まとめ　熱力学で用いる数学

１変数関数の微分と積分：

微分係数・導関数

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

※曲線 $y = f(x)$ の傾き：$dy/dx = f'(x) = \frac{df(x)}{dx}$

不定積分

$f(x)$ が $F(x)$ の導関数であるとき，すなわち，

$$f(x) = \frac{dF(x)}{dx} \tag{2}$$

のとき，$F(x)$ を $f(x)$ の不定積分 (原始関数) と呼び，

$$\int f(x)\,dx = F(x) \tag{3}$$

と表す。

定積分 (リーマン積分)

- 区間 $[a,b]$ の分割の集合：$\{\Delta \,|\, a_0 = a < a_1 < a_2 < \cdots < a_n = b\}$
- 各小区間 $[a_{i-1}, a_i]$ における $f(x)$ の最小値 m_i，最大値 M_i による下積分，上積分：
  $I_1 = \mathrm{Max}_{\{\Delta\}} \sum_i^n m_i\,(a_i - a_{i-1})$
  $I_2 = \mathrm{Min}_{\{\Delta\}} \sum_i^n M_i\,(a_i - a_{i-1})$

このとき $I_1 = I_2$ であれば，$f(x)$ はリーマン積分可能であるという．この値を $f(x)$ の定積分とよび，$\int_a^b f(x)\,dx$ と表す．

※ $f(x)$ が区間 $[a,b]$ でリーマン積分可能なとき，

$$\int_a^b f(x)\,dx = \lim_{\Delta x \to 0} \sum_{i=i}^{n} f(x_i)\,(a_i - a_{i-1}) \tag{4}$$

ここで，

$x_i \in [a_{i-1}, a_i]$ $(i = 1, \cdots, n)$，

$\Delta x = \max\{\,(a_i - a_{i-1})\,|\, i = 1, \cdots, n\}$.

※特に，$b - a = n\Delta x$, $x_i = a + (i-1)\Delta x$ $(i = 1, \cdots, n)$ として

$$\int_a^b f(x)\,dx = \lim_{\Delta x \to 0} \sum_{i=i}^{n} f(x_i)\,\Delta x \tag{5}$$

※ $f(x)$ が $F(x)$ の導関数のとき，

$$\int_a^b f(x)\,dx = F(b) - F(a) \tag{6}$$

$\because$) $\quad f(x) = \frac{dF(x)}{dx}$ より，微小な Δx に対して

$$F(x_i + \Delta x) - F(x_i) = f(x_i)\,\Delta x + \mathcal{O}(\Delta x^2)$$

これより

$$\begin{aligned}\int_a^b f(x)\,dx &= \lim_{\Delta x \to 0} \sum_{i=i}^{n} f(x_i)\,\Delta x \\ &= \lim_{\Delta x \to 0} \sum_{i=i}^{n} \left\{ F(x_i + \Delta x) - F(x_i) + \mathcal{O}(\Delta x^2) \right\} \\ &= F(b) - F(a)\end{aligned}$$

$F(x)$ の (全) 微分

式 (2), (6) の関係を次のように表し，$F(x)$ の微分と呼ぶ：

$$dF(x) = f(x)dx \tag{7}$$

２変数関数の微分と積分：

※ n 変数関数 $f(x_1, x_2, \cdots, x_n)$ への拡張も同様に可能.

偏微分係数・偏導関数

$$\frac{\partial f(x,y)}{\partial x} \equiv \lim_{\Delta x \to 0} \frac{f(x+\Delta x, y) - f(x,y)}{\Delta x} \tag{8}$$

$$\frac{\partial f(x,y)}{\partial y} \equiv \lim_{\Delta y \to 0} \frac{f(x, y+\Delta y) - f(x,y)}{\Delta y} \tag{9}$$

全微分可能性

関数 $f(x,y)$ が点 (x_0, y_0) を含む区間で定義されているとする．定数 α, β をうまくとって，f が

$$f(x,y) = f(x_0, y_0) + \alpha(x - x_0) + \beta(y - y_0) + \epsilon(x, y; x_0, y_0), \tag{10}$$

$$\epsilon(x, y; x_0, y_0)/\sqrt{(x-x_0)^2 + (y-y_0)^2} \longrightarrow 0 \quad \big((x,y) \to (x_0, y_0)\big), \tag{11}$$

と表される時，$f(x,y)$ は (x_0, y_0) で全微分可能という.

※曲面 $z = f(x,y)$ に点 x_0, y_0 で接平面を取ることができることを意味する.

●定理１

$f(x,y)$ が (x_0, y_0) において全微分可能ならば，偏微分可能であり，式 (8) の α, β はそれぞれ x, y に関する偏微分係数である：

$$\alpha = \frac{\partial f(x,y)}{\partial x}\Big|_{x=x_0, y=y_0}, \quad \beta = \frac{\partial f(x,y)}{\partial y}\Big|_{x=x_0, y=y_0}. \tag{12}$$

●定理２

$f(x,y)$ が (x_0, y_0) を含む区間において C^1 級 (偏微分可能で偏導関数が連続) であれば，$f(x,y)$ は (x_0, y_0) において全微分可能である.

●定理３

(x_0, y_0) を含む区間において $\frac{\partial f(x,y)}{\partial x}$, $\frac{\partial f(x,y)}{\partial y}$ $\frac{\partial^2 f(x,y)}{\partial x \partial y}$, $\frac{\partial^2 f(x,y)}{\partial y \partial x}$ が存在し，すべて連続であれば (特に f が C^2 級であれば)，次が成り立つ：

$$\frac{\partial^2 f(x,y)}{\partial x \partial y}\Big|_{x=x_0, y=y_0} = \frac{\partial^2 f(x,y)}{\partial y \partial x}\Big|_{x=x_0, y=y_0}. \tag{13}$$

全微分

$f(x,y)$ が C^1 級のとき，定理１, ２の結果を次の様に表す：

$$df(x,y) = \frac{\partial f(x,y)}{\partial x} dx + \frac{\partial f(x,y)}{\partial y} dy \tag{14}$$

この df を f の**全微分**とよぶ.

<u>2 重積分・面積分</u>

- 区間 $I = [a, b] \times [c, d]$ において有界な関数 $f(x, y)$
- 区間 $I = [a, b] \times [c, d]$ の分割 Δ：
  $\Delta = \left\{ I_i = [a_i, b_i] \times [c_i, d_i]\,(i = 1, \cdots, n) \mid \cup I_i = I,\ I_i \text{は内点を共有しない} \right\}$
- 各小区間 I_i の面積：$\mu(I_i) = (b_i - a_i) \times (d_i - c_i)$
- 各小区間 I_i における $f(x, y)$ の最小値 m_i，最大値 M_i による下積分，上積分：
  $S_1 = \mathrm{Max}_{\{\Delta\}} \sum_{i=1}^{n} m_i\, \mu(I_i)$
  $S_2 = \mathrm{Min}_{\{\Delta\}} \sum_{i=1}^{n} M_i\, \mu(I_i)$

このとき $S_1 = S_2$ であれば，$f(x, y)$ は I でリーマン積分可能であるという．この値を $f(x, y)$ の積分域 I における 2 重積分 (面積分) とよび，$\int\int_I f(x, y)\, dxdy$ と表す．

※有界な領域 A における有界な関数 $f(x, y)$ の 2 重積分は，区間 $I \supset A$ をとり，$(x, y) \in I - A$ に対して $f(x, y) = 0$ と関数 $f(x, y)$ を拡張した上で定義する．

$$\int\int_A f(x, y) dxdy = \int\int_{I \supset A} f(x, y) dxdy \qquad (f(x, y)|_{I-A} = 0) \tag{15}$$

- 区間 $[a, b]$ で連続な関数 $\psi(x), \phi(x)$；$\psi(x) \leq \phi(x)$ かつ $\psi(x) < \phi(x)\,(a < x < b)$
- 縦線型領域 D：$D = \{a < x < b, \psi(x) < y < \phi(x)\}$

●定理 4

$f(x, y)$ が縦線型領域 $D = \{a < x < b, \psi(x) < y < \phi(x)\}$ の閉包において連続とする．各 x について，

$$g(x) = \int_{\psi(x)}^{\phi(x)} f(x, y) dy$$

とすれば，$g(x)$ は $[a, b]$ で連続であり，次が成り立つ：

$$\int\int_D f(x, y) dxdy = \int_a^b g(x) dx = \int_a^b \Big[\int_{\psi(x)}^{\phi(x)} f(x, y) dy \Big] dx \tag{16}$$

線積分

平面上の領域 D 内の連続関数 $f(x,y)$, $g(x,y)$ および
連続曲線 $C: x=x(t), y=y(t)$ $(a \le t \le b)$ に対して,

$$I = \int_C \left\{ f(x,y)\,dx + g(x,y)\,dy \right\}: \tag{17}$$

$$\int_C f(x,y)\,dx = \lim_{\Delta x \to 0} \sum_{i=i}^{n} f(x(t_i), y(t_i))\,(x(a_i) - x(a_{i-1})), \tag{18}$$

$$\int_C g(x,y)\,dy = \lim_{\Delta y \to 0} \sum_{i=i}^{n} f(x(t_i), y(t_i))\,(y(a_i) - y(a_{i-1})). \tag{19}$$

ここで,

区間 $[a,b]$ の分割 $\Delta:\ a_0 = a < a_1 < a_2 < \cdots < a_n = b$,

$t_i \in [a_{i-1}, a_i]$ $(i = 1, \cdots, n)$,

$\Delta x = \max\left\{ \big(x(a_i) - x(a_{i-1})\big) \,|\, i = 1, \cdots, n \right\}$,

$\Delta y = \max\left\{ \big(y(a_i) - y(a_{i-1})\big) \,|\, i = 1, \cdots, n \right\}$.

※ 特に, C が閉曲線のとき, 次のように表す:

$$\oint_C \left\{ f(x,y)\,dx + g(x,y)\,dy \right\}$$

●定理５

C が区分的に滑らか ($x = x(t)$, $y = y(t)$ が C^1 級) ならば, 線積分 I が存在し,

$$I = \int_C \left\{ f(x,y)\,dx + g(x,y)\,dy \right\} \tag{20}$$

$$= \int \left\{ f(x,y)\,\frac{dx(t)}{dt} + g(x,y)\,\frac{dy(t)}{dt)} \right\} dt. \tag{21}$$

$F(x,y)$ は C^1 級とする.

●系１: C は区分的に滑らかで, 端点を (x_1, y_1), (x_2, y_2) とするとき,

$$\int_C \left\{ \frac{\partial F(x,y)}{\partial x}\,dx + \frac{\partial F(x,y)}{\partial y}\,dy \right\} = F(x_2, y_2) - F(x_1, y_1) \tag{22}$$

すなわち, F の全微分 dF の線積分は端点での F の値のみで決まり, 経路 C に依存しない.

●系２: C が区分的に滑らかな閉曲線であれば,

$$\oint_C \left\{ \frac{\partial F(x,y)}{\partial x}\,dx + \frac{\partial F(x,y)}{\partial y}\,dy \right\} = 0 \tag{23}$$

線積分と面積分の関係

●グリーンの定理

有界な領域 D の境界 $C = \partial D$ が区分的に滑らかな閉曲線とする．$P(x,y)$, $Q(x,y)$ が D の閉包の上で C^1 級であるとき，

$$\int\int_D \left\{\frac{\partial Q(x,y)}{\partial x} - \frac{\partial P(x,y)}{\partial y}\right\} dxdy = \oint_{C=\partial D} \left\{P(x,y)dx + Q(x,y)dy\right\} \tag{24}$$

完全微分式・積分可能性

微分式

$$\omega = P(x,y)dx + Q(x,y)dy \tag{25}$$

に対して，

$$P(x,y) = \frac{\partial F(x,y)}{\partial x}, \quad Q(x,y) = \frac{\partial F(x,y)}{\partial y} \tag{26}$$

すなわち

$$\omega = \frac{\partial F(x,y)}{\partial x}dx + \frac{\partial F(x,y)}{\partial y}dy = dF(x,y) \tag{27}$$

となる関数 $F(x,y)$ が存在するとき，ω を完全微分あるいは積分可能という．

ここで，特に $P(x,y)$, $Q(x,y)$ が C^1 級であれば，定理３より次が成り立つ：

$$\frac{\partial P(x,y)}{\partial y} = \frac{\partial Q(x,y)}{\partial x}. \tag{28}$$

このとき，系１, ２より完全微分 $\omega = Pdx + Qdy$ の線積分は経路 C の取り方によらず，閉曲線上ではゼロになる：

$$\int_C \left\{P(x,y)dx + Q(x,y)dy\right\} = \int_{C'} \left\{P(x,y)dx + Q(x,y)dy\right\}, \tag{29}$$

$$\oint \left\{P(x,y)dx + Q(x,y)dy\right\} = 0. \tag{30}$$

●定理６

微分式 $\omega = Pdx + Qdy$ が C^1 級であり，

$$\frac{\partial P(x,y)}{\partial y} = \frac{\partial Q(x,y)}{\partial x}. \tag{31}$$

を満たすならば，各点 (x,y) の近傍で ω は完全微分であり，積分可能である．

※その積分 $F(x,y)$ は，定数の不定性を除いて，(x,y) を端点とする曲線 C に沿っての線積分によって与えられる：

$$F(x,y) = \int_C \left\{P(x,y)dx + Q(x,y)dy\right\} \tag{32}$$

証明：

グリーンの定理より，点 (x,y) を含む任意の閉曲線について，

$$\oint \left\{P(x,y)dx + Q(x,y)dy\right\} = 0$$

が成り立つ．これより，始点 (x_0,y_0) と終点 (x,y) を結ぶ任意の経路 C, C 'について

$$\int_C \left\{P(x,y)dx + Q(x,y)dy\right\} = \int_{C'} \left\{P(x,y)dx + Q(x,y)dy\right\}$$

が成り立つ．すなわち，積分 $\int_C \left\{P(x,y)dx + Q(x,y)dy\right\}$ は経路 C に依存せず，端点 (x,y), (x_0,y_0) のみで決まる．(x_0,y_0) を固定すれば，(x,y) の関数と見なす事ができるから，これを $F(x,y)$ とおく．例えば，$C : (x_0,y_0) \to (x_0,y) \to (x,y)$ とすれば

$$F(x,y) = \int_{x_0}^{x} P(x',y)dx' + \int_{y_0}^{y} Q(x_0,y')dy'$$

これより，

$$\begin{aligned}
\partial F(x,y)/\partial x &= P(x,y), \\
\partial F(x,y)/\partial y &= \int_{x_0}^{x} \frac{\partial P(x',y)}{\partial y} dx' + Q(x_0,y) \\
&= \int_{x_0}^{x} \frac{\partial Q(x',y)}{\partial x} dx' + Q(x_0,y) \\
&= Q(x,y).
\end{aligned}$$

$P(x,y)$, $Q(x,y)$ は連続であるから，$F(x,y)$ は全微分可能であり，$dF = Pdx + Qdy$ となる．したがって，$dF = \omega$.

有用な公式

$z = z(x,y)$ に対して，$\frac{\partial z(x,y)}{\partial x} = \left(\frac{\partial z}{\partial x}\right)_y$, $\frac{\partial z(x,y)}{\partial y} = \left(\frac{\partial z}{\partial y}\right)_x$ と記す．

$$\left(\frac{\partial z}{\partial x}\right)_y = \frac{1}{\left(\frac{\partial x}{\partial z}\right)_y}, \tag{33}$$

$$\left(\frac{\partial z}{\partial x}\right)_y \left(\frac{\partial x}{\partial y}\right)_z \left(\frac{\partial y}{\partial z}\right)_x = -1. \tag{34}$$