Chapter 0 高等数学基础

0A 极限,导数与微分

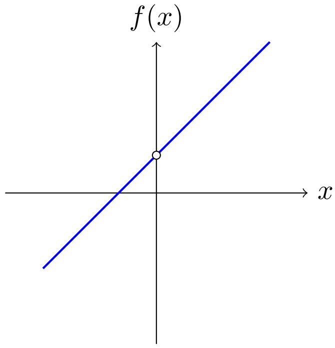
发展微积分的最初灵感之一来自试图去理解运动物体的速度,距离和时间的关系.人们经过数百年的探索建立了微积分这一学科,而这也是我们学习物理化学所必须掌握的数学基础知识.

0A.1 极限[1]

极限的定义

出于简单考虑,我们并不要求你了解极限的严格定义(即著名的$\varepsilon-\delta$语言),而是通过一些更形象的方式理解极限的意义.尤其是考虑到我们遇见的函数大多具有良好的性质,因此直观的理解并不会出太多差错.

你也许遇到过这样的一些函数,它们在某些地方没有定义,但其值却会随着自变量向此处靠近而越来越接近某一值.例如下面的这个函数,$f(x)=x+1(x\in\mathbb{R}\backslash\{0\})$.



尽管$f(x)$在$x=0$处没有定义,但你可以从图像上发现当x逐渐接近0时,$f(x)$也逐渐接近1.因此,尽管$f(x)$在$x=0$处没有定义,我们也可以获知x逐渐接近于0时$f(x)$的变化情况.因此,我们可以尝试用自然语言描述极限的定义.

Definition 0A.1.1 函数极限

当自变量x**无限接近**某一点a时,如果函数$f(x)$能**无限接近**于某一定值l,则称$f(x)$在$x=a$处的极限为l,记作

$$\lim_{x\to a} f(x)=l$$

这个定义的核心是描述函数在某个点附近的**趋势**,而不是该点的具体值.

定义中的无限接近是由$\varepsilon-\delta$语言保证的,但你并不需要了解这一点,只需对极限有一个直观认识即可.

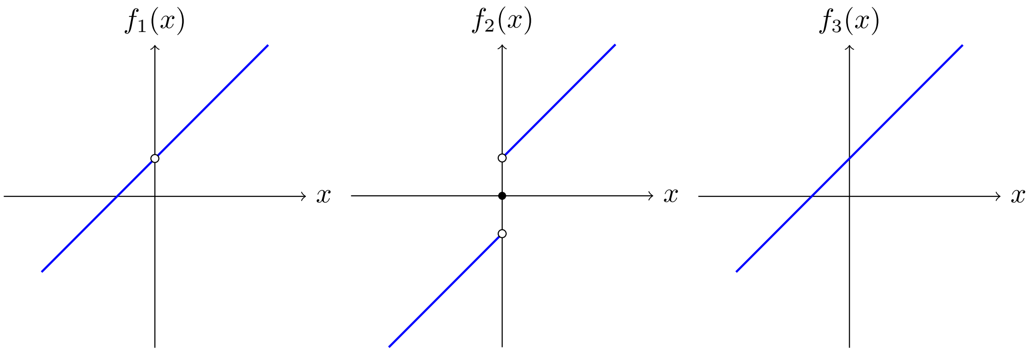
[1] 本节主要介绍的是函数极限.

Hint.

值得注意的是,$f(x)$在$x=0$附近对1的接近是任意的:对于任意$\varepsilon>0$,总存在$x=0$附近的一个区间$(-\delta,\delta)\backslash\{0\}$使得这一区间内的所有$x$都满足$|f(x)-1|<\varepsilon$.这就是极限的$\varepsilon-\delta$语言.

连续函数

你也许听说过**连续**这一概念.想象用笔在纸上画一条曲线.如果你在绘制的过程中笔尖始终接触纸面,线条不间断,那么从直觉来说你应该画出了一条连续的曲线.反之,如果你在绘制的过程中笔尖离开了纸面,从而出现了跳跃或间断点,那么这条曲线就应当是不连续的.我们可以观察下面的几个函数.



$f_1(x)$在$x=0$处没有定义,即出现了一个间断点,应当是不连续的.$f_2(x)$虽然在$x=0$处有定义,但其在$x=0$处的左侧极限和右侧极限不相等,也与$f_2(0)$不相等,函数出现了跳跃,也是不连续的.只有$f_3(x)$满足在$x=0$处有定义,且左侧极限和右侧极限均与定义的函数值相等,这在图像上表现为一段连续不断的曲线.这就是连续函数的定义.

Definition 0A.1.2 连续与连续函数

如果函数$f(x)$在$x=a$处有定义,并且在$x=a$处的两侧的极限均等于$f(a)$,即

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

那么就称$f(x)$在$x=a$处**连续**.

如果$f(x)$在其定义域上的每一点都连续,那么就称$f(x)$为其定义域上的**连续函数**.

常见的函数,例如多项式函数,三角函数,指对数函数等初等函数均在其定义域上连续.这一性质同样对初等函数的复合函数也成立.

夹逼准则与极限的运算[2]

我们先来介绍夹逼准则.

[2]本节仅作介绍,不必要求掌握.了解本节的内容有助于理解导数的计算过程.

Theorem 0A.1.3 夹逼准则

对于函数$f_1(x), f_2(x), f_3(x)$和给定的a,如果在包含a的区间上总有$f_1(x) \leqslant f_2(x) \leqslant f_3(x)$,并且

$$\lim_{x\to a} f_1(x) = \lim_{x\to a} f_3(x) = l$$

那么一定有

$$\lim_{x\to a} f_2(x) = l$$

直观地说,因为$f_1(x)$和$f_3(x)$都趋近于l,因此被夹在它们中间的$f_2(x)$也只能被迫趋近于l.我们以一个简单的例子对其进行直观理解.

Problem P.0A.1

求极限$\lim\limits_{x\to 0} x\sin\dfrac{1}{x}$.

Solution.

目标函数$f(x) = x\sin\dfrac{1}{x}$在$x = 0$处没有定义,因此不能使用连续函数的性质解决问题.然而,我们可以注意到

$$-1 \leqslant \sin\frac{1}{x} \leqslant 1$$

对所有$x \in \mathbb{R}\backslash\{0\}$成立,因此有

$$-x < x\sin\frac{1}{x} < x$$

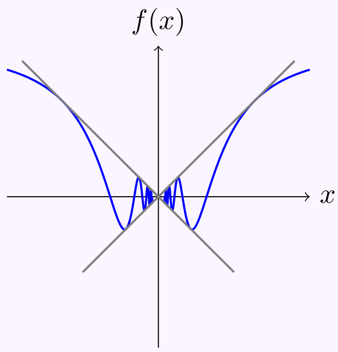
而

$$\lim_{x\to 0}(-x) = \lim_{x\to 0} x = 0$$

这是由连续函数的性质决定的.因此,我们可以得出

$$\lim_{x\to 0} x\sin\frac{1}{x} = 0$$

观察图像,可以发现$f(x) = x\sin\dfrac{1}{x}$被夹在$g(x) = x$和$h(x) = -x$之间,而后两个函数在x趋近于0时都趋近于0.自然,$f(x)$也被迫趋向于0.夹逼准则可以解决许多难以计算的极限问题.



除了使用夹逼准则以外,我们还可以利用极限的四则运算和复合来计算复杂函数的极限.

Theorem 0A.1.4 极限的四则运算

如果$f(x)$和$g(x)$满足

$$\lim_{x\to a} f(x) = l_1 \qquad \lim_{x\to a} g(x) = l_2$$

那么我们有

$$\lim_{x\to a} f(x) \pm g(x) = \mathrm{l}_1 \pm l_2$$

$$\lim_{x\to a} f(x) \cdot g(x) = l_1 l_2$$

$$\lim_{x\to a} \frac{f(x)}{g(x)} = \frac{l_1}{l_2}\ (l_2 \neq 0)$$

即如果两个函数在某处的极限均存在,那么这两个函数的四则运算所得的函数在此处的极限亦存在,并且其值等于各自的极限值进行相应的四则运算的结果.

Theorem 0A.1.5 复合函数的极限

如果$\lim\limits_{x\to a} f(x) = l$,而$g(x)$在$x = l$及其附近的区间上连续,那么

$$\lim_{x\to a} g(f(x)) = g(l)$$

这就是说,如果复合函数的外部连续(这一条件是容易满足的),就可以先对内部求极限后代入外部函数从而得到总体的极限值.这意味着我们可以对极限进行换元以简化计算.

上面两个定理的证明较为繁琐,因此你不必掌握它们的证明方法.总之,极限运算(在我们目前能接触到的函数中)是十分符合常理的.

两个重要极限

在日后的学习中,你经常会遇到自然常数e.它是由下面的式子定义的.

Definition 0A.1.6 自然常数

自然常数e定义为

$$\mathrm{e} = \lim_{x \to +\infty} \left(1 + \frac{1}{x}\right)^x$$

与我们在前面定义的极限不同的是,这里的$x \to +\infty$表示x趋向于正无穷大,而整个式子将趋向于定值e.

关于其独特而重要的性质,主要体现在日后微积分的应用中,我们将在到时进行详细叙述.

另一个重要的极限是关于三角函数的.这一极限的存在将在三角函数的微积分中发挥重要作用.

Theorem 0A.1.7 重要极限II

我们有

$$\lim_{x \to 0} \frac{\sin x}{x} = 1$$

Proof.

相信你应当在初中学习三角函数时知道

$$\sin x < x < \tan x, \forall x \in \left(0, \frac{\pi}{2}\right)$$

稍作变形即可得到

$$\cos x < \frac{\sin x}{x} < 1$$

由于$\lim\limits_{x \to 0} \cos x = 1$(因为$\cos x$是连续函数),因而根据夹逼定理可得

$$\lim_{x \to 0} \frac{\sin x}{x} = 1$$

Hint.

严格来说,上述证明有循环论证之嫌,这取决于我们定义三角函数的方式.避免这样的逻辑问题的方式是采取复分析的方法定义三角函数,不过这显然超出了我们的知识水平.如果你对这一问题感兴趣,可以自行查阅相关资料.

0A.2 导数

导数的定义

应该来说,前一节的内容都是非必须的,只是让你对导数所涉及的极限运算有一个大致的认

识.或者更确切地说,这一章节的内容都是为了让你对微积分有一个简单的,偏向直观的了解,而非与那些性质古怪的函数打交道.

Hint.

初等函数(即本书所讨论的绝大多数函数)都是光滑的.这在图像上表现为一条“看起来”光滑的曲线,不仅连续,而且没有粗糙的折点.一个函数光滑意味着它具有良好的性质,我们可以不加考虑地对它进行求导,无需担心可能出现的差错或意外.

正如前言中所说,人们是从物体的运动状态开始研究微积分的.在初中时,你应当学过简单的运动学知识:在一段时间t内,物体运动的距离[3]x与t之比就是它在这段时间内的平均速度v,即

$$v=\frac{x}{t}$$

我们让这段时间从某一时间点t_0开始,并结束于$t_0+\Delta t$,在这段时间内物体运动的距离为Δx.于是这段时间内的平均速度为

$$\bar{v}=\frac{\Delta x}{\Delta t}$$

为了考虑物体在某一时间点t_0时的运动状态,我们尝试用求极限的方式求出t_0时的速度的极限值.令Δt越来越小.在此过程中,物体的平均速度$\bar{v}$应当趋近于某一定值,这就是某一时间t_0时该物体的瞬时速度v_0,可以记为

$$v_0=\lim_{\Delta t\to 0}\frac{\Delta x}{\Delta t}$$

某一时间t_0的瞬时速度v_0等于当Δt趋近于0时$(t_0,t_0+\Delta t)$时间段内的运动距离Δx与Δt之比值的极限.我们知道,速度即为运动距离对时间的变化率.上面的叙述就可以引出导数的(浅显而形象的)定义.

Definition 0A.1.1 导数

函数$y=f(x)$在$x=x_0$处的导数定义为

$$f'\left(x_0\right)=\lim_{\Delta x\to 0}\frac{f\left(x+\Delta x\right)-f(x)}{\Delta x}$$

在各点处的$f'\left(x_0\right)$亦可以构成一个新的函数,这一函数$f'(x)$记为$f(x)$的导函数.今后,我们说某一函数的导数,一般就指其导函数.

上述的介绍难免有些粗略而晦涩.如果你想对高等数学的内容有更加深入的了解,笔者建议你阅读普林斯顿微积分读本以获得对微积分的初步认识,然后再阅读各种高等数学书籍.

常见函数的导数

[3]准确而言应当是位移.此处我们假定物体做直线运动,因而位移就与距离的数值相同.

接下来,我们将从定义出发推导一些函数的导函数.首先是简单的幂函数.

Problem P.0A.2

求函数$f(x)=x$的导函数.

Derivation.

我们有

$$f'(x)=\lim_{\Delta x\to 0}\frac{f(x+\Delta x)-f(x)}{\Delta x}=\lim_{\Delta x\to 0}\frac{x+\Delta x-x}{\Delta x}=\lim_{\Delta x\to 0}1=1$$

因此$f(x)=x$的导函数为$f'(x)=1$.

需要注意的是,上述极限中的变量为Δx,而x是一个固定的值.我们所做的事实上是对每个给定的x(视作常数)求出此时的导数值,然后将所有x对应的导数值合并成一个导函数.上面的式子把这两个过程合并在了一起,而你应当清楚地了解x和Δx各自的含义.

Problem P.0A.3

求函数$f(x)=x^2$的导函数.

Derivation.

同样地,我们有

$$\begin{aligned}f'(x)&=\lim_{\Delta x\to 0}\frac{f(x+\Delta x)-f(x)}{\Delta x}=\lim_{\Delta x\to 0}\frac{(x+\Delta x)^2-x^2}{\Delta x}\\&=\lim_{\Delta x\to 0}\frac{2x\Delta x-(\Delta x)^2}{\Delta x}=\lim_{\Delta x\to 0}(2x+\Delta x)=2x\end{aligned}$$

因此$f(x)=x^2$的导函数为$f'(x)=2x$.

在微积分被发明出来的一段时间内,导数并没有经由极限这一概念进行严格定义.Bishop Berkeley把Δx称作"消逝的量的鬼魂",因为它既可以作为除数,又在最后作为无穷小量被舍弃.这一困境在Cauchy提出极限的概念之后才得以解决.现在我们知道,我们从来都没有把Δx看作是0,只是考察整个式子在$\Delta x\to 0$时所趋近的值.只不过大部分时候由连续函数的性质,我们可以在最后把$\Delta x=0$代入以方便地得到最终的结果.这和直接令$\Delta x=0$是有本质区别的.

Problem P.0A.4

求函数$f(x)=\dfrac{1}{x}$的导函数.

Derivation.

我们有

$$\begin{aligned} f'(x) &= \lim_{\Delta x\to 0}\frac{f(x+\Delta x)-f(x)}{\Delta x} = \lim_{\Delta x\to 0}\frac{\frac{1}{x+\Delta x}-\frac{1}{x}}{\Delta x} \\ &= \lim_{\Delta x\to 0}\frac{1}{\Delta x}\cdot\frac{x-(x+\Delta x)}{x(x+\Delta x)} = -\lim_{\Delta x\to 0}\frac{1}{x^2+x\Delta x} \\ &= -\frac{1}{x^2} \end{aligned}$$

于是$f(x)=\dfrac{1}{x}$的导函数为$f'(x)=-\dfrac{1}{x^2}$.

Problem P.0A.5

求函数$f(x)=\sqrt{x}$的导函数.

Derivation.

我们有

$$\begin{aligned} f'(x) &= \lim_{\Delta x\to 0}\frac{f(x+\Delta x)-f(x)}{\Delta x} = \lim_{\Delta x\to 0}\frac{\sqrt{x+\Delta x}-\sqrt{x}}{\Delta x} \\ &= \lim_{\Delta x\to 0}\frac{(x+\Delta x)-x}{\left(\sqrt{x+\Delta x}+\sqrt{x}\right)\Delta x} \\ &= \lim_{\Delta x\to 0}\frac{1}{\sqrt{x+\Delta x}+\sqrt{x}} \\ &= \frac{1}{2\sqrt{x}} \end{aligned}$$

于是$f(x)=\sqrt{x}$的导函数为$f'(x)=\dfrac{1}{2\sqrt{x}}$.

经过总结与归纳(严格的证明需要用到广义二项展开,这里就不再介绍),我们可以得出幂函数$f(x)=x^a$的导函数的通式.

Theorem 0A.2.2 幂函数的导数

幂函数$f(x)=x^a(a\in\mathbb{R})$的导函数为$f'(x)=ax^{a-1}$.

接下来是常见的三角函数.

Problem P.0A.6

求函数$f(x)=\sin x$的导函数.

Derivation.

根据简单的和差角公式,我们可以得到

$$\begin{aligned} f'(x) &= \lim_{\Delta x \to 0} \frac{f(x+\Delta x) - f(x)}{\Delta x} = \lim_{\Delta x \to 0} \frac{\sin(x+\Delta x) - \sin x}{\Delta x} \\ &= \lim_{\Delta x \to 0} \frac{\sin x \cos \Delta x + \sin \Delta x \cos x - \sin x}{\Delta x} \\ &= \lim_{\Delta x \to 0} \frac{\sin x(1 - \cos \Delta x)}{\Delta x} + \lim_{\Delta x \to 0} \frac{\cos x \sin \Delta x}{\Delta x} \end{aligned}$$

现在我们分别处理这两个极限.我们有

$$\begin{aligned} \lim_{\Delta x \to 0} \frac{1 - \cos \Delta x}{\Delta x} &= \lim_{\Delta x \to 0} \frac{(1 - \cos \Delta x)(1 + \cos \Delta x)}{\Delta x\,(1 + \cos \Delta x)} \\ &= \lim_{\Delta x \to 0} \frac{1 - \cos^2 \Delta x}{\Delta x\,(1 + \cos \Delta x)} \\ &= \lim_{\Delta x \to 0} \frac{\sin \Delta x}{\Delta x} \cdot \lim_{\Delta x \to 0} \frac{\sin \Delta x}{1 + \cos \Delta x} \\ &= 1 \cdot 0 = 0 \end{aligned}$$

而后一项即为我们在前面所述的重要极限.因此有

$$f'(x) = \sin x \cdot 0 + \cos x \cdot 1 = \cos x$$

于是$f(x) = \sin x$的导函数为$f'(x) = \cos x$.

Problem P.0A.7

求函数$f(x) = \cos x$的导函数.

Derivation.

方法是与正弦函数完全一致的.我们有

$$\begin{aligned} f'(x) &= \lim_{\Delta x \to 0} \frac{f(x+\Delta x) - f(x)}{\Delta x} = \lim_{\Delta x \to 0} \frac{\cos(x+\Delta x) - \cos x}{\Delta x} \\ &= \lim_{\Delta x \to 0} \frac{\cos x \cos \Delta x - \sin \Delta x \sin x - \cos x}{\Delta x} \\ &= \lim_{\Delta x \to 0} \frac{\cos x(1 - \cos \Delta x)}{\Delta x} - \lim_{\Delta x \to 0} \frac{\sin x \sin \Delta x}{\Delta x} \\ &= -\sin x \end{aligned}$$

于是$f(x) = \cos x$的导函数为$f'(x) = -\sin x$.

最后是指数函数与对数函数.这两类函数相比前面的两类函数则略为复杂.

Problem P.0A.8

求函数$f(x)=a^x(a>0)$的导函数.

Derivation.

按照定义,我们有

$$f'(x)=\lim_{\Delta x\to 0}\frac{a^{x+\Delta x}-a^x}{\Delta x}=a^x\lim_{\Delta x\to 0}\frac{a^{\Delta x}-1}{\Delta x}$$

后面的极限值看起来是一个较难处理的函数.我们可以做换元$t=a^{\Delta x}-1$,这样就有$\Delta x=\log_a(t+1)$.于是我们有

$$\lim_{\Delta x\to 0}\frac{a^{\Delta x}-1}{\Delta x}=\lim_{t\to 0}\frac{t}{\log_a(t+1)}=\lim_{t\to 0}\frac{1}{\log_a(1+t)^{\frac{1}{t}}}$$

注意到这和我们定义的自然常数的相似性.因此,可以再令$s=\dfrac{1}{t}$,于是

$$\lim_{t\to 0}(1+t)^{\frac{1}{t}}=\lim_{s\to 0}\left(1+\frac{1}{s}\right)^s=\mathrm{e}$$

因此

$$\lim_{\Delta x\to 0}\frac{a^{\Delta x}-1}{\Delta x}=\frac{1}{\log_a\mathrm{e}}=\ln a$$

于是$f(x)=a^x$的导函数为$f'(x)=a^x\ln x$.特别地,当$a=\mathrm{e}$时,就有$f(x)=f'(x)=\mathrm{e}^x$.这也是自然常数体现出的特殊性质之一.

Problem P.0A.9

求函数$f(x)=\log_a x(a>0)$的导函数.

Derivation.

我们有

$$\begin{aligned}f'(x)&=\lim_{\Delta x\to 0}\frac{\log_a(x+\Delta x)-\log_a x}{\Delta x}\\&=\lim_{\Delta x\to 0}\frac{1}{x}\cdot\frac{x}{\Delta x}\cdot\log_a\left(1+\frac{\Delta x}{x}\right)\\&=\lim_{\Delta x\to 0}\frac{1}{x}\log_a\left(1+\frac{\Delta x}{x}\right)^{\frac{x}{\Delta x}}\\&\xlongequal{u=\frac{\Delta x}{x}}\frac{1}{x}\lim_{u\to 0}\log_a(1+u)^{\frac{1}{u}}\\&=\frac{\log_a\mathrm{e}}{x}=\frac{1}{x\ln a}\end{aligned}$$

于是$f(x)=\log_a x$的导函数为$f'(x)=\dfrac{1}{x\ln a}$.特别地,当$a=\mathrm{e}$时$f(x)=\ln x$,$f'(x)=\dfrac{1}{x}$.

导(函)数的运算法则

导函数的运算法则是十分重要且基础的工具.它能让我们从简单的函数出发直接推出复杂函数的导函数,而无需通过定义求导.这避免了繁琐的极限运算.事实上,即使不清楚初等函数的导函数的由来,我们仍然可以通过记忆它们的导函数,再通过导函数的运算法则求出许多函数的导函数.

Theorem 0A.1.2

导函数的运算法则主要有以下几条.

i. **导数的加减法**

如果$h(x)=f(x)\pm g(x)$,那么$h'(x)=f'(x)\pm g'(x)$.

ii. **导数的乘法**

如果$h(x)=f(x)g(x)$,那么$h'(x)=f'(x)g(x)+f(x)g'(x)$.

iii. **导数的除法**

如果$h(x)=\dfrac{f(x)}{g(x)}$,那么$h'(x)=\dfrac{f'(x)g(x)-f(x)g'(x)}{(g(x))^2}$

iv. **导数的复合**

如果$h(x)=f(g(x))$,那么$h'(x)=f'(g(x))\cdot g'(x)$.

以下是这些运算法则的简单说明.

Proof.

导函数的加减法是容易理解的.

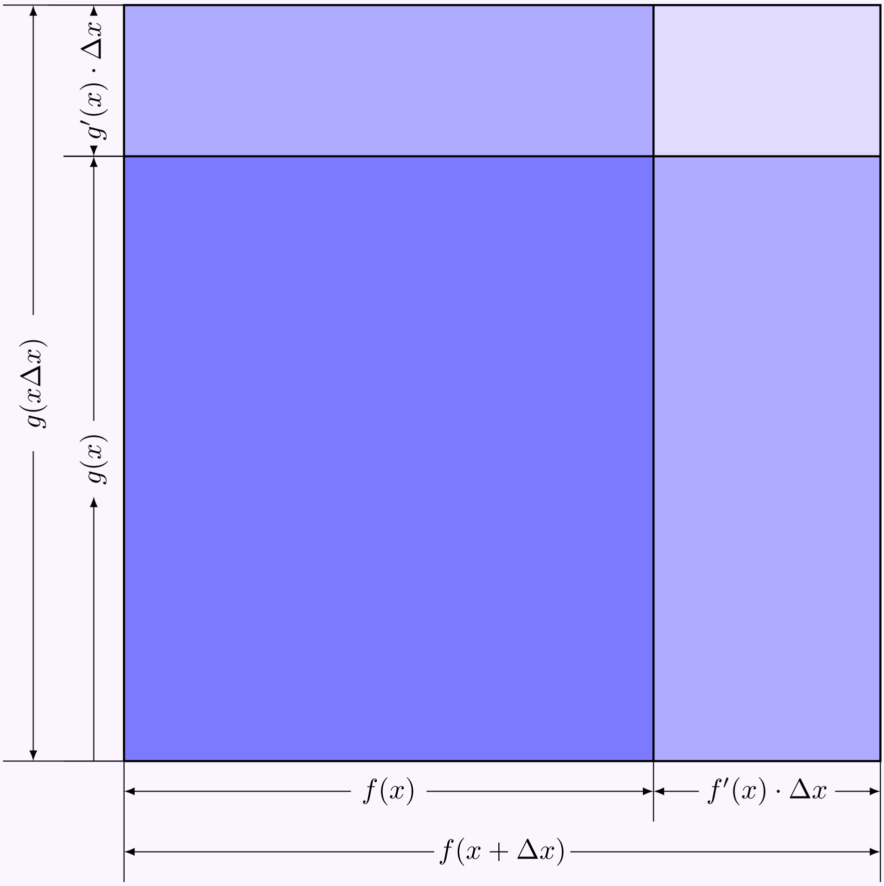
为了说明导数的乘法,我们考虑如下变换.

$$\begin{aligned}
&h(x+\Delta x)-h(x)\\
=&f(x+\Delta x)g(x+\Delta x)-f(x)g(x)\\
=&\left(f(x+\Delta x)-f(x)+f(x)\right)\left(g(x+\Delta x)-g(x)+g(x)\right)-f(x)g(x)\\
=&\left(f(x+\Delta x)-f(x)\right)\left(g(x+\Delta x)-g(x)\right)\\
&+f(x)\left(g(x+\Delta x)-g(x)\right)+g(x)\left(f(x+\Delta x)-f(x)\right)
\end{aligned}$$

因此我们有

$$\begin{aligned}
h'(x)&=\lim_{\Delta x\to 0}\frac{h(x+\Delta x)-h(x)}{\Delta x}\\
&=f(x)g'(x)+f'(x)g(x)+\lim_{\Delta x\to 0}\Delta x\cdot\frac{f(x+\Delta x)-f(x)}{\Delta x}\cdot\frac{g(x+\Delta x)-g(x)}{\Delta x}\\
&=f(x)g'(x)+f'(x)g(x)+f'(x)g'(x)\cdot\lim_{\Delta x\to 0}\Delta x\\
&=f(x)g'(x)+f'(x)g(x)
\end{aligned}$$

这一推导还有一个形象一些的理解.



可以看到,$h(x+\Delta x)$相比$h(x)$增加的部分即为图中的三个淡色的长方形的部分.它们的面积分别为$f(x)g'(x)\Delta x$,$f'(x)g(x)\Delta x$和$f'(x)g'(x)(\Delta x)^2$.当$\Delta x \to 0$时,由于最后一项含有两个Δx,因此是相比前两项是可以忽略的无穷小量.这样与Δx做比之后求极限即可得到结果.

而复合函数的链式求导法则可以简单地解释如下.例如函数$y = h(x)$由函数$y = f(u), u = g(x)$复合而成.粗略而言,导数总是变化率,因此给定增量Δx后,首先被函数$u = g(x)$作用,增量放大了$g'(x)$倍,即

$$\frac{\Delta u}{\Delta x} \approx g'(x)$$

然后Δu又在$f(u)$的作用下被放大了$f'(u)$倍,即

$$\frac{\Delta y}{\Delta u} \approx f'(u)$$

于是整体地看,Δx在复合函数$y = f(g(x))$的作用下被放大了

$$f'(u)g'(x)$$

倍,即

$$\frac{\Delta y}{\Delta x} \approx f'(u)g'(x) = f'(g(x)) \cdot g'(x)$$

这就是链式法则的直观解释.上述等号是可以通过极限的知识进行严格证明的,这里就不再详细讨论了.

导数的除法规则可以由链式法则和乘法规则共同推出.具体而言,你可以根据链式法则先求出$\dfrac{1}{g(x)}$的导数为$-\dfrac{g'(x)}{(g(x))^2}$,然后根据乘法规则即可得出最终的结果.

我们来看一些简单的例题以巩固前面所学的知识.

Exercise E.0A.1

求函数$f(x)=\mathrm{e}^x(\sin x+\cos x)$的导函数.

Solution.

$f(x)$可以看作是由$g(x)=\mathrm{e}^x$和$h(x)=\sin x+\cos x$相乘得到.因此

$$f'(x)=\mathrm{e}^x(\sin x+\cos x)+\mathrm{e}^x(\cos x-\sin x)=2\mathrm{e}^x\cos x$$

Exercise E.0A.2

求函数$f(x)=\ln\left(x^2+1\right)$的导函数.

Solution.

$f(x)$可以看作是$g(u)=\ln u$和$u=h(x)=x^2+1$复合而成.因此

$$f'(x)=\frac{1}{u}\cdot 2x=\frac{2x}{x^2+1}$$

Exercise E.0A.3

求函数$f(x)=x^x$的导函数.

Solution.

注意到$f(x)=x^x=\mathrm{e}^{x\ln x}$.因此可以将其视作复合函数,就有

$$f'(x)=\mathrm{e}^{x\ln x}\cdot(\ln x+1)=x^x\left(\ln x+1\right)$$

接下来,我们将讨论在微积分中的一个重要的概念:微分.

0A.3 微分

无穷小量与微分

顾名思义,无穷小量就是以0为极限的变量.

Definition 0A.3.1 无穷小量

假定变量y与变量x具有函数关系$y=f(x)$,又$x\to a$时$y\to 0$,则称此时的y为**无穷小量**.

例如,当$x\to 0$时$x^2,\ln(1+x),\sin x,1-\cos x$等等均为无穷小量.正如我们在讨论导数时总是说到两个无穷小量的比一样,微分和导数之间可以通过无穷小量进行联系.

我们考虑函数$y=f(x)$在$x=x_0$处的导数.它的定义是

$$f'\left(x_0\right)=\lim_{\Delta x\to 0}\frac{f\left(x_0+\Delta x\right)-f\left(x_0\right)}{\Delta x}$$

容易看出,当$\Delta x\to 0$时因变量y的增量$\Delta y=f\left(x_0+\Delta x\right)-f\left(x_0\right)$满足

$$\lim_{\Delta x\to 0}\Delta y=0$$

这是由$y=f(x)$在x_0处的连续性保证的.因此Δy也是一个无穷小量.于是我们有

$$\lim_{\Delta x\to 0}\frac{\Delta x}{\Delta y}=f'\left(x_0\right)$$

我们进一步考虑在Δx向0趋近的过程中,$\frac{\Delta y}{\Delta x}$与其极限值$f'\left(x_0\right)$的差值.令

$$\eta(\Delta x)=\frac{\Delta y}{\Delta x}-f'\left(x_0\right)$$

显然地,$\eta(\Delta x)$也是一个无穷小量.我们对上式移项即可得

$$\Delta y=f'\left(x_0\right)\cdot\Delta x+\eta(\Delta x)\Delta x$$

第二项是比Δx更高阶的无穷小量(这意味着它与Δx之比仍为无穷小量).因此,我们可以将其记作$o(\Delta x)$.这样就得到了微分的定义.

Definition 0A.3.2 微分

设函数$y=f(x)$在$x=x_0$处附近有定义.如果存在常数A使得

$$f\left(x_0+\Delta x\right)-f\left(x_0\right)=A\Delta x+o(\Delta x)\quad(\Delta x\to 0)$$

那么称$y=f(x)$在$x=x_0$处可微,并把$A\Delta x$称作y在$x=x_0$处的微分,记作$\mathrm{d}y$.

[3]这里的$\mapsto$代表映射.你可以简单地认为这代表了函数关系$y=f(x)$.

特别地,对于函数$y=x$而言,$\mathrm{d}x=\Delta x$.因此我们常常把微分中的Δx记作$\mathrm{d}x$.这样就有

$$\mathrm{d}y=\mathrm{d}\left(f(x)\right)=f'(x)\mathrm{d}x$$

成立.因此,微分$\mathrm{d}y$事实上代表了一个无穷小量,它与自变量的无穷小量$\mathrm{d}x$可以通过求导而联系在一起[4].

正因如此,求导可以视作对两个微分求商的结果,即

$$\frac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}x}=f'(x)$$

这也是求导被称作"微商"的原因.因此,对函数$f(x)$求导的记号有时也可以写作$\dfrac{\mathrm{d}f(x)}{\mathrm{d}x}$.

一阶微分的形式不变性

引入微分这一概念可以方便地帮助我们考察无穷小量之间的关系,进而方便地求出导数.而一阶微分是可以相互随意替换的.这就是一阶微分的形式不变性.

Theorem 0A.3.3 一阶微分的形式不变性

考虑函数$y=f(x)$与$z=g(y)$,那么变量z与变量x有复合函数关系$z=g(f(x))$.根据复合函数的求导法则有

$$\mathrm{d}z=g'(f(x))f'(x)\mathrm{d}x$$

又因为$\mathrm{d}y=f'(x)\mathrm{d}x$,因此

$$\mathrm{d}z=g'(f(x))\mathrm{d}y=g'(y)\mathrm{d}y$$

这和直接对$z=g(y)$微分的结果是相同的.因此,**无论y是作为联系z和x的中间变量还是自己作为自变量,都有微分关系$\mathrm{d}z=g'(y)\mathrm{d}y$成立**.这就是**一阶微分的形式不变性**.

这就是说,一阶微分之间的关系可以任意地互相代入;或者更直接地说,对一个等式两边求微分后等式仍然成立.我们仍然以**E.0A.3**中的函数为例向你说明这一点.

Solution.

我们有变量关系$y=x^x$.两边取对数后,这关系仍然成立,于是可以得到

$$\ln y=x\ln x$$

左边微分可得$\mathrm{d}(\ln y)=\dfrac{1}{y}\mathrm{d}y$,右边微分可得$\mathrm{d}(x\ln x)=1+\ln x$.于是

$$\frac{\mathrm{d}y}{y}=(1+\ln x)\,\mathrm{d}x$$

[4]对于一元函数而言,可导和可微是等价的,而对于多元函数则并非如此.我们将在介绍多元函数时对此进行详细解释.

于是

$$\frac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}x} = y\left(1+\ln x\right) = x^x\left(1+\ln x\right)$$

除此之外,我们还可以对隐函数求导.

Exercise E.0A.4

求$x^2+xy+y^2=1$确定的隐函数$y=f(x)$的导函数.结果中可以出现x,y.

Solution.

将y视作x的函数$y=f(x)$,那么

$$x^2+xy+y^2=x^2+xf(x)+\left(f(x)\right)^2$$

再将上面的整个式子记作z,z也与x有函数关系.因此

$$\mathrm{d}z=\left(2x+xf'(x)+f(x)+2f(x)f'(x)\right)\mathrm{d}x$$

又因为$\mathrm{d}y=f'(x)\mathrm{d}x$,于是就有

$$\mathrm{d}z=2x\mathrm{d}x+x\mathrm{d}y+y\mathrm{d}x+2y\mathrm{d}y=(2x+y)\mathrm{d}x+(2y+x)\mathrm{d}y$$

又因为题中有$z=1$,于是$\mathrm{d}z=0$,于是

$$(2x+y)\mathrm{d}x+(2y+x)\mathrm{d}y=0$$

于是

$$f'(x)=\frac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}x}=-\frac{2x+y}{2y+x}$$

总之,在实际应用中可以灵活地运用一阶微分的形式不变性来对变量进行替换.

0B 多元函数微分学

本节的内容相当重要.一方面,这应当是你第一次接触多元函数这一概念,它比我们一直以来所学习的一元函数更加复杂,;另一方面,在物理化学的学习中遍布多元函数,它们之间也有相当复杂的关系,而传统的物理化学书籍中并没有对这些数学关系以及方法进行介绍.因此,笔者希望你能在阅读本节的内容后有所收获.

0B.1 多元函数

多元函数的定义

不同于一元函数,多元函数接受多个自变量的值,并将其映射为一个因变量.例如平面上一点$P(x,y)$到原点$O(0,0)$的距离d就是以x,y为自变量的多元函数

$$d=f(x,y)=\sqrt{x^2+y^2}$$

在定义多元函数之前,我们需要一种合适的方法描述这些自变量.不难想到,有序的数组

$$(x_1,\cdots,x_n)$$

就是一个合适的方法.特别的,这也可以作为n维空间中一个点的坐标.

Definition 0B.1.1 记号:$\mathbb{R}^n$

全体n元有序实数组构成的集合记为$\mathbb{R}^n$,即

$$\mathbb{R}^n=\{(x_1,\cdots,x_n):x_1,\cdots,x_n\in\mathbb{R}\}$$

正如实数集R可以代表数轴上的所有点一样,在几何上,R^n包含了n维空间中的所有点.

我们给出多元函数的正式定义.

Definition 0B.1.2 多元函数

设集合$D\subseteq\mathbb{R}^n$.如果对于D中任意的有序实数组$(x_1,\cdots,x_n)$,按照一定的规则f,都有唯一的$u\in\mathbb{R}$与之对应,则称f是定义在D上的n元函数.

二元函数的极限[5]

与一元函数类似,多元函数也有极限的概念.我们以二元函数为例定义其极限.

[5]由于多元函数的性质都是类似的,因此在本节中我们以二元函数为例进行学习.

Definition 0B.1.3 二元函数的极限

当自变量(x,y)无限接近某一定点(x_0,y_0)时,如果二元函数$f(x,y)$能无限接近于某一定值l,则称$f(x,y)$在点(x_0,y_0)处的极限为l,记作

$$\lim_{(x,y)\to(x_0,y_0)} f(x,y)=l$$

可以看出,我们只不过把x趋近于a替换成了(x,y)趋近于(x_0,y_0),而其余的定义均与一元函数的极限保持一致.

Hint.

严谨地说,这里的**无限接近**实际上应当是**以任意路径无限接近**.不同于数轴上只能以一种方式接近,在多维空间中接近一个点可以有多种路径和方式,而多元函数极限的存在要求这些接近方式所得出的极限值都相等,才能保证总体极限的存在.

不过,我们遇到的函数大多性质良好,不会出现这样的情况.因此,你无需担心这一点,同样地对二元函数的极限有简单认识即可.

同样地,我们可以由极限的概念推出连续的概念.

Definition 0B.1.4 连续函数

如果二元函数$f(x,y)$在某一点(x_0,y_0)有定义,并且

$$\lim_{(x,y)\to(x_0,y_0)} f(x,y)=f\left(x_0,y_0\right)$$

则称$f(x,y)$在(x_0,y_0)处连续.特别地,如果$f(x,y)$在定义域上每一点都连续,则称其为定义域上的**连续函数**.

二元函数的极限运算法则与一元函数的极限完全相同,在此就不作介绍了.

0B.2 偏导数与全微分

偏导数与偏微分

研究多元函数的一个自然的想法是研究各个变量分别对函数值的影响.所谓分别,应当固定其余变量不变,只研究函数值与某一个变量的变化关系(即变化率).由此,我们可以采取与一元函数的导数类似的方法定义多元函数的偏导数.

Definition 0B.2.1 二元函数的偏导数

设二元函数$z=f(x,y)$在点(x_0,y_0)附近有定义.固定$y=y_0$,则称极限(假定其存在)

$$\lim_{\Delta x\to 0}\frac{f\left(x_0+\Delta x,y_0\right)-f\left(x_0,y_0\right)}{\Delta x}$$

为$z=f(x,y)$在点(x_0,y_0)处对x的偏导数,记作

$$f_x\left(x_0,y_0\right)\qquad \frac{\partial f\left(x_0,y_0\right)}{\partial x}$$

符号∂意为partial,你可以自行选择一种方式识读它.

类似地,如果在定义域上的任意一点都存在对x的偏导数,那么可以定义对x的偏导函数,记作

$$f_x(x,y)\ \text{或}\ \frac{\partial f(x,y)}{\partial x}$$

可以看出,偏导数的本质仍然是一元函数的导函数,只需将其它变量视作常数,目标变量视作自变量后运用一元函数的求导方法即可得出多元函数的偏导数.

对偏导函数(本质上仍然是一个二元函数)求导,即可得到二元函数的二阶偏导数.

Definition 0B.2.2 二元函数的二阶偏导函数

二元函数$f(x,y)$的二阶偏导函数有如下几种情形.

$$\begin{aligned}
f_{xx}(x,y)&=\frac{\partial f_x(x,y)}{\partial x}=\frac{\partial^2 f(x,y)}{\partial x^2}\\
f_{yy}(x,y)&=\frac{\partial f_y(x,y)}{\partial y}=\frac{\partial^2 f(x,y)}{\partial y^2}\\
f_{xy}(x,y)&=\frac{\partial f_x(x,y)}{\partial y}=\frac{\partial^2 f(x,y)}{\partial y\partial x}\\
f_{yx}(x,y)&=\frac{\partial f_y(x,y)}{\partial x}=\frac{\partial^2 f(x,y)}{\partial x\partial y}
\end{aligned}$$

上面的后两个函数区别在于求偏导的顺序不同.事实上,我们有如下定理联系两者的关系.

Definition 0B.2.3 二阶混合偏导函数

如果在某一区域D上,$f(x,y)$的两个二阶偏导函数$f_{xy}(x,y)$和$f_{yx}(x,y)$存在且连续,那么它们在D上必然相等,即

$$f_{xy}(x,y)=f_{yx}(x,y)\quad \forall(x,y)\in D$$

定理的证明较为繁琐,因此略去.上述的函数存在且连续的要求在我们讨论的范畴内很容易满足,因此可以广泛地应用这一结论.这一定理在我们后面的学习中十分重要.

全微分

我们已经在微分一节中讨论了无穷小量之间的关系.在那时我们说在定点$x = x_0$附近的因变量增量Δy与自变量增量Δx满足线性关系$\Delta y = f'(x_0)\Delta x$.同样地,我们也希望将多元函数$z = f(x,y)$在某一定点$(x_0,y_0)$附近的增量$\Delta z$表示成两个因变量增量$\Delta x$和$\Delta y$的线性组合.这就引出了全微分的概念.

Definition 0B.2.4 二元函数的全微分

设函数$z = f(x,y)$在某一定点(x_0,y_0)附近有定义.如果$z = f(x,y)$的增量

$$\Delta z = f(x_0+\Delta x, y_0+\Delta y) - f(x_0,y_0)$$

满足

$$\Delta z = A\Delta x + B\Delta y + o(\rho) \quad \rho = \sqrt{(\Delta x)^2 + (\Delta y)^2} \to 0$$

其中A, B为常数,那么$z = f(x,y)$在(x_0,y_0)处**可微**,并将$A\Delta x + B\Delta y$称作$z = f(x,y)$在此处的全微分,记作

$$\mathrm{d}z = A\Delta x + B\Delta y$$

与一元函数的微分类似,上式更常见的被写作$\mathrm{d}z = A\mathrm{d}x + B\mathrm{d}y$.

同样地,全微分和偏导数也存在联系.

Theorem 0B.2.5 全微分与偏导数的关系

二元函数$z = f(x,y)$的全微分满足

$$\mathrm{d}z = \frac{\partial f(x,y)}{\partial x}\mathrm{d}x + \frac{\partial f(x,y)}{\partial y}\mathrm{d}y$$

即**0B.2.4**中的A, B分别等于函数在(x_0,y_0)处对x和对y的偏导数.

对于初等函数而言,在定义域内只要偏导数存在就一定可微.**0B.2.5**将各个自变量对因变量的贡献联系在一起,是一个十分重要的式子.

复合函数微分法

我们现在给出对二元复合函数求偏导数的方法.

Theorem 0B.2.6 复合函数求偏导法

设函数$u=\phi(x,y),v=\psi(x,y)$以及$z=f(u,v)$,则复合函数$z=f(\phi(x,y),\psi(x,y))$满足[6]

$$\frac{\partial z}{\partial x}=\frac{\partial f}{\partial u}\cdot\frac{\partial u}{\partial x}+\frac{\partial f}{\partial v}\cdot\frac{\partial v}{\partial x}$$

$$\frac{\partial z}{\partial y}=\frac{\partial f}{\partial u}\cdot\frac{\partial u}{\partial y}+\frac{\partial f}{\partial v}\cdot\frac{\partial v}{\partial y}$$

Proof.

我们仍采用较为容易理解的方式阐述上述定理.考虑x的增量Δx,那么相应的u的增量满足

$$\Delta u\approx\frac{\partial u}{\partial x}\Delta x$$

同样地,v的增量满足

$$\Delta v\approx\frac{\partial v}{\partial x}\Delta x$$

而u,v的增量引起z的增量为

$$\Delta z\approx\frac{\partial f}{\partial u}\Delta u+\frac{\partial f}{\partial v}\Delta v$$

将前面的两个式子代入其中就有

$$\Delta z=\left(\frac{\partial f}{\partial u}\cdot\frac{\partial u}{\partial x}+\frac{\partial f}{\partial v}\cdot\frac{\partial v}{\partial x}\right)\Delta x$$

这就可以得出

$$\frac{\partial z}{\partial x}=\frac{\partial f}{\partial u}\cdot\frac{\partial u}{\partial x}+\frac{\partial f}{\partial v}\cdot\frac{\partial v}{\partial x}$$

对y亦是同理.在不引起混淆的情况下,$\frac{\partial f}{\partial u}$也可以写作$\frac{\partial z}{\partial u}$.

所谓不引起混淆的情况,可以由下面这个例子进行说明.

Problem P.0B.1

设函数$u=\phi(x,y)$和$z=f(u,y)$.求复合函数$z=f(\phi(x,y),y)$对y的偏导数$\frac{\partial z}{\partial y}$.

Solution.

乍一看,我们可以令$v=y$从而代入**0B.2.6**的公式,得到

$$\frac{\partial z}{\partial y}=\frac{\partial z}{\partial u}\cdot\frac{\partial u}{\partial y}+\frac{\partial z}{\partial v}\cdot\frac{\partial v}{\partial y}=\frac{\partial z}{\partial u}\cdot\frac{\partial u}{\partial y}+\frac{\partial z}{\partial y}$$

[6]假定相应的偏导数均存在.

这显然是有问题的:等式的左右两端消去$\dfrac{\partial z}{\partial y}$竟然可以得到$\dfrac{\partial z}{\partial u}\cdot\dfrac{\partial u}{\partial y}=0$.问题出在哪里呢?

事实上,左边的$\dfrac{\partial z}{\partial y}$表示$z$以$x,y$作为自变量时$z$对$y$的偏导数.考虑偏导数的定义,在对$y$求偏导时将$x$视作定值,因此可以表示为

$$\left(\frac{\partial z}{\partial y}\right)_x$$

而右边的$\dfrac{\partial z}{\partial y}$表示$z$以$u,v$为自变量时$z$对$v$的偏导数.由于$v=y$,于是这实际上是$z$以$u,y$为自变量时$z$对$y$的偏导数.求此偏导数时,将$u$视作定值,因此可以表示为

$$\left(\frac{\partial z}{\partial y}\right)_u$$

这样就可以得到

$$\left(\frac{\partial z}{\partial y}\right)_x=\left(\frac{\partial z}{\partial u}\right)_y\left(\frac{\partial u}{\partial y}\right)_x+\left(\frac{\partial z}{\partial y}\right)_u$$

这一结论在之后也将经常用到.

Definition 0B.2.7 偏导数的另一种记号

在变量之间具有复杂的复合函数关系时,求偏导数时需要注明固定的自变量.例如

$$\left(\frac{\partial z}{\partial x}\right)_y$$

表示固定y时z对x的偏导数,亦即因变量为z,自变量为(x,y)时构成的函数$z=f(x,y)$对x的偏导数.

一阶全微分的形式不变性

与一阶微分具有的形式不变性相似的,我们还有一阶全微分的形式不变性.

Theorem 0B.2.8 一阶全微分的形式不变性

设函数$z=f(u,v),u=\phi(x,y),v=\psi(x,y)$有连续的一阶偏导数,则复合函数

$$z=f(\phi(x,y),\psi(x,y))$$

在给定点(x,y)处的微分仍然满足

$$\mathrm{d}z=f_u\mathrm{d}u+f_v\mathrm{d}v$$

而不论u,v作为中间变量还是自变量.