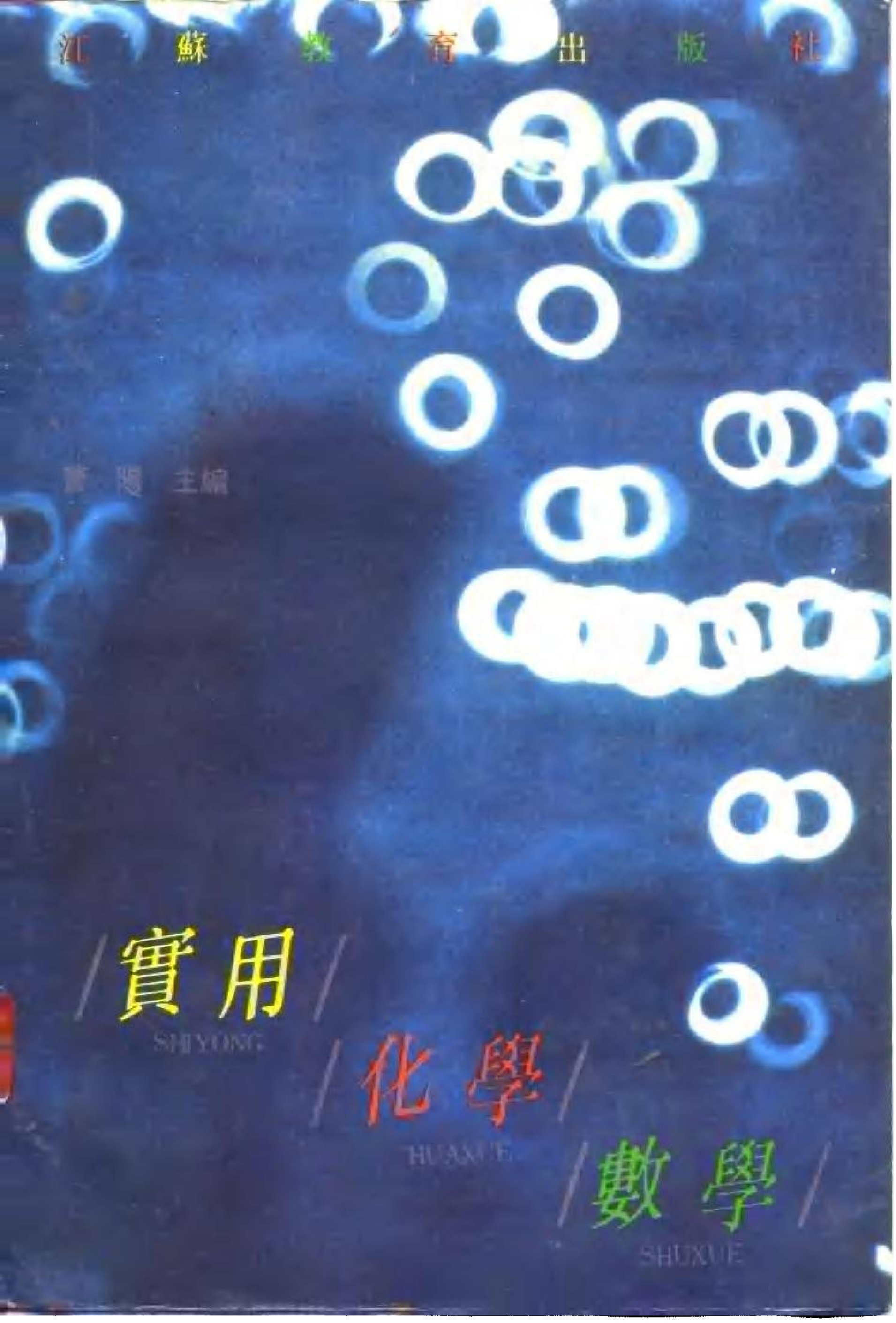

江 蘇 教 育 出 版 社
曹 陽 主編
實用
SHIYONG
化學
HUAXUE
數學
SHUXUE

曹　陽　主编

實用化學數學

江蘇教育出版社

（苏）新登字第003号

实用化学数学

主编　曹阳

责任编辑　王瑞书

出版发行：江苏教育出版社

（南京中央路165号，邮政编码：210009）

经　销：江苏省新华书店

印　刷：江苏新华印刷厂

（南京中央路145号，　邮政编码：210009）

开本 787×1092毫米　1/32　印张 24.25 插页2字数538,400

1991年9月第1版　　1991年9月第1次印刷

印数 1—2,000册

ISBN 7—5343—1401—1

G·1243　　定价：7.10元

前　言

随着科学技术的日新月异，现代化学已经发生了从描述性向推理性、从宏观向微观、从定性向定量的急剧变化，其间，化学与其它学科，尤其是数学的关系也越来越密切。事实很明显，要定量地研究化学，不应用数学是不可能的。

本书是为广大化学工作者学习数学、运用数学、查阅有关数学问题而编写的。作者编写时考虑到以下三种化学工作者的情况：

（1）已经学过一般的高等数学，但不了解这些数学将如何运用于解决有关化学问题，属于这类的化学工作者很多，包括四年制本科化学专业的大多数学生和毕业生。

（2）许多有实践经验的化学工作者，他们有的曾在中等化学专业学校毕业，有的虽然没有经过学校的正规训练，但长期的实践使他们具有丰富的化学知识。由于数学在化学中日益重要的地位，他们希望系统地自学与化学有关的数学问题。

（3）过去曾经学过高等数学，但时隔多年，有许多内容已经遗忘，在工作中随时都会遇到一些数学问题，因此，需要查阅其有关原理和应用的公式。

针对以上三种情况，本书的编写具有下列几个特点：

（1）根据目前化学的发展情况，将化学中所出现和运用到的一些数学有重点地按章节加以介绍。在叙述时，尽量通俗易懂，适于系统自学之用。

（2）为了适合化学工作者的特点，对于所应用到的原理一般不加详细的推导和证明，仅对这些原理的产生背景、应用范围以及有关注意事项作必要的说明，以便读者顺利地运用这些原理和公式。

（3）在各个章节之后附有大量的例题。通过这些例题的详细的解题过程，读者可以举一反三，了解运用数学方法解决化学问题的常用办法。

总而言之，本书既是一本为化学专业工作者所写的包含着大量结合实际化学问题的应用数学书，又是一本可用来系统学习与化学有关数学的自学书。当然它还可提供给化学工作者随时需要了解有关数学问题时进行查阅。

本书的第八、第十和第十二章为曹阳所编写，第二、第六和第七章为曹瑟南所编写，第一、第三、第四和第五章为朱益华编写，第九章为顾梅华编写，第十一章为陈庆云所编写，全书由曹阳主编。

虽然编者都有长期从事化学数学教育方面的经验，但编写这样一本实用化学数学尚属首次，不当或谬误之处在所难免，恳请读者批评指正，以便改进。

编　者

1990．12．

目　录

第一章　微 分 学

第二章　积 分 学

第三章　级　　数

第四章 矢 量 与 张 量

第五章 微 分 方 程

I 常微分方程

Ⅱ 偏微分方程

第六章 复变函数

第七章 变分法

第八章 特殊函数

第九章 线性代数基础

第十章 群 论

第十一章 概率与数理统计

第十二章　计算机在化学中的应用

第一章　微　分　学

化学离不开函数．研究化学变化，往往需要用定量的方式处理变化速率．微分学恰好为人们提供了处理这一问题的完美方法，因而它是每一位化学工作者必须掌握的重要工具．

§1.1　函数的极限与连续

1.1.1　函数

函数是微积分研究的主要对象．

在某一变化过程中．设有一对变量 x 和 y．如果对于 x 在其允许值范围内所取的每一个值，按照某一法则，都有确定的 y 值与之对应，则称 y 是 x 的函数．且 x 称为自变量，y 称为因变量或函数．对应法则称为函数关系，记为：

$y=f(x)$，$y=F(x)$，$y=\varphi(x)$，……

自变量 x 的允许值范围称为函数的定义域．函数值 y 的全体称为函数的值域．

1.1.2　函数的极限

1．函数极限的定义

考察函数

$$f(x)=\frac{x^2-1}{x-1}$$

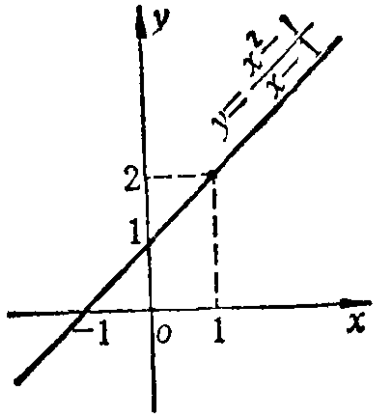


图 1-1

当x趋近于特定数1时的变化情况：

$f(x)$在点$x=1$无定义。（见图1-1）当x无限接近于1时，$f(x)$无限接近于2。可以说，当$|x-1|$充分小时（$x\neq1$）

$$\left|f(x)-2\right|=\left|\frac{x^2-1}{x-1}-2\right|$$

$$=|x-1|$$

就可以任意小。

若ε是任意小正数，我们用$|f(x)-2|<\varepsilon$表示$f(x)$与2的距离任意小。δ是一个正数，用$|x-1|<\delta$表示x与1的距离充分小。于是，对于满足不等式$0<|x-1|<\delta$的一切x都有

$$|f(x)-2|<\varepsilon$$

成立。

一般地，设$y=f(x)$在点x_0附近有定义（但在$x=x_0$可以没有定义），我们有当$x\to x_0$时，函数$y=f(x)$极限的定义如下：

如果对于预先任意给定的正数ε，总有一个正数δ，使得对于适合不等式$0<|x-x_0|<\delta$的一切x，不等式

$$|f(x)-A|<\varepsilon \qquad (1\text{-}1)$$

恒成立，则称常数A为函数$f(x)$当$x\to x_0$时的极限。记作

$$\lim_{x\to x_0}f(x)=A \qquad 或 \qquad f(x)\to A\ (x\to x_0)$$

读作"$f(x)$当$x\to x_0$时的极限等于A。"

这样，上例中函数

$$f(x)=\frac{x^2-1}{x-1}$$

当 $x\to1$ 时的极限值就是2。

例 1.1 证明 $\lim\limits_{x\to1}(2x-1)=1$。

证：要使 $|f(x)-A|=|2x-1-1|=2|x-1|<\varepsilon$ 只须 $|x-1|<\frac{\varepsilon}{2}$ 取 $\delta=\frac{\varepsilon}{2}$，可见当 x 适合不等式

$$|x-1|<\frac{\varepsilon}{2}$$

时，就有 $|f(x)\ 1|<\varepsilon$。

2。*函数 $f(x)$ 在点 x_0 有极限的充要条件*

例 1.1 中，$\lim\limits_{x\to1}(2x-1)=1$ 意味着不管 x 从 1 的左边还是右边趋近于 1，其极限值都是 1。有时却不是这样，如阶梯函数（见图 1-2）

$$f(x)=\begin{cases}1 & x\geqslant0\\ 0 & x<0.\end{cases}$$

当 x 从 0 的左边趋近于 0 时，$f(x)$ 趋近于 0，当 x 从 0 的右边趋近于 0 时，$f(x)$ 的极限为 1。记作

$$\lim_{x\to0-}f(x)=0,\quad \lim_{x\to0+}f(x)=1.$$

它们分别称 $f(x)$ 在点 $x=0$ 处的左极限和右极限。

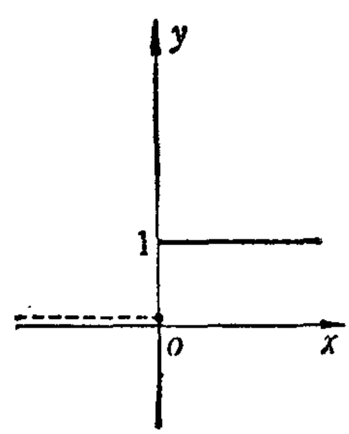


图 1-2

此函数在 $x=0$ 处左、右极限都存在，但不相等，因而极限不存在。显然，若 $\lim\limits_{x\to x_0}f(x)$ 存在，必然有 $\lim\limits_{x\to x_0^-}f(x)$ 与

$\lim\limits_{x\to x_0^+} f(x)$都存在且相等。如果 $f(x)$ 在 x_0 的左右极限中有一个不存在，或者即使两个都存在而不相等。$\lim\limits_{x\to x_0} f(x)$必不存在。

因此，我们有函数$f(x)$在点x_0极限存在的充要条件：

$$\lim_{x\to x_0^-} f(x)=\lim_{x\to x_0^+} f(x) \qquad (1-2)$$

注意：求极限时，什么时候要考虑左、右极限呢？一般讲，求分段函数分点处的极限时，要计算在该点的左右极限。此外，有些函数虽然由一个解析式给出，但当计算其没有定义的点处的极限时，往往需要从计算左、右极限入手。

例如，求$\lim\limits_{x\to 0} \dfrac{1}{1+e^{\frac{1}{x}}}$时就要这样做。

3．函数极限的四则运算

设$\lim\limits_{x\to x_0} f(x)=A$，$\lim\limits_{x\to x_0} g(x)=B$，则

1）$\lim\limits_{x\to x_0}[f(x)\pm g(x)]=\lim\limits_{x\to x_0} f(x)\pm\lim\limits_{x\to x_0} g(x)$；

2）$\lim\limits_{x\to x_0} f(x)g(x)=\lim\limits_{x\to x_0} f(x)\cdot\lim\limits_{x\to x_0} g(x)$；

3）当分母极限 $B\neq 0$ 时有

$$\lim_{x\to x_0}\frac{f(x)}{g(x)}=\frac{\lim\limits_{x\to x_0} f(x)}{\lim\limits_{x\to x_0} g(x)}.$$

总而言之，函数的和、差、积、商的极限等于函数的极限的和、差、积、商(商的情形分母的极限不为零)。

4．两个重要极限

$$\lim_{x\to 0}\frac{\sin x}{x}=1. \tag{1-3}$$

$$\lim_{x\to 0}(1+x)^{\frac{1}{x}}=e. \tag{1-4}$$

1.1.3 函数的连续性

前面讨论函数的极限时，我们并不要求 $f(x)$ 在 x_0 有定义，更没有要求 $f(x)$ 与 $\lim\limits_{x\to 0}f(x)$ 一定要相等，但对连续函数而言则要求 $\lim\limits_{x\to x_0}f(x)$ 与 $f(x_0)$ 相等。

1. 函数在一点 x_0 连续的定义

若 $f(x)$ 在 x_0 及其附近处处有定义且

$$\lim_{x\to x_0}f(x)=f(x_0), \tag{1-5}$$

则称函数 $f(x)$ 在点 x_0 连续。$f(x)$ 在区间$[a,b]$上每一点都连续时称 $f(x)$ 在区间 $[a,b]$ 上连续。

由定义可知，求连续函数在一点的极限值，只要求函数在该点的函数值。

2. 连续函数的运算

若 $f(x)$，$g(x)$ 在点 x_0 处连续，则

$$f(x)\pm g(x),\ f(x)\cdot g(x),\ \frac{f(x)}{g(x)}\ (g(x_0)\neq 0)$$

在 x_0 也续连。

若 $f(x)$，$g(x)$ 在点 x_0 处连续，则其复合函数也是连续函数。由此

$$\lim_{x\to x_0}f(x)=f(x_0)=f(\lim_{x\to x_0}x)$$

即对连续函数求极限时，可交换极限符号和函数符号的次序。

3. 连续函数的基本性质

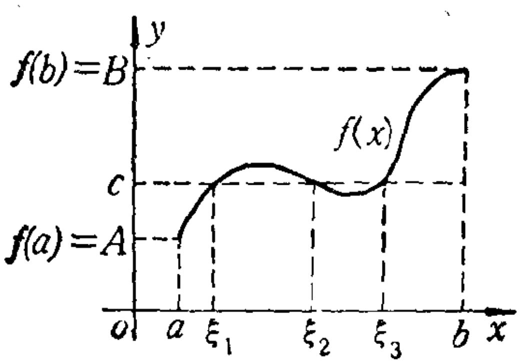
i) 若函数 $f(x)$ 在闭区间 $[a,b]$ 上连续，则 $f(x)$ 在 $[a,b]$ 上至少取得它的最大值和最小值各一次.

ii) 设函数 $f(x)$ 在闭区间 $[a,b]$ 上连续，在这区间的端点取不同的函数值 $f(a)=A$ 与 $f(b)=B$。

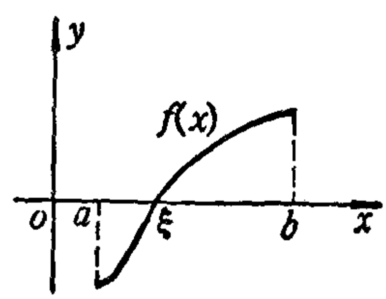
那么，不论 C 是 A 与 B 之间的怎样的数，在开区间 (a,b) 内至少有一点 ξ，使得：

$f(\xi)=C \qquad (a<\xi<b)$ （见图 1-3(a)）

特别：若 $f(a)$ 与 $f(b)$ 异号，则在 (a,b) 内至少存在一点 ξ，使 $f(\xi)=0$ （见图 1-3(b)）



(a)



(b)

图 1-3

4. 函数的间断点

由函数的连续性定义可知，$f(x)$ 在 x_0 有下列情形之一：

1) $f(x)$ 在 x_0 没有定义。

2) $f(x)$ 在 x_0 虽有定义，但 $\lim\limits_{x\to x_0} f(x)$ 不存在。

3) 尽管 $\lim\limits_{x\to x_0} f(x)$ 存在但不等于 $f(x_0)$。

则函数 $f(x)$ 在 $x=x_0$ 不连续，而点 x_0 称为 $f(x)$ 的不连续

点或间断点。

因此，可以粗略地说，如果不用从纸上提起笔而能画出函数的图形，那么，这个函数就是连续的。

例如，函数 $f(x)=\frac{1}{x}$ 在 $x=0$ 没有定义，所以在 $x=0$ 不连续。函数 $f(x)=\sin\frac{1}{x^2-1}$，当 $x=\pm1$ 时也不连续。

§1.2 函数的导数与微分

由函数的极限概念可以分析函数的瞬时变化率，函数的瞬时变化率(当其存在时)叫做函数的导数，确定导数的过程叫做求导。

1.2.1 函数导数的定义

若函数 $y=f(x)$ 在 x_0 的某个邻域内有定义，Δx 为自变量改变量，$\Delta y=f(x_0+\Delta x)-f(x_0)$ 为函数的改变量。

如果极限

$$\lim_{\Delta x\to 0}\frac{\Delta y}{\Delta x}=\lim_{\Delta x\to 0}\frac{f(x_0+\Delta x)-f(x_0)}{\Delta x} \tag{1-6}$$

存在，则称函数 $f(x)$ 在 x_0 处可导。该极限值称为 $f(x)$ 在 x_0 处的导数，记作

$$f'(x_0),\text{或}\ \left.\frac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}x}\right|_{x=x_0},\quad y'\big|_{x=x_0}\cdots\cdots$$

函数在一点 x_0 的导数表示 $f(x)$ 在 x_0 的变化率。速度是路程对时间的一阶导数，比热是热量对温度的一阶导数，电流强度是电量对时间的导数，在几何上 $f'(x_0)$ 表示曲线上