Мисник М.П.

Элементы математического анализа

Часть 2

Дифференцирование Интегрирование

2016г.

Методическое пособие по математике предназначено для студентов химиков и химиков-технологов.
Целью является оказание помощи студентам в самостоятельном изучении рассмотренных тем: дифференцирование и интегрирование.
В работе приведены примеры с решением, а так же химические примеры с использованием математического аппарата.

Содержание

ВВЕДЕНИЕ

Курс «Математика» является фундаментальной общеобразовательной дисциплиной для студентов-химиков, изучение которой предусматривает:

- развитие логического и алгоритмического мышления;
- овладение основными методами исследования и решения математических задач;
- выработку умения самостоятельно расширять математические знания и применять математический аппарат при решении прикладных задач.

Цель предлагаемого пособия – показать студентам-химикам роль математики в химии, на примере решения типичных задач химии с использованием математических методов.

1. ПРИМЕНЕНИЕ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНОГО ИСЧИСЛЕНИЯ К РЕШЕНИЮ ЗАДАЧ ХИМИИ

Математические уравнения и методы, используемые в химии, имеют дело не с абстрактными величинами, а с конкретными свойствами атомов и молекул, которые подчиняются естественным природным ограничениям. Иногда эти ограничения бывают довольно жесткими и приводят к резкому сужению числа возможных решений математических уравнений. Иначе говоря, математические уравнения, применяемые в химии, а также их решения должны иметь химический смысл.

1.1. Функции одной переменной

Если под постоянной величиной понимается величина, не изменяющая своего числового значения в данных условиях, то под переменной величиной понимается величина, которая изменяет свое числовое значение в данных условиях. Множество значений переменной величины называется *областью ее изменения* или *областью определения функции.*

Если известен закон, по которому значению переменной x, взятому из области ее изменения ставится в соответствие единственное значение переменной y, то говорят, что y есть функция от x и обозначают $y = f(x)$ или $y = y(x)$. Здесь x – независимая переменная или аргумент, y – зависимая переменная или функция. Символы $f(x)$ или $y(x)$ обозначают закон соответствия между x и y.

Понятие функциональной зависимости широко используется при решении практических задач химии.

П р и м е р ы.

1. Если переменную величину «время» обозначить буквой t, а количество вещества, возникшего в результате некоторой реакции за время t обозначить Q, то функция $Q = Q(t)$ будет определять зависимость этого количества от времени.

2. Если t - время, а q - количество электричества, протекающего через сечение проводника в единицу времени, то функция $q = q(t)$ будет определять функциональную зависимость.

3. Если T - температура нагреваемого тела, а t - время, то функция $T = T(t)$ будет определять зависимость температуры от времени нагревания.

Функции могут обладать свойствами, полезными в практическом применении.

<u>Определение 1.1.</u> Функция $y = f(x)$ называется *возрастающей в интервале* (a,b), если для любых двух точек x_1 и x_2 из указанного интервала, удовлетворяющих неравенству $x_1 < x_2$, выполняется неравенство $f(x_1) < f(x_2)$ (рис. 1.1).

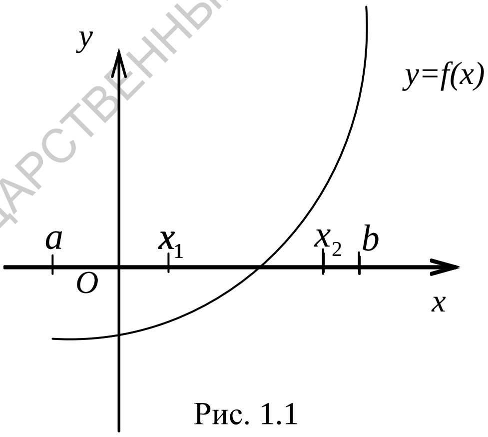

Рис. 1.1

<u>Определение 1.2.</u> Функция $y = f(x)$ называется *убывающей в интервале* (a,b), если для любых двух точек x_1 и x_2 из указанного интервала, удовлетворяющих неравенству $x_1 < x_2$, выполняется неравенство $f(x_1) > f(x_2)$ (рис. 1.2).

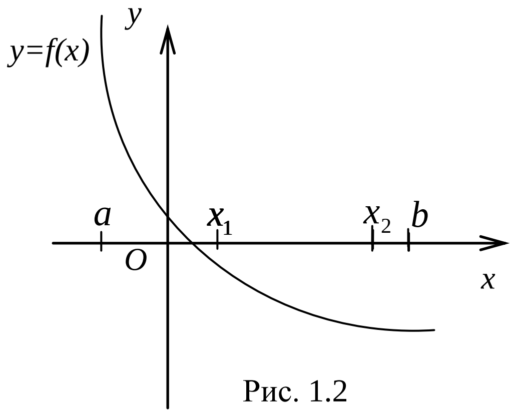

Рис. 1.2

<u>Определение 1.3.</u> Точка $x_0 \in (a,b)$ называется *точкой минимума функции* $y = f(x)$, если при любом достаточно малом $h > 0$, выполняется неравенство $f(x_0 - h) > f(x_0)$ и $f(x_0 + h) < f(x_0)$.

<u>Определение 1.4.</u> Точка $x_0 \in (a,b)$ называется *точкой максимума функции* $y = f(x)$, если при любом достаточно малом $h > 0$, выполняется неравенство $f(x_0 - h) < f(x_0)$ и $f(x_0 + h) > f(x_0)$.

<u>Определение 1.5.</u> Значение функции $y = f(x)$ в точках минимума (максимума) называются *минимумом(максимумом) функции* или *экстремумом функции* (рис. 1.3): $\max\limits_{(a,b)} f(x) = f(x_1)$; $\min\limits_{(a,b)} f(x) = f(x_2)$.

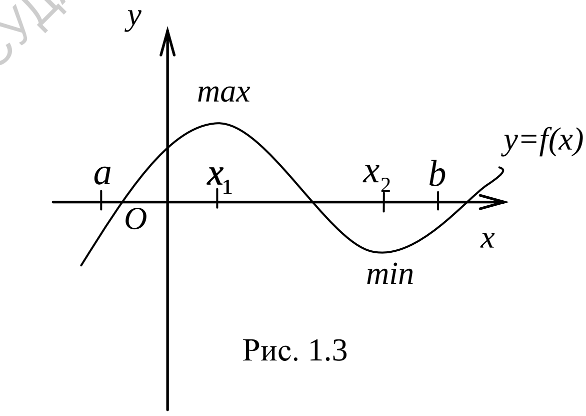

Рис. 1.3

Определение 1.6. Функция $y = f(x)$ называется *выпуклой в интервале* (a,b), если график этой функции расположен ниже касательной, проведенной в любой точке этого интервала (рис. 1.4).

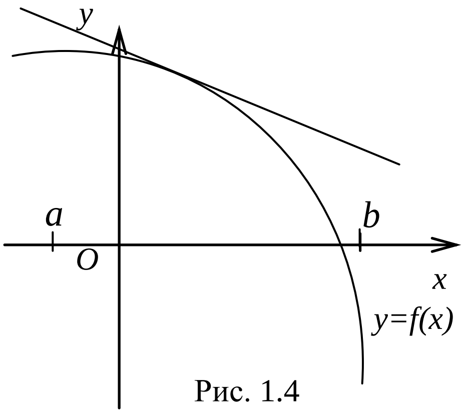

Рис. 1.4

Определение 1.7. Функция $y = f(x)$ называется *вогнутой в интервале* (a,b), если график этой функции расположен выше касательной, проведенной в любой точке этого интервала (рис. 1.5).

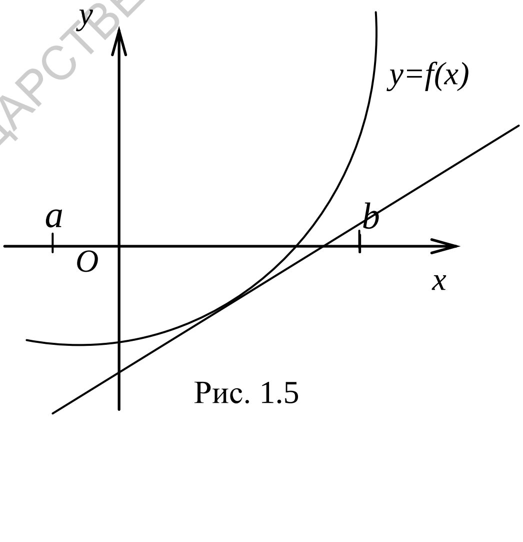

Рис. 1.5

Определение 1.8. Точка $x_0 \in (a,b)$ называется *точкой перегиба функции* $y = f(x)$, если существует такая окрестность точки x_0 оси абсцисс, в пределах которой функция $y = f(x)$ слева и справа от точки x_0 имеет разные направления выпуклости (рис. 1.6).

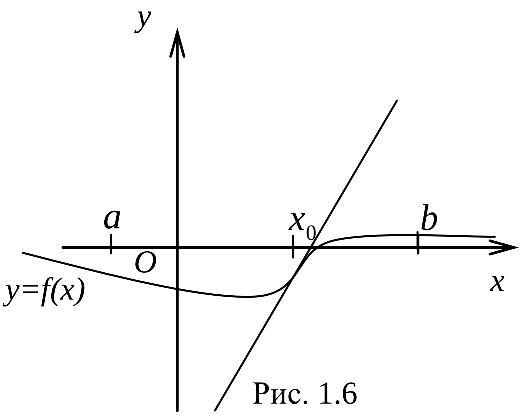

Рис. 1.6

Если необходимо исследовать скорость изменения функции в зависимости от изменения независимой переменной используется понятие производной функции.

Определение 1.9. *Производной функции* $y = f(x)$ в точке x называется

$$\lim_{\Delta x \to 0} \frac{f(x+\Delta x) - f(x)}{\Delta x} = \lim_{\Delta x \to 0} \frac{\Delta y}{\Delta x},$$

где Δx – приращение независимой переменной, Δy – приращение функции. Обозначается y', $f'(x)$, $\frac{dy}{dx}$, $\frac{df(x)}{dx}$.

Вычисление производной функции называется *дифференцированием*.

Правила дифференцирования, а также таблицы производных элементарных функций приведены в литературе.

Вообще говоря, в химии нет бесконечно малых величин. Каждая физическая величина – время, энергия, масса, расстояние – имеет конечное наименьшее значение, которому присущ химический смысл. Например, время в химии ограничено снизу значением 10^{-14} сек, которое характеризует самую быструю реакцию среди всех возможных: $H + H = H_2$.

Нижняя граница для расстояний – это 10^{-10} м, то есть характерный размер атомов. Меньшие значения с точки зрения химии уже не имеют смысла. Раз нет бесконечно малых величин, то, строго говоря, теряет смысл понятие «производной в точке», которое равно отношению бесконечно малых приращений функции и аргумента. Тем не менее, в химии производная играет очень большую роль: производные по температуре, давлению и объему составляют основу математического аппарата химической термодинамики, а производные по времени – химической кинетики. Это связано с тем, что при той точности измерений, которая принята в химии, отличие производной от отношения конечных приращений экспериментально не наблюдаемо, то есть практически равно нулю: $f'(x) - \dfrac{\Delta y}{\Delta x} \approx 0$.

Для вышеприведенных примеров функциональных зависимостей, величина $Q'(t)$ определяет скорость, с которой протекает реакция, $q'(t)$ - изменение силы тока, а $T'(t)$ - скорость нагревания.

Геометрически $f'(x) = tg\alpha$, где α - угол наклона касательной в точке x к графику функции $y = f(x)$ с положительным направлением оси абсцисс. Отсюда следует, что если производная функции положительна в точках некоторой области изменения независимой переменной, то функция возрастает в этой области, если отрицательна – функция убывает.

Производная сама является функцией, а, следовательно, возможно повторное дифференцирование, определяющее производную второго порядка

$$f''(x) = \left(f'(x)\right)' = \frac{d^2 f}{dx^2}.$$

Физическим смыслом второй производной является ускорение функции.

Если процесс дифференцирования продолжить, то n-ая производная вычисляется по формуле

$$f^{(n)}(x) = \left(f^{(n-1)}(x)\right)' = \frac{d^n f}{dx^n}$$

Операция дифференцирования связана с определением дифференциала функции: df.

Из соотношения

$$\lim_{\Delta x \to 0} \frac{f(x+\Delta x) - f(x)}{\Delta x} = \lim_{\Delta x \to 0} \frac{\Delta y}{\Delta x} = f'(x),$$

можно записать

$$\frac{f(x+\Delta x) - f(x)}{\Delta x} = f'(x) + \alpha(\Delta x),$$

где $\alpha(\Delta x)$, величина, стремящаяся к нулю, когда приращение аргумента Δx стремится к нулю.

Отсюда

$$f(x+\Delta x) - f(x) = f'(x)\Delta x + \alpha(\Delta x)\Delta x.$$

Величина приращения функции $\Delta f = f(x+\Delta x) - f(x)$ определяется значением $f'(x)\Delta x$.

<u>Определение 1.10.</u> *Дифференциалом функции* $y = f(x)$ называется главная часть ее приращения, линейная относительно приращения аргумента, равная произведению производной функции на дифференциал независимой переменной $(dx = \Delta x)$ $df = f'(x)dx$.

Дифференциал функции используется, в частности, для приближенных вычислений значений функций. Если приращение Δx аргумента мало по абсолютной величине, то $\Delta f \approx df$ и

$$f(x+\Delta x) \approx f(x) + f'(x)\Delta x.$$

В исследовании поведения функции большой интерес представляет знание точек минимума, максимума, перегиба функции, а также интервалов возрастания, убывания, характер прогиба. Анализ поведения производных первого и второго порядков дают возможность ответа на интересующие вопросы.

Так, если в некоторой точке x_0 $f'(x_0) = 0$ и $f''(x_0) > 0$, то точка x_0 является точкой минимума функции, а если $f'(x_0) = 0$ и $f''(x_0) < 0$, то точка x_0 является точкой максимума функции $y = f(x)$.

Если $f''(x) > 0$, то в точке x функция вогнута, а если $f''(x) < 0$, то функция выпукла.

Необходимым условием существования точки перегиба x_0 является $f''(x_0)=0$. Точкой перегиба x_0 будет при выполнении достаточного условия: если для любой малой величины $h>0$

$$f''(x_0-h)>0,\quad f''(x_0+h)>0 \text{ или } f''(x_0-h)<0,\quad f''(x_0+h)>0.$$

В качестве примеров применения дифференциального исчисления к исследованию химических процессов, рассмотрим несколько задач.

Задача 1.1. Определение оптимальных условий работы компрессора при двухступенчатом сжатии газа.

Решение данной задачи сводится к определению промежуточного давления P_2, для которого расход энергии является минимальным.

Пусть P_1 - начальное давление, а P_3 - конечное давление. Если газ поступает с температурой T_1 и охлаждается до температуры T, то работа выражается формулой

$$W=NRT_1\cdot\frac{k}{k-1}\cdot\left[\left(\frac{P_2}{P_1}\right)^{\frac{k-1}{k}}-2+\left(\frac{P_3}{P_2}\right)^{\frac{k-1}{k}}\right],$$

где W - работа, кГм; N - количество сжимаемого газа, кг-моль; R - газовая постоянная; k - отношение теплоемкости при постоянном давлении к теплоемкости при постоянном объеме.

Для определения минимума функции $W=W(P_2)$, следует вычислить ее производную $\dfrac{dW}{dP_2}$ и приравняв ее к нулю, определить значение P_2. Затем при найденном значении P_2 подсчитать $\dfrac{d^2W}{dP_2^2}$.

$$\frac{dW}{dP_2}=NRT_1\cdot\frac{k}{k-1}\cdot\left(\frac{k-1}{k}\cdot P_1^{\frac{1-k}{k}}\cdot P_2^{-\frac{1}{k}}-\frac{k-1}{k}\cdot P_3^{\frac{k-1}{k}}\cdot P_2^{\frac{1-2k}{k}}\right)=0.$$

Решая уравнение, имеем

$$P_2^{\frac{2k-2}{k}}=P_3^{\frac{k-1}{k}}\cdot P_1^{\frac{k-1}{k}}\Rightarrow P_2=\sqrt{P_1\cdot P_3}.$$

Следовательно, при $P_2 = \sqrt{P_1 \cdot P_3}$, исходная функция может иметь минимум. Для проверки этого факта необходимо вычислить вторую производную.

$$\frac{d^2W}{dP_2^2} = NRT_1 \cdot \frac{k}{k-1} \cdot \left[\frac{k-1}{k} \cdot P_1^{\frac{1-k}{k}} \cdot \left(-\frac{1}{k}\right) \cdot P_2^{-\left(1+\frac{1}{k}\right)} - \frac{k-1}{k} \cdot P_3^{\frac{k-1}{k}} \cdot \frac{1-2k}{k} \cdot P_2^{\frac{1-3k}{k}} \right]$$

Производную второго порядка необходимо вычислить в точке предполагаемого минимума, то есть при $P_2 = \sqrt{P_1 \cdot P_3}$.

$$\frac{d^2W}{dP_2^2} = NRT_1 \cdot \frac{k}{k-1} \cdot \left[\frac{k-1}{k} \cdot P_1^{\frac{1-k}{k}} \cdot \left(-\frac{1}{k}\right) \cdot \left(P_1^{\frac{1}{2}} P_3^{\frac{1}{2}}\right)^{-\left(1+\frac{1}{k}\right)} - \frac{k-1}{k} \cdot P_3^{\frac{k-1}{k}} \cdot \frac{1-2k}{k} \cdot \left(P_1^{\frac{1}{2}} P_3^{\frac{1}{2}}\right)^{\frac{1-3k}{k}} \right] =$$

$$= NRT_1 \cdot \frac{k}{k-1} \cdot \left[\frac{1-k}{k^2} \cdot P_1^{\frac{1-k}{k}} \cdot P_1^{\frac{-k-1}{2k}} \cdot P_3^{\frac{-k-1}{2k}} - \frac{(k-1)(1-2k)}{k^2} \cdot P_3^{\frac{k-1}{k}} \cdot P_1^{\frac{1-3k}{2k}} \cdot P_3^{\frac{1-3k}{2k}} \right] =$$

$$= NRT_1 \cdot \frac{k}{k-1} \cdot \left[\frac{1-k}{k^2} \cdot P_1^{\frac{1-3k}{2k}} \cdot P_3^{\frac{-k-1}{2k}} + \frac{(1-k)(1-2k)}{k^2} \cdot P_1^{\frac{1-3k}{2k}} \cdot P_3^{\frac{-k-1}{2k}} \right] =$$

$$= NRT_1 \cdot \frac{k}{k-1} \cdot \frac{1-k}{k^2} \cdot P_1^{\frac{1-3k}{2k}} \cdot P_3^{\frac{-k-1}{2k}} \cdot (1+1-2k) =$$

$$= NRT_1 \cdot \frac{k}{k-1} \cdot \frac{2(1-k)(1-k)}{k^2} \cdot P_1^{\frac{1-3k}{2k}} \cdot P_3^{\frac{-k-1}{2k}} = NRT_1 \cdot \frac{k}{k-1} \cdot \frac{2(1-k)^2}{k^2} \cdot P_1^{\frac{1-3k}{2k}} \cdot P_3^{\frac{-k-1}{2k}}.$$

Таким образом,

$$\frac{d^2W}{dP_2^2} = NRT_1 \cdot \frac{k}{k-1} \cdot \frac{2(1-k)^2}{k^2} \cdot P_1^{\frac{1-3k}{2k}} \cdot P_3^{\frac{-k-1}{2k}}.$$

Учитывая, что $k > 1$, полученное выражение положительно и, следовательно, работа компрессора при двухступенчатом сжатии газа имеет минимальное значение при $P_2 = \sqrt{P_1 \cdot P_3}$.

Соотношение выбирается оптимальным для промежуточного давления при двухступенчатом сжатии. Так как в полученном выражении отсутствует константа k, то оно имеет место для любого политропического сжатия, что дает возможность обобщения на трехступенчатое сжатие:

$$P_2 = \sqrt[3]{P_1^2 \cdot P_4}\,, \qquad P_3 = \sqrt[3]{P_4^2 \cdot P_1}\,.$$

где P_2, P_3 - оптимальные значения двух промежуточных давлений.■

Задача 1.2. Определение оптимального освещения для фотохимических процессов.

Процессы сульфирования и хлорирования органических соединений осуществляются с применением света. Необходимо вычислить высоту x подвески источника света над площадкой, чтобы освещенность была максимальной.

Предполагается, что площадка располагается под некоторым углом к лучам света (рис. 1.7)

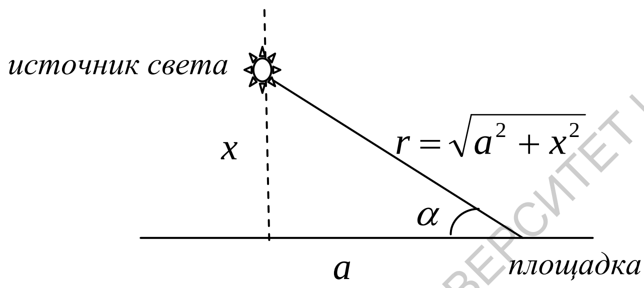

Рис. 1.7

Известно, что освещенность площадки обратно пропорциональна квадрату расстояния ее от источника света r и прямо пропорциональна синусу угла падения световых лучей α:

$$J = \frac{k}{r^2} \cdot \sin\alpha\,.$$

Так как $r^2 = a^2 + x^2$, $\sin\alpha = \dfrac{x}{\sqrt{a^2 + x^2}}$, то $J(x) = kx\left(a^2 + x^2\right)^{-\frac{3}{2}}$. Решаем задачу на экстремум.

$$\frac{dJ}{dx} = k\left(a^2 + x^2\right)^{-\frac{5}{2}}\left[1 - 3x^2\left(a^2 + x^2\right)^{-1}\right] = 0\,.$$

Отсюда

$$\frac{3x^2}{a^2+x^2}=1 \Rightarrow x=\sqrt{\frac{a^2}{2}} \approx 0{,}707a\,.$$

Проверим выполнение достаточного условия существования экстремума.

$$\frac{d^2J}{dx^2}=k\cdot\left(-\frac{3}{2}\right)\left(a^2+x^2\right)^{-\frac{5}{2}}\cdot 2x\cdot\left(1-\frac{3x^2}{a^2+x^2}\right)+$$

$$+k\cdot\left(a^2+x^2\right)^{-\frac{3}{2}}\cdot\frac{-6x\left(a^2+x^2\right)-3x^2\cdot 2x}{\left(a^2+x^2\right)^2}=$$

$$=k\cdot\left(-\frac{3x}{\left(a^2+x^2\right)^{\frac{5}{2}}}\cdot\frac{a^2+x^2-3x^2}{a^2+x^2}-\frac{6x^3+6xa^2+6x^3}{\left(a^2+x^2\right)^2}\right)=$$

$$=\frac{k}{\left(a^2+x^2\right)^{\frac{7}{2}}}\cdot\left(-3xa^2+9x^3-12x^3-6xa^2\right)=\frac{k}{\left(a^2+x^2\right)^{\frac{7}{2}}}\cdot\left(-9xa^2-3x^3\right)=$$

$$=-\frac{3kx}{\left(a^2+x^2\right)^{\frac{7}{2}}}\cdot\left(3a^2+x^2\right)<0$$

Следовательно, значение $x \approx 0{,}707a$ является точкой максимума исходной функции.■

1.2. Функции нескольких переменных

Понятия производной и дифференциала можно обобщить для функций, зависящих от нескольких независимых переменных.

Пусть дана функция $u=f(x_1,x_2,\ldots,x_n)$, зависящая от переменных $x_1,x_2,\ldots,x_n$. Если зафиксировать все переменные за исключением одной, то функцию можно считать функцией одной переменной и можно рассматривать производную функции по этой переменной.

Определение 1.11. *Приращением функции* $u=f(x_1,x_2,\ldots,x_n)$ по независимой переменной x_i называется величина

$$\Delta_i u = f(x_1,x_2,..x_i+\Delta x_i,..x_n)-f(x_1,x_2,..x_i,..x_n),\quad i=1,2,\ldots,n,$$

где Δx_i – приращение независимой переменной x_i

<u>Определение 1.12.</u> *Частной производной функции* $u = f(x_1, x_2, \ldots, x_n)$ по независимой переменной x_i называется конечный предел

$$\lim_{\Delta x_i \to 0} \frac{f(x_1, x_2, \ldots x_i + \Delta x_i, \ldots x_n) - f(x_1, x_2, \ldots x_i, \ldots x_n)}{\Delta x_i} = \lim_{\Delta x_i \to 0} \frac{\Delta_i u}{\Delta x_i} = \frac{\partial f}{\partial x_i}, \quad i = 1, 2, \ldots, n,$$

где Δx_i – приращение независимой переменной x_i

Обозначается u'_{x_i}, f'_{x_i}, $\dfrac{\partial f}{\partial x_i}$, $\dfrac{\partial u}{\partial x_i}$.

При вычислении частной производной функции нескольких переменных справедливы правила и формулы дифференцирования функции одной переменной.

Примеры.

1. Дана функция $u = x^3 + 2y^2 - 3xy - 4x + 2y + 5$. Найти $\dfrac{\partial u}{\partial x}$, $\dfrac{\partial u}{\partial y}$.

При вычислении $\dfrac{\partial u}{\partial x}$, будем считать y величиной постоянной, тогда $\dfrac{\partial u}{\partial x} = 3x^2 - 3y - 4$. При вычислении $\dfrac{\partial u}{\partial y}$, будем считать x величиной постоянной, тогда $\dfrac{\partial u}{\partial y} = 2y - 3x + 2$.

2. Дана функция $u = e^{xy(x^2+y^2)}$. Найти $\dfrac{\partial u}{\partial x}$, $\dfrac{\partial u}{\partial y}$.

$$\frac{\partial u}{\partial x} = e^{xy(x^2+y^2)}\left(x \cdot y \cdot \left(x^2 + y^2\right)\right)'_x = e^{xy(x^2+y^2)}\left(y \cdot \left(x^2 + y^2\right) + xy \cdot 2x\right) = e^{xy(x^2+y^2)}\left(3x^2 y + y^3\right).$$

$$\frac{\partial u}{\partial y} = e^{xy(x^2+y^2)}\left(x \cdot y \cdot \left(x^2 + y^2\right)\right)'_y = e^{xy(x^2+y^2)}\left(x \cdot \left(x^2 + y^2\right) + xy \cdot 2y\right) = e^{xy(x^2+y^2)}\left(3xy^2 + x^3\right).$$

Частная производная $\dfrac{\partial f}{\partial x_i}$ сама является функцией переменных $x_1, x_2, \ldots, x_n$, следовательно, можно рассматривать ее частные производные, то есть получать частные производные второго порядка:

$$\frac{\partial}{\partial x_i}\left(\frac{\partial f}{\partial x_i}\right)=\frac{\partial^2 f}{\partial x_i^2}=f''_{x_i x_i}(x_1,x_2,\ldots,x_i,\ldots x_n),\qquad i=1,2,\ldots,n.$$

Эти производные называются *прямыми частными производными второго порядка.*

Частные производные вида

$$\frac{\partial}{\partial x_j}\left(\frac{\partial f}{\partial x_i}\right)=\frac{\partial^2 f}{\partial x_i \partial x_j}=f''_{x_i x_j}(x_1,x_2,\ldots,x_i,\ldots,\ldots x_j,\ldots x_n),\qquad i,j=1,2,\ldots,n$$

называются *смешанными частными производными второго порядка.*

Аналогично определяются и обозначаются частные производные третьего и высших порядков, например:

$$\frac{\partial}{\partial x_i}\left(\frac{\partial^2 f}{\partial x_i^2}\right)=\frac{\partial^3 f}{\partial x_i^3}=f'''_{x_i x_i x_i}(x_1,x_2,\ldots,x_i,\ldots,x_n),\qquad i=1,2,\ldots,n,$$

$$\frac{\partial}{\partial x_j}\left(\frac{\partial^2 f}{\partial x_i^2}\right)=\frac{\partial^3 f}{\partial x_i^2 \partial x_j}=f'''_{x_i x_i x_j}(x_1,x_2,\ldots,x_i,\ldots,\ldots x_j,\ldots x_n),\qquad i,j=1,2,\ldots,n,$$

$$\frac{\partial}{\partial x_i}\left(\frac{\partial^2 f}{\partial x_j^2}\right)=\frac{\partial^3 f}{\partial x_j^2 \partial x_i}=f'''_{x_j x_j x_i}(x_1,x_2,\ldots,x_i,\ldots,\ldots x_j,\ldots x_n),\qquad i,j=1,2,\ldots,n.$$

Смешанные производные, отличающиеся друг от друга лишь последовательностью дифференцирования, равны между собой, если они непрерывны, например $\frac{\partial^2 f}{\partial x_1 \partial x_2}=\frac{\partial^2 f}{\partial x_2 \partial x_1}$; $\frac{\partial^3 f}{\partial x_1^2 \partial x_2}=\frac{\partial^3 f}{\partial x_2 \partial x_1^2}$.

П р и м е р.

Дана функция $u=e^{xy(x^2+y^2)}$. Найти $\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$, $\frac{\partial^2 u}{\partial y^2}$ $\frac{\partial^2 u}{\partial x \partial y}$, $\frac{\partial^2 u}{\partial y \partial x}$.

Результат предыдущего примера определяет производные данной функции первого порядка. Тогда

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = \frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right) = \left(e^{xy(x^2+y^2)}\left(3x^2y + y^3\right)\right)_x' =$$

$$= \left(e^{xy(x^2+y^2)}\right)_x'\left(3x^2y + y^3\right) + e^{xy(x^2+y^2)}\left(3x^2y + y^3\right)_x' = e^{xy(x^2+y^2)}\left(3x^2y + y^3\right)^2 + e^{xy(x^2+y^2)} \cdot 6xy =$$
$$= e^{xy(x^2+y^2)}\left(\left(3x^2y + y^3\right)^2 + 6xy\right).$$

$$\frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = \frac{\partial}{\partial y}\left(\frac{\partial u}{\partial y}\right) = \left(e^{xy(x^2+y^2)}\left(3y^2x + x^3\right)\right)_y' =$$
$$= \left(e^{xy(x^2+y^2)}\right)_y'\left(3xy^2 + x^3\right) + e^{xy(x^2+y^2)}\left(3xy^2 + x^3\right)_y' = e^{xy(x^2+y^2)}\left(3xy^2 + x^3\right)^2 + e^{xy(x^2+y^2)} \cdot 6xy =$$
$$= e^{xy(x^2+y^2)}\left(\left(3xy^2 + x^3\right)^2 + 6xy\right).$$

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x \partial y} = \frac{\partial}{\partial y}\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right) = \left(e^{xy(x^2+y^2)}\left(3x^2y + y^3\right)\right)_y' =$$
$$= \left(e^{xy(x^2+y^2)}\right)_y'\left(3x^2y + y^3\right) + e^{xy(x^2+y^2)}\left(3x^2y + y^3\right)_y' = e^{xy(x^2+y^2)}\left(3xy^2 + x^3\right)\left(3x^2y + y^3\right) +$$
$$+ e^{xy(x^2+y^2)}\left(3x^2 + 3y^2\right).$$

$$\frac{\partial^2 u}{\partial y \partial x} = \frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\partial u}{\partial y}\right) = \left(e^{xy(x^2+y^2)}\left(3xy^2 + x^3\right)\right)_x' =$$
$$= \left(e^{xy(x^2+y^2)}\right)_x'\left(3xy^2 + x^3\right) + e^{xy(x^2+y^2)}\left(3xy^2 + x^3\right)_x' = e^{xy(x^2+y^2)}\left(3x^2y + y^3\right)\left(3xy^2 + x^3\right) +$$
$$+ e^{xy(x^2+y^2)}\left(3y^2 + 3x^2\right).$$

Очевидно, что $\dfrac{\partial^2 u}{\partial x \partial y} = \dfrac{\partial^2 u}{\partial y \partial x}$.

Правила дифференцирования неявных функций полно излагаются в литературе.

Особое внимание следует обратить на дифференцирование сложных функций.

Пусть $u = f(x_1, x_2, \ldots, x_n)$, где $x_1 = \varphi_1(t), x_2 = \varphi_2(t), \ldots, x_n = \varphi_n(t)$ и функции $f(x_1, x_2, \ldots, x_n)$, $x_i = \varphi_i(t)$, $i = 1, 2, \ldots, n$ дифференцируемы. Тогда производная сложной функции $u = f(\varphi_1(t), \varphi_2(t), \ldots, \varphi_n(t))$ вычисляется по формуле

$$\frac{du}{dt} = \frac{\partial f}{\partial x_1}\frac{dx_1}{dt} + \frac{\partial f}{\partial x_2}\frac{dx_2}{dt} + \ldots + \frac{\partial f}{\partial x_n}\frac{dx_n}{dt}$$

и является обыкновенной производной по переменной t.

П р и м е р.

Дана функция $u = e^{x^2+y^2}$, где $x = \cos t,\ y = \sin t$. Найти $\dfrac{du}{dt}$.

Имеем

$$\frac{du}{dt} = \frac{\partial u}{\partial x}\frac{dx}{dt} + \frac{\partial u}{\partial y}\frac{dy}{dt} = e^{x^2+y^2} \cdot 2x \cdot (-\sin t) + e^{x^2+y^2} \cdot 2y \cdot \cos t =$$
$$= 2e^{x^2+y^2}\left(y\cos t - x\sin t\right).$$

Подставив выражения x, y через t, получим

$$\frac{du}{dt} = 2e^{\cos^2 t+\sin^2 t}\left(\sin t\cos t - \cos t\sin t\right) = 0.$$

Пусть $u = f(x_1, x_2, \ldots, x_n)$, где $x_1 = \varphi_1(t,v),\ x_2 = \varphi_2(t,v), \ldots, x_n = \varphi_n(t,v)$ и функции $f(x_1, x_2, \ldots, x_n)$, $x_i = \varphi_i(t,v)$, $i = 1,2,\ldots,n$ дифференцируемы. Тогда функция $u = f(\varphi_1(t,v), \varphi_2(t,v), \ldots, \varphi_n(t,v))$ является сложной функцией двух переменных t, v и при вычислении производных будем иметь частные производные, определяемые формулами

$$\frac{\partial u}{dt} = \frac{\partial f}{\partial x_1}\frac{\partial x_1}{\partial t} + \frac{\partial f}{\partial x_2}\frac{\partial x_2}{\partial t} + \ldots + \frac{\partial f}{\partial x_n}\frac{\partial x_n}{\partial t};$$
$$\frac{\partial u}{\partial v} = \frac{\partial f}{\partial x_1}\frac{\partial x_1}{\partial v} + \frac{\partial f}{\partial x_2}\frac{\partial x_2}{\partial v} + \ldots + \frac{\partial f}{\partial x_n}\frac{\partial x_n}{\partial v}.$$

П р и м е р.

Дана функция $u = x^2 + y^2 + z$, где $x = t^3,\ y = tv,\ z = t^2\sqrt{v}$. Найти $\dfrac{\partial u}{\partial t}, \dfrac{\partial u}{\partial v}$.

На основании формул дифференцирования сложных функций имеем

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial u}{\partial x}\frac{\partial x}{\partial t} + \frac{\partial u}{\partial y}\frac{\partial y}{\partial t} + \frac{\partial u}{\partial z}\frac{\partial z}{\partial t} = 2x \cdot 3t^2 + 2y \cdot v + 1 \cdot 2t\sqrt{v};$$
$$\frac{\partial u}{\partial v} = \frac{\partial u}{\partial x}\frac{\partial x}{\partial v} + \frac{\partial u}{\partial y}\frac{\partial y}{\partial v} + \frac{\partial u}{\partial z}\frac{\partial z}{\partial v} = 2x \cdot 0 + 2y \cdot t + 1 \cdot t^2\frac{1}{2\sqrt{v}} = 2yt + \frac{t^2}{2\sqrt{v}}.$$

Определение 1.13. *Полным приращением функции* $u = f(x_1, x_2, \ldots, x_n)$ в точке $M(x_1, x_2, \ldots, x_n)$ называется разность

$$\Delta u = f(x_1 + \Delta x_1, x_2 + \Delta x_2, \ldots, x_n + \Delta x_n) - f(x_1, x_2, \ldots, x_n),$$

где Δx_i – приращение независимой переменной x_i

Определение 1.14. Если полное приращение Δu функции $u = f(x_1, x_2, \ldots, x_n)$ в точке $M(x_1, x_2, \ldots, x_n)$ можно представить в виде

$$\Delta u = A_1 \cdot \Delta x_1 + A_2 \cdot \Delta x_2 + \ldots + A_n \cdot \Delta x_n + \varepsilon_1 \cdot \Delta x_1 + \varepsilon_2 \cdot \Delta x_2 + \ldots + \varepsilon_n \cdot \Delta x_n,$$

где A_i не зависят от Δx_i, а $\varepsilon_i \to 0$ при $\Delta x_i \to 0$, то функция $u = f(x_1, x_2, \ldots, x_n)$ называется дифференцируемой в точке $M(x_1, x_2, \ldots, x_n)$.

Определение 1.15. *Полным дифференциалом функции* $u = f(x_1, x_2, \ldots, x_n)$ в точке $M(x_1, x_2, \ldots, x_n)$ называется главная часть полного приращения функции и имеет вид

$$du = \frac{\partial f}{\partial x_1} dx_1 + \frac{\partial f}{\partial x_2} dx_2 + \ldots + \frac{\partial f}{\partial x_n} dx_n .$$

Полное приращение функции Δu отличается от полного дифференциала этой функции du при малых значениях приращения независимых переменных на малую величину, поэтому для дифференцируемой функции $u = f(x_1, x_2, \ldots, x_n)$ справедливы равенства

$$\Delta u \approx du;$$

$$f(x_1 + \Delta x_1, x_2 + \Delta x_2, \ldots, x_n + \Delta x_n) \approx f(x_1, x_2, \ldots, x_n) + du .$$

Этот факт используется при решении практических задач.

Определение 1.16. *Дифференциалом второго порядка функции* $u = f(x_1, x_2, \ldots, x_n)$ называется дифференциал от ее полного дифференциала, то есть $d^2u = d(du)$.

Аналогично определяются дифференциалы третьего и высшего порядков: $d^3u = d(d^2u)$ и, в общем случае, $d^n u = d(d^{n-1}u)$.

Если x_1, x_2 - независимые переменные и функция $u = f(x_1, x_2)$ имеет непрерывные частные производные, то

$$d^2u = \frac{\partial^2 f}{\partial x_1^2} dx_1^2 + 2\frac{\partial^2 f}{\partial x_1 \partial x_2} dx_1 dx_2 + \frac{\partial^2 f}{\partial x_2^2} dx_2^2 .$$

Вообще, имеет место формула

$$d^n u = \left(\frac{\partial}{\partial x_1} dx_1 + \frac{\partial}{\partial x_2} dx_2 \right)^n u,$$

которая формально раскрывается по биномиальному закону.

Часто в практических задачах требуется найти точки экстремума функции нескольких переменных. Рассмотрим это понятие для функции двух независимых переменных.

Определение 1.17. Функция $u = f(x_1, x_2)$ имеет *максимум (минимум)* в точке $M_0(x_1^0, x_2^0)$, если значение функции в этой точке больше (меньше), чем ее значение в любой другой точке $M(x_1, x_2)$ некоторой окрестности точки M_0.

Определение 1.18. Максимум (минимум) функции называется ее *экстремумом*. Точка $M_0(x_1^0, x_2^0)$, в которой функция имеет экстремум, называется *точкой экстремума.*

Необходимым условием достижения экстремума функции в точке $M_0(x_1^0, x_2^0)$ является равенство нулю частных производных первого порядка функции в этой точке, то есть

$$\frac{\partial f(x_1^0, x_2^0)}{\partial x_1} = 0, \quad \frac{\partial f(x_1^0, x_2^0)}{\partial x_2} = 0.$$

Точки, в которых частные производные равны нулю, называются *стационарными.* Не всякая стационарная точка является точкой экстремума. Пусть $M_0(x_1^0, x_2^0)$ – стационарная точка функции $u = f(x_1, x_2)$. Обозначим

$$A = \frac{\partial^2 f(x_1^0, x_2^0)}{\partial x_1^2}, \quad B = \frac{\partial^2 f(x_1^0, x_2^0)}{\partial x_1 \partial x_2}, \quad C = \frac{\partial^2 f(x_1^0, x_2^0)}{\partial x_2^2}$$

и подсчитаем величину $\Delta = AC - B^2$. Тогда

1) если $\Delta > 0$, то функция имеет в точке M_0 экстремум:

при $A < 0$ или $C < 0$ – *максимум;*

при $A > 0$ или $C > 0$ – *минимум;*

2) если $\Delta < 0$, то в точке M_0 экстремума функции нет:

3) если $\Delta = 0$, то требуются дополнительные исследования.

Эти условия называются достаточными условиями существования экстремума функции $u = f(x_1, x_2)$.

П р и м е р.

Найти экстремум функции $u = x^2 + xy + y^2 - 3x - 6y.$

Найдем частные производные первого порядка:

$$\frac{\partial u}{\partial x} = 2x + y - 3, \quad \frac{\partial u}{\partial y} = x + 2y - 6.$$

Используя необходимое условие экстремума, находим стационарные точки: $\begin{cases} 2x + y - 3 = 0, \\ x + 2y - 6 = 0, \end{cases}$ откуда $x = 0,\ y = 3;$ $M_0(0;3).$

Находим значения частных производных второго порядка в точке M_0:

$$A = \frac{\partial^2 f(0;3)}{\partial x} = 2, \quad B = \frac{\partial^2 f(0;3)}{\partial x \partial y} = 1, \quad C = \frac{\partial^2 f(0;3)}{\partial y} = 2$$

и подсчитаем $\Delta = AC - B^2 = 3 > 0;\ A > 0.$ Следовательно, в точке $M_0(0;3)$ заданная функция имеет минимум. Значение функции в этой точке $u_{\min} = -9$.

Определение 1.19. *Условным экстремумом* функции $u = f(x_1, x_2)$ называется экстремум этой функции, достигнутый при условии, что переменные x_1, x_2 связаны уравнением $\varphi(x_1, x_2) = 0$, называемым *уравнением связи*.

Отыскание условного экстремума можно свести к исследованию на обычный экстремум *функции Лагранжа*, имеющей вид

$$L(x_1, x_2, \lambda) = f(x_1, x_2) + \lambda\varphi(x_1, x_2),$$

где λ–неопределенный постоянный множитель.

Необходимые условия экстремума функции Лагранжа имеют вид

$$\begin{cases} \dfrac{\partial u}{\partial x_1} \equiv \dfrac{\partial f}{\partial x_1} + \lambda \dfrac{\partial \varphi}{\partial x_1} = 0, \\ \dfrac{\partial u}{\partial x_2} \equiv \dfrac{\partial f}{\partial x_2} + \lambda \dfrac{\partial \varphi}{\partial x_2} = 0, \\ \dfrac{\partial L}{\partial \lambda} = \varphi(x_1, x_2) = 0. \end{cases}$$

Из этой системы трех уравнений можно найти неизвестные x_1, x_2, λ.

1. ПРИМЕНЕНИЕ ИНТЕГРАЛЬНОГО ИСЧИСЛЕНИЯ К РЕШЕНИЮ ХИМИЧЕСКИХ ЗАДАЧ

2.1. Неопределенный интеграл

Определение 2.1. Функция $F(x)$ называется *первообразной* для функции $f(x)$, если

1) они определены и непрерывны на одном множестве X;
2) $\forall x \in X \quad F'(x) = f(x)$ или $dF(x) = f(x)dx$.

Если функция $f(x)$ имеет первообразную $F(x)$, то функция $F(x) + C$, где C - произвольная постоянная, также будет ее первообразной:

$$\left(F(x) + C\right)' = F'(x) = f(x).$$

Таким образом, функция имеет бесконечное множество первообразных.

Нахождение функции $f(x)$ по ее первообразной $F(x)$, является операцией обратной операции дифференцирования.

Определение 2.2. *Неопределенным интегралом* от функции $f(x)$ называется совокупность всех ее первообразных $F(x) + C$.

Обозначается $\int f(x)dx$,

где $\int$ - знак интеграла, $f(x)$ - подынтегральная функция, $f(x)dx$ - подынтегральное выражение, x - переменная интегрирования.

Нахождение первообразной функции называется *интегрированием функции*.

Свойства неопределенного интеграла

1°. $\left(\int f(x)dx\right)' = f(x)$.

2°. $d\left(\int f(x)dx\right) = f(x)dx$.

3°. $\int dF(x) = F(x) + C$.

4°. $\int kf(x)dx = k\int f(x)dx$, где k - постоянная.

5°. $\int \left(f_1(x) + f_2(x) + \ldots + f_n(x)\right)dx = \int f_1(x)dx + \int f_2(x)dx + \ldots + \int f_n(x)dx$.

6°. Если $\int f(x)dx = F(x) + C$ и $u = \varphi(x)$, то $\int f(u)du = F(u) + C$.

При вычислении неопределенных интегралов необходимо знать таблицу первообразных элементарных функций [3].

Чтобы вычислить неопределенный интеграл, необходимо его свести к табличному интегралу, используя свойства интеграла или основные способы вычисления.

Замена переменной в неопределенном интеграле

Замена переменной должна привести неопределенный интеграл к упрощению подынтегрального выражения и, в лучшем случае, к табличному интегралу.

Пусть $x = \varphi(t) \Rightarrow dx = d\varphi(t) \Rightarrow dx = \varphi'(t)dt$. Тогда формула замены переменной будет иметь вид

$$\int f(x)dx = \int f(\varphi(t))\varphi'(t)dt = \int f(\varphi(t))d\varphi(t) = F(\varphi(t)) + C.$$

Обратная замена позволит получить необходимый результат.

Интеграл $\int f(ax+b)dx$, где a,b - постоянные, может быть легко найден с помощью подстановки $t=ax+b$. Действительно

$$\int f(ax+b)dx=\left\{t=ax+b\Rightarrow dt=adx\Rightarrow dx=\frac{1}{a}dt\right\}=\frac{1}{a}\int f(t)dt=$$
$$=\frac{1}{a}F(t)+C=\frac{1}{a}F(ax+b)+C.$$

Пример.

$$\int\cos(2x+3)dx=\left\{t=2x+3\Rightarrow dt=2dx\Rightarrow dx=\frac{1}{2}dt\right\}=\frac{1}{2}\int\cos tdt=$$
$$=\frac{1}{2}\sin t+C=\frac{1}{2}\sin(2x+3)+C.$$

При нахождении $\int f(ax+b)dx$ записи самой подстановки можно не производить, приняв во внимание, что $dx=\frac{1}{a}d(ax+b)$. Таким образом,

$$\int f(ax+b)dx=\frac{1}{a}F(ax+b)+C,$$

где F - первообразная для f.

Примеры.

1. $\int\frac{dx}{3x-5}=\left\{dx=\frac{1}{2}d(3x-5)\right\}=\frac{1}{5}\int\frac{d(3x-5)}{3x-5}=\frac{1}{5}\ln|3x-5|+C.$

2. $\int\sin^2 x\cos xdx=\{t=\sin x\Rightarrow dt=d\sin x\Rightarrow dt=\cos xdx\}=$
$=\int t^2dt=\frac{t^3}{3}+C=\frac{\sin^3 x}{3}+C.$

3. $\int\frac{\sin\sqrt[3]{x}}{\sqrt[3]{x^2}}dx=\{t=\sqrt[3]{x}\Rightarrow x=t^3\Rightarrow dx=3t^2dt\}=\int\frac{\sin t}{t^2}\cdot 3t^2dt=$
$=3\int\sin tdt=-3\cos t+C.$

Осуществив переход к старой переменной x, учитывая, что $t=\sqrt[3]{x}$, получим окончательный результат

$$\int \frac{\sin\sqrt[3]{x}}{\sqrt[3]{x^2}}dx = -3\cos\sqrt[3]{x} + C.$$

4. $\int x^2\sqrt{x^3+5}dx = \left\{t = x^3+5 \Rightarrow dt = 3x^2dx \Rightarrow x^2dx = \frac{1}{3}dt\right\} =$
$= \int \sqrt{t}\cdot\frac{1}{3}dt = \frac{1}{3}\cdot\frac{1}{2\sqrt{t}} + C = \frac{1}{3}\cdot\frac{1}{2\sqrt{t}} + C = \frac{1}{6\sqrt{x^3+5}} + C.$

Рассмотрим вопрос вычисления интеграла вида $\int \frac{f'(x)}{f(x)}dx$.

$$\int \frac{f'(x)}{f(x)}dx = \{t = f(x) \Rightarrow dt = f'(x)dx\} = \int \frac{dt}{t} = \ln|t| + C = \ln|f(x)| + C.$$

Используя полученный результат, легко вычисляются следующие интегралы.

П р и м е р ы.

1. $\int \frac{x}{x^2-1}dx = \left\{f(x) = x^2-1 \Rightarrow f'(x) = 2x\right\} = = \frac{1}{2}\int \frac{2xdx}{x^2-1} =$
$= \frac{1}{2}\ln|f(x)| + C = \frac{1}{2}\ln\left|x^2-1\right| + C.$

2. $\int \frac{2x-4}{x^2-4x+8}dx = \left\{f(x) = x^2-4x+8 \Rightarrow f'(x) = 2x-4\right\} =$
$= \int \frac{f'(x)dx}{f(x)} = \ln|f(x)| + C = \frac{1}{2}\ln\left|x^2-4x+8\right| + C.$

Интегрирование по частям

Пусть $u = u(x)$ и $v = v(x)$ - непрерывно дифференцируемые функции. Тогда $d(uv) = udv + vdu$.

Интегрируя обе части выражения, получим

$$\int d(uv) = \int udv + \int vdu,$$

или, учитывая, что $\int d(uv) = uv$, получим *формулу интегрирования по частям*

$$\int udv = uv - \int vdu.$$

Формулу интегрирования по частям применяют при вычислении интегралов вида: $\int P_n(x)\sin xdx$, $\int P_n(x)\cos xdx$, $\int P_n(x)e^x dx$, $\int P_n(x)\arcsin xdx$, $\int P_n(x)\arccos xdx$, $\int P_n(x)arctgxdx$, $\int P_n(x)arcctgdx$, $\int P_n(x)\ln axdx$, где $P_n(x) = a_n x^n + a_{n-1}x^{n-1} + \ldots + a_1 x + a_0$ – многочлен степени n.

При интегрировании по частям в подынтегральном выражении одну из функций принимают за функцию u, а за dv принимается все, что остается под знаком интеграла. При правильном выборе после интегрирования по частям $\int vdu$ должен оказаться проще первоначального.

Примеры.

1. $$\int x \cdot e^x dx = \left\{ \begin{matrix} u = x \Rightarrow du = (x)' dx \Rightarrow du = dx \\ dv = e^x dx \Rightarrow v = \int e^x dx = e^x \end{matrix} \right\} =$$

$$= xe^x - \int e^x dx = xe^x - e^x + C.$$

2. $$\int \ln xdx = \left\{ \begin{matrix} u = \ln x \Rightarrow du = (\ln x)' dx \Rightarrow du = \frac{1}{x}dx \\ dv = dx \Rightarrow v = x \end{matrix} \right\} = x\ln x - \int x \cdot \frac{1}{x}dx =$$

$$= x\ln x - \int dx = x\ln x - x + C = x(\ln x - 1) + C.$$

3. $\int (5-x)\cdot\cos 2x dx = \left\{ \begin{array}{l} u = 5-x \Rightarrow du = (5-x)' dx \Rightarrow du = -dx \\ dv = \cos 2x dx \Rightarrow v = \int \cos 2x dx = \dfrac{1}{2}\sin 2x \end{array} \right\} =$

$$= (5-x)\cdot\frac{1}{2}\sin 2x - \int \frac{1}{2}\sin 2x(-dx) = \frac{5-x}{2}\sin 2x + \frac{1}{2}\int \sin 2x dx =$$

$$= \frac{5-x}{2}\sin 2x - \frac{1}{4}\cos 2x + C.$$

Интегрирование простейших рациональных дробей

Определение 2.3. *Простейшими рациональными дробями* называются дроби следующего вида:

I. $\dfrac{a}{x+d}$, где a, d - действительные числа;

II. $\dfrac{a}{(x+d)^m}$, где $m > 0$;

III. $\dfrac{a}{x^2+px+q}$, где a, p, q - действительные числа, $\dfrac{p^2}{4} - q < 0$, то есть квадратный трехчлен в знаменателе не имеет действительных корней;

IV. $\dfrac{ax+b}{x^2+px+q}$, где a, b, p, q - действительные числа, $\dfrac{p^2}{4} - q < 0$;

V. $\dfrac{ax+b}{(x^2+px+q)^n}$, где n - целое положительное число, $\dfrac{p^2}{4} - q < 0$.

Интегралы от простейших рациональных дробей всегда могут быть приведены к табличным интегралам.

I. $\displaystyle\int \frac{a}{x+d} dx = a\int \frac{dx}{x+d} = a\int \frac{d(x+d)}{x+d} = a\cdot\ln|x+d| + C,$

Пример.

$$\int \frac{2}{x-3}dx = 2\int \frac{dx}{x-3} = 2\int \frac{d(x-3)}{x-3} = 2\cdot \ln|x-3| + C.$$

II. $\int \frac{a}{(x+d)^m}dx = a\int (x+d)^{-m}dx = a\int (x+d)^{-m}d(x+d) = a\frac{(x+d)^{-m+1}}{-m+1} + C.$

Пример.

$$\int \frac{1}{(2x+3)^3}dx = \int (2x+3)^{-3}dx = \frac{1}{2}\int (2x+3)^{-3}d(2x+3) = \frac{1}{2}\cdot\frac{(2x+3)^{-3+1}}{-3+1} =$$

$$= -\frac{1}{4(2x+3)^2} + C.$$

III. $\int \frac{a}{x^2+px+q}dx = a\int \frac{1}{x^2+px+q}dx = \left\{ x^2+px+q = \left(x+\frac{p}{2}\right)^2 + q - \frac{p^2}{4} = \right.$

$$\left. = \left(x+\frac{p}{2}\right)^2 + \frac{4q-p^2}{4} \Rightarrow x^2+px+q = t^2+h^2, \textit{где } t = x+\frac{p}{2},\ h = \frac{\sqrt{4q-p^2}}{2} \right\} =$$

$$= a\int \frac{dx}{t^2+h^2} = \frac{a}{h}\,arctg\,\frac{t}{h} + C = \frac{2a}{\sqrt{4q-p^2}}\,arctg\,\frac{2x+p}{\sqrt{4q-p^2}} + C.$$

Пример.

$$\int \frac{dx}{x^2+6x+25} = \left\{ \frac{p^2}{4} - q = \frac{36}{4} - 25 < 0 \Rightarrow x^2+6x+25 = (x+3)^2 + 16 \right\} =$$

$$= \int \frac{dx}{(x+3)^2+16} = \int \frac{d(x+3)}{(x+3)^2+4^2} = \frac{1}{4}\,arctg\,\frac{x+3}{4} + C.$$

IV. $\int \frac{ax+b}{x^2+px+q}dx =$

$$= \left\{ \left(x^2+px+q\right)' = 2x+p; \quad ax+b = \frac{a}{2}(2x+p) - \frac{ap}{2} + b \right\} =$$

$$= \frac{a}{2}\int \frac{2x+p}{x^2+px+q}dx + \left(b - \frac{ap}{2}\right)\int \frac{dx}{x^2+px+q}$$

Первый из полученных интегралов относится к рассмотренным интегралам вида $\int \frac{f'(x)}{f(x)}dx$, а второй – относится к интегралам вида III. Окончательно получим следующий результат

$$\int \frac{ax+b}{x^2+px+q}dx = \frac{a}{2}\ln\left|x^2+px+q\right| + \frac{2b-ap}{\sqrt{4q-p^2}}\,arctg\,\frac{2x+p}{\sqrt{4q-p^2}} + C.$$

П р и м е р.

$$\int \frac{3x-1}{x^2-4x+8}dx =$$

$$= \left\{\frac{p^2}{4}-q=\frac{16}{4}-8<0;\ \left(x^2-4x+8\right)' = 2x-4 \Rightarrow 3x-1=\frac{3}{2}(2x-4)-1+6\right\} =$$

$$= \frac{3}{2}\int \frac{2x-4}{x^2-4x+8}dx + 5\int \frac{dx}{x^2-4x+8} = \frac{3}{2}\ln\left|x^2-4x+8\right| + 5\int \frac{dx}{(x-2)^2+2^2} =$$

$$= \frac{3}{2}\ln\left|x^2-4x+8\right| + \frac{5}{2}\,arctg\,\frac{x-2}{2} + C.$$

V. $\int \frac{ax+b}{\left(x^2+px+q\right)^n}dx$

Вычисление данного интеграла требует применения сложных рекуррентных формул.

<u>Интегрирование правильных рациональных дробей с помощью разложения на простейшие рациональные дроби</u>

<u>Определение 2.4.</u> *Правильной рациональной дробью* называется дробь вида $\frac{P_n(x)}{Q_m(x)}$, где $P_n(x)$-многочлен степени n, $Q_m(x)$-многочлен степени m, причем $n<m$.

Многочлен $Q_m(x)$ всегда можно разложить на линейные или квадратичные множители

$$Q_m(x) = (x-a)(x-b)^k \ldots \left(x^2+px+q\right)\left(x^2+cx+d\right)^l \ldots,$$

где a - действительный корень многочлена $Q_m(x)$, b - действительный корень кратности k многочлена $Q_m(x)$, $\frac{p^2}{4}-q<0$, $\frac{c^2}{4}-d<0$, то есть квадратные трехчлены не имеют действительных корней.

Тогда

$$\frac{P_n(x)}{Q_m(x)}=\frac{P_n(x)}{(x-a)(x-b)^k\ldots(x^2+px+q)(x^2+cx+d)^l\ldots}$$

Полученную правильную рациональную дробь всегда можно разложить на простейшие рациональные дроби следующим образом

$$\frac{P_n(x)}{(x-a)(x-b)^k\ldots(x^2+px+q)(x^2+cx+d)^l\ldots}=\frac{A_1}{(x-a)}+\frac{B_1}{(x-b)}+.\frac{B_2}{(x-b)^2}+\ldots+$$
$$+\frac{B_k}{(x-b)^k}+\frac{Ex+F}{(x^2+px+q)}+\frac{C_1x+D_1}{(x^2+cx+d)}+\frac{C_2x+D_2}{(x^2+cx+d)^2}+\ldots+\frac{C_lx+D_l}{(x^2+cx+d)^l}+\ldots$$

где $A_1,B_1,B_2,\ldots,B_k,E,F,C_1,D_1,C_2,D_2,\ldots,C_l,D_l,\ldots$неопределенные постоянные коэффициенты, определив которые можно вычислить интеграл от каждого слагаемого суммы как интеграл от простейшей рациональной дроби.

Для вычисления неопределенных коэффициентов, следует выполнить следующие действия:

1) привести к общему знаменателю выражение в правой части последнего равенства;

2) приравнять коэффициенты при одинаковых степенях x в левой и правой частях полученного тождества;

3) решить систему линейных уравнений относительно искомых коэффициентов;

4) вернуться с полученными значениями коэффициентов к интегрированию суммы простейших дробей.

Примеры.

1. $\int\frac{dx}{x^2-3x+2}=\int\frac{1}{(x-1)(x-2)}dx=$

$$=\left\{\begin{array}{l}\dfrac{1}{(x-1)(x-2)}=\dfrac{A}{(x-1)}+\dfrac{B}{(x-2)}\Rightarrow\dfrac{1}{(x-1)(x-2)}=\dfrac{A(x-2)+B(x-1)}{(x-1)(x-2)}\\ \dfrac{1}{(x-1)(x-2)}=\dfrac{(A+B)x+(-2A-B)}{(x-1)(x-2)}\Rightarrow\begin{cases}A+B=0,\\ -2A-B=1\end{cases}\Rightarrow\begin{cases}A=-1,\\ B=1.\end{cases}\Rightarrow\\ \Rightarrow\dfrac{1}{(x-1)(x-2)}=\dfrac{-1}{(x-1)}+\dfrac{1}{(x-2)}\end{array}\right\}=$$

$$=\int\frac{-1}{(x-1)}dx+\int\frac{dx}{(x-2)}=-\ln|x-1|+\ln|x-2|+C=\ln\left|\frac{x-2}{x-1}\right|+C.$$

2. $\displaystyle\int\frac{dx}{x^3-8}=\int\frac{1}{(x-2)\left(x^2+2x+4\right)}dx=$

$$=\left\{\begin{array}{l}\dfrac{1}{(x-2)\left(x^2+2x+4\right)}=\dfrac{A}{(x-2)}+\dfrac{Bx+C}{\left(x^2+2x+4\right)};\\ \dfrac{1}{(x-2)\left(x^2+2x+4\right)}=\dfrac{A\left(x^2+2x+4\right)+(Bx+C)(x-2)}{(x-2)\left(x^2+2x+4\right)};\\ \dfrac{1}{(x-2)\left(x^2+2x+4\right)}=\dfrac{(A+B)x^2+(2A-2B+C)x+4A-2C}{(x-2)\left(x^2+2x+4\right)};\\ \begin{cases}A+B=0,\\ 2A-2B+C=0,\\ 4A-2C=1.\end{cases}\Rightarrow\begin{cases}A=\dfrac{1}{12},\\ B=-\dfrac{1}{12},\\ C=-\dfrac{1}{3}\end{cases}\Rightarrow\dfrac{1}{(x-2)\left(x^2+2x+4\right)}=\dfrac{1}{12}\dfrac{1}{(x-2)}-\dfrac{1}{12}\dfrac{x+4}{\left(x^2+2x+4\right)};\end{array}\right\}=$$

$$=\frac{1}{12}\int\frac{1}{(x-2)}dx-\frac{1}{12}\int\frac{x+4}{\left(x^2+2x+4\right)}dx=\frac{1}{12}\ln|x-2|-\frac{1}{12}\int\frac{x+4}{\left(x^2+2x+4\right)}dx=$$

$$=\left\{\left(x^2+2x+4\right)'=2x+2\Rightarrow x+4=\frac{1}{2}(2x+2)-1+4\Rightarrow x+4=\frac{1}{2}(2x+2)+3\right\}=$$

$$=\frac{1}{12}\ln|x-2|-\frac{1}{12}\cdot\frac{1}{2}\int\frac{(2x+2)}{\left(x^2+2x+4\right)}dx-\frac{1}{4}\int\frac{dx}{\left(x^2+2x+4\right)}=\left\{x^2+2x+4=(x+1)^2+3\right\}=$$

$$=\frac{1}{12}\ln|x-2|-\frac{1}{24}\ln\left(x^2+2x+4\right)-\frac{1}{4}\int\frac{dx}{(x+1)^2+\left(\sqrt{3}\right)^2}=$$

$$=\frac{1}{12}\ln|x-2|-\frac{1}{24}\ln\left(x^2+2x+4\right)-\frac{1}{4\sqrt{3}}\,arctg\,\frac{x+1}{\sqrt{3}}+C=$$

$$=\frac{1}{24}\ln\frac{(x-2)^2}{\left(x^2+2x+4\right)}-\frac{\sqrt{3}}{12}\,arctg\,\frac{\sqrt{3}(x+1)}{3}+C.$$

Интегрирование неправильных рациональных дробей

Определение 2.5. *Неправильной рациональной дробью* называют дробь вида $\frac{P_n(x)}{Q_m(x)}$, где $P_n(x)$-многочлен степени n, $Q_m(x)$-многочлен степени m, причем $n \geq m$.

При интегрировании неправильной рациональной дроби необходимо прежде выделить из нее целую часть путем деления числителя на знаменатель или с использованием схемы Горнера, то есть представить в виде

$$\frac{P_n(x)}{Q_m(x)} = S_{n-m}(x) + \frac{R(x)}{Q_m(x)},$$

где $S_{n-m}(x)$-многочлен степени $n-m$, $\frac{R(x)}{Q_m(x)}$-правильная рациональная дробь.

Таким образом, интегрирование неправильной рациональной дроби сводится к интегрированию многочлена и правильной рациональной дроби.

Пример.

$$\int \frac{x^3+3x^2+5x+7}{x^2+2}dx = \left\{ x^3+3x^2+5x+7 = x+3+\frac{3x+1}{x^2+2} \right\} =$$

$$= \int \left(x+3+\frac{3x+1}{x^2+2} \right) dx = \int xdx + 3\int dx + \int \frac{3x+1}{x^2+2}dx = \frac{x^2}{2} + 3x + \int \frac{3x+1}{x^2+2}dx =$$

$$= \left\{ \left(x^2+2\right)' = 2x; 3x+1 = \frac{3}{2}\cdot 2x+1 \right\} = \frac{x^2}{2} + 3x + \frac{3}{2}\int \frac{2x}{x^2+2}dx + \int \frac{dx}{x^2+\left(\sqrt{2}\right)^2} =$$

$$= \frac{x^2}{2} + 3x + \frac{3}{2}\ln\left(x^2+2\right) + \frac{1}{\sqrt{2}} arctg\frac{x}{\sqrt{2}} + C.$$

Задача 2.1. Исследование кинетики автокаталитических реакций.

Если во время реакции одно из взаимодействующих веществ выступает как катализатор, то процесс носит название *автокатализа*.

Пусть превращаемое вещество действует как катализатор. Тогда скорость реакции зависит от концентрации вещества, действующего как катализатор. Полагая эту зависимость линейной, примем ее равной $k + k^*(a-x)$, где k, k^*, a – константы. Тогда скорость реакции

$$\frac{dx}{d\tau}=\left(k+k^{*}(a-x)\right)\cdot(a-x)$$

преобразуем следующим образом

$$\frac{dx}{\left(k+k^{*}(a-x)\right)\cdot(a-x)}=d\tau .$$

Проинтегрируем левую и правую часть уравнения

$$\int\frac{dx}{\left(k+k^{*}(a-x)\right)\cdot(a-x)}=\int d\tau .$$

Отсюда

$$\tau=\int\frac{dx}{\left(k+k^{*}\,(a-x)\right)\cdot(a-x)}=\{z=a-x\Rightarrow dz=-dx\}=-\int\frac{dz}{\left(k+k^{*}z\right)\cdot z}=$$

$$=\left\{\begin{array}{l}\dfrac{1}{z\left(k^{*}z+k\right)}=\dfrac{A}{z}+\dfrac{B}{\left(k^{*}z+k\right)};\\[2ex] \dfrac{1}{z\left(k^{*}z+k\right)}=\dfrac{A(k^{*}z+k)+Bz}{z\left(k^{*}z+k\right)}\Rightarrow\begin{cases}Ak^{*}+B=0,\\ Ak=1.\end{cases}\Rightarrow\begin{cases}A=\dfrac{1}{k},\\ B=-\dfrac{k^{*}}{k}.\end{cases}\\[2ex] \dfrac{1}{z\left(k^{*}z+k\right)}=\dfrac{1}{k}\cdot\dfrac{1}{z}-\dfrac{k^{*}}{k}\cdot\dfrac{1}{\left(k^{*}z+k\right)};\end{array}\right\}=$$

$$=-\frac{1}{k}\int\frac{dz}{z}+\frac{k^{*}}{k}\int\frac{dz}{\left(k_1^{*}z+k\right)}=-\frac{1}{k}\ln|z|+\frac{k^{*}}{k}\cdot\frac{1}{k^{*}}\int\frac{d(k^{*}z+k)}{\left(k^{*}z+k\right)}=-\frac{1}{k}\ln|z|+\frac{1}{k}\ln\left|k^{*}z+k\right|+C=$$

$$=\{z=a-x\}=-\frac{1}{k}\ln|a-x|+\frac{1}{k}\ln\left|k+k^{*}(a-x)\right|+C=\frac{1}{k}\ln\left|\frac{k+k^{*}(a-x)}{a-x}\right|+C .$$

Неопределенный интеграл содержит произвольную постоянную C, поэтому неоднозначен. Дополнительные условия задачи позволяют найти значение этой постоянной. В рассматриваемой задаче при $\tau=0$ $x=0$. Подставив эти значения в выражение для τ, получим

$$0=\frac{1}{k}\ln\left|\frac{k+k^{*}(a-0)}{a-0}\right|+C\Rightarrow C=\frac{1}{k}\ln\left|\frac{a}{k+k^{*}a}\right|.$$

Тогда решение задачи примет вид

$$\tau = \frac{1}{k}\ln\left|\frac{k+k^*(a-x)}{a-x}\right| + \frac{1}{k}\ln\left|\frac{a}{k+k^*a}\right|, \quad \text{или} \quad \tau = \frac{1}{k}\ln\left|\frac{a(k+k^*(a-x))}{(a-x)(k+k^*a)}\right|. \blacksquare$$

2.2. Определенный интеграл

Пусть функция $f(x)$ определена на отрезке $[a, b]$. Разобьем этот отрезок на n произвольных частей точками $a = x_0 < x_1 < x_2 < \ldots < x_n = b$. В каждом из полученных частичных отрезков $[x_{i-1}, x_i]$ выберем произвольную точку ξ_i $(x_{i-1} \le \xi_i \le x_i)$ и составим сумму

$$\sigma = f(\xi_1)\Delta x_1 + f(\xi_2)\Delta x_2 + \ldots + f(\xi_n)\Delta x_n = \sum_{i=1}^{n} f(\xi_i)\Delta x_i\,,$$

где $\Delta x_i = x_i - x_{i-1}$.

Такая сумма называется *интегральной суммой* для функции $f(x)$ на отрезке $[a, b]$.

Обозначим через μ длину наибольшего частичного отрезка разбиения $\mu = \max\limits_{1\le i\le n}\{\Delta x_i\}$.

<u>Определение 2.4.</u> Если существует конечный предел I интегральной суммы σ при $\mu \to 0$ $\left(I = \lim\limits_{\mu\to 0}\sum\limits_{i=1}^{n} f(\xi_i)\Delta x_i\right)$, то этот предел называется *определенным интегралом* от функции $f(x)$ по отрезку $[a, b]$ и обозначается следующим образом:

$$I = \int_a^b f(x)dx\,.$$

В этом случае функция $f(x)$ называется *интегрируемой на* $[a, b]$. Числа a и b называются соответственно *нижним и верхним пределами интегрирования*, $f(x)$ – *подынтегральной функцией*, x – *переменной интегрирования*.

Для интегрируемости функции достаточно ее непрерывности на отрезке $[a, b]$.

Если $f(x)>0$ на отрезке $[a, b]$, то определенный интеграл $\int_a^b f(x)dx$ геометрически представляет собой площадь криволинейной трапеции – фигуры, ограниченной линиями $y=f(x)$, $x=a$, $x=b$, $y=0$ (рис. 2.1).

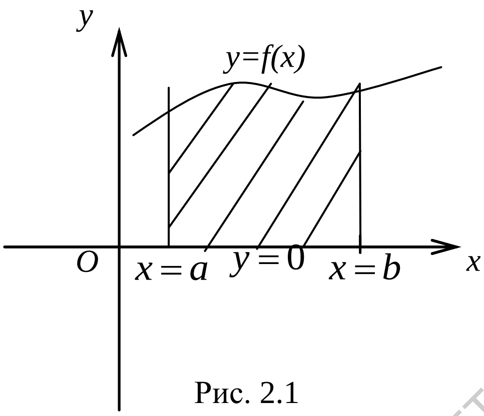

Рис. 2.1

Свойства определенного интеграла

1°. $\int_a^a f(x)dx=0$.

2°. $\int_a^b f(x)dx=-\int_b^a f(x)dx$.

3°. Для любых чисел a, b, c, всегда имеет место равенство

$$\int_a^b f(x)dx=\int_a^c f(x)dx+\int_c^b f(x)dx.$$

4°. $\int_a^b kf(x)dx=k\int_a^b f(x)dx$, где k - постоянная.

$$5^{\circ}.\ \int_a^b \left(f_1(x) \pm f_2(x) \pm \ldots \pm f_n(x)\right)dx = \int_a^b f_1(x)dx \pm \int_a^b f_2(x)dx \pm \ldots \pm \int_a^b f_n(x)dx$$

$$6^{\circ}.\ \int_a^b f(x)dx = F(x)\,|_a^b = F(b) - F(a),\ \text{где}\quad F'(x) = f(x).$$

Эта формула вычисления определенного интеграла называется *формулой Ньютона-Лейбница*.

Вычисление определенного интеграла сводится к нахождению первообразной функции $F(x)$ и применению формулы Ньютона-Лейбница.

При вычислении определенных интегралов $\int_a^b f(x)dx$ можно воспользоваться методами нахождения первообразных, изложенных для неопределенного интеграла, в том числе, методом подстановки. Если сделать замену переменной $x = \varphi(t)$, $dx = \varphi'(t)dt$, то интеграл примет вид

$$\int_a^b f(x)dx = \int_\alpha^\beta f\left[\varphi(t)\right] \cdot \varphi'(t)dt\,.$$

В этом случае, если $a \le x \le b$, то $\alpha \le t \le \beta$, то есть необходимо пересчитать пределы изменения новой переменной, при этом обязательными условиями являются: $\varphi(\alpha) = a,\ \varphi(\beta) = b$.

При вычислении определенных интегралов можно также воспользоваться и формулой интегрирования по частям

$$\int_a^b u du = uv\,|_a^b - \int_a^b v du\,.$$

Формула интегрирования по частям верна при условии интегрируемости функций $u(x),\ v(x)$ на отрезке $[a,b]$.

Задача 2.2. Истечение газов и паров из отверстий.

Состояние газов и паров при их истечении изменяется по закону

$$p_1 v_1^n = p v^n = const\,,$$

где p_1, p, v_1, v – давление и объем в начале и в конце процесса соответственно, n – показатель политропы.

Совершаемая работа A при истечении газов и паров вычисляется с помощью определенного интеграла

$$A = \int_{p}^{p_1} v\,dp.$$

Геометрически работа A представляет площадь F криволинейной трапеции, ограниченной политропой и осью Op (рис. 2.2).

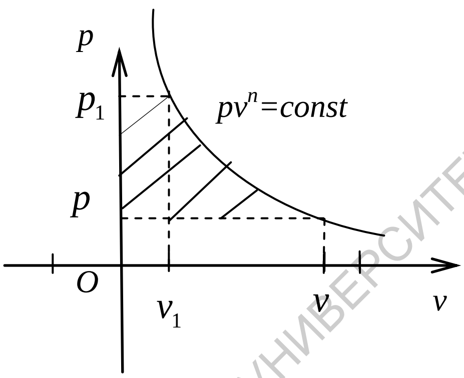

Рис. 2.2

Обозначим $x = p$, $y = v$, $n = -\dfrac{1}{m}$, $y = cx^m$, где $c - const$. Тогда

$$F = \int_{x_1}^{x_2} y\,dx = c\left.\frac{x^{m+1}}{m+1}\right|_{x_1}^{x_2} = c\,\frac{x_2^{m+1} - x_1^{m+1}}{m+1}.$$

Подставив $y_1 = cx_1^m$, $y_2 = cx_2^m$ в полученное выражение

$$F = \frac{cx_2^m x_2 - cx_1^m x_1}{m+1} = \frac{y_2 x_2 - y_1 x_1}{m+1}.$$

Следовательно,

$$A=\int_{p}^{p_1} v\,dp=\frac{n}{n-1}\left(p_1v_1-pv\right)=\frac{n}{n-1}\cdot p_1v_1\cdot\left(1-\left(\frac{p}{p_1}\right)^{\frac{n-1}{n}}\right).$$

Энергия истечения W совпадает с работой, то есть $W=A$. Энергия определяется по формуле

$$W=\frac{mw^2}{2}=\frac{w^2}{2g},$$

где $m=\dfrac{1}{g}$ – масса 1 кг газа или пара, w – скорость истечения и

$$w=\sqrt{2g\frac{n}{n-1}p_1v_1\left(1-\left(\frac{p}{p_1}\right)^{\frac{n-1}{n}}\right)}.$$

Если S – площадь отверстия, а γ – удельный вес газа или пара, то количество вещества, протекающего в секунду, составит

$$G=Sw\gamma .$$

Если положить $\gamma=\dfrac{1}{v}$, то

$$G=S\sqrt{2g\frac{n}{n-1}\frac{p_1}{v_1}\left(\left(\frac{p}{p_1}\right)^{\frac{2}{n}}-\left(\frac{p}{p_1}\right)^{\frac{n+1}{n}}\right)}.$$

Используя эту формулу, можно вычислить величину давления $p=p_0$, соответствующего наименьшему сечению $S=S_0$ отверстия сопла или насадки при постоянном расходе G и наибольшую скорость истечения вещества, которая может быть достигнута с помощью малых отверстий.■

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1.Батунер Л.М., Позин М Е. Математические методы в химической технике. ГХИ 1963г 640стр.

2. Кудрявцев Л.Д. Краткий курс математического анализа «Наука» 1989г 736с.

3. Бермант А.Ф., Араманович И.Г. Краткий курс математического анализа М:. Наука 1967г 736с.

4. Демидович Б.П. Сборник задач и упражнений по математическому анализу М:. Физматгиз 1962г 544с.

5. Фихтенгольц Г.М. Курс дифференциального и интегрального исчисления т. 1, М:. Физматгиз 1958г 608с.

6. Пискунов Н.С. Дифференциальное и интегральное исчисления М:. Наука 1978г 456с.

7. Данко П.Е., Попов А.Г., Кожевникова Т.Я. Высшая математика в упражнениях и задачах часть 1 М:. «Высшая шк.» 1997г 304с.

8. Письменный Д. Конспект лекций по высшей математике часть 1 М:. Рольф 2000г 288с.