уравнением

$$\sum_{j=1}^{n} c_j = P_0/RT_0. \tag{4.33}$$

Пересечение гиперплоскости (4.32) с конусом концентраций есть центральная проекция $D(b)$ на эту плоскость, центр — в точке $c = 0$.

ГЛАВА 5

ТЕРМОДИНАМИЧЕСКОЕ ДЕРЕВО

5.1. РАЗРЕЗАНИЕ МНОГОГРАННИКА ВЫПУКЛЫМ МНОЖЕСТВОМ

Этот раздел включает вспомогательные результаты. Основная его цель — свести описание связных компонент $D\backslash U$ к описанию связных компонент $D_1\backslash U$. Приняты следующие обозначения:

D — выпуклый многогранник в R^m с непустой внутренностью (всегда является замкнутым), $m > 1$;

D_0 — множество, составленное из вершин D;

D_1 — множество, составленное из всех точек ребер D, включая вершины;

D_l — множество всех точек l-мерных граней D, $D_0 \subset D_1 \subset \ldots \subset D_m = D$;

$[x, y]$ — замкнутый отрезок прямой, соединяющий точки x и y;

$[x, y] = \{\lambda x + (1-\lambda)y | \lambda \in [0, 1]\}$;

$(x, y) = \{\lambda x + (1-\lambda)y | \lambda \in (0, 1)\}$ — открытый отрезок;

$[x, y) = \{\lambda x + (1-\lambda)y | \lambda \in [0, 1)\}$;

$(x, y] = \{\lambda x + (1-\lambda)y | \lambda \in (0, 1]\}$;

U — выпуклое множество (не обязательно замкнутое).

Лемма 5.1. *Пусть $N \in D\backslash U$. Тогда существует такая вершина $v \in D_0$, что $[v, N] \subset D\backslash U$.*

Доказательство. Предположим противное. Тогда для каждой вершины $v \in D_0$ существует такое $\lambda_v > 0$, что $N + \lambda_v(v - N) \in U$. Множество D — выпуклый многогранник, поэтому существует такой набор чисел $\varkappa_v \geqslant 0$ $(v \in D_0)$, что $\sum\limits_v \varkappa_v v = N$, $\sum\limits_v \varkappa_v = 1$. Легко проверить, что

$$\sum_v \delta_v (N + \lambda_v (v - N)) = N, \tag{5.1}$$

где $\delta_v = \varkappa_v \Big/ \Big(\lambda_v \sum\limits_{v'} (\varkappa_{v'}/\lambda_{v'})\Big) \geqslant 0$, $\sum\limits_v \delta_v = 1$. Согласно (5.1) N принадлежит выпуклой оболочке множества точек $N + \lambda_v(v - N)$ $(v \in D_0)$. Каждая из этих точек принадлежит U (по предположению). Так как U выпукло, отсюда следует, что $N \in U$, но по условию леммы это не так: $N \notin U$. Следовательно, хотя бы для одного $v \in D_0$ отрезок $[v, N]$ не пересекается с U. Лемма доказана.

Таким образом, если точка выпуклого многогранника D не принадлежит некоторому выпуклому множеству U, то ее можно соединить с какой-нибудь вершиной D отрезком, не пересекающимся с U. Покажем теперь, что если две вершины D можно соединить лежащей в D непрерывной кривой так, чтобы эта кривая не пересекалась с U, то их можно соединить и ломаной, составленной из ребер D так, чтобы эта ломаная не пересекалась с U.

Лемма 5.2. *Пусть v, $v' \notin D_0$, v, $v' \notin U$, $\varphi : [0, 1] \to D$ — непрерывная функция (путь), $\varphi(0) = v$, $\varphi(1) = v'$ и для любого $\varepsilon \in [0, 1]$ точка $\varphi(\varepsilon) \notin U$. Тогда существует такая последовательность вершин $v_0, \ldots, v_l$, что каждые две последовательные вершины v_i и v_{i+1} связаны ребром D, $v_l = v'$, $v_0 = v$, и для любого $i = 1, \ldots, l$ пересечение ребра $[v_i, v_{i+1}]$ с U пусто.*

Доказательство. Будем последовательно преобразовывать путь φ, получая на k-м шаге путь φ_k, соединяющий v с v' и лежащий на D_{m-k} $(k = 1, \ldots, m-1)$. Сначала построим путь $\varphi_1 : [0, 1] \to \partial D$ $(= D_{m-1})$. Рассмотрим два возможных случая:

1) в U содержится какая-нибудь внутренняя точка многогранника $D : N^0 \in U \cap \operatorname{int} D$;

2) U не содержит никакой внутренней точки D.

В первом случае положим: φ_1 — центральная проекция φ на ∂D из центра N^0. Эта центральная проекция π отображает $D \backslash \{N^0\}$ на ∂D и строится так. Пусть $N \in D$, $N \neq N^0$. Существует и единственно такое $\lambda > 0$, что $N^0 + \lambda(N - N^0)$ принадлежит ∂D. Полагаем $\pi(N) = N^0 + \lambda(N - N^0)$. Отображение π непрерывно на $D \backslash \{N^0\}$. Выбираем $\varphi_1(\tau) = \pi(\varphi(\tau))$ $(\tau \in [0, 1])$. Если путь φ не пересекается с U (ни для какого $\tau \in [0, 1]$ значение $\varphi(\tau)$ не принадлежит U), то и путь φ_1 не пересекается с U. Действительно, предположим противное: $\varphi_1(\tau) \in U$. Тогда $[N^0, \varphi_1(\tau)] \subset U$ ввиду выпуклости U. По построению $\varphi(\tau) \in [N^0, \varphi_1(\tau)]$ и, следовательно, $\varphi(\tau) \in U$. Но по условию $\varphi(\tau) \notin U$. Получено противоречие, поэтому заключаем, что $\varphi_1(\tau) \notin U$. Во втором случае ввиду выпуклости D и U существует линейный функционал L, отделяющий $\operatorname{int} D$ от U: для некоторого числа q значение $L(N) < q$ при $N \in \operatorname{int} D$ и $L(N) \geqslant q$ при $N \in U$, поэтому $D \cap U$ лежит в гиперплоскости $L(N) = q$. Эта гиперплоскость не содержит точек $\operatorname{int} D$, следовательно, ее пересечение с D либо пусто (тогда и $D \cap U = \varnothing$), либо совпадает с одной из собственных граней D. Таким образом, если $U \cap \operatorname{int} D = \varnothing$, то $U \cap D$ либо пусто, либо лежит на одной из граней D. В этом случае существует ломаная из ребер, соединяющая v и v' и не пересекающаяся с U, так как граф, получаемый удалением из графа многогранника D всех ребер, принадлежащих одной собственной грани, связен. Последнее утверждение хорошо известно и легко может быть доказано индукцией по размерности D. Рекомендуем читателю проделать это в качестве упражнения.

Итак, если существует соединяющий v и v' путь в D, не пересекающийся с U, то такой путь существует и в $\partial D = D_{m-1}$. Предположим теперь, что существует путь в D_{m-k}, соединяющий v с v' и непересекающийся с U:

$$\varphi_k: [0, 1] \to D_{m-k},\ \varphi_k(0) = v,\ \varphi_k(1) = v',\ \varphi_k(\tau) \notin U \quad (\tau \in [0, 1]).$$

Построим такой же путь φ_{k+1} в D_{m-k-1}, если $m-k>1$. Воспользуемся индукцией по числу $(m-k)$-мерных граней D, относительная внутренность которых пересекается с $\varphi_k([0, 1])$. Если путь φ_k не пересекается с относительной внутренностью ни одной $(m-k)$-мерной грани, то $\varphi_k(\tau) \in D_{m-k-1}$ при любом $\tau \in [0, 1]$, и можно положить $\varphi_{k+1} = \varphi_k$. Предположим, что если $\varphi_k([0, 1])$ пересекается с относительной внутренностью q $(m-k)$-мерных граней, то существует путь $\varphi_{k+1}: [0, 1] \to D_{m-k-1}$, для которого $\varphi_{k+1}(0) = v$, $\varphi_{k+1}(1) = v'$, $\varphi_{k+1}(\tau) \notin$ $\notin U$ $(\tau \in [0, 1])$. Допустим теперь, что $\varphi_k([0, 1])$ пересекается с относительной внутренностью $(q+1)$-й $(m-k)$-мерной грани. Пусть s — одна из них. Рассмотрим два случая:

1) в относительной внутренности s существует точка N^0 из U;

2) пересечение относительной внутренности s с U пусто.

В первом случае каждой точке $\varphi_k(\tau)$, принадлежащей $\mathrm{ri}\, s$, сопоставим ее центральную проекцию на $\mathrm{r}\partial s$ из центра N^0. Строится эта центральная проекция, как и выше, следующим образом. Пусть $N \in s$. Существует и единственно такое $\lambda(N) > 0$, что $N^0 + \lambda(N - N^0) \in$ $\in \mathrm{r}\partial s$. Полагаем $\pi(N) = N^0 + \lambda(N - N^0)$. Отображение π можно непрерывно продолжить на все $D_{m-k} \setminus \{N^0\}$:

$$\pi(N) = \begin{cases} N^0 + \lambda(N)(N - N^0), & \text{если } N \in s; \\ N, & \text{если } N \notin s. \end{cases} \tag{5.2}$$

Ввиду выпуклости $\ddot{U}$, если $N \notin U$, то и $\pi(N) \notin U$. Полагаем $\varphi_k'(\tau) =$ $= \pi(\varphi_k(\tau))$ $(\tau \in [0, 1]$, π определено согласно (5.2)). Путь φ_k' соединяет v и v', не пересекается с U, и число тех граней D размерности $m-k$, с относительной внутренностью которых он пересекается, на единицу меньше, чем у φ_k. По предположению индукции отсюда следует, что существует путь $\varphi_{k+1}: [0, 1] \to D_{m-k-1}$, для которого $\varphi_{k+1}(0) = v$, $\varphi_{k+1}(1) = v'$, $\varphi_{k+1}(\tau) \notin U$ $(\tau \in [0, 1])$. Во втором случае $(U \cap \mathrm{ri}\, s = \varnothing)$ найдем точки первого входа в s и последнего выхода из s пути φ_k: $\tau_1 = \min\{\tau | \varphi_k(\tau) \in s\}$, $\tau_2 = \max\{\tau | \varphi_k(\tau) \in s\}$. Обозначим $N^1 = \varphi_k(\tau_1)$, $N^2 = \varphi_k(\tau_2)$. Заменим φ_k на отрезке $[\tau_1, \tau_2]$ линейной функцией

$$\varphi_k'(\tau) = \begin{cases} N^1 + (\tau - \tau_1)(N^2 - N^1)/(\tau_2 - \tau_1), & \text{если } \tau_1 \leqslant \tau \leqslant \tau_2; \\ \varphi_k(\tau) \text{ — в противном случае.} \end{cases} \tag{5.3}$$

Путь φ_k' соединяет v и v', не пересекается с U, а число граней размерности $m-k$, с относительной внутренностью которых он пересекается, не больше, чем для φ_k. Если $m-k>1$, то существует точка $N^0 \in \mathrm{ri}\, s$, которая не лежит на кривой φ_k' — $\varphi_k'(\tau) \neq N^0$ $(\tau \in$ $\in [0, 1])$. Каждой точке $\varphi_k'(\tau)$ (5.3), принадлежащей $\mathrm{ri}\, s$, сопоставим ее центральную проекцию на $\mathrm{r}\,\partial s$ из центра N^0 (см. (5.2)). Получим путь $\varphi_k''(\tau) = \pi(\varphi_k'(\tau))$. Этот путь φ_k'' соединяет v и v', не пересекается с U, и число тех граней D размерности $m-k$, с относительной внутренностью которых он пересекается, на единицу меньше, чем у φ_k. По предположению индукции отсюда следует, что существует путь $\varphi_{k+1}:[0,\ 1]\to D_{m-k-1}$, для которого $\varphi_{k+1}(0)=v$, $\varphi_{k+1}(1)=v'$, $\varphi_{k+1}(\tau)\notin U$ $(\tau\in[0,\ 1])$.

Итак, если $m-k>1$ и если существует путь $\varphi_k:[0,\ 1]\to D_{m-k}$, соединяющий v с v', но не пересекающийся с U, то существует такой же путь и в D_{m-k-1} — отображение $\varphi_{k+1}:[0,\ 1]\to D_{m-k-1}$. Отсюда получаем: существует путь $\psi:[0,\ 1]\to D_1$, соединяющий v и v' и не пересекающийся с U. Из такого пути легко выбрать ломаную с требуемыми свойствами, выбрасывая все петли, т. е. такие отрезки $[\tau_0,\ \tau_1]$, что $\psi(\tau_0)=\psi(\tau_1)$. Выбрасывание означает замену ψ на

$$\psi'(\tau)=\begin{cases}\psi(\tau(1-(\tau_1-\tau_0))), & \text{если } \tau(1-(\tau_1-\tau_0))\leqslant\tau_0;\\ \psi(1-(1-\tau)(1-(\tau_1-\tau_0))) & \text{— в противном случае.}\end{cases}\tag{5.4}$$

Формула (5.4) для $\psi'(\tau)$ означает, что отрезок $[\tau_0,\ \tau_1)$ выброшен, а оставшиеся отрезки $[0,\ \tau_0]$ и $[\tau_1,\ 1]$ растянуты (коэффициент растяжения $1/(1-(\tau_1-\tau_0))$) и склеены. Лемма доказана.

Компонента линейной связности множества $D\backslash U$, содержащая точку N^0,— это совокупность всех точек N, для которых найдется непрерывный путь в $D\backslash U$, соединяющий N^0 с N. Любые две точки, лежащие в одной компоненте линейной связности $D\backslash U$, могут быть соединены непрерывными путями, лежащими в $D\backslash U$. Леммы 5.1, 5.2 позволяют найти число компонент линейной связности $D\backslash U$, если известно их число для $D_1\backslash U$, так как в каждой компоненте линейной связности $D\backslash U$ лежит хотя бы одна вершина D. По лемме 5.2, если две вершины D лежат в одной компоненте линейной связности $D\backslash U$, то они лежат в одной компоненте линейной связности $D_1\backslash U$. С другой стороны, если две вершины D принадлежат одной компоненте линейной связности $D_1\backslash U$, то они тем более лежат в одной компоненте линейной связности $D\backslash U$ — непрерывный путь в $D_1\backslash U$ является непрерывным путем в $D\backslash U$. Таким образом, справедливо следующее предложение.

Предложение 5.1. *Пусть $W_1,\ \ldots,\ W_q$ — компоненты линейной связности $D\backslash U$. Тогда $W_i\cap D_0\neq\varnothing$ для любого $i=1,\ \ldots,\ q$ и $W_i\cap D_1$ — компоненты линейной связности $D_1\backslash U$.*

Пересечение $D_1\cap U$ устроено весьма просто. Ввиду выпуклости U оно состоит из конечного числа отрезков (не обязательно замкнутых). Если d — ребро D и $d\cap U\neq\varnothing$, то на d существуют такие точки $x,\ y$, что $d\cap U$ есть один из отрезков $[x,\ y]$, $(x,\ y)$, $[x,\ y)$ или $(x,\ y]$. Можно еще более упростить изучение компонент линейной связности $D_1\backslash U$, если перейти от D_1 к графу $\tilde{D}$ (мы будем различать D_1 — подмножество R^m и граф $\tilde{D}$). Обозначим U_0 — совокупность вершин D, лежащих в U, U_1 — совокупность ребер D, пересекающихся с U. Рассмотрим граф, полученный из $\tilde{D}$ выбрасыванием всех вершин, входящих в U_0, и всех ребер, входящих в U_1. Обозначим его $\tilde{D}\backslash U$. Из леммы 5.2 получаем следующее предложение.

Предложение 5.2. *Пусть $W_1,\ \ldots,\ W_q$ — компоненты линейной связности $D\backslash U$. Тогда $W_i\cap \mathrm{D}_0$ для каждого $i=1,\ \ldots,\ q$ состоят* *из вершин D, принадлежащих одной связной компоненте графа $\tilde{D}\backslash U$.*

Таким образом, существует взаимно однозначное соответствие между связными компонентами графа $\tilde{D}\backslash U$ и компонентами линейной связности $D\backslash U$. Чтобы найти связные компоненты графа $\tilde{D}\backslash U$, достаточно выяснить, какие вершины D лежат в U и какие ребра D пересекаются с U, удалить соответствующие вершины и ребра из $\tilde{D}$ и найти связные компоненты полученного графа.

Пусть множество U задано системой неравенств и уравнений. Опишем компоненты линейной связности $D\backslash U$ неравенствами и уравнениями. Для этого построим сначала выпуклый многогранник $Q \subset U$, разделяющий D на такое же количество компонент линейной связности, что и U: каждой компоненте $D\backslash U$ должна соответствовать содержащая ее компонента $D\backslash Q$. Многогранник Q построим как выпуклую оболочку конечного множества точек. Для этого выберем на каждом пересекающемся с U ребре $d \subset D$ точку e_d, принадлежащую U. Обозначим множество таких точек Q_d. Положим

$$Q = \mathrm{co}\,(U_0 \cup Q_d). \tag{5.5}$$

Если одна из вершин, лежащих на ребре d, принадлежит U, то положим: e_d есть та вершина. В этом случае $e_d \in U_0$. Поскольку в (5.5) фигурирует объединение U_0 с Q_d, эту точку e_d можно не включать в Q_d. Окончательно определим Q_d так: рассмотрим совокупность ребер $d \subset D$, пересечение которых с U непусто, но не содержит вершин D; выберем на каждом таком ребре точку $e_d \in U$, $e_d \in \mathrm{ri}\, d$; совокупность таких точек обозначим Q_d.

Лемма 5.3. *Многогранник Q имеет своими вершинами все точки $U_0 \cup Q_d$. Число компонент линейной связности $D\backslash Q$ совпадает с их количеством в $D\backslash U$. Если $W_1, \ldots, W_q$ — компоненты линейной связности $D\backslash U$, а $V_1, \ldots, V_q$ — компоненты линейной связности $D\backslash Q$, то между ними можно установить взаимно однозначное соответствие таким образом, чтобы $W_i \subset V_i$ для всех $i = 1, \ldots, q$. При этом $W_i = V_i\backslash U$.*

Доказательство. Точка $e \in U_0 \cup Q_d$ не является вершиной Q тогда и только тогда, когда найдутся такие $e_1, \ldots, e_p \in U_0 \cup Q_d$ и $\lambda_1, \ldots, \lambda_p > 0$, что $e \neq e_i$ $(i = 1, \ldots, p)$ и

$$\sum_{i=1}^{p} \lambda_i = 1, \quad \sum_{i=1}^{p} \lambda_i e_i = e. \tag{5.6}$$

Поскольку все точки из U_0 являются вершинами D, а $U_0 \cup Q_d \subset D$, все точки из U_0 являются и вершинами Q: при $e \in U_0$ (5.6) возможно только в том случае, когда $e = e_i$ для какого-нибудь $i = 1, \ldots, p$. Для точки $e \neq e_i$ $(i = 1, \ldots, p)$, лежащей в относительной внутренности ребра $d \subset D$, (5.6) возможно только тогда, когда среди e_i $(i = 1, \ldots$ $\ldots, p)$ есть хотя бы две точки, принадлежащие тому же ребру d. Однако по построению в $U_0 \cup Q_d$ не может быть трех различных точек, принадлежащих одному ребру d. Итак, $U_0 \cup Q_d$ — множество вершин Q. Утверждения леммы о компонентах линейной связности $D\backslash Q$ и $D\backslash U$ следуют непосредственно из определения Q, предложения 5.2 и того, что $Q \subset U$ ввиду выпуклости U.

Опишем компоненты линейной связности $D\backslash Q$. После этого можно будет воспользоваться соотношением $W_i = V_i \backslash U$ из леммы 5.3 для описания компонент линейной связности $D\backslash U$.

Лемма 5.4. *Пусть $V_1, \ldots, V_q$ — компоненты линейной связности $D\backslash Q$. Тогда для любого $i = 1, \ldots, q$ множество $Q \cup V_i$ выпукло.*

Доказательство. Пусть $N^1, N^2 \in Q \cup V_i$. Докажем, что отрезок прямой, соединяющий N^1 с N^2, лежит в $Q \cup V_i$: $[N^1, N^2] \subset Q \cup V_i$. Возможны четыре случая:

а) $N^1, N^2 \in Q$, тогда и соединяющий их отрезок лежит в Q;

б) $N^1 \in Q$, $N^2 \notin Q$, ввиду выпуклости и замкнутости Q отрезок $[N^1, N^2]$ разбивается на два: $[N^1, N^3] \subset Q$ и $(N^3, N^2]$, $(N^3, N^2] \cap Q = \varnothing$. Если бы в $(N^3, N^2]$ существовала точка из V_j $(j = i)$, то это означало бы существование отрезка, соединяющего $N^2 \in V_i$ с какой-то точкой из V_j $(j \neq i)$ и не пересекающегося с Q. Но по определению V_j это невозможно, следовательно, $[N^1, N^2] \subset Q \cup V_i$;

в) $N^1, N^2 \notin Q$, и отрезок $[N^1, N^2]$ не пересекается с Q. Тогда $[N^1, N^2]$ не пересекается и с V_j при $j \neq i$ — иначе существовали бы отрезки, соединяющие $N^1, N^2 \in V_i$ с какими-нибудь точками из других компонент V_j $(j \neq i)$ и не пересекающие Q;

г) $N^1, N^2 \notin Q$, и отрезок $[N^1, N^2]$ пересекается с Q. Ввиду выпуклости и замкнутости Q отрезок $[N^1, N^2]$ разбивается на три отрезка $[N^1, N^3)$, $[N^3, N^4]$, $(N^4, N^2]$: $[N^1, N^3) \cap Q = \varnothing$, $[N^3, N^4] \subset Q$, $(N^4, N^2] \cap$ $\cap Q = \varnothing$. Как и выше, $[N^1, N^3) \subset V_i$, $(N^4, N^2] \subset V_i$, а $[N^3, N^4] \subset Q$, поэтому $[N^1, N^2] \subset Q \cup V_i$.

Лемма 5.4 допускает следующее обобщение.

Предложение 5.3. *Пусть U — произвольное выпуклое множество, $W_1, \ldots, W_q$ — компоненты линейной связности $D\backslash U$, I — произвольное подмножество $\{1, \ldots, q\}$. Тогда множество $U \cap \left(\bigcup_{i \in I} W_i\right)$ выпукло.*

Доказательство, по сути, совпадает с доказательством леммы 5.4.

Используем лемму 5.4 для описания $Q \cup V_i$ как выпуклой оболочки конечного множества.

Лемма 5.5. *Множество $Q \cup V_i$ есть выпуклый многогранник*:

$$Q \cup V_i = \mathrm{co}\,(U_0 \cup Q_d \cup (V_i \cap D_0)). \qquad (5.7)$$

Доказательство. Обозначим многогранник, стоящий в правой части (5.7), через R_i. Очевидно включение $R_i \subset Q \cup V_i$, поскольку R_i есть выпуклая оболочка элементов $Q \cup V_i$, а по лемме 5.4 $Q \cup V_i$ выпукло. Для доказательства обратного включения рассмотрим компоненты линейной связности множества $D\backslash R_i$. Ввиду включений $R_i \subset Q \cup V_i$, $Q \subset R_i$ таковыми компонентами являются, в частности, V_j $(j \neq i)$. Если бы $V_i \backslash R_i$ было непусто, то оно содержало бы какие-нибудь вершины D — по лемме 5.1 каждая компонента линейной связности $D\backslash R_i$ содержит хотя бы одну вершину D. Однако по определению (5.7) все лежащие в V_i вершины D принадлежат R. Следовательно, $V_i \backslash R_i = \varnothing$. Лемма доказана.

Итак, $Q \cup V_i$ есть выпуклая оболочка конечного множества точек, в которое входят все вершины Q, а также лежащие в V_i вершины D.

Лемма 5.5 допускает обобщение следующего вида.

Предложение 5.4. *Пусть I — произвольное подмножество $\{1, \ldots, q\}$. Тогда*

$$Q \cup \left(\bigcup_{i \in I} V_i\right) = \mathrm{co}\left(U_0 \cup Q_d \cup \left(D_0 \cap \left(\bigcup_{i \in I} V_i\right)\right)\right). \tag{5.8}$$

Правая часть (5.8) — выпуклый многогранник, являющийся выпуклой оболочкой конечного множества, в которое входят все вершины Q, а также все лежащие в V_i при $i \in I$ вершины D.

По лемме 5.3 каждая компонента линейной связности $W_i \subset D \backslash U$ имеет вид $V_i \backslash U$, где V_i — компонента $D \backslash Q$. Поскольку $Q \subset U$, можно записать

$$W_i = (Q \cup V_i) \backslash U. \tag{5.9}$$

Если U задано уравнениями и неравенствами, то формулы (5.7) и (5.9) дают возможность задать W_i с помощью уравнений и неравенств. Действительно, выпуклая оболочка конечного множества (5.7) задается системой линейных неравенств, хотя поиск этой системы по данному множеству может быть весьма громоздкой процедурой. Разность множеств (5.9), заданных уравнениями и неравенствами, также может быть легко задана уравнениями и неравенствами.

Итак, чтобы описать компоненты линейной связности $D \backslash U$, надо:

1. Найти все вершины D, входящие в U — множество U_0.
2. Найти все ребра D, пересекающиеся с U — множество U_1.
3. Удалить из графа $\tilde{D}$ многогранника D все вершины, входящие в U_0, и все ребра, входящие в U_1,— построить граф $\tilde{D} \backslash U$.
4. Найти все связные компоненты графа $\tilde{D} \backslash U$. Обозначим множества вершин, входящих в эти связные компоненты, $V_{01}, \ldots, V_{0q}$ (будем одинаково обозначать множества вершин графа и множества соответствующих вершин многогранника, это не приведет к путанице).
5. Сопоставим ребрам $d \subset D$, входящим в U_1, но не содержащим вершин из U_0, точки $e_d \in d \cap U$. Множество точек e_d — по одной для каждого ребра d — обозначим Q_d.
6. Для каждого $i = 1, \ldots, q$ построить (описать неравенствами) многогранник

$$R_i = \mathrm{co}\,(U_0 \cup Q_d \cup V_{0i}). \tag{5.10}$$

7. Компонент линейной связности у $D \backslash U$ ровно q, каждая из них может быть задана, как

$$W_i = R_i \backslash U. \tag{5.11}$$

5.2. ПРОСТРАНСТВО СВЯЗНЫХ КОМПОНЕНТ ПОВЕРХНОСТЕЙ УРОВНЯ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ ФУНКЦИЙ ЛЯПУНОВА — ТЕРМОДИНАМИЧЕСКОЕ ДЕРЕВО

Рассмотрим закрытую гомогенную химическую систему при фиксированных условиях. В понятие «фиксированные условия» мы будем включать: для изобарических изотермических условий — заданные давление P и температуру T, для изохорических изотермических — заданные объем V и температуру T, для теплоизолированных изохорических процессов — заданные V и внутреннюю энергию U, для теплоизолированных изобарических — P и энтальпию H и т. д. Зафиксируем также некоторое значение балансов (линейных законов сохранения) $b = b^0$. Многогранник $D(b^0)$ далее обозначаем просто D. По предположению при данных условиях в относительной внутренности D существует единственная точка равновесия N^*, являющаяся точкой минимума термодинамической функции Ляпунова G. Функция G определена в D и выпукла в D. Она ограничена снизу значением $g^* = G(N^*)$, а сверху может быть и не ограничена. Более того, она может быть не всюду конечна в D — для неизотермических систем могут существовать точки $N \in D$, в которых $G(N) = \infty$. Это означает, что при данных условиях состав N не может быть получен. Например, для изолированных систем при данном значении внутренней энергии U обращение $G(N)$ в ∞ означает: при этом U и положительной температуре состав N реализоваться не может.

Напомним основные свойства G:

1) G — замкнутая функция, это означает, что множество точек $\{(N, g) | g \geqslant G(N)\}$ замкнуто в множестве пар (N, x) $(N \in D,\ x \in (-\infty, \infty))$ — в $D \times (-\infty, \infty)$;

2) G — строго выпуклая в D функция, т. е. множество пар $\{(N, g) | g \geqslant G(N)\}$ выпукло и ни для какого конечного g не существует в D отрезка прямой, на котором функция G постоянна и равна g;

3) G непрерывна на множестве $\operatorname{dom} G = \{N \in D | G(N) < \infty\}$, и $\operatorname{dom} G$ открыто в D, отсюда, в частности, следует, что множества $S_g = \{N \in D | G(N) = g\}$ $(g^* \leqslant g \leqslant \infty)$ замкнуты, а множества $U_g = \{N \in D | G(N) < g\}$ $(g^* \leqslant g \leqslant \infty)$ открыты в D.

Основные обозначения:

$\operatorname{dom} G = \{N \in D | G(N) < \infty\}$ — множество тех точек $N \in D$, на которых G принимает конечные значения, предполагается, что $\operatorname{dom} G$ — открытое в D множество;

$S_g = \{N \in D | G(N) = g\}$ $(g^* \leqslant g \leqslant \infty)$ — множество тех точек $N \in D$, в которых $G(N) = g$, множества S_g замкнуты;

$U_g = \{N \in D | G(N) < g\}$ $(g^* \leqslant g \leqslant \infty)$ — множество тех точек $N \in D$, в которых $G(N) < g$, множества U_g открыты в D;

$N^1 \geqslant N^2$, если $N^1 N^2 \in D$ и существует непрерывный путь в D, для которого $\varphi(0) = N^1$, $\varphi(1) = N^2$ и $G(\varphi(\tau))$ — монотонная невозрастающая функция $\tau \in [0, 1]$;

$N^1 \sim N^2$, если $N^1, N^2 \in D$, $N^1 \geqslant N^2$ и $N^2 \geqslant N^1$;

$V(N) = \{N' \in D | N \geqslant N'\}$ — множество тех точек $N' \in D$, для которых $N \geqslant N'$.

Напомним, что множество называется *открытым* в D, если оно есть пересечение открытого в евклидовом пространстве E множества с D. В частности, D — открытое в D множество.

Отображение $\varphi : [0, 1] \to D$, для которого $G(\varphi(\tau))$ — невозрастающая функция, есть в точности термодинамически допустимый путь.

(см. гл. 2). По определению $N^1 \geqslant N^2$ тогда и только тогда, когда существует термодинамически допустимый путь, идущий от N^1 к N^2, поэтому основная задача — исследование для данного начального состава N множества $V(N)$, элементы которого могут быть получены из N при движении по термодинамически допустимым путям. Изучим сначала пространство классов эквивалентности $D/\sim = Y$. Это важно, поскольку для любых N^1, N^2, N^3, если $N^1 \geqslant N^2$, $N^2 \geqslant N^3$, то и $N^1 \geqslant N^3$ — отношение $\geqslant$ транзитивно, в частности, $V(N) = V(N')$ тогда и только тогда, когда $N \sim N'$. Транзитивность $\geqslant$ вытекает непосредственно из определения, так же как и следующая лемма.

Лемма 5.6. *Пусть x, $y \in D$. Соотношение $x \sim y$ равносильно тому, что x и y принадлежат одной компоненте линейной связности множества S_g для некоторого g.*

Естественно возникает идея — пронумеровать компоненты линейной связности поверхностей S_g компонентами $D \backslash U_g$ — те, в свою очередь, можно пронумеровать множествами вершин D (см. предыдущий раздел). Это осуществимо, поскольку G — замкнутая функция, непрерывная на $\operatorname{dom} G$.

Лемма 5.7. *Пусть $g^* < g < \infty$. Тогда между компонентами линейной связности S_g и $D \backslash U_g$ можно установить взаимно однозначное соответствие таким образом, чтобы компонента S_g являлась границей в D соответствующей компоненты $D \backslash U_g$.*

Доказательство. Определим отображение $f_g : D \backslash U_g \to S_g$: $f_g(N)$ — точка на отрезке $[N^*, N]$, для которой $G(f_g(N)) = g$. Ввиду строгой выпуклости G в D, замкнутости G и открытости в D множества $\operatorname{dom} G$ функция f_g однозначно определена и непрерывна. Ее неподвижные точки — элементы S_g. Образ каждой компоненты линейной связности $D \backslash U_g$ линейно связен: образ непрерывного пути — непрерывный путь. Прообраз каждой компоненты линейной связности S_g также линейно связен. Действительно, пусть $f_g(N^1)$, $f_g(N^2)$ принадлежат одной компоненте линейной связности S_g. Соединим N^1 и N^2 непрерывным путем в $D \backslash U_g$. Этот путь может быть составлен из движения по прямой от N^1 к $f_g(N^1)$, движения по S_g от $f_g(N^1)$ к $f(N^2)$ и движения по прямой от $f_g(N^2)$ к N^2. Ввиду замкнутости G, если $G(N) > g$, то у N существует такая окрестность в D, для всех точек которой $G > g$. Поэтому граница $D \backslash U_g$ в D совпадает с S_g ($g < \infty$). Лемма доказана.

Лемма 5.8. $S_\infty = D \backslash U_\infty$ $(U_\infty = \operatorname{dom} G)$.

Эта лемма — прямое следствие определений.

Для каждого $N \in D$ обозначим $\overline{N}$ класс эквивалентности по отношению $\sim$, содержащий N. На множестве классов эквивалентности $D/\sim$ определим частичный порядок $\geqslant : \overline{N}^1 \geqslant \overline{N}^2$, если $N \geqslant N'$ для каждых $N \in \overline{N}^1$, $N' \in \overline{N}^2$ или, что эквивалентно, если существуют $N \in \overline{N}^1$, $N' \in \overline{N}^2$, для которых $N \geqslant N'$. Обозначим $W(N)$ компоненту линейной связности $D \backslash U_g$ $(g = G(N))$, соответствующую $\overline{N} : f_g(W(N)) = \overline{N}$.

Лемма 5.9. $W(N) = \{N' \in D \mid N' \geqslant N\}$.

Доказательство. Если $N' \in W(N)$, то термодинамически допустимый путь, соединяющий N' с N, можно построить так: сначала пройдем по отрезку прямой $[N', f_g(N')]$, а потом, воспользовавшись линейной связностью $\bar{N} = f_g(W(N))$,— по непрерывному пути в $\bar{N}$, соединяющему $f_g(N')$ и N. Предположим теперь, что $N' \geqslant N$. Если N' принадлежит отличной от $W(N)$ компоненте линейной связности $D \backslash U_g$ $(g = G(N))$, то на любом непрерывном пути, соединяющем N' с N в D, найдутся точки U_g, в которых значение G меньше $g = G(N)$, такие пути не являются термодинамически допустимыми. Невозможно также, чтобы N' принадлежало U_g $(G(N') \geqslant G(N))$. Поэтому $N' \in W(N)$. Лемма доказана.

Отношение $\sim$ есть отношение термодинамической эквивалентности. Действительно, $N \sim N'$ тогда и только тогда, когда возможны непрерывные переходы от N к N' и обратно без изменения термодинамической функции Ляпунова. При этом для любого состава N^0, если термодинамически допустим переход от N^0 к N, допустим и переход от N^0 к N'. Обратно, если допустим переход от N к N^0, то допустим и переход от N' к N^0. «Склеим» между собой термодинамически эквивалентные точки — перейдем от многомерного фазового пространства D к одномерному пространству $D/\sim = Y$ классов термодинамической эквивалентности. Будем называть Y *термодинамическим деревом*. Ниже будет показано, как можно изобразить Y в виде дерева на плоскости — ввиду наличия точек ветвления изобразить Y на прямой не удается, за исключением случая $\dim D = 1$. Введем в Y координаты. Для этого сопоставим каждой точке $N \in D$ пару (число, конечное множество вершин D): $N \to (G(N), W(N) \cap D_0)$. Согласно леммам 5.7, 5.8 и предложению 5.2 термодинамически эквивалентным векторам состава N сопоставляются одинаковые пары, а неэквивалентным — разные, поэтому указанное соответствие взаимно однозначно сопоставляет каждому классу термодинамической эквивалентности $\bar{N}$ пару (значение G, конечное множество вершин D). Множество вершин D, входящее в эту пару, есть в точности совокупность тех вершин $v \in D_0$, для которых $v \geqslant N$. По предложению 5.2 эти вершины соответствуют вершинам одной связной компоненты графа $\tilde{D} \backslash U_g$ $(g = G(N))$. Согласно лемме 5.9 $\bar{N}^1 \geqslant \bar{N}^2$ тогда и только тогда, когда $G(N^1) \geqslant G(N^2)$, $W(N^1) \cap D_0 \subseteq W(N^2) \cap D_0$. Поэтому на множестве пар (g, M) (g — число, M — множество вершин связной компоненты графа $\tilde{D} \backslash U_g$) существует естественный порядок: $(g, M) \geqslant (g', M')$, если $g \geqslant g'$, $M \subseteq M'$. По определению $\bar{N} \geqslant \bar{N}'$ тогда и только тогда, когда отношением $\geqslant$ связаны их координаты: $(g, M) \geqslant (g', M')$. Опишем пространство P как множество всех координатных пар (g, M) с отношением $\geqslant$. Для этого укажем при любом g $(g^* \leqslant g \leqslant \infty)$ совокупность всех таких M, что (g, M) — координаты точки из Y. Рассмотрим граф $\tilde{D}$ многогранника D. Будем одинаково обозначать вершины и ребра D и соответствующие вершины и ребра $\tilde{D}$. Совокупность всех таких M, что (g, M) — координаты точек из Y, совпадает с совокупностью множеств вершин $\tilde{D}$, принадлежащих связным компонентам графа $\tilde{D} \backslash U_g$: (g, M) тогда и только тогда соответствует точке $\bar{N} \in Y$, когда M — множество вершин одной из связных компонент графа $\tilde{D} \backslash U_g$, $M \neq \varnothing$. Для данного g следует построить граф $\tilde{D} \backslash U_g$, удалив из графа $\tilde{D}$ все вершины v, в которых $G(v) <$

$< g$, и все ребра d, для которых $\min\limits_{N \in d} G(N) < g$. Найдя связные компоненты полученного графа, мы тем самым найдем все M, для которых (g, M) соответствует некоторому элементу Y.

Заметим, что граф $\tilde{D} \setminus U_g$ один и тот же для целого отрезка значений g. Действительно, пусть $g < g'$, ни для какой вершины v не выполняется неравенство $g \leqslant G(v) < g'$, и ни для какого ребра d не выполняется неравенство $g \leqslant \min\limits_{N \in d} G(N) < g'$. Тогда графы $\tilde{D} \setminus U_g$ и $\tilde{D} \setminus U_{g'}$ совпадают. Совпадают при этом и совокупности множеств M, для которых (g, M), (g', M) соответствуют элементам Y, поэтому если необходимо описать все пары (g, M), соответствующие точкам Y, можно поступить следующим образом.

1. Вычислить $G(v)$ для всех вершин $v \in D_0$.
2. Вычислить $\varepsilon_d = \min\limits_{N \in d} G(N)$ для всех ребер $d \subset D_1$.
3. Упорядочить множество чисел $\{G(v) | v \in D_0\} \cup \{\varepsilon_d | d \subset D_1\}$ в соответствии с порядком их следования на прямой. Обозначим это упорядоченное множество $g_1 < g_2 < \ldots < g_l$.
4. Положим $g_0 = g^*$. Найти для каждого g_i $(i = 1, \ldots, l)$ граф $D \setminus U_{g_i}$ и его связные компоненты. Обозначим множества вершин этих связных компонент через $M_i^1, \ldots, M_i^r$.

Если $g \in (g_{i-1}, g_i]$ $(g_{i-1} < g \leqslant g_i)$, то совокупность всех M, для которых (g, M) соответствует элементу Y, есть $M_i^1, \ldots, M_i^r$.

Удобно описывать связные компоненты $D \setminus U_g$ с помощью некоторых числовых функций на графе $\tilde{D}$, хотя вычислительно это не самый короткий путь. Сопоставим каждому ребру d число $\varepsilon_d = \min\limits_{N \in d} G(N)$. Каждой цепи P из ребер $\tilde{D}$ сопоставим число ε_p — минимум ε_d по всем встречающимся в P ребрам. Паре различных вершин v^1, v^2 сопоставим $\varepsilon(v^1, v^2)$ — максимум ε_p по всем соединяющим v^1 и v^2 цепям (достаточно рассматривать простые цепи). Функция $\varepsilon(v^1, v^2)$ обладает следующими свойствами:

1) $\varepsilon(v^1, v^2) = \varepsilon(v^2, v^1)$;

2) для любых трех различных вершин v^1, v^2, v^3

$$\varepsilon(v^1, v^3) \geqslant min\{\varepsilon(v^1, v^2), \varepsilon(v^2, v^3)\}; \tag{5.12}$$

3) $\varepsilon(v^1, v^2) \leqslant \min\{G(v^1), G(v^2)\}$.

Строгое неравенство в 3) имеет место в том случае, когда $G(v^1) < \infty$ или $G(v^2) < \infty$.

Для каждого g рассмотрим множество вершин $D_{0g} = \{v \in D_0 | G(v) \geqslant g\}$. На этом множестве можно ввести отношение $v^1 \approx_g v^2$, если $\varepsilon(v^1, v^2) \geqslant g$, либо $v^1 = v^2$. В силу (5.12) это — отношение эквивалентности (не путать с отношением $\sim$ термодинамической эквивалентности). Классы эквивалентности в D_{0g} по отношению $\approx_g$ есть в точности множества вершин, составляющие связные компоненты $\tilde{D} \setminus U_g$.

Можно представить Y в виде дерева на плоскости. Покажем, как это сделать. Предположим сначала, что G — ограниченная в D

функция. Точку $(g, M) \in Y$ будем изображать точкой на плоскости, откладывая g по вертикальной оси. Проекция (g, M) на горизонтальную ось выбирается из соображений удобства — чтобы избежать самопересечений. Построим сначала вершины Y. Они бывают трех типов: корень, концевые вершины и точки ветвления. *Корень* — точка (g^*, D_0). Пара (g, M) называется *концевой вершиной*, если M состоит из одной вершины, а g — значение G в этой вершине: $M = \{v\}$, $g = G(v)$. Пара (g, M) называется *точкой ветвления*, если M содержит такие две вершины v^1, v^2, что $g = \varepsilon(v^1, v^2)$. Вершины (g', M') и (g'', M'') соединяются ребром (на диаграмме — отрезком прямой), если $(g'', M'') \geqslant (g', M')$ и ни для какой третьей вершины дерева (g^0, M^0) не выполняется $(g'', M'') \geqslant (g^0, M^0) \geqslant (g', M')$. Если вершины (g', M') и (g'', M'') $(g'' > g')$ соединены ребром, то точкам этого ребра соответствуют пары (g, M''), $g'' \geqslant g \geqslant g'$.

Если G принимает в некоторых точках D бесконечные значения, то кроме описанных собственных концевых вершин (g, M), $g^* < < g < \infty$, появляются несобственные концевые вершины (∞, M), где M — классы эквивалентности в $D_{0\infty}$ по отношению $\approx_\infty$: $v^1 \approx_\infty v^1$, если $\varepsilon(v^1, v^2) = \infty$, либо $v^1 = v^2$. При этом удобно в качестве вертикальной координаты откладывать не g, а, например, $x = (g - g^*)/ /(1 + g - g^*)$ — чтобы была возможность изобразить точки с $g = \infty$ $(x = 1)$. Вместо этой функции x, можно выбрать, например, $x = = (2/\pi) \operatorname{arctg}(g - g^*)$ или любую другую монотонную функцию от $g - g^*$, имеющую конечный предел при $g - g^* \to \infty$. В остальном построение термодинамического дерева для неограниченных функций G совпадает с описанным построением для ограниченных G. Примеры диаграмм см. ниже в разд. 5.5.

Если $(g, M) \geqslant (g', M')$, то можно пройти по дереву «сверху вниз» и из точки (g, M) в точку (g', M'). Таким образом, отношение $\geqslant$ приобретает наглядный геометрический смысл.

Итак, если отождествить между собой термодинамически эквивалентные точки, то фазовое пространство — балансный многогранник — переходит в термодинамическое дерево — одномерный континуум-дендрит с конечным числом точек ветвления. Это дерево полностью характеризует систему термодинамически допустимых путей в D.

5.3. ОБРАЗ СОСТАВА НА ТЕРМОДИНАМИЧЕСКОМ ДЕРЕВЕ

В предыдущем разделе описано, как строить термодинамическое дерево — пространство классов термодинамической эквивалентности составов в балансном многограннике $D(b)$ при заданных условиях. Пусть это дерево построено. Если (g, M) и (g', M') — две точки дерева, то легко их сравнить — решить вопрос: достижима ли точка (g', M') из точки (g, M). Действительно, $(g, M) \geqslant (g', M')$ тогда и только тогда, когда $g \geqslant g'$ и $M \subseteq M'$. Составы N и N' также легко сравнить, если известны координаты из образов в Y. Первая координата, g, ищется сразу: $g = G(N)$. Покажем, как найти вторую координату, M. Пусть $g = G(N) < \infty$ и вершины D, для которых $G(v) \geqslant g$, разбиты на классы эквивалентности $M_1, \ldots, M_l$ по отношению $\approx_g$: $v^1 \sim_g v^2$, если $\varepsilon(v^1, v^2) \geqslant g$. Образ N в Y есть (g, M_i) для некоторого $i = 1, \ldots, l$. Чтобы найти вторую координату — M_i, достаточно найти хотя бы одну вершину $v \in M_i$. Поскольку множества M_i, M_j при различных i, j не пересекаются, можно, найдя один элемент $v \in M_i$, отыскать то из множеств $M_1, \ldots, M_l$, которому v принадлежит,— это и будет M_i.

Итак, чтобы найти вторую координату образа состава N на термодинамическом дереве, достаточно отыскать одну вершину $v \in D_0$, для которой $v \geqslant N$. Чтобы найти ее, воспользуемся леммой 5.1: существует такая вершина $v \in D_0$, что на отрезке $[v, N]$ значения G не меньше, чем $G(N)$. Функция G выпукла, и $G(N)$ — минимум G на отрезке прямой $[v, N]$, поэтому на отрезке $[v, N]$ функция G монотонно убывает от v к N. Этот отрезок, проходимый по направлению от v к N $(\varphi(\tau) = \tau N + (1-\tau)v)$ — термодинамически допустимый путь, и $v \geqslant N$. Достаточно найти такую вершину $v \in D_0$, что на отрезке $[v, N]$ выполнено неравенство $G \geqslant G(N)$. Это можно было бы сделать, рассмотрев все отрезки $[v, N]$ $(v \in D_0)$ и найдя минимум G на каждом из них. Однако можно поступить и проще. Пусть N — внутренняя точка $D(b)$. Проведем через N опорную гиперплоскость к выпуклому множеству, задаваемому неравенством $G \leqslant G(N)$. Эта гиперплоскость разрезает D на два выпуклых множества, в каждом из них есть вершины D, а в одном из них $G \geqslant G(N)$ — выберем из него произвольную вершину v. На отрезке $[v, N]$ будет $G \geqslant G(N)$. Следовательно, $v \geqslant N$ — искомая вершина (одна из возможных). Если N — внутренняя точка некоторой грани $s \subset D(b)$, то поступим так же, с той только разницей, что гиперплоскость будем проводить не в E, а в $E(I_s)$, где I_s — индекс грани, либо, что приведет к тому же результату, в линейном подмногообразии в $E(I_s)$, задаваемом уравнениями $b(N) = b$. При этом найдем вершину $v \in s$, $v \geqslant N$.

Градиент функции G во внутренней точке N (все $N_i > 0$) есть вектор безразмерных псевдопотенциалов: $\partial G/\partial N_i = m^i$. Гиперплоскость, опорная к множеству $G \leqslant G(N)$ в точке N, задается уравнением

$$\sum_{i=1}^{n} \left(N_i - N_i'\right) m^i (N) = 0. \tag{5.13}$$

Искомая вершина v $(v \geqslant N)$ находится с помощью неравенства

$$\sum_{i=1}^{n} (v_i - N_i)\, m^i (N) \geqslant 0. \tag{5.14}$$

Подчеркнем, что, возможно, не все вершины $v \in D_0(b)$, для которых $v \geqslant N$, удовлетворяют (5.14). Однако, как уже говорилось, достаточно найти одну — множество остальных отыщется как содержащий ее класс эквивалентности вершин графа $D \backslash U_g$ по отношению $\approx_g$ $(g = G(N) < \infty)$.

На грани s неравенство (5.14) заменяется на

$$\sum_{i \notin I_s} (v_i - N_i)\, m^i (N) \geqslant 0 \quad (v \in s). \tag{5.15}$$

Итак, воспользовавшись неравенствами (5.14) для внутренних точек D или (5.15) для внутренних точек грани $s \subset D$, находим вершину $v \geqslant N$. Зная ее, находим содержащий v класс эквивалентности вершин M графа $\tilde{D} \backslash U_g$ по отношению $v^1 \approx_g v^2$, если $\varepsilon(v^1, v^2) \geqslant g$ $(g = G(N))$. Координаты образа N на термодинамическом дереве Y суть (g, M).

Существует несколько исключительных точек, для которых координаты (g, M) не могут быть найдены с помощью (5.14), (5.15): для таких точек вектор $m^i(N)$ $(i \notin I_s)$ ортогонален всем разностям $v_i - N_i$ $(i \notin I_s,\ v \in s)$. Во внутренности D такая точка одна — точка равновесия N^*. Для нее

$$\sum_{i=1}^{n} (v_i - N_i)\, m^i(N) = 0, \tag{5.16}$$

какова бы ни была вершина $v \in D_0$. Но поскольку N^* — точка минимума G в D, движение по отрезку прямой $[v, N^*]$ от произвольной вершины $v \in D_0$ к N^* — термодинамически допустимый путь, и $v \geqslant N^*$, поэтому координаты (g, M) образа точки N^* на термодинамическом дереве Y есть (g^*, D_0) (здесь D_0 — совокупность всех вершин графа $\tilde{D}$; мы не делаем различия в обозначениях между вершинами D и вершинами $\tilde{D}$). Аналогично для грани $s \subset D$ неравенство (5.15) не имеет решений, если N — точка минимума G на грани s. Обозначим: $g_s^* = \min\limits_{N \in S} G(N)$ — минимальное значение G на грани $s \subset D$; N_s^* — точка s, в которой $G(N_s^*) = g_s^*$. В частности, если s — вершина D, $s = \{v\}$, то $g_s^* = G(v)$, $N_s^* = v$. Каждая грань $s \subset D$ может рассматриваться как балансный многогранник для меньшего списка веществ. Тогда N_s^* — соответствующая точка равновесия.

Если в (5.15) $N = N_s^*$, то

$$\sum_{i \notin I_s} \left(v_i - N_{is}^*\right) m^i(N_s) = 0 \tag{5.17}$$

для любой вершины $v \in s$. Но так же, как и для N^*, любая вершина $v \in s$ может быть связана с N_s^* термодинамически допустимым путем: $v \geqslant N_s^*$ $(v \in s)$, поэтому координаты (g, M) образа точки N_s^* на термодинамическом дереве Y определяются так: $g = g_s^*$, M — класс эквивалентности вершин графа $\tilde{D} \backslash U_g$ по отношению $\approx_g$, содержащий хотя бы одну вершину грани s, а следовательно, и все вершины s.

5.4. ПРЕДЕЛЫ ИЗМЕНЕНИЯ СОСТАВА В ОДНОМ КЛАССЕ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКОЙ ЭКВИВАЛЕНТНОСТИ

Мы описали, как найти точку (g, M) на термодинамическом дереве, если известен состав N. Не менее важна и интересна задача: в каких пределах изменяется N_i, если известна соответствующая N точка (g, M) — задан тем самым класс термодинамической эквивалентности.

Поставим задачу несколько шире. Пусть задан многогранник $D(b)$ и точка на соответствующем термодинамическом дереве — (g, M), $g < \infty$. Надо найти максимум и минимум некоторой гладкой функции $h(N)$, если вектор N пробегает класс термодинамической эквивалентности с координатами на $Y\ (g, M)$.

Ниже существенно используется гладкость функций G в $\mathrm{ri}\, D$ и ее строгая выпуклость во втором приближении. Решим сначала поставленную задачу, не предполагая, что $\partial G/\partial N_i \to -\infty$ при $N_i \to 0$ ($N \in D(b)$, $G(N) \leqslant g < \infty$). Впоследствии это условие будет использовано для упрощения решения.

Лемма 5.10. *Пусть $g^* \leqslant g < \infty$. Тогда поверхность S_g локально линейно связна, т. е. у каждой точки $N \in S_g$ в любой ее окрестности существует линейно связная окрестность в S_g.*

Не будем здесь доказывать эту лемму. Заметим только, что она — простое следствие наших предположений и является хорошим упражнением по общей топологии.

Из леммы 5.10 сразу следует, что точки максимума и минимума непрерывной функции h в классе термодинамической эквивалентности с координатами (g, M) суть точки, по крайней мере, локального максимума или минимума h на S_g. Поэтому поступим так: найдем точки локального экстремума h на S_g, потом определим, какая из них попадет в класс термодинамической эквивалентности с координатами (g, M) и, наконец, найдем среди них точки глобального максимума и минимума h в этом классе термодинамической эквивалентности.

Пусть $g > g^*$. Для внутренней точки $N \in \mathrm{ri}\, D$ необходимое условие того, что N — точка локального экстремума h на S_g, есть существование таких чисел $\lambda_0, \lambda_1, \ldots, \lambda_k$ (неопределенных множителей), что

$$\begin{gathered} G(N) = g, \quad \sum_{j=1}^{n} a_i^j N_j = b_i \quad (i = 1, \ldots, k), \\ \partial h/\partial N_i = \lambda_0 \partial G/\partial N_i + \sum_{j=1}^{k} \lambda_j a_j^i \quad (i = 1, \ldots, n). \end{gathered} \tag{5.18}$$

Если $g = g^*$, то $G(N) = g$ для единственной точки $N = N^*$. Ясно, что эта точка есть точка экстремума h на S_g.

Если N лежит в относительной внутренности какой-либо грани s ($N \in \mathrm{ri}\, s$) и N — точка локального экстремума h на S_g, то N — точка локального экстремума h на $\mathrm{ri}\, s \cap S_g$.

Пусть $g \neq g_s^*$. Для точки $N \in \mathrm{ri}\, s$ необходимые условия того, что N — точка локального экстремума h на $\mathrm{ri}\, s \cap S_g$, есть существование таких $\lambda_0, \lambda_1, \ldots, \lambda_k$ — неопределенных множителей, что

$$\begin{gathered} G(N) = g, \quad \sum_{j=1}^{n} a_i^j N_j = b_i \quad (i = 1, \ldots, k), \\ \frac{\partial h}{\partial N_i} = \lambda_0 \frac{\partial G}{\partial N_i} + \sum_{j=1}^{k} \lambda_j a_j^i \quad (i \notin I_s), \quad N_i = 0 \quad (i \in I_s). \end{gathered} \tag{5.19}$$

Если $g = g_s^*$, то $G(N) = g$ для единственной точки N_s^* в $\mathrm{ri}\, s$. Ясно, что эта точка есть точка локального экстремума h на $S_g \cap \mathrm{ri}\, s$.

Как система (5.18), так и система (5.19) содержат $n+k+1$ уравнение для определения $n+k+1$ неизвестного ($n - N_i$, $k+1 - \lambda_0, \ldots, \lambda_k$). «Как правило», такие системы имеют дискретное множество решений. Например, для линейных функций h система (5.18) и любая из систем (5.19) имеют не более двух решений каждая, если $h \not\equiv \mathrm{const}$ на D или s соответственно.

Пусть системы (5.18), (5.19) имеют конечное число решений. Обозначим эти решения $N^1, \ldots, N^q$. В предыдущем разделе было показано, как для точки $N \in D(b)$ найти координаты ее класса термодинамической эквивалентности на термодинамическом дереве. Найдем эти координаты $(g(N), M(N))$ для всех точек $N^1, \ldots, N^q$. Пусть $N^1, \ldots, N^r$ — те из $N^1, \ldots, N^q$, для которых $M(N) = M$, т. е. решения систем (5.18), (5.19), принадлежащие заданному вначале классу термодинамической эквивалентности. Тогда

$$\begin{gathered} \max\{h(N) \mid \bar{N} = (g, M)\} = \max\{h(N_i) \mid i = 1, \ldots, r\}, \\ \min\{h(N) \mid \bar{N} = (g, M)\} = \min\{h(N_i) \mid i = 1, \ldots, r\}. \end{gathered} \tag{5.20}$$

В описанной процедуре поиска максимума и минимума h на классе термодинамической эквивалентности есть одно удручающее обстоятельство: необходимо исследовать систему (5.19) для всех граней $s \in D(b)$. В некоторых случаях эту процедуру можно упростить, используя то, что $\partial G/\partial N_i \to -\infty$ при $N_i \to 0$, $G(N) \leqslant g < \infty$.

Пусть h — линейная функция: $h(N) = \sum\limits_i h_i N_i$.

Лемма 5.11. *Пусть s — грань многогранника $D(b)$, $\dim s > 1$, N^0 — точка локального минимума линейной функции h на S_g, $N^0 \in \mathrm{ri}\, s$. Тогда $h(N) = \mathrm{const}$ на s.*

Доказательство. Если $N^0 = N_s^*$, то гиперплоскость, задаваемая уравнением $h(N) = h(N^0)$, должна содержать s. Действительно, пусть вектор $N^0 + x$ принадлежит s. Сопоставим ему элемент $y \in S_g$, спроектировав $N^0 + x$ на S_g из центра N^*. Если x достаточно близко к 0, то $h(y) \leqslant h(N^0)$, поскольку N^0 — точка локального максимума h на S_g, центральная проекция s на S_g — непрерывное отображение и $N^0 = N_s^*$ — его неподвижная точка. Обозначим $y(\varepsilon)$ проекцию $N^0 + \varepsilon x$ на S_g из центра N^* $(0 < \varepsilon \leqslant 1)$. Согласно предположению о свойствах $\partial G/\partial N_i$ на границе $D(b)$, при $\varepsilon \to 0$ будет $(y(\varepsilon) - N^0)/\varepsilon \to x$. Поэтому $h(N^0 + x) \leqslant h(N^0)$. Точка N^0 — внутренняя точка s, следовательно, аналогичное неравенство справедливо и для вектора x: $h(N^0 - x) \leqslant h(N^0)$. Окончательно $h(N^0 + x) = h(N^0)$.

Пусть $N^0 \neq N_s^*$. Тогда гиперплоскость, задаваемая уравнением $h(N) = h(N^0)$, должна содержать линейное многообразие в $\mathrm{Aff}\, s$, опорное к $U_g \cap s$ (напомним, что $\mathrm{Aff}\, s$ — наименьшее по включению линейное многообразие, содержащее s). Для любой точки $N \in U_g \cap s$ выполнено неравенство $h(N) \leqslant h(N^0)$ (здесь существенно, что $\dim s > 1$ и G строго выпукла). Пусть $N \in U_g \cap \mathrm{ri}\, s$. Рассмотрим вектор $N^0+\varepsilon(N^0-N)$. Существует такое $\delta>0$, что при $0<\varepsilon<\delta$ точка $N^0+\varepsilon(N^0-N)\in \operatorname{ri} s$. В этом случае $G(N^0+\varepsilon(N^0-N))<g$. Поэтому можно определить $y(\varepsilon)$ — центральную проекцию $N^0+\varepsilon(N^0-N)$ на S_g из центра N^*. Как и выше, $(y(\varepsilon)-N^0)/\varepsilon\to N^0-N$ при $\varepsilon\to 0$. Значение $h(y(\varepsilon))\leqslant h(N^0)$ при достаточно малых ε, так как N^0 — точка локального максимума h на S_g. Отсюда получаем $h(N)\geqslant h(N^0)$. Окончательно $h(N)=h(N^0)$. Аналогичное утверждение верно, очевидно, и для локальных минимумов h на S_g. Лемма доказана.

Воспользуемся леммой 5.11 для поиска экстремума линейной функции h на классе термодинамической эквивалентности с координатами (g, M). Внутренняя точка $N\in \operatorname{ri} D(b)\cap S_g$ может являться точкой экстремума h на S_g тогда и только тогда, когда

$$\begin{gathered} G(N)=g,\ \sum_{j=1}^{n} a_i^j N_j=b_i \quad (i=1,\ldots,k), \\ h_i=\lambda_0 \partial G/N_i+\sum_{j=1}^{k}\lambda_j a_j^i \quad (i=1,\ldots,n). \end{gathered} \tag{5.21}$$

Таких точек может быть не более двух. Если s — грань $D(b)$, $\dim s>1$, то точка $N\in \operatorname{ri} s$ может быть точкой экстремума h на S_g тогда и только тогда, когда

$$G(N)=g,\ h_i=0 \quad (i\notin I_s). \tag{5.22}$$

Последнее условие в (5.22) означает, что $h\equiv\mathrm{const}$ на s. Наконец, если s — ребро D, то $N\in s$ может быть точкой экстремума h на S_b тогда и только тогда, когда $G(N)=g$. Таких точек на ребре может быть не более двух.

Итак, чтобы найти максимум и минимум линейной функции h на классе термодинамической эквивалентности с координатами (g, M), надо:

1. Исследовать систему (5.21) в $\operatorname{ri} D(b)$ и найти ее решения.
2. Найти точки $S_g\cap D_1(b)$.
3. Найти все грани $s\subset D(b)$, на которых $h_i=0$ $(i\notin I_s)$ и существуют точки $N\in \operatorname{ri} s$, где $G(N)=g$.
4. Для конечного множества точек, найденных на первом и втором шаге, определить координаты их классов термодинамической эквивалентности и выделить из этого множества те точки $N^1,\ldots,N^r$, которые принадлежат классу термодинамической эквивалентности с координатами (g, M).
5. Из конечного множества граней, найденных на третьем шаге, выделить те $s_1,\ldots,s_q$, которые пересекаются с классом термодинамической эквивалентности (g, M). Проверить, пересекается ли грань s с классом (g, M), можно так: для вершин $v\in s$ определим координаты $(G(v), M(v))$ их образов на термодинамическом дереве, если хотя бы для одной вершины $G(v)\geqslant g$, $v\in M$ и, кроме того, $G(N_s^*)\leqslant g$, то грань s пересекается с исследуемым классом термодинамической эквивалентности.

6. Из чисел $h(N^1)$, ..., $h(N^r)$, $h(s_1)$, ..., $h(s_q)$ выбрать наибольшее и наименьшее, они совпадают соответственно с максимумом и минимумом h на классе термодинамической эквивалентности (g, M).

Можно, конечно, построить более эффективные численные методы поиска максимума и минимума h на классе термодинамической эквивалентности, не обращаясь к исследованию системы (5.21). Описанный способ имеет преимущества в тех случаях, когда можно получить явные аналитические выражения, т. е. для функций G достаточно простого вида.

5.5. ПРИМЕР ПОСТРОЕНИЯ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКОГО ДЕРЕВА

Рассмотрим реакцию горения водорода, ограничиваясь сокращенным списком веществ H_2, O_2, H_2O, H, O, OH. В разд. 4.3 описаны балансные многогранники для этого списка веществ. Пусть смесь стехиометрическая: $b_H = 2b_0$. Это означает, что все вещество может быть сосредоточено в H_2O. Соответствующий граф балансного многогранника изображен на рис. 4.4, б. Перенумеруем ребра этого графа так, как указано на рис. 5.1. Будем рассматривать изотермический изохорический процесс, для которого $G_{TV} = \sum_i N_i (\ln (N_i/N_i^*) - 1)$. Для построения термодинамического дерева надо знать ε_d — минимальные значения G на ребрах D. Особенно важен порядок следования чисел ε_d на прямой. Пусть ε_i — минимум на i-м ребре. Выберем для примера такой порядок следования чисел ε_i:

$$\varepsilon_{15} > \varepsilon_{11} > \varepsilon_{12} > \varepsilon_{10} > \varepsilon_9 > \varepsilon_{13} > \varepsilon_{14} > \varepsilon_7 > \varepsilon_8 > \varepsilon_5 > \varepsilon_4 > \varepsilon_2 > \varepsilon_6 > \\ > \varepsilon_1 > \varepsilon_3. \quad (5.23)$$

Рассмотрим превращения графа $\tilde{D}$ при последовательном удалении ребер в порядке возрастания ε_d, начиная с ребра, имеющего номер 3. Сначала (рис. 5.2, *а*—5.2, *е*) последовательно удаляются ребра, соединяющие особую вершину H_2O с остальными. После удаления ребра под номером 5 граф $\tilde{D}$ распадается на две связные компоненты — вершину H_2O и «все остальное». Следующее изменение числа связных компонент происходит после отбрасывания ребер с номерами 8, 7, 14. Эти ребра соединяют вершину (H_2, O_2) с другими. После их удаления граф распадается на три связные компоненты — вершину H_2O, вершину (H_2, O_2) и «все остальное». После удаления

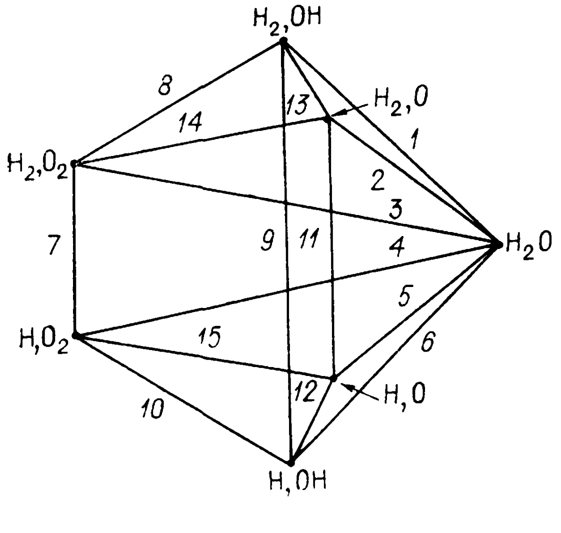

Рис. 5.1. Нумерация ребер графа балансного многогранника.

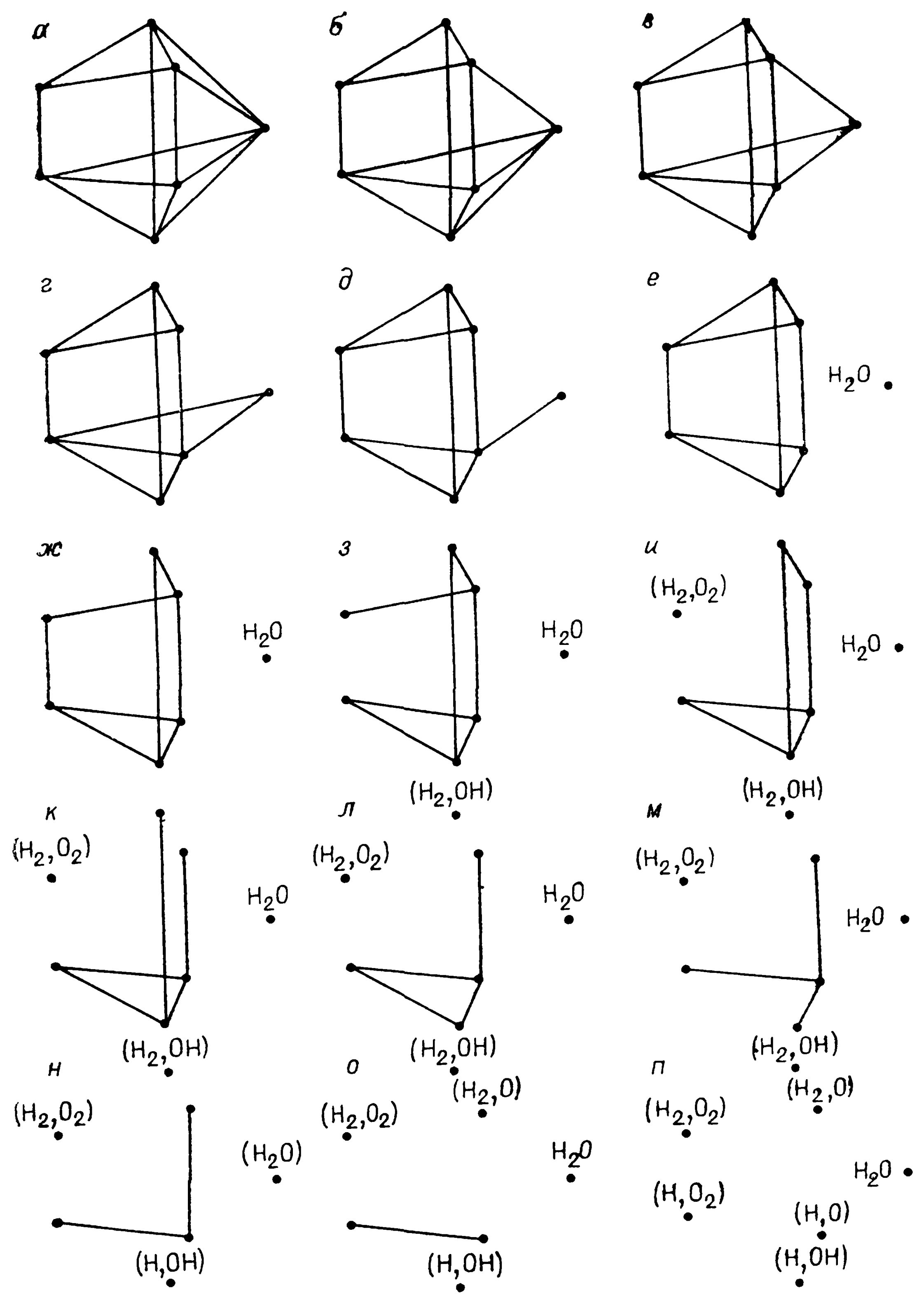

Рис. 5.2. Изменение графа балансного многогранника при отбрасывании ребер в порядке возрастания *G*.

еще двух ребер под номерами 13, 9 связных компонент становится уже 4 — отделяется вершина (H_2, OH). Далее, при удалении ребер 10, 12 отделяется вершина (H, OH). При удалении ребра 11 отделяется вершина (H_2, O), и, наконец, после удаления ребра 15 граф превращается в совокупность вершин, не соединенных между собой. В рассматриваемом примере граф $\tilde{D}$ по мере удаления ребер

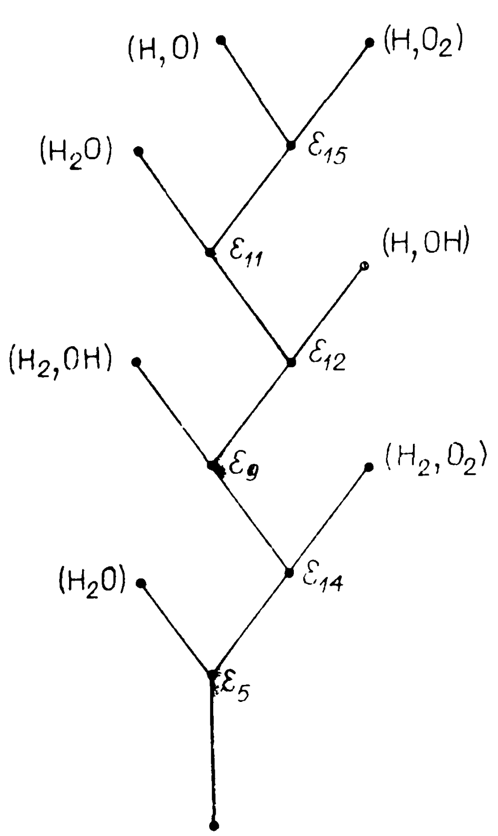

Рис. 5.3. Термодинамическое дерево.

распадается на связные компоненты однообразным способом — последовательно выделяются в отдельные связные компоненты вершины $\tilde{D}$. Соответствующее термодинамическое дерево имеет вид, изображенный схематично на рис. 5.3. Изображение имеет своей целью продемонстрировать топологию термодинамического дерева.

Г. Ш. Фридман обратил внимание автора на то, что в сложных случаях удобнее не выбрасывать ребра D в порядке возрастания ε_d, а наоборот, начинать с тривиального графа (без ребер) и вставлять в него ребра в порядке убывания ε_d. При этом на каждом шаге надо проверять, не соединились ли новым ребром имеющиеся связные компоненты — вычислительно более простая задача, чем проверка того, не распался ли граф при удалении ребра на связные компоненты.

5.6. РЕШЕТКА ПОЛОЖИТЕЛЬНО ИНВАРИАНТНЫХ МНОЖЕСТВ

Подмножество фазового пространства динамической системы называется *положительно инвариантным*, если вместе с каждой своей точкой оно содержит и соответствующую положительную полутраекторию. Это означает, что, начавшись в положительно инвариантном множестве при $t=0$, движение не выйдет из него при $t>0$.

В термодинамическом подходе нас интересует не одна динамическая система, а целый класс систем, согласованных с термодинамикой. В соответствии с этим представляют интерес множества, положительно инвариантные относительно всех таких систем. Продолжим изучение гомогенной химической системы с балансным многогранником D и термодинамической функцией Ляпунова G.

Будем говорить, что множество $V\subset D$ *положительно инвариантно*, если для любых $N^1\in V$, $N^2\in D$ из того, что $N^1\geqslant N^2$, следует $N^2\in V$. Таким образом, V содержит вместе с каждой своей точкой N любой выходящий из нее термодинамически допустимый путь.

Чтобы подчеркнуть независимость этого свойства от конкретной кинетики, можно назвать такие V *универсальными положительно инвариантными множествами*.

Аналогично можно определить положительно инвариантные подмножества термодинамического дерева Y. Именно, будем говорить, что $V \subset Y$ *положительно инвариантно*, если для любых $y_1 \in V$, $y_2 \in Y$ из того, что $y_1 \geqslant y_2$, следует, что $y_2 \in V$.

Следующая лемма вытекает непосредственно из определений.

Лемма 5.12. *Множество $V \subset D$ положительно инвариантно тогда и только тогда, когда оно есть полный прообраз положительно инвариантного подмножества Y при канонической проекции $D \to D/\sim = Y$.*

Объединение и пересечение положительно инвариантных множеств положительно инвариантно.

Ограничимся далее рассмотрением замкнутых положительно инвариантных множеств. Обозначим $T(D)$ и $T(Y)$ семейства замкнутых положительно инвариантных подмножеств D и Y соответственно. Пересечение любого семейства элементов $T(D)$ ($T(Y)$) и объединение конечного количества элементов $T(D)$ ($T(Y)$) принадлежит $T(D)$ ($T(Y)$). Поэтому можно было бы рассматривать $T(D)$ и $T(Y)$ как семейства замкнутых подмножеств D и Y в специальной топологии. Это, однако, далее не понадобится. Часто мы будем использовать то, что $T(D)$ и $T(Y)$ — решетки множеств, содержащие вместе с любыми двумя элементами их объединение и пересечение. В силу леммы 5.12 проекция $D \to D/\sim = Y$ индуцирует изоморфизм решеток $T(D)$ и $T(Y)$, так как эта проекция — непрерывное отображение и образ замкнутого насыщенного по отношению $\sim$ множества замкнут.

Пусть C — произвольное подмножество D. Обозначим $V(C)$ минимальное по включению множество среди элементов $T(D)$, содержащих C:

$$V(C) = \bigcap_{V \in T(D), C \subset V} V. \tag{5.24}$$

Основной задачей главы является описание $V(C)$ для множеств C, состоящих из одной точки. В этом случае $V(C)$ — совокупность всех составов, достижимых из данного при движении по термодинамически допустимым путям.

Пусть T — решетка множеств. Назовем семейство $B \subset T$ *базой* T, если любой элемент T может быть получен из элементов B с помощью конечного числа операций объединения и пересечения. Если B — база $T(D)$, то, как легко видеть, для одноточечного множества $C = \{N\}$ вместо (5.24) можно записать.

$$V(N) = \bigcap_{V \in B, N \in V} V. \tag{5.25}$$

Для решения указанной основной задачи полезно иметь описание какой-либо базы $T(D)$, достаточно удобной для построения $V(N)$ — задания этого множества с помощью уравнений и неравенств.

Ниже будет построена база $T(D)$, состоящая из однопараметрического семейства множеств $U_g^c = \{N \in D \mid G(N) \leqslant g\}$ и еще конечного семейства множеств. При этом построении используется изоморфизм $T(D)$ и $T(Y)$. Первый пример такой базы можно получить сразу из описания Y с помощью координат (g, M) — см.

разд. 5.2, 5.3. Для этого каждой вершине $v \in D_0$ сопоставим множество $V(v) = \{N \in D | v \geqslant N\}$. Семейство, состоящее из множеств U_g^c и $V(v)$ $(v \in D_0)$, образует базу $T(D)$. Это, однако, не решает поставленной задачи, пока в нашем распоряжении нет описания множеств $V(v)$ с помощью уравнений и неравенств. Для получения такого описания удобно использовать другую базу, построению которой посвящен следующий раздел.

5.7. БАЗА РЕШЕТКИ ПОЛОЖИТЕЛЬНО ИНВАРИАНТНЫХ ПОДМНОЖЕСТВ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКОГО ДЕРЕВА

Термодинамическое дерево — множество пар вида (g, M), где g — число или символ ∞, $M \subset D_0$ — некоторое множество вершин D_0. Не всякая пара такого вида соответствует точке дерева. Число g должно удовлетворять ограничению $g^* \leqslant g \leqslant \sup\{G(N) | N \in D\}$. При данном g множество M должно быть классом эквивалентности в $D_{0g} = \{v \in D_0 | G(v) \geqslant g\}$ по отношению: $v^1 \approx_g v^2$, если $\varepsilon(v^1, v^2) \geqslant g$ либо $v^1 = v^2$. Функция $\varepsilon(v^1, v^2)$ определена в разд. 5.2. Вычисляется она так: пусть ε_d — минимум G на ребре $d \subset D$, каждой цепи P из ребер D сопоставляется число ε_P — минимум ε_d по всем встречающимся в P ребрам d; $\varepsilon(v^1, v^2)$ — максимум ε_P по всем соединяющим v^1, v^2 цепям. В силу очевидных свойств функции $\varepsilon(v^1, v^2)$ (5.12) $\approx_g$ — отношение эквивалентности. Перечисленные условия необходимы и достаточны для того, чтобы пара (g, M) соответствовала точке термодинамического дерева.

Обозначим u_g подмножество Y, состоящее из тех пар (g', M), для которых $g' \leqslant g$. Множество u_g — образ U_g^c при проекции $D \to D/\sim = Y$ $\left(U_g^c = \{N \in D | G(N) \leqslant g\}\right)$.

Мы построим базу $T(Y)$, состоящую из однопараметрического семейства множеств u_g и конечного семейства P. Элементы P строятся так. Удалим из Y точку ветвления y. Множество $Y \backslash \{y\}$ состоит из нескольких связных компонент. Обозначим $b(y)$ связную компоненту $Y \backslash \{y\}$, содержащую корень (g^*, D_0). Остальные связные компоненты обозначим $a_1(y), \ldots, a_l(y)$. Множества $Y \backslash a_i(y)$ $(i = 1, \ldots, l)$ принадлежат $T(Y)$. Именно они и составляют семейство P. Эту конструкцию удобно представить геометрически. Пусть Y изображено как дерево на плоскости так, что при движении «снизу вверх» g растет. После удаления из дерева точки ветвления оно распадается на несколько связных компонент, одна из которых содержит корень, а другие суть верхние «ветви», соответствующие данной точке ветвления. Множество $Y \backslash a_i$ получается при удалении из Y одной такой верхней ветви. В интересующих нас случаях корень не является точкой ветвления, так как предполагается, что $\dim D > 1$.

Итак, пусть для каждой точки ветвления $y \in Y$ множества $a_i(y)$ $(i = 1, \ldots, l(y))$ — связные компоненты $Y \backslash \{y\}$, не содержащие корня, $P(y)$ — семейство множеств $Y \setminus a_i(y)$ $(i = 1, \ldots, l(y))$. Положим $P = \bigcup\limits_y P(y)$ — объединение берется по всем точкам ветвления.

Предложение 5.5. *Семейство множеств $P \cup \{u_g\}$ образует базу решетки $T(Y)$.*

Доказательство этого геометрически очевидного утверждения строится так. Сначала докажем существование для любого $V \in T(Y)$ такого конечного множества $\{y_1, \ldots, y_l\} \subset V$, что

$$V = \{y \in Y | y_1 \geqslant y \text{ или } y_2 \geqslant y \text{ или... или } y_l \geqslant y\}. \qquad (5.26)$$

Далее покажем, что для любого $y_0 = (g, M) \in Y$ множество $V(y_0) = \{y \in Y | y_0 \geqslant y\}$ есть пересечение u_g с $V(m)$, где $m = (G(v), M(v))$, v — любая вершина из M, $M(v) = \{v' \in D_0 | v' \sim v\}$, если $G(v) < \infty$, то $M(v) = \{v\}$.

Наконец, завершает доказательство следующее утверждение: для любой концевой вершины $m = (G(v), M(v))$ термодинамического дерева множество $V(m) = \{y \in Y | m \geqslant y\}$ есть пересечение всех содержащих его элементов P.

Итак, пусть $V \in T(Y)$. Заметим, что для любых двух $y_{1,2} \in Y$, $y_1 = (g_1, M_1)$, $y_2 = (g_2, M_2)$, возможны только такие соотношения между M_1, M_2: $M_1 \subseteq M_2$, $M_2 \subseteq M_1$, $M_1 \cap M_2 = \varnothing$. По построению координат (g, M) невозможно, чтобы пересечение M_1 и M_2 было непусто, но ни одно из этих множеств не лежало бы в другом. Среди вторых координат M точек $(g, M) \in V$ выберем минимальные по включению множества. Их конечное число, так как D_0 конечно. Обозначим эти минимальные M через $M_1, M_2, \ldots, M_l$. Ввиду их минимальности невозможно, чтобы имело место включение $M_i \subset M_j$ для различных $i, j = 1, \ldots, l$. Для каждого M_i $(i = 1, \ldots, l)$ существует максимум таких g, что $(g, M_i) \in V$. Это следует из замкнутости V. Обозначим такое максимальное g через g_i, а точку $(g_i, M_i) - y_i$. По построению точек y_i и в силу положительной инвариантности множества V оно может быть задано соотношением (5.26).

Пусть $y_0 = (g, M) \in Y$, $v \in M$, $m = (G(v), M(v))$. Множество $V(m) = \{y \in Y | m \geqslant y\}$ включает множество $V(y_0) = \{y \in Y | y_0 \geqslant y\}$. Пусть $V_0 = u_g \cap V(m) = \{y \in Y | m \geqslant y, G(y) \leqslant g\}$. Множества $V(y_0)$, $V(m)$ и V_0 положительно инвариантны. Имеем $m \geqslant y_0$, поэтому $y_0 \in V_0$, следовательно, $V(y_0) \subset V_0$. Пусть $y_1 \in V_0$, $y_1 = (g_1, M_1)$. Это означает, что $g_1 \leqslant g$, $m \in M_1$. Как уже отмечалось, если $M_1 \cap M \neq \varnothing$, то либо $M \subseteq M_1$, либо $M_1 \subseteq M$. В первом случае $(M \subseteq M_1)$ справедливо неравенство $y_0 \geqslant y_1$ и $y_1 \in V(y_0)$. Если $M_1 \neq M$, то включение $M_1 \subset M$ невозможно, так как M — класс эквивалентности по отношению $\approx_g$, M_1 — класс эквивалентности по отношению $\approx_{g_1}$ и $g_1 \leqslant g$. Поэтому $M \subseteq M_1$, $y_0 \geqslant y_1$, $V_0 = V(y_0)$.

Пусть v — вершина D, $m(G(v), M(v))$, $V(m) = \{y \in Y | m \geqslant y\}$, $y_0 = (g, M)$, $v \notin M$ и, что эквивалентно, $y_0 \notin V(m)$. Обозначим $V_P(m)$ пересечение всех элементов P, содержащих m. Множество $V_P(m)$ положительно инвариантно, поэтому $V(m) \subseteq V_P(m)$. Покажем, что $y_0 \notin V_P(m)$. Отсюда ввиду произвольности $y_0 \notin V_P(m)$ будет следовать равенство $V_P(m) = V(m)$. Обозначим ε минимальное из чисел

$\varepsilon(v, v')$, $v' \in M$. Пусть M_ε — содержащий v класс эквивалентности в $D_{0\varepsilon}$ по отношению $\approx_\varepsilon$. Точка $(\varepsilon, M_\varepsilon) \in Y$ есть точка ветвления, $m \geqslant (\varepsilon, M_\varepsilon)$ и $y_0 \geqslant (\varepsilon, M_\varepsilon)$. Точки m и y_0 принадлежат различным связным компонентам $Y \setminus \{(\varepsilon, M_\varepsilon)\}$. Это вытекает из следующего описания связных компонент $Y \setminus \{y\}$ для произвольной точки ветвления $y \in Y$.

Лемма 5.13. *Пусть $y = (g, m) \in Y$, y — точка ветвления. Существует такое $\gamma > 0$, что при $\delta < \gamma$, $\delta > 0$ классы эквивалентности в M по отношению $\approx_{g+\delta}$ не зависят от δ. Пусть эти классы эквивалентности суть $M_1, \ldots, M_l$. Тогда $Y \setminus \{y\}$ состоит из $l+1$ связной компоненты. Одна из них содержит корень дерева Y, остальные $a_1, \ldots, a_l$ суть множества вида*

$$a_i = \{(g', M') \in Y \mid g' > g,\ M' \subseteq M_i\} \quad (i = 1, \ldots, l). \tag{5.27}$$

Доказательство может быть получено из рассмотрения непрерывных путей в D и их образов в Y с помощью леммы 5.7. Обращение к D здесь необходимо, так как в Y определена топология фактор-пространства.

Итак, $V(m) = V_P(m)$ и семейство $\{u_g\} \cup P$ образует базу решетки $T(Y)$. Описание прообразов u_g в D тривиально — они задаются неравенствами $G(N) \leqslant g$. Описание неравенствами элементов P несколько сложнее.

5.8. ОПИСАНИЕ НЕРАВЕНСТВАМИ ПОЛОЖИТЕЛЬНО ИНВАРИАНТНЫХ ПОДМНОЖЕСТВ БАЛАНСНОГО МНОГОГРАННИКА

В предыдущем разделе описана база решетки положительно инвариантных подмножеств термодинамического дерева. Она состоит из однопараметрического семейства множеств u_g и еще конечного семейства P. Прообразы u_g в D суть множества $U_g^c = \{N \in D \mid G(N) \leqslant g\}$. Прообразы элементов P — дополнения в D прообразов a_i (5.27). Множество a_i есть связная компонента $Y \setminus \{y\}$, не содержащая корня дерева, для некоторой точки ветвления $y = (g, M) \in Y$. Прообраз y — связная компонента поверхности уровня S_g. Прообраз корня дерева — точка равновесия N^*. Следовательно, прообраз a_i — одна из связных компонент $D \setminus U_g^c$, так как образ U_g в Y лежит в той связной компоненте $Y \setminus \{y\}$, которая содержит корень дерева. Подчеркнем, что для точки ветвления $y = (g, M) \in Y$ выполнено неравенство $g < \infty$, а $g = \infty$ возможно только для концевых вершин дерева. Все связные компоненты можно описать, следуя результатам разд. 5.1. Для этого надо построить граф $\tilde{D} \setminus U_g^c$, удалив из $\tilde{D}$ все вершины v, в которых $G(v) \leqslant g$ и все ребра d, на которых минимум G, $\varepsilon_d \leqslant g$. Допуская вольность, одинаково обозначаем вершины и ребра $\tilde{D}$ и вершины и ребра D. Обозначим $\tilde{D}_g$ граф $\tilde{D} \setminus U_g^c$. Связные компоненты V_i графа $\tilde{D}_g$ взаимно однозначно соответствуют связным компонентам W_i множества $D \setminus U_g^c$. Пусть V_i — связная компонента D_g, V_{0i} — множество ее вершин. Среди ребер $\tilde{D}$, включающих вершины из V_{0i}, есть и такие, которые не принадлежат V_i. На этих ребрах d будет $\varepsilon_d \leqslant g$. Пусть d — ребро $\tilde{D}$, содержащее какую-либо одну вершину из V_{0i}, $\varepsilon_d \leqslant g$. Выберем на ребре d одну точку e_d, в которой $G(e_d) \leqslant g$. Множество точек e_d для всех таких ребер d обозначим Q_{di}. Соответствующая V_i связная компонента W_i множества $D \setminus U_g^c$ есть

$$W_i = (\mathrm{co}\,(Q_{di} \cup V_{0i})) \setminus U_g^c. \tag{5.28}$$

Это описание отличается от данного в (5.10), (5.11) тем, что вместо объединения $U \cup Q_d$ в (5.28) входит множество Q_{di}. Доказательство совпадает с приведенным в разд. 5.1. Отличие состоит в разной сложности вычислений. Если нужно описать неравенствами одно W_i, то использование множества Q_{di} часто удобнее. В том случае, когда нужны все W_i, может оказаться удобнее использовать множество $U_0 \cup Q_d$ — одно для всех.

Дополнение W в D может быть описано исходя из (5.28), а также непосредственно аналогичным образом:

$$D \setminus W_i = U_g^c \cup \mathrm{co}(Q_{di} \cup (D_0 \setminus V_{0i})). \tag{5.29}$$

Некоторые из множеств $D \setminus W_i$, найденные для конечного набора значений g, соответствующих точкам ветвления, и есть искомые прообразы элементов P. Выясним, какие именно. Для данного g точка ветвления $(g, M) \in Y$ существует тогда и только тогда, когда $g = \varepsilon(v^1, v^2)$ для некоторых вершин v^1, $v^2 \in D_0$ и $g < \infty$. Пусть $g = \varepsilon(v^1, v^2)$, $g < \infty$. Обозначим D_{0g} множество тех $v \in D^0$, для которых $G(v) \geqslant g$. Разобьем D_{0g} на классы эквивалентности по отношению $\approx_g : v^1 \approx_g v^2$, если $\varepsilon(v^1, v^2) \geqslant g$ или $v^1 = v^2$. Обозначим эти классы эквивалентности $M_1, \ldots, M_l$. Как было показано в разд. 5.2, $M_1, \ldots, M_l$ есть совокупность вторых координат всех точек $(g, M) \in Y$. Точка (g, M_i) является точкой ветвления тогда и только тогда, когда $\varepsilon(v, v') = g$ для некоторых v, $v' \in M_i$. По условию (g, M_i) есть точка ветвления хотя бы для одного i. Такое i не обязательно единственно. Изменяя, если потребуется, нумерацию, положим: (g, M_i) — точка ветвления для $i = 1, \ldots, r$.

Рассмотрим отношение эквивалентности $\approx_{g+} : v^1 \sim_{g+} v^2$, если $\varepsilon(v^1, v^2) > g$ или $v^1 = v^2$. Каждое M_i $(i = 1, \ldots, r)$ разбивается на несколько классов эквивалентности по отношению $\approx_{g+}$. Обозначим совокупность всех этих классов эквивалентности через $V_{01}, \ldots, V_{0q}$. Каждому V_{0i} $(i = 1, \ldots, q)$ сопоставим совокупность тех ребер $d \subset D$, которые содержат одну и только одну вершину из V_{0i}. Обозначим эту совокупность ребер D_{1i}. На любом ребре $d \in D_{1i}$ существуют точки e, в которых $G(e) \leqslant g$. Выберем по одной такой точке e_d на каждом $d \in D_{1i}$. Множество точек e_d для данного i обозначим Q_{di}. Построим множества $D \setminus W_i$ (5.29). Обозначим P_g совокупность всех множеств $D \setminus W_i$ для данного $g = \varepsilon(v^1, v^2)$. Пусть P' — объединение P_g при $g < \infty$, $g = \varepsilon(v^1, v^2)$, v^1, $v^2 \in D_0$.

Теорема 5.1. *Семейство множеств*

$$P'U\{\{N\in D|G(N)\leqslant g\}|g^*\leqslant g\leqslant\infty\}$$

образует базу решетки $T(D)$ положительно инвариантных подмножеств D.

Как построить $V(N)$ — множество таких $N'\in D$, что $N\geqslant N'$? Если построены все элементы P', то это сделать нетрудно:

$$V(N)=\{N'\in D\,|\,G(N)\geqslant G(N')\}\cap\Big(\bigcap_{W\in P',N\in W}W\Big).\qquad(5.30)$$

Таким образом, $V(N)$ есть пересечение множества $U^c_{G(N)}=\{N'\in\in D\,|\,G(N')\leqslant G(N)\}$ со всеми элементами P', содержащими N.

Насколько сильно отличается $V(N)$ от множества $\{N'\in D|$ $|G(N')\leqslant G(N)\}$? Для небольших размерностей D отличия могут быть весьма сильны. Так, в одномерном случае P' состоит из двух множеств, каждое из которых содержит точки, лежащие «по одну сторону» от равновесия. Примеры для двумерного случая приведены в гл. 1. Опыт расчетов, однако, показывает, что для больших размерностей, если все балансы одного порядка, то $V(N)$ мало отличается от $U^c_{G(N)}=\{N'\in D\,|\,G(N')\leqslant G(N)\}$. Если же значения одних балансов много меньше, чем других, то это приводит к эффективному уменьшению размерности. Важной задачей представляется поиск аналитических оценок, которые с хорошей точностью заменяли бы громоздкую процедуру вычисления (5.29) для больших размерностей. Эта задача пока еще не решена.

Вычислительно наиболее громоздко построение выпуклой оболочки в (5.29). Кроме этого, требуется вычислять минимумы G на ребрах D, функцию $\varepsilon(v^1, v^2)$ для вершин $v^{1,2}$ и искать классы эквивалентности в D_0 по отношению $\approx_g$. Логически самая простая последовательность действия для вычисления $V(N)$ такова.

1. Строится граф $\tilde D$ балансного многогранника.

2. Для каждого ребра $d\subset D$ вычисляется ε_d — минимум G на d и точка этого минимума e_d.

3. Для всех пар v^1, $v^2\in D_0$ вычисляется $\varepsilon(v^1, v_2)$ — максимум ε_P по всем цепям P, соединяющим v^1, v^2 в $\tilde D$. Число ε_P — минимум ε_d по ребрам, входящим в P.

4. Для каждого $g<\infty$, принадлежащего области значений функции $\varepsilon(v^1, v^2)$, строятся базисные положительно инвариантные множества $D\backslash W_i$ (см. выше в этом разделе). Строятся — значит, описываются неравенствами. Совокупность этих множеств P'.

5. Для данного N проверяется, каким из элементов P' принадлежит N, и строится $V(N)$ (5.30).