,RT) dx$ pentru diferite valori ale produsului $RT = 1, 2, 3$.



În aceste grafice se observă că odată cu creșterea temperaturii (creșterea produsului kT) crește probabilitatea de a găsi molecule cu energie u mai mare.

Această energie este foarte importantă în ciocnirile între reactanți, când transformarea acestora în produși de reacție se petrece atunci când energia acestora depășește un prag, E_a numit energie de activare.

Se poate calcula expresia probabilității pentru energiile mai mari decât E_a ; aceasta având expresia:

$$P(U > E_a) = \int_{E_a}^{\infty} h(u) du = \left(1 + \frac{E_a}{RT}\right) \cdot e^{-\frac{E_a}{RT}}$$

Viteza de reacție este produsul dintre densitatea de ciocniri și probabilitatea ca ciocnirea să aibă energie suficientă:

$$v = Z_{12} \cdot P(U > E_a) = N_A^2 \cdot \sigma \cdot [R_1] \cdot [R_2] \cdot \sqrt{2} \cdot \left(\frac{8kT}{\pi\mu}\right)^{1/2} \cdot \left(1 + \frac{E_a}{RT}\right) \cdot e^{-\frac{E_a}{RT}}$$

Din relația de mai sus se poate scoate expresia constantei de viteză:

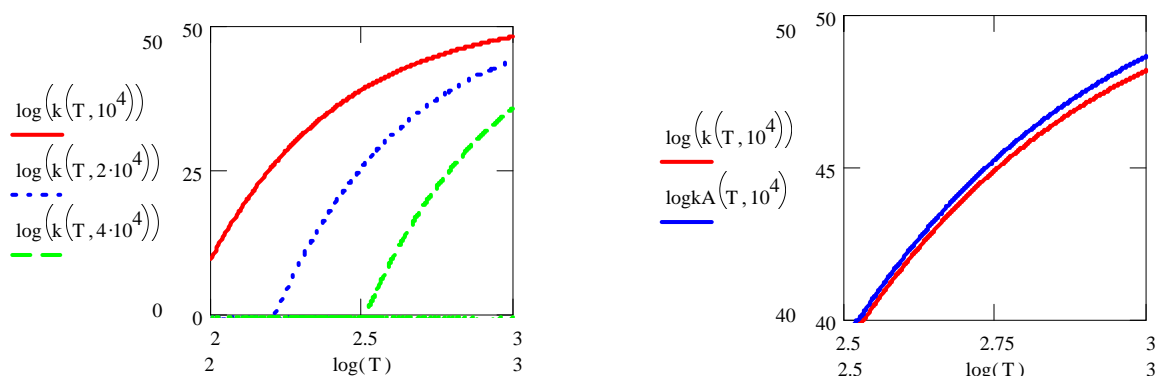
$$\kappa = N_A^2 \cdot \sigma \cdot \sqrt{2} \cdot \left(\frac{8kT}{\pi\mu}\right)^{1/2} \cdot \left(1 + \frac{E_a}{RT}\right) \cdot e^{-\frac{E_a}{RT}}$$

Tabelul de mai jos conține câteva valori pentru factorul preexponențial și energia de activare E_a obținute experimental pentru legea Arrhenius de variație a constantei de viteză cu temperatura, dedusă din observații experimentale:

Tabelul 12.1. Parametrii Arrhenius pentru reacții în fază gazoasă

Reacția	$A(1 \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{s}^{-1})$	$E_a(\text{J} \cdot \text{mol}^{-1})$	P (factor steric)
$2\text{NOCl} \rightarrow 2\text{NO} + 2\text{Cl}$	$9.4 \cdot 10^9$	$1.02 \cdot 10^5$	0.16
$2\text{ClO} \rightarrow \text{Cl}_2 + \text{O}_2$	$6.3 \cdot 10^7$	0	$2.5 \cdot 10^{-3}$
$\text{H}_2 + \text{C}_2\text{H}_4 \rightarrow \text{C}_2\text{H}_6$	$1.2 \cdot 10^6$	$1.8 \cdot 10^5$	$1.7 \cdot 10^{-6}$
$\text{K} + \text{Br}_2 \rightarrow \text{KBr} + \text{Br}$	10^{12}	0	4.8

În figura de mai jos se prezintă variația constantei $\kappa = \kappa(T, E_a/R)$ pentru diferite valori ale raportului $E_a/R = 10^4, 2 \cdot 10^4, 4 \cdot 10^4$ și comparativ alăturat obținută din ecuația Arrhenius, în domeniul de temperaturi $T \in [100 \text{ K}, 1000 \text{ K}]$.



În figură se observă că energii de activare mai mari necesită temperaturi mai mari pentru a evolua cu aceeași constantă de viteză (prima curbă și a 2-a curbă). Figura arată că abaterile modelului energetic Maxwell-Boltzmann de la legea Arrhenius observată experimental sunt nesemnificative pe scara logaritmică (factorul preexponențial nu influențează semnificativ constanta de viteză). De asemenea, graficele prezintă o variație foarte mare a constantei de viteză între limitele de temperatură precizate, însă trebuie să se țină seama că modelul teoretic se aplică numai

Procese la interfata fazelor: Modelare matematică, Optimizare numerică, Implementare web, cu aplicatii în separarea și caracterizarea seriilor de compusi chimici biologic activi

fazelor gazoase ale reactanților, până la temperatura acestora de disociere, interval de temperatură care este, în realitate, mult mai mic pentru majoritatea gazelor.

Factorul steric este o corecție aplicată modelului din teoria ciocnirilor. Pentru a corecta modelul teoretic al ciocnirilor cu valorile observate ale constantelor de viteză, se introduce o corecție σ^* , numită *secțiune eficace* la secțiunea de ciocnire σ calculată din razele moleculare.

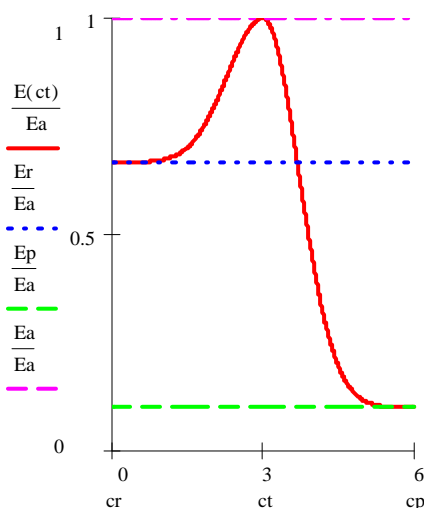
Relația de exprimare a constantei de echilibru devine:

$$\kappa = N_A^2 \cdot \sigma^* \cdot \sqrt{2} \cdot \left(\frac{8kT}{\pi\mu} \right)^{1/2} \cdot \left(1 + \frac{E_a}{RT} \right) \cdot e^{-\frac{E_a}{RT}} = N_A^2 \cdot \sigma \cdot P \cdot \sqrt{2} \cdot \left(\frac{8kT}{\pi\mu} \right)^{1/2} \cdot \left(1 + \frac{E_a}{RT} \right) \cdot e^{-\frac{E_a}{RT}}$$

unde $P = \sigma^*/\sigma$ se numește *factor steric*. În mod obișnuit, factorul steric s-a găsit cu câteva ordine de mărime mai mic decât 1 și este cauzat de forțele de respingere intermoleculare și de abaterea geometriei moleculare de la modelul sferic.

Modelul complexului activat. Pentru explicarea dinamicii moleculare care stă la baza reacțiilor chimice se introduce o nouă noțiune și anume *coordonata de reacție*. Coordonata de reacție este o mărime virtuală ce rezultă din reprezentarea în planul complex a stărilor energetice ale sistemului. Altfel spus, se pot pune în evidență prin măsurători de spectroscopie energiile reactanților, produșilor și complexului activat, dar nu se poate măsura coordonata de reacție. Se pot măsura însă timpi, care corespund diferitelor fenomene care se petrec.

Un prim fenomen este cel de formare a complexului activat. Pentru formarea acestuia (figura de mai jos) este nevoie de o cantitate de energie (diferența de la "E_a" la "E_r").



Acesta, odată format, începe să oscileze amortizat pe coordonata de reacție între coordonata reactanților ("cr" pe desen) și coordonata sa ("ca" pe desen) în echilibrul său cu reactanții cât și între coordonata sa ("ca" pe desen) și coordonata produșilor ("cp" pe desen) în echilibrul său cu produșii.

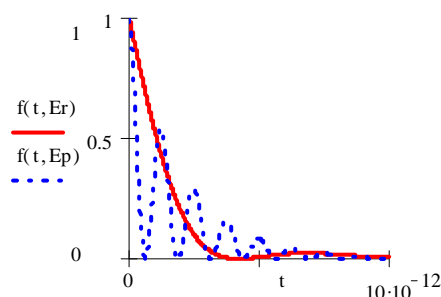
Dacă diferența de energie $E_a - E_p$ este suficient de mare atunci practic oscilația complexului cu produșii se reduce la o oscilație sau două, ceea ce s-a constatat de fapt în multe observații experimentale. De asemenea, tot experimental, s-a constatat că oscilația amortizată cu reactanții are

aproximativ 10 oscilații amortizate. Reprezentarea grafică din figură a fost obținută pe baza ecuației:

$$E(ct) = \begin{cases} E_r + (E_a - E_r) \cdot e^{-(ct-ca)^2}, & ct \leq ca \\ E_p + (E_a - E_p) \cdot e^{-(ct-ca)^2}, & ct > ca \end{cases}$$

pentru valorile $E_r = 2$, $E_a = 3$, $E_p = 0.3$, $cr = 0$, $ca = 3$, $cp = 6$. Graficul din figura de mai jos reprezintă amortizarea în timp a oscilațiilor complexului activat cu reactanții și respectiv cu produșii, și a fost obținut pe baza ecuației (12.67) unde $t_0 = 2 \cdot 10^{-12}$ s:

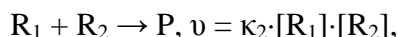
$$f(t,E) = e^{-\frac{t}{t_0}} \cos^2\left(\frac{E_a}{E} \frac{t}{2t_0}\right)$$



Pornind de la funcțiile de partiție ale reactanților, produșilor și a complexului activat, și ținând seama că un echilibru propriu zis se stabilește doar între complex și reactanți, Eyring a ajuns la următorul rezultat:

$$\kappa_2 = \kappa \cdot \frac{kT}{h} \cdot \bar{K}$$

Aceasta stabilește constanta de viteză a unei reacții în fază gazoasă în forma:



unde κ este coeficientul de transmisie în vibrația de-a lungul coordonatei de reacție și pentru vibrația către reactanți de obicei se ia 1, iar \bar{K} este o constantă ce depinde de funcțiile q de partiție molară ale reactanților și complexului activat:

$$q = \frac{1}{1 - e^{\frac{-h}{t_0 kT}}},$$

fiind direct proporțională cu funcția de distribuție energetică:

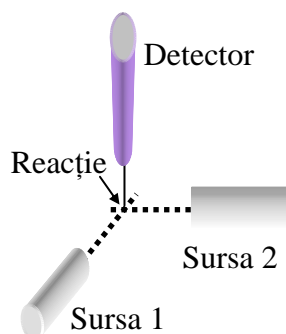
$$g(E_r) = e^{\frac{-(E_a - E_r)}{RT}}$$

Înlocuind în expresia lui κ_2 toți termenii (este un calcul mai laborios, ce ține seama de mișcările de translație și vibrație ale moleculelor) se obține o expresie pentru κ_2 similară cu cea obținută din teoria ciocnirilor. O observație este necesară și anume asupra ordinului de mărime al frecvenței $1/t_0$ sau a perioadei t_0 de vibrație a complexului activat. Aceasta (t_0) este de ordinul picosecundelor, așa cum a rezultat din observațiile recente puse în evidență cu ajutorul laserelor cu

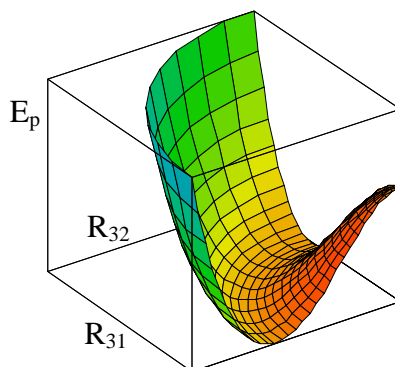
Procese la interfata fazelor: Modelare matematică, Optimizare numerică, Implementare web, cu aplicatii în separarea și caracterizarea seriilor de compuși chimici biologic activi

impulsuri de câteva femtosecunde ($1\text{fs} = 10^{-15}\text{s}$). Acesta este motivul pentru care investigațiile prin intermediul modelului complexului activat sunt încă dificile.

Modelul suprafețelor de potențial este cel mai detaliat studiu privind factorii ce guvernează vitezele de reacție, deoarece se bazează pe o modelare a studiului experimental bine pusă la punct și pe o interpretare matematică avansată a datelor. Cel mai frecvent studiu experimental se bazează pe schema din figura de mai jos, când se folosesc fascicule de molecule de reactant, iar la punctul de întâlnire este montat un detector care permite înregistrarea spectrelor de rotație și vibrație ale moleculelor în amestecul de reacție.



Din *fasciculele moleculare* se pot obține informații detaliate. Detectorul poate fi deplasat sub diferite unghiuri, astfel încât se obține o distribuție unghiulară a produșilor. Cum moleculele incidente pot avea acum diferite energii de translație (folosind acceleratoare centrifugale) sau de vibrație (folosind excitare cu lasere) și diferite orientări (orientarea spațială a moleculelor polare cu ajutorul câmpurilor electrice), este posibil studiul ciocnirilor eficiente în funcție de aceste variabile și studiul influenței acestor variabile asupra produșilor rezultați. Un concept important în interpretarea rezultatelor cu fascicule moleculare este *suprafața de energie potențială a reacției*. Aceasta reprezintă energia potențială a ansamblului în funcție de pozițiile relative ale tuturor moleculelor ce iau parte la reacție.



Folosind funcțiile de undă de tip Schrödinger se poate evalua această energie potențială. Pentru un caz simplu, cum ar fi apropierea unui atom de hidrogen de o moleculă de H_2 , reprezentarea grafică a

Lorentz JĂNTSCHI (principal investigator) & Sorana D. BOLBOACĂ (co-investigator)

suprafeței de energie potențială în funcție de distanțele R_{31} și R_{32} ale atomului de hidrogen (3) de cei doi atomi de hidrogen din moleculă (1) și (2) este reprezentată grafic în figura de mai sus. Studiul amănunțit al traiectoriilor ce pot fi urmate pe această suprafață pentru a cheltui energii minime la apropierea moleculelor dau rezultate foarte bune. Se poate astfel identifica direcția de atac și de separare. Privind problema din perspectiva modelului complexului activat, starea de tranziție este o geometrie critică în care fiecare traiectorie care trece prin ea duce la reacție.

Procese la interfata fazelor: Modelare matematică, Optimizare numerică, Implementare web, cu aplicatii în separarea și caracterizarea seriilor de compuși chimici biologic activi

Activități și rezultate. Etapa II(2007). Obiectivul 2(Dezvoltarea modelelor matematice). Activitatea 4(Participari la manifestări științifice).

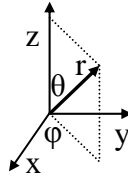
S-a participat cu lucrări științifice la 2 conferințe internaționale:

	Lorentz JÄNTSCHI, Sorana Daniela BOLBOACĂ, Processes Kinetics Modeling: A Numerical Study, Institute of General and Inorganic Chemistry, Bulgarian Academy of Sciences [http://sizemat.igic.bas.bg], FP6: EC-INCO-CT-2005-016414 Specific Support Action, Plovdiv, Bulgaria, April 19-21, 2007.
	Sorana D. BOLBOACĂ, Lorentz JÄNTSCHI, Data Mining on Structure-Activity/Property Relationships Models, The 11th Electronic Computational Chemistry Conference, online, Monmouth University, New Jersey, USA, www, Internet , paper #29, ECCC11, April 2-30, 2007.

**Activități și rezultate. Etapa II(2007). Obiectivul 3(Parametrizarea variabilelor).
Activitatea 5(Înglobarea repartiției și distribuției între faze).**

Problema cea mai importantă aferentă acestor activități a fost elaborarea modelului matematic al fenomenului de difuzie, prezent atât în cazul fenomenelor de repartiție și distribuție între faze cât și în cadrul diferitelor proprietăți de suprafață pe care lichidele le manifestă.

Fie un sistem de coordonate carteziene, pe care se exprimă simultan și coordonatele sferice:



Pornind de la ecuația difuziei:

$$\frac{\partial \wp(x, y, z, t)}{\partial t} = K \cdot \Delta \wp(x, y, z, t), \quad \Delta = \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right)$$

pentru a o aplica la sisteme cu simetrie sferică (funcția de proprietate este în coordonate polare $\wp = \wp(r, \varphi, \theta)$ și variază doar în funcție de r) este necesar să facem transformarea la coordonate polare a operatorului de derivare. Fie deci:

$$\wp = \wp(r, \varphi, \theta), \text{ cu } \frac{\partial \wp}{\partial \varphi} = 0 \text{ și } \frac{\partial \wp}{\partial \theta} = 0$$

unde ecuațiile exprimă faptul că \wp variază doar în funcție de r. Ecuațiile de transformare între coordonatele carteziene (x,y,x) și coordonatele polare (r,theta,phi) sunt:

$$\begin{cases} x = r \cdot \cos(\varphi) \cdot \sin(\theta) \\ y = r \cdot \sin(\varphi) \cdot \sin(\theta) \\ z = r \cdot \cos(\theta) \end{cases}, \quad \begin{cases} r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2} \\ \varphi = \arctan(y/x) \\ \theta = \arctan(\sqrt{x^2 + y^2}/z) \end{cases}$$

Exprimăm derivata de ordinul 1 a lui \wp în raport cu x și ținem seama de schimbarea de variabile:

$$\frac{\partial \wp}{\partial x} = \frac{\partial \wp}{\partial r} \cdot \frac{\partial r}{\partial x} + \frac{\partial \wp}{\partial \varphi} \cdot \frac{\partial \varphi}{\partial x} + \frac{\partial \wp}{\partial \theta} \cdot \frac{\partial \theta}{\partial x}$$

Folosim acum relațiile de mai sus, când rezultă:

$$\frac{\partial \wp}{\partial x} = \frac{\partial \wp}{\partial r} \cdot \frac{\partial r}{\partial x}, \quad \frac{\partial \wp}{\partial y} = \frac{\partial \wp}{\partial r} \cdot \frac{\partial r}{\partial y}, \quad \frac{\partial \wp}{\partial z} = \frac{\partial \wp}{\partial r} \cdot \frac{\partial r}{\partial z}$$

unde ecuațiile rezultă în mod analog. Calculăm derivatele de ordinul 1 ale lui r în raport cu x, y și z:

$$\frac{\partial r}{\partial x} = \frac{x}{\sqrt{x^2 + y^2 + z^2}}, \quad \frac{\partial r}{\partial y} = \frac{y}{\sqrt{x^2 + y^2 + z^2}}, \quad \frac{\partial r}{\partial z} = \frac{z}{\sqrt{x^2 + y^2 + z^2}}$$

și le exprimăm în funcție de r, θ și φ :

$$\frac{\partial r}{\partial x} = \cos(\varphi) \cdot \sin(\theta) = \frac{x}{r}, \quad \frac{\partial r}{\partial y} = \sin(\varphi) \cdot \sin(\theta) = \frac{y}{r}, \quad \frac{\partial r}{\partial z} = \cos(\theta) = \frac{z}{r}$$

Procese la interfața fazelor: Modelare matematică, Optimizare numerică, Implementare web, cu aplicații în separarea și caracterizarea seriilor de compuși chimici biologic activi

și le introducem în relația de mai sus, unde, pentru simetrie s-au lăsat rapoartele x/r , y/r și z/r :

$$\frac{\partial \varphi}{\partial x} = \frac{x}{r} \cdot \frac{\partial \varphi}{\partial r}, \quad \frac{\partial \varphi}{\partial y} = \frac{y}{r} \cdot \frac{\partial \varphi}{\partial r}, \quad \frac{\partial \varphi}{\partial z} = \frac{z}{r} \cdot \frac{\partial \varphi}{\partial r}$$

Calculăm și derivatele de ordinul 2 după formulele:

$$\frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial \varphi}{\partial x} = \frac{\partial r}{\partial x} \cdot \frac{\partial}{\partial r} \frac{\partial \varphi}{\partial x} + \frac{\partial \varphi}{\partial x} \cdot \frac{\partial}{\partial \varphi} \frac{\partial \varphi}{\partial x} + \frac{\partial \theta}{\partial x} \cdot \frac{\partial}{\partial \theta} \frac{\partial \varphi}{\partial x}$$

Ținem seama de relația de mai sus și de independența de r a rapoartelor x/r , y/r și z/r :

$$\frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial \varphi}{\partial x} = \frac{\partial r}{\partial x} \cdot \frac{x}{r} \cdot \frac{\partial}{\partial r} \frac{\partial \varphi}{\partial r} + \frac{\partial \varphi}{\partial x} \cdot \frac{\partial}{\partial \varphi} \frac{x}{r} \cdot \frac{\partial \varphi}{\partial r} + \frac{\partial \theta}{\partial x} \cdot \frac{\partial}{\partial \theta} \frac{x}{r} \cdot \frac{\partial \varphi}{\partial r}$$

Înlocuind:

$$\frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial \varphi}{\partial x} = \left(\frac{x}{r}\right)^2 \cdot \frac{\partial^2 \varphi}{\partial r^2} + \left(\frac{\partial \varphi}{\partial x} \cdot \frac{\partial}{\partial \varphi} \frac{x}{r} + \frac{\partial \theta}{\partial x} \cdot \frac{\partial}{\partial \theta} \frac{x}{r}\right) \cdot \frac{\partial \varphi}{\partial r}$$

Însumând acum cele 3 ecuații de tipul de mai sus obținem:

$$\Delta \varphi = \frac{\partial^2 \varphi}{\partial r^2} + \left(\frac{\partial \varphi}{\partial x} \cdot \frac{\partial}{\partial \varphi} \frac{x}{r} + \frac{\partial \theta}{\partial x} \cdot \frac{\partial}{\partial \theta} \frac{x}{r} + \frac{\partial \varphi}{\partial y} \cdot \frac{\partial}{\partial \varphi} \frac{y}{r} + \frac{\partial \theta}{\partial y} \cdot \frac{\partial}{\partial \theta} \frac{y}{r} + \frac{\partial \varphi}{\partial z} \cdot \frac{\partial}{\partial \varphi} \frac{z}{r} + \frac{\partial \theta}{\partial z} \cdot \frac{\partial}{\partial \theta} \frac{z}{r}\right) \cdot \frac{\partial \varphi}{\partial r}$$

și dacă se ține seama că φ nu depinde de z :

$$\Delta \varphi = \frac{\partial^2 \varphi}{\partial r^2} + \left(\frac{\partial \varphi}{\partial x} \cdot \frac{\partial}{\partial \varphi} \frac{x}{r} + \frac{\partial \theta}{\partial x} \cdot \frac{\partial}{\partial \theta} \frac{x}{r} + \frac{\partial \varphi}{\partial y} \cdot \frac{\partial}{\partial \varphi} \frac{y}{r} + \frac{\partial \theta}{\partial y} \cdot \frac{\partial}{\partial \theta} \frac{y}{r} + \frac{\partial \theta}{\partial z} \cdot \frac{\partial}{\partial \theta} \frac{z}{r}\right) \cdot \frac{\partial \varphi}{\partial r}$$

Să calculăm termenii ce apar în relația de mai sus. Derivatele de ordinul 1 ale lui φ sunt:

$$\frac{\partial \varphi}{\partial x} = \frac{-y}{x^2 + y^2} = \frac{1}{r} \cdot \frac{-\sin(\varphi)}{\sin(\theta)}, \quad \frac{\partial \varphi}{\partial y} = \frac{x}{x^2 + y^2} = \frac{1}{r} \cdot \frac{\cos(\varphi)}{\sin(\theta)}, \quad \frac{\partial \varphi}{\partial z} = 0$$

iar ale lui θ :

$$\frac{\partial \theta}{\partial z} = \frac{-\sqrt{x^2 + y^2}}{x^2 + y^2 + z^2} = -\frac{\sin(\theta)}{r}, \quad \frac{\partial \theta}{\partial x} = \frac{x}{\sqrt{x^2 + y^2}} \cdot \frac{z}{x^2 + y^2 + z^2} = \frac{\cos(\varphi) \cdot \cos(\theta)}{r},$$

$$\frac{\partial \theta}{\partial y} = \frac{y}{\sqrt{x^2 + y^2}} \cdot \frac{z}{x^2 + y^2 + z^2} = \frac{\sin(\varphi) \cdot \cos(\theta)}{r}$$

Cealalți termeni sunt:

$$\frac{\partial}{\partial \varphi} \frac{x}{r} = -\sin(\varphi) \cdot \sin(\theta), \quad \frac{\partial}{\partial \varphi} \frac{y}{r} = \cos(\varphi) \cdot \sin(\theta), \quad \frac{\partial}{\partial \theta} \frac{x}{r} = \cos(\varphi) \cdot \cos(\theta), \quad \frac{\partial}{\partial \theta} \frac{y}{r} = \sin(\varphi) \cdot \cos(\theta), \quad \frac{\partial}{\partial \theta} \frac{z}{r} = -$$

$$\sin(\theta)$$

Putem acum înlocui în expresia ce apare în fața derivatei de ordinul 1 a proprietății:

$$\left(\frac{\partial \varphi}{\partial x} \cdot \frac{\partial x}{\partial \varphi r} + \frac{\partial \theta}{\partial x} \cdot \frac{\partial x}{\partial \theta r} + \frac{\partial \varphi}{\partial y} \cdot \frac{\partial y}{\partial \varphi r} + \frac{\partial \theta}{\partial y} \cdot \frac{\partial y}{\partial \theta r} + \frac{\partial \theta}{\partial z} \cdot \frac{\partial z}{\partial \theta r} \right) = \frac{1}{r} \cdot \frac{\sin(\varphi)}{\sin(\theta)} \cdot \sin(\varphi) \cdot \sin(\theta) +$$

$$\frac{\cos(\varphi) \cdot \cos(\theta)}{r} \cdot \cos(\varphi) \cdot \cos(\theta) + \frac{1}{r} \cdot \frac{\cos(\varphi)}{\sin(\theta)} \cdot \cos(\varphi) \cdot \sin(\theta) + \frac{\sin(\varphi) \cdot \cos(\theta)}{r} \cdot \sin(\varphi) \cdot \cos(\theta) + \frac{\sin(\theta)}{r} \cdot \sin(\theta)$$

$$= \frac{1}{r} \cdot (\sin^2(\varphi) + \cos^2(\varphi) \cdot \cos^2(\theta) + \cos^2(\varphi) + \sin^2(\varphi) \cdot \cos^2(\theta) + \sin^2(\theta)) = \frac{2}{r}$$

Înlocuind rezultă expresia finală a Laplacianului în coordonate polare pentru sistemele ce difuzează în simetrie sferică:

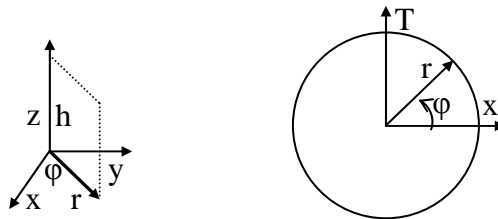
$$\Delta \varphi = \frac{\partial^2 \varphi}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \cdot \frac{\partial \varphi}{\partial r}$$

și deci ecuația difuziei (1) devine:

$$\frac{\partial \varphi(r,t)}{\partial t} = K \cdot \left(\frac{\partial^2 \varphi(r,t)}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \cdot \frac{\partial \varphi(r,t)}{\partial r} \right)$$

Ecuția de mai sus este deosebit de utilă în cazul proceselor catalizate, în care catalizatorul introdus în sistem difuzează în toate direcțiile în mod uniform, introducând o simetrie sferică.

Ecuția de mai sus este mai practică decât cea în coordonate carteziene, și numai pentru simplul fapt că simetria (și cea sferică) este o tendință a sistemelor vii către ordine (micșoarea entropiei) în raport cu evoluția naturală a sistemelor (mărirea entropiei). O altă formulă importantă este pentru simetria cilindrică, care este detaliată mai jos:



Pentru sisteme cu simetrie cilindrică (fie x și y în planul bazei cilindrului, ca în figurile de mai sus), derivata după z este nulă, și ecuațiile (A.1) și (A.2) devin:

$$\frac{\partial \varphi(x,y,t)}{\partial t} = K \cdot \Delta \varphi(x,y,t), \quad \Delta = \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right)$$

Dacă exprimăm funcția de proprietate φ în coordonate cilindrice, variabilelor x și y le iau locul variabilele r și φ . Pentru funcția de proprietate $\varphi(r,\varphi)$ este necesar să facem transformarea la coordonate polare a operatorului de derivare. Fie deci:

$$\varphi = \varphi(r,\varphi) \text{ și } \frac{\partial \varphi}{\partial \varphi} = 0$$

unde ecuația exprimă faptul că φ variază doar în funcție de r și h fiind ortogonal pe φ și r. Ecuațiile de transformare între coordonatele carteziene (x,y) și coordonatele polare (r, φ) sunt:

Procese la interfața fazelor: Modelare matematică, Optimizare numerică, Implementare web, cu aplicații în separarea și caracterizarea seriilor de compuși chimici biologici activi

$$\begin{cases} x = r \cdot \cos(\varphi) \\ y = r \cdot \sin(\varphi) \end{cases}, \begin{cases} r = \sqrt{x^2 + y^2} \\ \varphi = \arctan(y/x) \end{cases}$$

Exprimăm derivata de ordinul 1 a lui \wp în raport cu x și ținem seama de schimbarea de variabile:

$$\frac{\partial \wp}{\partial x} = \frac{\partial \wp}{\partial r} \cdot \frac{\partial r}{\partial x} + \frac{\partial \wp}{\partial \varphi} \cdot \frac{\partial \varphi}{\partial x}, \quad \frac{\partial \wp}{\partial y} = \frac{\partial \wp}{\partial r} \cdot \frac{\partial r}{\partial y} + \frac{\partial \wp}{\partial \varphi} \cdot \frac{\partial \varphi}{\partial y}$$

unde ecuația în raport cu y rezultă în mod analog. Calculăm derivatele de ordinul 1 ale lui r în raport cu x , y și z :

$$\frac{\partial r}{\partial x} = \frac{x}{\sqrt{x^2 + y^2}}, \quad \frac{\partial r}{\partial y} = \frac{y}{\sqrt{x^2 + y^2}}$$

și le exprimăm în funcție de r și φ folosind relațiile de mai sus:

$$\frac{\partial r}{\partial x} = \cos(\varphi) = \frac{x}{r}, \quad \frac{\partial r}{\partial y} = \sin(\varphi) = \frac{y}{r}$$

și le introducem în relația de mai sus, unde, pentru simetrie s-au lăsat rapoartele x/r și y/r :

$$\frac{\partial \wp}{\partial x} = \frac{x}{r} \cdot \frac{\partial \wp}{\partial r}, \quad \frac{\partial \wp}{\partial y} = \frac{y}{r} \cdot \frac{\partial \wp}{\partial r}$$

Calculăm și derivatele de ordinul 2 după formulele:

$$\frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial \wp}{\partial x} = \frac{\partial r}{\partial x} \cdot \frac{\partial}{\partial r} \frac{\partial \wp}{\partial x} + \frac{\partial \varphi}{\partial x} \cdot \frac{\partial}{\partial \varphi} \frac{\partial \wp}{\partial x}, \quad \frac{\partial}{\partial y} \frac{\partial \wp}{\partial y} = \frac{\partial r}{\partial y} \cdot \frac{\partial}{\partial r} \frac{\partial \wp}{\partial y} + \frac{\partial \varphi}{\partial y} \cdot \frac{\partial}{\partial \varphi} \frac{\partial \wp}{\partial y}$$

Ținem seama și de independența de r a rapoartelor x/r și y/r :

$$\frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial \wp}{\partial x} = \frac{\partial r}{\partial x} \cdot \frac{x}{r} \cdot \frac{\partial}{\partial r} \frac{\partial \wp}{\partial r} + \frac{\partial \varphi}{\partial x} \cdot \frac{\partial}{\partial \varphi} \frac{x}{r} \cdot \frac{\partial \wp}{\partial r}, \quad \frac{\partial}{\partial y} \frac{\partial \wp}{\partial y} = \frac{\partial r}{\partial y} \cdot \frac{y}{r} \cdot \frac{\partial}{\partial r} \frac{\partial \wp}{\partial r} + \frac{\partial \varphi}{\partial y} \cdot \frac{\partial}{\partial \varphi} \frac{y}{r} \cdot \frac{\partial \wp}{\partial r}$$

Rezultă:

$$\frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial \wp}{\partial x} = \left(\frac{x}{r}\right)^2 \cdot \frac{\partial^2 \wp}{\partial r^2} + \frac{\partial \varphi}{\partial x} \cdot \frac{\partial}{\partial \varphi} \frac{x}{r} \cdot \frac{\partial \wp}{\partial r}, \quad \frac{\partial}{\partial y} \frac{\partial \wp}{\partial y} = \left(\frac{y}{r}\right)^2 \cdot \frac{\partial^2 \wp}{\partial r^2} + \frac{\partial \varphi}{\partial y} \cdot \frac{\partial}{\partial \varphi} \frac{y}{r} \cdot \frac{\partial \wp}{\partial r}$$

Însumând acum cele 2 ecuații de tipul de mai sus obținem:

$$\Delta \wp = \frac{\partial^2 \wp}{\partial r^2} + \left(\frac{\partial \varphi}{\partial x} \cdot \frac{\partial}{\partial \varphi} \frac{x}{r} + \frac{\partial \varphi}{\partial y} \cdot \frac{\partial}{\partial \varphi} \frac{y}{r} \right) \cdot \frac{\partial \wp}{\partial r}$$

Recalcularea termenilor ce apar în relația de mai sus esteredată mai jos:

$$\frac{\partial \varphi}{\partial x} = \frac{-y}{x^2 + y^2} = -\frac{1}{r} \cdot \sin(\varphi), \quad \frac{\partial \varphi}{\partial y} = \frac{x}{x^2 + y^2} = \frac{1}{r} \cdot \cos(\varphi), \quad \frac{\partial}{\partial \varphi} \frac{x}{r} = -\sin(\varphi), \quad \frac{\partial}{\partial \varphi} \frac{y}{r} = \cos(\varphi)$$

Putem acum înlocui în expresia ce apare în fața derivatei de ordinul 1 a proprietății:

$$\left(\frac{\partial \varphi}{\partial x} \cdot \frac{\partial}{\partial \varphi} \frac{x}{r} + \frac{\partial \varphi}{\partial y} \cdot \frac{\partial}{\partial \varphi} \frac{y}{r} \right) = \frac{1}{r} \cdot \sin(\varphi) \cdot \sin(\varphi) + \frac{1}{r} \cdot \cos(\varphi) \cdot \cos(\varphi) = \frac{1}{r}$$

Înlocuind rezultă expresia finală a Laplacianului în coordonate polare pentru sistemele ce difuzează în simetrie cilindrică:

$$\Delta \varphi = \frac{\partial^2 \varphi}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \cdot \frac{\partial \varphi}{\partial r}$$

și deci ecuația difuziei devine:

$$\frac{\partial \varphi(r,t)}{\partial t} = K \cdot \left(\frac{\partial^2 \varphi(r,t)}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \cdot \frac{\partial \varphi(r,t)}{\partial r} \right)$$

Ecuția de mai sus se aplică cu succes îndeosebi în electrochimie, atunci când electrozii folosiți induc o simetrie cilindrică difuziei.

O problemă deosebit de importantă este bilanțul de material în reacțiile controlate difuziv. Această analiză este redată în continuare. Ecuția generală a difuziei stabilită pe baza fenomenelor de difuzie și convecție într-o regiune din spațiu ((x,y,z),(x+dx,y+dy,z+dz)) a fost exprimată fără a se ține seama de o posibilă reacție care ar putea diminua sau mări proprietatea φ în regiunea considerată. Această posibilă reacție în general este independentă de coordonatele spațiale și, după cum s-a văzut în exprimarea legilor de viteză pentru variația concentrației molare, variația sa se exprimă printr-o formulă generală de tipul:

$$\frac{\partial \varphi(x,y,z,t)}{\partial t} = \pm \kappa \cdot \varphi^{\gamma_\varphi}, \gamma_\varphi \text{ ordinul de reacție}$$

și completând cu termenul de mai sus se obține:

$$\frac{\partial \varphi(x,y,z,t)}{\partial t} = K \cdot \Delta \varphi(x,y,z,t) - \vec{\nabla}(\vec{i} + \vec{j} + \vec{k}) \varphi(x,y,z,t) \cdot \mathbf{v}(x,y,z,t) \pm \kappa \cdot \varphi^{\gamma_\varphi}$$

Ecuția de mai sus se numește *ecuația de bilanț de material pentru proprietatea φ* și se aplică în numeroase procese chimice. Două exemple în acest sens sunt difuzia oxigenului în sânge și difuzia unui gaz către suprafața unui catalizator.

Soluțiile ecuației de mai sus nu sunt ușor de obținut; aceasta este o ecuație diferențială neomogenă. Rezolvarea ei analitică este posibilă numai în câteva cazuri speciale. În proiectarea reactoarelor chimice și cinetica biologică care folosesc această ecuație se utilizează metode numerice pentru rezolvarea sa pentru modelele reale de reacție.

Să exprimăm ecuația în cazul unidimensional fără convecție și un consum de proprietate de ordinul 1 ($\gamma_\varphi = 1$):

$$\frac{\partial \varphi(x,t)}{\partial t} = K \cdot \frac{\partial^2 \varphi(x,t)}{\partial x^2} \pm \kappa \cdot \varphi(x,t)$$

Se poate verifica prin înlocuire că dacă $Q(x,t)$ este soluție a ecuației fără reacție,

$$\frac{\partial Q(x,t)}{\partial t} = K \cdot \frac{\partial^2 Q(x,t)}{\partial x^2}$$

Procese la interfata fazelor: Modelare matematică, Optimizare numerică, Implementare web, cu aplicatii în separarea și caracterizarea seriilor de compuși chimici biologic activi

atunci $\varphi(x,t)$ dat de:

$$\varphi(x,t) = Q(x,t) \cdot e^{-\kappa \cdot t}$$

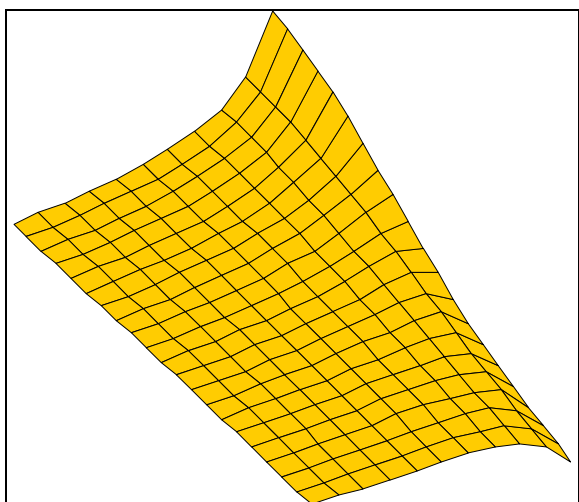
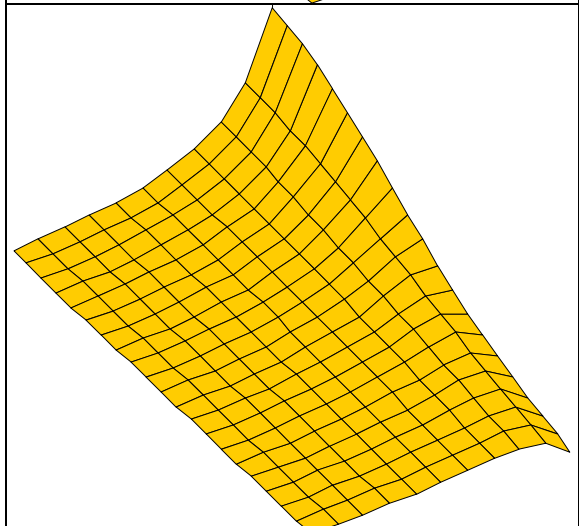
este soluție a ecuației cu reacție. Cât despre ecuația inițială și soluția acesteia, ea este rezolvată complet în cadrul teoriei distribuțiilor, și soluția generală în \mathfrak{R}^n , ($x = (x_1, \dots, x_n)$) este:

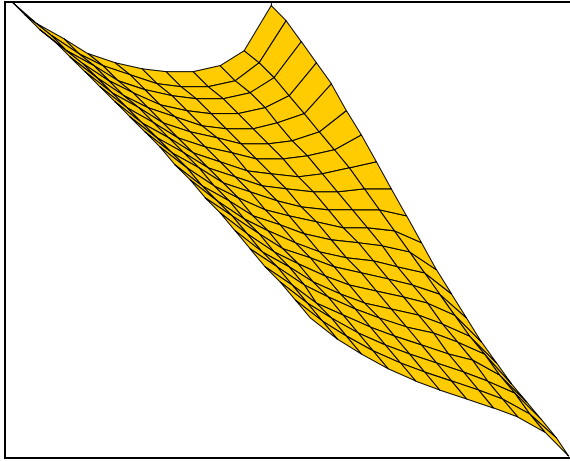
$$Q(x_1, \dots, x_n, t) = \frac{1}{(\sqrt{4K\pi t})^n} \cdot e^{-\frac{(x_1^2 + \dots + x_n^2)}{4Kt}}$$

Fie soluția din \mathfrak{R}^1 a ecuației; înlocuind-o pe aceasta în (12.63) obținem:

$$\varphi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{4K\pi t}} \cdot e^{-\frac{x^2}{4Kt}} \cdot e^{-\kappa \cdot t}$$

În figurile de mai jos s-au reprezentat variațiile concentrațiilor proprietății în spațiu (x) și timp (t) pentru difuzie și difuzie concurrentă cu reacție chimică.

	<p>Reprezentarea spațio-temporală (x,t) a fenomenului de difuzie (axa Z reprezintă concentrația proprietății) pentru $K = 2$ și $\kappa = 3$</p>
	<p>Reprezentarea spațio-temporală (x,t) a fenomenului de difuzie (axa Z reprezintă concentrația proprietății) concurrent cu fenomenul de reacție chimică cu consum de proprietate difuzată ($\kappa > 0$) pentru $K = 2$ și $\kappa = 3$</p>






Reprezentarea spațio-temporală (x,t) a fenomenului de difuzie (axa Z reprezintă concentrația proprietății) concurent cu fenomenul de reacție chimică cu formare de proprietate ($\kappa < 0$) pentru $K = 2$ și $\kappa = -3$

Procese la interfata fazelor: Modelare matematică, Optimizare numerică, Implementare web, cu aplicatii în separarea și caracterizarea seriilor de compuși chimici biologici activi

Activități și rezultate. Etapa II(2007). Obiectivul 2(Parametrizarea variabilelor).

Activitatea 6(Participari la manifestări științifice).

S-a participat cu lucrări științifice la 2 conferințe internaționale:

 <p>22 - 24 June 2007 Bayview Beach Resort, Penang, Malaysia</p> <p>INTERNATIONAL MANAGEMENT EDUCATION CONFERENCE 'Comparative Perspectives On Best Practices'</p>	<p>Carmen E. STOENOIU, Lorentz JÄNTSCHI, Ioan ABRUDAN, Sorana D. BOLBOACĂ, Romanian Higher Education: Modelling Evolution Tendencies, The International Management Education Conference 2007 Proceedings, Faculty of Business and Economics, University Pendidikan Sultan Idris, ISBN 978-983-3759-19-4, Penang, Malaysia, paper #10§02 (6 pages), 2007.</p> <p>Lorentz JÄNTSCHI, Carmen E. STOENOIU, Sorana D. BOLBOACĂ, Research Policy via Funding Allocation Analysis, The International Management Education Conference 2007 Proceedings, Faculty of Business and Economics, University Pendidikan Sultan Idris, ISBN 978-983-3759-19-4, Penang, Malaysia, paper #10§03 (7 pages), 2007.</p>
 <p>ESCAPE 17 17th European Symposium on Computer Aided Process Engineering</p> <p>27-30 May 2007, Bucharest, ROMANIA</p> <p>An Event of the CAPE Working Party of the European Federation of Chemical Engineering</p>  <p>EFCE</p>	<p>Sorana D. BOLBOACĂ, Lorentz JÄNTSCHI, Modelling the Inhibitory Activity on Carbonic Anhydrase I of Some Substituted Thiadiazole- and Thiadiazoline-Disulfonamides: Integration of Structure Information, ESCAPE17 - 17th European Symposium on Computer Aided Process Engineering, CAPE Working Party of the European Federation of Chemical Engineering then Elsevier Netherlands & UK, ISBN 978-0-444-53157-5 & eISBN 0-444-53158-2, Bucharest, Romania then Amsterdam, Netherlands, T4-212 (oral presentation), May 27-30 then p. 965-970, 2007.</p>

Activități și rezultate. Etapa II(2007). Obiectivul 4(Implementarea modelelor matematice). Activitatea 7(Funcții obiectiv și formule de iterație).

Scopul optimizării a fost minimizarea erorii de estimare între model și experiment folosind regresia liniară. Mai multe formule au fost elaborate și folosite, în funcție de natura erorii de estimare (și/sau legea de distribuție a acesteia). Următoarele tabele redau modelele de construcție a funcției de penalitate realizate:

	<p>Cazul clasic, cu cele două moduri de exprimare a erorii (vertical - Y variabila supusă erorii experimentale, orizontal - X variabila supusă erorii experimentale, și perpendicular (ambele X și Y supuse erorii).</p>
	<p>Valorile funcțiilor de penalitate exprimate ca funcții limită.</p>
	<p>Întreg domeniul de posibilități cuprins între ofsetul orizontal și cel vertical în funcție de gradul de afectare cu erori pe fiecare variabilă în parte și punctia PM - funcția putere</p>

Funcția putere (sau Hölder) este capabilă să măture întreaga arie determinată de cele două ofseturi:

$$\forall S \exists p \in \mathbb{R}^+ \text{ a.i. } |a_s| = \text{PM} \left(\left| a_{(Y-ax-c)^2} \right|, \left| a_{(X-(Y-c)/a)^2} \right|, p \right)$$

ceea ce aduce ca și consecință că:

$$\left| a_{(Y-ax-c)^2} \right| \leq |a_s| \leq \left| a_{(X-(Y-c)/a)^2} \right|$$

Formule specifice sunt redate în tabelul de mai jos:

Procese la interfata fazelor: Modelare matematică, Optimizare numerică, Implementare web, cu aplicatii în separarea și caracterizarea seriilor de compuși chimici biologic activi

Funcția penalitate (S)	Formule de calcul
$\sum (\hat{y}_i - y_i)^2$	$Y = aX + b$ $a = \frac{M(XY) - M(X)M(Y)}{M(X^2) - M^2(X)}$ $b = \frac{M(X^2)M(Y) - M(X)M(XY)}{M(X^2) - M^2(X)}$
$\sum (\hat{x}_i - x_i)^2$	$X = aY + b$ $a = \left(\frac{M(XY) - M(X)M(Y)}{M(Y^2) - M^2(Y)} \right)^{-1}$ $b = -\frac{M(Y^2)M(X) - M(Y)M(XY)}{M(XY) - M(X)M(Y)}$
$\sum \frac{(\hat{y}_i - y_i)^2 (\hat{x}_i - x_i)^2}{(\hat{y}_i - y_i)^2 + (\hat{x}_i - x_i)^2}$	$Y = aX + b$ $a = -\frac{(M(X^2) - M^2(X)) - (M(Y^2) - M^2(Y))}{2(M(XY) - M(X)M(Y))}$ $\pm \sqrt{\frac{(M(X^2) - M^2(X)) - (M(Y^2) - M^2(Y))}{2(M(XY) - M(X)M(Y))} + 1}$ $b = M(Y) - aM(X)$
$\frac{m^2 + 1}{(a - m)^2} \sum (ax_i - y_i + b)^2$	$Y = aX + b$ $a = \frac{m^2 (M(X^2) + M^2(X)) - 2m(M(XY) - M(X)M(Y)) + (M(Y^2) - M^2(Y)) \pm \sqrt{\Delta}}{2(m(3M^2(X) - M(X^2)) + (M(XY) - M(X)M(Y)))}$ $\Delta = 2m^2 (4(M(XY) - M(X)M(Y))^2 - (M(Y^2) - M^2(Y))(3M(X^2) - 5M^2(X))) - 8m(M(XY) - M(X)M(Y))(m^2(M(X^2) - M^2(X)) + (M(Y^2) - M^2(Y))) + m^4 (M(X^2) + M^2(X))^2 + (M(Y^2) - M^2(Y))^2$ $b = M(Y) - aM(X)$
$(Y - aX)^2, M(X) = 0$	$Y = aX$ $a = \frac{M(XY)}{M(X^2)}$
$(Y - aX)^2, M(X) \neq 0$	$Y = aX$ $a = \frac{M(Y)}{M(X)}$
$(Y - (aX + b))^2$	$Y = aX + b$

	$a = \frac{M(XY) - M(X)M(Y)}{M(X^2) - M^2(X)}$ $b = \frac{M(X^2)M(Y) - M(X)M(XY)}{M(X^2) - M^2(X)}$
$(X - Ya)^2, M(Y) = 0$	$X = aY$ $a = \frac{M(Y^2)}{M(XY)}$
$(X - Ya)^2, M(Y) \neq 0$	$X = aY$ $a = \frac{M(X)}{M(Y)}$
$(X - (Y - b)/a)^2$	$Y = aX + b$ $a = \frac{M(Y^2) - M^2(Y)}{M(XY) - M(X)M(Y)}$ $b = \frac{M(Y)M(XY) - M(X)M(Y^2)}{M(XY) - M(X)M(Y)}$
$GM \begin{pmatrix} a_{(Y - aX - b)^2} \\ a_{(X - (Y - b)/a)^2} \end{pmatrix}$	$Y = aX + b$ $a = \pm \sqrt{\frac{M(Y^2) - M^2(Y)}{M(X^2) - M^2(X)}}$ $b = M(Y) \mp M(X) \sqrt{\frac{M(Y^2) - M^2(Y)}{M(X^2) - M^2(X)}}$

Activități și rezultate. Etapa II(2007). Obiectivul 4(Implementarea modelelor matematice). Activitatea 8(Implementarea programelor de calcul).

Obținerea constantelor necunoscute pentru modele cinetice de reacție este o rutină extensivă în timp. Implementarea acesteia s-a făcut din acest motiv în FreePascal, aplicația având astfel viteza necesară pentru a efectua calculele și a produce soluțiile în timp real.

Aplicația a beneficiat de două implementări, una pentru identificarea funcției obiectiv optime, și a doua pentru aplicarea funcției obiectiv obținute și identificarea constantelor necunoscute.

```
Implementarea 0. Identificarea funcției obiectiv optime pentru modele cinetice
unit functii;
interface
uses math;
const
  dt=4e-5;
  //e0=125.0; -c0
  e0=210.1;
  X0=0.00882328636334255/e0;
  A0=0.010-X0;
  B0=0.010-X0;
  N=7000;
  N_opt=1100;
  N_const=3;
  N_coefs=4;
  N_vars=N_const+N_coefs;
  dv=0.01;
  r_stop=0.999;
type
  file_name=string[10];
  x_array=array[0..N]of extended;
  v_array=array[0..N_vars]of extended;
  i_array=array[0..N_vars]of shortint;
  procedure v_af(var v:v_array; msg:file_name);
  procedure i_af(var i:i_array);
  procedure s_A0(var x,y:x_array; md1,md2,md3:extended; var s_sum: extended);
  procedure s_A1(var x,y:x_array; md1,md2,md3:extended; var s_sum: extended);
  procedure s_A2(var x,y:x_array; md1,md2,md3:extended; var s_sum: extended);
  procedure s_A3(var x,y:x_array; md1,md2,md3:extended; var s_sum: extended);
  procedure s_A4(var x,y:x_array; md1,md2,md3:extended; var s_sum: extended);
  procedure s_A5(var x,y:x_array; md1,md2,md3:extended; var s_sum: extended);
  procedure s_B0(var x,y:x_array; md1,md2,md3:extended; var s_sum: extended);
  procedure s_B1(var x,y:x_array; md1,md2,md3:extended; var s_sum: extended);
  procedure s_B2(var x,y:x_array; md1,md2,md3:extended; var s_sum: extended);
  procedure s_B3(var x,y:x_array; md1,md2,md3:extended; var s_sum: extended);
  procedure s_B4(var x,y:x_array; md1,md2,md3:extended; var s_sum: extended);
  procedure s_B5(var x,y:x_array; md1,md2,md3,md4:extended; var s_sum: extended);
  procedure s_C0(var x,y:x_array; var s_sum: extended);
  procedure s_C1(var x,y:x_array; var s_sum: extended);
  procedure s_C2(var x,y:x_array; var s_sum: extended);
  procedure s_C3(var x,y:x_array; var s_sum: extended);
  procedure s_C4(var x,y:x_array; var s_sum: extended);
  procedure s_C5(var x,y:x_array; var s_sum: extended);
  procedure s_C6(var x,y:x_array; var s_sum: extended);
  procedure s_C7(var x,y:x_array; var s_sum: extended);
  procedure s_C8(var x,y:x_array; var s_sum: extended);
  procedure s_C9(var x,y:x_array; var s_sum: extended);
  procedure s_CA(var x,y:x_array; var s_sum: extended);
  procedure ini_mod(var v:v_array);
  procedure get_mod(var v,c:v_array; var x:x_array);
  procedure v_next(var i:i_array; var v0,v1,vl:v_array);
  procedure i_start(var i:i_array);
  function i_next(var i:i_array):boolean;
  procedure get_exp(var x:x_array;fn:file_name);
  procedure get_ini(var x,v:v_array;fn:file_name);
  procedure put_ini(var x:v_array;fn:file_name; step:longint);
  function m1(var x:x_array):extended;
  function m2(var x,y:x_array):extended;
  function mye(var x,y:x_array; ex,ey:extended):extended;
  function mxe(var x:x_array; ex:extended):extended;
  procedure one_step(var v,c:v_array);
```

```

procedure v_copy(var v1,v2:v_array);
implementation
procedure s_A0(var x,y:x_array; md1,md2,md3:extended; var s_sum: extended);
//S = (E-aX)^2 //md1 = m_y2; //Ok
var
  m_xy, m_x2 : extended;
begin
  m_xy := m2(x,y);
  m_x2 := m2(x,x);
  s_sum := md1-m_xy*m_xy/m_x2;
end;
procedure s_B0(var x,y:x_array; md1,md2,md3:extended; var s_sum: extended);
//S = (E-aX-b)^2 //md1 = m_y2; md2 = m_y1 //Ok
var
  a, b : extended;
  m_x, m_x2, m_xy : extended;
begin
  m_x := m1(x);
  m_x2 := m2(x,x);
  m_xy := m2(x,y);
  a := (m_xy-m_x*md2)/(m_x2-m_x*m_x);
  b := md2-a*m_x;
  s_sum := md1 - 2.0*a*m_xy - 2.0*b*md2+a*a*m_x2 + 2.0*a*b*m_x + b*b;
end;
procedure s_A1(var x,y:x_array; md1,md2,md3:extended; var s_sum: extended);
//S = E^1(E-aX)^2 //md1 = m_y3; //Ok
var
  m_xy2, m_x2y : extended;
begin
  m_xy2 := mye(x,y,1.0,2.0);
  m_x2y := mye(x,y,2.0,1.0);
  s_sum := md1-m_xy2*m_xy2/m_x2y;
end;
procedure s_B1(var x,y:x_array; md1,md2,md3:extended; var s_sum: extended);
//S = (E)(E-aX-b)^2 //md1 = m_y; md2 =m_y2; md3=m_y3; //Ok
var
  m_xy, m_xy2, m_x2y : extended;
  a,b : extended;
begin
  m_xy := m2(x,y);
  m_xy2 := mye(x,y,1.0,2.0);
  m_x2y := mye(x,y,2.0,1.0);
  a := (md1*m_xy2-md2*m_xy)/(m_x2y*md1-m_xy*m_xy);
  b := (md2-a*m_xy)/md1;
  s_sum := md3 - 2.0*a*m_xy2-2.0*b*md2+a*a*m_x2y+2.0*a*b*m_xy+b*b*md1;
end;
procedure s_A2(var x,y:x_array; md1,md2,md3:extended; var s_sum: extended);
//S = E^0.5(E-aX)^2 //md1 = my25; //Ok
var
  m_xy15, m_x2y05 : extended;
begin
  m_xy15 := mye(x,y,1.0,1.5);
  m_x2y05 := mye(x,y,2.0,0.5);
  s_sum := md1-m_xy15*m_xy15/m_x2y05;
end;
procedure s_B2(var x,y:x_array; md1,md2,md3:extended; var s_sum: extended);
//S = (E^0.5)(E-aX-b)^2 //md1 = my05; md2 =my15; md3=my25; //Ok
var
  m_xy05, m_x2y05, m_xy15 : extended;
  a,b : extended;
begin
  m_xy05 := mye(x,y,1.0,0.5);
  m_xy15 := mye(x,y,1.0,1.5);
  m_x2y05 := mye(x,y,2.0,0.5);
  a := (m_xy15-md2)/(m_x2y05-m_xy05);
  b := (md2-a*m_xy05)/md1;
  s_sum := md3 - 2.0*a*m_xy15 - 2.0*b*md2+a*a*m_x2y05 + 2.0*a*b*m_xy05 + b*b*md1;
end;
procedure s_A3(var x,y:x_array; md1,md2,md3:extended; var s_sum: extended);
//S = (1/E)(E-aX)^2 //md1 = m_y; //Ok
var
  m_x, m_x2_y : extended;
begin
  m_x := m1(x);
  m_x2_y := mye(x,y,2.0,-1.0);
  s_sum := md1 - m_x*m_x/m_x2_y;
end;
procedure s_B3(var x,y:x_array; md1,md2,md3:extended; var s_sum: extended);
//S = (1/E)(E-aX-b)^2 //md1 = my1; md2 =my_1; //Ok

```

Procese la interfața fazelor: Modelare matematică, Optimizare numerică, Implementare web, cu aplicații în separarea și caracterizarea seriilor de compuși chimici biologic activi

```

var
  m_x, m_x2_y, m_x_y : extended;
  a,b : extended;
begin
  m_x := m1(x);
  m_x2_y := mye(x,y,2.0,-1.0);
  m_x_y := mye(x,y,1.0,-1.0);
  a := (m_x-(m_x_y/md2))/(m_x2_y-m_x_y*m_x_y/md2);
  b := (1.0-a*m_x_y)/md2;
  s_sum := md1+a*a*m_x2_y+b*b*md2+2.0*a*b*m_x_y-2.0*a*m_x-2.0*b;
end;
procedure s_A4(var x,y:x_array; md1,md2,md3:extended; var s_sum: extended);
//S = (1/E^0.5)(E-aX)^2 //md1 = my15; //Ok
var
  m_xy05, m_x2y_05 : extended;
begin
  m_xy05 := mye(x,y,1.0,0.5);
  m_x2y_05 := mye(x,y,2.0,-0.5);
  s_sum := md1-m_xy05*m_xy05/m_x2y_05;
end;
procedure s_B4(var x,y:x_array; md1,md2,md3:extended; var s_sum: extended);
//S = (1/E^0.5)(E-aX-b)^2 //md1 = my05; md2=my15; md3 = my_05; //!!!!!!!
var
  m_xy_05, m_xy05, m_x2y_05 : extended;
  a,b : extended;
begin
  m_xy05 := mye(x,y,1.0,0.5);
  m_xy_05 := mye(x,y,1.0,-0.5);
  m_x2y_05 := mye(x,y,2.0,-0.5);
  a := (m_xy05-md1)/(m_x2y_05-m_xy_05);
  b := (md1-a*m_xy_05)/md3;
  s_sum := md2-2*a*m_xy05-2*b*md1+a*a*m_x2y_05+2*a*b*m_xy_05+b*b*md3;
end;
procedure s_A5(var x,y:x_array; md1,md2,md3:extended; var s_sum: extended);
//S = (E+1/E)(E-aX)^2 //md1 = m_y3; md2 = m_y1; //Ok
var
  a : extended;
  m_x, m_xy2, m_x2y, m_x2_y : extended;
begin
  m_x := m1(x);
  m_xy2 := mye(x,y,1.0,2.0);
  m_x2y := mye(x,y,2.0,1.0);
  m_x2_y := mye(x,y,2.0,-1.0);
  a := (m_x+m_xy2)/(m_x2y+m_x2_y);
  s_sum := md1 + md2 - 2.0*a*m_xy2-2.0*a*m_x+a*a*m_x2y+a*a*m_x2_y;
end;
procedure s_B5(var x,y:x_array; md1,md2,md3,md4:extended; var s_sum: extended);
//S = (E+1/E)(E-aX-b)^2 //md1 = my2; md2 =my1; md3=my0;md4=my3; //Ok
var
  m_xy2, m_x2y, m_x, m_xy, m_x2_y, m_x_y : extended;
  a,b,d : extended;
begin
  m_xy2 := mye(x,y,1.0,2.0);
  m_x2y := mye(x,y,2.0,1.0);
  m_x := m1(x);
  m_xy := m2(x,y);
  m_x2_y := mye(x,y,2.0,-1.0);
  m_x_y := mye(x,y,1.0,-1.0);
  a := (m_xy2+m_x)*(md2+md3) - (m_xy+m_x_y)*(md1+1);
  b := (m_xy2+m_x)*(m_xy+m_x_y)-(m_x2y+m_x2_y)*(md1+1);
  d := (m_x2y+m_x2_y)*(md2+md3)-(m_xy+m_x_y)*(m_xy+m_x_y);
  a := a/d;
  b := b/d;
  s_sum := md4 + md2 + a*a*(m_x2y+m_x2_y)
    + 2.0*a*b*(m_xy+m_x_y)+b*b*(md2+md3)-2.0*a*(m_xy2+m_x)-2.0*b*(md1+1);
end;
procedure s_C0(var x,y:x_array; var s_sum: extended);
var
  i : longint;
  s,p : extended;
begin
  s := 0.0;
  for i:= 0 to N_opt do
    s := s + y[i]/x[i];
  s := s/(N_opt+1);
  p := 0.0;
  for i:= 0 to N_opt do
    p := p + abs(y[i]/x[i]-s);
  p := p/(N_opt+1);

```

```

s_sum := p;
end;
procedure s_C1(var x,y:x_array; var s_sum: extended);
var
  i : longint;
  s,p : extended;
begin
  s := 0.0;
  for i:= 0 to N_opt do
    s := s + y[i]/x[i];
  s := s/(N_opt+1);
  p := 0.0;
  for i:= 0 to N_opt do
    p := p + power(abs(y[i]/x[i]-s),2.0);
  p := power(p,0.5);
  p := p/(N_opt+1);
  s_sum := p;
end;
procedure s_C2(var x,y:x_array; var s_sum: extended);
var
  i : longint;
  s,p : extended;
begin
  s := 0.0;
  for i:= 0 to N_opt do
    s := s + y[i]/x[i];
  s := s/(N_opt+1);
  p := 0.0;
  for i:= 0 to N_opt do
    p := p + power(abs(y[i]/x[i]-s),0.5);
  p := power(p,2.0);
  p := p/(N_opt+1);
  s_sum := p;
end;
procedure s_C3(var x,y:x_array; var s_sum: extended);
var
  i : longint;
  s,p : extended;
begin
  s := 0.0;
  for i:= 0 to N_opt do
    s := s + y[i]/x[i];
  s := s/(N_opt+1);
  p := 0.0;
  for i:= 0 to N_opt do
    p := p + power(abs(y[i]/x[i]-s),1.5);
  p := p/(N_opt+1);
  s_sum := p;
end;
procedure s_C4(var x,y:x_array; var s_sum: extended);
var
  i : longint;
  s,p : extended;
begin
  s := 0.0;
  for i:= 0 to N_opt do
    s := s + y[i]/x[i];
  s := s/(N_opt+1);
  p := 0.0;
  for i:= 0 to N_opt do
    p := p + x[i]*power(abs(y[i]/x[i]-s),2.0);
  p := p/(N_opt+1);
  s_sum := p;
end;
procedure s_C5(var x,y:x_array; var s_sum: extended);
var
  i : longint;
  s,p : extended;
begin
  s := 0.0;
  for i:= 0 to N_opt do
    s := s + y[i]/x[i];
  s := s/(N_opt+1);
  p := 0.0;
  for i:= 0 to N_opt do
    p := p + power(x[i],0.5)*power(abs(y[i]/x[i]-s),2.0);
  p := p/(N_opt+1);
  s_sum := p;
end;
procedure s_C6(var x,y:x_array; var s_sum: extended);

```

Procese la interfața fazelor: Modelare matematică, Optimizare numerică, Implementare web, cu aplicații în separarea și caracterizarea seriilor de compuși chimici biologic activi

```
var
  i : longint;
  s,p : extended;
begin
  s := 0.0;
  for i:= 0 to N_opt do
    s := s + y[i]/x[i];
  s := s/(N_opt+1);
  p := 0.0;
  for i:= 0 to N do
    p := p + power(x[i],2.0)*power(abs(y[i]/x[i]-s),2.0);
  p := p/(N_opt+1);
  s_sum := p;
end;
procedure s_C7(var x,y:x_array; var s_sum: extended);
var
  i : longint;
  s1,s2,p : extended;
begin
  s1 := 0.0;
  s2 := 0.0;
  for i:= 0 to N_opt do begin
    s1 := s1 + y[i]/x[i];
    s2 := s2 + x[i]/y[i];
  end;
  s1 := s1/(N_opt+1);
  s2 := s2/(N_opt+1);
  p := 0.0;
  for i:= 0 to N_opt do
    p := p + power(abs(x[i]/y[i]-s2),2.0)*power(abs(y[i]/x[i]-s1),2.0);
  p := p/(N_opt+1);
  s_sum := p;
end;
procedure s_C8(var x,y:x_array; var s_sum: extended);
var
  i : longint;
  s1,s2,p : extended;
begin
  s1 := 0.0;
  s2 := 0.0;
  for i:= 0 to N_opt do begin
    s1 := s1 + y[i]/x[i];
    s2 := s2 + x[i]/y[i];
  end;
  s1 := s1/(N_opt+1);
  s2 := s2/(N_opt+1);
  p := 0.0;
  for i:= 0 to N_opt do
    p := p + power(abs(x[i]/y[i]-s2),0.5)*power(abs(y[i]/x[i]-s1),0.5);
  p := p/(N_opt+1);
  s_sum := p;
end;
procedure s_C9(var x,y:x_array; var s_sum: extended);
var
  i : longint;
  s1,s2,p : extended;
begin
  s1 := 0.0;
  s2 := 0.0;
  for i:= 0 to N_opt do begin
    s1 := s1 + y[i]/x[i];
    s2 := s2 + x[i]/y[i];
  end;
  s1 := s1/(N_opt+1);
  s2 := s2/(N_opt+1);
  p := 0.0;
  for i:= 0 to N_opt do
    p := p + power(abs(x[i]/y[i]-s2),0.125)*power(abs(y[i]/x[i]-s1),0.125);
  p := p/(N_opt+1);
  s_sum := p;
end;
procedure s_CA(var x,y:x_array; var s_sum: extended);
var
  i : longint;
  s1,s2 : extended;
  p1,p2 : extended;
begin
  s1 := 0.0;
  s2 := 0.0;
  for i:= 1 to N_opt do begin
```

```

    s1 := s1 + y[i]/x[i];
    s2 := s2 + x[i]/y[i];
end;
s1 := s1 /N_opt;
s2 := s2 /N_opt;
p1 := 0.0;
p2 := 0.0;
for i:= 1 to N_opt do begin
    p1 := p1 + power(abs(y[i]/x[i]-s1),2.0);
    p2 := p2 + power(abs(x[i]/y[i]-s2),2.0);
end;
s_sum := sqrt(p1*p2);
end;
procedure one_step(var v,c:v_array);
var
    c1:extended;//X,A,B :1,2,3
begin
    c1:=v[1]*power(c[2],v[4])*power(c[3],v[5])-v[2]*power(c[1],v[6]);
    c[1] := c[1]+dt*(c1-v[3]*power(c[1],v[7]));
    c[2] := c[2]-dt*c1;
    c[3] := c[3]-dt*c1;
end;
procedure get_mod(var v,c:v_array; var x:x_array);
var
    i : shortint;
    j : longint;
begin
    x[0] := c[1];
    for j := 1 to N_opt do begin
        one_step(v,c);
        x[j] := c[1];
        for i := 1 to N_const do
            if(c[i]<0)then begin
                //writeln('concentratia substantei ',i,' la iteratia ',j,' negativa!');
                c[i] := 0.0;
                //readln;//halt;
            end;
        end;
    end;
end;
procedure v_next(var i:i_array; var v0,vi,v1:v_array);
var
    j : shortint;
begin
    for j := 1 to N_vars do v1[j] := v0[j]*(1+vi[j]*(i[j]-1));
end;
procedure i_start(var i:i_array);
var
    j:shortint;
begin
    for j:= 0 to N_vars do i[j] := 0;
end;
function i_next(var i:i_array):boolean;
var
    j:shortint;
    t:shortint;
begin
    i[N_vars] := i[N_vars] + 1;
    for j:= N_vars downto 1 do begin
        t := i[j] div 3;
        i[j] := i[j] mod 3;
        i[j-1] := i[j-1] + t;
    end;
    if i[0]>0 then i_next := true else i_next := false;
end;
procedure get_exp(var x:x_array;fn:file_name);
var
    f_in:text;
    i:longint;
begin
    assign(f_in,fn);
    reset(f_in);
    i:=0;
    while(not(eof(f_in)))do begin
        readln(f_in,x[i]);
        i:=i+1;
    end;
    close(f_in);
end;
procedure get_ini(var x,v:v_array;fn:file_name);
var

```

Procese la interfața fazelor: Modelare matematică, Optimizare numerică, Implementare web, cu aplicații în separarea și caracterizarea seriilor de compuși chimici biologic activi

```
f_in:text;
i:longint;
begin
  assign(f_in,fn);
  reset(f_in);
  i:=0;
  while(not(eof(f_in)))do begin
    readln(f_in,x[i]);
    v[i]:=dv;
    i:=i+1;
  end;
  close(f_in);
end;
procedure put_ini(var x:v_array;fn:file_name; step:longint);
var
  f_in:text;
  i:longint;
begin
  assign(f_in,fn);
  {$i-}
  reset(f_in);
  i:=ioresult;
  {$i+}
  if(i>0) then begin
    rewrite(f_in);
    close(f_in);
  end;
  append(f_in);
  write(f_in,step);
  for i:=0 to N_vars do write(f_in,x[i]);
  writeln(f_in);
  close(f_in);
end;
function m1(var x:x_array):extended;
var
  rez:extended;
  i:longint;
begin
  rez :=0.0;
  for i:=0 to N_opt do rez := rez + x[i];
  m1 := rez/(N_opt+1);
end;
function m2(var x,y:x_array):extended;
var
  rez:extended;
  i:longint;
begin
  rez :=0.0;
  for i:=0 to N_opt do rez := rez + x[i]*y[i];
  m2 := rez/(N_opt+1);
end;
function mye(var x,y:x_array; ex,ey:extended):extended;
var
  rez:extended;
  i:longint;
begin
  rez :=0.0;
  for i:=0 to N_opt do rez := rez + power(x[i],ex)*power(y[i],ey);
  mye := rez/(N_opt+1);
end;
function mxex(var x:x_array; ex:extended):extended;
var
  rez:extended;
  i:longint;
begin
  rez :=0.0;
  for i:=0 to N_opt do rez := rez + power(x[i],ex);
  mxex := rez/(N_opt+1);
end;
procedure ini_mod(var v:v_array);
begin
  v[1] := X0;
  v[2] := A0;
  v[3] := B0;
end;
procedure i_af(var i:i_array);
var
  j:shortint;
begin
  for j:= 1 to N_vars-1 do write(i[j], ' ');
```

```

    writeln(i[N_vars]);
end;
procedure v_af(var v:v_array; msg:file_name);
var
  j:shortint;
begin
  writeln(msg);
  for j:= 0 to N_vars-1 do write(v[j],' ');
  writeln(v[N_vars]);
end;
procedure v_copy(var v1,v2:v_array);
var
  i : shortint;
begin
  for i := 0 to N_vars do v2[i] := v1[i];
end;
end.
program Cin;
{$APPYTYPE CONSOLE}
uses
  SysUtils,
  math,
  functii;
var
  x_exp:x_array;
  x_mod:x_array;
  m_y0,m_y_,m_y1, m_y2, m_y3, my25,my05,my15 :extended;
  v_0:v_array;
  v_v:v_array;
  v_i:i_array;
  v_1:v_array;
  v_c:v_array;//concentratii instantanee
  v_2:v_array;
  step:longint;
  stepf:longint;
begin
  get_exp(x_exp,'Text1');
  m_y1 := m1(x_exp);
  m_y2 := m2(x_exp,x_exp);
  m_y0 := mxe(x_exp,-1.0);
  m_y_ := mxe(x_exp,-0.5);
  m_y3 := mxe(x_exp,3.0);
  my25 := mxe(x_exp,2.5);
  my05 := mxe(x_exp,0.5);
  my15 := mxe(x_exp,1.5);
  get_ini(v_0,v_v,'Start');
  //put_ini(v_0,'Itera',0);
  put_ini(v_0,'Itera1',0);
  v_copy(v_0,v_2);
  step := 0;
  stepf:= 0;
  repeat
    i_start(v_i);
    step := step +1;
    repeat
      v_next(v_i,v_0,v_v,v_1);
      ini_mod(v_c);
      get_mod(v_1,v_c,x_mod);
      s_A0(x_mod,x_exp,m_y2,0.00,0.00,v_1[0]);
      //s_A1(x_mod,x_exp,m_y3,0.00,0.00,v_1[0]);
      //s_A2(x_mod,x_exp,my25,0.00,0.00,v_1[0]);
      //s_A3(x_mod,x_exp,m_y1,0.0,0.0,v_1[0]);
      //s_A4(x_mod,x_exp,my15,0.0,0.00,v_1[0]);
      //s_A5(x_mod,x_exp,m_y3,m_y1,0.0,v_1[0]);
      //s_B0(x_mod,x_exp,m_y2,m_y1,0.00,v_1[0]);
      //s_B1(x_mod,x_exp,m_y1,m_y2,m_y3,v_1[0]);
      //s_B2(x_mod,x_exp,my05,my15,my25,v_1[0]);
      //s_B3(x_mod,x_exp,m_y1,m_y0,0.0,v_1[0]);
      //s_B4(x_mod,x_exp,my05,my15,m_y_,v_1[0]);
      //s_B5(x_mod,x_exp,m_y2,m_y1,m_y0,m_y3,v_1[0]);
      //s_C0(x_mod,x_exp,v_1[0]);
      //s_C1(x_mod,x_exp,v_1[0]);
      //s_C2(x_mod,x_exp,v_1[0]);
      //s_C3(x_mod,x_exp,v_1[0]);
      //s_C4(x_mod,x_exp,v_1[0]);
      //s_C5(x_mod,x_exp,v_1[0]);
      //s_C6(x_mod,x_exp,v_1[0]);
      //s_C7(x_mod,x_exp,v_1[0]);
      //s_C8(x_mod,x_exp,v_1[0]);
      //s_C9(x_mod,x_exp,v_1[0]);

```

Procese la interfața fazelor: Modelare matematică, Optimizare numerică, Implementare web, cu aplicații în separarea și caracterizarea seriilor de compuși chimici biologic activi

```
//s_CA(x_mod,x_exp,v_1[0]);
if(v_1[0]<v_2[0])then begin   ///
  v_copy(v_1,v_2);
end;
until i_next(v_i);
//put_ini(v_2,'Itera',step);
if(step mod 100 = 0) then writeln(step,' ',v_2[0]);
if(v_2[0]<v_0[0])then begin
  v_copy(v_2,v_0);
  stepf := stepf + 1;
  put_ini(v_2,'Itera1',stepf);
end;
until(step>128000);//(v_2[0]>r_stop);   ///
{ TODO -oUser -cConsole Main : Insert code here }
end.
```

Implementarea 1. Obținerea constantelor necunoscute ale modelelor cinetice

```
unit functii;
interface
uses math;
const
  dt=4e-5;
  N=7000;
  N_const=3;
  dv=0.01;
const
  y0=1.0;
  y1=1.0;
  y2=1.0;
  y3=2.0;
type
  file_name=string[10];
  x_array=array[0..N]of extended;
  v_array=array[0..N_const]of extended;
  i_array=array[0..N_const]of shortint;
procedure s_CC(var x,y:x_array; n_e:longint; o_o_s: extended; var s_sum: extended);
procedure s_CB(var x,y:x_array; n_e:longint; o_o_s: extended; var s_sum: extended);
procedure s_CA(var x,y:x_array; n_e:longint; var s_sum: extended);
procedure s_A0(var x,y:x_array; n_e:longint; my2:extended; var s_sum: extended);
procedure s_B0(var x,y:x_array; n_e:longint; my2,my1:extended; var s_sum: extended);
procedure get_mod(var v,c:v_array; var x:x_array; n_e:longint);
procedure v_next(var i:i_array; var v0,vi,v1:v_array);
procedure i_start(var i:i_array);
function i_next(var i:i_array):boolean;
procedure get_exp(var x:x_array;var n_e:longint; fn:file_name);
procedure put_ini(var x:v_array;fn:file_name; step:longint);
procedure one_step(var v,c:v_array);
procedure v_copy(var v1,v2:v_array);
function m1(var x:x_array; n_e:longint):extended;
function m2(var x,y:x_array; n_e:longint):extended;
implementation
procedure s_CC(var x,y:x_array; n_e:longint; o_o_s: extended; var s_sum: extended);
var
  i : longint;
  i_n : longint;
  n_s : longint;
  s1,s2,p1,p2 : extended;
begin
  n_s := 6*n_e div 14;
  s1 := 0.0;  s2 := 0.0;  p1 := 0.0;  p2 := 0.0;  i_n := 0;
  for i:= 1 to n_s do if(y[i]<o_o_s) then begin
    s1 := s1 + y[i]/x[i];
    s2 := s2 + x[i]/y[i];
    i_n := i_n + 1;
  end;
  s1 := s1/i_n;  s2 := s2/i_n;
  for i:= 1 to n_s do if(y[i]<o_o_s) then begin
    p1 := p1 + power(abs(y[i]/x[i]-s1),4.0);
    p2 := p2 + power(abs(x[i]/y[i]-s2),4.0);
  end;
  s_sum := power(p1*p2,0.5);
end;
procedure s_CB(var x,y:x_array; n_e:longint; o_o_s: extended; var s_sum: extended);
var
  i : longint;
  i_n : longint;
  s1,s2,p1,p2 : extended;
begin
  s1 := 0.0;  s2 := 0.0;  p1 := 0.0;  p2 := 0.0;  i_n := 0;
  for i:= 1 to n_e do if(y[i]<o_o_s) then begin
```

```

    s1 := s1 + y[i]/x[i];
    s2 := s2 + x[i]/y[i];
    i_n := i_n + 1;
end;
s1 := s1/i_n;  s2 := s2/i_n;
for i:= 1 to n_e do if(y[i]<o_o_s) then begin
    p1 := p1 + power(abs(y[i]/x[i]-s1),4.0);
    p2 := p2 + power(abs(x[i]/y[i]-s2),4.0);
end;
s_sum := power(p1*p2,0.5);
end;
procedure s_CA(var x,y:x_array; n_e:longint; var s_sum: extended);
var
    i : longint;
    s1,s2,p1,p2 : extended;
begin
    s1 := 0.0;  s2 := 0.0;  p1 := 0.0;  p2 := 0.0;
    for i:= 1 to n_e do begin
        s1 := s1 + y[i]/x[i];
        s2 := s2 + x[i]/y[i];
    end;
    s1 := s1/n_e;  s2 := s2/n_e;
    for i:= 1 to n_e do begin
        p1 := p1 + power(abs(y[i]/x[i]-s1),8.0)/sqrt(i);
        p2 := p2 + power(abs(x[i]/y[i]-s2),8.0)/sqrt(i);
    end;
    s_sum := sqrt(p1*p2);
end;
procedure s_A0(var x,y:x_array; n_e: longint; my2:extended; var s_sum: extended);
var
    m_xy, m_x2 : extended;
begin//S = (E-aX)^2
    m_xy := m2(x,y,n_e);
    m_x2 := m2(x,x,n_e);
    s_sum := my2-m_xy*m_xy/m_x2;
end;
procedure s_B0(var x,y:x_array; n_e:longint; my2,my1:extended; var s_sum: extended);
var
    a, b, m_x, m_x2, m_xy : extended;
begin//S = (E-aX-b)^2
    m_x := m1(x,n_e);
    m_x2 := m2(x,x,n_e);
    m_xy := m2(x,y,n_e);
    a := (m_xy-m_x*my1)/(m_x2-m_x*m_x);
    b := my1-a*m_x;
    s_sum := my2 - 2.0*a*m_xy - 2.0*b*my1+a*a*m_x2 + 2.0*a*b*m_x + b*b;
end;
procedure one_step(var v,c:v_array);
begin//X,A,B :1,2,3
    c[0] := dt*(v[1]*power(c[2],y0)*power(c[3],y1)-v[2]*power(c[1],y2));
    c[1] := c[1]+c[0]-dt*v[3]*power(c[1],y3);
    c[2] := c[2]-c[0];
    c[3] := c[3]-c[0];
end;
procedure get_mod(var v,c:v_array; var x:x_array; n_e:longint);
var
    i : shortint;
    j : longint;
begin
    x[0] := c[1];
    for j := 1 to n_e do begin
        one_step(v,c);
        x[j] := c[1];
        for i := 1 to N_const do
            if(c[i]<0)then begin
                c[i] := 0.0;
            end;
        end;
    end;
end;
procedure v_next(var i:i_array; var v0,vi,v1:v_array);
var
    j : shortint;
begin
    for j := 1 to N_const do v1[j] := v0[j]*(1+vi[j]*(i[j]-1));
end;
procedure i_start(var i:i_array);
var
    j:shortint;
begin
    for j:= 0 to N_const do i[j] := 0;

```

Procese la interfața fazelor: Modelare matematică, Optimizare numerică, Implementare web, cu aplicații în separarea și caracterizarea seriilor de compuși chimici biologic activi

```
end;
function i_next(var i:i_array):boolean;
var
  j:shortint;
  t:shortint;
begin
  i[N_const] := i[N_const] + 1;
  for j:= N_const downto 1 do begin
    t := i[j] div 3;
    i[j] := i[j] mod 3;
    i[j-1] := i[j-1] + t;
  end;
  if i[0]>0 then begin
    i_next := true;
    i[0] := 0;
  end else i_next := false;
end;
procedure get_exp(var x:x_array;var n_e:longint; fn:file_name);
var
  f_in:text;
  i:longint;
begin
  assign(f_in,fn);
  reset(f_in);
  i:=0;
  while(not(eof(f_in)))do begin
    readln(f_in,x[i]);
    i:=i+1;
  end;
  close(f_in);
  n_e := i-1;
end;
procedure put_ini(var x:v_array;fn:file_name; step:longint);
var
  f_in:text;
  i:longint;
begin
  assign(f_in,fn);
  {$i-}
  reset(f_in);
  i:=ioresult;
  {$i+}
  if(i>0) then begin
    rewrite(f_in);
    close(f_in);
  end;
  append(f_in);
  write(f_in,step);
  for i:=0 to N_const do write(f_in,x[i]);
  write(f_in,y0);
  write(f_in,y1);
  write(f_in,y2);
  write(f_in,y3);
  writeln(f_in);
  close(f_in);
end;
procedure v_copy(var v1,v2:v_array);
var
  i : shortint;
begin
  for i := 0 to N_const do v2[i] := v1[i];
end;
function m1(var x:x_array; n_e:longint):extended;
var
  rez:extended;
  i:longint;
begin
  rez :=0.0;
  for i:=0 to n_e do rez := rez + x[i];
  m1 := rez/(n_e+1);
end;
function m2(var x,y:x_array; n_e:longint):extended;
var
  rez:extended;
  i:longint;
begin
  rez :=0.0;
  for i:=0 to n_e do rez := rez + x[i]*y[i];
  m2 := rez/(n_e+1);
end;
```

```

end.
program Cin;
{$APPYTYPE CONSOLE}
uses
  SysUtils,
  math,
  functii;
var
  x_exp:x_array;
  x_mod:x_array;
  v_0:v_array;
  v_v:v_array;
  v_i:i_array;
  v_1:v_array;
  v_c:v_array;//concentratii instantanee
  v_2:v_array;
  stepf,step:longint;
  n_exp:longint;
  X0,A0,B0,e0:extended; //my1,my2: extended;
  out_of_scale:extended;
begin
  get_exp(x_exp,n_exp,'Text05');
  A0 := 0.005;
  B0 := 0.005;
  out_of_scale := 1.7e-1;
  e0 := 1012.2;
  v_0[0] := 1e80;
  v_0[1] := 1.82e+3;
  v_0[2] := 8.5e-15;
  v_0[3] := 2.66e+5;
  X0 := x_exp[0]/e0;
  //my2:=m2(x_exp,x_exp,n_exp);//my1:=m1(x_exp,n_exp);
  put_ini(v_0,'Iteral',0);
  v_copy(v_0,v_2);
  step := 0;
  stepf:= 0;
  i_start(v_i);
  v_v[1] := dv; v_v[2] := dv; v_v[3] := dv;
  repeat
    repeat
      v_next(v_i,v_0,v_v,v_1);
      v_c[1] := X0;
      v_c[2] := A0-X0;
      v_c[3] := B0-X0;
      get_mod(v_1,v_c,x_mod,n_exp);
      s_CC(x_mod,x_exp,n_exp,out_of_scale,v_1[0]);
      //s_CB(x_mod,x_exp,n_exp,out_of_scale,v_1[0]);
      //s_CA(x_mod,x_exp,n_exp,v_1[0]);
      //s_A0(x_mod,x_exp,n_exp,my2,v_1[0]);
      //s_B0(x_mod,x_exp,n_exp,my2,my1,v_1[0]);
      if(v_1[0]<v_2[0])then begin
        v_copy(v_1,v_2);
      end;
    until i_next(v_i);
    if (step mod 200 = 0) then writeln(step:5, ' ', v_2[0]);
    step := step + 1;
    if(v_2[0]<v_0[0])then begin
      v_copy(v_2,v_0);
      stepf := stepf + 1;
      put_ini(v_2,'Iteral',stepf);
    end;
  until(step>128000);
end.

```

Pentru optimizarea fazei mobile s-au creat un set de programe care implementează modelele cu 6 și 7 termeni (M6 și M7) pentru funcțiile de răspuns cromatografic implementate. Sursele acestor programe sunt redată mai jos:

[index.php](#)

```

<br>
Mobile Phase Optimization Program
<BR>
The program is designed for MPO applied to Tree Solvents Mixtures in HPTLC.
<table border='1'>
<tr>
<td valign='top'>
<img src='mobile_phase_opt.png'>

```

Procese la interfata fazelor: Modelare matematică, Optimizare numerică, Implementare web, cu aplicatii în separarea și caracterizarea seriilor de compuși chimici biologic activi

```
<td valign='top'>
<li>The model described in Romanian language <A HRef='MODEL_Romanian_Language.pdf'>Link</A>
<br>
<li>Reference (in english):<br>
Lorentz JĂNTSCHI, Sorana-Daniela BOLBOACA, Mihaela Ligia UNGURESAN, Mobile Phase Optimization
in Three Solvents High Performance Thin-Layer Chromatography: Methodology and Evaluation, 6th
European Conference on Computational Chemistry, September 3-7, 2006, European Association for
Chemical and Molecular Sciences, Tale, Slovakia, 2006.
</table>
You can choose one of the following data:
?>
<form method='get' action='opl.php'>
<table width='80%'>
<tr>
<td>
<select name='d'>
<?
$b="ls data*.php";
$a=`$b`;
$b=explode("\n",$a);
if(!$b[count($b)-1])unset($b[count($b)-1]);
for($i=0;$i<count($b);$i++)
echo("<option value='".$i."'>".$b[$i]);
?>
</select>
<td>
<input type='submit' value='Enter to the program'>
</table>
</form>
```

opl.php

```
echo("<form method='post' action='op2.php'");
if(array_key_exists("d",$_GET)){
  if(is_numeric($_GET["d"])){
    echo("?d=".$_GET["d"]);
  }
}
echo(">");
include("definitions.php");
if(isset($reference))
  if($reference)
    echo("<b>Reference for data:<li>".$reference."</li></b>");
  else
    echo("<b>Reference N/A</b>");
else
  echo("Reference: in press.");
?>
<br>
<table width='100%'>
<tr>
<td align='center'>
<b>Solvents:</b><BR>
<textarea name='solvents' rows='10' cols='20'>
<?
for($i=0;$i<count($solvents);$i++){
  echo($solvents[$i]);
  echo("\r\n");
}
?>
</textarea>
<td align='center'>
<b>Compounds:</b><BR>
<textarea name='compounds' rows='10' cols='20'>
<?
for($i=0;$i<count($compounds);$i++){
  echo(htmlentities($compounds[$i]));
  echo("\r\n");
}
?>
</textarea>
<tr>
<td colspan=2 align='center'>
<BR>
<input type='submit'>
</table>
</form>
```

op2.php

```
echo("<form method='post' action='op3.php'");
if(array_key_exists("d",$_GET)){
```

```

if(is_numeric($_GET["d"])){
    echo("?d=".$_GET["d"]);
}
}
echo(">");
include("definitions.php");
if(isset($reference))
    if($reference)
        echo("<b>Reference for data:<li>".$reference."</li></b>");
    else
        echo("<b>Reference N/A</b>");
else
    echo("Reference: in press.");
?>
<br>
<table width='100%'>
<tr>
<td align='center'>
<?
unset($solvents);
$solvents=explode("\r\n",$_POST['solvents']);
for($i=count($solvents)-1;$i>=0;$i--){
    if(!$solvents[$i]) unset($solvents[$i]);
}
unset($compounds);
$compounds=explode("\r\n",$_POST['compounds']);
for($i=count($compounds)-1;$i>=0;$i--){
    if(!$compounds[$i]) unset($compounds[$i]);
}
?>
<B>Experiments:</B><BR>
<table border='1' align='center'>
<?
echo("<tr><td>Experiment<td>Include");
for($i=0;$i<3;$i++){
    echo("<td>".$solvents[$i]);
}
for($j=0;$j<count($experiments);$j++){
    $is_checked=" DISABLED";
    $eluent_explode=explode(" ",$eluent);
    if(array_key_exists($j,$eluent_explode)){
        $is_checked=" CHECKED";
    }
    echo("<tr><td align='center'>".$j."<td align='center'><input type='checkbox'
name='experiment'".$j."".$is_checked.">");
    $ex=explode(" ",$experiments[$j]);
    for($i=0;$i<count($ex);$i++){
        echo("<td align='center'>".$ex[$i]."%");
    }
}
?>
</table>
<td align='center'>
<b>Compounds:</b><BR>
<textarea name='compounds' rows='10' cols='30' readonly='true'>
<?
for($i=0;$i<count($compounds);$i++){
    echo(htmlentities($compounds[$i]));
    echo("\r\n");
}
?>
</textarea>
<BR>
<BR>
<b>Solvents:</b><BR>
<textarea name='solvents' rows='6' cols='30' readonly='true'>
<?
for($i=0;$i<count($solvents);$i++){
    echo($solvents[$i]);
    echo("\r\n");
}
?>
</textarea>
</table>
<BR>
<center>
<input type='submit'>
</center>
</form>

```

Procese la interfața fazelor: Modelare matematică, Optimizare numerică, Implementare web, cu aplicații în separarea și caracterizarea seriilor de compuși chimici biologic activi

```
op3.php
<?
$cols_textarea=9;
$cols_input=8;
include("definitions.php");
unset($solvents);
$solvents=explode("\r\n",$_POST['solvents']);
for($i=count($solvents)-1;$i>=0;$i--){
    if(!$solvents[$i]) unset($solvents[$i]);
}
$mixture=implode(" ",$solvents);
unset($compounds);
$compounds=explode("\r\n",$_POST['compounds']);
for($i=count($compounds)-1;$i>=0;$i--){
    if(!$compounds[$i]) unset($compounds[$i]);
}
for($i=0;$i<count($results);$i++){
    $res[$i]=explode(" ",$results[$i]);
}
$elu=explode(" ",$eluent);
echo("<br>");
if(isset($reference))
    if($reference)
        echo("<b>Reference for data:<li>".$reference."</li></b>");
    else
        echo("<b>Reference N/A</b>");
else
    echo("Reference: in press.");

?>
<form method='post' action='op4.php'>
<table border='1' class='loril' align='center'>
<tr><td>Compound
<?
$ne=0;
for($i=0;$i<count($experiments);$i++){
    if(array_key_exists("experiment".$i,$_POST))
        $ne++;
echo("<td colspan='".$ne."' align='center'>Experiments results for solvents = (");
echo("<input type='text' style='text-align:center' size='40' readonly='true' name='solvents'
value='".$mixture."' class='lori'>");
echo("<tr><td>Mixture<BR>characteristic");
$ii=0;
for($i=0;$i<count($experiments);$i++){
    if(array_key_exists("experiment".$i,$_POST)){
        echo("<td><input type='text' name='experiment".$ii."' value='".$experiments[$i]."'
size='".$cols_input."' style='text-align:center' readonly='true' class='lori'>");
        echo("<BR>pos, width");
        $ii++;
    }
}
for($j=0;$j<count($compounds);$j++){
    echo("<tr><td align='center' valign='center'><input type='text' name='compound".$j."'
value='".$htmlentities($compounds[$j])."' readonly='true' size='".$cols_input."'
class='lori'>");
    $i=0;
    for($i=0;$i<count($experiments);$i++){
        if(array_key_exists("experiment".$i,$_POST)){
            echo("<td><input type='text' name='data_".$j."_".$ii."' size='".$cols_textarea."'
class='lori'>");
            if(array_key_exists($j,$res)){
                if((array_key_exists(2*$i,$res[$j]))&&(array_key_exists(2*$i+1,$res[$j])))
                    echo(" value='".$res[$j][2*$i].",".$res[$j][2*$i+1]."'");
            }
            echo(">");
            $ii++;
        }
    }
}
echo("<tr><td align='center' valign='center'><input type='text' name='eluent' value='eluent'
readonly='true' size='".$cols_input."' class='lori'>");
$ii=0;
for($i=0;$i<count($experiments);$i++){
    if(array_key_exists("experiment".$i,$_POST)){
        echo("<td><input type='text' name='data_e_".$ii."' size='".$cols_textarea."' class='lori'>");
        if(array_key_exists($i,$elu)){
            echo(" value='".$elu[$i]."'");
        }
        echo(">");
        $ii++;
    }
}
?>
```

```

</table>
Warning: all data selection produces a file of approximately 4 Mb!
<table border='1'>
<tr>
<td colspan='3' valign='top'>
Model Equation:
<LI>
<input type='checkbox' name='model6' checked>
Y = a<sub>1</sub>x<sub>1</sub>+a<sub>2</sub>x<sub>2</sub>+a<sub>3</sub>x<sub>3</sub>
+a<sub>4</sub>x<sub>1</sub>x<sub>2</sub>+a<sub>5</sub>x<sub>1</sub>x<sub>3</sub>
+a<sub>6</sub>x<sub>2</sub>x<sub>3</sub>
<LI>
<input type='checkbox' name='model7' checked>
Y = a<sub>1</sub>x<sub>1</sub>+a<sub>2</sub>x<sub>2</sub>+a<sub>3</sub>x<sub>3</sub>
+a<sub>4</sub>x<sub>1</sub>x<sub>2</sub>+a<sub>5</sub>x<sub>1</sub>x<sub>3</sub>
+a<sub>6</sub>x<sub>2</sub>x<sub>3</sub>+a<sub>7</sub>x<sub>1</sub>x<sub>2</sub>x<sub>3</sub>
<tr>
<td valign='top'>
Dependent Variable:
<LI>
<input type='checkbox' name='of' checked>FO
<LI>
<input type='checkbox' name='rs' checked>RS
<LI>
<input type='checkbox' name='rf' checked>RF
<td valign='top'>
Graph:<br>
<input type='radio' name='spectra' value='rg'>Red (best) - Green (worst)<br>
<input type='radio' name='spectra' value='gr' CHECKED>Green gradient only<br>
<td valign='top'>
<center>
<input type='submit'>
</center>
</table>
</form>

```

op4.php

```

include("z_HPTLC_Models.php");
include("z_F_OBJ.php");
define("n_f_i","18");
if(array_key_exists("spectra",$_POST)){
    $spectra = $_POST["spectra"];
}else{
    $spectra="gr";
}

$arr=get_defined_functions();
$arr_excl=array_search("definition_show_page_info",$arr["user"]);
if(!$arr_excl===FALSE)unset($arr["user"][$arr_excl]);
echo("<hl>Program functions</hl>".implode(" ",$arr["user"])."<BR>");unset($arr);
if(array_key_exists("model6",$_POST))
    $m6="a<sub>1</sub>x<sub>1</sub>+a<sub>2</sub>x<sub>2</sub>+a<sub>3</sub>x<sub>3</sub>
+a<sub>4</sub>x<sub>1</sub>x<sub>2</sub>+a<sub>5</sub>x<sub>1</sub>x<sub>3</sub>
+a<sub>6</sub>x<sub>2</sub>x<sub>3</sub><BR>";
if(array_key_exists("model7",$_POST))
    $m7="a<sub>1</sub>x<sub>1</sub>+a<sub>2</sub>x<sub>2</sub>+a<sub>3</sub>x<sub>3</sub>
+a<sub>4</sub>x<sub>1</sub>x<sub>2</sub>+a<sub>5</sub>x<sub>1</sub>x<sub>3</sub>
+a<sub>6</sub>x<sub>2</sub>x<sub>3</sub>
+a<sub>7</sub>x<sub>1</sub>x<sub>2</sub>x<sub>3</sub><BR>";
if(array_key_exists("rs",$_POST)) $rs="rs";
if(array_key_exists("rf",$_POST)) $rf="rf";
if(array_key_exists("of",$_POST)) $of="of";
c_post($_POST,"solvents","mixtures","experiment","compound","data","length",
"retention_factor","compound_pair","resolutions_pair","resolutions_all","resolutions",
"resolutions_sort");
echo("<hl>Data</hl>");
af_table("solvents","","","");
af_table("experiment","","","");
af_table("compound_pair","","","");
af_table("resolutions_pair","","","");
af_table("length","","","");
af_table("mixtures","solvents","experiment","");
af_table("data","experiment","compound","");
af_table("retention_factor","experiment","compound","");
af_table("resolutions_all","experiment","compound_pair","");
af_table("resolutions","experiment","resolutions_pair","");
af_table("resolutions_sort","experiment","resolutions_pair","");
display_results(array("&#916;"),"rf",array("6","7"),"retention_factor","mixtures","solvents",
array("compound"),"experiment","max");
display_results(array("all","sort"),"rs",array("6","7"),"resolutions","mixtures","solvents",

```

Procese la interfața fazelor: Modelare matematică, Optimizare numerică, Implementare web, cu aplicații în separarea și caracterizarea seriilor de compuși chimici biologic activi

```
array("compound_pair","resolutions_pair"),"experiment","max");

if(array_key_exists("of",$POST)){
  echo("<h1>Objective functions</h1>");
  obj_funcs("f_sm","retention_factor","resolutions_sort","experiment");
  obj_funcs("f_rsa","resolutions_sort","resolutions_sort","experiment");
  obj_funcs("f_rrp","resolutions_sort","resolutions_sort","experiment");
  obj_funcs("f_inf","retention_factor","resolutions_sort","experiment");
  echo("<BR>");
  obj_func("f_ob1","f_sm","f_rsa","f_rrp","f_inf",
"retention_factor","resolutions_sort","experiment");
  obj_func("f_ob2","f_sm","f_rsa","f_rrp","f_inf",
"retention_factor","resolutions_sort","experiment");
  obj_func("f_ob3","f_sm","f_rsa","f_rrp","f_inf",
"retention_factor","resolutions_sort","experiment");
  obj_func("f_ob4","f_sm","f_rsa","f_rrp","f_inf",
"retention_factor","resolutions_sort","experiment");
  obj_func("f_ob5","f_sm","f_rsa","f_rrp","f_inf",
"retention_factor","resolutions_sort","experiment");
  echo("<BR>");
  $obj_file="z_F_OBJ.php";
  echo("<h1>".$obj_file."</h1>");
  highlight_file($obj_file);
  $f_ii[0]="o";
  display_results(array("f"),"of",array("6","7"),
"f_sm","mixtures","solvents",array("f_ii"),"experiment","min");
  display_results(array("f"),"of",array("6","7"),
"f_rsa","mixtures","solvents",array("f_ii"),"experiment","max");
  display_results(array("f"),"of",array("6","7"),
"f_rrp","mixtures","solvents",array("f_ii"),"experiment","max");
  display_results(array("f"),"of",array("6","7"),
"f_inf","mixtures","solvents",array("f_ii"),"experiment","max");
  echo("<HR>");
  display_results(array("f"),"of",array("6","7"),
"f_ob1","mixtures","solvents",array("f_ii"),"experiment","min");
  display_results(array("f"),"of",array("6","7"),
"f_ob2","mixtures","solvents",array("f_ii"),"experiment","max");
  display_results(array("f"),"of",array("6","7"),
"f_ob3","mixtures","solvents",array("f_ii"),"experiment","max");
  display_results(array("f"),"of",array("6","7"),
"f_ob4","mixtures","solvents",array("f_ii"),"experiment","min");
  display_results(array("f"),"of",array("6","7"),
"f_ob5","mixtures","solvents",array("f_ii"),"experiment","max");
}
?>
```

Programele listate mai sus folosesc un set de module implementate extern. Acestea sunt

"z_HPTLC_Models.php" și "z_F_OBJ.php" ale căror surse sunt redată mai jos:

z_F_OBJ.php

```
<?
function f_ob1($sm,$rsa,$rrp,$inf){
  for($i=0;$i<count($sm);$i++){
    $f_tot[$i]=1/$sm[$i]+$inf[$i];
  }
  return $f_tot;
}
function f_ob2($sm,$rsa,$rrp,$inf){
  for($i=0;$i<count($sm);$i++){
    $f_tot[$i]=1/$sm[$i]+$inf[$i]/10+$inf[$i]*$rsa[$i]/20+$rrp[$i]/20;
  }
  return $f_tot;
}
function f_ob3($sm,$rsa,$rrp,$inf){
  for($i=0;$i<count($sm);$i++){
    $f_tot[$i]=1/(1/$sm[$i]+$inf[$i]/10+$inf[$i]*$rsa[$i]/20+$rrp[$i]/20);
  }
  return $f_tot;
}
function f_ob4($sm,$rsa,$rrp,$inf){
  for($i=0;$i<count($sm);$i++){
    $f_tot[$i]=$sm[$i];
    if($inf[$i])
      $f_tot[$i]+=10/$inf[$i];
    if(($inf[$i]&&$rsa[$i]))
      $f_tot[$i]+=20/$inf[$i]/$rsa[$i];
    if($rrp[$i])
      $f_tot[$i]+=20/$rrp[$i];
  }
  return $f_tot;
}
}
```

```

function f_ob5($sm,$rsa,$rrp,$inf){
    $sm=div_row($sm,array_sum($sm)/count($sm));
    $rsa=div_row($rsa,array_sum($rsa)/count($rsa));
    $rrp=div_row($rrp,array_sum($rrp)/count($rrp));
    $inf=div_row($inf,array_sum($inf)/count($inf));
    for($i=0;$i<count($sm);$i++){
        $f_tot[$i]=1/$sm[$i]+$inf[$i]+$inf[$i]*$rsa[$i]+$rrp[$i];
    }
    return $f_tot;
}
function Worst_OF($f_oo){
    return $f_oo[0];
}
?>

```

z_HPTLC_Models.php

```

<?
function c_post(&$p,$s,$m,$e,$c,$d,$l,$r_f,$c_p,$r_p,$r_a,$r,$r_s){
    $GLOBALS[$s]=explode(",",$p[$s]);
    for($i=0;$i<count($GLOBALS[$s]);$i++){
        $GLOBALS[$s][$i]=trim($GLOBALS[$s][$i]);
    }//solvents done
    for($i=0;array_key_exists($e.$i,$p);$i++){
        $GLOBALS[$m][$i]=explode(",",$p[$e.$i]);
        for($j=0;$j<count($GLOBALS[$m][$i]);$j++){
            $GLOBALS[$m][$i][$j]=trim($GLOBALS[$m][$i][$j]);
        }//mixtures done
    }
    for($i=0;array_key_exists($e.$i,$p);$i++){
        $GLOBALS[$e][$i]=$i;
    }//experiments done
    for($i=0;array_key_exists($c.$i,$p);$i++){
        $GLOBALS[$c][$i]=trim($p[$c.$i]);
        for($j=0;array_key_exists($e.$j,$p);$j++){
            $GLOBALS[$d][$i][$j]=trim($p[$d."_".$i."_".$j]);
            if(!$GLOBALS[$d][$i][$j])die("Please fill all measured data.");
            $GLOBALS[$d][$i][$j]=explode(",",$GLOBALS[$d][$i][$j]);
            $GLOBALS[$d][$i][$j][0]=trim($GLOBALS[$d][$i][$j][0]);
            $GLOBALS[$d][$i][$j][1]=trim($GLOBALS[$d][$i][$j][1]);
        }
    }//measured positions done
    for($i=0;array_key_exists($d."_e".$i,$p);$i++){
        $GLOBALS[$l][$i]=$p[$d."_e".$i];
    }//columns lengths done
    for($i=0;$i<count($GLOBALS[$d]);$i++){
        for($j=0;$j<count($GLOBALS[$d][$i]);$j++){
            $GLOBALS[$r_f][$i][$j]=$GLOBALS[$d][$i][$j][0]/$GLOBALS[$l][$j];
        }//retention factors done
    }
    $r_f_1=array_transpose($GLOBALS[$r_f]);
    $r_f_2=$r_f_1;
    for($i=0;$i<count($r_f_2);$i++){
        sort($r_f_2[$i]);
    }
    for($i=0;$i<count($r_f_2);$i++){
        for($j=0;$j<count($r_f_2[$i]);$j++){
            $r_f_2[$i][$j]=array_search($r_f_2[$i][$j],$r_f_1[$i]);
        }
    }
    for($i=0;$i<count($GLOBALS[$c])-1;$i++){
        for($j=$i+1;$j<count($GLOBALS[$c]);$j++){
            $GLOBALS[$c_p][]=" ".$GLOBALS[$c][$i].", ".$GLOBALS[$c][$j].";";
            if($j==$i+1) $GLOBALS[$r_p][]=" ".$i.", ".$j.";";
            for($k=0;$k<count($GLOBALS[$e]);$k++){
                $GLOBALS[$r_a][count($GLOBALS[$c_p])-1][$k]=
                    R0($GLOBALS[$d][$i][$k][0],$GLOBALS[$d][$j][$k][0],
                    $GLOBALS[$d][$i][$k][1],$GLOBALS[$d][$j][$k][1]);
            }
        }
    }
    for($k=0;$k<count($GLOBALS[$e]);$k++){
        for($i=0;$i<count($r_f_2[$k])-1;$i++){
            $GLOBALS[$r][$k][]=
                R0($GLOBALS[$d][$r_f_2[$k][$i]][$k][0],$GLOBALS[$d][$r_f_2[$k][$i+1]][$k][0],
                $GLOBALS[$d][$r_f_2[$k][$i]][$k][1],$GLOBALS[$d][$r_f_2[$k][$i+1]][$k][1]);
        }
    }
    $GLOBALS[$r]=array_transpose($GLOBALS[$r]);
    $GLOBALS[$r_s]=resolution_sort($GLOBALS[$r]);
}
function resolution_sort($resolutions){
    $resolutions=array_transpose($resolutions);
    for($i=0;$i<count($resolutions);$i++){
        sort($resolutions[$i]);
    }
    return array_transpose($resolutions);
}

```

Procese la interfata fazelor: Modelare matematică, Optimizare numerică, Implementare web, cu aplicatii în separarea și caracterizarea seriilor de compusi chimici biologic activi

```
//sort resolutions
function af_table($table,$cols,$rows,$msg){
echo("<table border=1><tr><td>");
if($msg) echo($msg." ");
echo($table);
if(array_key_exists($table,$GLOBALS)){
if($cols)
for($i=0;$i<count($GLOBALS[$cols]);$i++)
echo("<td>".$GLOBALS[$cols][$i]);
for($i=0;$i<count($GLOBALS[$table]);$i++){
if(is_array($GLOBALS[$table][$i])){
echo("<tr>");
if($rows) echo("<td>".$GLOBALS[$rows][$i]);
for($j=0;$j<count($GLOBALS[$table][$i]);$j++)
if(is_array($GLOBALS[$table][$i][$j]))
echo("<td>".implode(":",$GLOBALS[$table][$i][$j]));
else
echo("<td>".sprintf("%1.4f",$GLOBALS[$table][$i][$j]));
}
else echo("<td>".$GLOBALS[$table][$i]);
}
}
echo("</table>");
}
//display a one, two or three dimensional matrix
function af_simu(&$v1,&$v2,$v3){
$af=implode("\t",$v1);
for($i=0;$i<count($v2);$i++)
$af.="\t".sprintf("%1.4f",$v2[$i]);
return($af."\t".sprintf("%1.6f",$v3)."\r\n");
}
function array_transpose(&$a){
for($i=0;$i<count($a);$i++)
for($j=0;$j<count($a[$i]);$j++)
$b[$j][$i]=$a[$i][$j];
return $b;
}
//transpose a matrix
function put_results($n,$text,$worst,$d,$m,$s,$c,$e,$optim){
$coefX=MX_Coefs($n,$GLOBALS[$d],$GLOBALS[$m]);
for($i=0;$i<count($GLOBALS[$m]);$i++)
$coefM[$i]=MX_Model($n,$GLOBALS[$m][$i]);
for($i=0;$i<count($coefX);$i++){
for($j=0;$j<count($GLOBALS[$m]);$j++){
$GLOBALS["calc"][$i][$j]=MX_Est($coefX[$i],$coefM[$j]);
if($GLOBALS["calc"][$i][$j]<0) $GLOBALS["calc"][$i][$j]=0;//!!!!!!!!!! NEW CHANGE
}
}
af_table($d,$e,$c,"");
af_table("calc",$e,$c,$n);
unset($GLOBALS["calc"]);
$af_all="";
if($optim=="max") $max=array(0,0,0,0);
else $min=array(0,0,0,1e100);
echo("<form method='post' action='graph.php' target='_blank'>");
for($i=0;$i<count($GLOBALS[$s]);$i++) echo($GLOBALS[$s][$i]."\t ");
echo("Estimated ".$text." min<BR><textarea name='data' cols='118' rows='10'>");
for($i=0;$i<101;$i++){
for($j=0;$j<101-$i;$j++){
$vx=array($i,$j,100-$i-$j);
$cM=MX_Model($n,$vx);
for($k=0;$k<count($coefX);$k++){
$rfy[$k]=MX_Est($coefX[$k],$cM);
if($rfy[$k]<0)$rfy[$k]=0;//!!!!!!!!!! NEW CHANGE
}
}
$opt=$worst($rfy);
if($opt>0){
$af_all.=af_simu($vx,$rfy,$opt);
if($optim=="max"){
if($max[3]<$opt){
$max=$vx;
$max[3]=$opt;
}
}
}
else{
if($min[3]>$opt){
$min=$vx;
$min[3]=$opt;
}
}
}
}
}
if($optim=="max") $max[3]=sprintf("%1.6f",$max[3]);
else $min[3]=sprintf("%1.6f",$min[3]);
echo($af_all);
```

```

echo("</textarea><BR>");
echo("<table border=1 width='80%' style='text-align:center;'><tr><td>");
echo("<table width='100%' style='text-align:center;'><tr><td>");
echo("X Axis: <select name='x'>");
for($i=0;$i<count($GLOBALS[$s]);$i++){
  echo("<option value='".$i."'");
  if($i==0) echo(" selected");
  echo(">".$GLOBALS[$s][$i]);
}
echo("</select><td>");
echo("Y Axis: <select name='y'>");
for($i=0;$i<count($GLOBALS[$s]);$i++){
  echo("<option value='".$i."'");
  if($i==1) echo(" selected");
  echo(">".$GLOBALS[$s][$i]);
}
echo("</select><td> Z min: ");
echo("<input type='text' name='z' size='4' value=''");
if($optim=="max") echo(sprintf("%1.3f",$max[3]*0.6).">");
else echo(sprintf("%1.3f",$min[3]).">");
echo("<td>Colors: <input type='text' name='c' size='4' value='254'>");
echo("<tr><td colspan='2'>");
if($optim=="max")
  echo("<sub>min</sub><sub>max</sub> = (".implode(" ",$max).")<BR>");
else
  echo("<sub>max</sub><sub>min</sub> = (".implode(" ",$min).")<BR>");
echo("<td colspan='2'><input name='spectra' type='hidden' value=''");
if(isset($GLOBALS["spectra"]))echo($GLOBALS["spectra"]);else echo("gr");
echo("><input type='submit' name='u' value='I want the Picture'>");
</table><td><input type='submit' name='v' value='I want the File'></table>");
echo("</form>");
}
function display_results($aa,$rr,$mm,$d,$m,$s,$c,$e,$opt){//aa[0]=
if(array_key_exists($rr,$GLOBALS)) for($i=0;$i<count($aa);$i++){
  $minus=""; $plus=$minus;
  if(count($aa)>1) {
    $minus=" ";
    $plus=$minus.$aa[$i];
  }
  echo("<h1>".$aa[$i].$minus.$GLOBALS[$rr]."</h1>");
  for($j=0;$j<count($mm);$j++) if(array_key_exists("m".$mm[$j],$GLOBALS)){
    echo($aa[$i].$minus.$GLOBALS[$rr]." = ".$GLOBALS["m".$mm[$j]]);
    put_results($mm[$j],$aa[$i].$minus.$GLOBALS[$rr],"Worst_".
strtoupper($GLOBALS[$rr]),$d.$plus,$m,$s,$c[$i],$e,$opt);
  }
}
}

class m_c{
  var $b;//free terms
  var $a;//linked terms
}
function MX_Model($n,&$x){
  $m=array($x[0]/100,$x[1]/100,$x[2]/100,$x[0]*$x[1]/10000,$x[0]*$x[2]/10000,$x[1]*$x[2]/10000);
  if($n==7) $m[6]=$x[0]*$x[1]*$x[2]/1000000;
  return $m;
}
function MX_Put($n,&$x,&$d,&$r){
  for($i=0;$i<count($x);$i++){
    $r->a[$i]=MX_Model($n,$x[$i]);
    $r->b[$i]=$d[$i];
  }
}
function MX_Est(&$a,&$x){//a1x1+a2x2+a3x3+a4x1x2+a5x1x3+a6x2x3+...
  $Rs=0;
  for($i=0;$i<count($a);$i++) $Rs+=$a[$i]*$x[$i];
  return $Rs;
}
function MX_System(&$S_in,&$S_out){
  for($j=0;$j<count($S_in->a);$j++){
    $S_out->b[$j]=m2($S_in->b,$S_in->a[$j]);
    for($i=0;$i<count($S_in->a);$i++)
      $S_out->a[$j][$i]=m2($S_in->a[$j],$S_in->a[$i]);
  }
}
function MX_Gauss(&$b,&$a){
  for($i=0;$i<count($a);$i++){
    $m=$i;//caut max in coloana
    for($j=$i+1;$j<count($a);$j++)

```

Procese la interfața fazelor: Modelare matematică, Optimizare numerică, Implementare web, cu aplicații în separarea și caracterizarea seriilor de compuși chimici biologic activi

```
if(abs($a[$i][$j])>abs($a[$i][$m]))$m=$j;
if($a[$i][$m]==0)return -1;
if($m != $i){//inlocuiesc linii
  $tmp=$b[$m];$b[$m]=$b[$i];$b[$i]=$tmp;
  for($j=0;$j<count($a);$j++){
    $tmp=$a[$m][$j];$a[$m][$j]=$a[$i][$j];$a[$i][$j]=$tmp;
  }
}
if(!abs($a[$i][$i])) return -1;
for($j=$i+1;$j<count($a);$j++)//impart linie
  $a[$i][$j]/=$a[$i][$i];
$b[$i]/=$a[$i][$i];
$a[$i][$i]=1;
for($j=$i+1;$j<count($a);$j++){//fac 0 sub diagonala
  $b[$j]-=$a[$j][$i]*$b[$i];
  for($k=count($a)-1;$k>$i;$k--){
    $a[$j][$k]-=$a[$j][$i]*$a[$i][$k];
  }
}
for($i=count($a)-1;$i>0;$i--)//fac 0 peste diagonala
  for($j=$i-1;$j>=0;$j--){
    $b[$j]-=$a[$j][$i]*$b[$i];
  }
return 1;
}
function MX_coefs($n,&$data,&$mixtures){
  for($i=0;$i<count($data);$i++){
    $m_c_t[$i] = new m_c;
    MX_Put($n,$mixtures,$data[$i],$m_c_t[$i]);
    $m_c_t[$i]->a=array_transpose($m_c_t[$i]->a);
    $m_c_X[$i] = new m_c;
    MX_System($m_c_t[$i],$m_c_X[$i]);
    $g=MX_Gauss($m_c_X[$i]->b,$m_c_X[$i]->a);
    if($g<0)die("Gauss error.");
    $coef[]=$m_c_X[$i]->b;
  }
  return $coef;
}
function m2(&$v,&$u){
  $rez=0;
  $n=count($v);
  for($i=0;$i<$n;$i++){
    $rez+=$v[$i]*$u[$i];
  }
  return $rez/$n;
}
function R0($l1,$l2,$w1,$w2){
  return abs(($l2-$l1)*2/($w1+$w2));
}
//compute the resolution

function Worst_RF($rf){
  $worst=1;
  sort($rf);
  for($i=0;$i<count($rf)-1;$i++){
    if(abs($rf[$i]-$rf[$i+1])<$worst) $worst=abs($rf[$i]-$rf[$i+1]);
  }
  return $worst;
}
//the worstest RF are returned
function Worst_RS($rs){
  $worst=$rs[0];
  for($i=1;$i<count($rs);$i++){
    if($rs[$i]<$worst) $worst=$rs[$i];
  }
  return $worst;
}
//the worstest RS are returned
function rf_sort(&$rf){
  $rf_s=array_transpose($rf);
  for($i=0;$i<count($rf_s);$i++) sort($rf_s[$i]);
  return array_transpose($rf_s);
}
function f_sm(&$r_f){
  $rf=rf_sort($r_f);
  $n=count($rf);//nr componenti
  for($i=0;$i<count($rf[0]);$i++){
    $drft=100.0/($n-1);
    $f_sm[$i]=0;
    for($j=0;$j<count($rf)-1;$j++){
      $f_sm[$i]+=pow($drft-100.0*abs($rf[$j][$i]-$rf[$j+1][$i]),2);
    }
    $f_sm[$i]=pow($f_sm[$i],0.5)/pow($n*($n+1),0.5);
  }
  return $f_sm;
}
//Sm
function f_rsa(&$r_s){
```

```

$rs=array_transpose($r_s);
for($i=0;$i<count($rs);$i++){
  $f_rsa[$i]=0;
  for($j=0;$j<count($rs[$i]);$j++){
    $f_rsa[$i]+=$rs[$i][$j]/count($rs[$i]);
  }
}
return $f_rsa;
} //RSM
function f_rrp(&$r_s){
  $f_rsa=f_rsa($r_s);
  $rs=array_transpose($r_s);
  for($i=0;$i<count($rs);$i++){
    $f_rrp[$i]=1;
    for($j=0;$j<count($rs[$i]);$j++){
      $f_rrp[$i]*=$rs[$i][$j];
    }
    if($f_rsa[$i])
      $f_rrp[$i]/=$f_rsa[$i];
    else
      $f_rrp[$i]=0;
  }
  return $f_rrp;
} //RRP
function f_inf(&$rf){
  $n=n_f_i;
  $fi="i_f";
  for($j=0;$j<count($rf[0]);$j++){
    for($i=0;$i<$n;$i++){
      $GLOBALS[$fi][$i][$j]=0;
    }
    for($j=0;$j<count($rf[0]);$j++){
      for($i=0;$i<count($rf);$i++){
        for($k=$n-1;$k>=0;$k--){
          if($rf[$i][$j]>=$k/$n) break;
        }
        $GLOBALS[$fi][$k][$j]++;
      }
    }
  }
  $r=f_log($GLOBALS[$fi],count($rf));
  //af_table($fi,"","","","");
  unset($GLOBALS[$fi]);
  return $r;
}
function f_log(&$fi,$n){
  for($j=0;$j<count($fi[0]);$j++){
    $r[$j]=0;
    for($i=0;$i<count($fi);$i++){
      if($fi[$i][$j]) $r[$j]-=$fi[$i][$j]*log($fi[$i][$j]/$n,2)/$n;
    }
  }
  return $r;
}
function div_row($row,$div){
  for($i=0;$i<count($row);$i++){
    $row[$i]/=$div;
  }
  return $row;
}
function obj_funcs($f_o,$r_f,$r_s,$e){
  $GLOBALS[$f_o][0]=$f_o($GLOBALS[$r_f]);
  $GLOBALS["o_rows"]=array($f_o);
  af_table($f_o,$e,"o_rows","");
  unset($GLOBALS["o_rows"]);
}
function obj_func($f_o,$sm,$rsa,$rrp,$inf,$r_f,$r_s,$e){
  $GLOBALS[$f_o][0]=$f_o($GLOBALS[$sm][0],$GLOBALS[$rsa][0],
  $GLOBALS[$rrp][0],$GLOBALS[$inf][0]);
  $GLOBALS["o_rows"]=array($f_o);
  af_table($f_o,$e,"o_rows","");
  unset($GLOBALS["o_rows"]);
}
?>

```

Procese la interfața fazelor: Modelare matematică, Optimizare numerică, Implementare web, cu aplicații în separarea și caracterizarea seriilor de compuși chimici biologic activi

Activități și rezultate. Etapa II(2007). Obiectivul 5(Obținerea parametrilor de model și de experiment). Activitatea 9(Testarea funcțiilor obiectiv).

Au fost testate funcțiile obiectiv pentru identificarea parametrilor cinetici de reacție. În continuare sunt redată rezultatele pentru primul set de date de test:

It	k_0	k_1	k_2	y_0	y_1	y_2	y_3	ε
0	1.00E+10	1.40E+03	1.20E-01	4.00E+03	1.00E+00	1.00E+00	1.00E+00	2.00E+00
1	6.86E-02	1.41E+03	1.21E-01	4.04E+03	9.90E-01	9.90E-01	9.90E-01	1.98E+00
2	6.48E-02	1.43E+03	1.22E-01	4.08E+03	9.80E-01	9.80E-01	9.80E-01	1.96E+00
3	6.07E-02	1.44E+03	1.24E-01	4.12E+03	9.70E-01	9.70E-01	9.70E-01	1.94E+00
4	5.63E-02	1.46E+03	1.25E-01	4.16E+03	9.61E-01	9.61E-01	9.61E-01	1.92E+00
5	5.17E-02	1.47E+03	1.26E-01	4.20E+03	9.51E-01	9.51E-01	9.51E-01	1.90E+00
6	4.69E-02	1.49E+03	1.27E-01	4.25E+03	9.41E-01	9.41E-01	9.41E-01	1.88E+00
7	4.20E-02	1.50E+03	1.29E-01	4.29E+03	9.32E-01	9.32E-01	9.32E-01	1.86E+00
8	3.71E-02	1.52E+03	1.30E-01	4.33E+03	9.23E-01	9.23E-01	9.23E-01	1.85E+00
9	3.22E-02	1.53E+03	1.31E-01	4.37E+03	9.14E-01	9.14E-01	9.14E-01	1.83E+00
10	2.75E-02	1.55E+03	1.33E-01	4.42E+03	9.04E-01	9.04E-01	9.04E-01	1.81E+00
11	2.30E-02	1.56E+03	1.34E-01	4.46E+03	8.95E-01	8.95E-01	8.95E-01	1.79E+00
12	1.89E-02	1.58E+03	1.35E-01	4.51E+03	8.86E-01	8.86E-01	8.86E-01	1.77E+00
13	1.52E-02	1.59E+03	1.37E-01	4.55E+03	8.78E-01	8.78E-01	8.78E-01	1.76E+00
14	1.20E-02	1.61E+03	1.38E-01	4.60E+03	8.69E-01	8.69E-01	8.69E-01	1.74E+00
15	9.49E-03	1.63E+03	1.39E-01	4.64E+03	8.60E-01	8.60E-01	8.60E-01	1.72E+00
16	7.68E-03	1.64E+03	1.38E-01	4.69E+03	8.51E-01	8.51E-01	8.69E-01	1.70E+00
17	6.67E-03	1.66E+03	1.37E-01	4.74E+03	8.43E-01	8.43E-01	8.77E-01	1.69E+00
18	6.48E-03	1.67E+03	1.35E-01	4.74E+03	8.35E-01	8.35E-01	8.86E-01	1.69E+00
19	6.46E-03	1.66E+03	1.34E-01	4.69E+03	8.26E-01	8.35E-01	8.95E-01	1.69E+00
20	6.45E-03	1.66E+03	1.32E-01	4.64E+03	8.18E-01	8.26E-01	9.04E-01	1.70E+00
21	6.44E-03	1.64E+03	1.31E-01	4.60E+03	8.10E-01	8.26E-01	9.13E-01	1.70E+00
22	6.43E-03	1.62E+03	1.30E-01	4.55E+03	8.18E-01	8.18E-01	9.22E-01	1.70E+00
23	6.42E-03	1.61E+03	1.29E-01	4.51E+03	8.10E-01	8.18E-01	9.31E-01	1.70E+00
24	6.41E-03	1.59E+03	1.27E-01	4.46E+03	8.18E-01	8.10E-01	9.41E-01	1.70E+00
25	6.41E-03	1.59E+03	1.26E-01	4.42E+03	8.10E-01	8.18E-01	9.50E-01	1.70E+00
26	6.40E-03	1.58E+03	1.25E-01	4.37E+03	8.10E-01	8.26E-01	9.60E-01	1.69E+00
27	6.39E-03	1.56E+03	1.23E-01	4.33E+03	8.18E-01	8.18E-01	9.69E-01	1.69E+00
28	6.39E-03	1.55E+03	1.22E-01	4.28E+03	8.09E-01	8.18E-01	9.79E-01	1.69E+00
29	6.37E-03	1.53E+03	1.21E-01	4.24E+03	8.18E-01	8.10E-01	9.89E-01	1.69E+00
30	6.37E-03	1.53E+03	1.20E-01	4.20E+03	8.09E-01	8.18E-01	9.99E-01	1.69E+00
31	6.36E-03	1.51E+03	1.19E-01	4.16E+03	8.01E-01	8.18E-01	1.01E+00	1.69E+00
32	6.35E-03	1.50E+03	1.17E-01	4.12E+03	8.09E-01	8.09E-01	1.02E+00	1.69E+00
33	6.35E-03	1.48E+03	1.16E-01	4.07E+03	8.01E-01	8.09E-01	1.03E+00	1.69E+00
34	6.34E-03	1.47E+03	1.15E-01	4.03E+03	8.09E-01	8.01E-01	1.04E+00	1.69E+00
35	6.33E-03	1.47E+03	1.14E-01	3.99E+03	8.01E-01	8.09E-01	1.05E+00	1.69E+00
36	6.32E-03	1.45E+03	1.13E-01	3.95E+03	8.01E-01	8.17E-01	1.06E+00	1.67E+00
37	6.32E-03	1.44E+03	1.12E-01	3.91E+03	8.09E-01	8.09E-01	1.07E+00	1.67E+00
38	6.31E-03	1.43E+03	1.11E-01	3.87E+03	8.01E-01	8.09E-01	1.08E+00	1.67E+00
39	6.30E-03	1.41E+03	1.09E-01	3.84E+03	8.09E-01	8.01E-01	1.09E+00	1.67E+00
40	6.29E-03	1.40E+03	1.08E-01	3.80E+03	8.09E-01	7.93E-01	1.10E+00	1.67E+00
41	6.28E-03	1.38E+03	1.07E-01	3.76E+03	8.01E-01	8.01E-01	1.11E+00	1.67E+00

42	6.28E-03	1.38E+03	1.06E-01	3.72E+03	8.09E-01	7.93E-01	1.13E+00	1.67E+00
43	6.27E-03	1.37E+03	1.05E-01	3.68E+03	8.09E-01	7.85E-01	1.14E+00	1.67E+00
44	6.26E-03	1.36E+03	1.04E-01	3.65E+03	8.01E-01	7.93E-01	1.15E+00	1.67E+00
45	6.26E-03	1.34E+03	1.03E-01	3.61E+03	8.01E-01	7.85E-01	1.16E+00	1.67E+00
46	6.24E-03	1.33E+03	1.02E-01	3.58E+03	7.93E-01	7.93E-01	1.17E+00	1.67E+00
47	6.24E-03	1.32E+03	1.01E-01	3.54E+03	7.93E-01	8.01E-01	1.18E+00	1.65E+00
48	6.23E-03	1.30E+03	1.00E-01	3.50E+03	8.01E-01	7.93E-01	1.19E+00	1.65E+00
49	6.22E-03	1.30E+03	9.90E-02	3.47E+03	7.93E-01	8.01E-01	1.21E+00	1.65E+00
50	6.21E-03	1.29E+03	9.80E-02	3.43E+03	7.85E-01	8.01E-01	1.22E+00	1.65E+00
51	6.21E-03	1.28E+03	9.70E-02	3.40E+03	7.93E-01	7.93E-01	1.23E+00	1.65E+00
52	6.20E-03	1.26E+03	9.61E-02	3.37E+03	7.85E-01	7.93E-01	1.24E+00	1.65E+00
53	6.19E-03	1.25E+03	9.51E-02	3.33E+03	7.93E-01	7.85E-01	1.26E+00	1.65E+00
54	6.18E-03	1.24E+03	9.41E-02	3.30E+03	7.93E-01	7.77E-01	1.27E+00	1.65E+00
55	6.17E-03	1.23E+03	9.32E-02	3.27E+03	7.85E-01	7.85E-01	1.28E+00	1.65E+00
56	6.17E-03	1.23E+03	9.23E-02	3.23E+03	7.93E-01	7.77E-01	1.29E+00	1.65E+00
57	6.16E-03	1.21E+03	9.13E-02	3.20E+03	8.01E-01	7.77E-01	1.31E+00	1.64E+00
58	6.15E-03	1.20E+03	9.04E-02	3.17E+03	7.93E-01	7.85E-01	1.32E+00	1.64E+00
59	6.14E-03	1.19E+03	8.95E-02	3.14E+03	7.93E-01	7.77E-01	1.33E+00	1.64E+00
60	6.13E-03	1.18E+03	8.86E-02	3.11E+03	7.85E-01	7.85E-01	1.35E+00	1.64E+00
61	6.13E-03	1.17E+03	8.77E-02	3.08E+03	7.77E-01	7.85E-01	1.36E+00	1.64E+00
62	6.12E-03	1.15E+03	8.69E-02	3.04E+03	7.85E-01	7.77E-01	1.37E+00	1.64E+00
63	6.11E-03	1.14E+03	8.60E-02	3.01E+03	7.85E-01	7.69E-01	1.39E+00	1.64E+00
64	6.10E-03	1.13E+03	8.51E-02	2.98E+03	7.77E-01	7.77E-01	1.40E+00	1.64E+00
65	6.10E-03	1.13E+03	8.43E-02	2.95E+03	7.84E-01	7.69E-01	1.41E+00	1.64E+00
66	6.09E-03	1.12E+03	8.34E-02	2.92E+03	7.92E-01	7.69E-01	1.43E+00	1.62E+00
67	6.08E-03	1.11E+03	8.26E-02	2.90E+03	7.84E-01	7.77E-01	1.44E+00	1.62E+00
68	6.07E-03	1.10E+03	8.18E-02	2.87E+03	7.84E-01	7.69E-01	1.46E+00	1.62E+00
69	6.06E-03	1.09E+03	8.10E-02	2.84E+03	7.77E-01	7.77E-01	1.47E+00	1.62E+00
70	6.06E-03	1.08E+03	8.02E-02	2.81E+03	7.69E-01	7.77E-01	1.49E+00	1.62E+00
71	6.05E-03	1.07E+03	7.94E-02	2.78E+03	7.76E-01	7.69E-01	1.50E+00	1.62E+00
72	6.04E-03	1.05E+03	7.86E-02	2.75E+03	7.76E-01	7.61E-01	1.52E+00	1.62E+00
73	6.03E-03	1.04E+03	7.78E-02	2.73E+03	7.69E-01	7.69E-01	1.53E+00	1.62E+00
74	6.03E-03	1.03E+03	7.70E-02	2.70E+03	7.61E-01	7.69E-01	1.55E+00	1.62E+00
75	6.01E-03	1.02E+03	7.62E-02	2.67E+03	7.69E-01	7.61E-01	1.56E+00	1.62E+00
76	6.01E-03	1.02E+03	7.55E-02	2.64E+03	7.76E-01	7.69E-01	1.58E+00	1.60E+00
77	6.00E-03	1.01E+03	7.47E-02	2.62E+03	7.76E-01	7.61E-01	1.59E+00	1.60E+00
78	5.99E-03	1.00E+03	7.40E-02	2.59E+03	7.69E-01	7.69E-01	1.61E+00	1.60E+00
79	5.99E-03	9.93E+02	7.32E-02	2.57E+03	7.61E-01	7.69E-01	1.63E+00	1.60E+00
80	5.98E-03	9.83E+02	7.25E-02	2.54E+03	7.68E-01	7.61E-01	1.64E+00	1.60E+00
81	5.97E-03	9.73E+02	7.18E-02	2.52E+03	7.68E-01	7.53E-01	1.66E+00	1.60E+00
82	5.96E-03	9.63E+02	7.10E-02	2.49E+03	7.61E-01	7.61E-01	1.68E+00	1.60E+00
83	5.95E-03	9.54E+02	7.03E-02	2.47E+03	7.53E-01	7.61E-01	1.69E+00	1.60E+00
84	5.94E-03	9.44E+02	6.96E-02	2.44E+03	7.61E-01	7.53E-01	1.71E+00	1.60E+00
85	5.94E-03	9.35E+02	6.89E-02	2.42E+03	7.61E-01	7.46E-01	1.73E+00	1.60E+00
86	5.93E-03	9.26E+02	6.82E-02	2.39E+03	7.68E-01	7.53E-01	1.74E+00	1.59E+00
87	5.92E-03	9.16E+02	6.76E-02	2.37E+03	7.68E-01	7.46E-01	1.76E+00	1.59E+00
88	5.91E-03	9.07E+02	6.69E-02	2.34E+03	7.61E-01	7.53E-01	1.78E+00	1.59E+00
89	5.90E-03	8.98E+02	6.62E-02	2.32E+03	7.61E-01	7.46E-01	1.80E+00	1.59E+00
90	5.89E-03	8.89E+02	6.56E-02	2.30E+03	7.53E-01	7.53E-01	1.81E+00	1.59E+00

Procese la interfața fazelor: Modelare matematică, Optimizare numerică, Implementare web, cu aplicații în separarea și caracterizarea seriilor de compuși chimici biologic activi

91	5.89E-03	8.80E+02	6.49E-02	2.27E+03	7.53E-01	7.45E-01	1.83E+00	1.59E+00
92	5.88E-03	8.71E+02	6.43E-02	2.25E+03	7.45E-01	7.53E-01	1.85E+00	1.59E+00
93	5.87E-03	8.63E+02	6.36E-02	2.23E+03	7.38E-01	7.53E-01	1.87E+00	1.59E+00
94	5.86E-03	8.54E+02	6.30E-02	2.21E+03	7.45E-01	7.45E-01	1.89E+00	1.59E+00
95	5.86E-03	8.45E+02	6.23E-02	2.19E+03	7.45E-01	7.38E-01	1.91E+00	1.59E+00
96	5.84E-03	8.37E+02	6.17E-02	2.16E+03	7.53E-01	7.45E-01	1.93E+00	1.57E+00
97	5.84E-03	8.37E+02	6.11E-02	2.14E+03	7.45E-01	7.53E-01	1.94E+00	1.57E+00
98	5.83E-03	8.29E+02	6.05E-02	2.12E+03	7.38E-01	7.53E-01	1.96E+00	1.57E+00
99	5.82E-03	8.20E+02	5.99E-02	2.10E+03	7.45E-01	7.45E-01	1.98E+00	1.57E+00

Rezultate pentru al doilea set de date de test:

It	k_0	k_1	k_2	y_0	y_1	y_2	y_3	ε
0	1.00E+10	1.40E+03	1.20E-01	4.00E+03	1.00E+00	1.00E+00	1.00E+00	2.00E+00
1	6.86E-02	1.41E+03	1.21E-01	4.04E+03	9.90E-01	9.90E-01	9.90E-01	1.98E+00
2	6.48E-02	1.43E+03	1.22E-01	4.08E+03	9.80E-01	9.80E-01	9.80E-01	1.96E+00
3	6.07E-02	1.44E+03	1.24E-01	4.12E+03	9.70E-01	9.70E-01	9.70E-01	1.94E+00
4	5.63E-02	1.46E+03	1.25E-01	4.16E+03	9.61E-01	9.61E-01	9.61E-01	1.92E+00
5	5.17E-02	1.47E+03	1.26E-01	4.20E+03	9.51E-01	9.51E-01	9.51E-01	1.90E+00
6	4.69E-02	1.49E+03	1.27E-01	4.25E+03	9.41E-01	9.41E-01	9.41E-01	1.88E+00
7	4.20E-02	1.50E+03	1.29E-01	4.29E+03	9.32E-01	9.32E-01	9.32E-01	1.86E+00
8	3.71E-02	1.52E+03	1.30E-01	4.33E+03	9.23E-01	9.23E-01	9.23E-01	1.85E+00
9	3.22E-02	1.53E+03	1.31E-01	4.37E+03	9.14E-01	9.14E-01	9.14E-01	1.83E+00
10	2.75E-02	1.55E+03	1.33E-01	4.42E+03	9.04E-01	9.04E-01	9.04E-01	1.81E+00
11	2.30E-02	1.56E+03	1.34E-01	4.46E+03	8.95E-01	8.95E-01	8.95E-01	1.79E+00
12	1.89E-02	1.58E+03	1.35E-01	4.51E+03	8.86E-01	8.86E-01	8.86E-01	1.77E+00
13	1.52E-02	1.59E+03	1.37E-01	4.55E+03	8.78E-01	8.78E-01	8.78E-01	1.76E+00
14	1.20E-02	1.61E+03	1.38E-01	4.60E+03	8.69E-01	8.69E-01	8.69E-01	1.74E+00
15	9.49E-03	1.63E+03	1.39E-01	4.64E+03	8.60E-01	8.60E-01	8.60E-01	1.72E+00
16	7.68E-03	1.64E+03	1.38E-01	4.69E+03	8.51E-01	8.51E-01	8.69E-01	1.70E+00
17	6.67E-03	1.66E+03	1.37E-01	4.74E+03	8.43E-01	8.43E-01	8.77E-01	1.69E+00
18	6.48E-03	1.67E+03	1.35E-01	4.74E+03	8.35E-01	8.35E-01	8.86E-01	1.69E+00
19	6.46E-03	1.66E+03	1.34E-01	4.69E+03	8.26E-01	8.35E-01	8.95E-01	1.69E+00
20	6.45E-03	1.66E+03	1.32E-01	4.64E+03	8.18E-01	8.26E-01	9.04E-01	1.70E+00
21	6.44E-03	1.64E+03	1.31E-01	4.60E+03	8.10E-01	8.26E-01	9.13E-01	1.70E+00
22	6.43E-03	1.62E+03	1.30E-01	4.55E+03	8.18E-01	8.18E-01	9.22E-01	1.70E+00
23	6.42E-03	1.61E+03	1.29E-01	4.51E+03	8.10E-01	8.18E-01	9.31E-01	1.70E+00
24	6.41E-03	1.59E+03	1.27E-01	4.46E+03	8.18E-01	8.10E-01	9.41E-01	1.70E+00
25	6.41E-03	1.59E+03	1.26E-01	4.42E+03	8.10E-01	8.18E-01	9.50E-01	1.70E+00
26	6.40E-03	1.58E+03	1.25E-01	4.37E+03	8.10E-01	8.26E-01	9.60E-01	1.69E+00
27	6.39E-03	1.56E+03	1.23E-01	4.33E+03	8.18E-01	8.18E-01	9.69E-01	1.69E+00
28	6.39E-03	1.55E+03	1.22E-01	4.28E+03	8.09E-01	8.18E-01	9.79E-01	1.69E+00
29	6.37E-03	1.53E+03	1.21E-01	4.24E+03	8.18E-01	8.10E-01	9.89E-01	1.69E+00
30	6.37E-03	1.53E+03	1.20E-01	4.20E+03	8.09E-01	8.18E-01	9.99E-01	1.69E+00
31	6.36E-03	1.51E+03	1.19E-01	4.16E+03	8.01E-01	8.18E-01	1.01E+00	1.69E+00
32	6.35E-03	1.50E+03	1.17E-01	4.12E+03	8.09E-01	8.09E-01	1.02E+00	1.69E+00
33	6.35E-03	1.48E+03	1.16E-01	4.07E+03	8.01E-01	8.09E-01	1.03E+00	1.69E+00
34	6.34E-03	1.47E+03	1.15E-01	4.03E+03	8.09E-01	8.01E-01	1.04E+00	1.69E+00
35	6.33E-03	1.47E+03	1.14E-01	3.99E+03	8.01E-01	8.09E-01	1.05E+00	1.69E+00
36	6.32E-03	1.45E+03	1.13E-01	3.95E+03	8.01E-01	8.17E-01	1.06E+00	1.67E+00
37	6.32E-03	1.44E+03	1.12E-01	3.91E+03	8.09E-01	8.09E-01	1.07E+00	1.67E+00

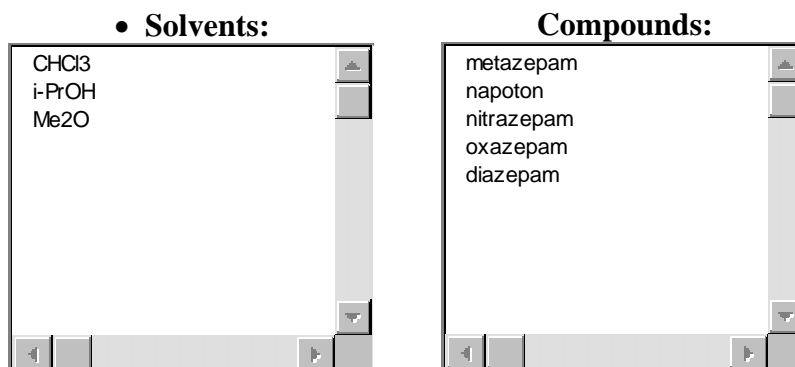
38	6.31E-03	1.43E+03	1.11E-01	3.87E+03	8.01E-01	8.09E-01	1.08E+00	1.67E+00
39	6.30E-03	1.41E+03	1.09E-01	3.84E+03	8.09E-01	8.01E-01	1.09E+00	1.67E+00
40	6.29E-03	1.40E+03	1.08E-01	3.80E+03	8.09E-01	7.93E-01	1.10E+00	1.67E+00
41	6.28E-03	1.38E+03	1.07E-01	3.76E+03	8.01E-01	8.01E-01	1.11E+00	1.67E+00
42	6.28E-03	1.38E+03	1.06E-01	3.72E+03	8.09E-01	7.93E-01	1.13E+00	1.67E+00
43	6.27E-03	1.37E+03	1.05E-01	3.68E+03	8.09E-01	7.85E-01	1.14E+00	1.67E+00
44	6.26E-03	1.36E+03	1.04E-01	3.65E+03	8.01E-01	7.93E-01	1.15E+00	1.67E+00
45	6.26E-03	1.34E+03	1.03E-01	3.61E+03	8.01E-01	7.85E-01	1.16E+00	1.67E+00
46	6.24E-03	1.33E+03	1.02E-01	3.58E+03	7.93E-01	7.93E-01	1.17E+00	1.67E+00
47	6.24E-03	1.32E+03	1.01E-01	3.54E+03	7.93E-01	8.01E-01	1.18E+00	1.65E+00
48	6.23E-03	1.30E+03	1.00E-01	3.50E+03	8.01E-01	7.93E-01	1.19E+00	1.65E+00
49	6.22E-03	1.30E+03	9.90E-02	3.47E+03	7.93E-01	8.01E-01	1.21E+00	1.65E+00
50	6.21E-03	1.29E+03	9.80E-02	3.43E+03	7.85E-01	8.01E-01	1.22E+00	1.65E+00
51	6.21E-03	1.28E+03	9.70E-02	3.40E+03	7.93E-01	7.93E-01	1.23E+00	1.65E+00
52	6.20E-03	1.26E+03	9.61E-02	3.37E+03	7.85E-01	7.93E-01	1.24E+00	1.65E+00
53	6.19E-03	1.25E+03	9.51E-02	3.33E+03	7.93E-01	7.85E-01	1.26E+00	1.65E+00
54	6.18E-03	1.24E+03	9.41E-02	3.30E+03	7.93E-01	7.77E-01	1.27E+00	1.65E+00
55	6.17E-03	1.23E+03	9.32E-02	3.27E+03	7.85E-01	7.85E-01	1.28E+00	1.65E+00
56	6.17E-03	1.23E+03	9.23E-02	3.23E+03	7.93E-01	7.77E-01	1.29E+00	1.65E+00
57	6.16E-03	1.21E+03	9.13E-02	3.20E+03	8.01E-01	7.77E-01	1.31E+00	1.64E+00
58	6.15E-03	1.20E+03	9.04E-02	3.17E+03	7.93E-01	7.85E-01	1.32E+00	1.64E+00
59	6.14E-03	1.19E+03	8.95E-02	3.14E+03	7.93E-01	7.77E-01	1.33E+00	1.64E+00
60	6.13E-03	1.18E+03	8.86E-02	3.11E+03	7.85E-01	7.85E-01	1.35E+00	1.64E+00
61	6.13E-03	1.17E+03	8.77E-02	3.08E+03	7.77E-01	7.85E-01	1.36E+00	1.64E+00
62	6.12E-03	1.15E+03	8.69E-02	3.04E+03	7.85E-01	7.77E-01	1.37E+00	1.64E+00
63	6.11E-03	1.14E+03	8.60E-02	3.01E+03	7.85E-01	7.69E-01	1.39E+00	1.64E+00
64	6.10E-03	1.13E+03	8.51E-02	2.98E+03	7.77E-01	7.77E-01	1.40E+00	1.64E+00
65	6.10E-03	1.13E+03	8.43E-02	2.95E+03	7.84E-01	7.69E-01	1.41E+00	1.64E+00
66	6.09E-03	1.12E+03	8.34E-02	2.92E+03	7.92E-01	7.69E-01	1.43E+00	1.62E+00
67	6.08E-03	1.11E+03	8.26E-02	2.90E+03	7.84E-01	7.77E-01	1.44E+00	1.62E+00
68	6.07E-03	1.10E+03	8.18E-02	2.87E+03	7.84E-01	7.69E-01	1.46E+00	1.62E+00
69	6.06E-03	1.09E+03	8.10E-02	2.84E+03	7.77E-01	7.77E-01	1.47E+00	1.62E+00
70	6.06E-03	1.08E+03	8.02E-02	2.81E+03	7.69E-01	7.77E-01	1.49E+00	1.62E+00
71	6.05E-03	1.07E+03	7.94E-02	2.78E+03	7.76E-01	7.69E-01	1.50E+00	1.62E+00
72	6.04E-03	1.05E+03	7.86E-02	2.75E+03	7.76E-01	7.61E-01	1.52E+00	1.62E+00
73	6.03E-03	1.04E+03	7.78E-02	2.73E+03	7.69E-01	7.69E-01	1.53E+00	1.62E+00
74	6.03E-03	1.03E+03	7.70E-02	2.70E+03	7.61E-01	7.69E-01	1.55E+00	1.62E+00
75	6.01E-03	1.02E+03	7.62E-02	2.67E+03	7.69E-01	7.61E-01	1.56E+00	1.62E+00
76	6.01E-03	1.02E+03	7.55E-02	2.64E+03	7.76E-01	7.69E-01	1.58E+00	1.60E+00
77	6.00E-03	1.01E+03	7.47E-02	2.62E+03	7.76E-01	7.61E-01	1.59E+00	1.60E+00
78	5.99E-03	1.00E+03	7.40E-02	2.59E+03	7.69E-01	7.69E-01	1.61E+00	1.60E+00
79	5.99E-03	9.93E+02	7.32E-02	2.57E+03	7.61E-01	7.69E-01	1.63E+00	1.60E+00
80	5.98E-03	9.83E+02	7.25E-02	2.54E+03	7.68E-01	7.61E-01	1.64E+00	1.60E+00
81	5.97E-03	9.73E+02	7.18E-02	2.52E+03	7.68E-01	7.53E-01	1.66E+00	1.60E+00
82	5.96E-03	9.63E+02	7.10E-02	2.49E+03	7.61E-01	7.61E-01	1.68E+00	1.60E+00
83	5.95E-03	9.54E+02	7.03E-02	2.47E+03	7.53E-01	7.61E-01	1.69E+00	1.60E+00
84	5.94E-03	9.44E+02	6.96E-02	2.44E+03	7.61E-01	7.53E-01	1.71E+00	1.60E+00
85	5.94E-03	9.35E+02	6.89E-02	2.42E+03	7.61E-01	7.46E-01	1.73E+00	1.60E+00
86	5.93E-03	9.26E+02	6.82E-02	2.39E+03	7.68E-01	7.53E-01	1.74E+00	1.59E+00

Procese la interfața fazelor: Modelare matematică, Optimizare numerică, Implementare web, cu aplicații în separarea și caracterizarea seriilor de compuși chimici biologic activi

87	5.92E-03	9.16E+02	6.76E-02	2.37E+03	7.68E-01	7.46E-01	1.76E+00	1.59E+00
88	5.91E-03	9.07E+02	6.69E-02	2.34E+03	7.61E-01	7.53E-01	1.78E+00	1.59E+00
89	5.90E-03	8.98E+02	6.62E-02	2.32E+03	7.61E-01	7.46E-01	1.80E+00	1.59E+00
90	5.89E-03	8.89E+02	6.56E-02	2.30E+03	7.53E-01	7.53E-01	1.81E+00	1.59E+00
91	5.89E-03	8.80E+02	6.49E-02	2.27E+03	7.53E-01	7.45E-01	1.83E+00	1.59E+00
92	5.88E-03	8.71E+02	6.43E-02	2.25E+03	7.45E-01	7.53E-01	1.85E+00	1.59E+00
93	5.87E-03	8.63E+02	6.36E-02	2.23E+03	7.38E-01	7.53E-01	1.87E+00	1.59E+00
94	5.86E-03	8.54E+02	6.30E-02	2.21E+03	7.45E-01	7.45E-01	1.89E+00	1.59E+00
95	5.86E-03	8.45E+02	6.23E-02	2.19E+03	7.45E-01	7.38E-01	1.91E+00	1.59E+00
96	5.84E-03	8.37E+02	6.17E-02	2.16E+03	7.53E-01	7.45E-01	1.93E+00	1.57E+00
97	5.84E-03	8.37E+02	6.11E-02	2.14E+03	7.45E-01	7.53E-01	1.94E+00	1.57E+00
98	5.83E-03	8.29E+02	6.05E-02	2.12E+03	7.38E-01	7.53E-01	1.96E+00	1.57E+00
99	5.82E-03	8.20E+02	5.99E-02	2.10E+03	7.45E-01	7.45E-01	1.98E+00	1.57E+00

Au fost testate modulele aplicației de optimizare a fazei mobile. Următoarele sunt date de test:

÷ Faza 1. Alegerea solventilor și compușilor de interes:



÷ Faza 2. Selectarea modelului de experimentare (designului experimental):

Experiments:

Experiment	Include	CHCl3	i-PrOH	Me2O
0	<input checked="" type="checkbox"/>	33.3%	33.3%	33.3%
1	<input checked="" type="checkbox"/>	10%	10%	80%
2	<input checked="" type="checkbox"/>	10%	80%	10%
3	<input checked="" type="checkbox"/>	80%	10%	10%
4	<input checked="" type="checkbox"/>	50%	0%	50%
5	<input checked="" type="checkbox"/>	50%	50%	0%
6	<input checked="" type="checkbox"/>	0%	50%	50%
7	<input checked="" type="checkbox"/>	100%	0%	0%
8	<input checked="" type="checkbox"/>	0%	0%	100%
9	<input checked="" type="checkbox"/>	0%	100%	0%

÷ Faza 3. Completarea cu valori experimentale a modelului experimental:

Compound	Experiments results for solvents = (CHCl ₃ , i-PrOH, Me ₂ O)									
	33.3, 33.3, 33.3	10, 10, 8	10, 80, 1	80, 10, 1	50, 0, 50	50, 50, 0	0, 50, 50	100, 0, 0	0, 0, 100	0, 100, 0
Mixture characteristic	pos, width	pos, width	pos, width	pos, width	pos, width	pos, width	pos, width	pos, width	pos, width	pos, width
metazepam	5.62, 0.39	4.92, 0.37	5.90, 0.39	3.38, 0.41	2.91, 0.43	6.07, 0.44	5.91, 0.51	0.56, 0.28	6.05, 0.44	8.23, 0.43
napoton	5.95, 0.38	5.42, 0.37	5.35, 0.49	3.84, 0.37	4.52, 0.47	6.30, 0.42	6.47, 0.42	0.55, 0.30	7.14, 0.40	9.31, 0.23
nitrazepam	6.12, 0.25	5.99, 0.39	6.00, 0.28	4.67, 0.22	5.60, 0.40	6.79, 0.38	6.64, 0.32	1.42, 0.25	9.03, 0.27	9.50, 0.25
oxazepam	6.32, 0.30	5.56, 0.49	5.91, 0.32	5.49, 0.28	5.97, 0.42	6.87, 0.33	6.99, 0.36	2.52, 0.24	8.25, 0.28	9.28, 0.22
diazepam	6.46, 0.32	5.99, 0.32	6.15, 0.35	5.77, 0.28	6.35, 0.36	7.03, 0.29	7.06, 0.47	2.72, 0.21	8.77, 0.30	9.39, 0.24
eluent	6.88	6.88	6.99	6.97	7.72	7.39	7.64	10.0	10.0	10.0

÷ Faza 4. Selectarea modelelor

Model Equation:	
<input checked="" type="checkbox"/>	$Y = a_1X_1 + a_2X_2 + a_3X_3 + a_4X_1X_2 + a_5X_1X_3 + a_6X_2X_3$
<input checked="" type="checkbox"/>	$Y = a_1X_1 + a_2X_2 + a_3X_3 + a_4X_1X_2 + a_5X_1X_3 + a_6X_2X_3 + a_7X_1X_2X_3$
Dependent Variable:	Graph:
<input checked="" type="checkbox"/> FO	<input type="checkbox"/> Red (best) - Green (worst)
<input checked="" type="checkbox"/> RS	<input checked="" type="checkbox"/> Green gradient only
<input checked="" type="checkbox"/> RF	

÷ Faza 5. Calcularea datelor auxiliare

solvents	CHCl ₃	i-PrOH	Me ₂ O							
experiment	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
compound_pair										
	(metazepam, napoton)									
	(metazepam, nitrazepam)									
	(metazepam, oxazepam)									
	(metazepam, diazepam)									
	(napoton, nitrazepam)									
	(napoton, oxazepam)									
	(napoton, diazepam)									
	(nitrazepam, oxazepam)									
	(nitrazepam, diazepam)									
	(oxazepam, diazepam)									
resolutions_pair	(0, 1)	(1, 2)	(2, 3)	(3, 4)						
length	6.88	6.88	6.99	6.97	7.72	7.39	7.64	10.0	10.0	10.0
mixtures	CHCl ₃	i-PrOH	Me ₂ O							
0	33.3000	33.3000	33.3000							
1	10.0000	10.0000	80.0000							
2	10.0000	80.0000	10.0000							
3	80.0000	10.0000	10.0000							
4	50.0000	0.0000	50.0000							
5	50.0000	50.0000	0.0000							
6	0.0000	50.0000	50.0000							

Procese la interfața fazelor: Modelare matematică, Optimizare numerică, Implementare web, cu aplicații în separarea și caracterizarea seriilor de compuși chimici biologic activi

7	100.0000	0.0000	0.0000
8	0.0000	0.0000	100.0000
9	0.0000	100.0000	0.0000

data	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
metazepam	5.62:0.39	4.92:0.37	5.90:0.39	3.38:0.41	2.91:0.43	6.07:0.44	5.91:0.51	0.56:0.28	6.05:0.44	8.23:0.43
napoton	5.95:0.38	5.42:0.37	5.35:0.49	3.84:0.37	4.52:0.47	6.30:0.42	6.47:0.42	0.55:0.30	7.14:0.40	9.31:0.23
nitrazepam	6.12:0.25	5.99:0.39	6.00:0.28	4.67:0.22	5.60:0.40	6.79:0.38	6.64:0.32	1.42:0.25	9.03:0.27	9.50:0.25
oxazepam	6.32:0.30	5.56:0.49	5.91:0.32	5.49:0.28	5.97:0.42	6.87:0.33	6.99:0.36	2.52:0.24	8.25:0.28	9.28:0.22
diazepam	6.46:0.32	5.99:0.32	6.15:0.35	5.77:0.28	6.35:0.36	7.03:0.29	7.06:0.47	2.72:0.21	8.77:0.30	9.39:0.24

retention_factor	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
metazepam	0.8169	0.7151	0.8441	0.4849	0.3769	0.8214	0.7736	0.0560	0.6050	0.8230
napoton	0.8648	0.7878	0.7654	0.5509	0.5855	0.8525	0.8469	0.0550	0.7140	0.9310
nitrazepam	0.8895	0.8706	0.8584	0.6700	0.7254	0.9188	0.8691	0.1420	0.9030	0.9500
oxazepam	0.9186	0.8081	0.8455	0.7877	0.7733	0.9296	0.9149	0.2520	0.8250	0.9280
diazepam	0.9390	0.8706	0.8798	0.8278	0.8225	0.9513	0.9241	0.2720	0.8770	0.9390

resolutions_all	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
(metazepam, napoton)	0.8571	1.3514	1.2500	1.1795	3.5778	0.5349	1.2043	0.0345	2.5952	3.2727
(metazepam, nitrazepam)	1.5625	2.8158	0.2985	4.0952	6.4819	1.7561	1.7590	3.2453	8.3944	3.7353
(metazepam, oxazepam)	2.0290	1.4884	0.0282	6.1159	7.2000	2.0779	2.4828	7.5385	6.1111	3.2308
(metazepam, diazepam)	2.3662	3.1014	0.6757	6.9275	8.7089	2.6301	2.3469	8.8163	7.3514	3.4627
(napoton, nitrazepam)	0.5397	1.5000	1.6883	2.8136	2.4828	1.2250	0.4595	3.1636	5.6418	0.7917
(napoton, oxazepam)	1.0882	0.3256	1.3827	5.0769	3.2584	1.5200	1.3333	7.2963	3.2647	0.1333
(napoton, diazepam)	1.4571	1.6522	1.9048	5.9385	4.4096	2.0563	1.3258	8.5098	4.6571	0.3404
(nitrazepam, oxazepam)	0.7273	0.9773	0.3000	3.2800	0.9024	0.2254	1.0294	4.4898	2.8364	0.9362
(nitrazepam, diazepam)	1.1930	0.0000	0.4762	4.4000	1.9737	0.7164	1.0633	5.6522	0.9123	0.4490
(oxazepam, diazepam)	0.4516	1.0617	0.7164	1.0000	0.9744	0.5161	0.1687	0.8889	1.7931	0.4783

resolutions	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
(0, 1)	0.8571	1.3514	1.2500	1.1795	3.5778	0.5349	1.2043	0.0345	2.5952	3.2308
(1, 2)	0.5397	0.3256	0.0282	2.8136	2.4828	1.2250	0.4595	3.2453	3.2647	0.1333
(2, 3)	0.7273	0.9773	0.3000	3.2800	0.9024	0.2254	1.0294	4.4898	1.7931	0.3404
(3, 4)	0.4516	0.0000	0.4762	1.0000	0.9744	0.5161	0.1687	0.8889	0.9123	0.4490

resolutions_sort	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
(0, 1)	0.4516	0.0000	0.0282	1.0000	0.9024	0.2254	0.1687	0.0345	0.9123	0.1333
(1, 2)	0.5397	0.3256	0.3000	1.1795	0.9744	0.5161	0.4595	0.8889	1.7931	0.3404
(2, 3)	0.7273	0.9773	0.4762	2.8136	2.4828	0.5349	1.0294	3.2453	2.5952	0.4490
(3, 4)	0.8571	1.3514	1.2500	3.2800	3.5778	1.2250	1.2043	4.4898	3.2647	3.2308

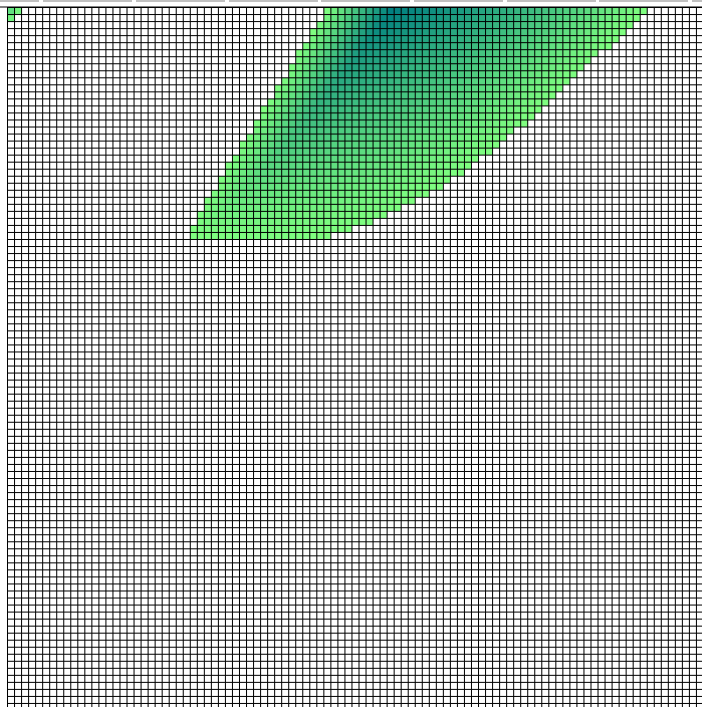
÷ Faza 6. Obținere rezultate pe fiecare funcție obiectiv:

$$\Delta rf = a_1x_1 + a_2x_2 + a_3x_3 + a_4x_1x_2 + a_5x_1x_3 + a_6x_2x_3$$

retention_factor	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
metazepam	0.8169	0.7151	0.8441	0.4849	0.3769	0.8214	0.7736	0.0560	0.6050	0.8230
napoton	0.8648	0.7878	0.7654	0.5509	0.5855	0.8525	0.8469	0.0550	0.7140	0.9310

nitrazepam	0.8895	0.8706	0.8584	0.6700	0.7254	0.9188	0.8691	0.1420	0.9030	0.9500
oxazepam	0.9186	0.8081	0.8455	0.7877	0.7733	0.9296	0.9149	0.2520	0.8250	0.9280
diazepam	0.9390	0.8706	0.8798	0.8278	0.8225	0.9513	0.9241	0.2720	0.8770	0.9390

6 calc	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
metazepam	0.7716	0.6613	0.8747	0.3852	0.4449	0.8657	0.8050	0.0970	0.6203	0.7910
napoton	0.8392	0.7697	0.9044	0.4390	0.6329	0.8559	0.8240	0.1156	0.7220	0.8510
nitrazepam	0.8986	0.8866	0.9409	0.5339	0.7565	0.9313	0.8390	0.2162	0.8921	0.9018
oxazepam	0.9349	0.8568	0.9402	0.6235	0.7993	0.9427	0.8684	0.3441	0.7979	0.8751
diazepam	0.9656	0.9043	0.9577	0.6543	0.8523	0.9687	0.8835	0.3671	0.8561	0.8934

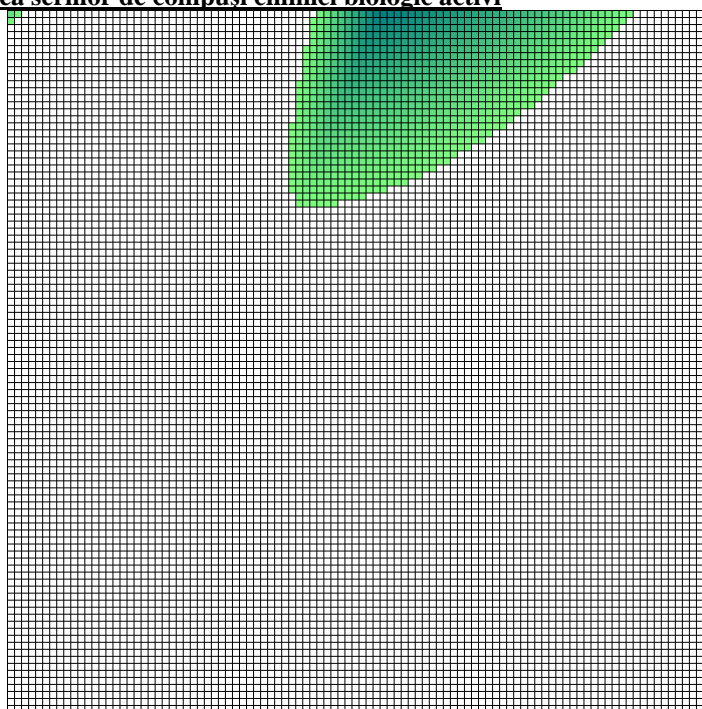


$$\Delta rf = a_1x_1 + a_2x_2 + a_3x_3 + a_4x_1x_2 + a_5x_1x_3 + a_6x_2x_3 + a_7x_1x_2x_3$$

retention_factor	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
metazepam	0.8169	0.7151	0.8441	0.4849	0.3769	0.8214	0.7736	0.0560	0.6050	0.8230
napoton	0.8648	0.7878	0.7654	0.5509	0.5855	0.8525	0.8469	0.0550	0.7140	0.9310
nitrazepam	0.8895	0.8706	0.8584	0.6700	0.7254	0.9188	0.8691	0.1420	0.9030	0.9500
oxazepam	0.9186	0.8081	0.8455	0.7877	0.7733	0.9296	0.9149	0.2520	0.8250	0.9280
diazepam	0.9390	0.8706	0.8798	0.8278	0.8225	0.9513	0.9241	0.2720	0.8770	0.9390

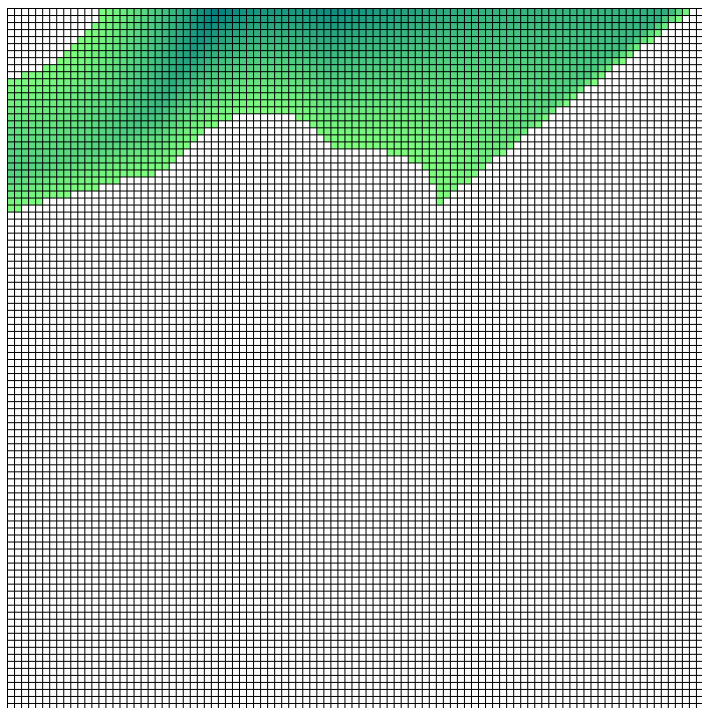
7 calc	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
metazepam	0.8407	0.6656	0.8790	0.3895	0.4114	0.8321	0.7715	0.1033	0.6266	0.7973
napoton	0.8620	0.7711	0.9058	0.4404	0.6218	0.8449	0.8130	0.1176	0.7241	0.8531
nitrazepam	0.8977	0.8865	0.9409	0.5339	0.7569	0.9317	0.8394	0.2161	0.8920	0.9017
oxazepam	0.9236	0.8561	0.9395	0.6228	0.8048	0.9482	0.8739	0.3430	0.7969	0.8741
diazepam	0.9529	0.9035	0.9570	0.6536	0.8585	0.9749	0.8897	0.3660	0.8550	0.8922

Procese la interfata fazelor: Modelare matematică, Optimizare numerică, Implementare web, cu aplicatii în separarea și caracterizarea seriilor de compusi chimici biologic activi



$$\text{all_rs} = a_1X_1 + a_2X_2 + a_3X_3 + a_4X_1X_2 + a_5X_1X_3 + a_6X_2X_3$$

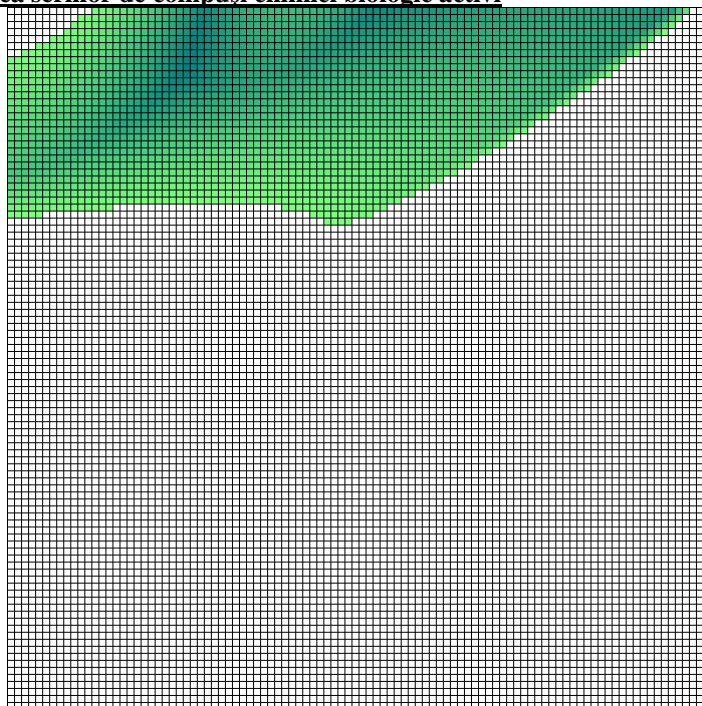
resolutions_all	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
(metazepam, napoton)	0.8571	1.3514	1.2500	1.1795	3.5778	0.5349	1.2043	0.0345	2.5952	3.2727
(metazepam, nitrazepam)	1.5625	2.8158	0.2985	4.0952	6.4819	1.7561	1.7590	3.2453	8.3944	3.7353
(metazepam, oxazepam)	2.0290	1.4884	0.0282	6.1159	7.2000	2.0779	2.4828	7.5385	6.1111	3.2308
(metazepam, diazepam)	2.3662	3.1014	0.6757	6.9275	8.7089	2.6301	2.3469	8.8163	7.3514	3.4627
(napoton, nitrazepam)	0.5397	1.5000	1.6883	2.8136	2.4828	1.2250	0.4595	3.1636	5.6418	0.7917
(napoton, oxazepam)	1.0882	0.3256	1.3827	5.0769	3.2584	1.5200	1.3333	7.2963	3.2647	0.1333
(napoton, diazepam)	1.4571	1.6522	1.9048	5.9385	4.4096	2.0563	1.3258	8.5098	4.6571	0.3404
(nitrazepam, oxazepam)	0.7273	0.9773	0.3000	3.2800	0.9024	0.2254	1.0294	4.4898	2.8364	0.9362
(nitrazepam, diazepam)	1.1930	0.0000	0.4762	4.4000	1.9737	0.7164	1.0633	5.6522	0.9123	0.4490
(oxazepam, diazepam)	0.4516	1.0617	0.7164	1.0000	0.9744	0.5161	0.1687	0.8889	1.7931	0.4783
6 calc	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
(metazepam, napoton)	1.2297	2.0911	1.7231	0.8779	3.2534	0.2852	0.6630	0.3175	2.2950	3.1219
(metazepam, nitrazepam)	1.8341	5.0659	1.5321	3.3541	5.8293	1.3881	0.5535	3.9097	7.3837	3.2939
(metazepam, oxazepam)	2.2571	4.0018	1.4016	5.7978	6.3414	1.5385	1.1505	8.0274	5.0143	2.7724
(metazepam, diazepam)	2.8378	5.1104	1.6402	6.8342	7.8481	2.0618	1.1900	9.1511	6.5089	3.2051
(napoton, nitrazepam)	0.7169	2.8245	0.6734	2.3515	2.1688	1.5661	0.3003	3.4298	4.9074	1.3674
(napoton, oxazepam)	1.2931	1.8339	0.5222	4.8314	2.7979	1.7228	1.0450	7.4886	2.4749	0.6701
(napoton, diazepam)	1.7820	2.8816	0.7427	5.7855	3.9676	2.2839	1.1663	8.6245	3.9977	1.0202
(nitrazepam, oxazepam)	0.3195	1.4732	0.3818	2.6251	1.1309	0.5698	1.0516	4.8053	2.5074	0.8391
(nitrazepam, diazepam)	0.9985	0.7179	0.4127	3.7940	2.0267	0.9882	0.9644	5.9739	0.4926	0.4669
(oxazepam, diazepam)	0.4809	1.1282	0.4099	0.8170	1.0109	0.6572	0.2398	0.9608	1.7252	0.6193



$$\text{all_rs} = a_1X_1 + a_2X_2 + a_3X_3 + a_4X_1X_2 + a_5X_1X_3 + a_6X_2X_3 + a_7X_1X_2X_3$$

resolutions_all	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
(metazepam, napoton)	0.8571	1.3514	1.2500	1.1795	3.5778	0.5349	1.2043	0.0345	2.5952	3.2727
(metazepam, nitrazepam)	1.5625	2.8158	0.2985	4.0952	6.4819	1.7561	1.7590	3.2453	8.3944	3.7353
(metazepam, oxazepam)	2.0290	1.4884	0.0282	6.1159	7.2000	2.0779	2.4828	7.5385	6.1111	3.2308
(metazepam, diazepam)	2.3662	3.1014	0.6757	6.9275	8.7089	2.6301	2.3469	8.8163	7.3514	3.4627
(napoton, nitrazepam)	0.5397	1.5000	1.6883	2.8136	2.4828	1.2250	0.4595	3.1636	5.6418	0.7917
(napoton, oxazepam)	1.0882	0.3256	1.3827	5.0769	3.2584	1.5200	1.3333	7.2963	3.2647	0.1333
(napoton, diazepam)	1.4571	1.6522	1.9048	5.9385	4.4096	2.0563	1.3258	8.5098	4.6571	0.3404
(nitrazepam, oxazepam)	0.7273	0.9773	0.3000	3.2800	0.9024	0.2254	1.0294	4.4898	2.8364	0.9362
(nitrazepam, diazepam)	1.1930	0.0000	0.4762	4.4000	1.9737	0.7164	1.0633	5.6522	0.9123	0.4490
(oxazepam, diazepam)	0.4516	1.0617	0.7164	1.0000	0.9744	0.5161	0.1687	0.8889	1.7931	0.4783
7 calc	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
(metazepam, napoton)	0.6818	2.0572	1.6891	0.8439	3.5195	0.5513	0.9291	0.2678	2.2453	3.0722
(metazepam, nitrazepam)	1.0018	5.0143	1.4805	3.3026	6.2335	1.7923	0.9577	3.8342	7.3082	3.2184
(metazepam, oxazepam)	1.2946	3.9422	1.3419	5.7381	6.8089	2.0060	1.6180	7.9400	4.9270	2.6851
(metazepam, diazepam)	1.7846	5.0452	1.5749	6.7690	8.3596	2.5733	1.7015	9.0556	6.4133	3.1096
(napoton, nitrazepam)	0.5783	2.8159	0.6648	2.3429	2.2361	1.6334	0.3676	3.4172	4.8949	1.3549
(napoton, oxazepam)	1.0124	1.8165	0.5048	4.8140	2.9342	1.8591	1.1813	7.4632	2.4494	0.6446
(napoton, diazepam)	1.4876	2.8633	0.7245	5.7672	4.1106	2.4269	1.3093	8.5978	3.9710	0.9935
(nitrazepam, oxazepam)	0.7276	1.4985	0.4071	2.6504	0.9327	0.3716	0.8534	4.8423	2.5444	0.8761
(nitrazepam, diazepam)	1.1754	0.7288	0.4236	3.8050	1.9408	0.9023	0.8785	5.9899	0.5087	0.4830
(oxazepam, diazepam)	0.5409	1.1320	0.4136	0.8207	0.9818	0.6280	0.2107	0.9662	1.7307	0.6248

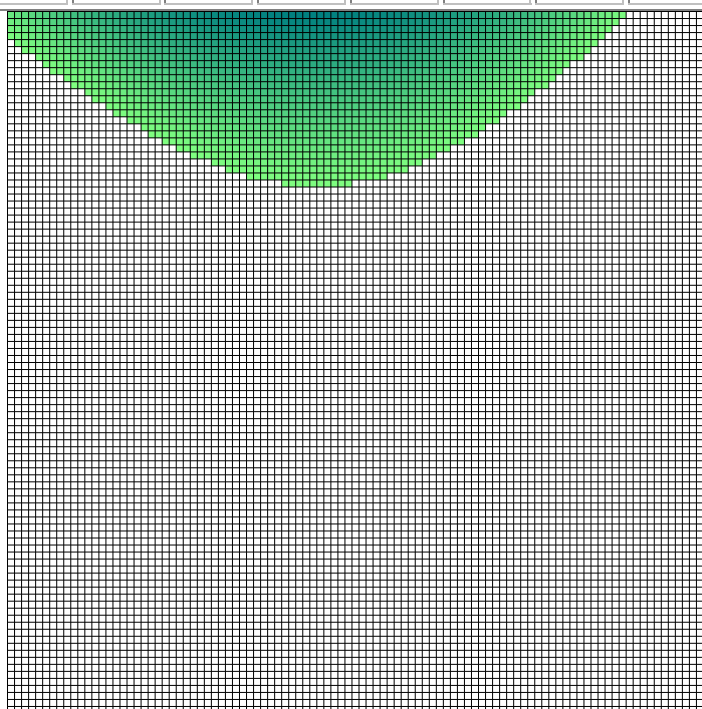
Procese la interfata fazelor: Modelare matematică, Optimizare numerică, Implementare web, cu aplicatii în separarea și caracterizarea seriilor de compuși chimici biologic activi



$$\text{sort_rs} = a_1X_1 + a_2X_2 + a_3X_3 + a_4X_1X_2 + a_5X_1X_3 + a_6X_2X_3$$

resolutions_sort	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
(0, 1)	0.4516	0.0000	0.0282	1.0000	0.9024	0.2254	0.1687	0.0345	0.9123	0.1333
(1, 2)	0.5397	0.3256	0.3000	1.1795	0.9744	0.5161	0.4595	0.8889	1.7931	0.3404
(2, 3)	0.7273	0.9773	0.4762	2.8136	2.4828	0.5349	1.0294	3.2453	2.5952	0.4490
(3, 4)	0.8571	1.3514	1.2500	3.2800	3.5778	1.2250	1.2043	4.4898	3.2647	3.2308

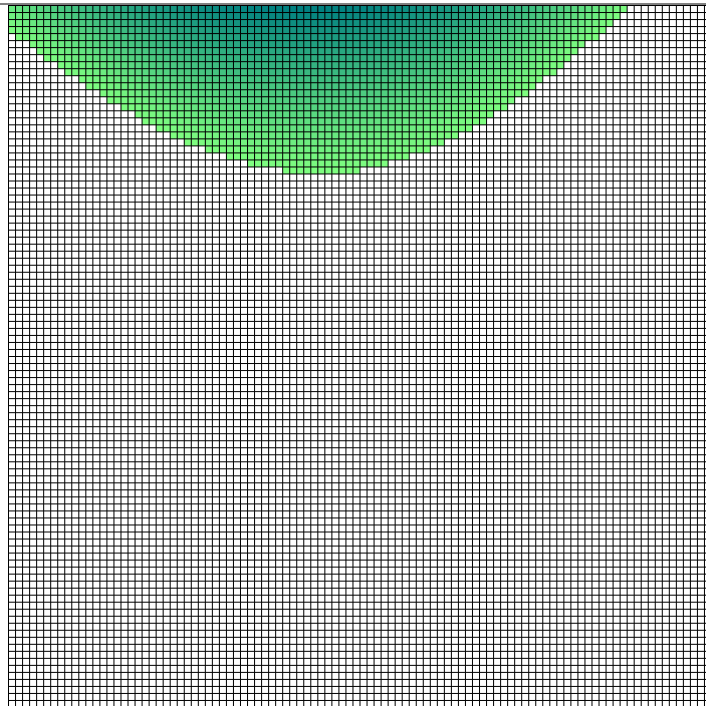
6 calc	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
(0, 1)	0.4316	0.5558	0.1142	0.4957	0.8914	0.3459	0.0000	0.3257	0.6098	0.0940
(1, 2)	0.4780	0.9814	0.2976	0.8695	0.8912	0.6172	0.2901	1.0831	1.4465	0.3624
(2, 3)	0.9203	1.7346	0.3382	2.4137	2.2883	0.5911	0.7616	3.5081	2.2101	0.5651
(3, 4)	1.0586	2.1174	1.6019	3.1575	3.2684	1.0316	0.7621	4.6603	2.9376	3.1356



$$\text{sort_rs} = a_1X_1 + a_2X_2 + a_3X_3 + a_4X_1X_2 + a_5X_1X_3 + a_6X_2X_3 + a_7X_1X_2X_3$$

resolutions_sort	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
(0, 1)	0.4516	0.0000	0.0282	1.0000	0.9024	0.2254	0.1687	0.0345	0.9123	0.1333
(1, 2)	0.5397	0.3256	0.3000	1.1795	0.9744	0.5161	0.4595	0.8889	1.7931	0.3404
(2, 3)	0.7273	0.9773	0.4762	2.8136	2.4828	0.5349	1.0294	3.2453	2.5952	0.4490
(3, 4)	0.8571	1.3514	1.2500	3.2800	3.5778	1.2250	1.2043	4.4898	3.2647	3.2308

7 calc	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
(0, 1)	0.4222	0.5552	0.1136	0.4951	0.8960	0.3504	0.0000	0.3248	0.6090	0.0931
(1, 2)	0.4658	0.9806	0.2968	0.8687	0.8971	0.6232	0.2961	1.0820	1.4454	0.3613
(2, 3)	0.6890	1.7202	0.3239	2.3994	2.4006	0.7034	0.8739	3.4871	2.1891	0.5442
(3, 4)	0.6576	2.0926	1.5771	3.1327	3.4631	1.2263	0.9568	4.6239	2.9013	3.0992



Funcții obiectiv

f_sm	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
f_sm	8.0234	7.7855	8.1567	6.1249	5.6269	7.9791	7.8057	7.3348	6.5468	8.1183
f_rsa	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
f_rsa	0.6439	0.6636	0.5136	2.0683	1.9843	0.6253	0.7155	2.1646	2.1413	1.0384
f_rrp	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
f_rrp	0.2359	0.0000	0.0098	5.2628	3.9361	0.1219	0.1343	0.2063	6.4725	0.0634
f_inf	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
f_inf	1.3710	1.5219	0.7219	1.9219	1.9219	1.9219	1.5219	1.9219	2.3219	1.3710
f_ob1	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
f_ob1	1.4956	1.6504	0.8445	2.0852	2.0996	2.0473	1.6500	2.0583	2.4747	1.4941
f_ob2	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
f_ob2	0.3177	0.3311	0.2138	0.8174	0.7574	0.3837	0.3415	0.5469	0.9572	0.3346
f_ob3	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9

Procese la interfata fazelor: Modelare matematică, Optimizare numerică, Implementare web, cu aplicatii în separarea și caracterizarea seriilor de compuși chimici biologici activi

f_ob3	3.1479	3.0200	4.6768	1.2235	1.3203	2.6062	2.9286	1.8286	1.0448	2.9884
-------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------

f_ob4	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
-------	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---

f_ob4	122.737	34.161	2117.983	20.156	21.155	193.932	181.678	114.281	17.966	344.884
-------	---------	--------	----------	--------	--------	---------	---------	---------	--------	---------

f_ob5	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
-------	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---

f_ob5	2.3152	2.3523	1.5229	7.4805	6.7021	2.7383	2.4696	4.2967	8.8616	2.4602
-------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------

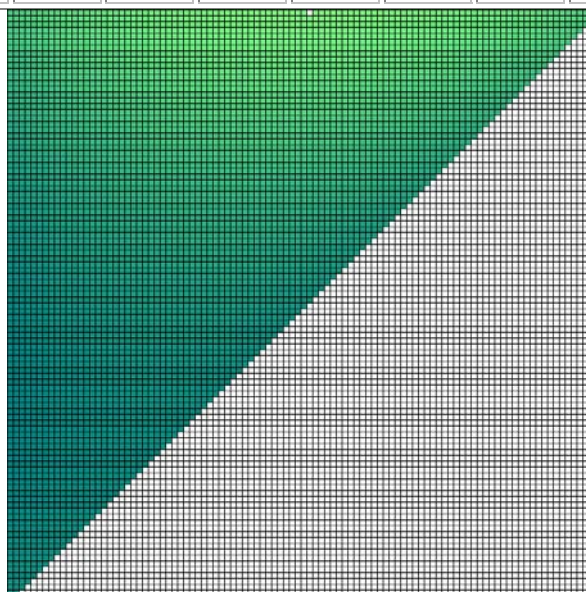
$$f_{of} = a_1x_1 + a_2x_2 + a_3x_3 + a_4x_1x_2 + a_5x_1x_3 + a_6x_2x_3$$

f_sm	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
------	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---

o	8.0234	7.7855	8.1567	6.1249	5.6269	7.9791	7.8057	7.3348	6.5468	8.1183
---	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------

6 calc	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
--------	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---

o	7.4340	6.9918	8.2016	6.8760	5.9002	8.0176	8.2767	6.8492	6.9263	8.0281
---	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------



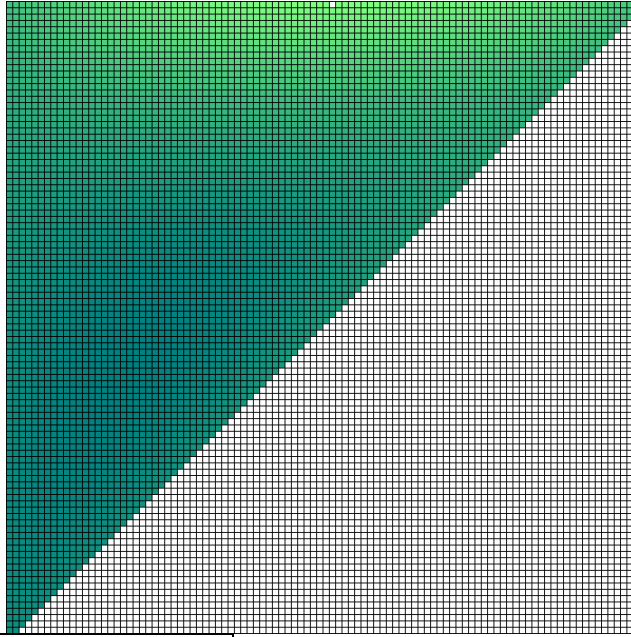
$$f_{of} = a_1x_1 + a_2x_2 + a_3x_3 + a_4x_1x_2 + a_5x_1x_3 + a_6x_2x_3 + a_7x_1x_2x_3$$

f_sm	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
------	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---

o	8.0234	7.7855	8.1567	6.1249	5.6269	7.9791	7.8057	7.3348	6.5468	8.1183
---	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------

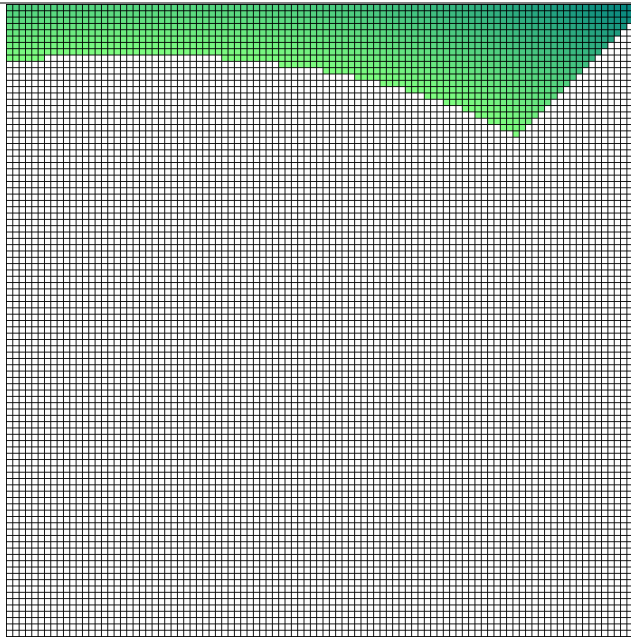
7 calc	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
--------	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---

o	8.0001	7.0268	8.2367	6.9111	5.6252	7.7426	8.0018	6.9005	6.9777	8.0795
---	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------



$$f_{of} = a_1x_1 + a_2x_2 + a_3x_3 + a_4x_1x_2 + a_5x_1x_3 + a_6x_2x_3$$

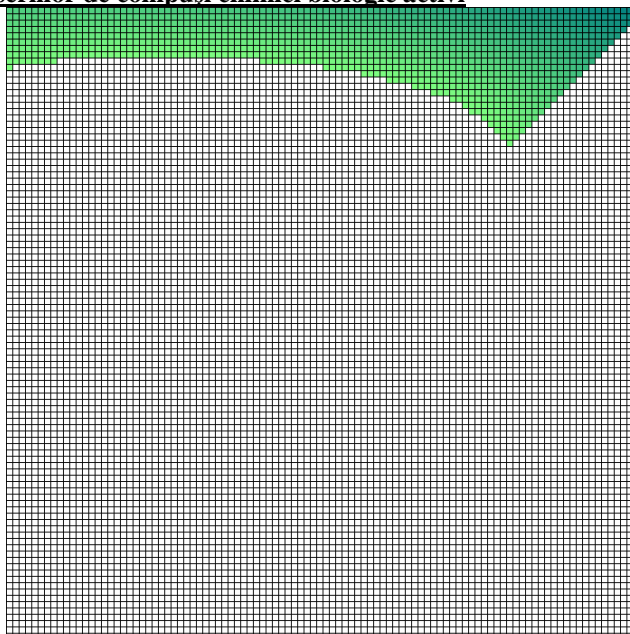
f_rsa	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
o	0.6439	0.6636	0.5136	2.0683	1.9843	0.6253	0.7155	2.1646	2.1413	1.0384
6 calc	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
o	0.7221	1.3473	0.5880	1.7341	1.8348	0.6464	0.4515	2.3943	1.8010	1.0393



$$f_{of} = a_1x_1 + a_2x_2 + a_3x_3 + a_4x_1x_2 + a_5x_1x_3 + a_6x_2x_3 + a_7x_1x_2x_3$$

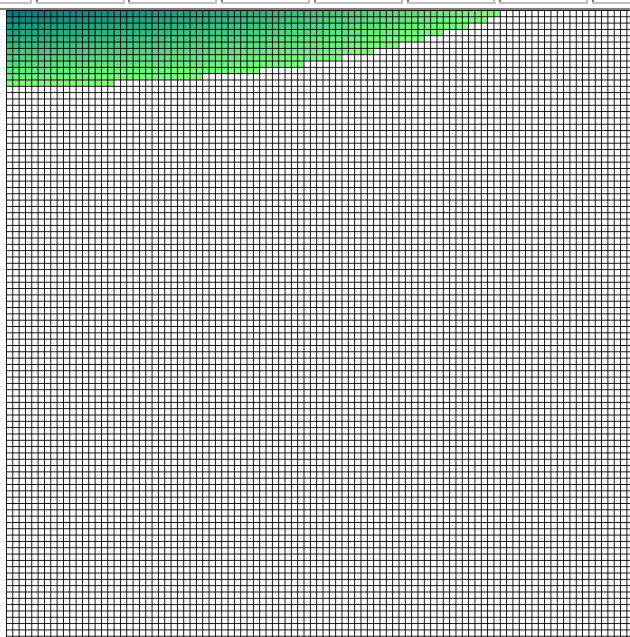
f_rsa	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
o	0.6439	0.6636	0.5136	2.0683	1.9843	0.6253	0.7155	2.1646	2.1413	1.0384
7 calc	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
o	0.5587	1.3372	0.5778	1.7240	1.9142	0.7258	0.5309	2.3795	1.7862	1.0245

Procese la interfata fazelor: Modelare matematică, Optimizare numerică, Implementare web, cu aplicatii în separarea și caracterizarea seriilor de compuși chimici biologic activi



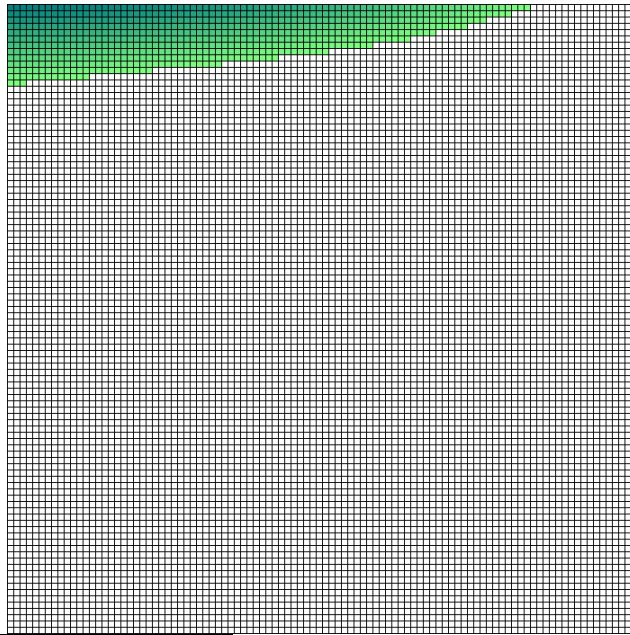
$$f_{of} = a_1x_1 + a_2x_2 + a_3x_3 + a_4x_1x_2 + a_5x_1x_3 + a_6x_2x_3$$

f_rrp	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
o	0.2359	0.0000	0.0098	5.2628	3.9361	0.1219	0.1343	0.2063	6.4725	0.0634
6 calc	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
o	0.8551	3.0573	0.0000	2.0160	3.7340	0.8585	0.0000	2.0542	4.7901	0.2585



$$f_{of} = a_1x_1 + a_2x_2 + a_3x_3 + a_4x_1x_2 + a_5x_1x_3 + a_6x_2x_3 + a_7x_1x_2x_3$$

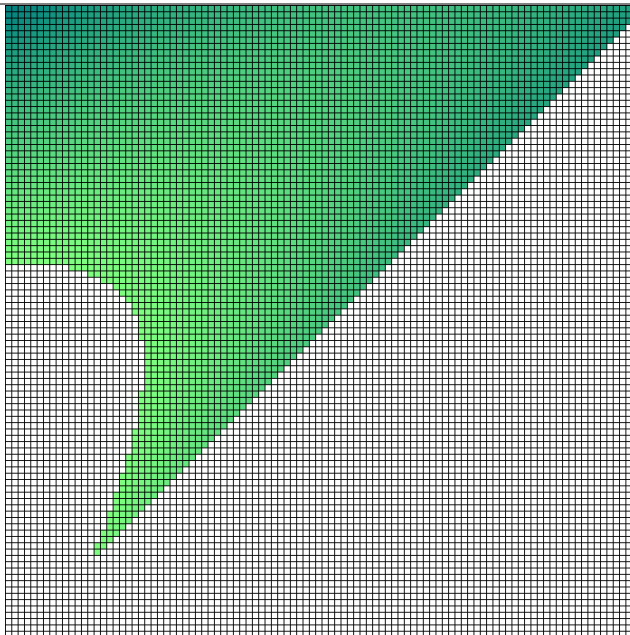
f_rrp	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
o	0.2359	0.0000	0.0098	5.2628	3.9361	0.1219	0.1343	0.2063	6.4725	0.0634
7 calc	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
o	0.3609	3.0267	0.0000	1.9853	3.9740	1.0985	0.0000	2.0094	4.7452	0.2136



$$f_{of} = a_1x_1 + a_2x_2 + a_3x_3 + a_4x_1x_2 + a_5x_1x_3 + a_6x_2x_3$$

f_inf	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
o	1.3710	1.5219	0.7219	1.9219	1.9219	1.9219	1.5219	1.9219	2.3219	1.3710

6 calc	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
o	1.4854	1.8336	1.2258	1.8658	1.7692	1.7154	1.2125	2.0268	2.2208	1.1622

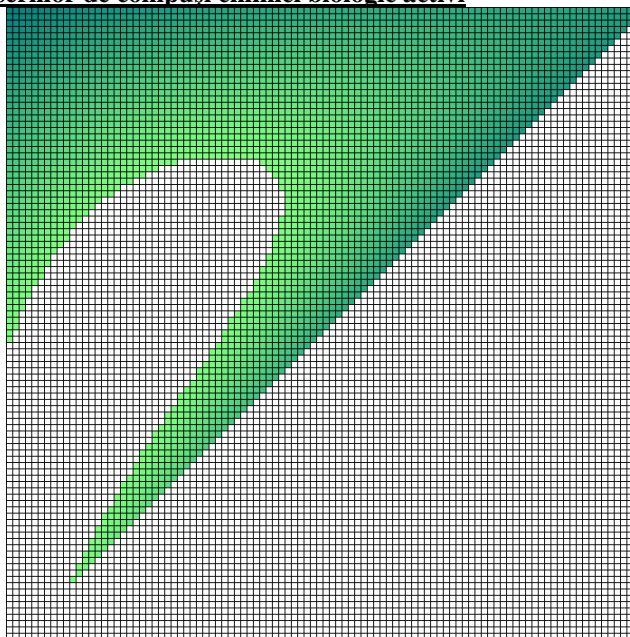


$$f_{of} = a_1x_1 + a_2x_2 + a_3x_3 + a_4x_1x_2 + a_5x_1x_3 + a_6x_2x_3 + a_7x_1x_2x_3$$

f_inf	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
o	1.3710	1.5219	0.7219	1.9219	1.9219	1.9219	1.5219	1.9219	2.3219	1.3710

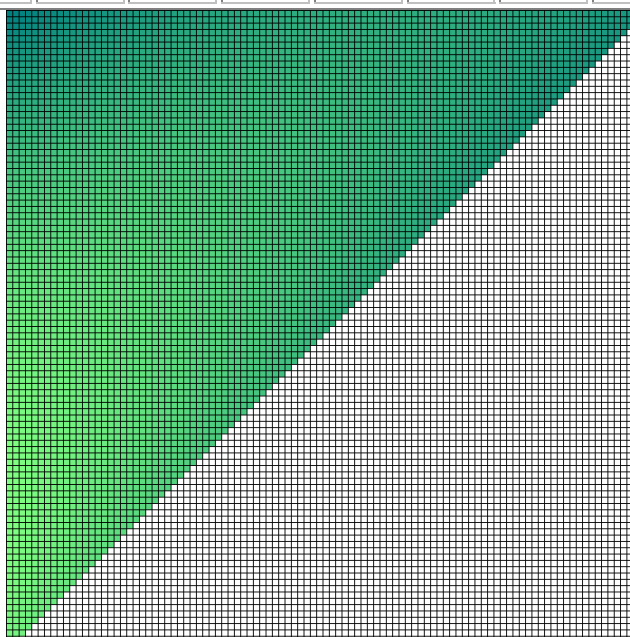
7 calc	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
o	1.2172	1.8170	1.2091	1.8492	1.8995	1.8457	1.3427	2.0024	2.1965	1.1379

Procese la interfata fazelor: Modelare matematică, Optimizare numerică, Implementare web, cu aplicatii în separarea și caracterizarea seriilor de compuși chimici biologic activi



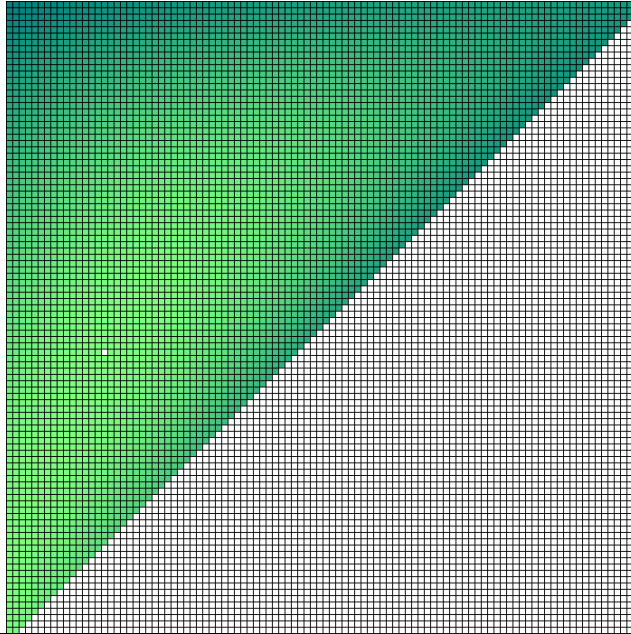
$$f_{of} = a_1x_1 + a_2x_2 + a_3x_3 + a_4x_1x_2 + a_5x_1x_3 + a_6x_2x_3$$

f_ob1	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
o	1.4956	1.6504	0.8445	2.0852	2.0996	2.0473	1.6500	2.0583	2.4747	1.4941
6 calc	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
o	1.6229	1.9790	1.3470	2.0138	1.9408	1.8397	1.3305	2.1731	2.3655	1.2876



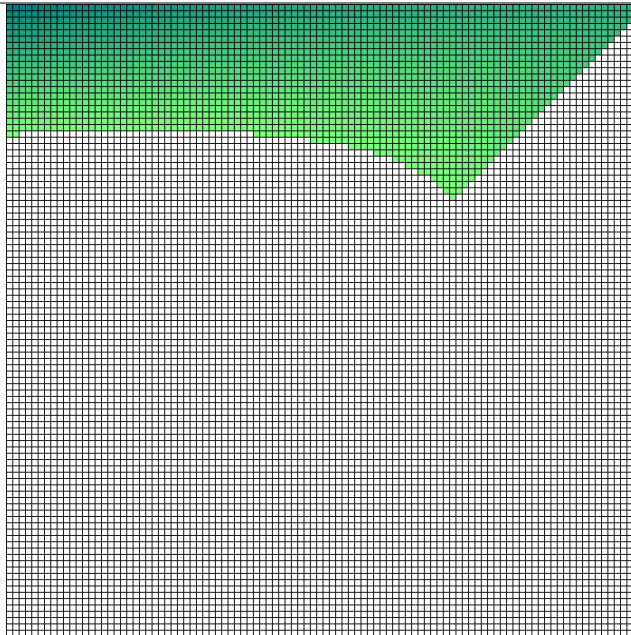
$$f_{of} = a_1x_1 + a_2x_2 + a_3x_3 + a_4x_1x_2 + a_5x_1x_3 + a_6x_2x_3 + a_7x_1x_2x_3$$

f_ob1	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
o	1.4956	1.6504	0.8445	2.0852	2.0996	2.0473	1.6500	2.0583	2.4747	1.4941
7 calc	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
o	1.3423	1.9616	1.3297	1.9964	2.0771	1.9760	1.4668	2.1476	2.3400	1.2621



$$f_{of} = a_1x_1 + a_2x_2 + a_3x_3 + a_4x_1x_2 + a_5x_1x_3 + a_6x_2x_3$$

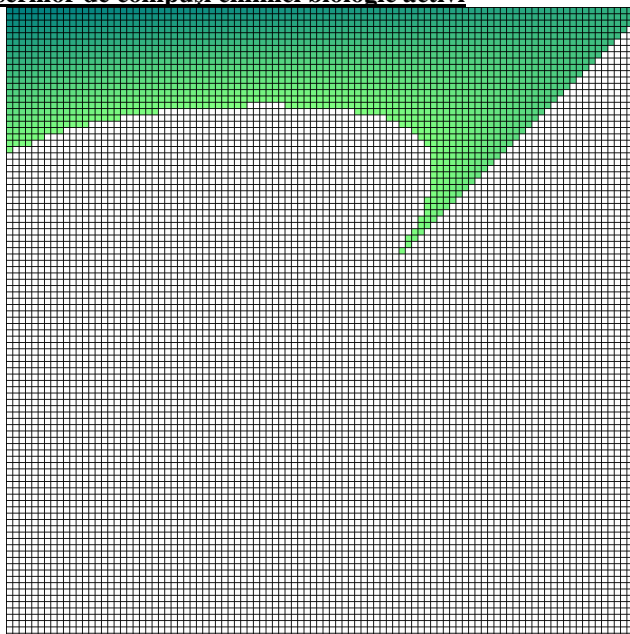
f_ob2	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
o	0.3177	0.3311	0.2138	0.8174	0.7574	0.3837	0.3415	0.5469	0.9572	0.3346
6 calc	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
o	0.3826	0.6190	0.2604	0.5994	0.7044	0.3982	0.2143	0.6854	0.8124	0.3250



$$f_{of} = a_1x_1 + a_2x_2 + a_3x_3 + a_4x_1x_2 + a_5x_1x_3 + a_6x_2x_3 + a_7x_1x_2x_3$$

f_ob2	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
o	0.3177	0.3311	0.2138	0.8174	0.7574	0.3837	0.3415	0.5469	0.9572	0.3346
7 calc	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
o	0.2959	0.6137	0.2550	0.5940	0.7465	0.4403	0.2564	0.6775	0.8046	0.3172

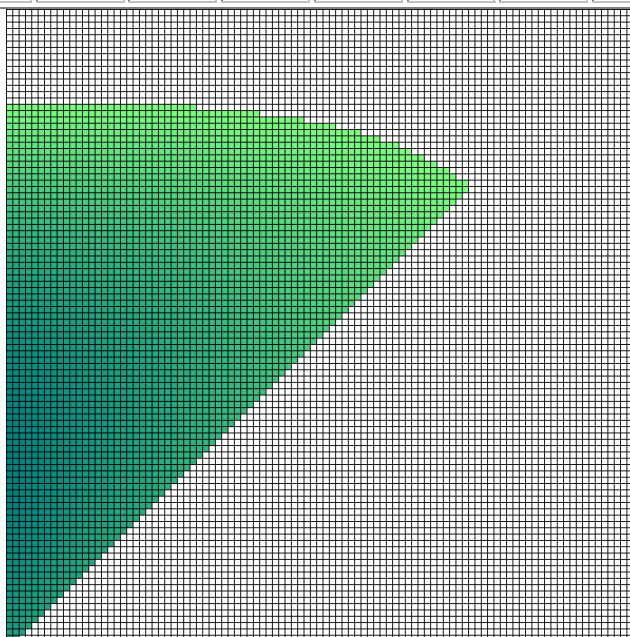
Procese la interfata fazelor: Modelare matematică, Optimizare numerică, Implementare web, cu aplicatii în separarea și caracterizarea seriilor de compuși chimici biologic activi



$$f_{of} = a_1x_1 + a_2x_2 + a_3x_3 + a_4x_1x_2 + a_5x_1x_3 + a_6x_2x_3$$

f_ob3	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
o	3.1479	3.0200	4.6768	1.2235	1.3203	2.6062	2.9286	1.8286	1.0448	2.9884

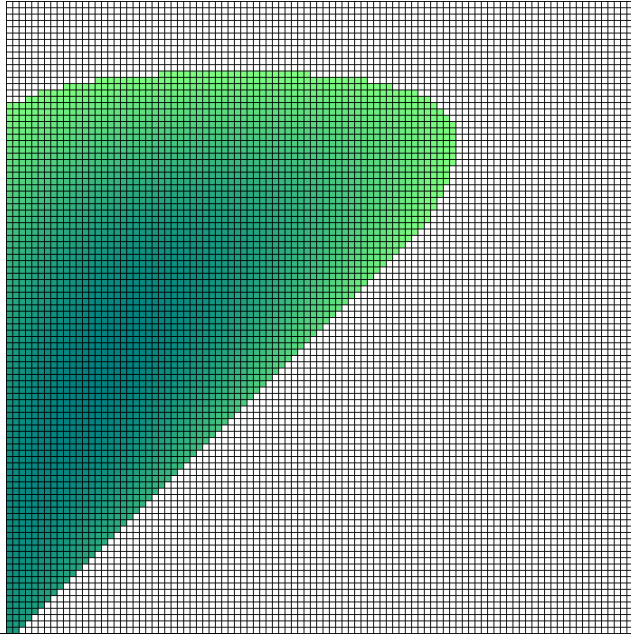
6 calc	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
o	2.9132	2.0885	3.5956	1.8330	1.5707	2.8984	3.6524	1.3491	1.4282	3.4557



$$f_{of} = a_1x_1 + a_2x_2 + a_3x_3 + a_4x_1x_2 + a_5x_1x_3 + a_6x_2x_3 + a_7x_1x_2x_3$$

f_ob3	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
o	3.1479	3.0200	4.6768	1.2235	1.3203	2.6062	2.9286	1.8286	1.0448	2.9884

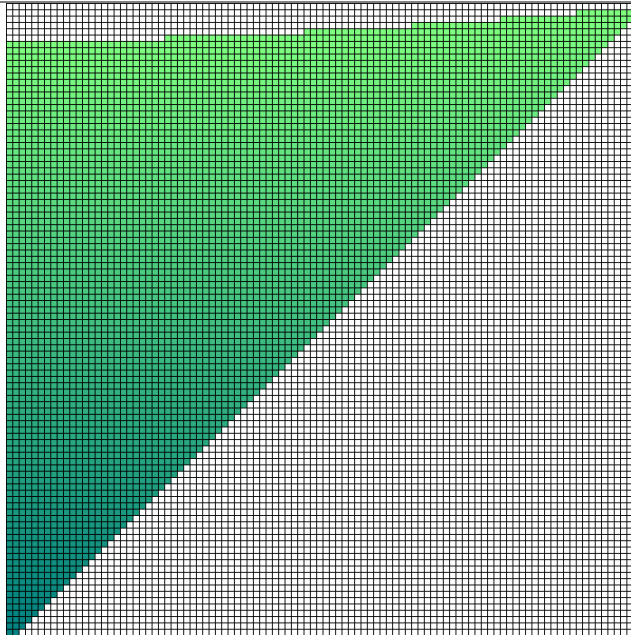
7 calc	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
o	3.4311	2.1205	3.6277	1.8651	1.3192	2.6469	3.4009	1.3960	1.4752	3.5027



$$f_{of} = a_1x_1 + a_2x_2 + a_3x_3 + a_4x_1x_2 + a_5x_1x_3 + a_6x_2x_3$$

f_ob4	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
o	122.737	34.161	2117.983	20.159	21.155	193.932	181.678	114.281	17.966	344.884

6 calc	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
o	322.752	53.868	806.964	91.138	0.0000	501.239	503.341	0.0000	0.0000	1003.540

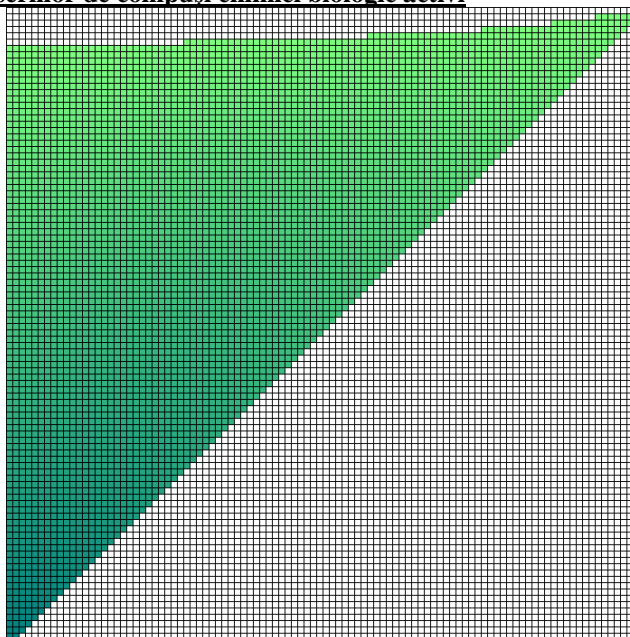


$$f_{of} = a_1x_1 + a_2x_2 + a_3x_3 + a_4x_1x_2 + a_5x_1x_3 + a_6x_2x_3 + a_7x_1x_2x_3$$

f_ob4	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
o	122.737	34.161	2117.983	20.159	21.155	193.932	181.678	114.281	17.966	344.884

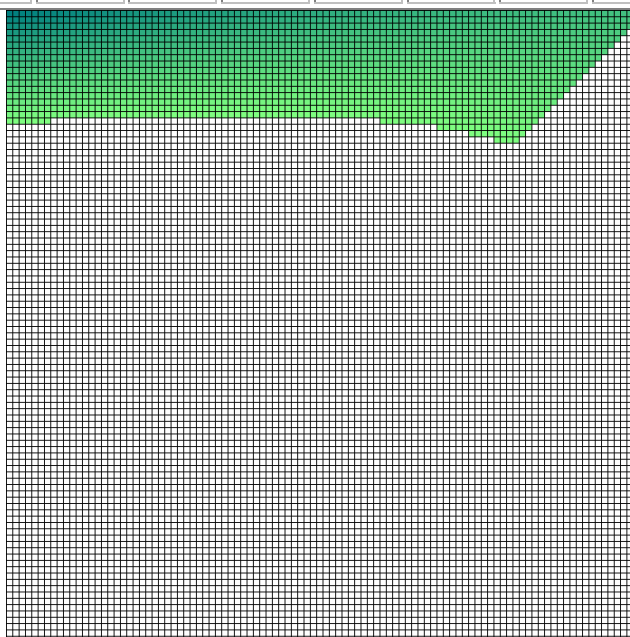
7 calc	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
o	384.629	57.702	810.798	94.971	0.000	471.186	473.288	4.633	0.000	1009.154

Procese la interfata fazelor: Modelare matematică, Optimizare numerică, Implementare web, cu aplicatii în separarea și caracterizarea seriilor de compuși chimici biologic activi



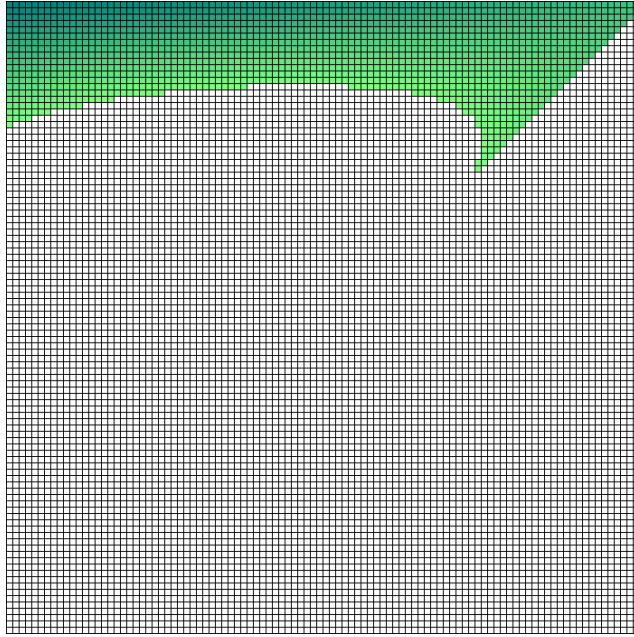
$$f_{of} = a_1x_1 + a_2x_2 + a_3x_3 + a_4x_1x_2 + a_5x_1x_3 + a_6x_2x_3$$

f_ob5	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
o	2.3152	2.3523	1.5229	7.4805	6.7021	2.7383	2.4696	4.2967	8.8616	2.4602
6 calc	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
o	2.9487	5.3632	1.7570	5.0249	6.2341	3.0477	1.2485	5.8051	7.3088	2.4623



$$f_{of} = a_1x_1 + a_2x_2 + a_3x_3 + a_4x_1x_2 + a_5x_1x_3 + a_6x_2x_3 + a_7x_1x_2x_3$$

f_ob5	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
o	2.3152	2.3523	1.5229	7.4805	6.7021	2.7383	2.4696	4.2967	8.8616	2.4602
7 calc	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
o	2.1753	5.3152	1.7090	4.9769	6.6097	3.4234	1.6241	5.7349	7.2386	2.3922



Procese la interfata fazelor: Modelare matematică, Optimizare numerică, Implementare web, cu aplicatii în separarea și caracterizarea seriilor de compuși chimici biologic activi

Activități și rezultate. Etapa II(2007). Obiectivul 5(Obținerea parametrilor de model și de experiment). Activitatea 10(Corelarea experimentele a funcțiilor obiectiv optime).

÷ Așa cum a rezultat din analiza rezultatelor experimentale (parte din ele prezentate mai sus) funcția obiectiv optimă pentru modelarea cinetică a reacțiilor chimice este:

```

procedure s_CC(var x,y:x_array; n_e:longint; o_o_s: extended; var s_sum: extended);
var
  i : longint; i_n : longint; n_s : longint; s1,s2,p1,p2 : extended;
begin
  n_s := 6*n_e div 14;
  s1 := 0.0; s2 := 0.0; p1 := 0.0; p2 := 0.0; i_n := 0;
  for i:= 1 to n_s do if(y[i]<o_o_s) then begin
    s1 := s1 + y[i]/x[i]; s2 := s2 + x[i]/y[i];
    i_n := i_n + 1;
  end;
  s1 := s1/i_n; s2 := s2/i_n;
  for i:= 1 to n_s do if(y[i]<o_o_s) then begin
    p1 := p1 + power(abs(y[i]/x[i]-s1),4.0);
    p2 := p2 + power(abs(x[i]/y[i]-s2),4.0);
  end;
  s_sum := power(p1*p2,0.5);
end;

```

funcție care penalizează după formula:

$$\min \leftarrow \sqrt{\left(\sum_{i=0}^N \left(\frac{X_i}{t_i} - \frac{\bar{X}}{\bar{t}} \right)^4 \right) \left(\sum_{i=0}^N \left(\frac{t_i}{X_i} - \frac{\bar{t}}{\bar{X}} \right)^4 \right)}$$

÷ Datele experimentale incluse în modelare sunt redată în tabelul următor:

No.	Cu ²⁺ (M)	S ₂ O ₃ ²⁻ (M)
Exp. Nr. 1	1·10 ⁻³	1·10 ⁻³
Exp. Nr. 2	5·10 ⁻³	5·10 ⁻³
Exp. Nr. 3	10·10 ⁻³	10·10 ⁻³

÷ Analiza de regresie a produs următoarele rezultate:

Nr.	E = aX + b			IC
	a	b	r	
Exp. Nr. 1	218.5	-0.0005	0.9801	107
Exp. Nr. 2	189.4	-0.0821	0.9551	99
Exp. Nr. 3	226.7	-0.1300	0.9616	99

r = coeficient de corelație; IC = Ciclul de iterație

÷ Programele au produs valorile parametrilor de cinetică a reacției. Valorile sunt redată în tabelul următor (N.R.: nu e valid; y₀, ... y₃: ordine parțială de reacție, k₀, k₁, k₂: constante de viteză):

	Exp. Nr. 1	Exp. Nr. 2	Exp. Nr. 3
y ₀	0.823	0.799	0.745
y ₁	0.807	0.791	0.745
y ₂	N.R.	N.R.	N.R.
y ₃	1.509	1.571	1.571
k ₀	3.46·10 ⁺³	1.02·10 ⁺³	8.20·10 ⁺²
k ₁	N.R.	N.R.	N.R.
k ₂	2.30·10 ⁺³	2.04·10 ⁺³	2.10·10 ⁺³
S _{min}	1.81·10 ⁻⁵	6.66·10 ⁻⁴	5.82·10 ⁻³

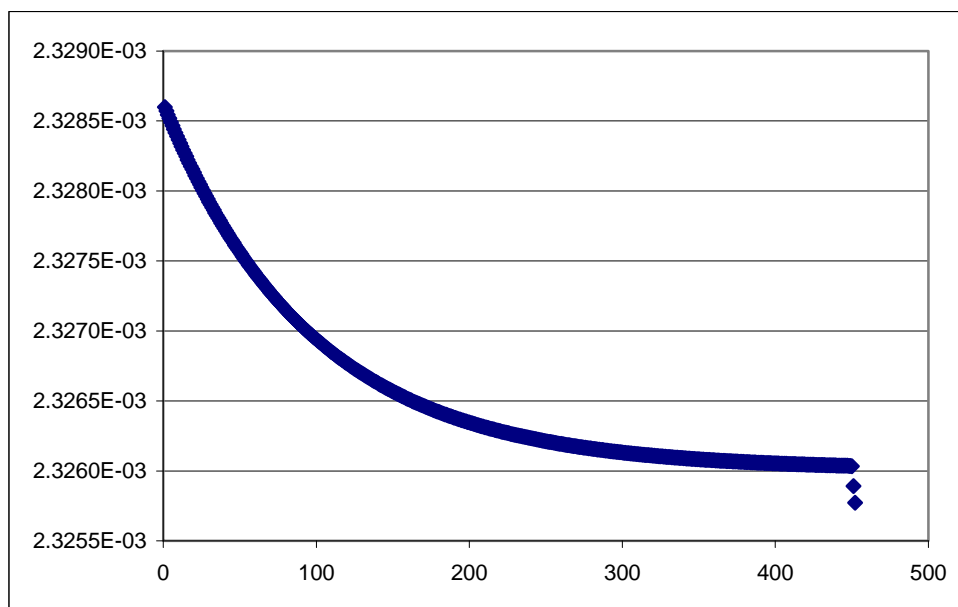
÷ În cazul optimizării fazei mobile a amestecurilor de solvenți pentru cromatografie, o serie de funcții obiectiv au dovedit abilitate predictivă. Lista acestor funcții împreună cu predicția realizată este redată în tabelul de mai jos:

Funcție	Punct de optim (CHCl ₃ :i-PrOH:Me ₂ O)		
Δrf-M6	54	0	46
Δrf-M7	53	0	47
sort_rs-M6	42	0	58
sort_rs-M7	42	0	58
f_sm-M6	51	0	49
f_sm-M7	51	0	49
f_ob4-M7	57	4	39

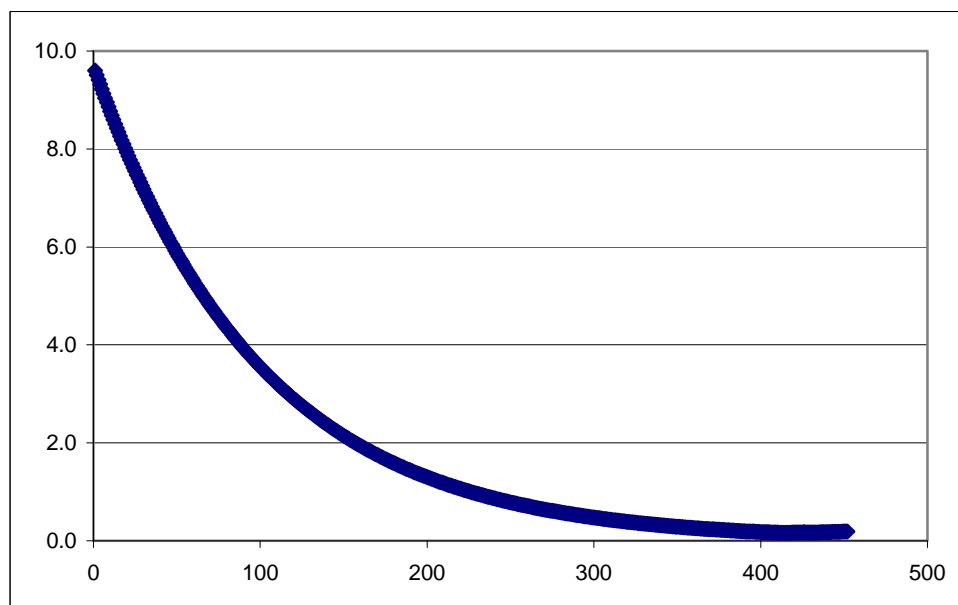
Ultima dintre aceste funcții (f_ob4) s-a dovedit a fi cel mai aproape de cazul ideal experimental, când pentru optimizarea amestecului propus s-a observat prin analiza factorială completă (variind întâi din 20 în 20 unități fiecare concentrație de solvent - un număr total de 20 de experimente, apoi pe domeniul cel mai potrivit variind din 5 în 5 unități - un număr total de 12 experimente, apoi variind din 1 în 1 - un număr total de 20 experimente), a rezultat concentrația optimă a fazei mobile ca fiind CHCl₃:i-PrOH:Me₂O = 55:5:40.

Activități și rezultate. Etapa II(2007). Obiectivul 6(Obținerea parametrilor de model și de experiment). Activitatea 11(Calcularea parametrilor de model).

Modul de calcul al parametrilor de model prin optimizare și a parametrilor de experiment prin formule de calcul s-a ilustrat în expunerea rezultatelor de la etapele anterioare. În continuare se redau grafic rezultatele obținute prin iterarea până la iterația 452 a coeficientului de extincție (constantă necunoscută) de model cinetic pentru cea mai bogată sursă de date, experimentul pentru concentrații ale reactanților de $10^{-2}M$, precum și variația sumei reziduurilor:



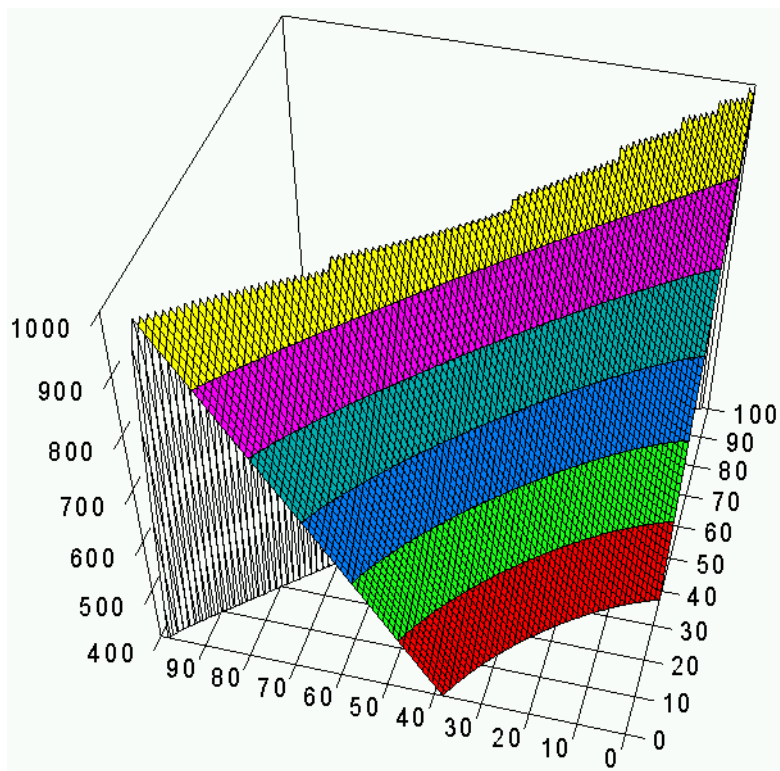
Valori ale coeficientului de extincție, ϵ



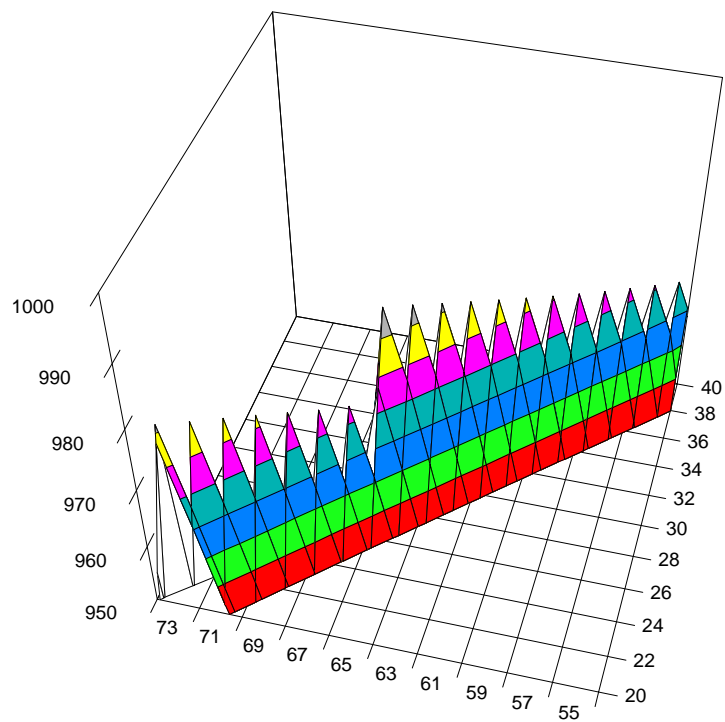
Valori ale funcției de penalitate (suma reziduurilor), S

Parametrii de model și parametrii de experiment au fost calculați și pentru compoziția optimă a fazei mobile folosind funcția obiectiv f_{ob4} și modelul cu 7 termeni (M7). Cu ajutorul lor

s-a reprezentat suprafața de variație a funcției obiectiv în funcție de concentrațiile CHCl_3 și Me_2O , grafic care este redat în continuare.





Graficul detaliat în regiunea de interes este reprezentat în următoarea figură:



Procese la interfata fazelor: Modelare matematică, Optimizare numerică, Implementare web, cu aplicatii în separarea și caracterizarea seriilor de compuși chimici biologic activi

Activități și rezultate. Etapa II(2007). Obiectivul 6(Obținerea parametrilor de model și de experiment). Activitatea 12(Participari la manifestări științifice).

S-a participat cu lucrări științifice la 4 conferințe internaționale:

 <p>Fourth International Conference of Applied Mathematics and Computing August 12 - 18, 2007 Plovdiv, Bulgaria</p>	<p>Sorana-Daniela BOLBOACĂ, Lorentz JÄNTSCHI, Structure-Property Based Model Estimation of Alkanes Boiling Points, Fourth International Conference of Applied Mathematics and Computing, August 12-18, 2007, University of Chemical Technology and Metallurgy Sofia & Technical University of Plovdiv, Invited lecture, presented on August 13, from 18.30 to 19.00, Plovdiv, Bulgaria, p. 48, 2007.</p> <p>Carmen Elena STOENOIU, Sorana-Daniela BOLBOACĂ, Lorentz JÄNTSCHI, Model Formulation and Interpretation for Chemical Reactions Mechanisms - From Experiment to Theory, Fourth International Conference of Applied Mathematics and Computing, August 12-18, 2007, University of Chemical Technology and Metallurgy Sofia & Technical University of Plovdiv, Invited lecture, presented on August 15, from 11.30 to 12.10, Plovdiv, Bulgaria, p. 511, 2007.</p>
 <p>19-23 September, 2007 Sunny Beach, Bulgaria</p>	<p>Lorentz JÄNTSCHI, Sorana D. BOLBOACĂ, Molecular Descriptors Family on Chromatography, BBCAC-4 4th Black Sea Basin Conference on Analytical Chemistry, "St. Kliment Ohridski" University of Sofia, Poster P128, Sunny Beach, Bulgaria, September 19-23, 2007.</p> <p>Sorana D. BOLBOACĂ, Lorentz JÄNTSCHI, Solvent Mixtures Tool for Separation of Biological Active Compounds, BBCAC-4 4th Black Sea Basin Conference on Analytical Chemistry, "St. Kliment Ohridski" University of Sofia, Poster P127, Sunny Beach, Bulgaria, September 19-23, 2007.</p>

CHEMMOD 2007

ChemMod 2007 - Chemical Graph Theory and Molecular Modeling Workshop, European Society of Mathematical Chemistry (inaugural event), Cluj-Napoca, Romania, October 23-26, 2007

Lorentz JÄNTSCHI, Sorana D. BOLBOACĂ, Molecular Descriptors Family Project and Their Application on Structure-Property/Activity Relationships, ChemMod 2007 - Chemical Graph Theory and Molecular Modeling Workshop, Faculty of Chemistry and Chemical Engineering of Babes-Bolyai University and European Society of Mathematical Chemistry, Poster #22, Cluj-Napoca, Romania, October 23-26, p. 22, 2007.

Sorana D. BOLBOACĂ, Lorentz JÄNTSCHI, Modeling Analysis of Amino Acids Hydrophobicity, ChemMod 2007 - Chemical Graph Theory and Molecular Modeling Workshop, Faculty of Chemistry and Chemical Engineering of Babes-Bolyai University and European Society of Mathematical Chemistry, Oral Presentation #6, Cluj-Napoca, Romania, October 23-26, p. 6, 2007.



The screenshot shows the CSCB website header with navigation links: Home, About Us, Research, Facilities, Education, Media. Below the header, there is an 'Event Details' section for 'Recent Advances in Synthesis and Chemical Biology VII' held on December 12, 2008, at University College Dublin. A note mentions the CSCB's seventh annual symposium on December 12, 2008.

Sorana D. BOLBOACĂ, Lorentz JÄNTSCHI, Is Amino Acids Hydrophobicity a Matter of Scale?, Recent Advances in Synthesis & Chemical Biology VI, Centre for Synthesis & Chemical Biology, University of Dublin, Symposium, 14th December 2007, Dublin, Ireland, P2, 2007.

Lorentz JÄNTSCHI, Sorana D. BOLBOACĂ, How to Assess Dose-Response Study Outcome: a Statistical Approach, Recent Advances in Synthesis & Chemical Biology VI, Centre for Synthesis & Chemical Biology, University of Dublin, Symposium, 14th December 2007, Dublin, Ireland, P36, 2007.

Procese la interfata fazelor: Modelare matematică, Optimizare numerică, Implementare web, cu aplicatii în separarea și caracterizarea seriilor de compusi chimici biologic activi

Activități și rezultate. Etapa III(2008). Obiectivul 1(Dezvoltarea librăriiilor aplicațiilor). Activitatea 1(Implementare librării) & 2(Documentare librării).

S-au implementat și documentat librării pentru modulele de obținere a coeficienților cinetici ai reacțiilor chimice. Implementarea s-a realizat folosind limbajul Pascal în versiunea sa open source FreePascal.

S-au definit constantele programelor:

Cod sursă	Documentare
const dt=4e-5; N=7000; N_const=3; dv=0.01;	dt: unitatea de timp folosită pentru iterarea evoluției reacției chimice: $dA = -k_0A^{y_0}B^{y_1}dt + k_1X^{y_2}dt$ $dB = -k_0A^{y_0}B^{y_1}dt + k_1X^{y_2}dt$ $dX = (k_0A^{y_0}B^{y_1} - k_1X^{y_2} - k_2X^{y_3})dt$ N: numărul maxim de perechi de date experimentale (timp, intensitate luminoasă) N_const: numărul de valori în iterarea valorilor parametrilor necunoscuți dv: versorul variației parametrilor modelului (Z:=n*dv; n=0..N_const; Param:=Param+Z).

S-au construit tipurile de date:

Cod sursă	Documentare
type file_name=string[10]; x_array=array[0..N]of extended; v_array=array[0..N_const]of extended; i_array=array[0..N_const]of shortint;	file_name: tip de dată string conținând un nume de fișier x_array: tablou pentru stocarea internă a extincțiilor experimentale v_array: tablou pentru stocarea valorilor instantanee ale vectorului de variație Z i_array: tablou pentru stocarea valorilor instantanee ale indicilor vectorului de variație Z

S-au definit valorile de inițializare ale constantelor cinetice ale modelelor:

Cod sursă	Documentare
y0=1.0; y1=1.0; y2=1.0; y3=2.0;	y0: ordinul de reacție al reactantului A în cadrul reacției A+B→X y1: ordinul de reacție al reactantului B în cadrul reacției A+B→X y2: ordinul de reacție al intermediarului X în cadrul reacției X→A+B y3: ordinul de reacție al intermediarului X în cadrul reacției X→P

S-au definit funcțiile și procedurile care operează pe tipurile de date definite:

Cod sursă	Documentare
procedure s_CC(var x,y:x_array; n_e:longint; o_o_s: extended; var s_sum: extended); var i , i_n, n_s : longint; s1,s2,p1,p2 : extended;	s_CC implementează funcția de penalitate S dată de formula $S = \sqrt{(\sum(y_i/x_i - y_x)^4)(\sum(x_i/y_i - x_y)^4)},$

<pre>begin n_s := 6*n_e div 14; s1 := 0.0; s2 := 0.0; p1 := 0.0; p2 := 0.0; i_n := 0; for i:= 1 to n_s do if(y[i]<o_o_s) then begin s1 := s1 + y[i]/x[i]; s2 := s2 + x[i]/y[i]; i_n := i_n + 1; end; s1 := s1/i_n; s2 := s2/i_n; for i:= 1 to n_s do if(y[i]<o_o_s) then begin p1 := p1 + power(abs(y[i]/x[i]-s1),4.0); p2 := p2 + power(abs(x[i]/y[i]-s2),4.0); end; s_sum := power(p1*p2,0.5); end;</pre>	<p>unde</p> $y_x = (\sum y_i/x_i)/N$ <p>și</p> $x_y = (\sum x_i/y_i)/N$ <p>s_CC are ca date de intrare valorile extincției estimate (x) și experimentale (y) și produce suma reziduurilor de estimare (s_sum); se iau în considerare numai 3/7 din datele de intrare</p>
<pre>procedure s_CB(var x,y:x_array; n_e:longint; o_o_s: extended; var s_sum: extended); var i, i_n : longint; s1,s2,p1,p2 : extended; begin s1 := 0.0; s2 := 0.0; p1 := 0.0; p2 := 0.0; i_n := 0; for i:= 1 to n_e do if(y[i]<o_o_s) then begin s1 := s1 + y[i]/x[i]; s2 := s2 + x[i]/y[i]; i_n := i_n + 1; end; s1 := s1/i_n; s2 := s2/i_n; for i:= 1 to n_e do if(y[i]<o_o_s) then begin p1 := p1 + power(abs(y[i]/x[i]-s1),4.0); p2 := p2 + power(abs(x[i]/y[i]-s2),4.0); end; s_sum := power(p1*p2,0.5); end;</pre>	<p>s_CB implementează funcția de penalitate S dată de formula</p> $S = \sqrt{(\sum (y_i/x_i - y_x)^4)(\sum (x_i/y_i - x_y)^4)},$ <p>unde</p> $y_x = (\sum y_i/x_i)/N$ <p>și</p> $x_y = (\sum x_i/y_i)/N$ <p>s_CB are ca date de intrare valorile extincției estimate (x) și experimentale (y) și produce suma reziduurilor de estimare (s_sum)</p>
<pre>procedure s_CA(var x,y:x_array; n_e:longint; var s_sum: extended); var i : longint; s1,s2,p1,p2 : extended; begin s1 := 0.0; s2 := 0.0; p1 := 0.0; p2 := 0.0; for i:= 1 to n_e do begin s1 := s1 + y[i]/x[i]; s2 := s2 + x[i]/y[i]; end; s1 := s1/n_e; s2 := s2/n_e; for i:= 1 to n_e do begin p1 := p1 + power(abs(y[i]/x[i]-s1),8.0)/sqrt(i); p2 := p2 + power(abs(x[i]/y[i]-s2),8.0)/sqrt(i); end; s_sum := sqrt(p1*p2); end;</pre>	<p>s_CA implementează funcția de penalitate S dată de formula</p> $S = \sqrt{(\sum (y_i/x_i - y_x)^8/\sqrt{i})(\sum (x_i/y_i - x_y)^8/\sqrt{i})},$ <p>unde</p> $y_x = (\sum y_i/x_i)/N$ <p>și</p> $x_y = (\sum x_i/y_i)/N$ <p>s_CA are ca date de intrare valorile extincției estimate (x) și experimentale (y) și produce suma reziduurilor de estimare (s_sum)</p>
<pre>procedure s_A0(var x,y:x_array; n_e: longint;</pre>	<p>s_A0 implementează funcția de penalitate S dată</p>

Procese la interfața fazelor: Modelare matematică, Optimizare numerică, Implementare web, cu aplicații în separarea și caracterizarea seriilor de compuși chimici biologic activi

<pre>my2:extended; var s_sum: extended); var m_xy, m_x2 : extended; begin//S = (E-aX)^2 m_xy := m2(x,y,n_e); m_x2 := m2(x,x,n_e); s_sum := my2-m_xy*m_xy/m_x2; end;</pre>	<p>de formula</p> $S = (\sum(y_i - ax_i)^2$ <p>s_A0 are ca date de intrare valorile extincției estimate (x) și experimentale (y) și produce suma reziduurilor de estimare (s_sum)</p>
<pre>procedure s_B0(var x,y:x_array; n_e:longint; my2,my1:extended; var s_sum: extended); var a, b, m_x, m_x2, m_xy : extended; begin//S = (E-aX-b)^2 m_x := m1(x,n_e); m_x2 := m2(x,x,n_e); m_xy := m2(x,y,n_e); a := (m_xy-m_x*m_y1)/(m_x2-m_x*m_x); b := my1-a*m_x; s_sum := my2 - 2.0*a*m_xy - 2.0*b*my1+a*a*m_x2 + 2.0*a*b*m_x + b*b; end;</pre>	<p>s_B0 implementează funcția de penalitate S dată de formula</p> $S = (\sum(y_i - ax_i - b)^2$ <p>s_B0 are ca date de intrare valorile extincției estimate (x) și experimentale (y) și produce suma reziduurilor de estimare (s_sum)</p>
<pre>procedure one_step(var v,c:v_array); begin//X,A,B :1,2,3 c[0] := dt*(v[1]*power(c[2],y0)*power(c[3],y1) -v[2]*power(c[1],y2)); c[1] := c[1]+c[0]-dt*v[3]*power(c[1],y3); c[2] := c[2]-c[0]; c[3] := c[3]-c[0]; end;</pre>	<p>one_step implementează incrementarea unui moment de timp prin evaluarea expresiilor:</p> $\begin{aligned} dA &= -k_0A^{y_0}B^{y_1}dt + k_1X^{y_2}dt \\ dB &= -k_0A^{y_0}B^{y_1}dt + k_1X^{y_2}dt \\ dX &= (k_0A^{y_0}B^{y_1} - k_1X^{y_2} - k_2X^{y_3})dt \end{aligned}$ <p>c[0] conține valoarea concentrației [A+dA] c[1] conține valoarea concentrației [B+dB] c[2] conține valoarea concentrației [X+dX] c[3] conține valoarea concentrației [P+dP]</p>
<pre>procedure get_mod(var v,c:v_array; var x:x_array; n_e:longint); var i : shortint; j : longint; begin x[0] := c[1]; for j := 1 to n_e do begin one_step(v,c); x[j] := c[1]; for i := 1 to N_const do if(c[i]<0)then begin c[i] := 0.0; end; end; end; end;</pre>	<p>get_mod iterează desfășurarea completă a unei reacții chimice conform modelului:</p> $\begin{aligned} dA &= -k_0A^{y_0}B^{y_1}dt + k_1X^{y_2}dt \\ dB &= -k_0A^{y_0}B^{y_1}dt + k_1X^{y_2}dt \\ dX &= (k_0A^{y_0}B^{y_1} - k_1X^{y_2} - k_2X^{y_3})dt \end{aligned}$ <p>în vederea obținerii unei estimări a valorilor instantanee ale extincției (x) în raport cu valorile definite pentru constantele de viteză (v) și ordinele de reacție (c)</p>
<pre>procedure v_next(var i:i_array;</pre>	<p>v_next realizează incrementarea valorilor</p>

<pre> var v0,vi,v1:v_array); var j : shortint; begin for j := 1 to N_const do v1[j] := v0[j]*(1+vi[j]*(i[j]-1)); end;</pre>	<p>constantelor de experiment în raport cu valorile versorului de valori iterative (Z în notația de mai sus)</p>
<pre> procedure i_start(var i:i_array); var j:shortint; begin for j:= 0 to N_const do i[j] := 0; end;</pre>	<p>i_start inițiază librăria combinatorică a celor 3^7 valori iterative cu prima valoare a acestora: (0,0,0,0,0,0,0)</p>
<pre> function i_next(var i:i_array):boolean; var j:shortint; t:shortint; begin i[N_const] := i[N_const] + 1; for j:= N_const downto 1 do begin t := i[j] div 3; i[j] := i[j] mod 3; i[j-1] := i[j-1] + t; end; if i[0]>0 then begin i_next := true; i[0] := 0; end else i_next := false; end;</pre>	<p>i_next realizează o iterație în spațiul iterațiilor ordonate: (a1,a2,a3,a4,a5,a6,a7) unde a1, a2, a3, a4, a5, a6, a7 sunt valori întregi din mulțimea ordonată (în această ordine) {0,1,-1}</p>
<pre> procedure get_exp(var x:x_array; var n_e:longint; fn:file_name); var f_in:text; i:longint; begin assign(f_in,fn); reset(f_in); i:=0; while(not(eof(f_in)))do begin readln(f_in,x[i]); i:=i+1; end; close(f_in); n_e := i-1; end;</pre>	<p>get_exp realizează citirea datelor de extincție experimentală (y) din fișierul transmis ca parametru (fn)</p>
<pre> procedure put_ini(var x:v_array; fn:file_name; step:longint); var f_in:text; i:longint; begin assign(f_in,fn);</pre>	<p>put_ini inițializează fișierul de rezultate al aplicației; scrie iterația (step), valorile constantelor de viteză (x) și valorile ordinelor de reacție (y0,y1,y2,y3,y4)</p>

Procese la interfața fazelor: Modelare matematică, Optimizare numerică, Implementare web, cu aplicații în separarea și caracterizarea seriilor de compuși chimici biologic activi

<pre>{ \$i- } reset(f_in); i:=ioresult; { \$i+ } if(i>0) then begin rewrite(f_in); close(f_in); end; append(f_in); write(f_in,step); for i:=0 to N_const do write(f_in,x[i]); write(f_in,y0); write(f_in,y1); write(f_in,y2); write(f_in,y3); writeln(f_in); close(f_in); end;</pre>	
<pre>procedure v_copy(var v1,v2:v_array); var i : shortint; begin for i := 0 to N_const do v2[i] := v1[i]; end;</pre>	<p>v_copy realizează copia unui vector (v1) în alt vector (v2), ambii vectori fiind de același tip (v_array)</p>
<pre>function m1(var x:x_array; n_e:longint):extended; var rez:extended; i:longint; begin rez :=0.0; for i:=0 to n_e do rez := rez + x[i]; m1 := rez/(n_e+1); end;</pre>	<p>m1 calculează media aritmetică a valorilor din vectorul transmis ca parametru (x) după formula:</p> $m1 := (\sum x_i) / N$
<pre>function m2(var x,y:x_array; n_e:longint):extended; var rez:extended; i:longint; begin rez :=0.0; for i:=0 to n_e do rez := rez + x[i]*y[i]; m2 := rez/(n_e+1); end;</pre>	<p>m2 calculează media aritmetică de convoluție a valorilor din doi vectori transmiși ca parametrii (x și y) după formula:</p> $m2 := (\sum x_i y_i) / N$

S-au implementat și documentat librării pentru modulele de obținere a coeficienților modelelor de separare în amestecuri de trei solvenți. Implementarea s-a realizat folosind limbajul PHP în versiunea sa open source. Funcțiile operează direct asupra valorilor variabilelor aflate în programul principal (variabilele globale). Acestea sunt:

Cod sursă	Documentare
<pre>function c_post (&\$p,\$s,\$m,\$e,\$c,\$d,\$l,\$r_f,\$c_p,\$r_p,\$r_a,\$r,\$r_s) { \$GLOBALS[\$s]=explode(",",\$p[\$s]); for(\$i=0;\$i<count(\$GLOBALS[\$s]);\$i++) \$GLOBALS[\$s][\$i]=trim(\$GLOBALS[\$s][\$i]); //solvents done for(\$i=0;array_key_exists(\$e.\$i,\$p);\$i++){ \$GLOBALS[\$m][\$i]=explode(",",\$p[\$e.\$i]); for(\$j=0;\$j<count(\$GLOBALS[\$m][\$i]);\$j++) \$GLOBALS[\$m][\$i][\$j] = trim(\$GLOBALS[\$m][\$i][\$j]); }//mixtures done for(\$i=0;array_key_exists(\$e.\$i,\$p);\$i++){ \$GLOBALS[\$e][\$i]=\$i; }//experiments done for(\$i=0;array_key_exists(\$c.\$i,\$p);\$i++){ \$GLOBALS[\$c][\$i]=trim(\$p[\$c.\$i]); for(\$j=0;array_key_exists(\$e.\$j,\$p);\$j++){ \$GLOBALS[\$d][\$i][\$j] = trim(\$p[\$d." ".\$i." ".\$j]); if(!\$GLOBALS[\$d][\$i][\$j]) die("Please fill all measured data."); \$GLOBALS[\$d][\$i][\$j] = explode(",",\$GLOBALS[\$d][\$i][\$j]); \$GLOBALS[\$d][\$i][\$j][0] = trim(\$GLOBALS[\$d][\$i][\$j][0]); \$GLOBALS[\$d][\$i][\$j][1] = trim(\$GLOBALS[\$d][\$i][\$j][1]); } }//measured positions done for(\$i=0;array_key_exists(\$d."_e".\$i,\$p);\$i++){ \$GLOBALS[\$l][\$i]=\$p[\$d."_e".\$i]; }//columns lengths done for(\$i=0;\$i<count(\$GLOBALS[\$d]);\$i++) for(\$j=0;\$j<count(\$GLOBALS[\$d][\$i]);\$j++) \$GLOBALS[\$r_f][\$i][\$j]= \$GLOBALS[\$d][\$i][\$j][0]/\$GLOBALS[\$l][\$i][\$j]; //retention factors done \$rf_1=array_transpose(\$GLOBALS[\$r_f]); \$rf_2=\$rf_1; for(\$i=0;\$i<count(\$rf_2);\$i++) sort(\$rf_2[\$i]); for(\$i=0;\$i<count(\$rf_2);\$i++) for(\$j=0;\$j<count(\$rf_2[\$i]);\$j++) \$rf_2[\$i][\$j]=array_search(\$rf_2[\$i][\$j],\$rf_1[\$i]); for(\$i=0;\$i<count(\$GLOBALS[\$c])-1;\$i++){ for(\$j=\$i+1;\$j<count(\$GLOBALS[\$c]);\$j++){ \$GLOBALS[\$c_p][]=" ".\$GLOBALS[\$c][\$i].", "."\$GLOBALS[\$c][\$j]."; if(\$j==\$i+1)</pre>	<p>c_post prelucrează datele transmise prin protocolul HTTP POST</p> <p>rezultatele funcției c_post sunt salvate în variabila globală \$GLOBALS</p> <p>se prelucrează după cum urmează:</p> <ul style="list-style-type: none"> - valorile denunirilor solvenților (salvate în variabila \$GLOBALS[\$s]) - valorile fracțiilor molare ale solvenților asociate fiecărui experiment efectuat (salvate în variabila \$GLOBALS[\$m][\$i]) - valorile experimentale ale fronturilor de migrare ale solvenților asociate fiecărui experiment efectuat (salvate în variabila \$GLOBALS[\$e][\$i]) - valorile experimentale ale spoturilor compușilor asociate fiecărui experiment efectuat (salvate în variabila \$GLOBALS[\$d][\$i][\$j]) - valorile experimentale ale fronturilor de migrare ale solvenților asociate fiecărui experiment efectuat (salvate în variabila \$GLOBALS[\$l][\$i]) - valorile calculate ale factorilor de retenție pentru fiecare experiment și fiecare compus, acestea fiind salvate în variabila \$GLOBALS[\$r_f][\$i][\$j] - valorile calculate ale rezoluțiilor pentru fiecare experiment și fiecare pereche de compuși, acestea fiind salvate în variabila \$GLOBALS[\$r_f2][\$i][\$j] - valorile calculate ale rezoluțiilor pentru fiecare experiment și fiecare ordonată pereche de compuși, acestea fiind salvate în variabila \$GLOBALS[\$r_p][\$i][\$j]

Procese la interfața fazelor: Modelare matematică, Optimizare numerică, Implementare web, cu aplicații în separarea și caracterizarea seriilor de compuși chimici biologic activi

<pre> \$GLOBALS[\$r_p][]=(".\$i.", ".\$j."); for(\$k=0;\$k<count(\$GLOBALS[\$e]);\$k++){ \$GLOBALS[\$r_a][count(\$GLOBALS[\$c_p])- 1][\$k]= R0(\$GLOBALS[\$d][\$i][\$k][0], \$GLOBALS[\$d][\$j][\$k][0], \$GLOBALS[\$d][\$i][\$k][1], \$GLOBALS[\$d][\$j][\$k][1]); } } } for(\$k=0;\$k<count(\$GLOBALS[\$e]);\$k++){ for(\$i=0;\$i<count(\$rf_2[\$k])-1;\$i++){ \$GLOBALS[\$r][\$k][]= R0(\$GLOBALS[\$d][\$rf_2[\$k][\$i]][\$k][0], \$GLOBALS[\$d][\$rf_2[\$k][\$i+1]][\$k][0], \$GLOBALS[\$d][\$rf_2[\$k][\$i]][\$k][1], \$GLOBALS[\$d][\$rf_2[\$k][\$i+1]][\$k][1]); } } \$GLOBALS[\$r] = array_transpose(\$GLOBALS[\$r]); \$GLOBALS[\$r_s] = resolution_sort(\$GLOBALS[\$r]); } </pre>	
<pre> function resolution_sort(\$resolutions){ \$resolutions=array_transpose(\$resolutions); for(\$i=0;\$i<count(\$resolutions);\$i++) sort(\$resolutions[\$i]); return array_transpose(\$resolutions); } //sort resolutions </pre>	<p>resolutions_sort ordonează crescător tabloul de rezoluții ale experimentelor și perechilor de compuși</p>
<pre> function af_table(\$table,\$cols,\$rows,\$msg){ echo("<table border=1><tr><td>"); if(\$msg) echo(\$msg." "); echo(\$table); if(array_key_exists(\$table,\$GLOBALS)){ if(\$cols) for(\$i=0;\$i<count(\$GLOBALS[\$cols]);\$i++) echo("<td>".\$GLOBALS[\$cols][\$i]); for(\$i=0;\$i<count(\$GLOBALS[\$table]);\$i++){ if(is_array(\$GLOBALS[\$table][\$i])){ echo("<tr>"); if(\$rows) echo("<td>".\$GLOBALS[\$rows][\$i]); } } for(\$j=0;\$j<count(\$GLOBALS[\$table][\$i]);\$j++) if(is_array(\$GLOBALS[\$table][\$i][\$j])) echo("<td>". implode(":",\$GLOBALS[\$table][\$i][\$j])); } } </pre>	<p>af_table are ca date de intrare:</p> <ul style="list-style-type: none"> ÷ un tabel de valori \$table ÷ un șir de denumiri de coloane \$cols asociate valorilor din variabila \$table ÷ un șir de denumiri de linii \$rows asociate valorilor din variabila \$table ÷ un mesaj \$msg <p>folosește:</p> <ul style="list-style-type: none"> ÷ tabloul variabilelor globale \$GLOBALS pentru a manipula datele din tabelul

<pre> else echo("<td>". sprintf("% 1.4f", \$GLOBALS[\$table][\$i][\$j])); } else echo("<td>". \$GLOBALS[\$table][\$i]); } } echo("</table>"); } //display a one, two or three dimensional matrix </pre>	<p>\$table</p> <p>și realizează afișarea formatată HTML a tabelului \$table folosind \$msg drept prim element în tabel (linia 0 și coloana 0)</p>
<pre> function af_simu(&\$v1,&\$v2,\$v3){ \$af=explode("\t",\$v1); for(\$i=0;\$i<count(\$v2);\$i++) \$af.="t".sprintf("% 1.4f",\$v2[\$i]); return(\$af."t".sprintf("% 1.6f",\$v3)."\r\n"); } </pre>	<p>af_simu prepară pentru afișare o serie de date care îi este transmisă ca parametrii în care se presupune că \$v1 este un șir de întregi, \$v2 este un șir de reali cu precizie de 4 zecimale iar \$v3 este o valoare cu o precizie de 6 zecimale</p>
<pre> function array_transpose(&\$a){ for(\$i=0;\$i<count(\$a);\$i++) for(\$j=0;\$j<count(\$a[\$i]);\$j++) \$b[\$j][\$i]=\$a[\$i][\$j]; return \$b; } //transpose a matrix </pre>	<p>array_transpose implementează transpusa unei matrici care este transmisă ca parametru (\$a); returnează valoarea transpusei (\$b)</p>
<pre> function MX_Model(\$n,&\$x){ \$m=array(\$x[0]/100, \$x[1]/100, \$x[2]/100, \$x[0]*\$x[1]/10000, \$x[0]*\$x[2]/10000, \$x[1]*\$x[2]/10000); if(\$n==7) \$m[6]=\$x[0]*\$x[1]*\$x[2]/1000000; return \$m; } </pre>	<p>MX_Model implementează calculul valorii estimate a funcției de răspuns cromatografic pentru modelul cu 6 termeni (când \$n=6) și pentru modelul cu 7 termeni (când \$n=7) folosind valorile fracțiilor molare (\$x) transmise drept parametrii și returnând valorile termenilor cunoscuți ai modelului (\$m)</p>
<pre> function MX_Put(\$n,&\$x,&\$d,&\$r){ for(\$i=0;\$i<count(\$x);\$i++){ \$r->a[\$i]=MX_Model(\$n,\$x[\$i]); \$r->b[\$i]=\$d[\$i]; } } </pre>	<p>MX_Put construiește tabloul de valori ai termenilor cunoscuți (\$r->a) și de estimare (\$r->b) pentru toate experimentele (\$x) date drept parametrii de intrare</p>
<pre> function MX_Est(&\$a,&\$x){ \$Rs=0; for(\$i=0;\$i<count(\$a);\$i++) \$Rs+=\$a[\$i]*\$x[\$i]; return \$Rs; } </pre>	<p>Realizează o estimare a funcției de răspuns cromatografic folosind formula modelului:</p> $a_1x_1+a_2x_2+a_3x_3+ \\ a_4x_1x_2+a_5x_1x_3+a_6x_2x_3+...$
<pre> function MX_System(&\$S_in,&\$S_out){ for(\$j=0;\$j<count(\$S_in->a);\$j++){ \$S_out->b[\$j]=m2(\$S_in->b,\$S_in->a[\$j]); } for(\$i=0;\$i<count(\$S_in->a);\$i++) \$S_out->a[\$j][\$i]= </pre>	<p>MX_System calculează coeficienții sistemului de ecuații obținut prin aplicarea metodei celor mai mici pătrate de eroare</p>

Procese la interfața fazelor: Modelare matematică, Optimizare numerică, Implementare web, cu aplicații în separarea și caracterizarea seriilor de compuși chimici biologici activi

<pre> m2(\$S_in->a[\$j],\$S_in->a[\$i]); } } </pre>	<p>având drept date de intrare \$S_in erorile de estimare în experimente și drept date de ieșire matricea extinsă a sistemului coeficienților necunoscuți de determinat</p>
<pre> function MX_Gauss(&\$b,&\$a){ for(\$i=0;\$i<count(\$a);\$i++){ \$m=\$i;//caut max in coloana for(\$j=\$i+1;\$j<count(\$a);\$j++) if(abs(\$a[\$i][\$j])>abs(\$a[\$i][\$m]))\$m=\$j; if(\$a[\$i][\$m]==0)return -1; if(\$m != \$i){//inlocuiesc linii \$tmp=\$b[\$m];\$b[\$m]=\$b[\$i];\$b[\$i]=\$tmp; for(\$j=0;\$j<count(\$a);\$j++){ \$tmp=\$a[\$m][\$j]; \$a[\$m][\$j]=\$a[\$i][\$j]; \$a[\$i][\$j]=\$tmp; } } if(!abs(\$a[\$i][\$i])) return -1; for(\$j=\$i+1;\$j<count(\$a);\$j++)//impart linie \$a[\$i][\$j]/=\$a[\$i][\$i]; \$b[\$i]/=\$a[\$i][\$i]; \$a[\$i][\$i]=1; //fac 0 sub diagonala for(\$j=\$i+1;\$j<count(\$a);\$j++){ \$b[\$j]-=\$a[\$j][\$i]*\$b[\$i]; for(\$k=count(\$a)-1;\$k>\$i;\$k--) \$a[\$j][\$k]-=\$a[\$j][\$i]*\$a[\$i][\$k]; } } //fac 0 peste diagonala for(\$i=count(\$a)-1;\$i>0;\$i--) for(\$j=\$i-1;\$j>=0;\$j--) \$b[\$j]-=\$a[\$j][\$i]*\$b[\$i]; return 1; } </pre>	<p>MX_Gauss are drept date de intrare șirul coeficienților termenilor liberi \$b și matricea coeficienților sistemului de ecuații liniare și omogene \$a, aplică metoda Gauss-Jordan asupra matricii extinse a sistemului de ecuații pentru obținerea soluției unice a sistemului, făcând întâi 0 deasupra diagonalei principale a sistemului, apoi 1 pe diagonala principală, apoi 0 sub diagonala principală, rămânând în final ca în matricea coeficienților (\$b) să se regăsească valorile soluției unice a sistemului de ecuații liniare și omogene \$a.\$b</p> <p>Cazurile de eșec în algoritmul descris mai sus sunt interpretate cu semnificația că atunci sistemul nu admite o soluție unic determinată</p>
<pre> function MX_coefs(\$n,&\$data,&\$mixtures){ for(\$i=0;\$i<count(\$data);\$i++){ \$m_c_t[\$i] = new m_c; MX_Put(\$n,\$mixtures,\$data[\$i],\$m_c_t[\$i]); \$m_c_t[\$i]->a=array_transpose(\$m_c_t[\$i]->a); \$m_c_X[\$i] = new m_c; MX_System(\$m_c_t[\$i],\$m_c_X[\$i]); \$g=MX_Gauss(\$m_c_X[\$i]->b,\$m_c_X[\$i]->a); if(\$g<0)die("Gauss error."); \$coef[]=\$m_c_X[\$i]->b; } return \$coef; } </pre>	<p>MX_coefs obține coeficienții necunoscuți prin construirea matricii extinse a sistemului (MX_Put urmată de MX_System), aplicarea metodei Gauss (MX_Gauss) și recoltarea coeficienților în variabila \$coef care este apoi returnată</p>
<pre> function m2(&\$v,&\$u){ \$rez=0; \$n=count(\$v); </pre>	<p>m2 efectuează media aritmetică de convoluție a doi vectori transmiși drept</p>

<pre>for(\$i=0;\$i<\$n;\$i++) \$rez+=\$v[\$i]*\$u[\$i]; return \$rez/\$n; }</pre>	parametrii (\$v și \$u), valoare care este apoi returnată
<pre>function R0(\$l1,\$l2,\$w1,\$w2){ return abs((\$l2-\$l1)*2/(\$w1+\$w2)); } //compute the resolution</pre>	R0 calculează rezoluția a două picuri ale căror retenții (\$l1 și \$l2) și lățimi (\$w1 și \$w2) sunt transmise ca parametrii
<pre>function Worst_RF(\$rf){ \$worst=1; sort(\$rf); for(\$i=0;\$i<count(\$rf)-1;\$i++) if(abs(\$rf[\$i]-\$rf[\$i+1])<\$worst) \$worst=abs(\$rf[\$i]-\$rf[\$i+1]); return \$worst; } //the worstest RF are returned</pre>	Worst_RF folosind un șir de factori de retenție care este primit ca date de intrare calculează cea mai mică diferență între factorii de retenție pe care o returnează
<pre>function Worst_RS(\$rs){ \$worst=\$rs[0]; for(\$i=1;\$i<count(\$rs);\$i++) if(\$rs[\$i]<\$worst) \$worst=\$rs[\$i]; return \$worst; } //the worstest RS are returned</pre>	Worst_RF folosind un șir de rezoluții care este primit ca date de intrare calculează cea mai mică diferență între rezoluții pe care o returnează
<pre>function rf_sort(&\$rf){ \$rf_s=array_transpose(\$rf); for(\$i=0;\$i<count(\$rf_s);\$i++) sort(\$rf_s[\$i]); return array_transpose(\$rf_s); }</pre>	rf_sort are ca date de intrare șirul retențiilor pentru fiecare experiment și sortează pentru fiecare experiment în ordinea crescătoare a retențiilor, returnând rezultatul obținut
<pre>function f_sm(&\$r_f){ \$rf=rf_sort(\$r_f); \$n=count(\$rf); //nr componente for(\$i=0;\$i<count(\$rf[0]);\$i++){ \$drft=100.0/(\$n-1); \$f_sm[\$i]=0; for(\$j=0;\$j<count(\$rf)-1;\$j++){ \$f_sm[\$i]+= pow(\$drft-100.0*abs(\$rf[\$j][\$i]-\$rf[\$j+1][\$i]),2); } \$f_sm[\$i]= pow(\$f_sm[\$i],0.5)/pow(\$n*(\$n+1),0.5); } return \$f_sm; } //Sm</pre>	<p>f_sm are ca date de intrare factorii de retenție (\$r_f) și calculează separarea medie relativă:</p> $S_m(e) = \sqrt{(\sum_j (\Delta R_{FT} - \Delta R_{F(j,e)})) / (n+1)}$ <p>unde</p> $\Delta R_{FT} = 100 / (n-1)$ $\Delta R_{F(j,e)}$ separare relativă a lui j în e; Separarea relativă compusului ordonat j în eluentul e se calculează împărțind distanța de migrare a celui de-al j-lea compus migrat l(j) la lungimea frontului de eluție l(e) și *100
<pre>function f_rsa(&\$r_s){ \$rs=array_transpose(\$r_s); for(\$i=0;\$i<count(\$rs);\$i++){ \$f_rsa[\$i]=0; for(\$j=0;\$j<count(\$rs[\$i]);\$j++){ \$f_rsa[\$i]+=\$rs[\$i][\$j]/count(\$rs[\$i]); } } return \$f_rsa;</pre>	<p>f_rsa are ca date de intrare rezoluțiile (\$r_s) și calculează rezoluția medie:</p> $RSA(e) = \sum_j RSO(j,e) / n$ <p>unde</p> $RSO(j,e)$ este rezoluția separării picurilor j și j+1 în e

Procese la interfata fazelor: Modelare matematică, Optimizare numerică, Implementare web, cu aplicatii în separarea și caracterizarea seriilor de compusi chimici biologic activi

<pre> } //RsM function f_rrp(&\$r_s){ \$f_rsa=f_rsa(\$r_s); \$rs=array_transpose(\$r_s); for(\$i=0;\$i<count(\$rs);\$i++){ \$f_rrp[\$i]=1; for(\$j=0;\$j<count(\$rs[\$i]);\$j++){ \$f_rrp[\$i]*=\$rs[\$i][\$j]; } if(\$f_rsa[\$i]) \$f_rrp[\$i]/=\$f_rsa[\$i]; else \$f_rrp[\$i]=0; } return \$f_rrp; } //RRP </pre>	<p>f_rrp are ca date de intrare rezoluțiile (\$r_s) și calculează expresia:</p> $RRP(e)=(\Pi_j RSO(j,e))/RSA(e)$ <p>unde</p> <p>RSA(e) este rezoluția medie</p> <p>$\Pi_j RSO(j,e)$ este produsul rezoluțiilor</p>
<pre> function f_inf(&\$rf){ \$n=n_f_i; \$fi="i_f"; for(\$j=0;\$j<count(\$rf[0]);\$j++) for(\$i=0;\$i<\$n;\$i++) \$GLOBALS[\$fi][\$i][\$j]=0; for(\$j=0;\$j<count(\$rf[0]);\$j++) for(\$i=0;\$i<count(\$rf);\$i++){ for(\$k=\$n-1;\$k>=0;\$k--){ if(\$rf[\$i][\$j]>=\$k/\$n) break; } \$GLOBALS[\$fi][\$k][\$j]++; } \$r=f_log(\$GLOBALS[\$fi],count(\$rf)); unset(\$GLOBALS[\$fi]); return \$r; } </pre>	<p>f_inf are ca date de intrare factorii de retenție pentru toate separările (\$rf) și calculează entropia informațională a separării folosind formula:</p> $Inf(e,m) = \sum k(n_k/n)\log_2(n_k/n)$ <p>unde</p> <p>n_k este numărul de picuri cuprins în intervalul k din cele m intervale în care este împărțită distanța de eluție l(e)</p>
<pre> function f_log(&\$fi,\$n){ for(\$j=0;\$j<count(\$fi[0]);\$j++){ \$r[\$j]=0; for(\$i=0;\$i<count(\$fi);\$i++){ if(\$fi[\$i][\$j]) \$r[\$j]- =\$fi[\$i][\$j]*log(\$fi[\$i][\$j]/\$n,2)/\$n; } } return \$r; } </pre>	<p>f_log are ca date de intrare factorii de retenție pentru o separare (\$rf) și calculează entropia informațională a separării folosind formula:</p> $Inf(e,m) = \sum k(n_k/n)\log_2(n_k/n)$ <p>unde</p> <p>n_k este numărul de picuri cuprins în intervalul k din cele m intervale în care este împărțită distanța de eluție l(e)</p>
<pre> function div_row(\$row,\$div){ for(\$i=0;\$i<count(\$row);\$i++){ \$row[\$i]/=\$div; } return \$row; } </pre>	<p>div_row împarte valorile unui șir (\$row) la o valoare (\$div) și întoarce șirul rezultat</p>

S-au implementat funcții pentru evaluarea polinoamelor (de numărare și caracteristice) asociate structurilor compușilor chimici. Codul sursă este redat mai jos:

Cod sursă	Documentare
<pre>const impa_min=1e-100; disp_min=1e-14; type st255=string[255]; ydat=array[0..35]of double; polv=array[0..11500]of ydat; ysys=array[0..3]of double; xsys=array[0..3]of ysys; rati=array[0..11500]of shortint; rats=array[0..11500]of double;</pre>	<p>constantele programului valoarea minimă acceptată la împărțire valoarea minimă acceptată unei dispersii tipurile de date tip șir de caractere cu maxim 255 caractere șir de maxim 36 de numere reale tablou de maxim 11501 șiruri de nr. reale șir de maxim 4 numere reale tablou de maxim 4 șiruri de numere reale șir de maxim 11501 numere întregi scurte tablou de maxim 11501 numere reale</p>
<pre>function gauss(var b:ysys;var a:xsys;DC:byte) :Boolean; var i,j,m,k:Byte;tmp:double; begin gauss := True; for i:=0 to DC do begin m := i; for j:=i+1 to DC do if (abs(a[i,j])>abs(a[i,m])) then m := j; if(abs(a[i][m])<impa_min) then exit; if(m <> i) then begin //inlocuiesc linii tmp := b[m]; b[m] := b[i]; b[i] := tmp; for j:=0 to DC do begin tmp := a[m,j]; a[m,j] := a[i,j]; a[i,j] := tmp; end; end; if(abs(a[i,i])<impa_min) then exit; for j:=i+1 to DC do//impart linie a[i,j] := a[i,j]/a[i,i]; b[i] := b[i]/a[i,i]; a[i,i]:=1; for j := i+1 to DC do begin b[j] := b[j] - a[j,i]*b[i]; for k:= DC downto i+1 do a[j,k] := a[j,k] - a[j,i]*a[i,k]; end; end; for i := DC downto 1 do for j := i-1 downto 0 do b[j] := b[j] - a[j,i]*b[i]; gauss := False; end;</pre>	<p>gauss implementează algoritmul Gauss-Jordan și returnează false la succes variabile locale începutul algoritmului inițializează valoarea de retur caută maximum in coloana presupune că acesta este i (m=i) pentru j>i dacă $a(i,j) > a(i,m)$ atunci m=j dacă maximum (m) < impa_min atunci eșec dacă maximum nu e pe linia i atunci se înlocuiește linia i cu linia m atât în coloana termenilor liberi (b) cât și în coloana coeficienților (a) ai matricii sistemului; această transformare nu modifică soluția sistemului, fiind o transformare elementară aplicată matricii extinse a sistemului de ecuații liniare și omogene de rezolvat dacă $a(i,i) < impa_min$ atunci ieșire cu eșec pentru j>i imparte a(i,j) la a(i,i) imparte termenul liber b(i) la a(i,i) a(i,i) devine acum 1 (prin aceeași împărțire) pentru j>i se face 0 sub diagonala astfel: din b(j) se scade a(j,i)*b(i) pentru fiecare k>i+1 din a(j,k) se scade a(j,i)*a(i,k) sfarsit pentru 0 sub diagonala principală sfarsit parcurgere completă pe diagonală pentru fiecare linie fac 0 peste diagonală pentru fiecare coloană din b(j) se scade a(j,i)*b(i) ieșirea este acum cu succes sfârșit algoritm</p>
<pre>type</pre>	<p>noi tipuri de date</p>

Procese la interfata fazelor: Modelare matematică, Optimizare numerică, Implementare web, cu aplicatii în separarea și caracterizarea seriilor de compusi chimici biologic activi

<pre>desc=record mx1,mxy,mx2,dx1,dx2:double;end; dess=array[0..12000]of desc; dexx=array[0..12000]of rats;</pre>	<p>structura de caracterizare a unui descriptor tabloul de descriptori tabloul de covarianțe perechi de descriptori</p>
<pre>function mm1y(var y:ydat;mn:integer):double; var i:integer;r:double; begin r:=0.0; for i:=0 to mn do r:=r+y[i]; mm1y:=r/(mn+1.0); end;</pre>	<p>mm1y returnează media unui șir de numere variabile locale început algoritm inițializează cu 0 suma adună la suma anterioară valoarea lui y(i) împarte suma obținută la nr. de elemente sfârșit algoritm</p>
<pre>function mm2y(var y1,y2:ydat;mn:integer):double; var i:integer;r:double; begin r:=0.0; for i:=0 to mn do r:=r+y1[i]*y2[i]; mm2y:=r/(mn+1.0); end;</pre>	<p>mm1y returnează covarianța a 2 șiruri de nr. variabile locale început algoritm inițializează cu 0 suma pentru fiecare pereche de numere adună la suma anterioară y1(i)*y2(i) și împarte suma obținută la nr. de elemente; sfârșit algoritm</p>
<pre>var f:text; s:st255; pn:st255; mn:integer; i0,i1,i2,i3:integer; rn:integer; yy0:ydat; r_i,r_j:rati; xx:polv; gcol:ysys; gmat:xsys; m_y0,d_y0:double; r2y_1,r2y_2_1,r2y_2_2,r2y_2,r2y,r2:double; d00,d12,d13,d23:double; dxy:dess; dxx:dexx;</pre>	<p>variable globale în programul principal variabilă tip fișier text pentru citiri/scrieri variabilă pentru citiri/scrieri șiruri caractere variabilă pentru citiri/scrieri șiruri caractere mn este numărul de structuri moleculare variabile tip contor rn este numărul de valori polinomiale yy0 este șirul de valori experimentale r_i, r_j sunt termenii fracției raționale p/q xx tabloul valorilor polinomiale pt molecule gcol: coloana termenilor liberi (b) pt Gauss gmat: matricea sistemului (a) pentru Gauss media și dispersia valorilor experimentale var. pt. val. intermediare, finale corelație variabile cu diferite semnificații caracterizează un descriptor stochează covarianțe de descriptori</p>
<pre>begin assign(f,'p_v.txt');reset(f);readln(f,pn);readln(f,s); read(f,mn);read(f,rn); mn:=mn-1;rn:=rn-1;read(f,i0); for i0:=0 to mn do read(f,yy0[i0]); readln(f); r2:=0.2;//r2 global m_y0:=mm1y(yy0,mn); d_y0:=mm2y(yy0,yy0,mn)-m_y0*m_y0; for i1:=0 to rn do begin read(f,r_i[i1]); read(f,r_j[i1]); read(f,r2y); for i0:=0 to mn do read(f,xx[i1][i0]); readln(f); dxy[i1].mx1:=mm1y(xx[i1],mn);//m(x1) dxy[i1].mx2:=mm2y(xx[i1],xx[i1],mn);//m(x1^2) dxy[i1].mxy:=mm2y(xx[i1],yy0,mn);//m(x1y)</pre>	<p>inceput program principal pregătire citire date numerice din fișier date citire număr molecule și număr descriptori decrementarea nr. molecule și descriptori citirea valorilor experimentale citirea sfârșitului de linie inițializarea corelației minime acceptate calcularea mediei valorilor experimentale calcularea dispersiei valorilor experimentale pentru fiecare descriptor polinomial citirea numărătorului raționalului p/q citirea numitorului raționalului p/q citirea valorii raționalului p/q citirea valorii polinomului în rădăcina p/q citirea sfârșitului de linie calcularea valorii medii pentru descriptor calcularea mediei pătratelor pt. descriptor calcularea covarianței cu valorile experim.</p>

<pre> dxy[i1].dx1:=dxy[i1].mxy-dxy[i1].mx1*m_y0; dxy[i1].dx2:= dxy[i1].mx2-dxy[i1].mx1*dxy[i1].mx1; end; close(f); for i1:=0 to rn-1 do begin for i2:=1 to rn do begin dxx[i1][i2]:=mm2y(xx[i1],xx[i2],mn); end; end; assign(f,pn+'_rez_'+s+'.txt');rewrite(f);close(f); for i1:=0 to rn-2 do begin writeln(i1); if(abs(dxy[i1].dx2)<disp_min)then continue; for i2:=i1+1 to rn-1 do begin if(abs(dxy[i2].dx2)<disp_min)then continue; d12:=dxx[i1][i2]-dxy[i1].mx1*dxy[i2].mx1; d00:=d12*d12/dxy[i1].dx2/dxy[i2].dx2; if((d00<0)or(d00>=0.99))then continue; for i3:=i2+1 to rn do begin if(abs(dxy[i3].dx2)<disp_min)then continue; d13:=dxx[i1][i3]-dxy[i1].mx1*dxy[i3].mx1; d00:=d13*d13/dxy[i1].dx2/dxy[i3].dx2; if((d00<0)or(d00>=0.99))then continue; d23:=dxx[i2][i3]-dxy[i2].mx1*dxy[i3].mx1; d00:=d23*d23/dxy[i2].dx2/dxy[i3].dx2; if((d00<0)or(d00>=0.99))then continue; gcol[0]:=m_y0; gcol[1]:=dxy[i1].mxy; gcol[2]:=dxy[i2].mxy; gcol[3]:=dxy[i3].mxy; gmat[0][0]:=1.0; gmat[1][0]:=dxy[i1].mx1; gmat[0][1]:=gmat[1][0]; gmat[2][0]:=dxy[i2].mx1; gmat[0][2]:=gmat[2][0]; gmat[3][0]:=dxy[i3].mx1; gmat[0][3]:=gmat[3][0]; gmat[1][1]:=dxy[i1].mx2; gmat[2][2]:=dxy[i2].mx2; gmat[3][3]:=dxy[i3].mx2; gmat[2][1]:=dxx[i1][i2]; gmat[1][2]:=gmat[2][1]; gmat[3][1]:=dxx[i1][i3]; gmat[1][3]:=gmat[3][1]; gmat[3][2]:=dxx[i2][i3]; gmat[2][3]:=gmat[3][2]; if(gauss(gcol,gmat,3))then continue; if(abs(gcol[0])>1e5)then continue; r2y_1:=gcol[1]*dxy[i1].dx1 +gcol[2]*dxy[i2].dx1 +gcol[3]*dxy[i3].dx1; </pre>	<p> calcularea dispersiei cu valorile experim. calcularea dispersiei valorilor descriptorului //m(x1^2)-m(x1)*m(x1) sfârșit pentru închidere fișier date de intrare pentru fiecare pereche de două rădăcini p/q calculează media de convoluție a valorilor polinomului în cele două puncte date sfârșit pentru pregătește fișierul de ieșire pentru rezultate pentru fiecare descriptor afișează indicele descriptorului dacă $D^2(X1)<disp_min$ continuă pentru fiecare descriptor dacă $D^2(X2)<disp_min$ continuă $d12=M(X1X2)-M(X1)M(X2)$ $d00=d12*d12/D^2(X1)/D^2(X2)$ dacă (d00<0)sau(d00>0.99) continuă pentru fiecare descriptor dacă $D^2(X3)<disp_min$ continuă; $d13=M(X1X3)-M(X1)M(X3)$ $d00=d13*d13/D^2(X1)/D^2(X3)$ dacă (d00<0)sau(d00>0.99) continuă $d23=M(X2X3)-M(X2)M(X3)$ $d00=d23*d23/D^2(X2)/D^2(X3)$ dacă (d00<0)sau(d00>0.99) continuă m(y) m(yx1) m(yx2) m(yx3) 1 m(x1) m(x1) m(x2) m(x2) m(x3) m(x3) m(x1x1) m(x2x2) m(x3x3) m(x1x2) m(x1x2) m(x1x3) m(x1x3) m(x2x3) m(x2x3) sistemul nu are soluție unic determinată coeficientul liber e valoare inacceptabilă $r2y_1= a1*M(X1)$ + $a2*M(X2)$ + $a3*M(X3)$ </p>
---	---

Procese la interfata fazelor: Modelare matematică, Optimizare numerică, Implementare web, cu aplicatii în separarea și caracterizarea seriilor de compusi chimici biologic activi

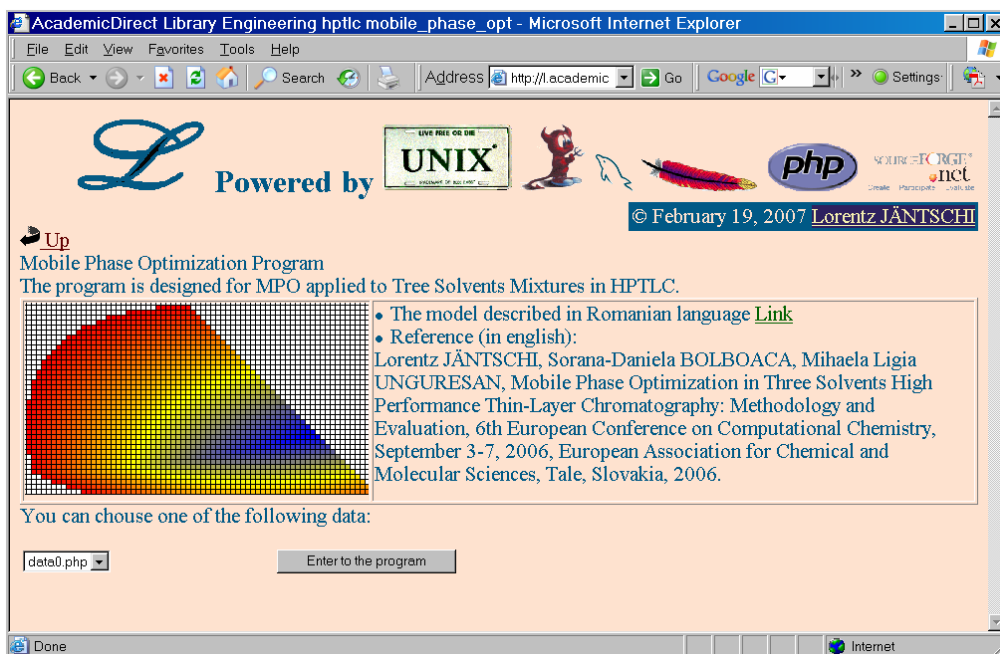
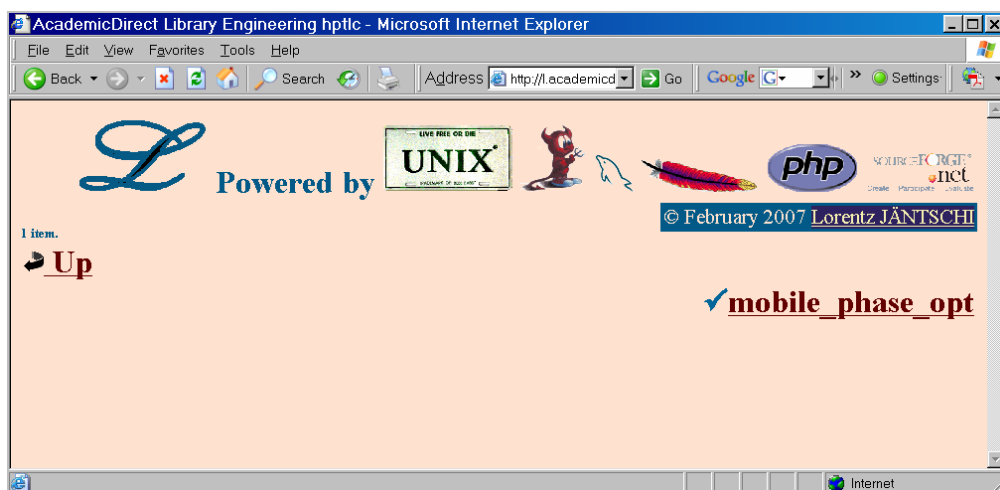
<pre> r2y_2_1:=gcol[1]*gcol[1]*dxy[i1].dx2 +gcol[2]*gcol[2]*dxy[i2].dx2 +gcol[3]*gcol[3]*dxy[i3].dx2; r2y_2_2:=gcol[1]*gcol[2]*d12 +gcol[1]*gcol[3]*d13 +gcol[2]*gcol[3]*d23; r2y_2:=(r2y_2_1+2.0*r2y_2_2)*d_y0; if(r2y_2<disp_min)then continue; r2y:=r2y_1*r2y_1/r2y_2; if((r2y<0)or(r2y>=1))then continue; if(r2y>r2)then begin append(f); writeln(f,r2y:0:3,' ',r_i[i1],',',r_j[i1],', ',r_i[i2], ', ',r_j[i2],', ',r_i[i3],',',r_j[i3],', ',r2y,', gcol[0],', ',gcol[1],', ',gcol[2],', ',gcol[3]); close(f); r2=r2y; writeln(r2y); end; end; end; end; end; readln; end. </pre>	<pre> r2_y_2_1= a1²*D²(X1) + a2²*D²(X2) + a3²*D²(X3) r2y_2_2=a1a2*(M(X1X2)-M(X1)M(X2)) +a1a3*(M(X1X3)-M(X1)M(X3)) +a2a3*(M(X2X3)-M(X2)M(X3)) r2y_2= r2y_2_1+2.0*r2y_2_2)*D²(Y) dc r2y_2<disp_min at. sol. nerezonabilă r2y=r2(Y,Y^) dacă(r2y<0)sau(r2y>1)atunci eroare dacă(r2y>r2)atunci pregătește fișierul rezultate pt. adăugare scrie în fișierul de rezultate valorile determinării r², raționalilor p1/q1, p2/q2, p3/q3, și coef. ecuației de regresie închide fișierul de rezultate noua valoare a lui r2 devine r2y afișează noua valoare a lui r2 sfârșit dacă sfârșit pentru sfârșit pentru sfârșit pentru așteaptă enter sfârșit program </pre>
---	---

Lorentz JĂNTSCHI (principal investigator) & Sorana D. BOLBOACĂ (co-investigator)

Activități și rezultate. Etapa III(2008). Obiectivul 2(Dezvoltarea aplicațiilor). Activitatea 3(Implementare interfață).

S-au proiectat și implementat interfețele client server pentru optimizarea amestecului de trei solvenți în cromatografie și pentru analiza dependenței liniare.

Următoarele reprezintă capturi de ecran ale aplicației client-server entru optimizarea amestecului de trei solvenți în cromatografie:



Procese la interfața fazelor: Modelare matematică, Optimizare numerică, Implementare web, cu aplicații în separarea și caracterizarea seriilor de compuși chimici biologic activi

AcademicDirect Library Engineering hptlc mobile_phase_opt - Microsoft Internet Explorer

File Edit View Favorites Tools Help

Address http://l.academic

Powered by UNIX php SOURCEFORGE nct

© February 19, 2007 Lorentz JÄNTSCHI

Up

Reference for data:

- Claudia CIMPOIU, Lorentz JÄNTSCHI, Teodor HODISAN, A New Method for Mobile Phase Optimization in High-Performance Thin-Layer Chromatography (HPTLC), Journal of Planar Chromatography - Modern TLC, Research Institute for Medicinal Plants in cooperation with Springer Hungarica, ISSN 0933-4173, Budapest, Hungary, 11(May/June), p. 191-194, 1998.
- && Claudia CIMPOIU, Lorentz JÄNTSCHI, Teodor HODISAN, A New Mathematical Model for the Optimization of the Mobile Phase Composition in HPTLC and the Comparison with Other Models, Journal of Liquid Chromatography and Related Technologies, Marcel Dekker Inc. then Taylor & Francis, ISSN 1082-6076 (Print) 1520-572X (Online), London, England, 22(10), p. 1429-1441, 1999.

Solvents:

Compounds:

Submit Query

AcademicDirect Library Engineering hptlc mobile_phase_opt - Microsoft Internet Explorer

File Edit View Favorites Tools Help

Address http://l.academic

Powered by UNIX php SOURCEFORGE nct

© February 19, 2007 Lorentz JÄNTSCHI

Up

Reference for data:

- Claudia CIMPOIU, Lorentz JÄNTSCHI, Teodor HODISAN, A New Method for Mobile Phase Optimization in High-Performance Thin-Layer Chromatography (HPTLC), Journal of Planar Chromatography - Modern TLC, Research Institute for Medicinal Plants in cooperation with Springer Hungarica, ISSN 0933-4173, Budapest, Hungary, 11(May/June), p. 191-194, 1998.
- && Claudia CIMPOIU, Lorentz JÄNTSCHI, Teodor HODISAN, A New Mathematical Model for the Optimization of the Mobile Phase Composition in HPTLC and the Comparison with Other Models, Journal of Liquid Chromatography and Related Technologies, Marcel Dekker Inc. then Taylor & Francis, ISSN 1082-6076 (Print) 1520-572X (Online), London, England, 22(10), p. 1429-1441, 1999.

Experiments:

Experiment	Include	CHCl3	i-PrOH	Me2O
0	<input checked="" type="checkbox"/>	33.3%	33.3%	33.3%
1	<input checked="" type="checkbox"/>	10%	10%	80%
2	<input checked="" type="checkbox"/>	10%	80%	10%
3	<input checked="" type="checkbox"/>	80%	10%	10%
4	<input checked="" type="checkbox"/>	50%	0%	50%
5	<input checked="" type="checkbox"/>	50%	50%	0%
6	<input checked="" type="checkbox"/>	0%	50%	50%
7	<input checked="" type="checkbox"/>	100%	0%	0%
8	<input checked="" type="checkbox"/>	0%	0%	100%
9	<input checked="" type="checkbox"/>	0%	100%	0%

Compounds:

Solvents:

Submit Query

AcademicDirect Library Engineering hptlc mobile_phase_opt - Microsoft Internet Explorer

Address: http://academicdirect.org/Engineering/

© February 19, 2007 Lorentz JÄNTSCHI

Reference for data:

- Claudia CIMPOIU, Lorentz JÄNTSCHI, Teodor HODISAN, A New Method for Mobile Phase Optimization in High-Performance Thin-Layer Chromatography (HPTLC), Journal of Planar Chromatography - Modern TLC, Research Institute for Medicinal Plants in cooperation with Springer Hungarica, ISSN 0933-4173, Budapest, Hungary, 11(May/June), p. 191-194, 1998.
- &&
- Claudia CIMPOIU, Lorentz JÄNTSCHI, Teodor HODISAN, A New Mathematical Model for the Optimization of the Mobile Phase Composition in HPTLC and the Comparison with Other Models, Journal of Liquid Chromatography and Related Technologies, Marcel Dekker Inc. then Taylor & Francis, ISSN 1082-6076 (Print) 1520-572X (Online), London, England, 22(10), p. 1429-1441, 1999.

Compound	Experiments results for solvents = (CHCl3, i-PrOH, Me2O)									
	33.3, 33.3,	10, 10, 8	10, 80, 1	80, 10, 1	50, 0, 50	50, 50, 0	0, 50, 50	100, 0, 0	0, 0, 100	0, 100, 0
Mixture characteristic	pos, width	pos, width	pos, width	pos, width	pos, width	pos, width	pos, width	pos, width	pos, width	pos, width
medazepam	5.62, 0.39	4.92, 0.37	5.90, 0.39	3.38, 0.41	2.91, 0.43	6.07, 0.44	5.91, 0.51	0.56, 0.28	6.05, 0.44	8.23, 0.43
chlordiazep	5.95, 0.38	5.42, 0.37	5.35, 0.49	3.84, 0.37	4.52, 0.47	6.30, 0.42	6.47, 0.42	0.55, 0.30	7.14, 0.40	9.31, 0.23
nitrazepam	6.12, 0.25	5.99, 0.39	6.00, 0.28	4.67, 0.22	5.60, 0.40	6.79, 0.38	6.64, 0.32	1.42, 0.25	9.03, 0.27	9.50, 0.25
oxazepam	6.32, 0.30	5.56, 0.49	5.91, 0.32	5.49, 0.28	5.97, 0.42	6.87, 0.33	6.99, 0.36	2.52, 0.24	8.25, 0.28	9.28, 0.22
diazepam	6.46, 0.32	5.99, 0.32	6.15, 0.35	5.77, 0.28	6.35, 0.36	7.03, 0.29	7.06, 0.47	2.72, 0.21	8.77, 0.30	9.39, 0.24
eluent	6.88	6.88	6.99	6.97	7.72	7.39	7.64	10.0	10.0	10.0

Warning: all data selection produces a file of approximately 4 Mb!

Model Equation:

- $Y = a_1x_1 + a_2x_2 + a_3x_3 + a_4x_1x_2 + a_5x_1x_3 + a_6x_2x_3$
- $Y = a_1x_1 + a_2x_2 + a_3x_3 + a_4x_1x_2 + a_5x_1x_3 + a_6x_2x_3 + a_7x_1x_2x_3$

Dependent Variable: Graph:

- FO
- RS
- RF
- Red (best) - Green (worst)
- Green gradient only

Submit Query

În continuare este redată captura de ecran a aplicației pentru studiul dependenței liniare:

AcademicDirect Library Statistics linear_dependence - Microsoft Internet Explorer

Address: http://l.aca

© March 7, 2007 Lorentz JÄNTSCHI

This application looks for significant correlations between given data columns. Computes correlation coefficients (Pearson, Spearman, Kendall, Gamma), cumulative distribution ratios (F, t, Z) and associated probabilities of wrong model, p.

id	d	IP	d	IR	d	Cr	d	RSD	d	Volum
1	0.00	0.00	4.90	0.00	0.00					
2	0.00	0.00	5.81	0.00	0.00					
3	1.46	0.81	4.69	4.10	114.00					
4	1.69	0.82	4.31	4.58	126.00					
5	1.97	0.82	4.77	5.11	139.00					
27	0.72	0.46	6.60	1.85	150.00					
28	0.92	0.61	3.29	2.58	157.00					
29	1.00	0.65	1.75	2.80	164.00					
30	1.02	0.63	1.75	2.67	160.00					
31	1.14	0.68	1.40	2.74	201.00					
53	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00					
54	0.00	0.00	1.50	0.00	0.00					
55	1.00	0.69	1.89	2.77	187.00					
56	1.20	0.69	1.61	3.24	133.00					
57	1.27	0.70	1.75	3.33	160.00					
79	0.97	0.61	5.49	2.57	160.00					
80	0.97	0.60	2.81	2.47	137.00					
81	0.88	0.58	2.61	2.39	146.00					
82	0.82	0.57	2.27	2.31	156.00					

Submit Query

Procese la interfata fazelor: Modelare matematică, Optimizare numerică, Implementare web, cu aplicatii în separarea și caracterizarea seriilor de compusi chimici biologic activi

Aplicația afișează întreaga analiză de corelație așa cum rezultă din listingul de mai jos:

Significant Correlation and Probability defined in functions_split.php

Significant Correlation is set to: 0.707106781186548

Significant Probability is set to: 0.01

Descriptive

number of measurements: 20

number of variables: 5

Quantitative

Pearson's correlation matrix

r(XX)	d_IP	d_IR	d_Cr	d_RSD	d_Volum
d_IP	1	0.9529	0.0929	0.9968	0.7273
d_IR		1	0.0024	0.9578	0.8749
d_Cr			1	0.0928	-0.1078
d_RSD				1	0.7234
d_Volum					1

r BLUE: Hypothesis of linear dependence can be accepted. **r RED:** Hypothesis of linear dependence is rejected.

F-ratio matrix

F(XX)	d_IP	d_IR	d_Cr	d_RSD	d_Volum
d_IP	INF	177.5184	0.1568	2801.1466	20.2177
d_IR		INF	0.0001	199.8466	58.757
d_Cr			INF	0.1562	0.2116
d_RSD				INF	19.7629
d_Volum					INF

Probability of wrong model matrix

pF(XX)	d_IP	d_IR	d_Cr	d_RSD	d_Volum
d_IP	0	9.201e-11	0.6968	3.280e-21	2.792e-4
d_IR		0	0.992	3.461e-11	4.480e-7
d_Cr			0	0.6973	0.651
d_RSD				0	3.124e-4
d_Volum					0

p BLUE: Hypothesis of linear dependence can be accepted with 99% of success. **p RED:** Hypothesis of linear dependence is rejected for 95% confidence.

t-ratio matrix

t(XX)	d_IP	d_IR	d_Cr	d_RSD	d_Volum
d_IP	INF	13.3236	0.396	52.9259	4.4964
d_IR		INF	0.0102	14.1367	7.6653
d_Cr			INF	0.3952	-0.46
d_RSD				INF	4.4455
d_Volum					INF

Probability of wrong model matrix

pt(XX)	d_IP	d_IR	d_Cr	d_RSD	d_Volum
--------	------	------	------	-------	---------

d_IP	0	9.201e-11	0.6968	3.280e-21	2.792e-4
d_IR		0	0.992	3.461e-11	4.480e-7
d_Cr			0	0.6973	1.349
d_RSD				0	3.124e-4
d_Volum					0

p BLUE: Hypothesis of linear dependence can be accepted with 99% of success. **p RED:** Hypothesis of linear dependence is rejected for 95% confidence.

semi-Quantitative

semi-Quantitative correlation matrix

$\lambda(XX)$	d_IP	d_IR	d_Cr	d_RSD	d_Volum
d_IP	1	0.9689	0.0838	0.9897	0.489
d_IR		1	0.0118	0.9755	0.5583
d_Cr			1	0.0749	0.158
d_RSD				1	0.4959
d_Volum					1

r BLUE: Hypothesis of linear dependence can be accepted. **r RED:** Hypothesis of linear dependence is rejected.

F-ratio matrix

F(XX)	d_IP	d_IR	d_Cr	d_RSD	d_Volum
d_IP	INF	275.8985	0.1274	856.6789	5.6572
d_IR		INF	0.0025	354.0692	8.151
d_Cr			INF	0.1015	0.461
d_RSD				INF	5.8695
d_Volum					INF

Probability of wrong model matrix

pF(XX)	d_IP	d_IR	d_Cr	d_RSD	d_Volum
d_IP	0	2.313e-12	0.7253	1.239e-16	0.0287
d_IR		0	0.9606	2.753e-13	0.0105
d_Cr			0	0.7537	0.5058
d_RSD				0	0.0262
d_Volum					0

p BLUE: Hypothesis of linear dependence can be accepted with 99% of success. **p RED:** Hypothesis of linear dependence is rejected for 95% confidence.

t-ratio matrix

t(XX)	d_IP	d_IR	d_Cr	d_RSD	d_Volum
d_IP	INF	16.6102	0.357	29.2691	2.3785
d_IR		INF	0.0502	18.8167	2.855
d_Cr			INF	0.3186	0.679
d_RSD				INF	2.4227
d_Volum					INF

Probability of wrong model matrix

Procese la interfața fazelor: Modelare matematică, Optimizare numerică, Implementare web, cu aplicații în separarea și caracterizarea seriilor de compuși chimici biologic activi

pt(XX)	d_IP	d_IR	d_Cr	d_RSD	d_Volum
d_IP	0	2.313e-12	0.7253	1.239e-16	0.0287
d_IR		0	0.9606	2.753e-13	0.0105
d_Cr			0	0.7537	0.5058
d_RSD				0	0.0262
d_Volum					0

p BLUE: Hypothesis of linear dependence can be accepted with 99% of success. **p RED:** Hypothesis of linear dependence is rejected for 95% confidence.

Qualitative

Spearman's correlation matrix

$\rho(XX)$	d_IP	d_IR	d_Cr	d_RSD	d_Volum
d_IP	1	0.9852	-0.0756	0.9826	0.3288
d_IR		1	-0.0583	0.9936	0.3562
d_Cr			1	-0.0605	-0.2316
d_RSD				1	0.3399
d_Volum					1

r BLUE: Hypothesis of linear dependence can be accepted. **r RED:** Hypothesis of linear dependence is rejected.

F-ratio matrix

F(XX)	d_IP	d_IR	d_Cr	d_RSD	d_Volum
d_IP	INF	594.6134	0.1036	502.6784	2.1815
d_IR		INF	0.0613	1382.7126	2.6165
d_Cr			INF	0.0661	1.0206
d_RSD				INF	2.3514
d_Volum					INF

Probability of wrong model matrix

pF(XX)	d_IP	d_IR	d_Cr	d_RSD	d_Volum
d_IP	0	3.068e-15	0.7513	1.329e-14	0.157
d_IR		0	0.8072	1.783e-18	0.1231
d_Cr			0	0.8001	0.3258
d_RSD				0	0.1426
d_Volum					0

p BLUE: Hypothesis of linear dependence can be accepted with 99% of success. **p RED:** Hypothesis of linear dependence is rejected for 95% confidence.

t-ratio matrix

t(XX)	d_IP	d_IR	d_Cr	d_RSD	d_Volum
d_IP	INF	24.3847	-0.3218	22.4205	1.477
d_IR		INF	-0.2476	37.1848	1.6176
d_Cr			INF	-0.257	-1.0103
d_RSD				INF	1.5334
d_Volum					INF

Probability of wrong model matrix

pt(XX)	d_IP	d_IR	d_Cr	d_RSD	d_Volum
d_IP	0	3.068e-15	1.2487	1.329e-14	0.157
d_IR		0	1.1928	1.783e-18	0.1231
d_Cr			0	1.1999	1.6742
d_RSD				0	0.1426
d_Volum					0

p BLUE: Hypothesis of linear dependence can be accepted with 99% of success. **p RED:** Hypothesis of linear dependence is rejected for 95% confidence.

Kendall's correlation matrix

ta(XX)	d_IP	d_IR	d_Cr	d_RSD	d_Volum
d_IP	1	0.9	0.0474	0.8947	0.2368
d_IR		1	0.0105	0.9316	0.2632
d_Cr			1	0.0158	0.2053
d_RSD				1	0.2368
d_Volum					1

r BLUE: Hypothesis of linear dependence can be accepted. **r RED:** Hypothesis of linear dependence is rejected.

Z-ratio matrix

Z(XX)	d_IP	d_IR	d_Cr	d_RSD	d_Volum
d_IP	INF	5.548	-0.292	5.5155	1.46
d_IR		INF	-0.0649	5.7426	1.6222
d_Cr			INF	-0.0973	-1.2653
d_RSD				INF	1.46
d_Volum					INF

Probability of wrong model matrix

pZ(XX)	d_IP	d_IR	d_Cr	d_RSD	d_Volum
d_IP	0	2.890e-8	1.2297	3.477e-8	0.1443
d_IR		0	1.0517	9.321e-9	0.1048
d_Cr			0	1.0775	1.7942
d_RSD				0	0.1443
d_Volum					0

p BLUE: Hypothesis of linear dependence can be accepted with 99% of success. **p RED:** Hypothesis of linear dependence is rejected for 95% confidence.

Kendall's correlation matrix

tb(XX)	d_IP	d_IR	d_Cr	d_RSD	d_Volum
d_IP	1	0.9293	0.0481	0.9239	0.2446
d_IR		1	0.0107	0.962	0.2717
d_Cr			1	0.016	0.2086
d_RSD				1	0.2446
d_Volum					1

Procese la interfata fazelor: Modelare matematică, Optimizare numerică, Implementare web, cu aplicatii în separarea și caracterizarea seriilor de compusi chimici biologic activi

r BLUE: Hypothesis of linear dependence can be accepted. **r RED:** Hypothesis of linear dependence is rejected.

Z-ratio matrix

Z(XX)	d_IP	d_IR	d_Cr	d_RSD	d_Volum
d_IP	INF	5.5987	-0.2933	5.566	1.4733
d_IR		INF	-0.0652	5.7951	1.637
d_Cr			INF	-0.0978	-1.2711
d_RSD				INF	1.4733
d_Volum					INF

Probability of wrong model matrix

pZ(XX)	d_IP	d_IR	d_Cr	d_RSD	d_Volum
d_IP	0	2.160e-8	1.2307	2.607e-8	0.1407
d_IR		0	1.052	6.827e-9	0.1016
d_Cr			0	1.0779	1.7963
d_RSD				0	0.1407
d_Volum					0

p BLUE: Hypothesis of linear dependence can be accepted with 99% of success. **p RED:** Hypothesis of linear dependence is rejected for 95% confidence.

Kendall's correlation matrix

$\tau_c(XX)$	d_IP	d_IR	d_Cr	d_RSD	d_Volum
d_IP	1	0.855	0.045	0.85	0.225
d_IR		1	0.01	0.885	0.25
d_Cr			1	0.015	0.195
d_RSD				1	0.225
d_Volum					1

r BLUE: Hypothesis of linear dependence can be accepted. **r RED:** Hypothesis of linear dependence is rejected.

Z-ratio matrix

Z(XX)	d_IP	d_IR	d_Cr	d_RSD	d_Volum
d_IP	INF	5.3188	-0.2787	5.2877	1.3997
d_IR		INF	-0.0619	5.5054	1.5552
d_Cr			INF	-0.0929	-1.2076
d_RSD				INF	1.3997
d_Volum					INF

Probability of wrong model matrix

pZ(XX)	d_IP	d_IR	d_Cr	d_RSD	d_Volum
d_IP	0	1.045e-7	1.2195	1.239e-7	0.1616
d_IR		0	1.0494	3.684e-8	0.1199
d_Cr			0	1.074	1.7728
d_RSD				0	0.1616
d_Volum					0

p BLUE: Hypothesis of linear dependence can be accepted with 99% of success. **p RED:** Hypothesis of linear dependence is rejected for 95% confidence.

Gamma correlation matrix

$\Gamma(XX)$	d_IP	d_IR	d_Cr	d_RSD	d_Volum
d_IP	1	0.9553	0.0503	0.9341	0.2514
d_IR		1	0.0112	0.9779	0.2809
d_Cr			1	0.0166	0.2179
d_RSD				1	0.2486
d_Volum					1

r BLUE: Hypothesis of linear dependence can be accepted. **r RED:** Hypothesis of linear dependence is rejected.

Z-ratio matrix

Z(XX)	d_IP	d_IR	d_Cr	d_RSD	d_Volum
d_IP	INF	5.6257	0.0156	5.3783	0.3896
d_IR		INF	0.0008	5.895	0.4864
d_Cr			INF	0.0017	0.2926
d_RSD				INF	0.381
d_Volum					INF

Probability of wrong model matrix

pZ(XX)	d_IP	d_IR	d_Cr	d_RSD	d_Volum
d_IP	0	1.847e-8	0.9876	7.518e-8	0.6968
d_IR		0	0.9994	3.748e-9	0.6267
d_Cr			0	0.9986	0.7698
d_RSD				0	0.7032
d_Volum					0

p BLUE: Hypothesis of linear dependence can be accepted with 99% of success. **p RED:** Hypothesis of linear dependence is rejected for 95% confidence.

Global

All correlation and probability matrices matrix

all _{r,p} (XX)	d_IP	d_IR	d_Cr	d_RSD	d_Volum
d_IP	YES	YES	NO	YES	NO
d_IR		YES	NO	YES	NO
d_Cr			YES	NO	NO
d_RSD				YES	NO
d_Volum					YES

Procese la interfata fazelor: Modelare matematică, Optimizare numerică, Implementare web, cu aplicații în separarea și caracterizarea seriilor de compuși chimici biologic activi

Activități și rezultate. Etapa III(2008). Obiectivul 2(Dezvoltarea aplicațiilor).

Activitatea 4(Participari la manifestări științifice).

20. *Workshop on Energy Conservation and Sustainable Energy*, Technical Assistance and Information Exchange Instrument of the Institution Building unit of Directorate-General Enlargement of the European Commission, TAIEX event RTP 25832, 13-14.Feb.2008, Cluj-Napoca, Romania - DCC;
21. *HSI'08: Conference on Human System Interaction*, University of Information Technology and Management in Rzeszow, 25-27.Mai.2008, Krakow, Poland - MSIMV;

S-a participat cu lucrări științifice la 2 conferințe internaționale:

 <p>Workshop on Energy Conservation and Sustainable Energy 13-14 February 2008 Cluj-Napoca, Romania</p>	<p>Mugur BĂLAN, Lorentz JĂNTSCHI, On-Line Solar Radiation Monitoring System, in Cluj-Napoca, Romania, Workshop on Energy Conservation and Sustainable Energy, Technical Assistance and Information Exchange Instrument of the Institution Building unit of Directorate-General Enlargement of the European Commission, TAIEX event RTP 25832, February 13-14 2008, Cluj-Napoca, Romania, Invited Plenary Lecture, 2008.</p>
 <p>University of Information Technology and Management in Rzeszow 25-27 Mai 2008 Krakow, Poland</p>	<p>Lorentz JĂNTSCHI, Sorana D. BOLBOACĂ, Monica M. MARTA, Alexandru LASZLO, E-Learning and E-Evaluation: A Case Study - oral presentation, IEEE HSI'08: Conference on Human System Interaction, University of Information Technology and Management in Rzeszow, R1-S5: HUMAN SYSTEM INTERACTION IN EDUCATION, May 25-27 2008, Krakow, Poland, May 26 2008 11.00-11.15, 2008.</p> <p>Sorana D. BOLBOACĂ, Monica M. MARTA, Lorentz JĂNTSCHI, Computer-Assisted Instruction in Evidence-Based Medicine: A Pilot Study - oral presentation, HSI'08: Conference on Human System Interaction, University of Information Technology and Management in Rzeszow, R1-S5:</p>

Lorentz JÄNTSCHI (principal investigator) & Sorana D. BOLBOACÄ (co-investigator)

	HUMAN SYSTEM INTERACTION IN EDUCATION, May 25-27 2008, Krakow, Poland, May 25-27 2008, 11.20-11.35, 2008.
--	---

Procese la interfața fazelor: Modelare matematică, Optimizare numerică, Implementare web, cu aplicații în separarea și caracterizarea seriilor de compuși chimici biologici activi

Activități și rezultate. Etapa III(2008). Obiectivul 3(Demers didactic). Activitatea 5(Colectarea cunoașterii).

Următoarele două tabele sintetizează caracteristicile întrebărilor (din lucrarea *E-Learning and E-Evaluation: A Case Study*):

TABLE 1A: QUESTIONS CHARACTERISTICS.

<i>Param.</i>	<i>IA: No. (%)</i>	<i>KC: No. (%)</i>	<i>MC: No. (%)</i>	
<i>n_{c-answer}</i>	1	331 (50.61)	146 (62.93)	297 (34.41)
	2	155 (23.70)	45 (19.40)	201 (23.29)
	3	105 (16.06)	22 (9.48)	181 (20.97)
	4	63 (9.63)	19 (8.19)	184 (21.32)
<i>n_{std}</i>	23 (31.94)	11 (45.83)	30 (30.3)	

Param. = parameter; No. = absolute frequency, % = relative frequency;

IA = Instrumental Analysis ($n_{MCQ} = 654$);

KC = Kinetics Chemistry ($n_{MCQ} = 232$);

MC = Materials Chemistry ($n_{MCQ} = 863$);

$n_{c-answer}$ = number of correct answer;

n_{std} = number of students that created multiple-choice questions;

n_{MCQ} = number of multiple-choice question in bank question

TABLE 1B: QUESTIONS CHARACTERISTICS.

<i>Param.</i>	<i>PM: No. (%)</i>	<i>Tox: No (%)</i>	
<i>n_{c-answer}</i>	1	154 (35.08)	419 (54.63)
	2	101 (23.01)	147 (19.17)
	3	100 (22.78)	116 (15.12)
	4	84 (19.13)	85 (11.08)
<i>n_{std}</i>	19 (48.71)	28 (43.75)	

Param. = parameter; No. = absolute frequency; % = relative frequency;

PM = Pollutants Metrology ($n_{MCQ} = 439$); Tox = Toxicology ($n_{MCQ} = 767$);

$n_{c-answer}$ = number of correct answer;

n_{std} = number of students that created multiple-choice questions;

n_{MCQb} = number of question in bank question.

Următorul tabel sintetizează numărul de testări în raport cu numărul de studenți și cu disciplina de pregătire a acestora:

TABLE 2: E-TESTING USAGE VERSUS NUMBER OF STUDENTS.

<i>Topic</i>	<i>Academic year</i>				<i>Total</i>	
	<i>2005-2006</i>		<i>2006-2007</i>		<i>n_{e-test}</i>	<i>n_{std}</i>
	<i>n_{e-test}</i>	<i>n_{std}</i>	<i>n_{e-test}</i>	<i>n_{std}</i>		
IA	86	42	47	30	133	72
KC	n.a.	n.a.	35	24	35	24
MC	236	99	n.a.	n.a.	236	99
PM	n.a.	n.a.	69	39	69	39
Tox	80	37	55	27	135	64
Total	402	178	206	120	608	298

n_{e-test} = number of e-testing usage; n_{std} = number of students;

IA = Instrumental Analysis; KC = Kinetics Chemistry;

MC = Materials Chemistry; PM = Pollutants Metrology;

Tox = Toxicology; n.a. = not applicable

Următoarele tabele sintetizează rezultatele testării în raport numărul de testări în raport cu numărul de studenți și cu disciplina de pregătire a acestora:

TABLE 3A: PARAMETERS OF EVALUATIONS: INSTRUMENTAL ANALYSIS.

<i>Param</i>	<i>Correct answer</i>		<i>Time per correct answer (seconds)</i>		<i>Bonus</i>	
	2006	2007	2006	2007	2006	2007
Year	2006	2007	2006	2007	2006	2007
n _{valid}	61	32	61	32	12	8
μ	6.84	15.63	126.92	44.35	0.91	0.71
SD	3.65	7.12	79.27	61.97	0.94	0.6
Me	6	14.5	111.1	21.7	0.41	0.55
Min	1	2	19.7	4.8	0.2	0.14
Max	17	28	396.4	295	2.62	1.75

Year = year of evaluation; n_{valid} = sample size;
 μ = arithmetic mean; SD = standard deviation;
 Me = median

TABLE 3B: PARAMETERS OF EVALUATIONS: TOXICOLOGY.

<i>Param</i>	<i>Correct answer</i>		<i>Time per correct answer (seconds)</i>		<i>Bonus</i>	
	2006	2007	2006	2007	2006	2007
Year	2006	2007	2006	2007	2006	2007
n _{valid}	50	35	50	35	12	16
μ	15.94	11.83	40.66	61.84	0.69	1.12
SD	6.62	5.73	39.98	57.28	0.47	0.52
Me	16	13	32.65	46.7	0.53	1.14
Min	2	3	7.6	10.5	0.21	0.32
Max	29	24	273.5	290	1.68	1.91

Year = year of evaluation; n_{valid} = sample size; μ = arithmetic mean;
 SD = standard deviation; Me = median

TABLE 3C: PARAMETERS OF EVALUATIONS: KINETICS CHEMISTRY.

<i>Param</i>	<i>Correct answer</i>	<i>Time per correct answer (seconds)</i>	<i>Bonus</i>
Year	2007	2007	2007
n _{valid}	27	27	12
μ	9.37	86.63	0.34]
SD	3.49	48.72	0.36
Me	10	71.7	0.33
Min	4	16.8	-0.5
Max	15	224.2	0.89

Year = year of evaluation; n_{valid} = sample size;
 μ = arithmetic mean;
 SD = standard deviation; Me = median

TABLE 3D: PARAMETERS OF EVALUATIONS: POLLUTANT METROLOGY.

<i>Param</i>	<i>Correct answer</i>	<i>Time per correct answer (seconds)</i>	<i>Bonus</i>
Year	2007	2007	2007
n _{valid}	43	43	17
μ	10.28	88.97	1.53
SD	6.41	90.05	0.62
Me	8	60.8	1.83
Min	2	15.6	0.2
Max	24	478.5	2.15

Year = year of evaluation; n_{valid} = sample size;
 μ = arithmetic mean; SD = standard deviation; Me = median

Procese la interfata fazelor: Modelare matematică, Optimizare numerică, Implementare web, cu aplicatii în separarea și caracterizarea seriilor de compusi chimici biologic activi

TABLE 3E: PARAMETERS OF EVALUATIONS: MATERIALS CHEMISTRY.

<i>Param</i>	<i>Correct answer</i>	<i>Time per correct answer (seconds)</i>	<i>Bonus</i>
Year	2006	2006	2006
n _{valid}	149	149	24
μ	21.85	21.86	1.90
SD	7.45	25.58	1.07
Me	24	11.5	1.93
Min	1	3.3	-0.5
Max	30	142.9	4

Year = year of evaluation; n_{valid} = sample size;

μ = arithmetic mean; 95% CI = 95% confidence intervals for mean;

SD = standard deviation; Me = median

Activități și rezultate. Etapa III(2008). Obiectivul 3(Demers didactic). Activitatea 6(Optimizarea accesului la resurse).

Pe lângă aplicațiile online s-a creat accesul la resursele de educație corespunzătoare. Astfel întrebările și răspunsurile pentru disciplina Analiză Instrumentală se găsesc la adresa

<http://l.academicdirect.org/Education/Evaluation/Chemistry/Instrumental/questions.php?what=all>

În continuare este redată lista întrebărilor și răspunsurilor:

707 [1, ANTON Camelia-adriana]

Factorul de retenție reprezintă raportul subunitar dintre vitezele de deplasare prin coloană ale unui:

1 component

1 eluent

0 efluent

0 emitent

0 emisar

708 [2, ANTON Camelia-adriana]

Ce fel de mărime este coeficientul de distribuție K?

0 scalară

0 vectorială

1 identică celei din extracție

0 necorespunzătoare celei din extracție

0 variantele de mai sus nu corespund

767 [3, ANTON Camelia-adriana]

H poarta numele de:

1 înaltime echivalentă

0 înaltimea coloanei de apă

0 înaltime relativă

0 înaltime teoretică

0 înaltime reală

768 [4, ANTON Camelia-adriana]

Cu cât valoarea lui H este mai mare cu atât separarea este :

0 mai rea

1 mai bună;

0 medie

0 insuficientă

0 nici un răspuns de mai sus nu corespunde

769 [5, ANTON Camelia-adriana]

Care este simbolul rezoluției?

1 Rp;

0 Rs

0 Rd

0 Ra

0 Re

770 [6, ANTON Camelia-adriana]

Cum sunt picurile dacă valoarea lui n crește?

0 mai puține

1 mai înguste;

0 mai rare

0 mai dese

0 mai multe

771 [7, ANTON Camelia-adriana]

Ce este în general suma dintre cantitatea de probă, eficiență a coloanei și viteza de separare?

0 o variabilă

0 un număr

Procese la interfata fazelor: Modelare matematică, Optimizare numerică, Implementare web, cu aplicatii în separarea și caracterizarea seriilor de compuși chimici biologic activi

- 1 o constantă;
 - 0 o derivată
 - 0 o integrală
-

811 [8, ANTON Camelia-adriana]

Cum se comportă coloana și timpul dacă factorul de capacitate crește?

- 1 coloana reține mai puternic un component;
 - 0 coloana nu reține nici un component
 - 1 timpul de retenție crește
 - 0 timpul de retenție scade
 - 0 timpul de retenție ramane constant
-

812 [9, ANTON Camelia-adriana]

Cu cât este egal R_s pentru două picuri alăturate?

- 1 $R_s=1$;
 - 0 $R_s=4$
 - 1 $R_s=1,5$
 - 0 $R_s=2$
 - 0 $R_s=3$
-

813 [10, ANTON Camelia-adriana]

Pentru o coloană și un sistem supus separării date, încercând să mărim capacitatea de probă pierdem din rezoluție pentru că:

- 0 temperatura este prea mare
 - 1 depășim capacitatea de sorbție a coloanei;
 - 1 depășim capacitatea de adsorbție a coloanei;
 - 0 depășim capacitatea de absorbție a coloanei
 - 0 depășim capacitatea de desorbție a coloanei
-

814 [11, ANTON Camelia-adriana]

Ce va trebui să se "sacrifice" pentru a se putea separa cantități mari de probă?

- 1 rezoluția;
 - 0 lungimea
 - 1 viteza;
 - 0 lățimea
 - 0 înălțimea
-

815 [12, ANTON Camelia-adriana]

Ce trebuie să facem pentru a putea câștiga viteză?

- 1 renunțăm la rezoluție;
 - 0 scădem viteza
 - 0 creștem viteza
 - 1 renunțăm la cantitatea de probă;
 - 0 micșorăm lungimea
-

816 [13, ANTON Camelia-adriana]

Cum a fost numit K în cazul cromatografiei de adsorbție, cromatografiei de schimb ionic și în cazul cromatografiei de excluziune sterică?

- 1 coeficient de adsorbție;
 - 1 coeficient de distribuție ionică;
 - 1 coeficient de difuziune;
 - 0 coeficient de desorbție
 - 0 coeficient de absorbție
-

817 [14, ANTON Camelia-adriana]

Care sunt cei trei factori de care depinde rezoluția?

- 1 eficiența;
 - 0 ineficiența
 - 1 selectivitatea;
 - 1 capacitatea de separare a coloanei;
 - 0 rezistența
-

818 [15, ANTON Camelia-adriana]

Compromisul realizat în orice separare cromatografică se face între:

- 0 presiune
 - 1 viteză;
 - 1 eficiență;
 - 1 volumul probei;
 - 0 temperatură
-

832 [16, ANTON Camelia-adriana]

Care sunt constantele ecuației $H=A+B*v+C/v$ pentru cromatografia de gaze?

- 1 A;
 - 1 B;
 - 1 C;
 - 0 v
 - 0 H
-

833 [17, ANTON Camelia-adriana]

Termenul A este:

- 1 o constantă într-o coloană;
 - 0 viteză
 - 1 legat de difuzia turbulentă;
 - 1 legat de geometria umpluturii;
 - 0 lățimea
-

834 [18, ANTON Camelia-adriana]

Care dintre următoarele caracteristici îi aparțin termenului B?

- 0 nu este puternic legat de difuzia longitudinală
 - 1 este coeficientul de difuzie în gazul purtător;
 - 1 este legat puternic de difuzia longitudinală;
 - 1 este o constantă într-un montaj instrumental;
 - 0 este înălțimea
-

835 [19, ANTON Camelia-adriana]

Ce se înțelege prin natura coloanei?

- 1 compoziția fizico-chimică;
 - 1 lungimea;
 - 1 temperatura;
 - 1 viteza eluentului;
 - 0 înălțimea
-

836 [20, ANTON Camelia-adriana]

Care sunt parametrii separării a doua componente care se modifică pentru a asigura separarea completă a amestecului de interes practic?

- 1 K;
 - 0 A
 - 1 N;
 - 1 k;
 - 1 α ;
-

837 [21, ANTON Camelia-adriana]

Constantele A,B,C au în realitate fiecare niște dependențe funcționale ce țin de:

- 1 natura fizică a fazei staționare;
 - 1 natura fizică a fazei mobile;
 - 0 lungime
 - 1 condițiile de operare;
 - 1 diametrul și natura umpluturii;
-

906 [22, ANTON Camelia-adriana]

Prin ce se caracterizează termenul C?

- 1 este legat de transferul de masă;
- 1 legat de cinetica de fixare a componentului pe faza staționară;
- 1 legat direct de natura fazei staționare;

Procese la interfata fazelor: Modelare matematică, Optimizare numerică, Implementare web, cu aplicatii în separarea și caracterizarea seriilor de compusi chimici biologic activi

1 legat de specia moleculară care migrează prin coloană;

0 legat de viteză

907 [23, ANTON Camelia-adriana]

Se poate remarca ca valoarea lui H este cu atât mai mică cu cât raza:

1 scade;

0 este constantă

0 crește

0 este mai mare

0 tot timpul oscilează

908 [24, ANTON Camelia-adriana]

Cât este întotdeauna suma paralelelor la cele trei laturi?

0 3

1 1;

0 5

0 2

0 4

910 [25, ANTON Camelia-adriana]

Ce exprimă ecuația lui Van Deemter?

1 contribuția diverșilor factori la lărgirea zonei unui anumit component;

0 contribuția diverșilor factori ecologici

0 contribuția diverșilor factori fizici

0 contribuția diverșilor factori chimici

0 contribuția diverșilor factori la micirea zonei unui anumit component

748 [1, BALDEAN Roxana]

O importanta sarcina care-i revine analistului este de a alege o metoda:

1 analitica;

0 bazica

0 chimica

0 anorganica

0 organica

749 [2, BALDEAN Roxana]

Odata ce e definit obiectivul analizei, trebuie ca la alegerea metodei de analiza sa se precizeze o serie de factori:

1 domeniul de concentratie;

1 precizia;

1 sensibilitatea;

1 selectivitatea si rapiditatea;

0 presiunea

750 [3, BALDEAN Roxana]

Care sunt caracteristicile procedeelor de monitorizare:

1 exactitate

1 precizie

1 durata

1 cost

0 nici un raspuns corect

1042 [4, BALDEAN Roxana]

Buletinul de analiza est actul prin care este certificata:

1 Compozitia;

1 Calitatea oricariu material;

0 Cantitate probelor

0 Culoarea

0 Calculele

1087 [5, BALDEAN Roxana]

Limita de detectie Cd reprezinta continutul:

1 Minim;

0 Maxim

0 Mediu
0 Mediu
0 Ridicat

1088 [6, BALDEAN Roxana]

In ce se masoara rapiditatea?

1 Unitati de timp/analiza;
0 Unitati de masura/analiza
0 Procente
0 Amperi
0 Metri/s

1089 [7, BALDEAN Roxana]

Prima etapa in realizarea unui procedeu analitic o constituie:

0 Stabilirea procedului
1 Stabilirea obiectivului;
0 Concentratia
0 Metodele chimice
0 Toate raspunsurile sunt corecte

1090 [8, BALDEAN Roxana]

In conformitate cu clasificarea metodelor analitice in functie de cantitatea de determinare metodele chimice se presteaza la:

1 Determinarea macrocantitatilor;
0 Determinarea microcantitatilor
0 Determinarea cantitatilor
0 Determinarea submicrocantitatilor
0 Determinarea semimicrocantitatilor

1091 [9, BALDEAN Roxana]

Care din urmatoarele caracteristici sunt proprii procedeele d monitorizare?

1 Exactitatea;
1 Precizia;
1 Selectivitatea;
1 Sensibilitatea;
0 Eroarea

1092 [10, BALDEAN Roxana]

Procedeele de monitorizare sunt individualizate prin unele caracteristici proprii,cum ar fi:

1 limita de detectie;
0 Etalonarea
1 Durata;
1 Costul;
0 Toate raspunsurile sunt corect

1093 [11, BALDEAN Roxana]

Masurarea increderi acordata masuratori efectuate cu un mijloc de masurare este:

0 Precizia
1 Exactitatea;
0 Durata
0 Precizia inexacta
0 Eroarea

1094 [12, BALDEAN Roxana]

Analistul are obligatia de a efectua determinari bazate pe:

1 Procedee sigure;
1 Procedee reproductibile;
1 Procedee verificate;
0 Procedee neverificate
0 Procedee de monitorizar

1095 [13, BALDEAN Roxana]

O masuratoare simpla poate implica proprietati ca:

Procese la interfata fazelor: Modelare matematică, Optimizare numerică, Implementare web, cu aplicatii în separarea și caracterizarea seriilor de compuși chimici biologic activi

1 Masa;
1 Intensitatea de curent;
1 Tensiunea;
1 Volum;
0 Nici un raspuns nu este corect

1096 [14, BALDEAN Roxana]

La functiile liniare de forma $y=a+bx$ cea mai frecvent folosita marime, in calitate de sensibilitate a analizei este:

0 Coeficientul x
0 Coeficientul a
0 Coeficientul bx
1 Coeficientul b;
1 Coeficientul $S=b$;

1097 [15, BALDEAN Roxana]

Pentru analiza chimica instrumentala elementele de pe diagonala principala trebuie sa fie:

0 Medi
0 Nule
1 Maxime;
1 Egale cu 0;
1 Cat mai mici;

1098 [16, BALDEAN Roxana]

Metodele analitice se clasifica in functie de cantitatea de detrimant in:

1 Macro;
1 Semimacro;
1 Ultramicro;
1 Micro;
0 Mare

1099 [17, BALDEAN Roxana]

Exactitatea se masoara folosind un material (substanta):

1 Etalon;
0 Poros
0 Dur
0 Rigid
0 Riguros

1100 [18, BALDEAN Roxana]

In ce se exprima notiunea de precizie?

1 Procente;
0 Grade
0 Radian
0 Newton
0 Angstrom

1101 [19, BALDEAN Roxana]

Ce utilizeaza abatere standard a mediei de selectie?

1 Notiunea de precizie;
1 Reproductibilitatea;
0 Productibilitatea
0 Exactitatea
0 Metodele analitice

1102 [20, BALDEAN Roxana]

Rapiditatea se masoara in unitati de timp per analiza iar costul la pretul unei analize include:

1 Materialele;
1 Manopera;
1 Chiria laboratorului;
1 Monitorizarea aparatelor;
0 Utilizarea calculatoarelor

1103 [21, BALDEAN Roxana]

Ce include costul la pretul unei analize?

1 Energia;

1 Apa;

0 Gazul

1 Costurile reactivilor folositi;

0 Telefonie

1104 [22, BALDEAN Roxana]

Ce obligatie are executantul laboratorului la primirea unei probe?

1 Data;

1 Ora primiri probei;

1 Numele celui ce a efectuat analiza;

0 NIci o obligatie

0 Sa nu accepte proba facuta altundeva

1105 [23, BALDEAN Roxana]

Cand se primeste o proba intr-un laborator trebuie sa se noteze:

1 Rezultatul;

1 Data;

1 Ora eliberari buletinului de analiza;

0 Calculele

0 Toate raspunsurile sunt corecte

1106 [24, BALDEAN Roxana]

Ce contin caietele de laborator folosite la executia analizelor chimice?

1 Masuratori;

1 Cantariri;

0 Numele executantului

0 Grafice

0 Titrari

1107 [25, BALDEAN Roxana]

Probele sunt bine sa fie pastrat in:

1 Vase speciale;

1 Vase inchise;

0 Recipiente de plastic

0 In orice vas

0 In pahare Berzelius

710 [1, BALMOS Ramona]

Silicagelul este definit ca:

1 materialul cel mai important utilizat ca faza staționară;

0 bun

0 neutilizabil

0 folositor

0 nefolositor

711 [2, BALMOS Ramona]

Silicagelul s-a obținut la inceput in formă:

1 granulară;

0 negranulară

1 neregulată;

0 de stea

0 de sferă

712 [3, BALMOS Ramona]

Obținerea silicagelului sferic se face plecând de la soluții conținând:

1 silicat de sodiu;

0 argint

1 tetraclorură de siliciu;

1 silicat de etil;

1 compuși hidrolizabili;

Procese la interfața fazelor: Modelare matematică, Optimizare numerică, Implementare web, cu aplicații în separarea și caracterizarea seriilor de compuși chimici biologic activi

713 [4, BALMOS Ramona]

Puritatea silicagelului este o condiție a:

0 mediului

0 apei

1 bunei funcționări a materialului;

0 atmosferei

0 aerului

714 [5, BALMOS Ramona]

Silicagelul are o structură:

1 tridimensională cu o rețea de bază;

1 tridimensională;

1 formată din legături Si-O-Si;

0 patrată

1 formată din grupe silanol;

715 [6, BALMOS Ramona]

Ce sunt coloanele de monolit?

0 roci

0 metale

0 nemetale

0 nici un răspuns corect

1 un tip de fază staționară cu performanțe ridicate;

716 [7, BALMOS Ramona]

Care sunt cele trei grupe silanol superficiale?

1 I-legate;

1 II-reactive;

1 III-libere;

0 Iv

0 Iii

717 [8, BALMOS Ramona]

Care este tăria relativă dintre tipurile de grupe silanol superficiale?

1 $I <^{222} <^{22}$;

0 $^{22} <^{222} <^2$

0 $I <^{22} <^{222}$

0 $I >^{222} >^{22}$

0 $I >^{22} >^{222}$

718 [9, BALMOS Ramona]

În funcție de tehnologia de obținere a grupelor silanol superficiale diferă:

1 porozitatea internă;

1 suprafața specifică;

1 rezistența la compresiune;

0 poziția

1 polaritatea;

719 [10, BALMOS Ramona]

Care sunt urmările scăderii suprafeței specifice?

0 scade

1 crește diametrul porilor;

0 crește

1 pH-ul se situează în domeniul 5.4-8.4;

0 pH-ul scade

720 [11, BALMOS Ramona]

Care sunt absorbenții mai puțin utilizați?

1 alumina;

1 oxidul de zirconiu;

1 cărbunele macropors;

0 aurul
1 polimerii poroși;

721 [12, BALMOS Ramona]

Fazele staționale chimic legate au apărut în urma:

0 arderii
0 înghețului
1 încercărilor mai puțin eficiente de utilizare a unor faze staționare lichide depuse pe un suport poros lichid;
0 lichefierii
0 gazeificării

722 [13, BALMOS Ramona]

Stratul de hidrocarbură greșat de suport se comportă ca un strat:

1 foarte subțire de lichid nepolar;
1 uniform de lichid nepolar;
1 mult mai stabil;
0 solubil
0 insolubil

723 [14, BALMOS Ramona]

Cum se mai numește faza mobilă?

0 solvent
0 solvit
1 eluent;
0 diluant
0 colorant

724 [15, BALMOS Ramona]

Caracteristicile generale ale eluentului sunt:

1 trebuie să aibă o vâscozitate coborâtă;
1 trebuie să dizolve bine componentele;
0 este solubil
1 nu trebuie să afecteze funcțiile coloanei;
1 trebuie să permită funcționarea detectorului;

725 [16, BALMOS Ramona]

Ce se spune despre eluții care provoacă migrarea unui anumit compus mai repede prin coloană?

1 au o tărie relativ mai mare;
1 au o putere de eluție mai ridicată;
0 sunt solubili
0 sunt roci
0 sunt metale

726 [17, BALMOS Ramona]

Din ce sunt formate fazele mobile uzuale?

1 metanol;
0 aer
1 apă;
0 sol
0 atmosferă

727 [18, BALMOS Ramona]

Care sunt compușii fazelor mobile (monocomponente)?

0 aer
1 clorură de metilen;
1 metanol;
1 apă;
0 sol

728 [19, BALMOS Ramona]

Ce soluții de electroliți se folosesc în cromatografia ionică?

1 NaOH;
1 NaHCO₃;

Procese la interfata fazelor: Modelare matematică, Optimizare numerică, Implementare web, cu aplicatii în separarea și caracterizarea seriilor de compuși chimici biologic activi

0 NaCl
1 HCl;
0 Ho

729 [20, BALMOS Ramona]
Ce soluții de electroliți se folosesc in ecluziunea sferică?
1 solvenți simpli;
0 NaOH
1 solvenți compatibili cu polimerii;
0 apă
0 sare

730 [21, BALMOS Ramona]
Ce se întâmplă in HPLC?
1 solventul are o contribuție foarte importantă in procesul de separare;
0 are loc evaporarea
1 nu trebuie neglijată importanța decisivă a cuplului fază mobilă-fază staționară;
0 se descompun gazele
0 se amestecă gazele

731 [22, BALMOS Ramona]
Ce sunt detectorii in cromatografie?
1 instrumente analitice specializate;
1 situați la ieșirea elementului dintr-o coloană;
1 pot inregistra continuu substanțele separate de că tre acestea;
0 baze
0 acizi

732 [23, BALMOS Ramona]
Derivatizarea a fost utilizată in:
0 aer
1 metode spectrofotometrice;
1 metode fluorimetrice;
0 apă
1 analiza unor amestecuri de compuși numeroși;

733 [24, BALMOS Ramona]
Care din detectorii de mai jos sunt detectori LC?
1 fluorimetrici;
1 electrochimici;
1 difuzarea luminii;
0 fotografia
1 fotoionizarea;

734 [25, BALMOS Ramona]
Detectorii refractometrici:
0 sunt metale
0 au in alcătuire aur
1 au la bază legile refracției luminii;
0 sunt nemetale
0 sunt solubili

426 [1, BASALAGA Ovidiu]
Ce tip de spin prezinta electronii atomilor
1 spin electronic
0 spin magnetioc
0 spin de ecranare
0 spin electric
0 nici un raspuns nu este corespunzator

429 [2, BASALAGA Ovidiu]
Frecventa Larmor se foloseste in mod uzual in domeniul
1 radio

0 televiziunii
0 frecvente ultrascurte
0 telefonie mobila
0 nici un raspuns nu este corespunzator

431 [3, BASALAGA Ovidiu]
Separarea spectrului este posibila cu ajutorul
1 R.M.N bidimensionala
0 R.M.N dimensionala
0 R.M.N unidimensionala
0 R.M.N tridimensionala
0 nici un raspuns nu este corespunzator

433 [4, BASALAGA Ovidiu]
Daca doi spini se gasesc in inconjurari cu deplasari chimice diferite, ei sunt refocalizati si se obtine
1 o singura linie
1 o singura dreapta
0 doua linii
0 trei linii
0 nici un raspuns nu este corespunzator

436 [5, BASALAGA Ovidiu]
Rezonanta electronica de spin (R.E.S) se aplica moleculelor ce contin electroni impari de forma
1 [100]
1 [101]
0 [106]
0 [108]
0 nici un raspuns nu este corespunzator

595 [6, BASALAGA Ovidiu]
Momentul unghiular de spin $m\omega$ are o valoare cuantificata dupa formula
1 $m\omega = \sqrt{I(I+1)} \times h/2\pi$
0 $m\omega = \sqrt{I(I+1)} \times h/2\pi$
0 $m\omega = \sqrt{I/2(I+1)} \times h/2\pi$
0 $m\omega = \sqrt{I(I/2+1)} \times h/2\pi$
0 nici un raspuns nu corespunde

596 [7, BASALAGA Ovidiu]
Se da relatia $\delta B = -\sigma B$ unde σ reprezinta
1 constanta de ecranare moment unghiular
0 moment unghiular electronic
0 frecvenza Larmor
0 camp magnetic suplimentar
0 nici un raspuns nu corepunde

597 [8, BASALAGA Ovidiu]
In absenta campului $B(B=0)$ frecventa Larmor ν_L se anuleaza iar diferenta de energie $\Delta E_{\pm 1/2}$ are valoarea
1 Zero
0 Doi
0 Unu
0 trei
0 Nici un raspuns nu corespunde

598 [9, BASALAGA Ovidiu]
Expresia $\delta = \delta L$ are semnificatia urmatoare
1 Conditie de rezonanta
0 Conditie de magnetizare
0 Conditie de radiatie
0 Conditie de temperatura
0 Nici un raspuns nu e corect

599 [10, BASALAGA Ovidiu]
De obicei δ numita constanta de ecranare este

Procese la interfata fazelor: Modelare matematică, Optimizare numerică, Implementare web, cu aplicatii în separarea și caracterizarea seriilor de compuși chimici biologici activi

1 Pozitiv sau poate fi și negativ

0 Pozitiv

0 Negativ

0 Egal cu -1

0 nici un raspuns nu corespunde

601 [11, BASALAGA Ovidiu]

În prezenta câmpului Bloc frecvența Larmor corespunde este

1 $\nu_L = (1 - \sigma)\gamma B / 2\pi$

0 $\nu_L = (1 - \sigma)\delta\gamma B / 2\pi$

0 $\nu_L = (1 - \sigma)\gamma B / 4\pi$

0 $\nu_L = (1 - \sigma)2\gamma B^2 / \pi$

0 nici un raspuns nu corespunde

602 [12, BASALAGA Ovidiu]

Standardul de referință pentru protoni ^1H este rezonanța protonilor din tetrametilsilan $\text{Si}(\text{CH}_3)_4$

1 T.M.S

0 T.S.M

0 S.T.M

0 S.M.T

0 nici un raspuns nu este corespunzător

603 [13, BASALAGA Ovidiu]

Deplasările chimice sunt redată pe o scară relativă

1 adimensională

0 dimensională

0 scară Larmor

0 scară metrică

0 nici un raspuns nu este corespunzător

604 [14, BASALAGA Ovidiu]

Formal constanta de ecranare se poate considera ca suma a trei contribuții ($\sigma = \sigma_{\text{f}} + \sigma_{\text{m}} + \sigma_{\text{s}}$) unde σ_{f} are semnificația

1 contribuția grupelor de atomi ce înconjoară restul melcului

0 contribuția moleculei de solvent

0 contribuția electronului studiat

0 contribuția electronului solvat

0 nici un raspuns nu este corespunzător

605 [15, BASALAGA Ovidiu]

Scindarea rezonanțelor în linii individuale se numesc

1 structură fină

0 structură dură

0 structură cristalină

0 structură cuplaj

0 nici un raspuns nu este corespunzător

606 [16, BASALAGA Ovidiu]

Pentru un sistem AX_n unde nucleele au aceleași spin $I(A) = I(X) = 1/2$ scindarea este un dublet, deoarece grupul de nuclee echivalente $n \times X$ rezonază ca

1 un singur nucleu

0 doi nuclei

0 trei nuclee

0 patru nuclee

0 nici un raspuns nu corespunde

607 [17, BASALAGA Ovidiu]

Un grup de nuclee sunt echivalente chimic dacă

1 sunt legate printr-o operație de simetrie a moleculei

0 sunt legate prin două operații de simetrie a moleculei

0 sunt legate cu operația de simetrie a doi atomi diferiți

0 sunt legate cu operația de simetrie a trei atomi diferiți

0 nici un raspuns nu corespunde

608 [18, BASALAGA Ovidiu]

Nucleele sunt echivalente magnetic daca

1 sunt echivalente chimice

0 sunt echivalente magnetice

0 sunt echivalentetermica

0 sunt echivalente moleculare

0 nici un raspuns nu este corespunzator

609 [19, BASALAGA Ovidiu]

Pentru un spectru care este format din 4 linii situate la cuplaj spin spin egal, ea provine de la o scindare intr-un camp provenit de la

1 $n-1 = 3$

0 $n-2 = 2$

0 $n-3 = 1$

0 $n+2 = -2$

0 nici un raspuns nu corespunde

610 [20, BASALAGA Ovidiu]

Modelele moderne de detectare a seararilor energetice intre starile de spin nuclear folosesc o varianta modificata de spectrometrie

1 R.M.N

0 M.N.R

0 R.N.M

0 M.R.N

0 nici un raspuns nu este corespunzator

611 [21, BASALAGA Ovidiu]

Complexitatea spectrului se reduce daca se folosesc

1 doua axe pentru reprezentarea datelor

0 o axa pentru reprezentarea datelor

0 patru axe pentru reprezentarea datelor

0 trei axe pentru reprezentarea datelor

0 nici un raspuns nu este corespunzator

612 [22, BASALAGA Ovidiu]

Nivelul energetic al unui spin electronic in camp magnetic este egal cu

1 $E_e = q_e \times m_s \times \hbar B \times B$

0 $E_e = q_e \times (m_s \times \hbar B \times B)/2$

0 $E_e = q_e \times (m_s \times \hbar B \times B)^2$

0 $E_e = (q_e \times m_s \times \hbar B \times B)^3$

0 nici un raspuns nu este corespunzator

652 [23, BASALAGA Ovidiu]

Nivelul energetic al unui spin electronic in camp magnetic este egal cu

1 $E_e = q_e \times m_s \times \hbar B \times B$

0 $E_e = q_e \times m_s \times \hbar B \times B/2$

0 $E_e = (q_e)^3 \times m_s \times \hbar B \times B$

0 $E_e = q_e \times m_s \times \hbar B \times (B)^3$

0 nici un raspuns nu corespunde

653 [24, BASALAGA Ovidiu]

Daca o proba in camp magnetic este expusa unei radiatii electromagnetice, rezonanta va avea loc cand

1 $h \times \nu = \hbar E$

0 $h \times \nu/2 = \hbar E$

0 $h \times \nu = \hbar E/2$

0 $(h \times \nu)^2 = \hbar E$

0 nici un raspuns nu este corespunzator

654 [25, BASALAGA Ovidiu]

Pentru o rezonanta magnetica se efectueaza deseori o analiza preliminara a topologiei moleculare prin studii de corelatie

1 [101]

0 [103]

0 [102]

Procese la interfata fazelor: Modelare matematică, Optimizare numerică, Implementare web, cu aplicatii în separarea și caracterizarea seriilor de compuși chimici biologic activi

0 [104]

0 nici un raspuns nu este corespunzator

655 [26, BASALAGA Ovidiu]

Pentru o relatie cu frecventa $\nu=1010$ Hz, lungimea de unda, avand camp magnetic cu o intensitate de 0.3T este egala cu

1 $\lambda=3$ cm

0 $\lambda=2$ cm

0 $\lambda=4$ cm

0 $\lambda=6$ cm

0 nici un raspuns nu corespunde

277 [1, BOLDOR Gabriel]

1. Reactia la echilibru are diferit de potentialul intre electroni

0 a) $E=1$

0 b) $E=-1$

1 c) $E=0$

0 d) $E=\infty$

0 e) $E=2$

278 [2, BOLDOR Gabriel]

2. Dupa ce relatie se exprima solubilitatea S a unei sari greu solubile c

0 a) $ML(e) \rightarrow M^+(aq) + X^-(aq)$

1 b) $MS(s) \leftrightarrow M^+(aq) + X^-(aq)$, $K_s = a(M^+) a(X^-)$

0 c) $K_L = a(M) a(X^+)$

0 d) $MS(s) \leftrightarrow K_s(M^-) a(X^-)$

0 e) $K_L \leftrightarrow M^+$

279 [3, BOLDOR Gabriel]

3. In relatia $K_s = a(M) a(X^-)$, ce reprezinta K_s

0 a) potentialul de echilibru

0 b) constanta de echilibru

1 c) constanta de solubilitate

0 d) potential electromagnetic

0 e) constanta de eficacitate

280 [4, BOLDOR Gabriel]

4 Exprimarea activitatii relative a ionilor in solutii se face prin

1 a) raportarea activitatii fiecarui ion la activitatea sarii solide

0 b) raportarea activitatii fiecarui sari solide la un ion

0 c) raportand ,asa concentratului

0 d) prin suma ion-sare

0 e) raportarea solidului la lichid

281 [5, BOLDOR Gabriel]

5 Notarea potentialului de jonctiune se face prin

0 a) ...

1 b) :

0 c) f

0 d) \equiv

0 e) q

282 [6, BOLDOR Gabriel]

6 Cum poate fi creata o celula galvanica

0 a) prin inlocuirea H cu Ag Cl

0 b) prin imersarea Ag Cl intr-o solutie NaOH

1 c) prin imersarea unui electrod de hydrogen si a unui electrod de H si a unui electrod de Ag Cl intr-o solutie de HCl

0 d) prin imersarea unui electrod de H in solutie de NaOH

0 e) prin folosirea energiei solare

283 [7, BOLDOR Gabriel]

7 Intr-o pila de concentratie de electrolit compartimentele electrozilor sunt

1 a) identice dar contin electrolitul la diferite concentratii

0 b) sunt asemanatoare ,dar contin electrolit la aceeasi concenratie

- 0 c) difera in totalitate
- 0 d) difera dar continutul electrolitului e acelasi la diferite concentratii
- 0 e) difera daca temperatura camerei creste

284 [8, BOLDOR Gabriel]

8 Ce se intampla intr-un electrod de gaz

- 1 a) un gaz nu e in echilibru cu solutia ionilor sai in absenta unui metal inert
- 0 b) un gas e in echilibru cu solutia ionilor sai ,in prezenta unui metal inert
- 0 c) masa unui gaz e diferita de cea a ionilor sai
- 0 d) concentratia gazului e aceeasi cu a ionilor sai
- 0 e) concentratia ionilor e direct proportionala cu masa gazului

285 [9, BOLDOR Gabriel]

9. Metalul inert participa la o reactie prin

- 0 a) activitate electrica
- 0 b) activitate magnetica
- 0 c) actiune moleculara
- 1 d) actiune catalitica
- 0 e) ajuta la mestecarea solutiilor

286 [10, BOLDOR Gabriel]

10 Corelarea PH-ului cu potentialul electrochimic se face cu ajutorul

- 0 a) electrodul de N
- 1 b) electrodul de H
- 0 c) electronul de H
- 0 d) electronii de C
- 0 e) electronul de apa

287 [11, BOLDOR Gabriel]

11 Una din aplicatiile potentialului standard este

- 0 a) reactii redox
- 0 b) nucleerea
- 0 c) solubilitatea
- 1 d) electroliza
- 0 e) dehidrogenarea

288 [12, BOLDOR Gabriel]

12 Potentialul unei celule E se coreleaza cu energia Gibbs de reactie prin introducerea

- 1 a) Constantei lui Faraday F
- 0 b) numar de moli
- 0 c) masa moleculara
- 0 d) sarcina electrica
- 0 e) masei atomice

289 [13, BOLDOR Gabriel]

13. Amalgamele sunt

- 0 a) solutii in care solvatul este O
- 1 b) solutii in care solventul e Hg
- 0 c) substante solide
- 0 d) concentratii de H
- 0 e) gazele rare

290 [14, BOLDOR Gabriel]

14. Intr-o pila de concentratie de electrod ,electrozii au concentratii

- 0 a) identice
- 0 b) egale
- 0 c) asemanatoare
- 1 d) diferite
- 0 e) direct proportionale cu masa aliajului din care sunt construiti

291 [15, BOLDOR Gabriel]

15. Pentru relatia $i_c/i = \sqrt{v}/10^5 \cdot c$, cu cat este egal v

- 0 a) $v = \Delta t / \Delta V$

Procese la interfata fazelor: Modelare matematică, Optimizare numerică, Implementare web, cu aplicatii în separarea și caracterizarea seriilor de compuși chimici biologic activi

- 0 b) $v=i_C/i$
0 c) $v=kg/k$
1 d) $v=\dot{A}V/\dot{A}t$
0 e) $v=i/i_C$
-

292 [16, BOLDOR Gabriel]

16. Cum variaza dependenta concentratiei de reactant $[A]=a_n$ in timp(t_n)

- 0 a) Scade odata cu cresterea temperaturii t_n
0 b) e o parabola
0 c) e o elipsa
1 d) creste odata cu cresterea temperaturii t_n
0 e) e constanta
-

293 [17, BOLDOR Gabriel]

17. Ce reprezinta notatia Pt(H_2 (g)/ H (aq))

- 1 a) electrod de H in care se barboteaza H intr-o solutie de ioni de H
1 b) cuplu redox H^+/H_2
0 c) reactie anod-catod
0 d) reactie galvanica
0 e) reactia de neutralizare a apei
-

294 [18, BOLDOR Gabriel]

18) Care dintre elementele de mai jos formeaza un cuplu redox

- 1 a) Cu^{2+}/Cu
1 b) Zn^{2+}/Zn
0 c) Cu^{2+}/Zn
0 d) Na^+/H
0 e) Na^+/Zn
-

295 [19, BOLDOR Gabriel]

9. Cate semireactii are un process redox

- 0 a) 4
0 b) 3
1 c) 2
0 d) 1
0 e) 5
-

296 [20, BOLDOR Gabriel]

20. Unde au loc reactiile speciilor chimice

- 0 a) in mediu solid
1 b) in solutie
0 c) in mediu gazos
0 d) in mediu gelatinos
0 e) in interiorul metalelor
-

297 [21, BOLDOR Gabriel]

21. Cum se produce electricitate in pilele (celulele) galvanice

- 0 a) prin aplicarea unei surse exterioare de curent
1 b) datorita reactiilor chimice spontane ce au loc in interiorul celulei
0 c) prin legarea directa a electrozilor de C si Ni
0 d) nu se produce electricitate
0 e) prin barbotarea solidului
-

298 [22, BOLDOR Gabriel]

22. Ce rol are puntea de sare

- 0 a) legarea electrozilor
0 b) legarea pilor galvanice
1 c) legarea compartimentelor electrozilor
0 d) ajuta la procesul global
0 e) izoleaza celula galvanica
-

299 [23, BOLDOR Gabriel]

23. Cand este un gaz in echilibru cu solutia ionilor sai intr-un electrod de gaz

- 0 a) cand se barboteaza H in solutie
 - 0 b) cand potentialul catodului este mai mare ca si cel al anodului
 - 0 c) cand interferenta dintre cele doua faze e orizontala
 - 1 d) in prezenta unui metal inert
 - 0 e) la introducerea solutiei de momoxid de C
-

300 [24, BOLDOR Gabriel]

Cum variaza dependenta concentratiei de produs $[B]=b_n$ in timp (t_n)

- 0 creste odata cu scaderea temperaturii
 - 0 nu variaza , este constanta
 - 1 creste odata cu cresterea temperaturii
 - 0 scade odata cu cresterea temperaturii
 - 0 este o parabola
-

301 [25, BOLDOR Gabriel]

24. Cum participa metalul inert intr-un electrod de gaz

- 1 a) prin actiune catalitica
 - 0 b) inlocuieste anodul
 - 0 c) prin omogenizarea solutiei
 - 0 d) nu participa
 - 0 e) reorganizeaza structura solutiei
-

620 [1, BUKKOSI Lorand-eleme]

In toate separarile cromatografice proba este dizolvata intr-o faza mobila

- 1 gaz
 - 1 lichid
 - 0 solid
 - 0 plasma
 - 1 fluid super critic
-

621 [2, BUKKOSI Lorand-eleme]

Metoda a fost descoperita de..... rus Mihail Tsvet

- 1 botanistul
 - 0 chimistul
 - 0 biologul
 - 0 fizicianul
 - 0 inginerul
-

622 [3, BUKKOSI Lorand-eleme]

Aplicatiile cromatografiei sunt

- 1 rapide
 - 1 simple
 - 1 cu variabilitate mare la alegerea metodei de separare
 - 1 cu costuri relativ reduse
 - 0 la alegerea studentului
-

623 [4, BUKKOSI Lorand-eleme]

Cromatografia a devenit principalul instrument pentru separarea

- 1 speciilor asemanatoare
 - 0 speciilor diferite
 - 0 atomilor
 - 0 moleculelor
 - 0 compusilor chimici
-

624 [5, BUKKOSI Lorand-eleme]

Toate datele cantitative sunt dependente de

- 1 prepararea standardelor
 - 1 calibrarile succesive ale coloanei folosind standardele
 - 0 tipul solutiei
 - 0 timp
 - 0 temperatura
-

Procese la interfata fazelor: Modelare matematică, Optimizare numerică, Implementare web, cu aplicatii în separarea și caracterizarea seriilor de compuși chimici biologic activi

625 [6, BUKKOSI Lorand-eleme]

Categoriile de cromatografie sunt

1 de adsorbție

1 de partitie

0 cu schimb de electroni

1 cu schimb de ioni

1 de afinitate

626 [7, BUKKOSI Lorand-eleme]

Metodele de cromatografie sunt bazate pe interacțiunea

1 fizica

0 chimica

0 atomica

0 moleculara

0 ionica

627 [8, BUKKOSI Lorand-eleme]

Fazele mobile sunt

1 gaze

1 lichide

1 fluide supercritice

0 solide

0 metale

628 [9, BUKKOSI Lorand-eleme]

În cromatografia de partitie faza staționară este

1 un film subțire

0 un film gros

0 o peliculă

0 o umbră

0 un oxid

629 [10, BUKKOSI Lorand-eleme]

Cromatografia de excludere moleculară este mai comun denumită

1 de gel permeabil

1 de filtrare cu gel

0 de filtrare cu hartie

0 de nefiltrare

0 de afinitate

630 [11, BUKKOSI Lorand-eleme]

Cromatografia de afinitate este bazată pe interacțiunea între

1 un tip de moleculă de soluție și un al doilea tip

0 2 tipuri de molecule

0 2 tipuri de atomi

0 2 tipuri de ioni

0 2 tipuri de oxizi

631 [12, BUKKOSI Lorand-eleme]

Cea mai comună metodă a detecției absorbantei moleculare este

1 UV-VIS

0 VIS-UV

0 BIS-CV

0 CV-BIS

0 AV-VIS

632 [13, BUKKOSI Lorand-eleme]

Detectorul ideal este necesar să aibă

1 sensibilitate adecvată

1 bună stabilitate și productivitate

1 timp de răspuns scurt

1 durată lungă de viață

0 stabilitate pe domeniu îngust de temperatură

633 [14, BUKKOSI Lorand-eleme]

Adesea o componenta a instrumentului UV-VIS este

- 1 monocromatorul
 - 0 bicromatorul
 - 0 policromatorul
 - 0 cromatorul
 - 0 microscopul
-

634 [15, BUKKOSI Lorand-eleme]

Metode de prelucrarea informatiei cromatografice sunt

- 1 metoda standardului intern
 - 1 metoda normalizarii ariilor
 - 0 metoda standardului extern
 - 0 metoda normalizarii suprafetelor
 - 0 metoda normalizarii planelor
-

635 [16, BUKKOSI Lorand-eleme]

O cromatografa

- 1 ilustreaza raspunsul detectorului la un compus de analizat din proba la iesirea acestuia din coloana ca functie de timp sau de volum
 - 1 este utila pentru determinarile cantitative
 - 1 este utila pentru determinarile calitative
 - 1 formeaza o serie de picuri
 - 0 este utila pentru determinarile ochiometrice
-

636 [17, BUKKOSI Lorand-eleme]

Formele de banda cromatografica sunt

- 1 picul Gaussian
 - 1 picul deplasat dreapta
 - 1 picul deplasat stanga
 - 0 picul central
 - 0 picul Tsvet
-

637 [18, BUKKOSI Lorand-eleme]

Largimea benzii poate fi explicata din punct de vedere

- 1 cantitativ
 - 0 calitativ
 - 0 ochiometric
 - 0 cromatografic
 - 0 chimic
-

638 [19, BUKKOSI Lorand-eleme]

Viteza de migrare este caracterizata de

- 1 timpul de retentie
 - 1 coeficientul de partitie
 - 1 factorul de capacitate
 - 1 factorul de separare
 - 0 factorul de amestecare
-

639 [20, BUKKOSI Lorand-eleme]

Viteza componentului din faza stationara este

- 1 $v=L/tR$
 - 0 $v=L/tM$
 - 0 $v=L/tT$
 - 0 $v=L/tF$
 - 0 $v=L/tV$
-

640 [21, BUKKOSI Lorand-eleme]

Factorul de capacitate k este o functie de pamametrii de solubilitate in cazul cromatografiei de separatie

- 1 lichid-lichid
- 0 lichid-gaz
- 0 solid-lichid

Procese la interfata fazelor: Modelare matematică, Optimizare numerică, Implementare web, cu aplicatii în separarea și caracterizarea seriilor de compuși chimici biologic activi

0 solid-gaz
0 solid-solid

641 [22, BUKKOSI Lorand-eleme]

Una dintre cele mai importante caracteristici ale unui sistem cromatografic eficienta sau

1 numarul de talere teoretice

0 numarul de moli

0 numarul de atomi

0 numarul de ioni

0 numarul de picuri

642 [23, BUKKOSI Lorand-eleme]

Pentru caracterizarea separabilitatii a 2 componente s-a introdus notiunea de rezolutie,notata cu

1 R_s

0 R_p

0 R_t

0 R_l

0 R_i

643 [24, BUKKOSI Lorand-eleme]

Factorul de capacitate este notat cu

1 k

0 K

0 C

0 c

0 nu are notatie

644 [25, BUKKOSI Lorand-eleme]

Coeficientul de partitie este notat cu

1 K

0 L

0 N

0 P

0 R

746 [1, BUNGARDEAN Camelia]

Care sunt operatiunile comune ale procedeelor de analiza cantitativa?

1 luarea probelor

1 uscarea

1 cantarirea

1 dizolvarea

0 filtrarea

747 [2, BUNGARDEAN Camelia]

Metodele de baza pentru colectarea probelor gazoase sunt:

1 expansiune;

1 absorbtie;

0 adsorbție

1 inlocuire cu un lichid;

0 extragere

1043 [3, BUNGARDEAN Camelia]

Etapa cu care se incepe analiza chimica din laboratorul de analiza instrumentala este:

1 cantarirea;

0 documentare

0 elaborare substante chimice

0 elaborare referat privind analiza

0 inventarul substantelor chimice

1065 [4, BUNGARDEAN Camelia]

Exactitatea tuturor analizelor din laborator depinde in principal de:

1 calitatea balantei analitice;

1 modul de intretinere a balantei analitice;

0 substantele folosite
0 indicatori de pH
0 aciditatea substantelor

1066 [5, BUNGARDEAN Camelia]

Exactitatea tuturor analizelor efectuate intr-un laborator de analiza instrumentala depinde de:

1 calitatea si modul de intretinere a balantei analitice;
0 exactitatea cu care lucreaza cel ce efectueaza analiza
0 exactitatea numerica
0 efectuarea corecta a calculelor
0 rapiditatea de executare a analizei

1067 [6, BUNGARDEAN Camelia]

Principalul instrument de cantarire intr-un laborator de analiza instrumentala este:

1 balanta analitica;
0 cantarul electronic
0 eprubeta
0 pipeta
0 cantarul analitic

1068 [7, BUNGARDEAN Camelia]

Intr-un laborator de analiza instrumentala, exactitatea analizelor efectuate depinde in principal de calitatea si modul de intretinere a:

1 principalului instrument de cantarire;
1 balantei analitica;
0 eprubetelor
0 pipetelor
0 instalatiilor

1069 [8, BUNGARDEAN Camelia]

Care din urmatoarele operatiuni de laborator comune in cadrul procedeeleor de analiza cantitativa, nu e intotdeauna necesara:

1 dizolvarea;
0 luarea probelor
0 uscarea
0 umectarea
0 cantarirea

1070 [9, BUNGARDEAN Camelia]

Pentru colectarea probelor gazoase folosind oricare dintre cele 3 metode de baza, trebuie sa se cunoasca:

1 volumele vaselor de colectare;
1 temperatura;
1 presiunea;
0 pH-ul
0 aciditatea

1071 [10, BUNGARDEAN Camelia]

Aldehida formica in contact cu reactivul 2-hidroxiimetilpiperidina conduce la:

1 oxazolidine;
1 combinatii stabile care pot fi ulterior desorbite si analizate;
0 formaldehida
0 metilen
0 metan

1072 [11, BUNGARDEAN Camelia]

Luarea probelor din atmosfera este o problema dificila datorita unor factori cum sunt:

1 vantul;
1 temperatura;
1 ploaia;
0 miscarea pamantului
0 radiatiile

Procese la interfata fazelor: Modelare matematică, Optimizare numerică, Implementare web, cu aplicatii în separarea și caracterizarea seriilor de compusi chimici biologic activi

1073 [12, BUNGARDEAN Camelia]

Procedeul utilizat pt luarea probelor din lichide se selectioneaza in functie de amestecul supus analizei, adica daca este:

- 1 o suspensie;
 - 1 o emulsie;
 - 1 o mixtura;
 - 1 un lichid continand reziduuri solide;
 - 0 solid
-

1074 [13, BUNGARDEAN Camelia]

Cele mai cunoscute amestecuri de lichide nemiscibile sunt:

- 1 ulei+apa;
 - 1 benzine+apa;
 - 0 apa+acid
 - 0 acid+baza
 - 0 baza+acid
-

1075 [14, BUNGARDEAN Camelia]

In cazul amestecurilor formate de deversarile de produse petroliere accidentale avem cateva metode uzuale in analiza instrumentala a lichidelor, cum ar fii:

- 1 separarea fazelor;
 - 1 masurarea raportului de amestecare;
 - 1 analiza cantitativa a fractiilor separate;
 - 0 expansiune
 - 0 absorbtie
-

1076 [15, BUNGARDEAN Camelia]

Una dintre cele mai moderne metode de prelevare a probelor lichide este:

- 1 extractia lichid-lichid;
 - 1 extractia lichid-solid;
 - 0 extractia emulsie-lichid
 - 0 extractia emulsie-solid
 - 0 extractia lichid-emulsie
-

1077 [16, BUNGARDEAN Camelia]

Extractia lichid-lichid de prelevare a probelor lichide se realizeaza prin:

- 1 coloane cu suport solid;
 - 0 randuri cu suport solid
 - 0 utilizarea balantei analitice
 - 0 utilizarea cantarului electronic
 - 0 dizolvare
-

1078 [17, BUNGARDEAN Camelia]

Principiul retentiei selective a analitului pe coloane prin extractie parcurge urmatoarele etape:

- 1 conditionare;
 - 1 introducerea probei;
 - 1 spalare impuritati;
 - 1 spalare analit;
 - 0 introducere de catalizator
-

1079 [18, BUNGARDEAN Camelia]

La prelevarea probelor dintr-o substanta solida, un parametru important este:

- 1 marimea particulei probei;
 - 0 temperatura
 - 0 vantul
 - 0 presiunea
 - 0 radiatia
-

1080 [19, BUNGARDEAN Camelia]

La transformarea unei probe mari intr-o marime convenabila pentru analiza se efectueaza mai intai:

- 1 reducerea probei la o marime de particule uniforma;
- 1 reducerea masei probei;
- 0 reducerea umiditatii probei

0 reducerea temperaturii
0 reducerea presiunii

1081 [20, BUNGARDEAN Camelia]
Reducerea prin metoda cuartarii are urmatoarele etape:
1 macinarea probei la o granulatie prevazuta;
1 amestecarea materialului obtinut in gramada;
1 turtirea cu ajutorul unei lopeti;
1 impartirea in 4 sferturi egale a amestecului;
0 selectarea anumitor particule din amestec pt analiza

1082 [21, BUNGARDEAN Camelia]
Care din urmatoarele dispozitive de taiere este folosit pentru reducerea probei:
1 zdrobitor;
1 taietor transversal;
1 taietor paralel;
0 foarfeca
0 lama

1083 [22, BUNGARDEAN Camelia]
Operatia de uscare a probei se realizeaza in mod uzual prin:
1 incalzire intr-o etuva;
1 intr-un cuptor cu mufla;
1 ardere la becuri Bunsen;
1 ardere la becuri Meeker;
0 suflare

1084 [23, BUNGARDEAN Camelia]
O marime de particule uniforma se obtine trecand proba prin care dintre urmatoarele instalatii:
1 concasoare;
1 mori;
1 pulverizatoare;
1 mojar;
0 furnal

1085 [24, BUNGARDEAN Camelia]
Care din urmatoarele constituiesc etape in retentia selectiva a analitului pe coloane prin extractie:
1 spalare analit;
1 spalare impuritati;
1 conditionare;
0 evacuare
0 eliminare

1086 [25, BUNGARDEAN Camelia]
In cazul solidelor granulare probele se extrag din mai multe puncte cu ajutorul:
1 sondelor;
0 tarnacoapelor
0 masinilor
0 fortei umane
0 nu se poate realiza extragerea

456 [1, CHIOREAN Larisa]
1.Scopul operatiei de precipitare este de
1 de purificare
1 de separare
0 de amestecare
0 de neutralizare
1 de filtrare si separare in grupe de ioni metalici

457 [2, CHIOREAN Larisa]
2. Masuratorile pentru determinarea masei, in cazul gravimetriei, se face cu
0 pipeta
0 balanta farmaceutica

Procese la interfata fazelor: Modelare matematică, Optimizare numerică, Implementare web, cu aplicatii în separarea și caracterizarea seriilor de compuși chimici biologic activi

- 1 balanta analitica
 - 0 micrometru
 - 0 talerul
-

458 [3, CHIOREAN Larisa]

3. Separarea prin precipitare se bazeaza pe
- 0 analiza cantitativa bazata pe masurarea masei unui precipitat
 - 1 diferentele intre stabilitatile precipitatelor, in anumite conditii experimentale
 - 0 diferentele intre stabilitatile precipitatelor, indiferent de conditiile experimentale
 - 0 asemanarile intre stabilitatile precipitatelor, in anumite conditii experimentale
 - 0 reactii electrochimice intr-o celula de electroliza
-

459 [4, CHIOREAN Larisa]

4. O analiza gravimetrica se realize printr-o serie de etape experimentale. Care sunt acestea
- 1 cantarirea probei ce trebuie analizata
 - 1 dizolvarea probei cantarite
 - 1 inlaturarea speciilor ce pot interfera in metoda aleasa
 - 1 se ajusteaza conditiile experimentale: pH, stare de oxidare, concentratie
 - 0 se adauga agentul de dizolvare adecvat
-

469 [5, CHIOREAN Larisa]

5. Procedeele electrogravimetrice se bazeaza pe
- 0 a) o reactie de neutralizare
 - 0 b) o reactie de precipitare
 - 1 c) o reactie electrochimica
 - 0 d) o reactie de dizolvare
 - 0 e) o reactie de separare
-

470 [6, CHIOREAN Larisa]

6. In procesul de degajare de gaze se inregistreaza
- 0 a) pierderi de masa a probei prin separarea componentilor
 - 1 b) pierderi de masa a probei prin volatizarea unei parti din proba
 - 0 c) pierderi de gaze in urma incalzirii probei
 - 0 d) cresterea masei probei in urma incalzirii ei
 - 0 e) nici unul dintre raspunsuri nu este corect
-

471 [7, CHIOREAN Larisa]

7. Presupunand ca un acid este tratat cu o baza, reactia de neutralizare steochiometrica implica trecerea
- 0 a) de la o solutie bazica la una acida
 - 1 b) de la o solutie acida la una bazica
 - 0 c) nu are importanta ordinea trecerii
 - 0 d) depinde de cantitatea de acid si baza
 - 0 e) nici unul dintre raspunsuri nu este corect
-

472 [8, CHIOREAN Larisa]

8. In mod obisnuit ca titrant se utilizeaza
- 0 a) acid slab tipic
 - 1 b) acid tare
 - 1 c) baza tare
 - 0 d) baza slaba tipica
 - 0 e) clorura de amoniu
-

473 [9, CHIOREAN Larisa]

9. Curba de titrare este o reprezentare grafica a
- 0 a) a titrantului in functie de cantitatea de acid
 - 0 b) a pH-lui in functie de cantitatea de acid
 - 0 c) a titrantului in functie de pH
 - 1 d) a pH-lui in functie de titrant
 - 0 e) nici unul dintre raspunsuri nu este corect
-

474 [10, CHIOREAN Larisa]

10. Cu ajutorul curbei de titrare este posibil sa se determine
- 0 a) volumul de acid necesar pentru neutralizarea probei

- 0 b) volumul de baza necesar pentru neutralizarea probei
 - 1 c) volumul de titrant necesar pentru neutralizarea probei
 - 0 d) cantitatea de clorura de amoniu necesara dizolvării probei
 - 0 e) toate raspunsurile sunt corecte
-

475 [11, CHIOREAN Larisa]

11. Se da ecuatie generala: $HA + BOH = AB + H_2O$. Care sunt echilibrele chimice implicate in procesul de titrare

- 1 a) $HOH \rightleftharpoons HO^- + H^+$
 - 1 b) $HA \rightleftharpoons H^+ + A^-$
 - 1 c) $BOH \rightleftharpoons B^+ + HO^-$
 - 1 d) $AB \rightleftharpoons A^- + B^+$
 - 0 e) $AOH \rightleftharpoons A^- + OH^+$
-

476 [12, CHIOREAN Larisa]

12. Daca o reactie redox este folosita pentru titrare, atunci ea trebuie sa fie

- 1 a) rapida
 - 0 b) lenta
 - 1 c) totala
 - 1 d) stoechiometrica
 - 1 e) sa existe un mijloc pentru detectarea punctului de echivalenta
-

477 [13, CHIOREAN Larisa]

13. In titrarea redox speciile de interes

- 0 a) nu isi schimba starea de oxidare
 - 1 b) isi schimba starea de oxidare
 - 1 c) potentialul electrochimic din solutie isi schimba si el valoarea
 - 0 d) potentialul nu isi schimba valoarea
 - 0 e) raman neschimbate
-

478 [14, CHIOREAN Larisa]

14. Daca o reactie redox este folosita pentru titrare, atunci ea trebuie sa indeplineasca aceleasi conditii generale ca si in cazul

- 0 a) titrarilor acide
 - 0 b) titrarilor bazice
 - 1 c) titrarilor de neutralizare
 - 0 d) nu se aseamana cu nici o alta titrare
 - 0 e) nici unul dintre raspunsuri nu este correct
-

584 [15, CHIOREAN Larisa]

Pentru indicarea punctului de salt al pH-lui ,care corespunde echilibrului stoechiometric, se folosesc de obicei

- 0 substante de neutralizare
 - 0 acizi
 - 0 baze
 - 1 indicatori de culoare
 - 0 nu se utilizeaza nici o substanta
-

585 [16, CHIOREAN Larisa]

Indicatorii de culoare au proprietatea ca

- 0 intr-un domeniu larg de pH isi schimba culoarea
 - 1 intr-un domeniu de pH ingust isi schimba culoarea
 - 0 indiferent de domeniu isi schimba culoarea
 - 0 maresc valoarea pH-lui
 - 0 micsoreaza valoarea pH-lui
-

586 [17, CHIOREAN Larisa]

Procedeele electrogravimetrice se bazeaza pe o reactie electrochimica intr-o celula de electroliza prin reglarea

- 0 solutiei probei
 - 1 curentului
 - 1 potentialului
 - 0 rezistivitatii
 - 0 susceptibilitatii
-

Procese la interfata fazelor: Modelare matematică, Optimizare numerică, Implementare web, cu aplicatii în separarea și caracterizarea seriilor de compuși chimici biologic activi

587 [18, CHIOREAN Larisa]

Solubilitatea PbCl₂ crește datorită

- 1 creșterii temperaturii
 - 0 micșorării temperaturii
 - 0 creșterii presiunii
 - 0 creșterii umidității
 - 0 micșorării presiunii
-

588 [19, CHIOREAN Larisa]

Formula concentrației sării la exces baza este

- 0 $C_x = (C_a \cdot V_a - C_b \cdot V_x) / (V_x + V_a)$
 - 0 $C_s = C_b \cdot V_x / (V_a + V_x)$
 - 0 $C_x = (C_b \cdot V_x - C_a \cdot V_a) / (V_a + V_x)$
 - 1 $C_s = C_a \cdot V_a / (V_a + V_x)$
 - 0 $V_x = V_a \cdot C_a / C_b$
-

589 [20, CHIOREAN Larisa]

Volumul adăugat la echilibru are ecuația

- 1 $V_x = V_a \cdot C_a / C_b$
 - 0 $C_x = (C_a \cdot V_a - C_b \cdot V_x) / (V_x + V_a)$
 - 0 $C_s = C_b \cdot V_x / (V_a + V_x)$
 - 0 $C_x = (C_b \cdot V_x - C_a \cdot V_a) / (V_a + V_x)$
 - 0 $C_s = C_a \cdot V_a / (V_a + V_x)$
-

590 [21, CHIOREAN Larisa]

Concentrația baza la exces baza are formula

- 0 $V_x = V_a \cdot C_a / C_b$
 - 0 $C_x = (C_a \cdot V_a - C_b \cdot V_x) / (V_x + V_a)$
 - 0 $C_s = C_b \cdot V_x / (V_a + V_x)$
 - 1 $C_x = (C_b \cdot V_x - C_a \cdot V_a) / (V_a + V_x)$
 - 0 $C_s = C_a \cdot V_a / (V_a + V_x)$
-

591 [22, CHIOREAN Larisa]

Concentrația acid la exces acid are formula

- 0 $V_x = V_a \cdot C_a / C_b$
 - 1 $C_x = (C_a \cdot V_a - C_b \cdot V_x) / (V_x + V_a)$
 - 0 $C_s = C_b \cdot V_x / (V_a + V_x)$
 - 0 $C_x = (C_b \cdot V_x - C_a \cdot V_a) / (V_a + V_x)$
 - 0 $C_s = C_a \cdot V_a / (V_a + V_x)$
-

592 [23, CHIOREAN Larisa]

Concentrația sării la exces acid are formula

- 0 $V_x = V_a \cdot C_a / C_b$
 - 0 $C_x = (C_a \cdot V_a - C_b \cdot V_x) / (V_x + V_a)$
 - 1 $C_s = C_b \cdot V_x / (V_a + V_x)$
 - 0 $C_x = (C_b \cdot V_x - C_a \cdot V_a) / (V_a + V_x)$
 - 0 $C_s = C_a \cdot V_a / (V_a + V_x)$
-

593 [24, CHIOREAN Larisa]

Indicatorii de culoare bazati pe pH sunt

- 1 fenolftaleina
 - 1 rosu de metal
 - 1 metilorange
 - 0 verde de alizarina
 - 1 galben de alizarina
-

594 [25, CHIOREAN Larisa]

Fenolftaleina este

- 0 neutralizator
- 1 indicator de culoare bazat pe pH
- 0 solvent basic
- 0 solvent acid
- 0 nici un raspuns nu e corect

461 [1, CHIRILA Sever]

Materialele ceramice sunt

0 materiale metalice

0 compozite

1 nemetalice

1 anorganice

0 organice

462 [2, CHIRILA Sever]

2. Materialele ceramice au structura

0 cristalina

0 amorfa

1 majoritar cristalina

0 majoritar amorfa

0 sunt cristale amorfe

463 [3, CHIRILA Sever]

Care din urmatuarele obiecte fac parte din grupa materialelor ceramice tehnice

0 rezervoare, faiante, conducte

1 rulmenti cu bile, agitatoare chimice, filiere de trefilat

0 caramiz, tigl, tuburi

1 inele de etansare, galeri de evacuare a gazelor fierbinti, pistoane

0 agitatoare chimice, caramizi, inele de etanseizare

464 [4, CHIRILA Sever]

4. Proprietatile fizico-chimice ale materialelor ceramice tehnice sunt materiallor metalice

0 inferioare

1 superioare

0 aproximativ egale

0 mult inferioare materialelor metalice

0 identic egale

465 [5, CHIRILA Sever]

Densitatea materialelor ceramice este

0 de 1.3 ori mai mica decat a materialelor metalice

1 1/3 din densitatea materialelor metalice

0 cu 1.3% mai mica decat a materialelor metalice

0 egala cu cea a materilelor metalice

0 mai mare decat a materialelo metalice

466 [6, CHIRILA Sever]

Rezistenta la uzura a materialelor ceramice este

0 cu 20-30 % mai mare decat a materialor metalice

0 cu doua treimimai mare deca a materialelor metalice

0 2-3 ori mai mica decat a materialelor metelice

0 mult mai mica decat a materialelor metalice

1 de 2-3 ori mai mare decat a materialelor metalice

467 [7, CHIRILA Sever]

Proprietatile materialelor ceramice depind de

1 compozitia chimica

1 procedeul de realizare a diferitelor produse

1 tehnologia de obtinere a produselor respective

0 nu depinde de nici una dintre variantele de mai sus

0 de nici unul din din cele enumerate

468 [8, CHIRILA Sever]

Compusul chimic de forma MnOm corespunde grupei

0 oxizilor complecsi

0 ceramicilor neoxidice

1 ceramicilor silicatice

Procese la interfata fazelor: Modelare matematică, Optimizare numerică, Implementare web, cu aplicatii în separarea și caracterizarea seriilor de compuși chimici biologic activi

- ceramicilor organice
 - ceramicilor oxidice
-

1404 [1, CIMPAN Oana]

Potentialul de jonctiune se noteaza cu:

- 1 :
 - a
 - f
 - e
 - q
-

1405 [2, CIMPAN Oana]

O aplicatie a potentialului standard poate fi:

- 1 electroliza;
 - solubilitatea
 - oxigenarea
 - hidroliza
 - nici un raspuns corect
-

1406 [3, CIMPAN Oana]

Reactiile speciilor chimice au loc in:

- sol
 - apa
 - metale
 - 1 solutie;
 - nici un raspuns corect
-

1407 [4, CIMPAN Oana]

Metoda cea mai comuna a detectiei absorbantei moleculare este:

- 1 Uv-vis;
 - Av-vis
 - Vis-uv
 - Ov-vis
 - nici un raspuns corect
-

1408 [5, CIMPAN Oana]

Una dintre componentele instrumentului UV-VIS este:

- 1 monocromatorul;
 - lamela
 - separatorul
 - manivela
 - nici un raspuns corect
-

1409 [6, CIMPAN Oana]

Structura materialelor ceramice este:

- 1 majoritar cristalina;
 - amorfa
 - nisipoasa
 - apoasa
 - nici un raspuns corect
-

1410 [7, CIMPAN Oana]

In aer se afla suspensii:

- 1 aproximativ 25% de origine naturala;
 - 100% de origine animala
 - 100% de originevegetala
 - 1 procentajul exact variaza in functie deregiunea din care se iau probele;
 - nici un raspuns corect
-

1411 [8, CIMPAN Oana]

Stiinta mediului inconjurator se ocupa cu studiul contaminarii:

- 1 aerului;
- 1 apei;

1 produselor alimentare;
0 metalelor
0 nici un raspuns corect

1412 [9, CIMPAN Oana]
La titrare o reactie redox trebuie sa fie:
1 rapida;
1 totala;
1 stoechiometrica;
0 grea
0 nici un raspuns corect

1413 [10, CIMPAN Oana]
Pentru titrare se folosesc urmatoarele substante:
0 apa
1 acid tare
1 baza tare
0 apa distilata
0 nici un raspuns corect

1414 [11, CIMPAN Oana]
Pentru separarile cromatografice proba trebuie separata intr-o faza mobila:
1 gaz
1 lichid
1 fluid supercritic
0 sol
0 nici un raspuns corect

1415 [12, CIMPAN Oana]
Din prelucrarea fontei si a otelurilor rezulta urmatotii poluanti organici tipici ai apelor reziduale:
1 agenti de umectare
1 lubrifianti
1 cianuri
1 inhibitori
0 nici un raspuns corect

1416 [13, CIMPAN Oana]
Din prelucrarea carbunelui si cocsului rezulta urmatotii poluanti organici tipici ai apelor reziduale:
1 humus
1 praf de carbune
1 cianuri
1 rodanine
0 nici un raspuns corect

1417 [14, CIMPAN Oana]
Din productia de carbune de lemn rezulta urmatotii poluanti organici tipici:
1 acizi grasi
1 alcooli
1 metanol
1 fenoli
0 nici un raspuns corect

1418 [15, CIMPAN Oana]
Din industria petroliera rezulta urmatotii poluanti organici tipici ai apelor reziduale industriale:
1 emulsii de uleiuri
1 acizi naftenici
1 sulfonati
0 alcooli
0 nici un raspuns corect

1419 [16, CIMPAN Oana]
Industria hartiei produce urmatotii poluanti organici tipici ai apelor reziduale industriale:
1 polizaharide

Procese la interfata fazelor: Modelare matematică, Optimizare numerică, Implementare web, cu aplicatii în separarea și caracterizarea seriilor de compuși chimici biologic activi

1 acizi rezinici
0 alcooli
0 cianuri
0 nici un raspuns corect

1420 [17, CIMPAN Oana]

Din cauza operatiilor de cocsificare in aer se gasesc urmatoarele particule poluante:

1 cocs
0 oxigen
0 fier
1 hidrocarburi poliacide aromatice
0 nici un raspuns corect

1421 [18, CIMPAN Oana]

Urmatoarele particule poluante se emana in aer datorita topirii minereurilor si proceselor metalurgice:

0 cocs
0 nichel
1 oxizi de fier
1 floruri
0 nici un raspuns corect

1422 [19, CIMPAN Oana]

In apele reziduale industriale din domeniul mine exista poluanti ca:

1 humusul
1 praful de carbune
1 agenti de flotatie
0 oxigen
0 nici un raspuns corect

1423 [20, CIMPAN Oana]

In apele reziduale industriale din turnatorii exista urmatarii poluanti:

1 cianuri
1 fenoli
1 gudroane
1 praf de carbune
0 nici un raspuns corect

1424 [21, CIMPAN Oana]

In urma arderii in cuptoare in aer exista urmatoarele particule poluante:

1 var
0 carbon
1 calcar
1 praf de ciment
0 nici un raspuns corect

1425 [22, CIMPAN Oana]

Industria pielariei produce poluanti organici tipici ai apelor reziduale industriale cum ar fi:

1 sapunuri
0 zahar
1 par
0 cafea
0 nici un raspuns corect

1426 [23, CIMPAN Oana]

Din spalatorii rezulta poluanti organici tipici ai apelor reziduale industriale cum ar fi:

1 sange
1 cafea
1 cacao
1 coloranti
0 nici un raspuns corect

1427 [24, CIMPAN Oana]

Din rafinariile de zahar rezulta urmatarii poluanti organici tipici ai apelor reziduale industriale:

1 zahar;
1 acizi vegetali;
1 betaina;
1 pectina;
0 nici un raspuns corect

1428 [25, CIMPAN Oana]
In urma fabricarii conservelor rezulta urmatoorii poluanti organici tipici ai apelor reziduale:
1 compusi vegetali solubili
0 metanol
0 detergenti
0 fier
0 nici un raspuns corect

152 [1, CIUCUS Dan]
Care sunt metodele de baza pentru colectarea gazelor
1 expansiune
1 spalare
1 inlocuire cu un lichid
0 nici o varianta
0 prin uscare

153 [2, CIUCUS Dan]
Ce trebuie sa se cunoasca pentru colectarea gazelor
1 volumul maselor de colectare
1 temperatura
1 presiunea
0 nici o varianta
0 compozitia gazelor

154 [3, CIUCUS Dan]
Din ce sunt confectionate vasele de colectare
1 din sticla
0 din metal
0 din material ceramic
0 din material plastic
0 nici o varianta

155 [4, CIUCUS Dan]
Cum se previne contaminarea probelor
0 prin spalarea containerului sub jet de apa
1 prin spalarea exterioara a containerului cu gaz
0 prin spalarea cu apa oxigenata
0 prin spalare in baie de acid
0 toate variantele de mai sus

156 [5, CIUCUS Dan]
Ce este aerul
0 un amestec de fluide
1 un amestec de diferite gaze
0 un amestec de substante
0 un amestec de fluide si lichide
0 toate variantele de mai sus

157 [6, CIUCUS Dan]
Cum se determina concentratia de anioni din aer
0 prin titrarea acido-bazica
0 prin electroliza
1 prin titrarea cu o baza
0 prin titrarea cu un acid
0 toate variantele

Procese la interfata fazelor: Modelare matematică, Optimizare numerică, Implementare web, cu aplicatii în separarea și caracterizarea seriilor de compuși chimici biologic activi

158 [7, CIUCUS Dan]

Care este expresia densitatii aerului

$\rho_{\text{aer}} = PM/RT$

$\rho_{\text{aer}} = MT/PR$

$\rho_{\text{aer}} = MRT$

$\rho_{\text{aer}} = RT/P$

nici o varianta

159 [8, CIUCUS Dan]

Care sunt cele mai cunoscute amestecuri de lichide nemiscibile

ulei+apa

ulei+benzine

benzine+apa

toate variantele

nici o varianta

160 [9, CIUCUS Dan]

Ce marime mai caracterizeaza amestecurile de lichide pe langa miscibilitate

coeficientul de dilatare termica

coeficientul de distributie

coeficientul de vascozitate

coeficientul de compresibilitate

nici o varianta

161 [10, CIUCUS Dan]

Cum se poate face o marire de particule

trecand proba prin concasoare

prin pulverizatoare

prin mori sau mojarare

prin furnale

nici o varianta

162 [11, CIUCUS Dan]

Care este cel mai uzual mijloc de determinare a cantitatii de metal

electroliza

titrarea

cantarirea

nici o varianta

masurare

163 [12, CIUCUS Dan]

Care sunt caracteristicile de baza pentru materialele solide ce determina proprietatile si calitatea acestora

dispersia

densitatea

suprafata specifica

structura porilor

nici o varianta

164 [13, CIUCUS Dan]

Care este formula densitatii materialelor

$\rho = mv$

$\rho = v/m$

$\rho = m/v$

$\rho = mgh$

nici o varianta

165 [14, CIUCUS Dan]

In ce se masoara densitatea

g/cm; kg/m

g; kg

cm; g

nici o varianta

cm

166 [15, CIUCUS Dan]

Care sunt categoriile de materiale solide clasificate in functie de structura lor

1 materiale compacte

1 materiale poroase

0 materiale opace

0 materiale dure

0 toate variantele

167 [16, CIUCUS Dan]

Care sunt materialele considerate perfect compacte

1 metalele

1 sticla

1 materialele polimerice

0 materiale plastice

0 toate variantele

168 [17, CIUCUS Dan]

Ce reprezinta volumul real al materialului

1 volumul ocupat de substanta solida din material

0 volumul ocupat de substanta lichida din material

0 volumul ocupat de substanta gazoasa din material

0 toate variantele

0 nici o varianta

169 [18, CIUCUS Dan]

Ce este compactitatea

1 gradul de umplere a unui corp cu material solid

0 gradul de umplere a unui corp cu material lichid

0 gradul de umplere a unui corp cu material polimer

0 gradul de umplere a unui corp cu material ceramic

0 toate variantele

170 [19, CIUCUS Dan]

Ce este porozitatea

1 volumul porilor din material

0 volumul porilor din substanta

0 volumul porilor din compozite

0 toate variantele

0 volumul porilor din particule

171 [20, CIUCUS Dan]

Care este legea lui Stokes

0 $F = \frac{4}{3}r^3(\tilde{n}^2 - \tilde{n}^2_1)$

0 $F = 4\tilde{\sigma}r^3(\tilde{n}^2 - \tilde{n}^2_1)$

1 $F = 4\tilde{\sigma}r^3(\tilde{n}^2 - \tilde{n}^2_1)$

0 $F = \tilde{\sigma}r^3(\tilde{n}^2 - \tilde{n}^2_1)$

0 nici o varianta

172 [21, CIUCUS Dan]

La ce serveste analiza de sedimentare

0 la determinarea dimensiunilor particulelor

1 determinarea dimensiunilor particulelor din emulsie

1 determinarea distributiei particulelor in sistem

0 toate variantele de mai sus

0 nici o varianta

173 [22, CIUCUS Dan]

Ce urmareste analiza de sedimentare

1 viteza de depunere in camp gravitacional a particulelor

0 viteza particulelor

0 viteza fazelor de reactie

Procese la interfata fazelor: Modelare matematică, Optimizare numerică, Implementare web, cu aplicatii în separarea și caracterizarea seriilor de compuși chimici biologic activi

0 nici o varianta

0 viteza particulelor in camp stationar

174 [23, CIUCUS Dan]

Ce densitate se exprima la materialele compacte

0 aparenta

0 volumica

0 de masa

1 reala

0 toate variantele

175 [24, CIUCUS Dan]

Care este expresia densitatii reale

0 $\rho_{\text{reala}} = m/v_{\text{aparenta}}$

0 $\rho_{\text{reala}} = m/v_{\text{reala}}$

1 $\rho_{\text{reala}} = m/v_{\text{reala}}$

0 $\rho_{\text{reala}} = v_{\text{reala}}/m$

0 nici o varianta

176 [25, CIUCUS Dan]

Cum se realizeaza analiza solidelor

1 prin metode de emisie sau absorbtie de radiatie

1 prin trecerea materialului solid sub forma de solutie

1 prin dizolvare cu sau fara schimbarea starii de agregare

0 nici o varianta

0 primele doua variante

252 [1, CONT LIANA]

1. Reactia poate intra in competitie cu o reactie chimica omogena si sa previna conservarea speciei A^- pentru formarea de B

0 a) $B + e^- \leftrightarrow A^- \rightarrow K_{\text{omogen}} B$

1 b) $A + e^- \leftrightarrow A^- \rightarrow K_{\text{omogen}} B$

0 c) $A + e^- \leftrightarrow B^- \rightarrow K_{\text{neomogen}} B$

0 d) $A + B \leftrightarrow A^- K_{\text{omogen}} e$

0 e) $B - A \leftrightarrow A^- K_{\text{omogen}} e$

253 [2, CONT LIANA]

2. Pentru relatia $i_e/i = \sqrt{v}/10^5 \cdot c$, ce semnificatie are v

0 a) este variatia energiei electrice

0 b) este varitia campului electric

0 c) este viteza de deplasare a curentului

1 d) viteza de variatie a potentialului

0 e) viteza curentului electric

254 [3, CONT LIANA]

3. Ce semnificatie are c in relatia $i_e/i = \sqrt{v}/10^5 \cdot c$

1 a) concentratia speciei descarcate pe electrod

0 b) caldura specifica

0 c) curentul de sarcini de decarcare pe elctrod

0 d) concentratia de electrozi

0 e) caldura molara

255 [4, CONT LIANA]

4. Fondul curentului de fond e compus din

1 a) dintr-un current faradaic provocat de impuritatile din solutie

1 b) dintr-un current nonfaradaic

0 c) dintr-un current faradaic si un curent alternative

0 d) dintr-un current continuu si unul nonfaradic

0 e) dintr-un curent alternativ

256 [5, CONT LIANA]

5. Dintre curentul faradaic si nonfaradaic care nu poate fi eliminat

0 a) curentul faradaic alfa

- 1 b) curentul nonfaradaic
 - 0 c) ambele
 - 0 d) nici unul
 - 0 e) curentul faradaic beta
-

257 [6, CONT LIANA]

6. Curentul faradaic e produs de
- 0 a) curentul de sarcini dintre electrolit si electrod
 - 0 b) curentul nonfaradic
 - 0 c) miscarea electrozilor
 - 1 d) impuritatile din solutie
 - 0 e) miscarea electronilor
-

258 [7, CONT LIANA]

7. Curentul nonfaradic rezulta din
- 1 a) curentul de sarcini dintre electrolit si electrod
 - 0 b) curentul faradic
 - 0 c) viteza de variatie a apotentialului
 - 0 d) curentul continuu
 - 0 e) curentul alternativ
-

259 [8, CONT LIANA]

8. Celula electrochimica e alcatuita din
- 1 a) 2 electrozi in contact cu un elctrolit
 - 1 b) 2 conductori metalici in contact cu un conductor ionic
 - 1 c) 2 electrozi (conductori metalici) in contact cu un electrolit (conducator ionic)
 - 0 d) 1 electrod in contact cu 2 electroliti
 - 0 e) 1 electrod in contact cu 3 electroliti
-

260 [9, CONT LIANA]

9. Conductorul ionic (electrolitul) poate fi
- 1 a) o solutie
 - 1 b) un lichid
 - 1 c) un solid
 - 0 d) un acid
 - 0 e) un gaz
-

261 [10, CONT LIANA]

10. Ce se produce in celulele galvanice
- 1 a) electricitate
 - 0 b) acizi
 - 0 c) baze
 - 0 d) atomi
 - 0 e) substante
-

262 [11, CONT LIANA]

11. Ce are loc in celulele electrolitice
- 0 a) reactii de reducere
 - 0 b) reactii de alaturare
 - 0 c) reactii cu electroliti separate(diferiti)
 - 1 d) reactii chimice prin aplicarea unei surse exterioare de curent si cu un electrolit comun
 - 0 e) reactii de impurificare
-

263 [12, CONT LIANA]

12. Intr-o recatie redox agentul de oxidare (oxidantul) este
- 0 a) acceptor si donator de elctroni
 - 0 b) reducător de electroni
 - 1 c) acceptor de electroni
 - 0 d) donator
 - 0 e) redistribuie electronii spre o celula galvanica
-

264 [13, CONT LIANA]

13. Care sunt reactiile redox

Procese la interfata fazelor: Modelare matematică, Optimizare numerică, Implementare web, cu aplicatii în separarea și caracterizarea seriilor de compusi chimici biologici activi

- 1 a) $2\text{Mg(s)} + \text{O}_2(\text{g}) \rightarrow 2\text{MgO(s)}$, Mg e reductor iar O_2 oxidant
1 b) $\text{CuO(s)} + \text{H}_2(\text{g}) \rightarrow \text{Cu(s)} + \text{H}_2\text{O(g)}$, H_2 e reductorul iar CuO oxidantul
1 c) $\text{Cu}^{2+}(\text{aq}) + \text{Zn(s)} \rightarrow \text{Cu(s)} + \text{Zn}^{2+}(\text{aq})$ Cu^{2+} e oxid iar Zn e reductor
0 d) $\text{Mg(s)} + \text{Cu(s)} \rightarrow \text{O(g)} + \text{Cu(g)} + \text{Mg(g)}$, Mg și H sunt oxidantii iar Cu este reductorul
0 e) $\text{H}_2(\text{g}) + \text{O}_2(\text{g}) \rightarrow \text{H}_2\text{O(g)}$ H_2 e reductorul iar O e oxidantul
-

265 [14, CONT LIANA]

14. Schema de exprimare a substantelor redox este

- 0 a) red/ox $n \cdot e^- + \text{ox} \rightarrow \text{red}$
0 b) red/ox $\text{red} + n \cdot e^- \rightarrow \text{ox}$
1 c) ox/red $\text{ox} + n \cdot e^- \rightarrow \text{red}$
0 d) ox/red $\text{red} + \text{ox} = n \cdot e^-$
0 e) ox/red $\text{red} + n \cdot e^- \rightarrow \text{ox}$
-

266 [15, CONT LIANA]

15. In cazul arbitrar ,a(ox) si a(red) sunt

- 0 a) atractiile dintre electroni
0 b) atractiile dintre electrozi
0 c) analizele reactiilor
1 d) activitatile chimice ale speciilor ox si red
0 e) respingerile diferitelor tipuri de substante
-

267 [16, CONT LIANA]

16. In relatia $a(\cdot) = y(\cdot) \cdot c(\cdot)$,y este

- 1 a) coeficient de activitate
0 b) activitate chimica
0 c) concentratia speciilor
0 d) activitate magnetica
0 e) coeficient de corectie
-

268 [17, CONT LIANA]

17. Coeficientul de activitate inglobeaza

- 1 a) contributia efectelor de temperatura
0 b) energia moleculara
1 c) interactiunea dintre moleculele de solvent
1 d) interactiunea intre moleculele de solvent cu cele de solvat
0 e) interactiunea dintre energia solara si cea moleculara
-

269 [18, CONT LIANA]

18. Intr-o celula electrochimica procesele de oxidare si reducere sunt

- 0 a) impreuna in spatiu
1 b) separate in spatiu
0 c) separate in timp
0 d) asemanatoare
0 e) explozive
-

270 [19, CONT LIANA]

19. Electroful metal/ion de metal(alcatuit dintr-un metal in contact cu o solutie apoasa) se noteaza

- 0 a) $E/E^{n+}(\text{s})$
1 b) $M/M^+(\text{aq})$
0 c) $S/E(\text{aq})$
0 d) I/M^+
0 e) nu are o notatie generala
-

271 [20, CONT LIANA]

20. Coeficientul de fugacitate ϕ este

- 0 a) marime dimensionala
1 b) marime adimensionala
1 c) depinde de natura gazului ,presiune si temperatura
0 d) nu depinde de natura gazului, presiune si temperatura
0 e) depinde de natura solidului
-

272 [21, CONT LIANA]

21. In ce consta un electrod metal/sare solubila

- 1 a) material acoperit cu un strat poros de sare insolubila MX
 - 1 b) strat poros de sare imersat intr-o solutie de ioni X
 - 0 c) strat de sare imersat intr-o solutie de ioni á
 - 0 d) material pur
 - 0 e) nemetal
-

273 [22, CONT LIANA]

22. Ce reprezinta $\Delta_r G^0$ in expresia potentialului unei celule

- 1 a) energia Gibbs
 - 0 b) energia cinetica
 - 0 c) energia moleculara
 - 0 d) energia de recatie
 - 0 e) energia de respingere intramoleculara
-

274 [23, CONT LIANA]

23. Potentialul in conditii standard este

- 0 a) $T_S=135\text{ k}$ si $p_S=10^{-5}\text{ Pa}$
 - 0 b) $p_S=135\text{ k}$ si $T_S=10^3\text{ Pa}$
 - 0 c) $T_S=480\text{ k}$ si $p_S=10^{-8}\text{ Pa}$
 - 1 d) $T_S=298\text{ k}$ si $p_S=10^5\text{ Pa}$
 - 0 e) $p=1\text{ atm}$ si $T=273\text{ k}$
-

275 [24, CONT LIANA]

24. Cum se obtine seria activitatii electrochimice pentru metalele uzule

- 1 a) daca se aplica a ordonare a alemetelor dupa potentialul lor de reducere standard
 - 1 b) de la starea de oxidare uzuala la starea neutral electric
 - 0 c) din sistemul Periodic al Elemtelor
 - 0 d) dupa cresterea energiei Gibbs
 - 0 e) prin punerea in contact direct cu o sursa de curent
-

276 [25, CONT LIANA]

25. La ce valoare reactia a atins echilibrul

- 1 a) $k=Q$
 - 0 b) $Q=-k$
 - 0 c) $k=-Q$
 - 0 d) $k-Q=0$
 - 0 e) $Q-k=0$
-

427 [1, CREMENE Cornelia]

Care din metodele de mai jos sunt metode de separare a impuritatilor din probe

- 1 flotare
 - 1 extractie
 - 1 distilare
 - 1 ultrafiltrare
 - 0 dilatare
-

428 [2, CREMENE Cornelia]

Metoda de separare numita sublimare are la baza

- 0 solubilitati diferite
 - 0 diferente de densitate intre substanta si lichid
 - 0 schimbul de ioni
 - 0 electroliza la electrozi inerti
 - 1 presiuni de valori diferite
-

430 [3, CREMENE Cornelia]

Metoda de separare numita cromatografie poate fi

- 1 de absorbtie pe coloana
- 1 prin schimb ionic
- 1 pe strat subtire
- 0 pe strat gros
- 0 nu este o metoda de separare

Procese la interfata fazelor: Modelare matematică, Optimizare numerică, Implementare web, cu aplicatii în separarea și caracterizarea seriilor de compuși chimici biologic activi

432 [4, CREMENE Cornelia]

Inainte ca proba sa fie supusa unei analize este necesar sa se indeparteze impuritatile din proba

0 nu,nu este necesar

0 depinde de modul de lucru

1 da,adesea este necesar

0 nu se indeparteaza niciodata

0 depinde de laborant

434 [5, CREMENE Cornelia]

Separarea componentilor dintr-un amestec

1 poate avea o importanta calitativa si cantitativa

1 poate fi utila pentru purificare

0 nu este utila deloc

0 componentii nu se separa din amestec niciodata

0 nu poate avea nici o importanta

435 [6, CREMENE Cornelia]

Unele din metodele de separare ale impuritatilor din probe sunt

1 rafinare zonala

1 cristalizare

1 precipitate

1 sublimare

0 nici un raspuns nu este corect

437 [7, CREMENE Cornelia]

Care sunt conditiile care trebuie indeplinite de materialul de referinta pentru etalonare

0 sa fie scump

1 sa fie accesibil si convenabil

1 sa aiba o puritate cunoscuta de cel putin 99%

0 sa nu i se cunoasca puritatea

0 sa nu participe la reactii stoechiometrice

438 [8, CREMENE Cornelia]

Care poate fi standardul de baza in chimie

1 o substanta a carei puritate a fost verificata

0 o substanta cu puritate neverificata

0 nu exista standard de baza in chimie

0 o unitate de masura ca si in cazul unor proprietati fizice

0 nu poate fi niciodata o substanta

439 [9, CREMENE Cornelia]

Procedeele de analiza cantitativa includ operatiuni de laborator comune.Care sunt aceste operatiuni

1 luarea probelor

1 uscarea

1 cantarirea

1 dizolvarea

0 evaporarea

440 [10, CREMENE Cornelia]

Care este singura operatiune de laborator care nu este intotdeauna necesara

0 cantarirea

0 uscarea

0 evaporarea

1 dizolvarea

0 luarea probelor

441 [11, CREMENE Cornelia]

Care sunt cele trei metode de baza pentru colectarea probelor gazoase

0 prin inlocuire cu un gaz

0 prin uscare

1 prin expansiune intr-un container ce pot fi evacuate

1 prin spalare
1 prin inlocuire cu un lichid

442 [12, CREMENE Cornelia]

In cele trei metode de baza pentru colectarea probelor trebuie sa se cunoasca

0 cantitatea vaselor de colectare

1 presiunea

1 temperatura

0 greutatea vaselor de colectare

0 inaltimea vaselor

443 [13, CREMENE Cornelia]

Cum trebuie sa fie vasele de colectare pentru colectarea probelor gazoase

1 sa fie confectionate din sticla

0 sa nu aiba orificii de iesire

0 sa nu aiba orificii de intrare

1 sa fie prevazut cu un orificiu de intrare si unul de iesire

1 orificiul de intrare si iesire sa se poata deschide si inchide

444 [14, CREMENE Cornelia]

Ce trebuie facut mai intai pentru transformarea unei probe mari intr-o proba de marime convenabila pentru efectuarea unei analize

1 trebuie sa se reduca proba la o marime de particule uniforma

0 trebuie sa se mareasca masa probei

1 trebuie sa se reduca masa probei

0 nu trebuie facut nimic

0 este imposibil acest procedeu

445 [15, CREMENE Cornelia]

Care din dispozitivele de taiere de mai jos sunt folosite pentru reducerea unei probe la o marime de particule uniforma

1 concasoare

1 mori sau mojar

1 zdrobitor

1 taietor transversal si paralel

0 nici unul nu se foloseste pentru asa ceva

446 [16, CREMENE Cornelia]

Cum se realizeaza in mod uzual operatia de uscarea a unei probe

0 proba nu trebuie uscata

1 prin incalzire intr-un cuptor cu mufla

1 prin ardere la becuri Bunsen sau Meeker

1 prin incalzire intr-o epuva

0 uscarea se face natural

447 [17, CREMENE Cornelia]

A catea din cele patru operatiuni de laborator este uscarea

0 a cincea

1 a doua

0 prima operatiune

0 a treia

0 a patra

448 [18, CREMENE Cornelia]

Care este urmatoarea operatiune de laborator care urmeaza de obicei dupa uscarea

0 dizolvarea

0 evaporarea

0 luarea probelor

0 uscarea este ultima operatiune

1 cantarirea

449 [19, CREMENE Cornelia]

Ce instrumente de masurare se folosesc de obicei pentru cantarire

1 balante tehnice, farmaceutice

Procese la interfata fazelor: Modelare matematică, Optimizare numerică, Implementare web, cu aplicatii în separarea și caracterizarea seriilor de compuși chimici biologic activi

0 sublere
0 pipete
0 micrometre
1 balante analitice,electrice

450 [20, CREMENE Cornelia]
Urmatoarea operatiune de laborator efectuata dupa cantarire este
1 dizolvarea
0 uscarea
0 distilarea
0 luarea de probe
0 verificarea probelor

451 [21, CREMENE Cornelia]
Cu ce precizie se cantaresta cu ajutorul balantelor farmaceutice
0 cu precizie de ordinul gramelor
0 cu precizie de 0,1 mg
0 aceste balante nu au precizie
1 cu precizie de la 1 la 10 mg
0 nici un raspuns nu este corect

452 [22, CREMENE Cornelia]
Prin ce dispozitive trebuie trecuta proba pentru a se obtine o marime de particule uniforma
1 pulverizatoare
0 ciocane
1 site pentru granule
1 concasoare
1 mojar

453 [23, CREMENE Cornelia]
Metode de separare numita precipitare are la baza
0 volabilitati diferite
0 solubilitate diferita intre doua faze
1 solubilitati diferite
0 cristalizare la temperaturi ridicate
0 presiuni de vapori diferiti

454 [24, CREMENE Cornelia]
Baza metodei de separare este electroliza la electroni inertii.Care este numele metodei cu aceasta baza
0 dializa
0 flotare
1 electrodepunere
0 rafinarea zonala
0 extractie

455 [25, CREMENE Cornelia]
Pe ce fenomene se bazeaza metodele de separare
0 mecanice
1 chimice
0 metalo-chimice
1 fizice
0 psihice

482 [1, CRISAN Camelia]
Metalele cristalizeaza in
1 retea cubica cu volum centrat
0 retea cubica cu baza centrata
1 retea cubica cu fete centrate
1 retea hexagonala compacta
0 toate raspunsurile corecte

483 [2, CRISAN Camelia]
FeS₂ are structura

1 triclina
0 rombica
0 monoclina
0 hexagonala
0 cubica

484 [3, CRISAN Camelia]

Conexiunile spatiale ale atomilor si fortelor dintre atomi sunt determinantele:

1 gradului de perfectiune
1 ordinii structurii interne a cristalului
1 simetriei structurii interne a cristalului
0 dezordinii structurii interne a cristalului
0 nici un raspuns corect

485 [4, CRISAN Camelia]

Ca urmare a ordinii si simetriei structurii interne a cristalelor, sunt simetrice

1 proprietatile fizice a cristalelor
1 formele lor poliedrice exterioare, vizibile cu ochiul liber
0 proprietatile chimice
0 formele poliedrice
0 nici un raspuns corect

486 [5, CRISAN Camelia]

Din cele 6 singonii fac parte urmatoarele singonii

1 triclina
1 monoclina
1 rombica
1 hexagonala
0 nici un raspuns corect

507 [6, CRISAN Camelia]

O caracteristica a unei translatii liniare

0 este cea mai mare translatie care determina repetarea proprietatilor punctuale
0 este o translatie medie care determina repetarea proprietatilor punctuale
1 este cea mai mica translatie care determina repetarea proprietatilor punctuale
0 este o translatie oarecare care determina repetarea proprietatilor punctuale
0 nici un raspuns corect

508 [7, CRISAN Camelia]

Schema de repetare a punctelor omoloage dintr-un plan este definita de o pereche de translatii elementare

0 paralele
0 perpendiculare
1 neparalele
0 concurente
0 oarecare

509 [8, CRISAN Camelia]

Celula elementara este formata din

0 prisma translatiilor elementare
1 paralelipipedul translatiilor elementare
0 hexagonul translatiilor elementare
0 conul translatiilor elementare
0 nici un raspuns corect

510 [9, CRISAN Camelia]

Substantele cristaline au

1 o aranjare ordonata a particulelor, in forme geometrice regulate
0 o aranjare neordonata a particulelor
1 un punct de topire caracteristic
0 un punct de topire oarecare
0 nici un raspuns corect

Procese la interfata fazelor: Modelare matematică, Optimizare numerică, Implementare web, cu aplicatii în separarea și caracterizarea seriilor de compuși chimici biologic activi

511 [10, CRISAN Camelia]

Categoriile de cristale sunt

1 inferioare

0 oarecare

1 medii

1 superioare

0 nici un raspuns corect

512 [11, CRISAN Camelia]

Reteaua Bravais poate fi

1 simpla

1 cu fete centrate

1 cu volum centrat

1 cu baza centrata

0 nici un raspuns corect

513 [12, CRISAN Camelia]

Consecintele ordinii structurii unui cristal sunt

1 omogenitatea

1 discontinuitatea

0 neomogenitatea

1 anizotropia

0 nici un raspuns corect

514 [13, CRISAN Camelia]

Categoria medie de cristale cuprinde urmatoarele singonii

1 tetragonala

0 rombica

1 hexagonala

0 monoclina

0 cubica

515 [14, CRISAN Camelia]

Singonia hexagonala cuprinde sistemele

1 trigonal

0 triclin

0 rombic

1 hexagonal

0 cubic

516 [15, CRISAN Camelia]

NaCl are structura

0 triclina

1 cubica

0 hexagonala

0 rombica

0 monoclina

517 [16, CRISAN Camelia]

Sistemul cubic se caracterizeaza prin

0 unghiuri egale

1 unghiuri drepte

1 parametri egali

0 parametri inegali

0 nici un raspuns corect

518 [17, CRISAN Camelia]

Categoria medie de cristale cuprinde sistemele

1 trigonal

0 cubic

1 tetragonal

0 rombic

1 hexagonal

519 [18, CRISAN Camelia]

Din cele 7 sisteme in care se impart retelele cristaline fac parte urmatoarele sisteme

1 triclinic

1 rombic

1 cubic

1 monoclinic

0 nici un raspuns

520 [19, CRISAN Camelia]

Sistemul tetragonal se caracterizeaza prin

0 parametrii egali

1 doi parametrii egali

0 unghiuri inegale

1 unghiuri drepte

0 nici un raspuns corect

521 [20, CRISAN Camelia]

Reteaua Bravais din sistemul cubic poate fi

1 cu fete centrate

1 simpla

0 cu baza centrata

1 cu volum centrat

0 nici un raspuns corect

522 [21, CRISAN Camelia]

Cristalele pot fi formate din

1 atomi

1 ioni

1 molecule

1 complecsi

0 nici un raspuns corect

523 [22, CRISAN Camelia]

Conexiunile spatiale ale atomilor si fortele dintre atomi sunt determinantele

1 gradului de perfectiune

1 ordinii structurii interne a cristalului

0 dezordinii structurii interne a cristalului

1 simetriei structurii interne a cristalului

0 nici un raspuns corect

524 [23, CRISAN Camelia]

Parametrii celulelor elementare sunt

1 laturile paralelipipedului elementar

0 unghiurile prisme elementare

1 unghiurile paralelipipedului elementar

0 laturile prisme elementare

0 nici un raspuns corect

525 [24, CRISAN Camelia]

In cate sisteme cristaline se impart retelele cristaline

0 9

0 5

1 7

0 8

0 nici un raspuns corect

526 [25, CRISAN Camelia]

Categoria superioara a cristalelor cuprinde sistemul

0 rombic

1 cubic

0 hexagonal

Procese la interfața fazelor: Modelare matematică, Optimizare numerică, Implementare web, cu aplicații în separarea și caracterizarea seriilor de compuși chimici biologic activi

0 monoclinic
0 triclinic

939 [1, CRISTEA Mihai]

Orice măsurătoare sau rezultat experimental :

1 trebuie înregistrat
0 poate fi trecut cu vederea
0 necesită ștergerea acestuia
0 trebuie recalulate
0 trebuie prezentate superiorilor

940 [2, CRISTEA Mihai]

Prin definiție, numărul de cifre semnificative reprezintă :

0 un număr neglijabil
0 mulțimea vidă
1 numărul de cifre dintr-un rezultat, în afară de zerourile din față și din coada rezultatului;
0 un număr nelimitat de cifre
0 o constantă

941 [3, CRISTEA Mihai]

Alegeți răspunsurile incorecte. De ce se preferă scrierea sub formă exponențială pentru reprezentarea cifrelor semnificative ?

0 pentru că se prezintă mai clar numărul de cifre semnificative
1 este elementară ;
1 deoarece este imprecisă nu poate fi luată în calcul;
1 se pot prezenta dimensiuni;
1 poate fi o eroare relativă ;

942 [4, CRISTEA Mihai]

De exemplu, dacă un număr rezultat dintr-o măsurătoare este scris $2 \cdot 1/10^3$ înseamnă că acesta :

1 are o singură cifră semnificativă ;
0 are două cifre semnificative
0 are trei cifre semnificative
0 are patru cifre semnificative
0 nu are nici o cifră semnificativă

943 [5, CRISTEA Mihai]

Numărul $2,0 \cdot 1/10^3$:

0 are o singură cifră semnificativă
1 nu are nici o cifră semnificativă ;
0 are 3 cifre semnificative
0 are 4 cifre semnificative
0 are 2 cifre semnificative

944 [6, CRISTEA Mihai]

Câte cifre semnificative poate avea $2,00 \cdot 1/10^3$, număr rezultat dintr-o măsurătoare :

0 patru
0 două
1 trei;
0 o singură cifră
0 nu putem vorbi despre așa ceva

945 [7, CRISTEA Mihai]

Când se efectuează calcule există procedee de calcul a incertitudinii rezultatului :

1 la adunare și scădere, rezultatul trebuie să aibă atâtea cifre semnificative câte are cel mai imprecis număr implicat în calcul;
0 nu există nici o legătură între incertitudinea rezultatului și cel mai imprecis număr
1 la înmulțire și împărțire, numărul de cifre semnificative trebuie determinat în prealabil;
0 aflarea incertitudinii rezultatului nu necesită calcule
0 incertitudinea rezultatului se află printr-o simplă rotunjire a acestuia

946 [8, CRISTEA Mihai]

Alegeți răspunsurile incorecte. Precizia rezultatului nu poate fi mai bună decât :

- 1 un număr;
 - 1 o moleculă ;
 - 0 rădăcina pătrată din suma pătratelor erorii relative
 - 1 un atom;
 - 1 o componentă atomică ;
-

947 [9, CRISTEA Mihai]

Marcați răspunsurile corecte. Rezultatul se va rotunji după ultima cifră semnificativă astfel :

- 1 dacă cifra este mai mare de 5 rotunjirea se va face prin adunare;
 - 1 dacă cifra este mai mică de 5 rotunjirea se va face prin scădere;
 - 1 dacă cifra este egală cu 5 rotunjirea se va face în funcție de cifra precedentă acesteia;
 - 0 dacă cifra este mai mare de 5 rotunjirea se va face prin scădere
 - 0 dacă cifra este mai mică de 5 rotunjirea se va face prin adunare
-

948 [10, CRISTEA Mihai]

Pentru a se media efectele rotunjirilor, în funcție de penultima cifră semnificativă, rotunjirea se va face astfel :

- 1 dacă această cifră este pară, rotunjirea se va face prin scădere;
 - 1 dacă această cifră este impară, rotunjirea se va face prin adunare;
 - 0 dacă această cifră este pară, nu se rotunjește
 - 0 dacă această cifră este impară, nu se rotunjește
 - 0 nu se fac rotunjiri
-

949 [11, CRISTEA Mihai]

Prin natura măsurătorilor instrumentale, rezultatele implică apariția unor erori. Erorile pot fi :

- 1 erori sistemice;
 - 1 erori întâmplătoare;
 - 1 erori grosolane;
 - 0 erori semnificative
 - 0 erori simple
-

950 [12, CRISTEA Mihai]

Erorile sistemice pot fi caracterizate de următoarele proprietăți :

- 1 indică faptul că metoda nu se poate aplica fără o prealabilă corecție;
 - 1 sunt caracterizate prin aceea că erorile măsurării au aceeași mărime și același sens;
 - 0 sunt niște calcule simple
 - 0 nu necesită formule
 - 0 nu depind de nici o mărime
-

951 [13, CRISTEA Mihai]

Erorile întâmplătoare :

- 1 își au originea în limitele metodei care duc la o lipsă de precizie a acestora;
 - 1 pot fi tratate și prelucrate static;
 - 0 sunt rare
 - 0 nu sunt semnificative
 - 0 nu au origine
-

952 [14, CRISTEA Mihai]

Erorile grosolane :

- 1 nu au soluție, necesitând o atenție sporită
 - 1 implică repetarea analizei
 - 0 nu sunt diferite de celelalte erori
 - 0 sunt egale cu erorile întâmplătoare
 - 0 sunt identice cu erorile sistemice
-

953 [15, CRISTEA Mihai]

Statica aplicată nu are următoarele ramuri :

- 1 chimie-fizică ;
 - 1 biochimie;
 - 1 tehnologia mașinilor unelte;
 - 0 statica descriptivă
 - 0 statica inductivă
-

Procese la interfata fazelor: Modelare matematică, Optimizare numerică, Implementare web, cu aplicatii în separarea și caracterizarea seriilor de compuși chimici biologic activi

954 [16, CRISTEA Mihai]

Statistica asociază oricărui eveniment o anumită frecvență de apariție, adică :

- 1 un număr care indică cât de des se produce acel eveniment;
 - 0 un rezultat subunitar
 - 0 o cifră
 - 0 o eroare
 - 0 un număr par
-

955 [17, CRISTEA Mihai]

Distribuția normală a lui Gauss este o funcție. Aici x poate lua valori pe domeniul :

- 1 $(-\infty, +\infty)$;
 - 0 $(-1, +1)$
 - 0 $(0, +\infty)$
 - 0 $(-\infty, 0)$
 - 0 $(0, 1)$
-

956 [18, CRISTEA Mihai]

Distribuția normală a lui Gauss nu are expresia :

- 0 $P(x, \mu, \sigma) = 1/\sqrt{2\pi\sigma} \exp(-(x-\mu)^2/2\sigma^2)$
 - 1 $P(x, \mu, \sigma) = 1/\sqrt{2} \exp(-1/2\sigma^2)$;
 - 1 $P(x) = 1 \exp(-1)$;
 - 1 $P(\mu) = x-1$;
 - 1 $P(\sigma) = 2x-y$;
-

957 [19, CRISTEA Mihai]

Pentru un număr finit de măsurători, valorile constantelor μ, σ, σ^2 se calculează astfel :

- 1 μ este egal cu media aritmetică a măsurătorilor;
 - 1 σ rezultă din σ^2 ;
 - 0 $\sigma = 1$
 - 0 $\mu = 1$
 - 0 $\sigma = 1$
-

958 [20, CRISTEA Mihai]

Se constată că valorile σ delimitează niște suprafețe ale ariei de sub curbă, anume ariile corespunzătoare:

- 1 $\pm 1\sigma$ conțin 68% din toate datele;
 - 1 $\pm 2\sigma$ conțin 95,5% din toate datele;
 - 1 $\pm 3\sigma$ conțin 99,7% din toate datele;
 - 0 σ nu conține nici o dată
 - 0 σ conține o infinitate de date
-

959 [21, CRISTEA Mihai]

Care din următoarele răspunsuri sunt corecte ?

- 1 în capitolul "Propagarea erorilor prin calcule" se vorbește despre procedee de calcul a incertitudinii;
 - 1 numărul 1,70 rezultat dintr-o măsurătoare are 3 cifre semnificative;
 - 1 pentru numărul 16,127 rotunjirea se face prin adunare;
 - 0 pentru numărul 1,631 rotunjirea se face prin adunare
 - 0 elementele de statică se studiază la disciplina biologie
-

960 [22, CRISTEA Mihai]

Rotunjirea rezultatelor experimentale se poate face :

- 1 prin adunare;
 - 1 prin scădere;
 - 0 prin înmulțire
 - 0 prin împărțire
 - 1 prin adunare sau prin scădere;
-

961 [23, CRISTEA Mihai]

Statistica descriptivă nu este utilizată pentru :

- 1 biologie;
- 1 filosofie;
- 0 descrierea naturii datelor experimentale
- 1 realizarea legăturilor de hidrogen;
- 1 legăturile coordinative;

962 [24, CRISTEA Mihai]

Caracterul aleator nu se atribuie :

- 1 fenomenelor produse intenționat;
 - 1 naturii erorilor;
 - 0 fenomenelor întâmplătoare sau supuse legilor hazardului
 - 1 mărimilor fizice;
 - 1 provenienței erorilor;
-

963 [25, CRISTEA Mihai]

Alegeți răspunsurile incorecte. Câte cifre semnificative are numărul 1,00, rezultat din calcule :

- 1 are o singură cifră semnificativă ;
 - 1 are 2 cifre semnificative;
 - 1 are 4 cifre semnificative;
 - 1 are 5 cifre semnificative;
 - 0 are 3 cifre semnificative
-

126 [1, CUCIOAN Anca Cristin]

1. Procedeu de precipitare este un procedeu folosit pentru

- 1 a) separare
 - 0 b) purificare:
 - 0 c) analiza galvanometrica
 - 0 d) determinarea solubilitatii
 - 0 e) nici un raspuns nu este corect
-

127 [2, CUCIOAN Anca Cristin]

2. Pb (II) poate fi precipitat sub forma de

- 0 a) PbCl₂ ,la cald
 - 1 b) PbCl₂ ,la rece
 - 0 c) PbCl₂ ,la rece
 - 0 d) PbCl₂ ,la cald
 - 0 e) nici un raspuns nu este corect
-

128 [3, CUCIOAN Anca Cristin]

3. Grupele de ioni metalici se pot obtine prin

- 1 a) precipitare
 - 0 b) purificare
 - 1 c) filtrare
 - 1 d) separare
 - 0 e) nici un raspuns nu este corect
-

129 [4, CUCIOAN Anca Cristin]

4. O analiza galvanometrica se realizeaza printr-o serie de etape experimentale

- 1 a) cantarirea exacta a probei
 - 1 b) dizolvarea probei cantarite
 - 0 c) se curata proba cantarita
 - 1 d) se separa precipitatul prin filtrare
 - 0 e) precipitarea se face in solute diluate la temperature joase
-

130 [5, CUCIOAN Anca Cristin]

5. Curba de titrare reprezinta

- 1 a) reprezentare grafica a pH-ului in functie de titrant
 - 0 b) dependenta pH-ului in functie de temperature
 - 0 c) dependenta pH-ului in functie de timp
 - 0 d) dependenta pH-ului in functie de presiune
 - 0 e) nici un raspuns nu este corect
-

131 [6, CUCIOAN Anca Cristin]

6. Substante folosite ca titranti

- 0 a) acid slab
- 1 b) acid tare
- 1 c) baza tare

Procese la interfata fazelor: Modelare matematică, Optimizare numerică, Implementare web, cu aplicatii în separarea și caracterizarea seriilor de compuși chimici biologic activi

0 d) baza slaba

0 e) nici un raspuns nu este corect

132 [7, CUCIOAN Anca Cristin]

7) Urmatoarele echilibre chimice sunt implicate in titrare

1 a) $\text{HOH} + \text{HO}^- \rightleftharpoons \text{H}^+$

1 b) $\text{HA} + \text{H}^+ \rightleftharpoons \text{A}^-$

0 c) $\text{BOH} + \text{B}^- \rightleftharpoons \text{HO}^+$

1 d) $\text{BOH} + \text{B}^+ \rightleftharpoons \text{HO}^-$

1 e) $\text{AB} + \text{A}^- \rightleftharpoons \text{B}^+$

133 [8, CUCIOAN Anca Cristin]

8) Ecuația pentru echilibrul acid-sare

1 a) $[\text{H}^+][\text{A}^-] = K_a[\text{HA}]$

0 b) $[\text{H}^+][\text{HO}^-] = K_a[\text{H}_2\text{O}]$

1 c) $C_s = C_b \cdot V_x / (V_a + V_x)$

0 d) $C_a = [\text{HA}] + [\text{H}^+] - [\text{HO}^-]$

0 e) nici un raspuns nu este corect

134 [9, CUCIOAN Anca Cristin]

9) Concentrația acid la exces acid este

1 a) $C_x = (C_a \cdot V_a - C_b \cdot V_x) / (V_a + V_x)$

1 b) $C_x = (-C_b \cdot V_x + C_a \cdot V_a) / (V_a + V_x)$

0 c) $C_s = C_b \cdot V_x / (V_a + V_x)$

0 d) $C_x = C_a \cdot V_a / (V_x + V_a)$

0 e) nici un raspuns nu este corect

135 [10, CUCIOAN Anca Cristin]

10) Concentrația sării la exces baza este

1 a) $C_s = C_a \cdot V_a / (V_a + V_x)$

0 b) $C_s = C_b \cdot V_x / (V_a + V_x)$

0 c) $C_s = V_x \cdot C_b / (V_a - V_x)$

1 d) $C_s = V_a \cdot C_a / (V_a + V_x)$

0 e) nici un raspuns nu este corect

136 [11, CUCIOAN Anca Cristin]

11) Ecuația sare-baza ($x = [\text{H}^+]$) are expresia

1 a) $0 = x^3 + (K_w/K_b + C_b) \cdot x^2 - (K_w + C_s \cdot K_w/K_b) \cdot x - K_w^2/K_b$

0 b) $0 = x^3 + (K_w \cdot C_s \cdot K_b) \cdot x - (K_w \cdot K_b/C_b \cdot x - K_w^2/K_b)$

1 c) $0 = x^3 - (K_w + C_s \cdot K_w/K_b) \cdot x + (K_w/K_b + C_b) \cdot x^2 - K_w^2/K_b$

0 d) $0 = x^3 + (K_w - C_s \cdot K_w/K_b) \cdot x^2 - (K_w/K_b + C_b) \cdot x - K_w^2/K_b$

0 e) nici un raspuns nu este corect

137 [12, CUCIOAN Anca Cristin]

12) Pentru indicarea punctului de salt de pH se folosesc

0 a) indicatori de culoare deschisa

1 b) indicatori de culoare

0 c) indicatori neutri

0 d) indicatori omogeni

0 e) indicatori neomogeni

138 [13, CUCIOAN Anca Cristin]

13) O reacție redox folosită pentru titrare trebuie să îndeplinească condițiile

0 a) să fie lentă

1 b) să fie rapidă

0 c) să fie parțială

1 d) să fie totală

1 e) să fie stoichiometrică

139 [14, CUCIOAN Anca Cristin]

14) În titrarea redox speciile de interes își schimbă

1 a) starea de oxidare

0 b) starea de reducere

- 0 c) starea de echilibru
- 0 d) starea de baza
- 0 e) starea solida

140 [15, CUCIOAN Anca Cristin]

15) In separarile cromatografice proba este dizolvata intr-o faza mobila

- 0 a) gaz
- 0 b) solid
- 0 c) vapori
- 1 d) lichid
- 1 e) fluid supercritic

141 [16, CUCIOAN Anca Cristin]

15) In separarile cromatografice proba este dizolvata intr-o faza mobila

- 1 a) gaz
- 0 b) solid
- 0 c) vapori
- 1 d) lichid
- 1 e) fluid supercritic

142 [17, CUCIOAN Anca Cristin]

16) Faza mobila se numeste

- 0 a) eluat
- 1 b) eluent
- 0 c) emulent
- 0 d) elutie
- 0 e) nici un raspuns nu este corect

143 [18, CUCIOAN Anca Cristin]

17) Metode cromatografice sunt bazate pe

- 1 a) absortia amestecului de substanta
- 0 b) dezabsortia amestecului de substanta
- 1 c) un material absorbent
- 1 d) desorbtiia succesiva a componentelor din amestec
- 0 e) dezabsortie scsesiva

144 [19, CUCIOAN Anca Cristin]

18) Coloana de absorbant poate fi inlocuita cu

- 1 a) foaie de hartie poroasa
- 0 b) foaie de hartie fina
- 1 c) un strat de absorbant fixat pe o placa de sticla
- 0 d) un strat de absorbant fixat pe o placa de plastic
- 0 e) foaie de calc

145 [20, CUCIOAN Anca Cristin]

19) Cromatografia este considerata a fi o metoda

- 1 a) rapida
- 1 b) simpla
- 1 c) cu costuri reduse
- 0 d) variabilitate mica la alegerea metodei de separare
- 0 e) cu costuri ridicate

146 [21, CUCIOAN Anca Cristin]

20) O analiza cromatografica se rezuma la urmatoarele etape

- 0 a) proba este dizolvata in faza mobila
- 0 b) proba este dizolvata in faza primara
- 1 c) faza stationara este cel mai frecvent un lichid absorbit la suprafata unor particule de solid utilizate pentru a impacheta coloana :
- 1 d) faza mobila este trecuta peste faza stationara nemiscibila
- 1 e) sulutul catre are o mare afinitate fata de faza mobile se va misca prin coloana foarte incet

147 [22, CUCIOAN Anca Cristin]

21) Cromatografia a devenit principalul instrument pentru

Procese la interfata fazelor: Modelare matematică, Optimizare numerică, Implementare web, cu aplicatii în separarea și caracterizarea seriilor de compuși chimici biologic activi

- 0 a) îndepărtarea speciilor asemănătoare
 - 0 b) distrugerea speciilor asemănătoare
 - 1 c) separarea speciilor asemănătoare
 - 1 d) despartirea speciilor asemănătoare
 - 0 e) nici un răspuns nu este corect
-

- 148 [23, CUCIOAN Anca Cristin]
22) Cromatografia poate fi utilizată pentru
- 0 a) determinări experimentale
 - 1 b) determinări calitative
 - 0 c) determinări sustantiale
 - 1 d) determinări cantitative
 - 0 e) determinări chimice
-

- 149 [24, CUCIOAN Anca Cristin]
23) Cromatografia servește ca precursor pentru analize
- 0 a) chimice
 - 1 b) chimice calitative
 - 1 c) chimice spectroscopice
 - 0 d) experimentale
 - 0 e) cantitative
-

- 150 [25, CUCIOAN Anca Cristin]
24) Categori de cromatografii
- 1 a) de absortie
 - 1 b) de partitie
 - 1 c) cu schimb ionic
 - 1 d) de afinitate
 - 0 e) de întregire
-

- 151 [26, CUCIOAN Anca Cristin]
25) Metode de cromatografie
- 1 a) planară
 - 0 b) spațială
 - 1 c) pe coloană
 - 0 d) tridimensională
 - 0 e) nici un răspuns nu este corect
-

- 322 [27, CUCIOAN Anca Cristin]
Un standard chimic primar îndeplinește următoarele condiții
- 1 Să participe la reacții în proporții stoechiometrice
 - 0 Are o puritate cunoscută de cel puțin 95%
 - 1 Să fie stabil în solventul utilizat
 - 1 Să fie nehigroscopic
 - 1 Să posede o masă moleculară mare
-

- 324 [28, CUCIOAN Anca Cristin]
Toate procedeele de analiză cantitativă includ următoarele operațiuni de laborator comune
- 1 Luarea probelor
 - 1 Uscarea
 - 1 Cântărirea
 - 1 Dizolvarea
 - 0 Titrarea
-

- 325 [29, CUCIOAN Anca Cristin]
În analiza cantitativă folosind metode instrumentale, nu e totdeauna necesară
- 0 Luarea probelor
 - 0 Uscarea probelor
 - 0 Cântărirea probelor
 - 1 Dizolvarea probelor
 - 0 Titrarea probelor
-

327 [30, CUCIOAN Anca Cristin]

Colectarea probelor gazoase se poate face prin

1 Expansiune într-un container ce poate fi ulterior evacuat

1 Spălare

1 Înlocuire cu un lichid

0 Captură cu o eprubetă

0 Compresiune până la transformarea în lichid

329 [31, CUCIOAN Anca Cristin]

Prelevarea probelor din atmosferă este o problemă dificilă datorită

1 Vântului

1 Temperaturii

1 Ploii

0 Altitudinii ridicate

0 Umidității acesteia

331 [32, CUCIOAN Anca Cristin]

Amestecurile de lichide eterogene din punctul de vedere al procedurii utilizat la prelevarea probelor pot fi

0 Bazice

1 Amestecurile de lichide eterogene

1 Suspensii

1 Emulsii

1 Lichid conținând reziduuri solide

335 [33, CUCIOAN Anca Cristin]

Este amestec de lichide nemiscibile

1 Ulei + apă

1 Benzine + apă

0 Produsele petroliere

0 Amoniac + apă

0 Soluția de HCl + soluția de NaOH

337 [34, CUCIOAN Anca Cristin]

Sunt dispozitive de reducere a dimensiunii probelor solide

1 Zdrobitor

1 Tăietor transversal

1 Tăietor paralel

0 Tăietor frontal

0 Circular

340 [35, CUCIOAN Anca Cristin]

O mărime de particule uniformă în vederea prelevării probelor solide se obține folosind

1 Concasoare

1 Pulverizatoare

1 Mori

1 Mojare

0 Strunguri

343 [36, CUCIOAN Anca Cristin]

Operația de uscare a probelor se face în mod uzual prin

1 Încălzire într-o etuvă

1 Ardere la becuri Bunsen

0 Ardere la becuri Tungfram

0 Fierbere la foc mic

0 Întindere pe o suprafață plană

347 [37, CUCIOAN Anca Cristin]

Operația de uscare a probelor se face în mod uzual prin

1 Încălzire într-un cuptor cu muflă

1 Ardere la becuri Meeker

0 Ardere la becuri Tungfram

0 Fierbere la foc mic

0 Întindere pe o suprafață plană

Procese la interfața fazelor: Modelare matematică, Optimizare numerică, Implementare web, cu aplicații în separarea și caracterizarea seriilor de compuși chimici biologic activi

350 [38, CUCIOAN Anca Cristin]

Următoarele dispozitive pot fi folosite pentru uscarea probelor

- 1 Bec de gaz
 - 1 Plită electrică
 - 1 Cuptor de uscare
 - 0 Centrifugă
 - 0 Ibric
-

354 [39, CUCIOAN Anca Cristin]

Întrucât pentru uscare se folosește căldura, este posibil ca în tentativa de uscare a probei

- 0 Să aibă loc accidente de muncă
 - 1 Proba să se descompună
 - 1 Proba să piardă substanțe volatile
 - 0 Proba să se topească
 - 0 Proba să fiarbă
-

356 [40, CUCIOAN Anca Cristin]

Cântărirea cu balanțele tehnice

- 1 Este permisă pentru probe a căror masă depășește 1 Kg
 - 1 Este permisă pentru probe la care precizia cerută este de ordinul gramelor
 - 0 Este totdeauna recomandată
 - 0 Oferă precizia maximă de măsură
 - 0 Nu se utilizează la prelevarea probelor
-

360 [41, CUCIOAN Anca Cristin]

Cântărirea cu balanțele farmaceutice

- 1 Este permisă pentru probe a căror masă depășește 100 g
 - 1 Este permisă pentru probe la care precizia cerută este de ordinul miligramelor
 - 0 Este totdeauna recomandată
 - 0 Oferă precizia maximă de măsură
 - 0 Nu se utilizează la prelevarea probelor
-

363 [42, CUCIOAN Anca Cristin]

Cântărirea cu balanțele analitice

- 1 Este permisă pentru probe a căror masă este mai mică de 100 g
 - 1 Este permisă pentru probe la care precizia cerută este de ordinul zecimilor de miligram
 - 0 Este greoaie datorită sistemului complicat de echilibrare a talerelor
 - 0 Oferă o precizie îndoielnică
 - 0 Nu se utilizează la prelevarea probelor
-

366 [43, CUCIOAN Anca Cristin]

Cântărirea cu balanțele electronice

- 0 Este improprie uzului curent datorită etalonării continue
 - 0 Este permisă pentru probe la care precizia cerută este de ordinul gramelor
 - 1 Permit înregistrarea variațiilor de masă în timp
 - 0 Oferă o precizie limitată
 - 0 Nu se utilizează la prelevarea probelor
-

369 [44, CUCIOAN Anca Cristin]

Nu mai este necesară etapa de dizolvare a probei și se poate utiliza direct proba lichidă sau solidă în analiza cantitativă dacă

- 1 Proba este excitată în arc
 - 1 Proba este excitată în scânteie
 - 0 Timpul nu permite
 - 0 Se folosesc fondanți
 - 0 Se elimină excesul de acid
-

372 [45, CUCIOAN Anca Cristin]

Pentru analiza cantitativă a probelor anorganice (cazul cel mai frecvent în industrie)

- 1 Proba se dizolvă într-un acid
- 1 Proba se topește cu un fondant
- 0 Proba poate fi contaminată

0 Proba se dizolvă cu solvenți organici
0 Proba nu se dizolvă

375 [46, CUCIOAN Anca Cristin]

Utilizarea acizilor la dizolvarea probelor anorganice (cazul cel mai frecvent în industrie) are următoarele situații specifice

1 H₂SO₄ nu trebuie utilizat pentru probe ce conțin Ba
1 HCl nu trebuie utilizat pentru probe ce conțin Ag
0 HNO₃ nu trebuie utilizat pentru probe ce conțin Fe
0 HF nu trebuie utilizat din motive de protecția muncii
0 HBr nu trebuie utilizat din motive de sănătate

379 [47, CUCIOAN Anca Cristin]

Acizii neoxidanți folosiți la dizolvarea probelor anorganice (cazul cel mai frecvent în industrie) sunt

1 HCl
1 H₂SO₄ diluat
1 HClO₄ diluat
0 H₂SO₄ fierbinte concentrat
0 HClO₄ fierbinte concentrat

383 [48, CUCIOAN Anca Cristin]

Acizii oxidanți folosiți la dizolvarea probelor anorganice (cazul cel mai frecvent în industrie) sunt

1 HNO₃
1 H₂SO₄ diluat
1 HClO₄ diluat
0 H₂SO₄ fierbinte concentrat
0 HClO₄ fierbinte concentrat

386 [49, CUCIOAN Anca Cristin]

Sunt folosite următoarele la dizolvarea probelor anorganice (cazul cel mai frecvent în industrie) datorită

1 HClO₄ fierbinte și concentrat – dizolvă toate metalele obișnuite
1 Apa regală (1:3 HNO₃:HCl) – HNO₃ oxidant, HCl complexant, aciditate puternică
1 HNO₃ + HClO₄ – dizolvare foarte energetică
1 HF – descompune rapid probele de silicați
0 Apa de brom (Br₂ + KBr + H₂O) – dizolvă rapid majoritatea elementelor situate după hidrogen în seria activității chimice

388 [50, CUCIOAN Anca Cristin]

Următorii sunt fondanți uzuali

1 Na₂CO₃
1 NaOH și KOH
1 B₂O₃
0 CaF₂
0 KF

393 [51, CUCIOAN Anca Cristin]

Următorii sunt fondanți uzuali

1 Na₂CO₃ + KNO₃
1 Na₂O₂
0 SrCO₃
0 YF₃
0 KF

26 [1, CUCUIET Luminita]

Consumul de energie din mediu se face prin absorbția unui foton, fenomen ce presupune

1 Inregistrarea frecvenței
1 inregistrarea intensității radiației
0 inregistrarea rezonanței emise
0 intensitate electrică
0 nici un răspuns corect

27 [2, CUCUIET Luminita]

Emisia și absorbția de radiație se face cu respectarea condiției de frecvență a lui Bohr

Procese la interfata fazelor: Modelare matematică, Optimizare numerică, Implementare web, cu aplicatii în separarea și caracterizarea seriilor de compuși chimici biologic activi

- 0 $h\nu = \Delta H$
- 0 $h\nu = \Delta S$
- 1 $h\nu = |\Delta E|$
- 1 $h\nu = E_2 - E_1$
- 0 $h\nu = \Delta G$

28 [3, CUCUIET Luminita]

Legea lui Beer pt o radiatie monocromatica de lungime de unda λ este

- 1 $A = Kb[\text{solut}]$
- 0 $A = BhK$
- 1 $A = b[\text{solut}]k$
- 0 $B = AK$
- 0 $A = Bb[\text{solut}]$

29 [4, CUCUIET Luminita]

Emisia și absorbția de radiatie se face cu respectarea conditiei de frecventa a lui Bohr

- 0 $h\nu = \Delta H$
- 0 $h\nu = \Delta S$
- 1 $h\nu = |\Delta E|$
- 0 $h\nu = |E_2 - E_1|$
- 0 $h\nu = \Delta G$

30 [5, CUCUIET Luminita]

În ce se măsoară transmitanța T

- 0 mm
- 0 MJ
- 1 %
- 0 Kmol
- 0 Pa

31 [6, CUCUIET Luminita]

Absorbivitatea și absorbanta depinde de

- 0 Fotometrie
- 1 Realizarea unei maxime locale de absorbție
- 0 temperatura
- 0 rezonanță
- 1 lungimea de undă a radiatiei incidente

32 [7, CUCUIET Luminita]

Momentul de inerție I este în raport cu

- 0 atomi interstitali
- 1 energia acumulată de molecule
- 0 relația spin-spin
- 1 axa de rotație
- 0 nici un răspuns corect

33 [8, CUCUIET Luminita]

Spectroscopia de rotație furnizează informații despre

- 1 lungimea legăturilor
- 0 frecvența legăturilor
- 0 concentrația substanței
- 0 puterea radiației
- 1 unghiurile dintre legături

34 [9, CUCUIET Luminita]

Dacă spectrul se înregistrează în corp electric când molecula capătă o orientare dată de axa de dipole electric

- 1 se reduce nr de rotații posibile
- 0 se reduce nr de atomi
- 0 apar neutroni
- 1 apare scindarea stărilor energetice
- 0 nici un răspuns corect

35 [10, CUCUIET Luminita]

Regula de selectie pt observarea unui spectru de rotatie pura este

0 regula lui Bohr

1 ca molecula sa aiba un moment electric de dipol permanent

0 regula lui Beer

0 molecula sa fie magnetica

0 nici un raspuns corect

36 [11, CUCUIET Luminita]

Momentul dipol indus μ^* suplimentar fata de orice dipole permanent este dat de

1 $\mu^* = E \alpha$

0 $\mu^* = CE$

1 $\mu^* = \alpha E$

0 $\mu^* = \alpha c$

0 $\mu^* = \alpha C$

37 [12, CUCUIET Luminita]

In intensitatea totala a tranzitiei ν reprezinta

1 moment de dipol electric permanent al moleculei

0 constanta de distorsiune

0 constanta lui Boltzman

0 taria momentului de dipol

0 energia moleculei

38 [13, CUCUIET Luminita]

Forma spectrului Raman este diferita de cea a spectrului pura prin

0 polarizarea moleculelor

1 radiatia imprastiata

1 starea de rotatie superioara a moleculelor

1 tranzitiile ce scad nr de unda al radiatei incidente

0 toate raspunsurile adevarate

39 [14, CUCUIET Luminita]

Forma spectrului Raman e caracterizata prin

0 regula Beer

1 liniile Stokes

0 regula Bohr

1 regula anti- Stokes

0 regula Boltzman

40 [15, CUCUIET Luminita]

Semnificatia masei reduce μ este urmatoarea

1 atomii usori oscileaza cu o amplitudine mai mare

1 fiecare atom oscileaza in functie de masa pe care o are

1 atomii grei oscileaza cu o amplitudine mai mica

0 oscileaza la fel

0 nici un raspuns correct

41 [16, CUCUIET Luminita]

Funcția de nivel energetic dintr-o molecula diatomica depinde de urmatoarele nr atomice

0 miscarea de translatie T

1 miscarea de vibratie ν

0 miscarea longitudinala

1 miscarea de rotatie j

0 miscarea cilindrica

42 [17, CUCUIET Luminita]

16 Care sunt modurile de vibratie in moleculele poliatomice

1 se pot intinde legaturile

0 se mareste nr atomilor

1 se pot deforma unghiurile

0 cresc electronii

0 nici un raspuns correct

Procese la interfata fazelor: Modelare matematică, Optimizare numerică, Implementare web, cu aplicatii în separarea și caracterizarea seriilor de compuși chimici biologic activi

43 [18, CUCUIET Luminita]

Care din urmatoarele molecule sunt rotori sferici

1 CH₄

1 SiH₄

0 Azot

1 SF₆

0 Sulf

44 [19, CUCUIET Luminita]

In urma efectuării spectrelor Raman se pot obtine informatii ca

1 lungimi de legatura

1 constanta de forta

0 unghiuri constante

1 energii de disociere

0 toate raspunsurile adevarate

45 [20, CUCUIET Luminita]

O molecula liniara cu N atomi este caracterizata in spatiu prin 3N coordonate

0 liniare

1 carteziene

1 cilindrice

0 polare

1 sferice

46 [21, CUCUIET Luminita]

Linile de frecventa mare, linia anti-Stokes sunt cele pt care

0 $\Delta S = -1$

1 $\Delta V = -1$

0 $\Delta E = -1$

0 $\Delta J = -1$

0 toate raspunsurile adevarate

47 [22, CUCUIET Luminita]

Care sunt procedeele experimentale pt observarea tranzitiilor electronice

1 emisia atomica

0 radiatia atomica

1 fluorescenta atomica

1 absorbtia atomica

0 vibratie atomica

48 [23, CUCUIET Luminita]

Ce se poate observa la momentul de dipol electric care variaza in timpul deplasarilor atomilor

1 nu e necesar ca moleculele sa prezinte dipol permanent

1 unele vibratii nu afecteaza momentul de dipol al moleculei

1 e necesara vibratia acestui moment de dipole

0 e necesara molecula diatomica

0 toate raspunsurile adevarate

49 [24, CUCUIET Luminita]

Daca K are semnificatia de constanta de forta a legaturilor si este mai mare, atunci

0 conduce la oscilatii armonice

1 legatura este mai rigida

0 legatura este slaba

1 ramurile parabolei sunt mai abrupte

0 ramurile parabolei sunt drepte

50 [25, CUCUIET Luminita]

Care din urmatoarele molecule sunt rotori asimetrici

1 H₂O

1 H₂CO

0 oxigen

1 H3COH
0 Bor

51 [26, CUCUIET Luminita]

Pt ce rotori, aplicand un camp electric starea de polarizare a moleculelor se schimba

1 rotori liniari
1 rotori simetrici
0 rotori cilindrici
0 rotori sferici
0 rotori axiali

328 [27, CUCUIET Luminita]

În medicină analizele chimice

1 În trecut se efectuau cu precădere doar analizele calitative
1 Rezultatele analizelor servesc la precizarea diagnosticelor
1 Pentru stabilirea diagnosticelor este nevoie de o serie de analize cantitative
0 Joacă un rol secundar în stabilirea diagnosticului
1 Probele se recoltează din corpul omenesc

333 [28, CUCUIET Luminita]

Analizele chimice cantitative în medicină includ determinarea

1 Glucozei și proteinelor
1 Ureei și acidului uric
1 Sodiului și calciului
1 pH-ului
0 Aspirinei

336 [29, CUCUIET Luminita]

Știința mediului înconjurător se ocupă cu schimbările care au loc în mediu și sunt de natură

1 Chimică
1 Fizică
1 Biologică
0 Geografică
0 Geologică

339 [30, CUCUIET Luminita]

Știința mediului înconjurător studiază contaminarea

1 Aerului
1 Apei
1 Produselor alimentare
0 Produselor cosmetice
1 Solului

344 [31, CUCUIET Luminita]

Analiza modificărilor de natură fizică și biologică aduse mediului servesc la stabilirea

1 Măsurii în care transformările au fost provocate de oameni
0 Măsurii în care transformările au fost provocate de inundații
0 Măsurii în care transformările au fost provocate de incendii
1 Măsurii în care aplicarea științei poate ameliora calitatea mediului înconjurător
1 Măsurii în care aplicarea tehnologiei poate ameliora calitatea mediului înconjurător

348 [32, CUCUIET Luminita]

Suspensiile aflate în aer

1 Sunt aproximativ 25% de origine naturală
0 Sunt aproximativ 50% de origine naturală
0 Sunt aproximativ 75% de origine naturală
1 Procentajul exact variază în funcție de regiunea din care se iau probele
0 Procentajul exact variază în funcție de ora din zi la care se iau probele

352 [33, CUCUIET Luminita]

În aer există următoarele particule poluante de la operațiile de ardere în cuptoare

1 Var
1 Calcar

Procese la interfata fazelor: Modelare matematică, Optimizare numerică, Implementare web, cu aplicatii în separarea și caracterizarea seriilor de compusi chimici biologic activi

1 Praf de ciment
0 Monoxid de carbon
0 Cobalt

358 [34, CUCUIET Luminita]

În aer există următoarele particule poluante de la operațiile de cocsificare

1 Cocs
0 Fier
1 Hidrocarburi policiclice aromatice
0 Titan
0 Cianuri

361 [35, CUCUIET Luminita]

În aer există următoarele particule poluante de la topirea minereurilor și procesele metalurgice

1 Oxizi de fier
1 Fluoruri
0 Dioxid de carbon
0 Hidroxid de sodiu
0 Nichel

364 [36, CUCUIET Luminita]

Următorii sunt poluanți organici tipici ai apelor reziduale industriale din domeniul mine, uzine de preparare a minereurilor

1 Humus
1 Praf de cărbune
1 Agenți de flotație
0 Agenți de umectare
0 Detergenți

368 [37, CUCUIET Luminita]

Următorii sunt poluanți organici tipici ai apelor reziduale industriale din turnătorii

1 Cianuri
1 Fenoli
1 Gudroane
1 Praf de cărbune
0 Emulsii de uleiuri

371 [38, CUCUIET Luminita]

Următorii sunt poluanți organici tipici ai apelor reziduale industriale din prelucrarea fontei și a oțelurilor

1 Agenți e umectare
1 Lubrifianți
1 Cianuri
1 Inhibitori
0 Humus

378 [39, CUCUIET Luminita]

Următorii sunt poluanți organici tipici ai apelor reziduale industriale din prelucrarea cărbunilor și cocserii

1 Humus
1 Praf de cărbune
1 Cianuri
1 Rodanine
0 Acizi grași

382 [40, CUCUIET Luminita]

Următorii sunt poluanți organici tipici ai apelor reziduale industriale din producția de cărbune lemn

1 Acizi grași
1 Alcoolii
1 Metanol
1 Fenoli
0 Piridine bazice

384 [41, CUCUIET Luminita]

Următorii sunt poluanți organici tipici ai apelor reziduale industriale din industria petrolieră

1 Emulsii de uleiuri
1 Acizi naftenici
1 Sulfonați
0 Acizi grași
0 Fenoli

387 [42, CUCUIET Luminita]

Următorii sunt poluanți organici tipici ai apelor reziduale industriale din fabricarea hârtiei

1 Metanol
1 Hidrați de carbon solubili
0 Emulsii de uleiuri
1 Semiceluloze alcaline
0 Detergenți

391 [43, CUCUIET Luminita]

Următorii sunt poluanți organici tipici ai apelor reziduale industriale din industria hârtiei

1 Polizaharide
1 Acizi rezinici
0 Cianuri
0 Gudroane
0 Enzime

397 [44, CUCUIET Luminita]

Următorii sunt poluanți organici tipici ai apelor reziduale industriale din industria textilă

1 Agenți de degresare
1 Agenți de umectare
1 Agenți de nivelare
1 Agenți de înclieiere
0 Agenți de flotație

400 [45, CUCUIET Luminita]

Următorii sunt poluanți organici tipici ai apelor reziduale industriale din spălătorii

1 Sânge
1 Cafea
1 Cacao
1 Coloranți
0 Humus

403 [46, CUCUIET Luminita]

Următorii sunt poluanți organici tipici ai apelor reziduale industriale din industria pielăriei și tanașilor

1 Produși de degradare a proteinelor
1 Săpunuri
1 Păr
0 Compuși vegetali solubili
0 Semiceluloze alcaline

406 [47, CUCUIET Luminita]

Următorii sunt poluanți organici tipici ai apelor reziduale industriale din rafinăriile de zahăr

1 Zahăr
1 Acizi vegetali
1 Betaină
1 Pectină
0 alcool

409 [48, CUCUIET Luminita]

Următorii sunt poluanți organici tipici ai apelor reziduale industriale din fabricile de amidon

1 Pectină
1 Hidrați de carbon
0 Acizi grași
0 Metanol
0 Lactoză

Procese la interfața fazelor: Modelare matematică, Optimizare numerică, Implementare web, cu aplicații în separarea și caracterizarea seriilor de compuși chimici biologic activi

413 [49, CUCUIET Luminita]

Următorii sunt poluanți organici tipici ai apelor reziduale industriale din fabricile de lactate

1 Lactoză și acid lactic

1 Agenți de spălare și clătire

0 Agenți de degresare și umectare

0 Agenți de tanare și nivelare

0 Acizi grași și aminoacizi

416 [50, CUCUIET Luminita]

Următorii sunt poluanți organici tipici ai apelor reziduale industriale din industria săpunurilor și grăsimilor

1 Glicerină

1 Acizi grași

1 Emulsii de grăsimi

0 Sânge

0 Proteine

419 [51, CUCUIET Luminita]

Următorii sunt poluanți organici tipici ai apelor reziduale industriale din fabricile de conserve

1 Componenti vegetali solubili

0 Metanol

0 Cloroform

0 Detergenți

0 Polizaharide

422 [52, CUCUIET Luminita]

Următorii sunt poluanți organici tipici ai apelor reziduale industriale din fabricile de bere

1 Componenti vegetali solubili

1 Reziduuri de bere

1 Agenți de clătire

0 Betaină

0 Pectină

682 [1, DALI Adriana]

Tehnica cromatografică se numeste:

1 cea mai răspândită;

0 derivatizare

1 prima dintre metodele de analiză;

0 analiza aromelor

0 igiena și criminalistica

683 [2, DALI Adriana]

Compuții amestecului supus separării pot fi:

0 detectori

0 compuși volatili

1 gaze

1 lichide

1 solide volatile

684 [3, DALI Adriana]

Unde se introduc substanțele de analizat?

0 cilindru

1 coloana de separare

0 etuvă

0 seringă

0 septum

685 [4, DALI Adriana]

Cum se numește procedeul care utilizează anumite reacții chimice specifice cu compușii noi?

0 reactivitate

0 etuvă

0 detector

0 volatilizare directă

1 derivatizare

686 [5, DALI Adriana]

Avantajele principale ale procedului de derivatizare sunt:

- 1 sensibilitate
 - 1 analiză nouă
 - 0 programe de temperatură
 - 1 posibilitatea de automatizare
 - 1 posibilități de aplicare
-

687 [6, DALI Adriana]

Domeniile în care GC ȳ-a cucerit un loc de prim rang sunt:

- 0 industria energetică
 - 1 petrochimică
 - 1 industria farmaceutică
 - 1 protecția mediului
 - 1 igiena ȳi criminalistica
-

688 [7, DALI Adriana]

Ce gaz purtător se folosește în cromatograful cu gaz?

- 0 carbon
 - 1 hidrogen
 - 0 cupru
 - 1 heliu
 - 0 oxigen
-

689 [8, DALI Adriana]

Din ce e formată "schema de principiu a unui cromatograf de gaze"?

- 1 etuvă-termostat
 - 1 coloană
 - 1 reductor
 - 0 septum
 - 1 cilindru sub presiune
-

690 [9, DALI Adriana]

Cu ce este dotată o etuvă?

- 1 ventilator
 - 0 cilindru
 - 0 coloană
 - 0 reductor
 - 1 dispozitiv electric de încălzit
-

691 [10, DALI Adriana]

Faza mobilă în această tehnică este un gaz:

- 1 hidrogen
 - 1 heliu
 - 1 azot
 - 1 argon
 - 0 sulf
-

692 [11, DALI Adriana]

Gazul nu trebuie să conțină:

- 1 oxigen
 - 0 carbon
 - 0 hidrogen
 - 1 dioxid de carbon
 - 1 apă
-

693 [12, DALI Adriana]

În faza mobilă se mai intercalează filtre cu dublu rol care sunt:

- 0 bazată pe fotoionizate
- 0 detectori universali
- 1 uscare

Procese la interfata fazelor: Modelare matematică, Optimizare numerică, Implementare web, cu aplicatii în separarea și caracterizarea seriilor de compuși chimici biologic activi

1 reducerea oxigenului
0 volatizare directă

694 [13, DALI Adriana]

Pe ce ecuație se stabilește viteza optimă:

0 Dixon
0 Boltzmann
1 Van Deemter
0 Miller
0 Ohm

695 [14, DALI Adriana]

Cu ce se reglează presiunea de la capătul coloanei?

0 uscare
0 reducerea oxigenului
1 regulator de presiune
0 detector
1 ventil

696 [15, DALI Adriana]

Cum se numesc detectorii din cromatograf?

1 specifici
1 universali
0 separabili
0 driflul
0 zgomot

697 [16, DALI Adriana]

Cei mai utilizați detectori în practica curentă sunt:

1 detectorul bazat pe conductibilitate termică
1 detectorul cu ionizare în flacără
1 detectorul cu fotoionizare
1 detectorul cu captură de electroni
0 detectori specifici

698 [17, DALI Adriana]

Din ce mărimi fizice este caracterizat un detector?

0 absorbție
1 specificitate
1 sensibilitate
1 zgomot de fond
1 drift

699 [18, DALI Adriana]

Reactivitatea include și posibilitatea reșinerii de componente ale probei sau provenite din:

1 prin degradare
0 detectori
1 prin absorbție
0 cu captură de electroni
1 prin reacții chimice

700 [19, DALI Adriana]

Gazul purtător provenit din coloană, se diluează cu:

0 sulf
1 hidrogen
1 aerul necesar
1 cu un alt gaz inert
0 neon

701 [20, DALI Adriana]

Catarametrul este de astfel singurul detector capabil să analizeze gazele permanente care sunt:

1 azot
1 oxigen

0 argon
0 nichel
1 dioxid de carbon

702 [21, DALI Adriana]

Catarometrul a rămas detectorul cel mai utilizat deoarece este:

1 simplu
1 nedistructiv
0 complex
1 universal
0 distructiv

703 [22, DALI Adriana]

In orice cromatograf trebuie să existe cel puțin un:

0 punte Wheatstone
0 driful
0 gaz
0 aer
1 detector universal

704 [23, DALI Adriana]

Gazul purtător la pătrunderea în detector este:

0 ionizare cu flacără
0 captură de electroni
1 este ionizat de către o sursă radioactivă
0 bazași pe fotoionizare
0 reactivitate

705 [24, DALI Adriana]

Lampile UV pot furniza o selectivitate suplimentară peste:

0 7.3eV
1 10.6eV
0 1.2eV
0 15eV
0 3.5eV

706 [25, DALI Adriana]

Volumul celulelor diferă, fiind cuprinse între:

0 200
0 150
0 1
1 2.5-100
0 0.01-1.5

96 [1, DUCA Danuta]

Separarea prin precipitare se bazează pe

1 diferențele între stabilitățile precipitatelor
0 legăturile dintre precipitate
0 creșterea temperaturii
0 creșterea volumului
0 nimic

98 [2, DUCA Danuta]

Reacțiile de precipitare sunt cantitative

1 da, dar nu toate
0 nu
0 dacă nu au oxizi în precipitat
0 dacă se măsoară masa substanței
0 niciodată

100 [3, DUCA Danuta]

Solubilitatea PbCl₂ crește foarte mult datorită

0 cantității de Cl din soluție

Procese la interfata fazelor: Modelare matematică, Optimizare numerică, Implementare web, cu aplicatii în separarea și caracterizarea seriilor de compuși chimici biologic activi

- 1 cresterii temperaturii
 - 0 cresterii presiunii
 - 0 separarii prin precipitarea
 - 0 nu creste
-

102 [4, DUCA Danuta]

- Principalul scop al precipitarii
- 0 eliminarea surplusului de substanta
 - 1 purificarea
 - 0 filtrarea
 - 0 cintarirea
 - 0 nici unul
-

104 [5, DUCA Danuta]

- Gravimetria este
- 1 metoda de analiza cantitativa
 - 1 masurarea masei unui precipitat
 - 0 determinarea masei cu balanta analitica
 - 0 o analiza de precipitare
 - 0 baza fizicii
-

106 [6, DUCA Danuta]

- Separarea precipitatului prin filtrare, spalarea si uscarea lui sunt
- 0 etape a precipitarii substantelor
 - 1 etape experimentale a analizei gravimetrice
 - 0 metode de precipitare
 - 0 metode de neutralizare
 - 0 metode ale fizicii
-

107 [7, DUCA Danuta]

- Procedeele electrogravimetrice se bazeaza pe o r. electrochimica
- 1 intr-o celula de electroliza care contine solutia probei
 - 1 prin reglarea curentului si a potentialului
 - 0 prin reprezentarea p/t
 - 0 prin parametrii r. chimice
 - 0 nu
-

108 [8, DUCA Danuta]

- Degajarea de gaze
- 0 inregistreaza cresterea presiunii
 - 1 este folosita de gravimetrie
 - 0 este o metoda a precipitarii
 - 0 are loc numai la neutralizare
 - 0 nu are importanta
-

109 [9, DUCA Danuta]

- O reactie de neutralizare stoechiometrica
- 1 implica trecerea de la o solutie acida la una bazica
 - 0 neutralizeaza apa
 - 0 este o reactie cu caracter basic
 - 0 este o reactie cu caracter acid
 - 0 nici un raspuns
-

110 [10, DUCA Danuta]

- Cu ajutorul curbei de titrare este posibil sa se determine
- 1 volumul acidului tare
 - 1 volumul bazei tari
 - 1 volumul de titrant
 - 0 volumul de apa
 - 0 nimic
-

111 [11, DUCA Danuta]

- NH₃ este

1 o baza slaba tipica
0 un precipitat
0 o analiza radioactive
0 o metoda analitica
0 un raspuns

112 [12, DUCA Danuta]
Indicarea punctului de salt de pH
0 se observa din diagrama Fe-C
0 nu este la chimie
0 e o functie de stare
1 corespunde echilibrului stoechiometric
0 nu exista

113 [13, DUCA Danuta]
Indicatorii de culoare
1 se folosesc pentru indicarea punctului de salt pH
0 sunt numai in amidon
0 sunt clasificati in trei mari categorii
0 au proprietatea ca intr-un anumit domeniu de pH isi schimba culoarea
0 nu exista

114 [14, DUCA Danuta]
Indicatori de culoare sunt
1 albastru de timol
1 dinitrofenol
1 rosu de congo
1 rosu de cresol
0 verde de alizarina

115 [15, DUCA Danuta]
Fenolftaleina este
0 o valoare a pH-lui
1 indicator de culoare bazat pe pH
0 indicator al prezentei H³
0 nedeterminabila
0 solida

116 [16, DUCA Danuta]
Un exemplu tipic de titrare de oxido-reducere este
0 Fe cu apa
0 Fe cu gaze
0 Fe cu H₂O
1 titrarea Fe (II) cu Cl (IV)
0 apa cu aer

117 [17, DUCA Danuta]
Metoda ce permite separarea de compusi foarte asemanatori din amestecuri complexe este
0 precipitarea
0 electrogravimetria
1 cromatografia
0 distilarea
0 nici una

118 [18, DUCA Danuta]
Metoda cromatografica a folosit intii separarea
1 unor substante colorate pe coloane
0 solidelor de gazoase
0 lichidelor de gazoase
0 pulberilor din gazelle de ardere
0 de Newton

Procese la interfata fazelor: Modelare matematică, Optimizare numerică, Implementare web, cu aplicatii în separarea și caracterizarea seriilor de compuși chimici biologic activi

119 [19, DUCA Danuta]

- Un pas essential in analiza chimica
 - 0 folosirea cuptorului cu microunde
 - 0 incalzirea precipitatului la 30 grade
 - 0 utilizarea unei lampe de gaz
 - 1 separarea compusului de analizat de potentialele interferente
 - 0 nici unul
-

120 [20, DUCA Danuta]

- Aplicatiile cromatografiei cresc exponential cu
 - 1 timpul
 - 0 presiunea
 - 0 temperature
 - 0 presiunea si temperature
 - 0 nu cresc
-

121 [21, DUCA Danuta]

- 0 cromatograma furnizeaza
 - 1 timpul de retentie al speciilor
 - 1 pozitiile speciilor pe faza stationara
 - 1 concentratiile speciilor
 - 0 orice valori legate de specii
 - 0 masa speciilor
-

122 [22, DUCA Danuta]

- Cromatografia poate fi extrem de utila pentru recunoasterea
 - 1 prezentei unor componentii in amestec
 - 1 absentei unor componentii in amestec
 - 0 componentei apei in zahar
 - 0 componentilor aerului
 - 0 fizica
-

123 [23, DUCA Danuta]

- Cromatografia are o larga folosinta
 - 0 in industria alimentara
 - 0 in formarea reactiilor chimice
 - 0 in grupele de atomi interstitiari
 - 0 pentru hidrocarburi
 - 1 pentru informatia cantitativa
-

124 [24, DUCA Danuta]

- Compararea mai multor inaltime sau suprafete ale picurilor analitici cu etaloane, sta la baza
 - 1 cromatografiei
 - 0 rezonantei electrice
 - 0 radiatiilor X
 - 0 determinariisuprafetelor metalelor
 - 0 fizica
-

125 [25, DUCA Danuta]

- Analiza bazata pe aria picurilor
 - 1 este independenta de efectele de deformare
 - 1 este mult mai precisa
 - 0 este dezavantajoasa
 - 0 este superficiala
 - 0 nu exista
-

772 [1, FRINCU Laura]

- Dupa obtinerea probei, analiza se va efectua :
- 1 dupa ce aceasta a fost uscata;
- 0 dupa ce aceasta a fost introdusa in apa
- 0 dupa ce aceasta a fost sulfurata
- 0 dupa ce aceasta a fost pusa la calcinare
- 0 dupa ce aceasta a fost deshidratata

791 [2, FRINCU Laura]

Ce ce se folosesc pentru cantarirea probei uscate??

- 0 etuve
 - 0 cuptoare
 - 1 balante;
 - 0 cantare
 - 0 eprubete
-

792 [3, FRINCU Laura]

Care este urmatoarea etapa dupa cantarirea probei??

- 0 extragerea substantelor usor volatile
 - 0 adaugarea de acid azotic
 - 1 dizolvarea;
 - 0 aruncarea probei
 - 0 introducerea unor fondanti
-

793 [4, FRINCU Laura]

Ce formeaza proba daca se hidrolizeaza lent in apa?

- 0 compusi solubili
 - 0 gaze
 - 0 substante volatile
 - 0 vapori
 - 1 compusi insolubili;
-

794 [5, FRINCU Laura]

Unde nu trebuie utilizat acidul sulfuric?

- 1 in probele ce contin bariu;
 - 0 in probele ce contin apa
 - 0 in probele ce contin argint
 - 0 in probele ce contin HCl
 - 0 in probele ce contin saruri de Ag
-

795 [6, FRINCU Laura]

Pe ce se bazeaza dizolvarea metalelor prin intermediul acizilor neoxidanti??

- 0 pe capacitatea metalelor de a inlocui Fe
 - 1 pe ce capacitatea metalelor de a inlocui H;
 - 0 pe ce capacitatea metalelor de a inlocui Fe
 - 0 pe ce capacitatea metalelor de a inlocui Zn
 - 0 pe ce capacitatea metalelor de a inlocui Ag
-

796 [7, FRINCU Laura]

Datorita carui fapt majoritatea probelor solide contin cantitati variabile de apa??

- 1 pentru ca proba este hidrosopica;
 - 0 pentru ca se efectueaza usor reactia de ardere
 - 1 pentru ca apa este initial absorbita la suprafata si se pierde control;
 - 0 pentru ca se efectueaza uscarea probei
 - 0 pentru ca probele au fisuri
-

797 [8, FRINCU Laura]

Ce se poate intampla cu proba daca in tentativa de uscare se foloseste caldura?

- 1 proba se poate descompune;
 - 1 poate sa piarda substante volatile;
 - 0 proba sa se transforme in lichid
 - 0 sa piarda din masa
 - 0 pot sa iasa vapori
-

996 [9, FRINCU Laura]

Ce se utilizeaza pentru dizolvare daca se cere sa fie analizata partea organica a amestecului din proba prelevata?

- 1 solventi organici;
- 0 solventi anorganici
- 0 acid azotic

Procese la interfata fazelor: Modelare matematică, Optimizare numerică, Implementare web, cu aplicatii în separarea și caracterizarea seriilor de compuși chimici biologici activi

0 apa

1 tehnologii specifice chimiei anorganice;

997 [10, FRINCU Laura]

Cum se dizolva probele anorganice?

1 intr-un acid;

1 se topește cu un fondant;

0 intr-o baza

0 cu apa

0 cu solvenți organici

998 [11, FRINCU Laura]

Unde nu trebuie utilizat HCl?

1 in probe ce conțin Ag;

0 in probe ce conțin HCl

1 in probe ce conțin Ag sau saruri de Ag;

0 in probe ce conțin Pb

0 in probe ce conțin Ba

999 [12, FRINCU Laura]

Cand se obțin cele mai puternice condiții de oxidare?

1 la utilizarea HClO₄ fierbinte;

1 la utilizarea HClO₄ concentrat;

0 cand se amesteca cu H₂O

0 cand sunt supra incalzite

0 cand se amesteca cu acizi

1000 [13, FRINCU Laura]

Cum se face operatia de uscare in mod uzual?

0 punera ei la soare

0 prin adaugare excesiva de substante usor volatile

1 prin incalzire intr-o etuva;

1 intr-un cuptor cu mufla;

1 prin ardere la becuri Bunsen sau Meeker;

1001 [14, FRINCU Laura]

De ce sunt dizolvate materialele organice in mod obisnuit?

0 de cuptoare cu mufla

1 de solvenți organici;

1 mixturi de solvenți organici;

1 apa;

0 de etuve

1002 [15, FRINCU Laura]

Care sunt acizi neoxidanti folositi la dizolvarea probei?

1 HCl;

1 H₂SO₄ diluat;

1 HClO₄ diluat;

0 H₂O

0 Al

1003 [16, FRINCU Laura]

Ce acizi oxidanti se folosesc la dizolvarea probei?

1 HNO₃;

1 H₂SO₄ fierbinte concentrat;

1 HClO₄ fierbinte concentrat;

0 H₂SO₄ diluat

0 H₂O

1004 [17, FRINCU Laura]

Care substante pot exista in stare supraceutica chiar in conditii apropiate de temperatura mediului ambiant?

1 CO₂;

1 N₂O;

1 CHCl₃;
0 H₂O
0 HCl

1005 [18, FRINCU Laura]

Ce probleme apar legate de luarea probei in vederea monitorizarii instrumentale?

0 forma statiei de monitorizare
0 riscul de incendiu
1 localizarea monitorului fata de obiectivul monitorizarii;
1 pozitia intrari in monitor;
1 alegerea dispozitivului de prelevare;

1006 [19, FRINCU Laura]

De cate tipuri pot fi balantele?

1 balante tehnice;
0 balante cu becuri Bunser sau Meeker
1 balante farmaceutice;
1 balante analitice;
1 balante electronice;

1007 [20, FRINCU Laura]

Ce substante se utilizeaza in ultimul timp in calitate de fondanti?

0 apa
1 boraxul calcinat;
1 piro-sulfatul de potasiu;
1 tetraboratul de litiu;
1 trioxidul de dibor;

1008 [21, FRINCU Laura]

Care sunt cele patru posibilitati care pot modifica selectivitatea fluidului supracritic?

1 presiunea;
1 temperatura;
1 durata;
0 volumul
1 alegerea unor modifcatori;

1009 [22, FRINCU Laura]

De ce factori depinde localizarea monitorului?

1 reglementarile autoritatilor locale;
1 accesibilitatea instrumentului intretinere;
1 existenta unu sistem de servicii;
0 stabilirea formei si marimii
1 tipul de apa ce monitorizeaza instrumentul;

1010 [23, FRINCU Laura]

De ce trebuie sa se tina cont in cazul rezultatelor analizelor de aer?

1 de directia si viteza vantului;
1 de gradientul vertical de temperatura;
1 de topografia locului;
1 de turbulenta sau precipitatiile prezente;
0 de pozitia intrarii aerului in analizatoir

1011 [24, FRINCU Laura]

Ce substante se includ in analizele de aer?

1 dioxidul de sulf;
1 dioxidul de carbon;
0 apa
1 hidrogenul sulfurat;
1 acidul fluorhidric;

1012 [25, FRINCU Laura]

La ce distanta trebuie sa se gaseasca locul de prelevare(gura)in vederea monitorizarii instrumentale?

1 la o distanta de 25m de monitor;

Procese la interfata fazelor: Modelare matematică, Optimizare numerică, Implementare web, cu aplicatii în separarea și caracterizarea seriilor de compuși chimici biologic activi

- 0 la o distanta de 45m de monitor
 - 0 la o distanta de 15m de monitor
 - 0 la o distanta de 35m de monitor
 - 0 la o distanta de 27m de monitor
-

709 [1, GABOR Izabella]

Pe ce se bazează fenomenul de conducție a curentului electric prin soluții?

- 1 electroliti;
 - 0 temperatura
 - 1 ioni;
 - 0 presiune
 - 0 nici un răspuns nu este corect
-

911 [2, GABOR Izabella]

Care lege respectă conducția?

- 1 legea lui Ohm;
 - 0 legea lui Arhimede
 - 0 legea lui Kirchoff
 - 0 legea lui Joule
 - 0 legea lui Gauss
-

912 [3, GABOR Izabella]

Ce sunt electroliti in conducție?

- 0 conductori de ordinul 0
 - 0 conductori de ordinul 1
 - 1 conductori de ordinul 2;
 - 0 conductori de ordinul 3
 - 0 conductori de ordinul 4
-

913 [4, GABOR Izabella]

Cum se poate scrie legea lui Ohm?

- 1 $U=i \cdot r$;
 - 1 $I=u \cdot l/r$;
 - 0 $R=u \cdot i$
 - 0 $I=r \cdot u$
 - 0 toate sunt corecte
-

914 [5, GABOR Izabella]

Rezistența unui conductor de secțiune este data de relația:

- 1 $R=\rho \cdot l/s$;
 - 0 $R=l \cdot H$
 - 0 $R=A \cdot l$
 - 0 $R=V \cdot l$
 - 0 nici un răspuns nu este corect
-

915 [6, GABOR Izabella]

Din ce sunt confecționați electrozii?

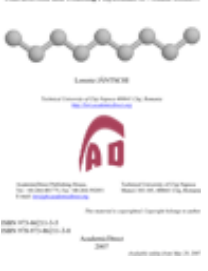
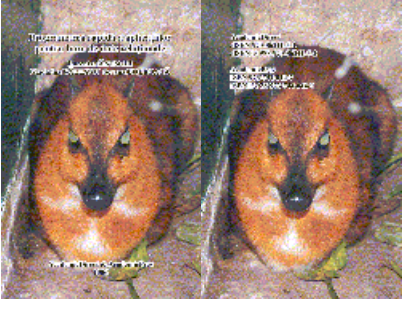
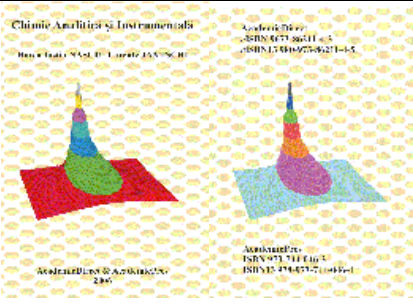
- 0 plastic
 - 0 lemn
 - 1 platină acoperită cu negru de platină;
 - 1 argint;
 - 1 oțel inoxidabil;
-

Lorentz JÄNTSCHI (principal investigator) & Sorana D. BOLBOACĂ (co-investigator)

Activități și rezultate. Etapa III(2008). Obiectivul 4(Promovarea rezultatelor). Activitatea 7(Elaborarea de publicații științifice).

Publicații științifice s-au elaborat pe întreg parcursul proiectului. În continuare este redată lista cronologică a acestora grupate pe capitole: Cărți, Conferințe și Articole.

Cărți.

	Lorentz JÄNTSCHI, <i>Characteristic and Counting Polynomials of Nonane Isomers</i> , AcademicDirect, ISBN 973-86211-3-5 & ISBN 980-973-86211-3-8, www, Internet, p. 101, 2007.
	Lorentz JÄNTSCHI, Mădălina Ana VĂLEANU, Sorana Daniela BOLBOACĂ, <i>Rapid Programming of Relational Databases Applications (in Romanian)</i> , AcademicDirect & AcademicPres, ISBN: 973-86211-5-1 & 978-973-86211-5-2 (AcademicDirect) & ISBN 973-744-044-7 & 978-973-744-044-0 (AcademicPres), www & Cluj-Napoca, Internet & Romania, 233 p., 2006.
	Horea Iustin NAȘCU, Lorentz JÄNTSCHI, <i>Instrumental and Analytical Chemistry (in Romanian)</i> , AcademicDirect & AcademicPres, ISBN 973-86211-4-3 & 978-973-86211-4-5 (AcademicDirect) & ISBN 973-744-046-3 & 978-973-744-046-4 (AcademicPres), www & Cluj-Napoca, Internet & Romania, 320 p., 2006.

Conferințe

1. Sorana D. BOLBOACĂ, Monica M. MARTA, Lorentz JÄNTSCHI, *Computer-Assisted Instruction in Evidence-Based Medicine: A Pilot Study - oral presentation, HSI'08: Conference on Human System Interaction, University of Information Technology and Management in Rzeszow, R1-S5: HUMAN SYSTEM INTERACTION IN EDUCATION, May 25-27 2008, Krakow, Poland, May 25-27 2008, 11.20-11.35, 2008.*

[getCITED](#)

Record => 2008:05:30:13:27:24 (Creation), 2008:05:30:13:27:24 (Last update)

File => 479.4 KBytes, application/pdf, [work_list.php?user=lori&id=181](#)

Subject(s) => [education - management, education - methodology, education - training, medicine - evidence based]

-
2. Lorentz JÄNTSCHI, Sorana D. BOLBOACĂ, Monica M. MARTA, Alexandru LASZLO, *E-Learning and E-Evaluation: A Case Study - oral presentation, IEEE HSI'08:*

Conference on Human System Interaction, University of Information Technology and Management in Rzeszow, R1-S5: HUMAN SYSTEM INTERACTION IN EDUCATION, May 25-27 2008, Krakow, Poland, May 26 2008 11.00-11.15, 2008.

[getCITED](#)

Record => 2008:05:30:13:24:21 (Creation), 2008:05:30:13:24:21 (Last update)

File => 932.6 KBytes, application/pdf, [work_list.php?user=lori&id=180](#)

Subject(s) => [chemistry - general, education - evaluation, education - management, education - training]

3. **Mugur BĂLAN, Lorentz JĂNTSCHI**, *On-Line Solar Radiation Monitoring System, in Cluj-Napoca, Romania, Workshop on Energy Conservation and Sustainable Energy, Technical Assistance and Information Exchange Instrument of the Institution Building unit of Directorate-General Enlargement of the European Commission, TAIEX event RTP 25832, February 13-14 2008, Cluj-Napoca, Romania, Invited Plenary Lecture, 2008.*

[getCITED](#)

Record => 2008:03:07:16:27:18 (Creation), 2008:03:07:16:27:18 (Last update)

File => 313.4 KBytes, application/pdf, [work_list.php?user=lori&id=175](#)

Subject(s) => [engineering - agriculture, informatics - applied, informatics - models implementation, informatics - systems architectures]

4. **Lorentz JĂNTSCHI, Sorana D. BOLBOACĂ**, *Molecular Descriptors Family Project and Their Application on Structure-Property/Activity Relationships, ChemMod 2007 - Chemical Graph Theory and Molecular Modeling Workshop, Faculty of Chemistry and Chemical Engineering of Babes-Bolyai University and European Society of Mathematical Chemistry, Poster #22, Cluj-Napoca, Romania, October 23-26, p. 22, 2007.*

[getCITED](#)

Record => 2007:11:03:15:27:03 (Creation), 2007:11:03:15:27:03 (Last update)

File => 145.5 KBytes, application/pdf, [work_list.php?user=lori&id=163](#)

Subject(s) => [chemistry - biochemistry, informatics - applied, informatics - models implementation, mathematics - statistics, medicine - informatics]

5. **Sorana D. BOLBOACĂ, Lorentz JĂNTSCHI**, *Modeling Analysis of Amino Acids Hydrophobicity, ChemMod 2007 - Chemical Graph Theory and Molecular Modeling Workshop, Faculty of Chemistry and Chemical Engineering of Babes-Bolyai University and European Society of Mathematical Chemistry, Oral Presentation #6, Cluj-Napoca, Romania, October 23-26, p. 6, 2007.*

[getCITED](#)

Record => 2007:11:03:15:16:17 (Creation), 2007:11:03:15:16:17 (Last update)

File => 954.4 KBytes, application/pdf, [work_list.php?user=lori&id=162](#)

Subject(s) => [chemistry - biochemistry, informatics - applied, mathematics - statistics, medicine - informatics]

6. **Lorentz JĂNTSCHI, Sorana D. BOLBOACĂ**, *Molecular Descriptors Family on Chromatography, BBCAC-4 4th Black Sea Basin Conference on Analytical Chemistry,*

"St. Kliment Ohridski" University of Sofia, Poster P128, Sunny Beach, Bulgaria, September 19-23, 2007.

[getCITED](#)

Record => 2007:10:06:17:03:37 (Creation), 2007:10:06:17:03:37 (Last update)

File => 238.5 KBytes, application/pdf, [work_list.php?user=lori&id=154](#)

Subject(s) => [chemistry - analytical, chemistry - organic, informatics - models implementation, informatics - web programming]

7. **Sorana D. BOLBOACĂ, Lorentz JÄNTSCHI, Solvent Mixtures Tool for Separation of Biological Active Compounds, BBCAC-4 4th Black Sea Basin Conference on Analytical Chemistry, "St. Kliment Ohridski" University of Sofia, Poster P127, Sunny Beach, Bulgaria, September 19-23, 2007.**

[getCITED](#)

Record => 2007:10:06:17:02:35 (Creation), 2007:10:06:17:02:35 (Last update)

File => 389.7 KBytes, application/pdf, [work_list.php?user=lori&id=153](#)

Subject(s) => [chemistry - analytical, informatics - models implementation, informatics - web programming]

8. **Sorana D. BOLBOACĂ, Lorentz JÄNTSCHI, Similarities Analysis on Hydroxyapatite-Zirconia Composites, 9th Annual Conference of the Yugoslav Materials Research Society, Serbian Academy of Sciences and Arts, ISBN 978-86-80321-11-0, Herceg Novi, Montenegro, OSE10, p. 64, September 10-14, 2007.**

[getCITED](#)

Record => 2007:10:06:16:18:28 (Creation), 2007:10:06:16:18:28 (Last update)

File => 1.0 MBytes, application/pdf, [work_list.php?user=lori&id=152](#)

Subject(s) => [engineering - materials science, mathematics - statistics]

9. **Liviu BRÂNDUȘAN, Lorentz JÄNTSCHI, Superficial Distortion Influence on Characteristics of the Iron-Based Materials, 9th Annual Conference of the Yugoslav Materials Research Society, Serbian Academy of Sciences and Arts, ISBN 978-86-80321-11-0, Herceg Novi, Montenegro, OSA12, p. 14, September 10-14, 2007.**

[getCITED](#)

Record => 2007:10:06:16:16:55 (Creation), 2007:10:06:16:16:55 (Last update)

File => 83.2 KBytes, application/pdf, [work_list.php?user=lori&id=151](#)

Subject(s) => [engineering - materials science]

10. **Ioan TĂUT, George ARGHIR, Viorel CÂNDEA, Sorana-Daniela BOLBOACĂ, Lorentz JÄNTSCHI, Mechanical Milling: Evolution of Crystal Parameter of Iron Powder, 9th Annual Conference of the Yugoslav Materials Research Society, Serbian Academy of Sciences and Arts, ISBN 978-86-80321-11-0, Herceg Novi, Montenegro, OSA11, p. 14, September 10-14, 2007.**

[getCITED](#)

Record => 2007:10:06:16:13:48 (Creation), 2007:10:06:16:13:48 (Last update)

File => 104.6 KBytes, application/pdf, work_list.php?user=lori&id=150

Subject(s) => [engineering - materials science]

11. **Lorentz JÄNTSCHI, Carmen Elena STOENOIU, Sorana Daniela BOLBOACĂ**, *Linking Assessment to e-Learning in Microbiology and Toxicology for Undergraduate Students, Eurocon 2007 Conference, IEEE Region 8, Poster 258, Warsaw, Poland, September 9-12, 2007.*

[getCITED](#)

Record => 2007:10:06:15:44:39 (Creation), 2007:10:06:15:44:39 (Last update)

File => 222.1 KBytes, application/pdf, work_list.php?user=lori&id=149

Subject(s) => [education - evaluation, education - management, education - methodology, education - training]

12. **Lorentz JÄNTSCHI, Mugur BĂLAN, Margareta Emilia PODAR, Sorana Daniela BOLBOACĂ**, *Thermal Energy Efficiency Analysis for Residential Buildings, Eurocon 2007 Conference, IEEE Region 8, Poster 143, Warsaw, Poland, September 9-12, 2007.*

[getCITED](#)

Record => 2007:10:06:15:24:40 (Creation), 2007:10:06:15:24:40 (Last update)

File => 350.2 KBytes, application/pdf, work_list.php?user=lori&id=148

Subject(s) => [education - training, informatics - applied]

13. **Sorana-Daniela BOLBOACĂ, Lorentz JÄNTSCHI**, *Structure-Property Based Model Estimation of Alkanes Boiling Points, Fourth International Conference of Applied Mathematics and Computing, August 12-18, 2007, University of Chemical Technology and Metallurgy Sofia & Technical University of Plovdiv, Invited lecture, presented on August 13, from 18.30 to 19.00, Plovdiv, Bulgaria, p. 48, 2007.*

[getCITED](#)

Record => 2007:08:19:19:14:50 (Creation), 2007:08:19:19:14:50 (Last update)

File => 528.9 KBytes, application/pdf, work_list.php?user=lori&id=145

Subject(s) => [chemistry - computational, chemistry - organic, chemistry - physical, informatics - fundamentals, mathematics - applied, mathematics - modeling, mathematics - statistics]

14. **Lorentz JÄNTSCHI, Sorana-Daniela BOLBOACĂ, Cristina Maria FURDUI**, *Characteristic and Counting Polynomials on Modeling Nonane Isomers Properties, Fourth International Conference of Applied Mathematics and Computing, August 12-18, 2007, University of Chemical Technology and Metallurgy Sofia & Technical University of Plovdiv, Invited lecture, presented on August 15, from 12.20 to 13.00, Plovdiv, Bulgaria, p. 234, 2007.*

[getCITED](#)

Record => 2007:08:19:19:09:57 (Creation), 2007:08:19:19:09:57 (Last update)

File => 238.4 KBytes, application/pdf, work_list.php?user=lori&id=144

Subject(s) => [chemistry - computational, chemistry - physical, informatics - fundamentals, mathematics - applied, mathematics - modeling, mathematics - statistics]

15. **Lorentz JÄNTSCHI, Carmen Elena STOENOIU, Sorana-Daniela BOLBOACĂ, A Formula for Vertex Cuts in b-Trees, Fourth International Conference of Applied Mathematics and Computing, August 12-18, 2007, University of Chemical Technology and Metallurgy Sofia & Technical University of Plovdiv, Short communication, presented on August 15, from 12.10 to 12.20, Plovdiv, Bulgaria, p. 233, 2007.**

[getCITED](#)

Record => 2007:08:19:19:04:54 (Creation), 2007:08:19:19:04:54 (Last update)

File => 160.0 KBytes, application/pdf, [work_list.php?user=lori&id=143](#)

Subject(s) => [chemistry - computational, informatics - fundamentals, mathematics - applied, mathematics - number theory]

16. **Carmen Elena STOENOIU, Sorana-Daniela BOLBOACĂ, Lorentz JÄNTSCHI, Model Formulation and Interpretation for Chemical Reactions Mechanisms - From Experiment to Theory, Fourth International Conference of Applied Mathematics and Computing, August 12-18, 2007, University of Chemical Technology and Metallurgy Sofia & Technical University of Plovdiv, Invited lecture, presented on August 15, from 11.30 to 12.10, Plovdiv, Bulgaria, p. 511, 2007.**

[getCITED](#)

Record => 2007:08:19:18:58:43 (Creation), 2007:08:19:18:58:43 (Last update)

File => 293.8 KBytes, application/pdf, [work_list.php?user=lori&id=142](#)

Subject(s) => [chemistry - computational, chemistry - inorganic, chemistry - physical, mathematics - applied]

17. **Sorana D. BOLBOACĂ, Lorentz JÄNTSCHI, Modelling the Inhibitory Activity on Carbonic Anhydrase I of Some Substituted Thiadiazole- and Thiadiazoline-Disulfonamides: Integration of Structure Information, ESCAPE17 - 17th European Symposium on Computer Aided Process Engineering, CAPE Working Party of the European Federation of Chemical Engineering then Elsevier Netherlands & UK, ISBN 978-0-444-53157-5 & eISBN 0-444-53158-2, Bucharest, Romania then Amsterdam, Netherlands, T4-212 (oral presentation), May 27-30 then p. 965-970, 2007.**

[getCITED](#)

Record => 2007:05:07:17:08:31 (Creation), 2007:05:30:13:24:00 (Last update)

File => 1.3 MBytes, application/pdf, [work_list.php?user=lori&id=131](#)

Subject(s) => [chemistry - biochemistry, chemistry - computational, informatics - applied, informatics - models implementation, mathematics - modeling, mathematics - statistics, medicine - immunology, medicine - informatics]

18. **Sorana D. BOLBOACĂ, Lorentz JÄNTSCHI, Data Mining on Structure-Activity/Property Relationships Models, ECC11- The 11th [Electronic Computational Chemistry Conference](#), online, Monmouth University, New Jersey, USA, N/A, [www.Internet](#), paper #29, Presentation located [here](#), April 2-30, 2007.**

[getCITED](#)

Record => 2007:05:02:12:04:49 (Creation), 2007:05:02:12:05:01 (Last update)

File => 15.2 MBytes, application/pdf, [work_list.php?user=lori&id=126](#)

Procese la interfata fazelor: Modelare matematică, Optimizare numerică, Implementare web, cu aplicatii în separarea și caracterizarea seriilor de compusi chimici biologic activi

Subject(s) => [chemistry - computational, chemistry - general, informatics - applied, mathematics - applied, mathematics - statistics, medicine - informatics, research - management, research - methodology]

19. **Lorentz JÄNTSCHI, Sorana Daniela BOLBOACĂ**, *Processes Kinetics Modeling: A Numerical Study*, *Institute of General and Inorganic Chemistry, Bulgarian Academy of Sciences* [<http://sizemat.igic.bas.bg>], *FP6: EC-INCO-CT-2005-016414 Specific Support Action, Plovdiv, Bulgaria, p. 72-73, April 19-21, 2007.*

[getCITED](#)

Record => 2007:04:30:17:12:14 (Creation), 2007:04:30:17:12:14 (Last update)

File => 821.6 KBytes, application/pdf, work_list.php?user=lori&id=125

Subject(s) => [chemistry - computational, chemistry - inorganic, chemistry - physical, informatics - applied, mathematics - analysis, mathematics - applied, mathematics - modeling, mathematics - optimization, mathematics - statistics, physics - optics, research - methodology]

20. **Sorana Daniela BOLBOACĂ, Lorentz JÄNTSCHI**, *Modeling the Property of Compounds from Structure: Statistical Methods for Models Validation*, *Institute of General and Inorganic Chemistry, Bulgarian Academy of Sciences* [<http://sizemat.igic.bas.bg>], *FP6: EC-INCO-CT-2005-016414 Specific Support Action, Plovdiv, Bulgaria, p. 71, April 19-21, 2007.*

[getCITED](#)

Record => 2007:04:30:17:08:30 (Creation), 2007:04:30:17:08:30 (Last update)

File => 1.4 MBytes, application/pdf, work_list.php?user=lori&id=124

Subject(s) => [chemistry - computational, informatics - applied, informatics - databases, mathematics - statistics, medicine - informatics, research - methodology]

21. **Carmen Elena STOENOIU, Sorana Daniela BOLBOACĂ, Lorentz JÄNTSCHI**, *Characterization of Marine Sediments Toxicity based on Structural Information*, *Institute of General and Inorganic Chemistry, Bulgarian Academy of Sciences* [<http://sizemat.igic.bas.bg>], *FP6: EC-INCO-CT-2005-016414 Specific Support Action, Plovdiv, Bulgaria, p. 54, April 19-21, 2007.*

[getCITED](#)

Record => 2007:04:30:17:06:13 (Creation), 2007:04:30:17:06:13 (Last update)

File => 2.0 MBytes, application/pdf, work_list.php?user=lori&id=123

Subject(s) => [chemistry - biochemistry, chemistry - computational, chemistry - organic, engineering - agriculture, medicine - immunology, medicine - informatics]

22. **Lorentz JÄNTSCHI, Carmen Elena STOENOIU, Sorana Daniela BOLBOACĂ**, *Undergraduate Students Assessment on Materials Chemistry Topic using an Auto-Calibrated Online System*, *International Joint Conferences on Computer, Information, and Systems Sciences, and Engineering (CIS2E06)*, Springer, ISBN 978-1-4020-6265-0, *www, Internet, EIAE #6, December 4-14, 2006.*

[getCITED](#)

Record => 2007:01:14:17:10:16 (Creation), 2007:05:06:15:46:46 (Last update)
File => 228.8 KBytes, application/pdf, [work_list.php?user=lori&id=98](#)
Subject(s) => [chemistry - general, education - evaluation, education - training, engineering - materials science, informatics - applied, informatics - web programming, research - evaluation]

23. **Lorentz JÄNTSCHI, Carmen Elena STOENOIU, Sorana Daniela BOLBOACĂ**, *Use of Graph Polynomials for Characterization of Alkanes Properties, International Symposium on Organic Chemistry, December 9-12, 2006, Avangard Prisma, ISBN 954-323-243-1 & 978-954-323-243-7, Sofia, Bulgaria, p. 87-88, December 9-12, 2006.*

[getCITED](#)

Record => 2007:01:14:17:22:35 (Creation), 2007:01:14:17:23:14 (Last update)
File => 268.4 KBytes, application/pdf, [work_list.php?user=lori&id=101](#)
Subject(s) => [chemistry - organic, chemistry - physical, informatics - fundamentals, informatics - models implementation, informatics - numerical optimization, mathematics - modeling, mathematics - number theory]

24. **Carmen Elena STOENOIU, Lorentz JÄNTSCHI**, *Information Theory and Others for Steroids Separation, International Symposium on Organic Chemistry, December 9-12, 2006, Avangard Prisma, ISBN 954-323-243-1 & 978-954-323-243-7, Sofia, Bulgaria, p. 89, December 9-12, 2006.*

[getCITED](#)

Record => 2007:01:14:17:20:52 (Creation), 2007:01:14:17:20:52 (Last update)
File => 283.2 KBytes, application/pdf, [work_list.php?user=lori&id=100](#)
Subject(s) => [chemistry - analytical, chemistry - organic, informatics - models implementation, informatics - web programming, mathematics - modeling]

25. **Lorentz JÄNTSCHI, Mircea V. DIUDEA**, *Subgraphs by Pairs of Vertices, TOPMOL2006 - 20 Years Anniversary of Molecular Topology at Cluj, Babes-Bolyai University, CEEEx M3 PR-D11-PT00-41, Cluj-Napoca, Romania, p. 16 [Plenary oral presentation], September 25-30, 2006.*

[getCITED](#)

Record => 2007:01:14:16:44:38 (Creation), 2007:01:14:17:18:26 (Last update)
File => 3.5 MBytes, application/pdf, [work_list.php?user=lori&id=96](#)
Subject(s) => [informatics - fundamentals, mathematics - algebra, mathematics - modeling, mathematics - number theory]

26. **Lorentz JÄNTSCHI, Sorana Daniela BOLBOACĂ**, *Molecular Descriptors Family on Structure-Activity and Structure-Property Relationships: Results, SizeMat: Workshop on Size-Dependent Effects in Materials for Environmental Protection and Energy Application, Institute of General and Inorganic Chemistry, Bulgarian Academy of Sciences [http://sizemat.igic.bas.bg], FP6: EC-INCO-CT-2005-016414 Specific Support Action, Varna, Bulgaria, p. 14-15 [Plenary oral presentation], May 25-27, 2006.*

[getCITED](#)

Procese la interfata fazelor: Modelare matematică, Optimizare numerică, Implementare web, cu aplicatii în separarea și caracterizarea seriilor de compusi chimici biologic activi

Record => 2007:01:14:15:51:30 (Creation), 2007:01:14:17:17:23 (Last update)

File => 704.8 KBytes, application/pdf, [work_list.php?user=lori&id=86](#)

Subject(s) => [chemistry - general, chemistry - inorganic, chemistry - organic, engineering - materials science, informatics - applied, mathematics - statistics]

27. **Sorana Daniela BOLBOACĂ, Lorentz JÄNTSCHI**, *Activity Characterization of Triazines Analogues: Statistical Parameters for Models Assessment*, **International Symposium on Organic Chemistry, December 9-12, 2006, Avangard Prisma, ISBN 954-323-243-1 & 978-954-323-243-7, Sofia, Bulgaria, p. 48-49 [Plenary oral presentation], December 9-12, 2006.**

[getCITED](#)

Record => 2007:01:14:17:16:16 (Creation), 2007:01:14:17:16:16 (Last update)

File => 336.6 KBytes, application/pdf, [work_list.php?user=lori&id=99](#)

Subject(s) => [chemistry - biochemistry, chemistry - computational, engineering - agriculture, informatics - models implementation, mathematics - modeling]

28. **Lorentz JÄNTSCHI, Sorana-Daniela BOLBOACĂ**, *Online System for Molecular Descriptors Family on Structure-Activity Relationships: Assessment and Characterization of Biologic Active Compounds*, **6th European Conference on Computational Chemistry, European Association for Chemical and Molecular Sciences, Poster 47, Tale, Slovakia, September 3-7, 2006.**

[getCITED](#)

Record => 2007:01:14:16:36:48 (Creation), 2007:01:14:16:36:48 (Last update)

File => 241.2 KBytes, application/pdf, [work_list.php?user=lori&id=95](#)

Subject(s) => [chemistry - biochemistry, chemistry - computational, informatics - models implementation, mathematics - modeling, research - evaluation, research - methodology]

29. **Lorentz JÄNTSCHI, Sorana-Daniela BOLBOACĂ, Mihaela Ligia UNGUREȘAN**, *Mobile Phase Optimization in Three Solvents High Performance Thin-Layer Chromatography: Methodology and Evaluation*, **6th European Conference on Computational Chemistry, European Association for Chemical and Molecular Sciences, Poster P46, Tale, Slovakia, September 3-7, 2006.**

[getCITED](#)

Record => 2007:01:14:16:35:46 (Creation), 2007:01:14:16:35:46 (Last update)

File => 158.1 KBytes, application/pdf, [work_list.php?user=lori&id=94](#)

Subject(s) => [chemistry - analytical, informatics - models implementation, mathematics - modeling, research - evaluation, research - methodology]

Articole

1. **Sorana D. BOLBOACĂ, Monica M. MARTA, Lorentz JÄNTSCHI**, *Computer-Assisted Instruction in Evidence-Based Medicine: A Pilot Study*, **HSI, 2008. Conference on Human System Interaction, IEEE - IES, IEEE CN:08EX1995C; ISBN 1-4244-1543-8; LoC: 2007905110, Krakow, Poland, #5-KF-004103, 2008.**

[getCITED](#)

Record => 2008:05:30:13:59:14 (Creation), 2008:05:30:13:59:14 (Last update)

File => 132.5 KBytes, application/pdf, [work_list.php?user=lori&id=183](#)

Subject(s) => [education - evaluation, education - management, education - training, medicine - evidence based]

2. **Lorentz JÄNTSCHI, Sorana D. BOLBOACĂ, Monica M. MARTA; Alexandru LASZLO**, *E-Learning and E-Evaluation: A Case Study, HSI, 2008. Conference on Human System Interaction, IEEE - IES, IEEE CN:08EX1995C; ISBN 1-4244-1543-8; LoC: 2007905110, Krakow, Poland, #4-KF-003247, 2008.*

[getCITED](#)

Record => 2008:05:30:13:57:09 (Creation), 2008:05:30:13:57:09 (Last update)

File => 176.2 KBytes, application/pdf, [work_list.php?user=lori&id=182](#)

Subject(s) => [chemistry - general, education - evaluation, education - management, education - training]

3. **Mugur C. BĂLAN, Mihai DAMIAN, Lorentz JÄNTSCHI**, *Preliminary Results on Design and Implementation of a Solar Radiation Monitoring System, Sensors, [Molecular Diversity Preservation International](#), ISSN 1424-8220, Basel, Switzerland, 8(2), p. 963-978, 2008.*

[getCITED](#)

Record => 2008:05:16:17:37:51 (Creation), 2008:05:16:17:37:51 (Last update)

File => 373.2 KBytes, application/pdf, [work_list.php?user=lori&id=178](#)

Subject(s) => [chemistry - physical, engineering - agriculture, informatics - applied, physics - optics]

4. **Ioan SUCIU, Constantin COSMA, Mihai TODICĂ, Sorana D. BOLBOACĂ, Lorentz JÄNTSCHI**, *Analysis of Soil Heavy Metal Pollution and Pattern in Central Transylvania, International Journal of Molecular Sciences, [Molecular Diversity Preservation International](#), ISSN 1422-0067, Basel, Switzerland, 9(4), p. 434-453, 2008.*

[getCITED](#)

Record => 2008:05:16:17:34:36 (Creation), 2008:05:16:17:34:36 (Last update)

File => 795.2 KBytes, application/pdf, [work_list.php?user=lori&id=177](#)

Subject(s) => [chemistry - analytical, physics - nuclear, physics - optics]

5. **Mugur BĂLAN, Mihai DAMIAN, Lorentz JÄNTSCHI**, *Solar Radiation Monitoring System, Proceedings of the 36-th international symposium on agricultural engineering: Actual Tasks on Agricultural Engineering, Agricultural Engineering Department, Faculty of Agriculture, University of Zagreb, ISSN 1333-2651, February 11-15, Opatija, Croatia, p. 507-517, 2008.*

[getCITED](#)

Record => 2008:03:07:16:21:04 (Creation), 2008:03:07:16:21:04 (Last update)

File => 437.9 KBytes, application/pdf, [work_list.php?user=lori&id=174](#)

Subject(s) => [engineering - agriculture]

6. **Mugur BĂLAN, Mihai DAMIAN, Lorentz JĂNTSCHI, Ion ION**, *Study concerning the influence of some working conditions, on the heat pumps performances, Proceedings of the 36-th international symposium on agricultural engineering: Actual Tasks on Agricultural Engineering, Agricultural Engineering Department, Faculty of Agriculture, University of Zagreb, ISSN 1333-2651, February 11-15, 2008, Opatija, Croatia, p. 535-544, 2008.*

[getCITED](#)

Record => 2008:03:07:16:13:52 (Creation), 2008:03:07:16:13:52 (Last update)

File => 557.2 KBytes, application/pdf, [work_list.php?user=lori&id=173](#)

Subject(s) => [engineering - agriculture]

7. **Lorentz JĂNTSCHI, Sorana D. BOLBOACĂ**, *Structure-Activity Relationships on the Molecular Descriptors Family Project at the End, Leonardo Electronic Journal of Practices and Technologies, AcademicDirect, ISSN 1583-1078, www, Internet, 6(11), p. 163-180, CAS-AN 2008:532878, 2007.*

[getCITED](#)

Record => 2008:01:19:18:06:35 (Creation), 2008:01:19:18:06:35 (Last update)

File => 202.3 KBytes, application/pdf, [work_list.php?user=lori&id=172](#)

Subject(s) => [chemistry - biochemistry, chemistry - computational, informatics - models implementation, mathematics - modeling, research - evaluation]

8. **Lorentz JĂNTSCHI, Carmen Elena STOENOIU, Sorana Daniela BOLBOACĂ**, *Linking Assessment to e-Learning in Microbiology and Toxicology for Undergraduate Students, EUROCON, 2007. The International Conference on "Computer as a Tool", IEEE, ISBN 1-4244-0813-X, IEEE 07EX1617C, LoC: 2006937182, DOI 10.1109/EURCON.2007.4400369, Warsaw, Poland, p. 2447-2452, 2007.*

[getCITED](#)

Record => 2008:01:04:13:12:26 (Creation), 2008:01:04:13:12:26 (Last update)

File => 28.8 KBytes, application/pdf, [work_list.php?user=lori&id=171](#)

Subject(s) => [chemistry - organic, education - management, education - methodology, informatics - databases]

9. **Lorentz JĂNTSCHI, Mugur BĂLAN, Margareta Emilia PODAR, Sorana Daniela BOLBOACĂ**, *Thermal Energy Efficiency Analysis for Residential Buildings, EUROCON, 2007. The International Conference on "Computer as a Tool", IEEE, ISBN 1-4244-0813-X, IEEE 07EX1617C, LoC: 2006937182, DOI 10.1109/EURCON.2007.4400261, Warsaw, Poland, p. 2009 - 2014, 2007.*

[getCITED](#)

Record => 2008:01:04:13:06:38 (Creation), 2008:01:04:13:06:38 (Last update)

File => 29.5 KBytes, application/pdf, [work_list.php?user=lori&id=170](#)

Subject(s) => [chemistry - physical, informatics - applied, informatics - databases, mathematics - modeling]

10. **Lorentz JĂNTSCHI, Sorana D. BOLBOACĂ, Mircea V. DIUDEA**, *Chromatographic Retention Times of Polychlorinated Biphenyls: from Structural Information to Property*

Characterization, International Journal of Molecular Sciences, Molecular Diversity Preservation International, ISSN 1422-0067, Basel & www, Switzerland & Internet, 8(11), p. 1125-1157, CAS-AN 2008:423655, 2007.

[getCITED](#)

Record => 2007:11:22:15:40:28 (Creation), 2007:11:22:15:40:28 (Last update)

File => 175.7 KBytes, application/pdf, [work_list.php?user=lori&id=166](#)

Subject(s) => [chemistry - computational, chemistry - organic, informatics - applied, informatics - databases, informatics - models implementation, mathematics - modeling]

11. **Lorentz JÄNTSCHI, Sorana D. BOLBOACĂ**, *Triazines Herbicidal Assessed Activity, Studii si Cercetari Stiintifice Universitatea Bacau Seria Biologie, Universitatea Bacau, ISSN 1224-919X, Bacau, Romania, 12(1), p. 57-62, 2007.*

[getCITED](#)

Record => 2007:11:09:13:59:01 (Creation), 2007:11:09:13:59:01 (Last update)

File => 277.6 KBytes, application/pdf, [work_list.php?user=lori&id=165](#)

Subject(s) => [chemistry - biochemistry, engineering - agriculture, medicine - informatics]

12. **Sorana D. BOLBOACĂ, Lorentz JÄNTSCHI**, *Structure versus Biological Role of Substituted Thiadiazole- and Thiadiazoline- Disulfonamides, Studii si Cercetari Stiintifice Universitatea Bacau Seria Biologie, Universitatea Bacau, ISSN 1224-919X, Bacau, Romania, 12(1), p. 50-56, 2007.*

[getCITED](#)

Record => 2007:11:09:13:56:54 (Creation), 2007:11:09:13:56:54 (Last update)

File => 401.1 KBytes, application/pdf, [work_list.php?user=lori&id=164](#)

Subject(s) => [chemistry - biochemistry, engineering - agriculture, medicine - informatics]

13. **Sorana D. BOLBOACĂ, Lorentz JÄNTSCHI**, *Similarities Analysis on Hydroxyapatite-Zirconia Composites, Leonardo Journal of Sciences, AcademicDirect, ISSN 1583-0233, www, Internet, 11(6), p. 153-164, CAN 148:61815, 2007.*

[getCITED](#)

Record => 2007:11:01:14:54:42 (Creation), 2007:11:01:14:54:42 (Last update)

File => 1006.8 KBytes, application/pdf, [work_list.php?user=lori&id=161](#)

Subject(s) => [engineering - materials science, mathematics - statistics]

14. **Dan ILINA, Monica Palaghia FODOR, Lorentz JÄNTSCHI**, *The Control of the Infrastructure of the Rural Water Wells in the Plain Area, Bulletin of University of Agricultural Sciences and Veterinary Medicine - Horticulture, AcademicPres, ISSN 1843-5254, eISSN 1843-5394, Cluj-Napoca, Romania, 64(1-2), p. 628-633, 2007.*

[getCITED](#)

Record => 2007:10:06:17:42:59 (Creation), 2007:10:06:17:42:59 (Last update)

File => 408.3 KBytes, application/pdf, [work_list.php?user=lori&id=156](#)

Subject(s) => [engineering - agriculture]

15. **Sorana D. BOLBOACĂ, Lorentz JÄNTSCHI**, *Data Mining on Structure-Activity/Property Relationships Models*, *World Applied Sciences Journal, IDOSI Publications, ISSN 1818-4952, www, Internet & Faisalabad, Pakistan, 2(4), p. 323-332, 2007.*

[getCITED](#)

Record => 2007:08:20:19:17:54 (Creation), 2007:08:20:19:17:54 (Last update)

File => 215.6 KBytes, application/pdf, [work_list.php?user=lori&id=147](#)

Subject(s) => [chemistry - computational, informatics - applied, mathematics - statistics, research - evaluation]

16. **Lorentz JÄNTSCHI, Sorana D. BOLBOACĂ**, *Antiallergic Activity of Substituted Benzamides: Characterization, Estimation and Prediction*, *Clujul Medical, Editura Iuliu Hatieganu, ISSN 1222-2119, Cluj-Napoca, Romania, LXXX(1), p. 125-132, 2007.*

[getCITED](#)

Record => 2007:06:16:18:57:12 (Creation), 2007:06:16:18:57:12 (Last update)

File => 138.8 KBytes, application/pdf, [work_list.php?user=lori&id=137](#)

Subject(s) => [chemistry - biochemistry, chemistry - computational, informatics - models implementation, mathematics - modeling, mathematics - statistics, medicine - immunology]

17. **Lorentz JÄNTSCHI, Sorin HODIȘAN, Claudia CIMPOIU, Anamaria HOSU, Eugen DARVASI, Teodor HODIȘAN**, *Modeling of thin-layer chromatographic separation of androstane isomers*, *JPC - Journal of Planar Chromatography - Modern TLC, Akadémiai Kiadó, ISSN 0933-4173, Budapest, Hungary, 20(2), p. 91-94, CAN 148:323259, 2007.*

[getCITED](#)

Record => 2007:06:01:13:30:04 (Creation), 2007:06:01:13:30:04 (Last update)

File => 266.2 KBytes, application/pdf, [work_list.php?user=lori&id=134](#)

Subject(s) => [chemistry - analytical, chemistry - biochemistry, informatics - applied, informatics - models implementation, informatics - numerical optimization, mathematics - modeling, mathematics - optimization]

18. **Sorana D. BOLBOACĂ, Lorentz JÄNTSCHI**, *Modelling the Inhibitory Activity on Carbonic Anhydrase I of Some Substituted Thiadiazole and Thiadiazoline-Disulfonamides: Integration of Structure Information*, *Computer-Aided Chemical Engineering, Elsevier Netherlands & UK, eISSN 1570-7946, Amsterdam, Netherlands, 24(2007), p. 965-970, CAS-AN 2008:400595, 2007.*

[getCITED](#)

Record => 2007:05:30:09:51:00 (Creation), 2007:05:30:10:32:00 (Last update)

File => 122.9 KBytes, application/pdf, [work_list.php?user=lori&id=133](#)

Subject(s) => [chemistry - biochemistry, chemistry - computational, informatics - applied, informatics - models implementation, mathematics - modeling, mathematics - statistics, medicine - immunology, medicine - informatics]

19. **Lorentz JÄNTSCHI, Sorana D. BOLBOACĂ**, *The Jungle of Linear Regression Revisited*, *Leonardo Electronic Journal of Practices and Technologies, AcademicDirect,*

ISSN 1583-1078, *www, Internet*, 6(10), p. 169-187, 2007.

[getCITED](#)

Record => 2007:05:06:17:30:20 (Creation), 2007:05:20:17:30:20 (Last update)

File => 162.9 KBytes, application/pdf, [work_list.php?user=lori&id=130](#)

Subject(s) => [mathematics - modeling, mathematics - statistics, research - evaluation, research - management]

20. Sorana D. BOLBOACĂ, Lorentz JÄNTSCHI, *How Good the Characteristic Polynomial Can Be for Correlations?*, *International Journal of Molecular Sciences*, [Molecular Diversity Preservation International](#), ISSN 1422-0067, *www & Basel, Internet & Switzerland*, 8(4), p. 335-345, CAN 147:276982, 2007.

[getCITED](#)

Record => 2007:05:03:11:48:36 (Creation), 2007:05:03:11:49:36 (Last update)

File => 191.9 KBytes, application/pdf, [work_list.php?user=lori&id=128](#)

Subject(s) => [chemistry - computational, chemistry - physical, informatics - applied, informatics - models implementation, mathematics - modeling, mathematics - statistics, research - methodology]

21. Lorentz JÄNTSCHI, Sorana-Daniela BOLBOACĂ, *Modeling the Octanol-Water Partition Coefficient of Substituted Phenols by the Use of Structure Information*, *International Journal of Quantum Chemistry*, Wiley InterScience, ISSN 0020-7608, eISSN 1097-461X, New York, NY, USA, Volume 107, Issue 8 (Special Issue: Proceedings from the 3rd Humboldt Conference on Computational Chemistry . Issue Edited by Georgi N. Vayssilov, Tzonka Mineva), p. 1736-1744, CAN 147:103053, 2007.

[getCITED](#)

Record => 2007:05:02:13:30:46 (Creation), 2007:05:02:13:30:46 (Last update)

File => 114.0 KBytes, application/pdf, [work_list.php?user=lori&id=127](#)

Subject(s) => [chemistry - computational, chemistry - organic, chemistry - physical, informatics - models implementation, mathematics - modeling, mathematics - statistics]

22. Sorana-Daniela BOLBOACĂ, Lorentz JÄNTSCHI, *Computer-based testing on physical chemistry topic: A case study*, *International Journal of Education and Development using Information and Communication Technology*, The University of the West Indies, Barbados, ISSN 1814-0556, *www, Internet*, [id=242](#), 3(1), 2007.

[getCITED](#)

Record => 2007:03:21:19:04:19 (Creation), 2007:03:21:19:04:19 (Last update)

File => 127.2 KBytes, application/pdf, [work_list.php?user=lori&id=122](#)

Subject(s) => [chemistry - general, chemistry - physical, education - evaluation, education - management, education - methodology, education - policy, informatics - applied, informatics - databases, informatics - web programming]

23. Lorentz JÄNTSCHI, Sorana BOLBOACĂ, *Results from the Use of Molecular Descriptors Family on Structure Property/Activity Relationships*, *International Journal of Molecular Sciences*, [Molecular Diversity Preservation International](#), ISSN 1422-0067,

www & Basel, Internet & Switzerland, [8\(3\)](#), p. 189-203, CAN 147:317671, 2007.

[getCITED](#)

Record => 2007:03:12:18:02:46 (Creation), 2007:03:12:18:02:46 (Last update)

File => 116.7 KBytes, application/pdf, [work_list.php?user=lori&id=121](#)

Subject(s) => [chemistry - computational, chemistry - organic, informatics - applied, informatics - databases, informatics - models implementation, informatics - web programming, research - evaluation]

24. **Carmen Elena STOENOIU, Sorana Daniela BOLBOACĂ, Lorentz JÄNTSCHI**, *Mobile Phase Optimization Method for Steroids Separation, Applied Medical Informatics, SRIMA, ISSN 1224-5593, Cluj-Napoca, Romania, 18(1-2), p. 17-24, 2006.*

[getCITED](#)

Record => 2007:06:16:13:17:51 (Creation), 2007:06:16:13:17:51 (Last update)

File => 122.3 KBytes, application/pdf, [work_list.php?user=lori&id=136](#)

Subject(s) => [chemistry - analytical, informatics - applied, informatics - models implementation, informatics - simulation, mathematics - modeling]

25. **Sorana D. BOLBOACĂ, Lorentz JÄNTSCHI**, *Molecular Descriptors Family on Structure-Activity Relationships: Modeling Herbicidal Activity of Substituted Triazines Class, Bulletin of University of Agricultural Sciences and Veterinary Medicine - Agriculture, AcademicPres, ISSN 1454-2382, Cluj-Napoca, Romania, 62, p. 35-40, 2006.*

[getCITED](#)

Record => 2007:01:13:17:24:03 (Creation), 2007:01:13:17:24:03 (Last update)

File => 836.4 KBytes, application/pdf, [work_list.php?user=lori&id=61](#)

Subject(s) => [chemistry - biochemistry, chemistry - computational, chemistry - organic, engineering - agriculture, informatics - models implementation, mathematics - modeling]

26. **Lorentz JÄNTSCHI, Sorana BOLBOACĂ**, *Modelling the Inhibitory Activity on Carbonic Anhydrase IV of Substituted Thiadiazole- and Thiadiazoline- Disulfonamides: Integration of Structure Information, Electronic Journal of Biomedicine, Red UniNet Spain, ISSN 1697-090X, www, Internet, 2006(2), p. 22-33, 2006.*

[getCITED](#)

Record => 2007:01:13:17:20:13 (Creation), 2007:01:13:17:20:13 (Last update)

File => 264.4 KBytes, application/pdf, [work_list.php?user=lori&id=60](#)

Subject(s) => [chemistry - computational, chemistry - inorganic, chemistry - organic, informatics - models implementation, mathematics - modeling, medicine - informatics]

27. **Lorentz JÄNTSCHI, Sorana BOLBOACĂ**, *Auto-calibrated Online Evaluation: Database Design and Implementation, Leonardo Electronic Journal of Practices and Technologies, AcademicDirect, ISSN 1583-1078, www, Internet, 5(9), p. 179-192, 2006.*

[getCITED](#)

Record => 2007:01:13:17:11:33 (Creation), 2007:01:13:17:11:33 (Last update)

File => 210.7 KBytes, application/pdf, [work_list.php?user=lori&id=59](#)

Subject(s) => [chemistry - general, education - evaluation, education - methodology, informatics - databases, informatics - web programming, mathematics - probability theory]

28. **Sorana BOLBOACĂ, Lorentz JÄNTSCHI**, *Pearson Versus Spearman, Kendall's Tau Correlation Analysis on Structure-Activity Relationships of Biologic Active Compounds*, *Leonardo Journal of Sciences, AcademicDirect, ISSN 1583-0233, www, Internet, 5(9), p. 179-200, CAS-AN 2007:1026159, 2006.*

[getCITED](#)

Record => 2007:01:13:17:08:23 (Creation), 2007:01:13:17:08:23 (Last update)

File => 237.0 KBytes, application/pdf, [work_list.php?user=lori&id=58](#)

Subject(s) => [informatics - numerical optimization, mathematics - modeling, mathematics - number theory, mathematics - optimization, medicine - epidemiology, medicine - evidence based, research - evaluation]

29. **Sorana BOLBOACĂ, Claudia FILIP, Ștefan ȚIGAN, Lorentz JÄNTSCHI**, *Antioxidant Efficacy of 3-Indolyl Derivates by Complex Information Integration*, *Clujul Medical, Editura Iuliu Hatieganu, ISSN 1222-2119, Cluj-Napoca, Romania, LXXIX(2), p. 204-209, 2006.*

[getCITED](#)

Record => 2007:01:13:17:01:44 (Creation), 2007:01:13:17:01:44 (Last update)

File => 2.8 MBytes, application/pdf, [work_list.php?user=lori&id=57](#)

Subject(s) => [chemistry - computational, chemistry - inorganic, chemistry - organic, informatics - models implementation, mathematics - modeling, medicine - informatics]

30. **Sorana Daniela BOLBOACĂ, Lorentz JÄNTSCHI**, *Modeling of Structure-Toxicity Relationship of Alkyl Metal Compounds by Integration of Complex Structural Information*, *Therapeutics: Pharmacology and Clinical Toxicology, RP Press, ISSN 1583-0012, Bucuresti, Romania, X(1), p. 110-114, 2006.*

[getCITED](#)

Record => 2007:01:13:16:58:58 (Creation), 2007:01:13:16:58:58 (Last update)

File => 737.7 KBytes, application/pdf, [work_list.php?user=lori&id=56](#)

Subject(s) => [chemistry - computational, chemistry - inorganic, chemistry - organic, informatics - models implementation, mathematics - modeling, medicine - informatics]

31. **Lorentz JÄNTSCHI, Sorana BOLBOACĂ**, *Molecular Descriptors Family on Structure Activity Relationships 6. Octanol-Water Partition Coefficient of Polychlorinated Biphenyls*, *Leonardo Electronic Journal of Practices and Technologies, AcademicDirect, ISSN 1583-1078, www, Internet, 5(8), p. 71-86, 2006.*

[getCITED](#)

Record => 2007:01:13:16:51:00 (Creation), 2007:01:13:16:51:00 (Last update)

File => 270.0 KBytes, application/pdf, [work_list.php?user=lori&id=55](#)

Subject(s) => [chemistry - analytical, chemistry - computational, chemistry - physical, informatics - models implementation, mathematics - modeling, medicine - informatics]

32. **Lorentz JÄNTSCHI, Sorana BOLBOACĂ**, *Molecular Descriptors Family on Structure Activity Relationships 5. Antimalarial Activity of 2,4-Diamino-6-Quinazoline Sulfonamide Derivates*, *Leonardo Journal of Sciences, AcademicDirect, ISSN 1583-0233, www, Internet, 5(8), p. 77-88, 2006.*

[getCITED](#)

Record => 2007:01:13:16:48:01 (Creation), 2007:01:13:16:48:01 (Last update)

File => 257.4 KBytes, application/pdf, [work_list.php?user=lori&id=54](#)


Subject(s) => [chemistry - computational, chemistry - inorganic, chemistry - organic, informatics - models implementation, mathematics - modeling, medicine - informatics]


Lorentz JÄNTSCHI (principal investigator) & Sorana D. BOLBOACĂ (co-investigator)

**Activități și rezultate. Etapa III(2008). Obiectivul 4(Promovarea rezultatelor).
Activitatea 8(Dobândirea de competențe complementare).**

Dobândirea de competențe complementare a constituit obiectul acestei activități. În continuare este redată lista cronologică a acestor evenimente împreună cu programul acestora:

Recent Advances in Synthesys and Chemical Biology VI Friday, 14th December, 2007 Trinity College Dublin	<i>Recent Advances in Synthesys & Chemical Biology VI, Centre for Synthesis & Chemical Biology, University of Dublin, Symposium, 14 December 2007, Dublin, Ireland</i>
8.45am	Opening session: Introductory remarks: Professor Thorri Gunnlaugsson Speaker: Professor John Hegarty, Provost, TCD
9.00am-10.00am	Chairperson: Professor Paul Murphy Professor Peter Seeberger , ETH Zürich <i>'From Microreactors to a Malaria Vaccine'</i>
10.00am-11.00am	Chairperson: Professor Kevin Nolan Professor Thomas Carell , Ludwig-Maximilians-University, Munich <i>'Synthetic and Crystallographic studies of Tanskripton and Replication through DNA lesions'</i>
11.30am-12.30pm	Chairperson: Dr Donal O'Shea GlaxoSmithkline Lecture Professor Michael J. Krische , The University of Texas at Austin <i>'Formation of C-C Bonds via Catalytic Hydrogenation and Transfer Hydrogenation'</i>
1.15pm-2.15pm	Chairperson: Professor Mathias Senge Eli Lilly Lecture Professor Chris Schofield , Oxford University <i>'The Chemistry of Oxygen Sensing'</i>
2.15pm-3.15pm	Poster Session.
3.15pm-4.15pm	Chairperson: Professor John M. Kelly Institut de Recherches Servier Lecture Professor Andrée Kirsch - De Mesmaeker , Université Libre de Bruxelles (ULB) <i>'Ru(II) complexes under illumination. Can they be used in Chemical Biology?'</i>
4.15pm-5.15pm	Chairperson: Dr Marc Devocelle Professor Mark Bradley , University of Edinburgh <i>'Interfacing combinatorial chemistry with microarrays'</i>
5.15pm	Closing Remarks: Professor Pat Guiry followed by half-hour Wine Reception

	<p>Strasbourg Summer School on Cheminformatics 2008, Louis Pasteur University of Strasbourg, 22-25 June 2008, Strasbourg, France;</p>
<p>Sunday, 22 June</p>	
<p>14:00-17:00 <i>Registration</i></p>	
<p>17:00-17:10 <i>Opening Remarks</i></p>	<p>A. Varnek, D. Rognan</p>
<p>17:10-17:40 QSAR: discovery and first steps</p>	<p>T. Fujita</p>
<p>17:40-18:20 History and challenges of cheminformatics</p>	<p>J. Gasteiger</p>
<p>18:20-19:00 Current trends in cheminformatics</p>	<p>W. Warr</p>
<p>Monday, 23 June (morning session)</p>	
<p><i>Molecular Similarity Analysis in Virtual Screening</i></p>	
<p>8:30-09:30 Fingerprint Design and Molecular Complexity Effects</p>	<p>J. Bajorath</p>
<p>9:30-10:30 Diversity Analysis and Library Design</p>	<p>V. Gillet</p>
<p>10:45-11:45 De novo Design</p>	<p>G. Schneider</p>
<p>Monday, 23 June (after-noon session)</p>	
<p>14:00-15:00 Lessons learned from modelling bioactivity - what works and what doesn't</p>	<p>R. Glen</p>
<p>15:00-16:00 How many drug targets? and other questions...</p>	<p>T. Oprea</p>
<p>16:15-17:30 Tutorial: Impact of dataset composition on models performance</p>	<p>N. Weill, G. Marcou, D. Horvath, A. Varnek and D. Rognan</p>
<p>17:45-19:00 <i>Meeting SFCi</i></p>	<p>(Albert Schweitzer hall)</p>
<p>17:45-19:00 <i>Software demonstration</i></p>	<p>(Hansi hall)</p>
<p>Tuesday, 24 June (morning session)</p>	
<p><i>QSAR/QSPR strategies, ADME/Tox predictions</i></p>	
<p>8:30-09:30 Molecular descriptors: an overview</p>	<p>R. Todeschini</p>
<p>9:30-10:30 The good, the bad and the ugly practices of QSAR modelling</p>	<p>A. Tropsha</p>
<p>10:45-11:45 Pharmacophore Approach in Drug Discovery</p>	<p>T. Langer</p>
<p>Tuesday, 24 June (after-noon session)</p>	
<p>14:00-15:00 Classification of chemical reactions</p>	<p>J. Aires-de-Sousa</p>
<p>15:00-16:00 Modern Machine Learning Regression Methods</p>	<p>I. Tetko, I. Baskin</p>
<p>16:00-17:00 Tutorial 2a. Benchmarking of Different Machine Learning Regression Methods</p>	<p>I. Baskin, I. Tetko and A. Varnek</p>
<p>Tutorial 2b. Descriptor Selection Bias.</p>	
<p>17:00-18:00 <i>Poster session</i></p>	<p>(Bertoldi hall)</p>
<p>Wednesday, 25 June (morning session)</p>	
<p><i>Bio- and Cheminformatics: Key Technologies within the Drug Discovery Process</i></p>	
<p>8:30-9:15 In silico target profiling</p>	<p>J. Mestres</p>
<p>9:15-10:15 Docking and post-docking strategies</p>	<p>D. Rognan</p>

10:30-11:15	<u>What Crystal Structure Databases Tell us about Conformational Preferences of Drug-like Molecules</u>	M. Stahl
11:15-12:00	<u>The Role of Cheminformatics in the Modern Drug Discovery Process</u>	P. Ertl
Wednesday, 25 June (after-noon session)		
14:00-16:00	<i>Round Table</i> <ul style="list-style-type: none">▪ <i>Hot topics in chemoinformatics</i>▪ <i>Teaching chemoinformatics</i>	A. Tropsha, P. Vayer, L. Morin-Allory
16:00	<i>Closing Remarks</i>	A. Varnek, D. Rognan
	14th Oxford Workshop in Teaching Evidence-Based Practice, Centre for Evidence-Based Medicine, Oxford University, 8-12 September 2008, Oxford, England	
Workshop Themes <p>There will be two main themes running throughout the workshop:</p> <ol style="list-style-type: none">1. Teaching will be addressed through the exploration of different educational models for teaching evidence-based practice and identification and discussion of issues of pedagogy, curriculum design development and maintenance. The aim will be to promote the teaching of evidence-based health care at your home institution2. Personal Development will be addressed by offering guidance and help in extending and advancing participants' existing critical appraisal and teaching skills.		
Workshop Format <p>Most of the Workshop will be conducted in small groups in which participants will develop and test their own EBM packages. Plenary sessions will present and discuss general issues in planning, executing, and evaluating EBM, and will demonstrate large-group strategies for teaching EBM. Searching and study time will be provided each day, and informal social events will encourage free discussion and the establishment of ongoing links.</p>		
Workshop materials and preparation <p>Participants will receive EBM packages in diagnosis, prognosis, therapy/prevention, quality of care, systematic reviews, and economic analysis appropriate to their fields of health care, plus background readings, a core EBM textbook and software tools to help practice and teach EBM. You will benefit most from the Workshop if you bring your own EBM packages for testing in simulated teaching situations.</p>		
Workshop facilitators <p>Workshop facilitators have been practicing and teaching EBM at sites across the UK, Europe and North America and Australasia. Teaching staff include:</p> <ul style="list-style-type: none">• Professor Paul Glasziou (Chair), Director of the Centre for Evidence-Based Medicine and Editor of the Journal Evidence-Based Medicine• Dr. Sharon Straus, co-author of How to Practice and Teach Evidence-Based Medicine• Professor Rod Jackson, Professor of Epidemiology and the Director of EPIQ from the University of Auckland		

Concluzii

Implementarea sistemului pentru investigarea proceselor la interfața fazelor a fost realizată realizându-se și o serie de componente online ale acestuia. Sistemul dovedit acuratețea estimativă și predictivă (obținându-se o serie de rezultate foarte bune, care au permis participarea cu lucrări la conferințe internaționale de prestigiu și publicarea de lucrări științifice de specialitate). Analiza rezultatelor obținute a arătat complexitatea fenomenelor studiate, uneori datele colectate pe parcursul studiului fiind insuficiente pentru o caracterizare completă a fenomenelor studiate. Sistemul însă a permis, chiar și în aceste situații, obținerea unor parametrii cinetici și de separare importanți pentru designul experimental.

Se impun desigur investigații mai amănunțite folosind o serie mai diversificată de experimente pentru caracterizarea completă a proceselor care au loc la interfața fazelor. Studiul de față a arătat că procesele care au loc la interfața fazelor sunt puternic dependente de compoziția și starea de agregare a fazelor între care se realizează un dublu echilibru: chimic și fizic. Separarea și caracterizarea seriilor de compuși chimici biologic activi, o componentă importantă urmărită pe parcursul derulării proiectului, este un proces care deseori se realizează uzând de fenomene la interfața fazelor pentru care modelele matematice, susținute de optimizarea numerică a parametrilor de model reprezintă o soluție dovedită pentru designul experimental.