

Chapitre 8

Précisions mathématiques

La notion de *fonction* est abordée dans le cours de mathématiques dès la classe de seconde comme un procédé associant à un nombre un autre nombre, appelé son *image*. Étudiée à travers des exemples de référence, cette notion est progressivement formalisée pour aboutir à celle d'application d'un ensemble A dans un ensemble B . La fonction est alors désignée par une lettre – par exemple G – et l'unique image de $a \in A$ par G est notée $G(a)$.

Les physiciens, les chimistes et, plus généralement, les expérimentateurs, s'intéressent quant à eux à des « grandeurs physiques » susceptibles d'être mesurées. Elles sont nombreuses et variées : longueur l , durée t , vitesse v , intensité i du courant, énergie E , quantité de matière n , masse m , pression P , température T , etc. La modélisation des phénomènes conduit à relier ces grandeurs entre elles par des lois.

Ainsi une grandeur G peut-elle s'exprimer en fonction d'une (ou plusieurs) autres grandeurs g_i qui seront traitées, selon le contexte, comme des variables ou des paramètres. La notation $G(g_1, g_2, \dots, g_N)$ traduit que la grandeur G dépend des grandeurs physiques g_1, g_2, \dots, g_N . Corrélativement, ce choix définit, du point de vue des mathématiques, une fonction G de plusieurs variables $(g_1, g_2, \dots, g_N) \mapsto G(g_1, \dots, g_N)$. Une difficulté majeure réside dans le fait que le physicien (le chimiste...) note avec la même lettre G toutes les fonctions, **quoique différentes**, servant à exprimer la **même grandeur G** en fonction de **jeux de variables différents**.

Par exemple, en thermodynamique, on utilise aussi bien l'expression $S_m(T, V_m)$ de l'entropie molaire S_m d'un corps pur en fonction de la température T et du volume molaire V_m que celle $S_m(T, P)$ en fonction de la température T et de la pression P . Ici encore le physicien donne le même nom S_m – celui de la grandeur physique – aux **deux** fonctions $(T, V_m) \mapsto f(T, V_m)$ et $(T, P) \mapsto g(T, P)$ qui sont en fait différentes. Cet amalgame au niveau des notations entre grandeur physique, fonction mathématique et, pire, valeur de la grandeur, conduit souvent à des confusions que ce chapitre va essayer de mettre en évidence et, si possible, de lever.

L'un des objectifs est de savoir convenablement exprimer et calculer la variation d'une grandeur physique lors d'une transformation, nécessairement finie, éventuellement de très faible amplitude. Nous posons les bases du raisonnement avec des fonctions à une seule variable, puis nous étendons l'étude aux grandeurs qui dépendent de plusieurs variables.

NOTE – dans tout ce qui suit, nous ne considérons que des fonctions réelles à variables réelles, de classe C^∞ sur un ouvert connexe de \mathbb{R}^n (c'est-à-dire un ouvert d'un seul tenant), sauf éventuellement en quelques points singuliers.

Sommaire

8.1 Fonctions d'une seule variable, dérivée, petites variations	1
8.1.1 Objectif	1
8.1.2 Rappels : notations de NEWTON, LEIBNIZ et LAGRANGE	1
8.1.3 De l'intérêt de la notation de LEIBNIZ	1
8.1.4 Différentielle et petite variation	2
8.2 Fonctions à plusieurs variables : dérivées partielles, différentielle et petites variations	4
8.2.1 Dérivées partielles	4
8.2.2 Grandeurs liées par une équation	5
8.2.3 Différentielle et petite variation	6
8.3 Formes différentielles	7
8.3.1 Définition	7
8.3.2 Intégration d'une forme différentielle	7

8.1 Fonctions d'une seule variable, dérivée, petites variations

8.1.1 Objectif

Considérons une grandeur x dont la variation $\Delta x = x_2 - x_1$ au cours d'une transformation entraîne la variation $\Delta y = y_2 - y_1$ au cours de cette évolution \mathcal{S} . L'objectif est de calculer cette variation en fonction de la variation de x .

\mathcal{S} est souvent appelée *variable de contrainte* et y *variable de réponse*.

Nous supposons que la grandeur y dépend de façon connue de la variable x et que la fonction f correspondante, qui à x associe y , possède les propriétés mathématiques requises.

Une méthode consiste à découper la transformation en une suite quasi continue de « petites » transformations. Il nous faut dès lors pouvoir estimer la « petite » variation δy de y faisant suite à une « petite » variation δx de x au voisinage d'un état du système, caractérisé par la valeur x_0 de la variable. Des outils mathématiques simples permettent de résoudre élégamment ce problème.

8.1.2 Rappels : notations de NEWTON, LEIBNIZ et LAGRANGE

Plusieurs notations sont utilisées pour les notions de dérivées (fonction dérivée ou valeur de cette fonction en un point donné) : notations de LAGRANGE, LEIBNIZ et NEWTON. Pour fixer les idées, on suppose ici que la grandeur x est la position d'un point dépendant du temps t . Comme il a été vu précédemment, le mathématicien introduit une fonction f telle que $x = f(t)$ et le physicien (ou le chimiste) note directement $x(t)$.

8.1.2.1 Notation de LAGRANGE

f' désigne la fonction dérivée de la fonction f . Le mathématicien désigne la valeur en t de cette fonction par $f'(t)$ alors que le physicien introduit une nouvelle grandeur, ici la vitesse, notée $v(t)$.

8.1.2.2 Notation de LEIBNIZ

Pour le physicien, elle consiste à noter $\frac{dx}{dt}$ la valeur au point générique t de la dérivée de la grandeur x .

En un point particulier t_0 , la dérivée se note $\frac{dx}{dt}(t_0)$.

Pour le mathématicien, elle consiste à noter $\frac{df}{dt}$ la fonction dérivée de la fonction f , ce qui donne, en un point t_0 , l'égalité $f'(t_0) = \frac{df}{dt}(t_0)$ – qu'on se gardera bien de noter $\frac{df(t_0)}{dt}$!

⚠ REMARQUE – On attire l'attention du lecteur sur le fait que $\frac{df}{dt}(3t)$ désigne la valeur en $3t$ de la dérivée de f et non la dérivée de la fonction $t \mapsto f(3t)$.

8.1.2.3 Notation de NEWTON

Elle est exclusivement réservée à la dérivée par rapport à la variable temps. Pour le physicien, \dot{x} désigne $v(t) = \frac{dx}{dt}$.

Dans le cours de mathématiques, la notation la plus fréquemment employée est celle de LAGRANGE. En physique-chimie et en SII, les notations de LEIBNIZ et de NEWTON sont couramment usitées.

8.1.3 De l'intérêt de la notation de LEIBNIZ

Pour plusieurs raisons, la notation dz/dt est bien adaptée au point de vue du physicien.

— Elle permet de lever l'ambiguïté sur la variable.

Prenons l'exemple de la chute libre : dans l'exemple classique du mouvement d'un point matériel dans le champ de pesanteur uniforme, l'abscisse x et la cote z de la particule sont reliées à l'instant

t d'observation par les lois horaires :

$$x(t) = v_{0x} t \quad \text{et} \quad z(t) = -\frac{gt^2}{2} + v_{0z} t$$

L'élimination de la variable t entre ces deux équations conduit à l'équation de la trajectoire :

$$z(x) = -\frac{gx^2}{2(v_{0x})^2} + \frac{v_{0z} x}{v_{0x}}$$

qui traduit la dépendance de la cote z de la particule à son abscisse x .

Du point de vue mathématique, cela conduit à manipuler deux fonctions différentes $x \mapsto z(x)$ et $t \mapsto z(t)$ associées à la même lettre z .

L'intérêt de la notation dz/dt (ou dz/dx) est de lever l'ambiguïté sur la variable choisie. En définitive, la notation f' d'usage courant en mathématiques est parfaitement adaptée au fait qu'on ne donne pas le même nom aux deux fonctions $z(t)$ et $z(x)$, ce qu'on écrira $z = f(t)$ et $z = g(x)$, les notations f' et g' pour les dérivées étant alors sans ambiguïté.

— Elle permet de retrouver aisément le calcul de la dérivée d'une fonction composée.

On suppose que $z = g(y)$ et $y = f(x)$. La formule bien connue :

$$(g \circ f)'(x) = g'(y)f'(x) = g'(f(x))f'(x)$$

s'écrit, en notation de LEIBNIZ :

$$\frac{dz}{dx} = \frac{dz}{dy} \cdot \frac{dy}{dx}$$

Comme souvent, en physique, on considère que la dérivée $\frac{dx}{dt}$ n'est rien d'autre que le rapport des accroissements infinitésimaux $dx = x(t + dt) - x(t)$ et dt , tout se passe comme s'il suffisait de simplifier une fraction sans tenir compte de l'annulation éventuelle de l'accroissement de y .

Moyen mnémotechnique efficace, une telle démonstration n'est évidemment pas recevable du strict point de vue des mathématiques.

— Elle permet de retrouver aisément le calcul de la dérivée d'une bijection réciproque.

On écrit $y = f(x)$ et $x = f^{-1}(y)$. La formule bien connue :

$$(f^{-1})'(y) = \frac{1}{f'(f^{-1}(y))}$$

se traduit simplement avec les notations de LEIBNIZ en :

$$\frac{dx}{dy} = \frac{1}{\left(\frac{dy}{dx}\right)}$$

Outre le fait qu'elle donne la valeur de la dérivée de la fonction réciproque en cas d'existence, cette égalité a le mérite de retrouver cette condition d'existence : $\left(\frac{dy}{dx} \neq 0\right)$

8.1.4 Différentielle et petite variation

8.1.4.1 Préliminaire « à la chimiste »

Pour une fonction f d'une seule variable, et compte tenu de l'interprétation usuelle en physique-chimie de la notion de dérivée, la notation de LEIBNIZ aboutissant à l'égalité $f'(x) = \frac{dy}{dx}$ peut aussi s'écrire sous la forme :

$$dy = f'(x)dx$$

En physique, en chimie et en SII, on interprète la notation différentielle dy comme l'accroissement δy de la grandeur y pour une petite variation dx de x , ce qui donne l'égalité :

$$dy = y(x + dx) - y(x) = f'(x) dx$$

égalité qui pose clairement problème pour les valeurs de x pour lesquelles $f'(x) = 0$.

8.1.4.2 Formalisme mathématique

Considérons la fonction f , définie et de classe C^∞ sur un intervalle I de \mathbb{R} , à valeurs réelles. La fonction dérivée de f est notée f' . Soit x_0 un point intérieur à I . Pour tout $h \in \mathbb{R}$, tel que $x_0 + h \in I$, nous pouvons écrire par définition de la dérivée de f en x_0 :

$$f(x_0 + h) = f(x_0) + h \cdot f'(x_0) + O(h^2) \quad \text{avec} \quad \lim_{h \rightarrow 0} \frac{O(h^2)}{h^2} = \frac{1}{2} f''(x_0) \quad (8.1)$$

Il s'agit du développement de TAYLOR de f à l'ordre 1 au voisinage de x_0 .

⚠️ REMARQUE – Notons bien qu'il faudrait poursuivre le développement de TAYLOR à un ordre supérieur pour approximer $f(x_0 + h) - f(x_0)$ lorsque $f'(x_0)$ est nul.

Si $f'(x_0) \neq 0$ et si h est suffisamment petit devant x_0 , nous négligeons $O(h^2)$ devant le produit $h \cdot f'(x_0)$, ce qui conduit à la relation :

$$f(x_0 + h) - f(x_0) \approx h \cdot f'(x_0) \quad (8.2)$$

L'erreur ainsi commise est inférieure à $M_2 \cdot h^2/2$, où M_2 est un majorant de $|f''(x)|$ quand x décrit un intervalle de la forme $[x_0 - \alpha; x_0 + \alpha]$ avec $\alpha > 0$, en imposant $|h| < \alpha$. Ce faisant, au voisinage du point M_0 de coordonnées $(x_0, y_0 = f(x_0))$, nous confondons la courbe d'équation $y = f(x)$ avec sa tangente en x_0 [Figure 8.1].

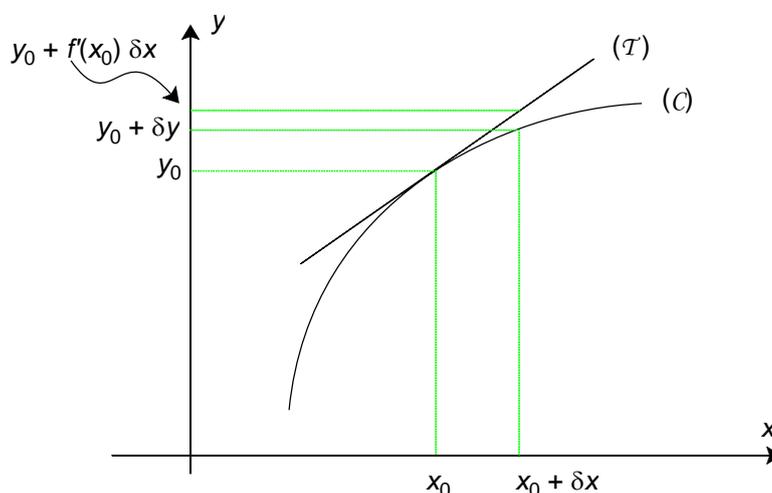


FIGURE 8.1 – Interprétation graphique d'un développement limité

L'application linéaire $h \mapsto h \cdot f'(x_0)$ est appelée « différentielle de f en x_0 » ou « application linéaire tangente à f en x_0 ». Notée $df(x_0)$, elle est définie sur \mathbb{R} tout entier et est représentée géométriquement par la droite passant par l'origine et parallèle à la tangente au point d'abscisse x_0 à la courbe d'équation $y = f(x)$.

Nous avons alors la relation, valable pour toute valeur de h (« petit » ou non !) :

$$df(x_0)(h) = f'(x_0) \cdot h$$

Reformulons les expressions précédentes avec les notations du physicien (ou du chimiste). Notons $\delta x = h$ la petite variation de x autour de x_0 et $\delta y = f(x_0 + h) - f(x_0)$ la petite variation correspondante de f . L'équation (8.2) devient alors :

$$\delta y = f'(x_0) \cdot \delta x + O(\delta x^2)$$

ou encore, au premier ordre du développement de TAYLOR :

$$\delta y = f'(x_0) \cdot \delta x = df(x_0)(\delta x) \quad (8.3)$$

Il est donc possible d'utiliser l'application linéaire tangente de la fonction qui à x associe y (ou, ce qui revient au même, la différentielle de la fonction correspondante), pour estimer, au premier ordre du développement de TAYLOR, la petite variation δy de y induite par une petite variation δx de x au voisinage d'un point x_0 . Ceci dit, l'usage est d'utiliser les notations différentielles dz au lieu des notations δz , même si cela peut induire des difficultés mathématiques, pour des raisons que nous verrons dans la section dédiée à l'étude des fonctions à plusieurs variables.

✎ REMARQUE – Rappelons que tout ceci n'est acceptable que si la dérivée de la fonction f ne s'annule pas au point x_0 !

8.2 Fonctions à plusieurs variables : dérivées partielles, différentielle et petites variations

Le même problème se pose de façon encore plus complexe lorsque la variable de réponse est une fonction de plusieurs variables de contrainte. Les mathématiques nous fournissent ici encore la solution.

Commençons par quelques rappels de cours.

8.2.1 Dérivées partielles

8.2.1.1 Définition

Soit f une fonction définie et de classe C^∞ sur un ouvert D de \mathbb{R}^3 , à valeurs réelles. Les dérivées partielles de f respectivement par rapport à x , y et z sont notées f'_x , f'_y et f'_z , ou $\frac{\partial f}{\partial x}$, $\frac{\partial f}{\partial y}$ et $\frac{\partial f}{\partial z}$. On peut aussi utiliser les notations $\partial_i f$, l'indice i se référant à la i -ème variable du triplet ordonné (x, y, z) .

Ces fonctions sont définies de la façon suivante, par exemple pour la dérivée partielle selon x : pour y et z fixés, soit φ_{yz} la fonction à une seule variable x qui, à $x \in \mathbb{R}$ associe $u = \varphi_{yz}(x) = f(x, y, z)$.

La dérivée φ'_{yz} de cette fonction par rapport à x est par définition la dérivée partielle de f par rapport à x .

Les difficultés apparaissent en physique (chimie) quand la fonction est associée à une grandeur qui peut être exprimée dans plusieurs jeux de variables. Ainsi, en thermodynamique (cf. page i), l'entropie molaire d'un corps pur S_m peut s'exprimer dans différents jeux de deux variables prises parmi la température T , la pression P et le volume molaire V_m : par exemple $S_m(T, V_m)$ et $S_m(T, P)$. Ceci impose de préciser, non seulement la variable par rapport à laquelle on dérive, mais aussi celle qui est bloquée. On notera alors :

$$\left(\frac{\partial S_m}{\partial T}\right)_{V_m} \text{ ou encore } \frac{\partial S_m}{\partial T} \Big|_{V_m} \quad \text{et} \quad \left(\frac{\partial S_m}{\partial T}\right)_P \text{ ou encore } \frac{\partial S_m}{\partial T} \Big|_P$$

des dérivées partielles de la même grandeur S_m , mais qui ne concernent pas la même fonction. Les notations sont ici sans ambiguïté puisqu'en indiquant la variable « bloquée » et la variable par rapport à laquelle on dérive, on explicite le jeu des deux variables concernées et donc la fonction dont il est question pour exprimer la grandeur entropie molaire.

Mathématiquement, si $S_m = f(T, V_m) = g(T, P)$, $\frac{\partial S_m}{\partial T} \Big|_{V_m}$ représente $\frac{\partial f}{\partial T}$ et $\frac{\partial S_m}{\partial T} \Big|_P$ représente $\frac{\partial g}{\partial T}$.

8.2.1.2 Dérivation de fonctions composées

Supposons à présent que x soit lui-même fonction à valeurs réelles, de classe C^∞ , des variables y et z et notons alors u et g respectivement les fonctions des deux variables y et z définies par :

$$x = u(y, z) \quad \text{et} \quad g(y, z) = f(u(y, z), y, z) \quad (8.4)$$

Les dérivées partielles de g par rapport aux variables y et z se calculent selon les règles de dérivation des fonctions composées de plusieurs variables :

$$\frac{\partial g}{\partial y} = \frac{\partial f}{\partial x} \frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial f}{\partial y} \quad \frac{\partial g}{\partial z} = \frac{\partial f}{\partial x} \frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial f}{\partial z} \quad (8.5)$$

Si maintenant c'est y qui est fonction de classe C^∞ des variables x et z , nous définissons les fonctions v et h de ces deux variables par : $y = v(x, z)$ et $h(x, z) = f(x, v(x, z), z)$, les dérivées partielles de h sont :

$$\frac{\partial h}{\partial x} = \frac{\partial f}{\partial x} + \frac{\partial f}{\partial y} \frac{\partial v}{\partial x} \quad \frac{\partial h}{\partial z} = \frac{\partial f}{\partial y} \frac{\partial v}{\partial z} + \frac{\partial f}{\partial z} \quad (8.6)$$

Mais le drame des physiciens et des chimistes est que non seulement ils donnent à la fonction u des variables y et z le même nom qu'à la variable x (on note $x(y, z)$), mais qu'en plus ils donnent aux

fonctions g et h le même nom qu'à la fonction f de départ, alors qu'elles ne dépendent plus que de deux variables, et encore pas les mêmes. Ainsi écrivent-ils, par exemple, les relations (8.5) comme suit :

$$\left(\frac{\partial f}{\partial y}\right)_x = \left(\frac{\partial f}{\partial x}\right)_{y,z} \left(\frac{\partial x}{\partial y}\right)_z + \left(\frac{\partial f}{\partial y}\right)_{x,z} ; \left(\frac{\partial f}{\partial z}\right)_x = \left(\frac{\partial f}{\partial x}\right)_{y,z} \left(\frac{\partial x}{\partial z}\right)_y + \left(\frac{\partial f}{\partial z}\right)_{x,y} \quad (8.7)$$

Le physicien-chimiste dit alors qu'il dérive « à x constant » ou « à y constant », ce qui correspond bien à la définition des dérivées partielles des fonctions de deux variables $g(y, z)$ ou $h(x, z)$.

8.2.2 Grandeurs liées par une équation

En thermodynamique, les grandeurs (P, T, V) d'un système – où sont fixées les quantités de matière n_i des différents constituants – sont liées par une équation d'état $f(P, T, V) = 0$, où f est une fonction régulière.

Par application du théorème des fonctions implicites¹, l'équation d'état $f(P, T, V) = 0$ permet d'exprimer, sous certaines conditions, chacune des grandeurs en fonction des deux autres.

Une condition pour que les trois fonctions $P(V, T)$, $V(P, T)$ et $T(P, V)$ soient définies au voisinage des valeurs P_0, T_0, V_0 est que :

$$\frac{\partial f}{\partial P}(P_0, T_0, V_0) \neq 0 ; \quad \frac{\partial f}{\partial V}(P_0, T_0, V_0) \neq 0 ; \quad \frac{\partial f}{\partial T}(P_0, T_0, V_0) \neq 0$$

Cette condition est par exemple vérifiée pour un gaz parfait pur pour lequel l'équation d'état $PV - nRT = 0$ permet même de tirer explicitement chacune des grandeurs (P, V, T) en fonction des deux autres et de la quantité de matière n .

Si l'on considère P dépendant de T et de V , le résultat donnant la dérivée de la réciproque d'une fonction d'une seule variable permet de justifier l'égalité :

$$\left(\frac{\partial P}{\partial T}\right)_V = \frac{1}{\left(\frac{\partial T}{\partial P}\right)_V}$$

dans laquelle la variable bloquée est la même dans les deux membres de l'égalité.

Si la grandeur P dépend uniquement de V ($P = P(V)$), et que la grandeur V dépend uniquement de T ($V = V(T)$), alors $P = P(V(T))$.

Par dérivation de la fonction composée, il vient : $\frac{dP}{dT} = \frac{dV}{dT} \cdot \frac{dP}{dV}$ ce qui, compte tenu de l'égalité $\frac{dV}{dT} = \frac{1}{\frac{dT}{dV}}$, permet d'écrire :

$$\frac{dP}{dT} = \frac{dP}{dV} \cdot \frac{dV}{dT}$$

égalité pouvant être interprétée comme résultant de la « simplification » par dV .

⚠ REMARQUE – Une analogie abusive pourrait laisser penser que :

$$\left(\frac{\partial P}{\partial T}\right)_V = \frac{\left(\frac{\partial P}{\partial V}\right)_T}{\left(\frac{\partial T}{\partial V}\right)_P}$$

égalité parfaitement erronée, puisqu'en contradiction avec la suivante, bien connue des physiciens :

$$\left(\frac{\partial P}{\partial T}\right)_V \left(\frac{\partial T}{\partial V}\right)_P \left(\frac{\partial V}{\partial P}\right)_T = -1$$

Voici une démonstration de cette dernière égalité :

1. Ce théorème n'est pas au programme de mathématiques, mais son résultat peut être présenté de manière géométrique

Le théorème des fonctions implicites permet d'exprimer T en fonction de (P, V) . Dès lors la dérivation par rapport à V de l'équation d'état $f(P, T(P, V), V) = 0$ conduit à :

$$\left(\frac{\partial T}{\partial V}\right)_P \frac{\partial f}{\partial T} + \frac{\partial f}{\partial V} = 0$$

Puis par permutation de P, T et V :

$$\frac{\partial f}{\partial P} + \left(\frac{\partial V}{\partial P}\right)_T \frac{\partial f}{\partial V} = 0 \quad ; \quad \frac{\partial f}{\partial V} + \left(\frac{\partial T}{\partial V}\right)_P \frac{\partial f}{\partial T} = 0$$

D'où l'on déduit la relation annoncée.

8.2.3 Différentielle et petite variation

8.2.3.1 Formalisme mathématique

Soit f une fonction de deux variables suffisamment régulière sur un ouvert D de \mathbb{R}^2 . Soit m_0 un point de D , de coordonnées (x_0, y_0) . Soit $z_0 = f(x_0, y_0)$ la valeur de f en ce point, f'_x et f'_y les dérivées partielles de f par rapport aux deux variables, définies notamment en m_0 .

Si les dérivées partielles f'_x et f'_y de f sont continues sur D , alors f admet en (x_0, y_0) un développement limité à l'ordre 1 :

$$f(x_0 + h, y_0 + k) = f(x_0, y_0) + f'_x(x_0, y_0) \cdot h + f'_y(x_0, y_0) \cdot k + \sqrt{h^2 + k^2} \varepsilon(\sqrt{h^2 + k^2}) \quad (8.8)$$

où $\varepsilon(h, k)$ tend vers 0 quand $(h, k) \mapsto (0, 0)$

La différentielle de f en (x_0, y_0) , encore appelée **application linéaire tangente** à f en (x_0, y_0) et notée $df_{(x_0, y_0)}$, est alors définie sur \mathbb{R}^2 tout entier par :

$$(u, v) \in \mathbb{R}^2 \mapsto df_{(x_0, y_0)}(u, v) = u \cdot f'_x(x_0, y_0) + v \cdot f'_y(x_0, y_0) \quad (8.9)$$

On note aussi df_{m_0} cette application, bien que cette notation puisse être sujette à confusion.

Si dx et dy désignent respectivement les projections $(u, v) \mapsto u$ et $(u, v) \mapsto v$, la définition de l'application linéaire tangente s'écrit, en notation fonctionnelle :

$$df_{(x_0, y_0)} = f'_x(x_0, y_0) \cdot dx + f'_y(x_0, y_0) \cdot dy \quad (8.10)$$

ATTENTION ! Ceci est une relation entre applications, absolument pas une relation entre réels et, *a fortiori*, entre petites variations.

8.2.3.2 Expression pratique d'une petite variation de la fonction f

Posons maintenant, avec les notations de la physique (et de la chimie) : $h = \delta x$ et $k = \delta y$, où h et k représentent de « petites variations » de x et de y autour de x_0 et de y_0 . Notons également $z = f(x_0, y_0)$ et $\delta z = [f(x_0 + \delta x, y_0 + \delta y) - z]$ la petite variation correspondante de z .

Cette dernière a donc pour expression :

$$\delta z = df_{(x_0, y_0)}(\delta x, \delta y) + O((\delta x)^2 + (\delta y)^2) \quad (8.11)$$

soit, au premier ordre du développement limité :

$$\delta z = df_{(x_0, y_0)}(\delta x, \delta y) \quad \text{soit} \quad \delta z = f'_x(x_0, y_0) \cdot \delta x + f'_y(x_0, y_0) \cdot \delta y \quad (8.12)$$

On peut montrer que, si f admet sur D des dérivées partielles d'ordre deux continues sur D , l'erreur ainsi commise est inférieure à $M_z((\delta x)^2 + (\delta y)^2)$, où M_z est un majorant de $\frac{1}{2}(|f''_{x^2}| + |f''_{xy}| + |f''_{y^2}|)$ sur un disque de centre m_0 et de rayon α , en imposant $(\delta x)^2 + (\delta y)^2 < \alpha^2$.

↪ REMARQUE – Les notations étant muettes, rien n'empêche de noter δx par dx . Mais cela entraîne une confusion grave entre une fonction (la projection $(h, k) \mapsto h$), définie sur \mathbb{R}^2 et un réel représentant la variation de la variable x au voisinage de x_0 .

Ceci dit, comme nous le savons, certaines grandeurs thermodynamiques peuvent être identifiées à la variation de fonctions et d'autres pas. Les physiciens-chimistes ont donc l'habitude d'utiliser des notations pour faire apparaître cette distinction. Ainsi, les grandeurs d'échange comme le travail et le transfert thermique seront notées, à l'échelle infinitésimale, δW et δQ car il n'existe pas de fonction dont la différentielle permette de calculer ces grandeurs. Au contraire, les variations infinitésimales d'énergie interne ou d'entropie δU ou δS seront (malheureusement !) presque toujours notées dU ou dS , pour se rappeler que ces grandeurs peuvent se calculer à l'aide des différentielles des fonctions correspondantes.

8.3 Formes différentielles

8.3.1 Définition

Soient $(x, y) \mapsto A(x, y)$ et $(x, y) \mapsto B(x, y)$ deux fonctions définies et de classe C^∞ sur un ouvert connexe D de \mathbb{R}^2 (c'est-à-dire un ouvert d'un seul tenant) à valeurs réelles. Pour tout (x, y) de D , on définit $\omega(x, y)$ comme l'application linéaire de \mathbb{R}^2 dans \mathbb{R} définie par :

$$\omega(x, y) = A(x, y) \cdot dx + B(x, y) \cdot dy \quad (8.13)$$

Conformément à la définition des projections dx et dy vue précédemment, l'image du couple (h, k) par $\omega(x, y)$ est :

$$\omega(x, y)(h, k) = A(x, y) \cdot h + B(x, y) \cdot k$$

L'application ω qui à tout (x, y) de D associe $\omega(x, y)$ est une forme différentielle.

Exemple : Si f est une application de classe C^1 sur D , sa différentielle df est une forme différentielle sur D puisque $df(x, y) = A(x, y)dx + B(x, y)dy$ avec $A(x, y) = f'_x(x, y)$ et $B(x, y) = f'_y(x, y)$.

Si les dérivées partielles f'_x et f'_y sont continues sur D , le théorème de SCHWARZ affirme alors que $\frac{\partial f'_x}{\partial y} = \frac{\partial f'_y}{\partial x}$, soit $\frac{\partial A}{\partial y} = \frac{\partial B}{\partial x}$.

On démontre dans le cours de mathématiques et nous l'admettons volontiers, que $\omega = Adx + Bdy$ est la différentielle d'une fonction f définie sur D si et seulement si nous avons la relation suivante :

$$\frac{\partial A}{\partial y} = \frac{\partial B}{\partial x} \quad (8.14)$$

Si cette condition est réalisée, la forme différentielle est dite *intégrable* et il existe une fonction f telle que $\omega = df$, ce qui se traduit par les relations :

$$A(x, y) = f'_x(x, y) \quad \text{et} \quad B(x, y) = f'_y(x, y) \quad (8.15)$$

La relation (8.14) traduit simplement l'application du théorème de SCHWARZ à la fonction f .

Si cette condition n'est pas réalisée en tout point de D , il n'existe pas de fonction f telle que $\omega = df$ et ω est une forme différentielle non intégrable.

Ceci dit, il reste tout à fait possible de considérer une petite variation δz induite par de petites variations δx de la variable x et δy de y autour des valeurs (x_0, y_0) avec :

$$\delta z = A(x, y) \cdot \delta x + B(x, y) \cdot \delta y \quad (8.16)$$

Tel est le cas du transfert thermique δQ ou du travail δW reçu par un système sur une transformation infinitésimale. Il n'est simplement pas possible d'intégrer la forme différentielle correspondante et de considérer le travail ou le transfert thermique, dans le cas général, comme la variation d'une fonction d'état du système, c'est-à-dire ne dépendant que des variables d'état du système.

8.3.2 Intégration d'une forme différentielle

Soient $(x, y) \mapsto A(x, y)$ et $(x, y) \mapsto B(x, y)$ deux fonctions définies et de classe C^∞ sur un ouvert simplement connexe D de \mathbb{R}^2 , à valeurs réelles, satisfaisant à la relation suivante en tout point (x, y) de D :

$$\frac{\partial A}{\partial y} = \frac{\partial B}{\partial x}$$

Nous venons de voir que la forme différentielle ω est la différentielle d'une fonction f définie sur D , que nous pouvons déterminer par la méthode suivante.

— Intégration par rapport à x , « à y constant », ce qui permet d'écrire la relation :

$$f(x, y) = \int_{x_0}^x A(t, y) dt + h(y) \quad (8.17)$$

où $y \in \mathbb{R} \mapsto h(y)$ est une fonction de la seule variable y (nous disons que c'est une constante par rapport à x !);

— Dérivation de la relation (8.17) par rapport à y , « à x constant » :

$$f'_y(x, y) = B(x, y) = \frac{\partial}{\partial y} \left(\int_{x_0}^x A(t, y) dt \right) + h'(y) \quad (8.18)$$

— Application du théorème de dérivation sous le signe intégral, intégration de cette nouvelle relation qui, on le démontre, permet de calculer $h(y)$ à une constante additive près.

*
* *