北京理工大学211工程
研究生规划教材

高等化工数学

Advanced Chemical Engineering Mathematics

化学工程与技术

◎ 陈晋南/编

北京理工大学出版社
BEIJING INSTITUTE OF TECHNOLOGY PRESS

北京理工大学211工程
研究生规划教材

高等化工数学

化学工程与技术

Advanced
Chemical Engineering Mathematics

◎ 陈晋南／编

北京理工大学出版社
BEIJING INSTITUTE OF TECHNOLOGY PRESS

图书在版编目（CIP）数据

高等化工数学／陈晋南编．—北京：北京理工大学出版社，2007.6
北京理工大学“211 工程”研究生规划教材．化学工程与技术
ISBN 978-7-5640-0943-4

Ⅰ．高…　Ⅱ．陈…　Ⅲ．化学工业-应用数学-研究生-教材
Ⅳ．TQ011

中国版本图书馆 CIP 数据核字（2007）第 037873 号

出版发行／北京理工大学出版社
社　　址／北京市海淀区中关村南大街 5 号
邮　　编／100081
电　　话／（010）68914775（办公室）　68944990（批销中心）　68911084（读者服务部）
网　　址／http://www.bitpress.com.cn
经　　销／全国各地新华书店
印　　刷／北京圣瑞伦印刷厂
开　　本／787 毫米×960 毫米　1/16
印　　张／27.25
字　　数／578 千字
版　　次／2007 年 6 月第 1 版　　2007 年 6 月第 1 次印刷
印　　数／1~3000 册　　责任校对／张　宏
定　　价／42.00 元　　责任印制／母长新

前　言

在过去的二三十年里，化学化工获得了迅速的发展。数学在这个发展中以各种形式起了极为重要的作用。没有足够的数学知识，工程师和科学技术人员甚至不能做任何工作。现代化学工程人员无论从事化学化工新产品、新工艺的研究还是进行过程设计、自动控制都需要应用数学知识。几乎所有的应用科学都要进行实验并必须采用数学方法解释所得到的实验结果，而应用数学的方法和能力将直接影响到研究的过程和结果。

本书编写的目的是为高等院校化学和化工等专业的研究生提供一本学习高等化工数学的教材。将在大学工科高等数学的基础上重点介绍化学化工中最常用的若干数学方法，为将来处理数学问题提供必要的基础知识，建立数学模型仅作入门介绍。由于篇幅和学时的限制，书中数学理论部分力求简明扼要、条理清晰，对于各种数学方法的讨论，立足于应用，不进行严密的推导和证明。和经典的数学教程相比，本书更着重于工程应用方面，而数学定理的证明或省略或放在次要的位置。如果需要，读者可以借助有关参考书进行深入学习和研究。

本书共分十章，介绍化学化工中最常用的各种数学方法，所采用的参考文献都列在每章末尾。第一章为绪论。由于考虑到化学和化工专业读者的数学基础，第二章复习常微分方程的解法，第三～五章分别为复变函数、矢量分析与场论和积分变换，为后五章的学习打下必要的基础。第六～十章分别为偏微分方程和特殊函数、点源法、无界空间的定解问题、变分法和偏微分方程的差分法。

在内容叙述时，编者尽量做到基本概念解释详尽、公式推导步骤清晰，并留给读者自学和思考的空间，有意识地将书中的有些问题留给读者在练习中完成，不少练习题是书中内容学习的延续。在讲解重点和难点理论概念时，附有例题以便于自学。每章末尾都附有一定数量的练习题，绝大部分给出了答案，以供读者学习和核对自己练习的结果。编者期望读者尽可能多做练习，这是吸收和消化理论知识的最好方法。不动手做练习题，无法掌握任何数学知识。通过完成练习，可以加深对书中内容的理解，培养学习、思考和解决问题的能力，能从本书的学习中学到所需的知识，并能学以致用地把知识应用到实践中去。

1986 年，编者自费到美国纽约市立大学研究生院学习，先后获工学硕士、物理学硕士和博士学位。1994 年作为博士后研究员在美国著名的约翰·霍普金斯大学化学工程系工作。在美国攻读学位期间，曾系统地学习了应用数学物理方程、线性代数、复变函数、数值分析、计算方法等数学知识，并参与了相关课程的硕士生辅导教学工作。数学的理论知识使编者在多年有关动量、热量和质量传递方面的大量科学研究工作中获益匪浅。编者期望化学工程师在解决实际问题时，能从本书中得到帮助。

1995 年年底，编者从美国留学回来，1996 年起为北京理工大学化工与环境学院研究生开设“化学化工数学”的学位课，在组织研究生课程教学过程中，编者认真拜读了国内市场上流行的有关教科书，并与美国名牌大学的研究生的教学内容进行了比较，根据国家和学校研究生培养的要求，结合国外的教材和个人的学习经验，精选内容组织了材料，编写了《化学化工数学Ⅰ》和《化学化工数学Ⅱ》内部教材，分别用于硕士生和博士生的学位课程。在工程硕士研究生学位课的教学中也使用了该教材。10 年里近千名学生学习使用了该教材，感谢同学们认真学习本课程，并在学习过程中提出了不少的宝贵意见。在这次出版时，将两部分内容合并，书名更改为《高等化工数学》。

在内部教材大纲的制定过程中，王利生教授和毋俊生副教授以自己教授本课程的经验提出了建议。在编写过程中得到彭炯博士、副教授的大力协助，他校验了部分习题，认真校核书稿打字编辑的疏漏和差错。近年来他参加了部分教学工作，对本书提出了有益的修改意见。编者的硕士生们协助完成了书中插图扫描和部分例题的录入。另外在编写出版本书的过程中得到了北京理工大学研究生院和北京理工大学出版社的大力支持和帮助。由于北京理工大学出版社编辑的辛勤劳动，大大减少了书中的疏漏。在此一并致以衷心的谢意。

在出版之际，编者由衷地感谢丁建中教授和王保国教授对本书认真细致的审核，老大中教授认真审核了变分法一章。按照三位教授的修改意见，编者对全书的内容进行了修改、调整和补充。

编者衷心感谢国家和人民多年来对自己的培养。感谢我的父母、丈夫和女儿对我学习和工作的全力支持。

根据编者的教学实践，整个课程大致需要 90 学时左右，在硕士生课程中学习前六章，博士生课程学习后四章。具有高等数学知识的读者就可阅读本书，如果读者具有线性代数、大学物理等基础知识，阅读本书会相对容易。

编者深感水平有限，不免有疏漏或不妥之处，真诚地恳请广大读者批评指正。

陈晋南

目　　录

第一章 绪 论

1.1 问题的数学描述

数学是一切数量科学和工程学的共同根源。20 世纪 80 年代化学和化学工程获得了迅速的发展，其中数学以各种形式起了重要和决定性的作用，计算数学和计算机的应用推动了这一发展。在这期间，化学工程和技术的发展达到了成熟阶级。现在，化工几乎对世界上所有的原料生产起着控制作用。化工既是生产这些原料的工业，也是把这些原料变成日用消费品的工业。由于化工领域涉及面广，过程复杂，没有足够的数学知识，化学工程师甚至不能做任何工作，即使是实际生产过程也离不开数学。

现代化学工程和技术人员无论从事化工新产品、新工艺的研究还是进行过程设计、自动控制都需要应用数学的知识。用数学去处理工程和技术问题需要涉及许多数学分支和数学知识，例如线性、非线性代数方程、数理方程、特殊函数和差分方程；随机过程理论；数值分析、有限元、边界元和最优化方法等。近年来泛函分析、拓扑学、图论等在化工系统分析中也得到了应用。化学工程科学家应用各种数学方法和化学工程与技术等具体问题结合，得出化学工艺和装置及设备设计的最终最佳结果。化学和化工科学家仅工作在化学实验室的时代已在逐步改变。几乎所有的应用科学都要进行实验，解释所得到的实验结果必须采用数学方法，而采用的数学方法将直接影响研究的结果。

如今科学计算已与理论分析，实验并列被公认为当代科学研究的三种手段之一。科学计算方法以及理论的奠定及不断完善是科学计算发展最深刻的内在动力。计算机技术的飞速发展，以及科学计算方法和理论的不断完善，促进了科学计算的发展。科学家解决工程问题的理论研究和实践，促进了这一科学研究方法的发展。现代化工生产规模超大、能量密集、产物众多，具有高温、高压、低温、低压、有毒和易燃易爆的特点。因此，化工过程安全历来是工业安全生产的重中之重，化工过程安全领域在技术上急需解决的是本质安全过程设计以及事故在线早期诊断，人们如何在能力有限的计算机上用数值方法模拟和仿真复杂的化学、生物、物理现象和复杂的工程问题，达到优化设计的目的，没有必要的数学理论基础和有效的计算方法是无法做到的。随着信息技术的发展，化学工程向着精细化发展，而这种发展要求化学工程师必须有坚实的数学基础和应用信息技术的能力。

近年来，随着计算机更新换代、信息技术和计算技术的发展，各种计算软件包（包括化工软件包）随之产生并得到了广泛应用。工程技术和科研人员学会使用软件包可以省去编程、

调试等许多工作量。但是，使用专门的软件包必须具备数学基本理论和知识，只有和必须具备数学方法和基本知识，才能正确使用软件包，而不至于发生偏差和谬误，有时还需要结合化工问题的特点对软件包提供的程序进行二次开发。当然化学和化工工程师的兴趣不在于数学定理的严密论证，主要目的是运用现代数学计算工具解决科研和工程的实际问题。具体地说希望解决这样几方面的问题：

① 建立化学和化工系统的现实而合理的数学模型。

② 选用适当的数学方法，开发相应的计算机程序或利用成熟可靠的 CFD 软件求解化工问题。

③ 分析所求解的精确性和可靠性，解释模型解的物理意义。

④ 利用数学理论作为指导，进一步利用计算机静、动态模拟优化来指导并加速科研和开发过程，从技术上解决本质安全过程设计以及事故在线早期诊断。

由于化学和化学工程领域涉及面广，过程复杂，进行数学处理需要涉及许多数学分支的知识，这门课将在大学工科高等数学基础上重点介绍化学和化学工程中最常用的若干数学方法，为将来处理化学和化学工程所涉及的数学问题提供必要的基础知识。

1.2 数学模型方法

化学和化学工程传统的研究方法是以实验和经验归纳为主，经验归纳通常采用因次分析和相似的方法整理归纳数据。随着生产过程大型化和自动化水平不断提高，特别是涉及化学动量、热量和质量传递以及反应过程的复杂问题，因次分析和相似方法不能满足需要。工程中的每个问题和研究的对象可看成一个系统。数学模型是对系统在假设条件下物理模型的数学抽象，数学模型是真实系统构成元素及其之间关系的数学描述。例如研究一个多组分、多级反应塔操作过程，是一个包含有流体动量、热量和质量传递，并且伴有化学反应机制的复杂过程。塔板上组分、温度、压力和汽液流率等是该系统的变量。数学模型可描述系统状态变量和自变量之间的关系，采用科学计算、理论分析和实验结合的科学研究方法可深入地研究在化工过程中系统的各变量随时间的变化规律和相互关系。

为此首先要建立描述在化工过程中系统正确适用的数学模型。根据建模的方法将数学模型分为三大类：一是由物理、化学和化学工程机理导出的机理模型；二是根据观测实验数据归纳而得到的经验模型；三是介于二者之间半经验半机理的混合模型。机理模型反映过程的本质特征，适用范围较广泛。经验模型由于模型参数是在一定范围内实验数据归纳得出，不宜大幅度外推。在条件许可的情况下，应尽可能建立机理模型。

1.2.1 数学模型的用途

数学模型方法对过程开发、本质安全过程设计、事故在线早期诊断、生产操作、优化控

制及过程机理研究都有重要的实用意义。

1. 化工过程开发和本质安全过程设计

在实验室实验基础上建立数学模型，运行计算机模拟仿真实验过程，以确认模型可靠性和必要精度，在此基础上设计本质安全的过程，优化化工过程的工艺和操作条件，可以大大减少实验工作量和化工中的不安全因素，节省原材料的消耗和实验费用，缩短新产品开发周期。

2. 生产操作优化控制和事故在线早期诊断

应用动态仿真数学模型可模拟实际生产的各种工况，分析研究各种工况。优化模拟计算可提供技术改造方案，降低能耗，进行事故在线早期诊断；建立优化控制方案可提高经济效益和减少不安全因素；建立的模拟器可进行操作工人和技术人员的培训。

3. 机理研究

应用数学模型的方法，可数值模拟和仿真某一化工产品生产的化工过程，研究该过程动量、热量、质量传递的机理，可模拟研究化学反应过程，研究各种化学反应的机理和化合物有机合成的配方，也可进行实验数据处理和模型参数估值。例如确定反应速率常数、相平衡参数等，最终可优化设备的结构和操作的工艺条件。

1.2.2 数学模型的分类

数学模型可以根据性质和特点从不同角度进行分类，后面的章节将给出具体的定义。为了便于下面章节的学习，这里先粗略介绍有关的基本概念。

1. 稳态、非稳态

根据数学模型与时间变量的关系分为稳态、非稳态。稳态数学模型不包含时间变量，非稳态数学模型考察过程随时间的动态变化规律。数学上也称为定常和非定常模型。

2. 线性、非线性

从数学模型方程的结构来区分数学模型的线性和非线性。方程中含有未知函数或导数的幂，以及未知函数和其导数的乘积等非线性项，该模型称为非线性的。非线性问题比线性问题难求解得多，一般情况没有解析解。

3. 确定性、随机性

随机数学模型包含随机变量，对于一个确定的量，其输出呈概率分布，不是一个确定的量。如雷诺数很大的湍流，流动错综复杂，其运动规律只能用统计的规律来描述。

4. 连续性、离散性

描述系统状态变量随自变量的连续变化的微分方程是连续性模型，描述自变量在有限个节点的函数差分方程是离散型模型。

5. 集中参数、分布参数

包含时间和空间位置多自变量的偏微分方程是分布参数模型，而集中参数模型的因变量不随空间坐标变化。

1.2.3 机理模型化方法的原则步骤

1. 确立系统

根据工程研究的对象确立所研究的系统，画出系统的略图，列出所给数据；确定系统的自变量与因变量，这些变量由问题的类型而定，对于非稳态过程，时间是自变量。

2. 建立数学模型

运用基础理论进行系统物料的总平衡和某特定物质的物料平衡或能量平衡，建立平衡关系。主要的基础理论包括质量、能量、动量守恒定律，还有反应动力学，化学平衡及相平衡等所有的物理、化学基本原理。运用工程判断能力对研究的问题进行必要和合理的简化假设，它是建模工作重要的一步，使简化后的模型能够反映过程本质，满足应用的要求，有其合理性；必须考虑求解的方便和可能，给出必要条件。建模时一定要考察模型的可解性。在简化假设条件下，建立数学模型，检查方程个数与自变量个数是否相等。

3. 确定边界条件和初始条件

确定边界上对应自变量数值的因变量数值和系统初始时刻的状态，通常初始条件是已知的。

4. 模型的求解

化简微分方程，选择适当的求解方法。可以采用解析法或数值法求解。解析法给出系统变量的连续函数值，可以准确地分析变量间相互关系。对于化学和化学工程中复杂的、非线性的问题使用数值法求解。

5. 模型解的验证，结果的分析讨论

数学模型是在假设条件下对系统物理模型的数学抽象，它只能近似地反映过程的本质特性。模型的可靠性与精确度依赖于建模假设偏离实际问题的程度和基础数据的精度。对解析解或数值解要进行分析讨论。用解析解或数值解分析变量间相互关系，找出其内在变化的规律。用实验或生产现场数据来考核解的可靠性，如果差距太大，则需要修改模型或校验基础数据，重新计算使其逐步完善。

1.3 本书的内容架构

本书为化学工程与技术专业的工科研究生编写。编者参考了美国一流大学工科研究生应用数学的教科书和国内很多教材编写本书。本书内容丰富，结构严谨，具有一定的理论深度。通过本课程的学习，学会运用不同的数学方法求解描述化学和化学工程中动量、热量和质量传递，以及化学反应动力学（俗称三传一反）的偏微分方程和特殊函数。本书分为十章，它所取材的参考文献列在每一章的后面。

第二章　常微分方程。首先介绍一阶微分方程、高阶微分方程、线性微分方程解法，在

此基础上介绍变系数微分方程的解法，最后介绍方程的级数解法。这部分内容在高等数学的教科书中有详细介绍。

第三章 复变函数概述。首先是复变函数概念和基本运算，然后介绍解析函数、复变函数积分和柯西定理，最后是罗朗级数和留数定理。

第四章 矢量分析与场论。首先介绍矢量函数和基本运算，然后是数量场和矢量场，进而介绍二阶张量，最后介绍场论在化学工程中的应用。以上几章是下面章节的学习基础。在具备了一定数学知识的基础上，进而学习第五章至第十章。

第五章 积分变换。首先介绍傅里叶变换和它的性质，以及广义傅里叶变换。第二部分对拉普拉斯变换作了较为详细的介绍，它包括初等函数、特殊函数的拉普拉斯变换，拉普拉斯变换的性质和它的逆变换，以及拉普拉斯变换的应用。

第六章 偏微分方程与特殊函数。首先介绍偏微分方程的分类，介绍建立波动方程、拉普拉斯方程和输运方程等典型偏微分方程的方法，重点介绍求解偏微分方程的分离变量法，介绍非齐次偏微分方程和非齐次边界条件偏微分方程的解法。最后部分介绍柱坐标系中的分离变量法、球坐标系中的分离变量法。重点介绍特殊函数，包括柱坐标系中的贝塞尔函数和球坐标系中的勒让德函数。

第七章 点源法。首先介绍 δ 函数、冲量定理及其应用，其次是波动方程与输运方程的格林函数法，最后是泊松方程的格林函数法。

第八章 无界空间的定解问题。主要介绍无界空间齐次波动方程的行波法和非齐次方程的点源法。

第九章 变分法。主要介绍变分法的基本问题、变分问题的直接法——里茨法和变分法在化学工程中的应用。

第十章 偏微分方程的差分法。主要介绍差分法概念和化工问题的基本差分格式、差分方程的稳定性。

本书对建立数学模型只能作入门介绍，因为建立数学模型不仅需要数学理论和方法，更需依靠实践知识和经验以及对实验认识的深化水平。对于各种数学理论和方法的讨论，立足于应用，保留了部分定理、性质证明，大多没有进行严密的推导和证明。在内容叙述时，编者尽量做到基本概念解释详尽、公式推导步骤清晰，并留给读者自学和思考的空间，有意识地将书中的有些问题留给读者在练习中完成，不少练习题是书中内容学习的延续。在讲解重点和难点理论概念时，附有例题以便于自学。每章列有大量例题，每章末尾都附有一定数量的练习题，绝大部分练习题给出了答案，以供读者学习和核对自己练习的结果。

编者期望读者在认真阅读基本内容的基础上，学习例题，完成每章的习题。尽可能多做练习，这是吸收和消化理论知识的最好方法。编者个人认为不动手做练习题，无法掌握任何数学知识。通过完成练习，可以加深对书中内容的理解，培养学习、思考和解决问题的能力，能从本书的学习中学到所需的知识，并能学以致用地把知识应用到实践中去。

第二章　常微分方程

含有未知函数的导数或微分的方程，称为**微分方程**。仅含有一个自变量的微分方程称为**常微分方程**。在化学工程中关于反应、扩散、传热、传质和流体流动等一维问题可用常微分方程来描述。高等数学中系统地介绍了常微分方程及其解法，在本章中仅概括地介绍化学化工中常出现的常微分方程及其解法[1~3]，为下面章节的学习打下基础。首先介绍一阶微分方程、高阶微分方程、线性微分方程解法，在此基础上介绍变系数微分方程的解法，最后介绍方程的级数解法。

2.1　变量可分离的微分方程

表示未知函数与未知函数的导数以及自变量之间的关系的方程，称为**微分方程**。一般物理现象和工程问题，以及化工问题，大都用微分方程来表达。如果在一个微分方程中出现的未知函数只含一个自变量的方程称为**常微分方程**。

2.1.1　概念和定义

n 阶常微分方程的一般形式

$$F(x,\ y, y', \cdots, y^{(n)}) = 0 \tag{2.1.1}$$

式中，x 为自变量，y 是 x 的未知函数；$y', \cdots, y^{(n)}$ 依次是函数 $y = y(x)$ 对 x 的一阶，二阶，n 阶导数。在方程中出现的各阶导数中最高的阶数称为**常微分方程的阶**。

若微分方程是未知函数及其各阶导数的一次方程，称为**线性微分方程**。微分方程中有因变量及其导数的乘积，或有导数本身的乘积或幂，因变量的乘积或幂的方程，称为**非线性微分方程**。

假定 $p_0(x), p_1(x), \cdots, p_{n-1}(x)$，$F(x)$ 在某一个区间内是连续函数，n 阶线性常微分方程还可表示为

$$\frac{\mathrm{d}^n y}{\mathrm{d}x^n} + p_{n-1}(x)\frac{\mathrm{d}^{n-1} y}{\mathrm{d}x^{n-1}} + \cdots + p_1(x)\frac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}x} + p_0(x)y = f(x) \tag{2.1.2}$$

式中，若 $p_0(x), p_1(x), \cdots, p_{n-1}(x), f(x)$ 均为区间（α, β）上 x 的常数时，方程称为 **n 阶常系数线性微分方程**；

若 $p_0(x), p_1(x), \cdots, p_{n-1}(x), f(x)$ 均为区间（α, β）上 x 的函数时，方程称为 **n 阶变系数线**

性微分方程；

若 $f(x)\equiv 0$，这个线性微分方程（2.1.2）称为**齐次线性微分方程**，否则称为**非齐次线性微分方程**。

满足微分方程的函数，即使微分方程成为恒等式的函数，称为**微分方程的解**。含有与微分方程的阶数相同的任意常数的解，称为**微分方程的一般解或通解**。例如：一个 n 阶微分方程的一般解，含有 n 个任意常数。确定了一般解中的任意常数的解，**称为微分方程的特解**。不能从一般解的任意常数定出来的解，称为**微分方程的奇解**。为了确定特解所给出条件，称为微分方程的初始条件或边界条件。常微分方程可分为初值问题和边值问题，给定初始条件的问题为**初值问题**，给定边界条件的问题为**边值问题**。微分方程有理化之后，方程中含有的最高阶导数的最高次幂，**称为微分方程的次。**

例题 2.1.1 判断下列方程的类型，指出方程的阶数、次数、线性或非线性。

① $\left(\dfrac{d^2y}{dx^2}\right)^2+3x=2\left(\dfrac{dy}{dx}\right)^2$，常微分方程，二阶，二次，非线性。

② $\dfrac{dy}{dx}+\dfrac{y}{x}=y^2$，常微分方程，一阶，一次，非线性。

③ $\dfrac{d^2Q}{dt^2}-3\dfrac{dQ}{dt}+2Q=4\sin 2t$，常微分方程，二阶，一次，线性。

④ $\dfrac{dy}{dx}=\dfrac{x+y}{x-y}$，常微分方程，一阶，一次，非线性。

⑤ $\dfrac{\partial^2V}{\partial x^2}+\dfrac{\partial^2V}{\partial y^2}=0$，偏微分方程，二阶，一次，线性。

⑥ $\dfrac{d^3y}{dx^3}-\dfrac{d^2y}{dx^2}+5\left(\dfrac{dy}{dx}\right)^3+2x^3\dfrac{dy}{dx}+4y=4e^x\cos x$，常微分方程，三阶，一次，非线性。

2.1.2 分离变量法

分离变量法是求解微分方程的最基本方法。若一阶齐次微分方程

$$p_1(x,y)\frac{dy}{dx}+p_0(x,y)=0 \tag{2.1.3}$$

中的函数 $p_1(x,y),p_0(x,y)$ 都可以分解为两个因子的积

$$p_0(x,y)=M_1(x)M_2(y),\quad p_1(x,y)=N_1(x)N_2(y)$$

这两个因子中，一个不含变量 x，一个不含变量 y，即方程可写为

$$M_1(x)M_2(y)dx+N_1(x)N_2(y)dy=0$$