МИНИМАЛЬНЫЕ НЕОБХОДИМЫЕ СВЕДЕНИЯ ИЗ ВЫСШЕЙ МАТЕМАТИКИ

1. ФУНКЦИЯ, ПРОИЗВОДНАЯ, ГРАДИЕНТ

(I) При записи эмпирических законов нам потребуются некоторые математические понятия: функция, непрерывность, производная и т.п..

● 1. Постоянной величиной называется величина, сохраняющая одно и то же значение (или вообще или в данном процессе). В последнем случае постоянная величина называется ***параметром***.

● 2. Переменная величина y называется однозначной ***функцией*** от переменной величины x, если они связаны между собой так, что каждому рассматриваемому значению величины x соответствует единственное вполне определенное значение величины y. Это определение впервые в общих чертах было сформулировано Лобачевским Н.И.

Переменная x называется при этом ***аргументом*** или независимой переменной, y иногда называют зависимой переменной. Относительно самих величин x и y говорят, что они находятся в функциональной зависимости.

Совокупность всех значений независимой переменной x, для которых функция y определена, называется ***областью определения*** или областью существования этой функции.

Тот факт, что y есть функция от x обозначают так $y = f(x)$.

● Приведем ***примеры функциональных зависимостей между переменными*** в физике. Главным предметом изучения в математическом анализе является не изучение изменения одной переменной сомой по себе, а зависимость между двумя или несколькими переменными при их совместном изменении. В различных областях физики и химии вы неоднократно встречались с такими зависимостями. Совместно изменяющиеся переменные не могут одновременно принимать любую пару значений (из своих областей изменения): если одной из них (независимой переменной) придано конкретное значение, то этим же определяется значение другой переменной (зависимой переменной или функции). Например (1), площадь круга S есть функция ее радиуса R; ее значение может быть вычислено по заданному значению радиуса с помощью известной формулы,

$$S = \pi R^2,$$

где $\pi = 3{,}14\ldots$ - число «пи».

(2) В случае свободного падения тяжелой материальной точки при отсутствии сопротивления время t (сек), отсчитываемой от начала движения, и пройденный за это время путь s (м) связаны уравнением

$$s = \frac{gt^2}{2},$$

где $g = 9{,}81$ м^2/сек – ускорение силы тяжести. Тогда время, за которое материальная точка пройдет путь s, будет зависеть от этого пути в соответствии с формулой

$$t = \sqrt{\frac{2s}{g}}.$$

(3) Рассмотрим некоторую массу идеального газа, содержащуюся под поршнем. В предположении, что температура сохраняется неизменной, объем V и давление p этой массы газа подчиняются закону Бойля-Мариотта:

$$pV = c = const$$

Если произвольно менять объем, то давление как функция объема будет меняться по формуле

$$p = \frac{c}{V}.$$

(4) Для давления воздуха в зависимости от высоты места над уровнем моря в физике выводится барометрическая формула

$$p = p_0 \mathbf{exp}(-kh),$$

где p_0 - давление на уровне моря; k - некоторая постоянная.

Выбор независимой переменной иногда бывает безразличен или связан с соображениями простого удобства. Например, в последнем случае связь между давлением и высотой над уровнем моря может быть использована для того, чтобы дать возможность летчику по наблюдаемому давлению судить о достигнутой высоте. В этом случае формулу удобно переписать в виде

$$h = \frac{1}{k} \mathbf{ln} \frac{p_0}{p}.$$

● 4. Пусть x и x_1 - два значения переменной из области определения X (старое и новое).

Приращением переменной величины называется разность между новым значением этой величины и ее прежним значением, т.е. в нашем случае это

$$\Delta x = x_1 - x.$$

Если y функция от аргумента x, то, задавая приращение аргумента $x + \Delta x$, мы получим приращение функции Δy.

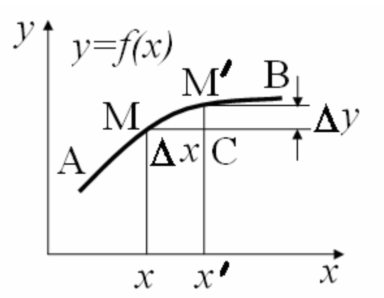

Рис. 1.

Этот факт можно записать так:

$$y + \Delta y = f(x + \Delta x).$$

Следовательно,

$$\Delta y = f(x + \Delta x) - f(x).$$

Эти понятия легко пояснить графически (рис. 1).

● 5. Функция $f(x)$ называется ***непрерывной*** в точке x_1, если (а) она определена в этой точке, т.е. x_1 принадлежит области определения функции: $x_1 \in X$; (б) существует конечный предел

$$\lim_{x \to x_1} f(x).$$

и (в) этот предел равен значению функции в этой точке

Иными словами:

функция $y = f(x)$ называется непрерывной в точке, если бесконечно малому приращению аргумента в этой точке соответствует бесконечно малое приращение функции, то есть

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

Если хотя бы одно из трех условий не выполнено, функция называется ***разрывной***.

- 6. ***Производной*** функции в точке x_1 называется предел отношения приращения функции Δy к вызвавшему его приращению аргумента Δx:

$$y' = f'(x) = \lim_{\Delta x \to 0} \frac{\Delta y}{\Delta x} = \frac{df}{dx}.$$

Это понятие обобщается на случай функции нескольких переменных (см. ниже). Например, в случае функции двух переменных $z = f(x, y)$ будем иметь две частных производные

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

(II) ***Градиент*** (слово происходит от латинского *gradiens*, в родительном падеже – *gradientis* – шагающий) – характеристика, показывающая направление наискорейшего возрастания некоторой величины, значение которой меняется от одной точки пространства к другой. Например, если взять высоту поверхности Земли над уровнем моря (2-мерное пространство), то её градиент в каждой точке поверхности будет показывать «в горку».

В математике, градиент функции f это вектор, который указывает направление наискорейшего роста этой функции, и чей модуль равен скорости ее изменения в этом направлении.

- Для случая трехмерного пространства градиентом функции $f(x, y, z)$ называется векторная функция с компонентами

$$\frac{\partial f}{\partial x}, \frac{\partial f}{\partial y}, \frac{\partial f}{\partial z},$$

равными частным производным $f(x, y, z)$ по всем ее аргументам.

Из определения градиента следует

$$\mathbf{grad} f = \frac{\partial f}{\partial x}\mathbf{i} + \frac{\partial f}{\partial y}\mathbf{j} + \frac{\partial f}{\partial z}\mathbf{k} \equiv \nabla f,$$

где $\mathbf{i}, \mathbf{j}, \mathbf{k}$ - единичные векторы декартовой системы координат.

Или, если для независимых переменных мы введем обозначения x_1, x_2, x_3, а для единичных векторов - $\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \mathbf{e}_3$, то сможем записать

$$\mathbf{grad} f = \frac{\partial f}{\partial x_1}\mathbf{e}_1 + \frac{\partial f}{\partial x_2}\mathbf{e}_2 + \frac{\partial f}{\partial x_3}\mathbf{e}_3 \equiv \nabla f.$$

Смысл градиента любой скалярной функции f состоит в том, что его произведение с бесконечно малым вектором перемещения $d\mathbf{x}$ с компонентами dx_1, dx_2, dx_3 дает ***полный дифференциал*** (см. ниже) этой функции

$$df = \frac{\partial f}{\partial x_1} dx_1 + \frac{\partial f}{\partial x_2} dx_2 + \frac{\partial f}{\partial x_3} dx_3 = \mathbf{grad} f \cdot d\mathbf{x} .$$

● В различных областях физики используется понятие градиента различных физических полей. Например, *градиент концентрации* – нарастание или уменьшение по какому-либо направлению концентрации растворённого вещества, *градиент температуры* – увеличение или уменьшение по направлению температуры среды и т. д. Градиент может быть вызван различными причинами.

Производная функции f по направлению $\mathbf{e}(\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \mathbf{e}_3)$ есть скалярное произведение градиента на единичный вектор

$$\frac{\partial f}{\partial \mathbf{e}} = \frac{\partial f}{\partial x_1} de_1 + \frac{\partial f}{\partial x_2} de_2 + \frac{\partial f}{\partial x_3} de_3 = (\nabla f, \mathbf{e}).$$

Так как модуль единичного вектора равен единице, то

$$\frac{\partial f}{\partial \mathbf{e}} = \|\nabla f\| \cdot \mathbf{cos}(\nabla f, \mathbf{e}).$$

Следовательно, наибольшая скорость изменения функции f достигается в направлении ее градиента и равна его модулю.

ПРОИЗВОДНЫЕ НЕКОТОРЫХ ЭЛЕМЕНТАРНЫХ ФУНКЦИЙ

$y = C = const$	$y' = 0$
$y = x^n$	$y' = nx^{n-1}$
$y = a^x$	$y' = a^x \ln a$
$y = e^x$	$y' = e^x$
$y = \log_a x$	$y' = \frac{1}{x \ln a}$
$y = \ln x$	$y' = \frac{1}{x}$

$y = \sin x$	$y' = \cos x$
$y = \cos x$	$y' = -\sin x$
$y = \operatorname{tg} x$	$y' = \dfrac{1}{\cos^2 x}$
$y = \operatorname{ctg} x$	$y' = -\dfrac{1}{\sin^2 x}$
$y = \arcsin x$	$y' = \dfrac{1}{\sqrt{1-x^2}}$
$y = \arccos x$	$y' = -\dfrac{1}{\sqrt{1-x^2}}$
$y = \operatorname{arctg} x$	$y' = \dfrac{1}{1+x^2}$
$y = \operatorname{arcctg} x$	$y' = -\dfrac{1}{1+x^2}$
$y = \operatorname{sh} x$	$y' = \operatorname{ch} x$
$y = \operatorname{ch} x$	$y' = \operatorname{sh} x$
$y = \operatorname{th} x$	$y' = \dfrac{1}{\operatorname{ch}^2 x}$
$y = \operatorname{cth} x$	$y' = -\dfrac{1}{\operatorname{sh}^2 x}$

ДИФФЕРЕНЦИАЛ

Пусть мы имеем функцию $y = f(x)$, определенную на некотором промежутке X непрерывную в рассматриваемой точке x_0. Тогда приращению

Δx аргумента отвечает приращение функции

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

бесконечно малое вместе с Δx. Большую важность имеет вопрос: существует ли для Δy такая линейная относительно Δx бесконечно малая $A\Delta x$ ($A = const$), что их разность оказывается, по сравнению с Δx, бесконечно малой высшего порядка

$$\Delta y = A \cdot \Delta x + o(\Delta x). \tag{1}$$

При $A \neq 0$ наличие равенства (1) показывает, что бесконечно малая $A \cdot \Delta x$ эквивалентна бесконечно малой Δy и, значит, служит для последней ее главной частью, если за основную бесконечно малую взята Δx.

Если равенство (1) выполняется, то функция $y = f(x)$ называется дифференцируемой, (при данном значении $x = x_0$), само же выражение $A \cdot \Delta x$ называется ***дифференциалом функции*** и обозначается символом dy или $df(x_0)$.

Дифференциалом независимо переменной называют именно приращение Δx и условно полагают

$$dx = \Delta x.$$

В результате:

$$dy = A \cdot dx \tag{2}$$

Итак, дифференциал функции характеризуется двумя свойствами: (1) он представляет линейную функцию от приращения Δx аргумента и (2) разнится от приращения функции на величину, которая при $\Delta x \to 0$ является бесконечно малой порядка высшего, чем Δx.

В математическом анализе доказывается следующее утверждение:

Для того чтобы функция $y = f(x)$ в точке x_0 была дифференцируема, необходимо и достаточно, чтобы для нее в этой точке существовала конечная производная $y' = f'(x_0)$. При выполнении этого условия равенство (1) имеет место именно при значении постоянной A, равном именно этой производной:

$$\Delta y = y'_x \cdot \Delta x + o(\Delta x).$$

и

$$dy = y'_x \cdot dx. \tag{3}$$

Рассмотрим простые примеры.

(1) Площадь круга S в зависимости от его радиуса r задается формулой $S = \pi r^2$. Если радиус получает приращение Δr, то приращение площади можно вычислить по формуле

$$\Delta S = \pi(r + \Delta r)^2 - \pi r^2 = 2\pi r \cdot \Delta r + \pi(\Delta r)^2.$$

Главной частью приращения при $\Delta r \to 0$, очевидно, будет $2\pi r \cdot \Delta r$.

Кроме того, $\frac{dS}{dr} = 2\pi r$.

(2) Рассмотри свободное падение материальной точки по закону $s = \frac{gt^2}{2}$. За промежуток времени Δt точка пройдет путь:

$$\Delta s = \frac{g(t + \Delta t)^2}{2} - \frac{gt^2}{2} = gt \cdot \Delta t + \frac{g}{2}(\Delta t)^2.$$

При $\Delta t \to 0$ главной частью формулы будет $gt \cdot \Delta t$.

Понятие дифференциала играет большую роль в приближенных вычислениях.

ПРОИЗВОДНЫЕ И ДИФФЕРЕНЦИАЛЫ ВЫСШИХ ПОРЯДКОВ

Если функция $y = f(x)$ имеет конечную производную $y' = f'(x)$ в некотором промежутке X, то последняя (т.е. производная) сама представляет новую функцию от x. Эта функция в свою очередь может иметь производную в некоторой точке x_0 из X, конечную или нет. Ее называют производной второго порядка или второй производной и обозначают так:

$$\frac{d^2y}{dx^2},\ y'',\ \frac{d^2f(x_0)}{dx^2},\ f''(x_0).$$

Аналогично, для производной третьего порядка или третьей производной имеем

$$\frac{d^3y}{dx^3},\ y''',\ \frac{d^3f(x_0)}{dx^3},\ f'''(x_0)$$

и т.д.

$$\frac{d^ny}{dx^n},\ y^{(n)},\ \frac{d^nf(x_0)}{dx^n},\ f^{(n)}(x_0).$$

Дифференциалом второго порядка или вторым дифференциалом функции $y = f(x)$ в некоторой точке называется дифференциал в этой точке от ее первого дифференциала:

$$d^2y = d(dy).$$

Дифференциалом n-го порядка или n-м дифференциалом функции $y = f(x)$ называется дифференциал от ее $(n-1)$-го дифференциала:

$$d^ny = d\left(d^{n-1}y\right).$$

При вычислении дифференциалов высших порядков важно помнить, что dx есть произвольное и независящее от x число, которое при дифференцировании по x следует рассматривать как постоянный множитель. Легко угадываемый общий закон:

$$d^ny = y^n dx^n.$$

Сделаем ***еще одно важное замечание***. Пусть функции $y = f(x)$ и $x = \varphi(t)$ таковы, что из них может быть составлена сложная функция

$$y = f(\varphi(t)).$$

Если существуют производные y'_x и φ'_t, то по правилам дифференциального исчисления существует и производная

$$y'_t = y'_x \cdot x'_t$$

Дифференциал dy по независимой переменной x следует из (3). Перейдем теперь к независимой переменной t

$$dy = y'_t dt = y'_x \cdot x'_t dt = y'_x dx, \tag{4}$$

т.е. мы вернулись к прежней форме дифференциала. Следовательно. Форма дифференциала может быть сохранена даже в том случае, если прежняя независимая переменная заменена новой. Это свойство называют ***инвариантностью формы дифференциала***.

Но ***уже второй дифференциал этим свойством не обладает***. Вычислим второй дифференциал от функции $dy = y'_x dx$ по t:

$$d^2y = d(y'_x dx) = dy'_x \cdot dx + y'_x d(dx) = dy'_x \cdot dx + y'_x d^2x$$

Пользуясь инвариантностью формы первого дифференциала, получим:

$$d^2y = d(y'_x dx)\cdot dx + y'_x d^2x = y''_{x^2}(dx)^2 + y'_x d^2x. \quad (5)$$

С другой стороны, дифференциал при независимой переменной x есть

$$d^2y = y''_{x^2} dx^2.$$

Выражение (5) является более общим для d^2y: если x есть независимая переменная, то $d^2x = 0$.

ФУНКЦИИ НЕСКОЛЬКИХ ПЕРЕМЕННЫХ

Говоря об изменении двух независимых переменных x и y, мы должны всякий раз указывать, какие пары значений (x,y) они могут принимать совместно; множество этих пар М и будет областью изменения переменных x, y.

Само определение понятия функции дается в тех же выражениях, что и для случая одной независимой переменной: переменная z с областью изменения Z называется функцией независимых переменных x, y в множестве М, если каждой паре (x,y) их значений из М – по некоторому правилу или закону – ставится в соответствие одно определенное значение z из Z.

Здесь имеется в виду однозначная функция; это определение легко распространить и на случай многозначной функции.

Множество М и есть область определения функции. Сами переменные x, y - по отношению к их функции – называются ее аргументами. Функциональная зависимость между z и x, y обозначается так же, как и в случае функции одной переменной:

$$z = f(x.y),\ z = \varphi(x.y),\ z = z(x.y) \text{ и т.д.}$$

В то время как для функции одной переменной областью изменения аргумента (***областью определения***) являлся тот или иной промежуток (конечный или бесконечный), в случае функции двух переменных область определения может быть достаточно сложной. Но ее ***удобно изображать как геометрическое место точек*** (x,y) ***на плоскости***: область определения заполняет некоторую фигуру. Наподобие того, как функция $z = f(x)$ геометрически иллюстрировалась своим графиком, можно геометрически истолковать и уравнение $z = f(x.y)$. Геометрическое место полученных таким образом точек и явится пространственным графиком нашей функции. В термодинамике, например, внутренняя энергия простой системы типа «газ» может рассматриваться как функция двух переменных – энтропии и объема:

$$U = U(S,V).$$

В случае n переменных мы будем говорить о числах или координатах точки $x_1, x_2, \ldots x_n$ в n-мерном пространстве, образующих n-мерную область определения функции. Тогда, если система может совершать, кроме работы расширения, и другие виды работ, можем записать

$$U = U(S,V,Z_1,Z_2,\ldots).$$

Для функций многих переменных можно распространить Понтия предела, непрерывности, ограниченности и т.п., известные для функции одной переменной.

В курсе термодинамики нам понадобятся ***понятия частных производных и частных дифференциалов***, которые мы для простоты рассмотрим на примере функции трех переменных.

Пусть в некоторой области D определена функция

$$u = f(x,y,z),$$

в том числе в точке $M(x_0, y_0, z_0)$.

Если мы припишем y и z постоянные значения y_0 и z_0, а x будем изменять, то u будет функцией только от одной переменной x в окрестности точки x_0. Придадим этому значению x_0 приращение Δx, тогда функция получит приращение

$$\Delta_x u = \Delta_x f(x_0, y_0, z_0) = f(x_0 + \Delta x, y_0, z_0) - f(x_0, y_0, z_0),$$

которое можно было бы назвать частным приращением, поскольку оно вызвано изменением лишь одной переменной. По определению производной, она представляет собой предел

$$\lim_{\Delta x \to 0} \frac{\Delta_x u}{\Delta x} = \lim_{\Delta x \to 0} \frac{f(x_0 + \Delta x, y_0, z_0) - f(x_0, y_0, z_0)}{\Delta x}.$$

Эта производная называется частной производной функции $f(x, y, z)$ по x в точке (x_0, y_0, z_0). В этом определении не все координаты равноправны: y_0 и z_0 фиксированы, а x меняется по направлению к x_0. Частную производную обозначают, например, так

$$\frac{\partial u}{\partial x},\ u'_x,\ \frac{\partial f(x_0, y_0, z_0)}{\partial x},\ f'_x(x_0, y_0, z_0).$$

Аналогично вводятся частные производные по двум другим переменным.

Произведение частной производной $\dfrac{\partial u}{\partial x}$ на произвольное приращение Δx называется ***частным дифференциалом по*** x ***функции*** u ***:***

$$d_x u = \frac{\partial u}{\partial x} \cdot \Delta x.$$

Если под приращением независимой переменной понимать дифференциал dx, то последняя формула запишется в виде:

$$d_x u = \frac{\partial u}{\partial x} \cdot dx.$$

Аналогично мы можем записать частные дифференциалы по двум другим переменным:

$$d_y u = \frac{\partial u}{\partial y} \cdot dy,\ d_z u = \frac{\partial u}{\partial z} \cdot dz.$$

Если придать приращения $\Delta x, \Delta y, \Delta z$ всем трем переменным, исходя из точки (x_0, y_0, z_0), то функция $u = f(x, y, z)$ получит приращение:

$$\Delta u = \Delta f(x_0, y_0, z_0) = f(x_0 + \Delta x, y_0 + \Delta y, z_0 + \Delta z) - f(x_0, y_0, z_0),$$

которое называется ***полным приращением функции***.

Для приращения функции одной переменной имела место формула вида

$$\Delta y = \Delta f(x_0) = f'(x_0) \cdot \Delta x + \alpha \cdot \Delta x,$$

где α зависит от Δx и $\alpha \to 0$ при $\Delta x \to 0$.

Аналогичная формула устанавливается для функции $u = f(x, y, z)$:

$$\Delta u = \Delta f(x_0, y_0, z_0) = f'_x(x_0, y_0, z_0) \cdot \Delta x + f'_y(x_0, y_0, z_0) \cdot \Delta y +$$
$$+ f'_z(x_0, y_0, z_0) \cdot \Delta z + \alpha \cdot \Delta x + \beta \cdot \Delta y + \gamma \cdot \Delta z,$$

где α, β, γ зависят от $\Delta x, \Delta y, \Delta z$ и вместе с ними стремятся к нулю. При этом ***на функцию*** $u = f(x, y, z)$ ***накладываются ограничения***: все частные производные должны существовать не только в точке (x_0, y_0, z_0), но и в ее некоторой окрестности; и функция (x_0, y_0, z_0), и все ее частные производные должны быть непрерывны в этой точке.

В термодинамике широко используется понятие полного дифференциала функции нескольких переменных, которое является естественным распространением понятия дифференциала, введенного для функции одной переменной. Переходя к функции, например, трех переменных $u = f(x, y, z)$, определенной в области D, можно поставить вопрос о нахождении формулы, подобной (1):

$$\Delta u = \Delta f(x_0, y_0, z_0) = A \cdot \Delta x + B \cdot \Delta y + C \cdot \Delta z + o(r), \tag{6}$$

где

$$r = \sqrt{(\Delta x)^2 + (\Delta y)^2 + (\Delta z)^2} \text{ -}$$

расстояние между точками (x_0, y_0, z_0) и (x, y, z), A, B, C - постоянные.

Если в окрестности точки (x_0, y_0, z_0) все частные производные функции $u = f(x, y, z)$ существуют и непрерывны вместе с самой функцией, то вместо (6) имеет место формула

$$\Delta f(x_0, y_0, z_0) = f'_x(x_0, y_0, z_0) \cdot \Delta x + f'_y(x_0, y_0, z_0) \cdot \Delta y + f'_z(x_0, y_0, z_0) \cdot \Delta z + o(r),$$

т.е. постоянные A, B, C есть частные производные функции $u = f(x, y, z)$, или

$$\Delta u = u'_x \cdot \Delta x + u'_y \cdot \Delta y + u'_z \cdot \Delta z + o(r).$$

При наличии последней формулы ***функция*** $u = f(x, y, z)$ ***называется дифференцируемой в точке*** (x_0, y_0, z_0) и (***только в этом случае***) выражение

$$u'_x \cdot \Delta x + u'_y \cdot \Delta y + u'_z \cdot \Delta z,$$

т.е. линейная часть приращения функции, называется ее полным дифференциалом и обозначается так

$$du = u'_x \cdot dx + u'_y \cdot dy + u'_z \cdot dz. \tag{7}$$

(под дифференциалами независимых переменных dx, dy, dz понимают произвольные приращения $\Delta x, \Delta y, \Delta z$).

Аналогично функции одной переменной, мы можем ввести понятия производных и дифференциалов высших порядков. В этом случае у нас появятся ***смешанные частные производные***. Например, если первая производная от $u = f(x, y, z)$ была взята по x, то мы будем иметь три вторых частных производных:

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = \frac{\partial^2 f(x_0, y_0, z_0)}{\partial x^2}, \quad \frac{\partial^2 u}{\partial y \partial x} = \frac{\partial^2 f(x_0, y_0, z_0)}{\partial y \partial x}, \quad \frac{\partial^2 u}{\partial z \partial x} = \frac{\partial^2 f(x_0, y_0, z_0)}{\partial z \partial x}.$$

Частные производные высших порядков, взятые по различным переменным, называются смешанными производными.

Для них имеет место теорема:

Пусть функция $u = f(x_1, x_2, \ldots, x_n)$ от n переменных определена в n-мерной области D и имеет в этой области всевозможные частные производные до ($k-1$)-го порядка включительно и смешанные производные k-го порядка, причем все эти производные непрерывны в D.

При этих условиях значение любой k-й смешанной производной не зависит от того порядка, в котором производятся последовательные дифференцирования. Например, для $k = 2$ имеем

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x_i \partial x_j} = \frac{\partial^2 u}{\partial x_j \partial x_i}$$

Примеры полных дифференциалов в термодинамике – это ***уравнения Гиббса.*** Например, для простой термодинамической системы с переменным числом частиц:

$$dU = \theta dS - p dV + \mu dN.$$

Равенства смешанных производных – это основа уравнений Максвелла. Например:

$$\left(\frac{\partial p}{\partial S}\right)_{V,N} = -\frac{\partial^2 U}{\partial S \partial V} = -\frac{\partial^2 U}{\partial V \partial S} = -\left(\frac{\partial \theta}{\partial V}\right)_{S,N}.$$

ПФАФФОВЫ ФОРМЫ

Основной математический аппарат термодинамики основан на теории функций многих переменных и так называемых Пфаффовых формах. Это хорошо разработанные области анализа.

Уравнением Пфаффа называют уравнение вида

$$Rdx + Qdy + Rdz = 0,$$

где P, Q, R - непрерывные дифференцируемые функции.

Пфаффовой формой называют выражение вида

$$\sum_{i=1}^{n} A_i(x_1, x_2, ..., x_n)dx.$$

Рассмотрим пример трех переменных

$$Pdx + Qdy + Rdz, \tag{8}$$

где P, Q, R непрерывные дважды дифференцируемые заданные функции x, y, z. При приведении формы (8) к каноническому виду возможны три различные случая.

1) Форма (8) представляет собой полный дифференциал. Это означает, что существует такая функция $u = u(x, y, z)$, что

$$Pdx + Qdy + Rdz = du \tag{8, I}$$

В этом случае

$$P = \frac{\partial u}{\partial x},\ Q = \frac{\partial u}{\partial y},\ R = \frac{\partial u}{\partial z}.$$

Из сравнения смешанных производных получаем три необходимые условия для представления формы (8) в виде (8, I):

$$\frac{\partial P}{\partial y} = \frac{\partial Q}{\partial x},\ \frac{\partial Q}{\partial z} = \frac{\partial R}{\partial y},\ \frac{\partial R}{\partial x} = \frac{\partial P}{\partial z}. \tag{9}$$

Эти условия являются также достаточными.

2) Если условие (9) не выполняется, но имеет место тождество

$$P\left(\frac{\partial Q}{\partial z} - \frac{\partial R}{\partial y}\right) + Q\left(\frac{\partial R}{\partial x} - \frac{\partial P}{\partial z}\right) + R\left(\frac{\partial P}{\partial y} - \frac{\partial Q}{\partial x}\right) = 0, \tag{10}$$

форма (8) не является полным дифференциалом, но допускает интегрирующий множитель, т.е.

$$Rdx + Qdy + Rdz = vdu, \tag{8, II}$$

причем P, Q, R, v - не равны одновременно нулю ни в какой области, т.е. переменные x, y, z, u - являются зависимыми, например $u = u(x, y, z)$.

3) Если условия (9) и (10) не выполняются, то от формы (8) можно отнять полный дифференциал некоторой функции так, что для разности будет выполняться условие типа (10). В этом случае форма (8) имеет канонический вид

$$Rdx + Qdy + Rdz = du + vdw. \tag{8, III}$$

Это можно интерпретировать следующим образом. Если при одних и тех же параметрах две термодинамические системы (или состояния одной и той же термодинамической системы) с макроскопической точки зрения чем-то отличаются друг от друга, то это просто означает, что данный набор параметров является неполным и в него надо добавить те величины, которые фиксируют макроскопически обнаруживаемое различие этих систем. Иначе, если для неравновесного процесса более не выполняется уравнение Гиббса, то, вводя дополнительную переменную состояния (отвечающую за отклонение системы от термодинамического равновесия), мы вновь придем к уравнению Гиббса, но с большим числом независимых термодинамических переменных состояния и сможем использовать весь математический аппарат термодинамики необратимых процессов в локально-равновесной формулировке.