Math-Net.Ru

Общероссийский математический портал

Ф. Айкарди, Перестройки овыпукленных видимых контуров и глобальные фазовые диаграммы в термодинамике, *Функц. анализ и его прил.*, 2003, том 37, выпуск 3, 1–19

DOI: <https://doi.org/10.4213/faa154>

Использование Общероссийского математического портала Math-Net.Ru подразумевает, что вы прочитали и согласны с пользовательским соглашением

<http://www.mathnet.ru/rus/agreement>

Параметры загрузки:

IP: 54.92.164.108

26 апреля 2023 г., 18:03:06

УДК 513.7+517.5+536.7

Перестройки овыпукленных видимых контуров и глобальные фазовые диаграммы в термодинамике

© 2003. Ф. Айкарди

Введение

В 1988 г. А. Н. Варченко [1] классифицировал локальные особенности фазовых диаграмм двухкомпонентных смесей, задавая их двухпараметрическими семействами выпуклых оболочек иммерсированных плоских кривых.

Настоящая работа дополняет эту классификацию: класс гладких кривых расширяется — рассматриваются *видимые контуры*, т. е. кривые с точками возврата (точное определение см. в §1).

Как следствие одно типичное явление для фазовых диаграмм двухкомпонентных смесей, отсутствующее в работе [1], добавляется при нашем подходе.

Заметим (см. также [3]), что другое явление, обнаруженное А. Н. Варченко, но пропущенное в курсе Ландау и Лифшица [2], отсутствует даже и в недавних термодинамических классификациях, хотя его существование и установлено в экспериментальных работах.

Кроме того, в настоящей работе получена классификация особенностей трехпараметрических семейств выпуклых оболочек видимых контуров, которые задают так называемые *глобальные фазовые диаграммы* в трехмерных пространствах параметров и определяют локальные перестройки фазовых диаграмм однопараметрических семейств двухкомпонентных смесей.

Я благодарю В. И. Арнольда, рассказавшего мне о работе Варченко [1] и о работе [10], И. А. Богаевского, познакомившего меня со своей работой [4], а также Ирину Аграчеву за помощь при редактировании русского текста.

§1. Определения и обозначения

Пусть поверхность S — образ гладкого вложения сферы в трехмерное пространство с декартовыми координатами (x, y, z) .

Видимым контуром Φ называется множество критических значений проекции S на плоскость (x, y) вдоль оси z .

Выпуклой оболочкой $\Omega(\Phi)$ видимого контура Φ называется пересечение всех полуплоскостей, содержащих этот видимый контур. *Овыпукленным видимым контуром* $\bar{\Phi}$ (*О-контуром* для краткости) называется граница выпуклой оболочки $\Omega(\Phi)$.

Вне выпуклой оболочки прообраз проекции поверхности S пустой, а число прообразов общей точки, лежащей внутри выпуклой оболочки, локально постоянно и четно.

О-контур общего положения имеет четное число простейших особых точек, в которых происходит разрыв кривизны: выпуклая дуга видимого контура сопрягается с отрезком двойной касательной (рис. 1).

Рис. 1. Типичный видимый контур, его выпуклая оболочка и овыпукленный видимый контур

(Ориентированная) касательная к О-контур $\bar{\Phi}$ называется *опорной* прямой [1] к видимому контуру Φ .

Опорная прямая общего положения имеет простое касание (степени 2) с видимым контуром $\bar{\Phi}$ ровно в одной точке. Исключительные (вырожденные) опорные прямые касаются $\bar{\Phi}$ либо в нескольких точках, либо в одной, но с порядком касания, большим двух.

О-контур общего положения $\bar{\Phi}$ с $2n$ особыми точками имеет n опорных прямых необщего положения, каждая из которых касается Φ в двух различных особых точках.

В работе [1] опорные прямые к иммерсированной кривой Φ разбиваются на классы с помощью следующих символов (характеристик). Опорной прямой общего положения сопоставлен символ $\{(1; 2)\}$, а опорной прямой необщего положения, касающейся $\bar{\Phi}$ в P различных точках $p_1, \dots, p_P$, — символ

$$\{(m_1; r_{1,1}, \dots, r_{1,m_1}; I_{1,j,k}), \dots, (m_P; r_{P,1}, \dots, r_{P,m_P}; I_{P,j,k})\},$$

где m_i — кратность кривой Φ в точке p_i , $r_{i,j}$ — степень уплощения j -й ветви ($j = 1, \dots, m_i$), проходящей через p_i , и для каждой пары j, k таких ветвей $I_{i,j,k}$ — их индекс пересечения (конечно, такие пары при $m_i \geq 2$ существуют).

ПРИМЕРЫ. Простейшие особые опорные прямые О-контра общего положения имеют символ $\{(1; 2), (1; 2)\}$. Так, на рис. 1 О-контур общего положения имеет 4 опорные прямые с символом $\{(1; 2), (1; 2)\}$. О-контур на рис. 2 имеет две необщие опорные прямые с символами $\{(1; 2), (1; 2), (1; 2)\}$ (а) и $\{(2; 2, 2, 2)\}$ (б).

Распространим понятие символа на опорные прямые к видимым контурам. Определим символ для двойной точки возврата $y = x^2 \pm x^{\frac{(2k+1)}{2}}$ ($k > 1$) как набор $\{(2; 2, 2; \frac{2k+1}{2})\}$. Вообще, символом точки возврата с ростком $y = x^{2r} \pm x^{\frac{(2k+1)}{2s}}$ ($\frac{2k+1}{2s} > 2r$) будем называть набор $\{(2; 2r, 2r; \frac{2k+1}{2s})\}$.

Рис. 2. Видимый контур необщего положения

ОПРЕДЕЛЕНИЯ. Опорные прямые с одинаковыми символами называются *эквивалентными*. Два О-контра называются *эквивалентными*, если множество особых опорных прямых (взятых в циклическом порядке) одного О-контра

(поэлементно) эквивалентно такому же множеству другого. В частности, О-контур общего положения эквивалентны, если они имеют одинаковое число особых точек.

Введем C -поверхность, полезную для приложений к термодинамике (см. [1] и §5).

Рассмотрим семейство О-контуров, зависящих от пары параметров (p, q) . В пространстве с координатами (p, q, t) , где $t \in S^1$ — параметризация овыпукленного видимого контура, C -поверхность образована всеми тройками (p, q, t_*) , где t_* — параметр особой точки О-контура, отвечающего паре (p, q) .

Над каждой точкой общего положения C -поверхность является $2n$ -листной (окружность параметра t разбивается на чередующиеся интервалы выпуклых дуг видимого контура и сегментов двойных касательных).

Над особыми значениями параметров (p, q) C -поверхность, вообще говоря, перестает быть $2n$ -листной и имеет особенности (см., например, рис. 4).

§2. Вырождения коразмерности 1

ТЕОРЕМА 1. *В однопараметрических семействах О-контуров общего положения, помимо опорных прямых общего положения, при изолированных значениях параметра встречаются опорные прямые видимого контура с такими же вырождениями, как и у опорных прямых к границе выпуклой оболочки образа иммерсии окружности на плоскость, перечисленных в теореме 2 из [1], т. е. имеющих символы*

$$\{(1; 4)\}, \quad \{(2; 2, 2; 2)\}, \quad \{(1; 2), (1; 2), (1; 2)\}.$$

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. По теореме Уитни типичные особенности проекции поверхности S на плоскость — это складки, порождающие гладкие части видимого контура, а также сборки и простейшие двойные точки (трансверсальные пересечения двух складок). Ни сборки, ни пересечения складок не попадают на выпуклую оболочку. (Сборка принадлежит внутренности образа проекции; в окрестности пересечения складок дополнение к образу лежит внутри сектора с углом, меньшим π .)

Особенности коразмерности 1 проекций поверхностей S — это *губы*, *клюв-к-клюву* и *ласточкин хвост* (см. [5–7]). Они также не могут находиться на границе выпуклой оболочки (см. рис. 3).

Рис. 3. Перестройки проекции гладкой поверхности при переходе через а) губы; б) клюв-к-клюву; в) ласточкин хвост

Остаются следующие опорные прямые к видимому контуру, имеющие вырождения коразмерности 1:

1) касательная с символом $\{(1;4)\}$ в точке видимого контура с уплощением 4-го порядка;

2) опорная прямая с символом $\{(2;2,2;2)\}$, проходящая через точку самокасаения видимого контура;

3) опорная прямая с символом $\{(1;2), (1;2), (1;2)\}$, касающаяся видимого контура в трех точках.

Эти особенности соответствуют точкам видимого контура образа иммерсии и рассмотрены в теореме 2 из [1].

ЗАМЕЧАНИЕ. В пространстве параметров вырожденные О-контур коразмерности 1 образуют локально коориентируемые гиперповерхности: положительной частью локального дополнения к такой гиперповерхности будем считать ту, где число $2n$ особых точек О-контура больше. На рис. 4 изображены коориентированные прямые на плоскости параметров. Рядом указаны минимальные значения числа $2n+1$ интервалов, на которые C -поверхность делит промежуток $t \in [0, 2\pi]$ (при условии, что 0 и 2π не особые точки).

Рис. 4. C -поверхности на особых стратах коразмерности 1 и коориентация таких стратов

§ 3. Вырождения коразмерности 2

Рассмотрим теперь двухпараметрическое семейство общего положения О-контуров.

На плоскости параметров вырожденные О-контур коразмерности 1 образуют коориентированные кривые. Вырождения коразмерности 2 — это трансверсальные пересечения таких кривых (отвечающие появлению двух вырожденных опорных прямых коразмерности 1) или специальные точки из замыкания этих кривых.

Вырожденные опорные прямые коразмерности 2 либо проходят через особые или кратные точки коразмерности 2 проекции поверхности S , либо имеют вырождение коразмерности 1 и еще дополнительную простую точку касания.

ТЕОРЕМА 2. Особенности коразмерности 2 границ выпуклых оболочек видимых контуров — это особенности коразмерности 2 выпуклых оболочек

иммерсированных плоских кривых, описанные в теореме 3 работы [1] и отвечающие опорным прямым с символами

$$\{(2; 2, 2, 3)\}, \quad \{(1; 4), (1; 2)\}, \quad \{(2; 2, 2, 2), (1; 2)\}, \quad \{(1; 2), (1; 2), (1; 2), (1; 2)\},$$

а также особенность, отвечающая опорной прямой с символом

$$\{(3; 2, 2, 2; 2, 2, 5/2)\}.$$

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. Первые 4 особенности из теоремы 3 в [1], очевидно, являющиеся также типичными особенностями овыпукленных видимых контуров, имеют следующее описание:

1) Необщая двойная точка O -контура с кратностью самопересечения 3. Опорная прямая имеет символ $\{(2; 2, 2, 3)\}$. На плоскости (p, q) ей соответствует точка возврата (типа $3/2$) линии точек $\{(2; 2, 2, 2)\}$ (рис. 5(1)).

2) Вырожденная опорная прямая с символом $\{(1; 4)\}$, касающаяся видимого контура еще в одной точке. Ее символ $\{(1; 4), (1; 2)\}$. На плоскости (p, q) ей отвечает общая предельная точка линий особенностей классов $\{(1; 4)\}$ и $\{(1; 2), (1; 2), (1; 2)\}$ (рис. 5(2)).

3) Вырожденная опорная прямая с символом $\{(2; 2, 2, 2)\}$, касающаяся видимого контура еще в одной точке. Ее символ $\{(2; 2, 2, 2), (1; 2)\}$. На плоскости (p, q) ей отвечает предельная точка линии особенностей $\{(2; 2, 2, 2)\}$, в которой эта линия касается замыкания линии особенностей $\{(1; 2), (1; 2), (1; 2)\}$ (рис. 5(3)).

4) Вырожденная опорная прямая, касающаяся видимого контура в четырех точках. Ее символ — $\{(1; 2), (1; 2), (1; 2), (1; 2)\}$. На плоскости (p, q) это предельная точка четырех попарно трансверсальных лучей особенностей $\{(1; 2), (1; 2), (1; 2)\}$ (рис. 5(4)).

Рис. 5. Бифуркационные диаграммы особенностей коразмерности 2 выпуклых оболочек гладких кривых

Существуют три класса особенностей коразмерности 2 проектирования гладкой поверхности на плоскость (см. [5], особенности 5, 7 и 8). Две из них (5 и 8) — это сборки типов $9/2$ и $5/4$, которые не могут лежать на выпуклой оболочке.

Точка третьего класса — это точка возврата (типа $5/2$), совпадающая с точкой гладкой ветви границы выпуклой оболочки (опорная прямая к гладкой и особой ветвям совпадают) (см. рис. 6). Символ этой опорной прямой $\{(3; 2, 2, 2; 2, 2, 5/2)\}$. Именно этот класс отсутствует в классификации Варченко [1].

Рис. 6. Особенность $\{(3; 2, 2, 2; 2, 2, 5/2)\}$

ЗАМЕЧАНИЯ. Росток в нуле поверхности $y = f(x, z)$, проектирование которого вдоль оси имеет эту особенность $\{(3; 2, 2, 2; 2, 2, 5/2)\}$, задается функцией

$$y = z^4 + z^2x + zx^2 + ax^2, \quad a \neq 0.$$

(Последний член ax^2 нужен для того, чтобы особенность лежала на выпуклой оболочке образа проекции.)

Следуя Варченко, давшему названия классам коразмерности 2, я назвала в работе [3] эту особенность «крылья».

Рис. 7. Особенность «крылья»

Изображенная в левой части рис. 7 C -поверхность «крылья» представляет собой вырожденный зонтик Уитни, линия самопересечения которого является линией самокасания. Касательные плоскости к C -поверхности вдоль этой линии вертикальны (точкам этой линии отвечают особенности $\{(2; 2, 2, 2; 2)\}$). Видимые контуры, отвечающие типичным (p, q) из окрестности нуля, изображены по периметру левой части рисунка. Справа изображена (p, q) -диаграмма: (черная) линия точек $\{(2; 2, 2, 2; 2)\}$ заканчивается на (белой) линии особенностей $\{(1; 4)\}$ и касается ее. (Похожая диаграмма имеется в [2] на плоскости термодинамических параметров (p, T) .)

§4. Вырождения коразмерности 3

В этом параграфе описаны типичные особенности трехпараметрических семейств О-контуров.

В пространстве параметров вырожденные О-контуры образуют поверхность Σ , вырождения коразмерности 2 отвечают линиям на ней, пересекающимся в точках коразмерности 3.

Особенность коразмерности 3, являющуюся трансверсальным пересечением трех стратов коразмерности 1 или двух стратов коразмерностей 1 и 2 (ей соответствуют О-контуры, имеющие одновременно разные вырожденные опорные прямые), назовем *тривиальной*.

ТЕОРЕМА 3. *Нетривиальные вырожденные опорные прямые, встречающиеся при изолированных значениях параметров типичного трехпараметрического семейства O -контуров, могут иметь только один из следующих 13 символов:*

$$\begin{aligned} &\{(1; 6)\}, \quad \{(2; 2, 2; 4)\}, \quad \{(2; 2, 4; 2)\}, \quad \{(3; 2, 2, 2; 2, 2, 2)\}, \quad \{(2; 2, 2; 3), (1, 2)\}, \\ &\quad \{(1; 4), (1; 2), (1; 2)\}, \quad \{(1; 2), (1; 4), (1; 2)\}, \\ &\quad \{(2; 2, 2; 2), (1; 2), (1; 2)\}, \quad \{(1; 2), (2; 2, 2; 2), (1; 2)\}, \\ &\quad \{(1; 2), (1; 2), (1; 2), (1; 2), (1; 2)\}, \\ &\{(1; 8/3)\}, \quad \{(3; 2, 2, 2; 2, 2, 7/2)\}, \quad \{(3; 2, 2, 2; 2, 2, 5/2), (1; 2)\}. \end{aligned}$$

Иерархия особенностей показана в таблице 1.

Табл. 1. Иерархия особенностей коразмерностей 1, 2 и 3.
(Т) означает тривиальные особенности (трансверсального пересечения)

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. I. Первые 10 вырождений отвечают вырождениям иммерсированных кривых на плоскости.

Пусть вырожденная опорная прямая совпадает с осью x и касается $N = m_1 + \dots + m_P$ ветвей видимого контура в $N \geq P$ точках положительной полуоси $x = x_j$, $y = 0$, $x_j \geq 0$, $j = 1, \dots, N$ (только P из этих точек различны). Будем считать, что $x_1 = 0$. Пусть j -я ветвь видимого контура в окрестности $x = x_j$ есть график функции $y = f_j(x) = \sum_{i \geq 2} a_i^{(j)}(x - x_j)^i$.

Поскольку видимый контур общего положения имеет опорные прямые с символом $\{(1; 2), (1; 2)\}$, то коразмерность особенности с $N > 2$ больше или равна $N - 2$. При $N = 1$ вырожденная опорная прямая имеет коразмерность k , если $a_i^{(1)} = 0$ для $i = 2, \dots, 2 + k$ и $a_{3+k}^{(1)} \neq 0$.

Рассмотрим последовательно все возможные значения P .

Пусть $P = 1$. Если вырожденная опорная прямая коразмерности 3 касается только одной ветви ($m_1 = 1$), то росток видимого контура имеет вид $y = x^6$ (символ $\{(1; 6)\}$). Если ветвей две ($m_1 = 2$), то их коэффициенты удовлетворяют либо условиям $x_2 = 0$, $a_2^{(1)} = a_2^{(2)}$ и $a_3^{(1)} = a_3^{(2)}$ (символ $\{(2; 2, 2; 4)\}$), либо условиям $x_2 = 0$, $a_2^{(2)} = a_3^{(2)} = 0$ (символ $\{(2; 2, 4; 2)\}$). В случае $m_1 = 3$ трех взаимно касающихся ветвей возможен только символ $\{(3; 2, 2, 2; 2, 2, 2)\}$.

Если $P = 2$, то возможен только случай, когда $m_1 = 2$ и $m_2 = 1$. В кратной точке $x_1 = x_2 = 0$ ветви удовлетворяют условиям $a_2^{(1)} = a_2^{(2)}$. Символ особенности — это $\{(2; 2, 2; 3), (1, 2)\}$.

При $P = 3$ из трех точек касания с опорной прямой две должны быть простыми, а одна — коразмерности 1, т. е. с символом $\{(1; 4)\}$ или $\{(2; 2, 2; 2)\}$. Итак, учитывая порядок этих точек, получаем 4 случая (в первых двух $N = 3$, а в последних $N = 4$) с символами

$$\begin{aligned} &\{(1; 4), (1; 2), (1; 2)\}, \quad \{(1; 2), (1; 4), (1; 2)\}, \\ &\{(2; 2, 2; 2), (1; 2), (1; 2)\}, \quad \{(1; 2), (2; 2, 2; 2), (1; 2)\}. \end{aligned}$$

Случай $P = 4$ невозможен. Действительно, из четырех точек касания x_j одна должна быть вырожденной, т. е. должна либо иметь символ $\{(1; 4)\}$, либо быть точкой касания двух ветвей, т. е. иметь символ $\{(2; 2, 2; 2)\}$, однако в обоих случаях это дает два дополнительных условия, и коразмерность в этих случаях равна 4, а не 3.

Наконец, при $P = 5$ единственная возможность — когда все точки касания простые (с символом $\{(1; 2)\}$). Общий символ — $\{(1; 2), (1; 2), (1; 2), (1; 2), (1; 2)\}$.

II. Оставшиеся вырождения включают точки возврата видимого контура. Имеется 7 особенностей коразмерности 3 проектирования поверхности на плоскость. Четыре из них (особенности 9^+ , 9^- , 10 и 11 из [5]) отвечают проектированию поверхности общего положения из специальных точек пространства. Конечно, все их можно получить и как особенности параллельного проектирования вырожденных поверхностей. Только особенность 10 может находиться на границе выпуклой оболочки. Она похожа на «крылья», но точка возврата более вырожденная (типа $7/2$). Нормальная форма (с добавочным квадратичным членом) имеет вид $y = z^4 + z^2x + zx^3 + ax^2$ ($a \neq 0$), а ее символ — это $\{(3; 2, 2, 2; 2, 2, 7/2)\}$. Особенности $9^\pm$ (вырожденные губы и клюв-к-клюву), а также особенность 11 (сборка типа $5/4$) лежат внутри выпуклой оболочки.

Три другие особенности, изученные В. В. Горюновым [5], получаются при проектировании необщей поверхности из точек специальной линии в пространстве. Из них только одна может находиться на границе выпуклой оболочки. Она наблюдается, когда губы рождаются на выпуклой ветви (складке) (и имеет нормальную форму $y = z^4 + z^2x^2 + zx^2$ и символ $\{(1; 8/3)\}$). (Для оставшихся двух особенностей прообраз проектирования либо пуст над целой проколотой окрестностью, либо пуст над некоторой кривой $y = -x^{6/5}$.)

Наконец, последний случай коразмерности 3 с символом $\{(3; 2, 2, 2; 2, 2, 5/2), (1; 2)\}$ наблюдается, когда опорная прямая с символом $\{(3; 2, 2, 2; 2, 2, 5/2)\}$ (коразмерности 2) касается видимого контура еще в одной точке.

§5. Описания бифуркационных диаграмм

Опишем топологические и дифференциальные свойства поверхности Σ в окрестности каждой из перечисленных выше особенностей коразмерности 3.

Здесь мы не даем полного исследования модулей (инвариантов дифференциального типа поверхности), хотя, например, даже в случае $\{(1;2), (1;2), (1;2), (1;2)\}$ коразмерности 2 бифуркационная диаграмма на плоскости состоит из четырех лучей с общей вершиной и имеет модуль. Заметим только, что, поскольку вырожденная опорная прямая соответствует особой точке преобразования Лежандра исходного видимого контура (см. [1]), то классификация мультиростков особенностей преобразований Лежандра плоских кривых (т.е. особенностей двойственных кривых) содержит классификацию вырождений опорных прямых. В частности, из простоты особенности A_5 вытекает отсутствие модулей в диаграмме вырожденной опорной прямой в случае 1 (рис. 8). Заметим также, что отсутствие модулей в случаях 11 (рис. 18) и 12 (рис. 19) вытекает из простоты соответствующих особенностей согласно результатам И. А. Богаевского [4] и В. В. Горюнова [8].

ЗАМЕЧАНИЯ. Ниже страты (точки, кривые, поверхности) бифуркационной диаграммы обозначаются символами соответствующих им особенностей опорных прямых. На рис. 8–20 компонентам связности дополнения к Σ приписаны нечетные числа $2n + 1$, где n — минимальное число опорных прямых с символом $\{(1;2), (1;2)\}$, которые имеет соответствующий видимый контур общего положения. Страты (поверхности) $\{(1;4)\}$, $\{(2;2,2;2)\}$ и $\{(1;2), (1;2), (1;2)\}$ на рисунках выделены соответственно белым, серым и темносерым цветами.

Рис. 8. Бифуркационная диаграмма особенности $\{(1;6)\}$

1) Бифуркационная диаграмма точки $\{(1;6)\}$ (рис. 8) получается из бифуркационной диаграммы особенности A_5 путем удаления стратов, не попадающих на границу выпуклой оболочки видимого контура. Поверхность $\{(1;4)\}$ име-

ет линию самопересечения, которая обрывается в особой точке $\{(1;6)\}$. Поверхность тройных точек $\{(1;2), (1;2), (1;2)\}$ ограничена полукубической кривой $\{(1;4), (1;2)\}$ и касается в особой точке указанной линии самопересечения. (Ребра возврата особенностей A_4 не видны.)

2) Бифуркационная диаграмма (рис. 9) точки $\{(2;2,2,4)\}$ диффеоморфна обычному ласточкиному хвосту. Точки ребра возврата отвечают особенностям $\{(2;2,2,3)\}$.

Рис. 9. Бифуркационная диаграмма особенности $\{(2; 2, 2, 4)\}$

3) В особой точке $\{(2; 2, 4, 2)\}$ (рис. 10) кривая $\{(2; 2, 2, 2), (1; 2)\}$ касается кривой $\{(1; 4), (1; 2)\}$ и линии трансверсального пересечения поверхностей $\{(2; 2, 2, 2)\}$ и $\{(1; 4)\}$.

Рис. 10. Бифуркационная диаграмма особенности $\{(2; 2, 4, 2)\}$

4) Бифуркационная диаграмма точки $\{(3; 2, 2, 2; 2, 2, 2)\}$ (рис. 11) содержит поверхность типа зонтика Уитни, являющуюся замыканием страта $\{(1; 2), (1; 2), (1; 2)\}$, и три компоненты поверхности $\{(2; 2, 2; 2)\}$. В особой точке попарно касаются три линии точек $\{(2; 2, 2; 2), (1; 2)\}$ и линия пересечения двух компонент поверхности $\{(2; 2, 2; 2)\}$. Линия самопересечения зонтика Уитни трансверсальна этим кривым и касается в особой точке третьей компоненты поверхности $\{(1; 2), (1; 2), (1; 2)\}$.

Рис. 11. Бифуркационная диаграмма особенности $\{(3; 2, 2, 2; 2, 2, 2)\}$

Рис. 12. Бифуркационная диаграмма особенности $\{(2; 2, 2; 3), (1, 2)\}$

5) К особой точке $\{(2; 2, 2; 3), (1, 2)\}$ (рис. 12) примыкают ребро возврата $\{(2; 2, 2; 3)\}$, кривая $\{(2; 2, 2; 2), (1; 2)\}$ и линия пересечения поверхностей $\{(1; 2), (1; 2), (1; 2)\}$ и $\{(2; 2, 2; 2)\}$. Все они имеют общую касательную в особой точке.

6) В бифуркационной диаграмме особенности $\{(1; 4), (1; 2), (1; 2)\}$ (рис. 13) линия $\{(1; 2), (1; 2), (1; 2), (1; 2)\}$, две линии $\{(1; 4), (1; 2)\}$ и линия пересечения поверхностей $\{(1; 2), (1; 2), (1; 2)\}$ и $\{(1; 4)\}$ трансверсальны друг другу и примыкают к особой точке. Каждая из этих линий трансверсальна поверхностям, к которым она не примыкает.

Рис. 13. Бифуркационная диаграмма особенности $\{(1; 4), (1; 2), (1; 2)\}$

Рис. 14. Бифуркационная диаграмма особенности $\{(1; 2), (1; 4), (1; 2)\}$

7) В бифуркационной диаграмме особенности $\{(1;2), (1;4), (1;2)\}$ (рис. 14) линия $\{(1;2), (1;2), (1;2), (1;2)\}$ и две линии $\{(1;4), (1;2)\}$ трансверсальны друг другу и примыкают к особой точке. Каждая из них трансверсальна поверхностям, к которым она не примыкает.

8) В бифуркационной диаграмме особенности $\{(2;2,2,2), (1;2), (1;2)\}$ (рис. 15) к линии $\{(1;2), (1;2), (1;2), (1;2)\}$ примыкают четыре поверхности $\{(1;2), (1;2), (1;2)\}$. Поверхность $\{(2;2,2,2)\}$ пересекает одну из них и касается двух соседних вдоль своего края $\{(2;2,2,2), (1;2)\}$, состоящего из двух трансверсальных кривых, примыкающих к особой точке.

Рис. 15. Бифуркационная диаграмма особенности $\{(2;2,2,2), (1;2), (1;2)\}$

9) В бифуркационной диаграмме особенности $\{(1;2), (2;2,2,2), (1;2)\}$ (рис. 16) четыре поверхности $\{(1;2), (1;2), (1;2)\}$ имеют общий край $\{(1;2), (1;2), (1;2), (1;2)\}$. Две из этих поверхностей пересекаются по линии, примыкающей к особой точке. Поверхность $\{(2;2,2,2)\}$ касается этих двух поверхностей вдоль своего края $\{(2;2,2,2), (1;2)\}$, представляющего собой пару трансверсальных между собой лучей, заканчивающихся в особой точке. Линия самопересечения поверхности $\{(1;2), (1;2), (1;2)\}$ трансверсальна линии $\{(1;2), (1;2), (1;2), (1;2)\}$ и касается поверхности $\{(2;2,2,2)\}$.

10) В бифуркационной диаграмме особенности $\{(1;2), (1;2), (1;2), (1;2), (1;2)\}$ (рис. 17) к особой точке подходят пять трансверсальных между собой (белых) лучей $\{(1;2), (1;2), (1;2), (1;2)\}$. К каждому лучу примыкает по 4 (из десяти) поверхностей $\{(1;2), (1;2), (1;2)\}$. Две поверхности пересекаются по (серому) лучу, также примыкающему к особой точке. Бифуркационная диаграмма гомеоморфна набору трех координатных плоскостей, хотя всего одна из 6 полуосей действительно является линией трансверсального пересечения двух гладких поверхностей.

Рис. 16. Бифуркационная диаграмма особенности $\{(1; 2), (2; 2, 2; 2), (1; 2)\}$

Рис. 17. Бифуркационная диаграмма особенности $\{(1; 2), (1; 2), (1; 2), (1; 2), (1; 2)\}$

11) Бифуркационная диаграмма особенности $\{(1; 8/3)\}$ (рис. 18) получается из диаграммы особенности видимого контура, изученной И. А. Богаевским в [4], удалением стратов особенностей, не попадающих на выпуклую оболочку, и добавлением поверхности $\{(1; 4)\}$, диффеоморфной зонтику Уитни. Поверхность $\{(2; 2, 2; 2)\}$ касается этого зонтика вдоль своего края $\{(3; 2, 2, 2; 2, 2, 5/2)\}$.

12) Бифуркационная диаграмма особенности $\{(3; 2, 2, 2; 2, 2, 7/2)\}$ (рис. 19) получается из диаграммы В. В. Горюнова [8], удалением, как и в предыдущем случае, стратов особенностей, не попадающих на выпуклую оболочку, и добавлении

ем поверхности $\{(1; 4)\}$. Диаграмма диффеоморфна диаграмме $\{(2; 2, 2; 3), (1; 2)\}$, страт $\{(1; 2), (1; 2), (1; 2)\}$ которой теперь отвечает символу $\{(2; 2, 2; 2)\}$.

Рис. 18. Бифуркационная диаграмма особенности $\{(1; 8/3)\}$

Рис. 19. Бифуркационная диаграмма особенности $\{(3; 2, 2, 2; 2, 2, 7/2)\}$

13) В бифуркационной диаграмме $\{(3; 2, 2, 2; 2, 2, 5/2), (1; 2)\}$ (рис. 20) особая точка находится на кривой $\{(1; 4), (1; 2)\}$ и принадлежит замыканию линии пересечения поверхностей $\{(1; 4)\}$ и $\{(1; 2), (1; 2), (1; 2)\}$. Кроме того, к особой точке примыкают трансверсальные кривые $\{(3; 2, 2, 2; 2, 2, 5/2)\}$ и $\{(2; 2, 2; 2), (1; 2)\}$, образующие край поверхности $\{(2; 2, 2; 2)\}$, которая вдоль этих кривых касается поверхностей $\{(1; 4)\}$ и $\{(1; 2), (1; 2), (1; 2)\}$.

Рис. 20. Бифуркационная диаграмма особенности $\{(3; 2, 2, 2; 2, 2, 5/2), (1; 2)\}$

§ 6. Приложения к термодинамике

Рассмотрим термодинамическую систему из двух компонент. Ее состояние задается точкой в четырехмерном пространстве с координатами u, v, s, x , равными удельным (т.е. отнесенным к одному молю смеси) значениям соответственно внутренней энергии, объема, энтропии и концентрации второй компоненты $x = x_2$ ($x_1 = 1 - x$) в смеси. Гиперповерхность равновесия задается графиком гладкой функции $u = u(v, s, x)$ (потенциала).

Касательную плоскость к графику функции u можно координатировать, считая положительным верхнее полупространство. Выпуклой оболочкой $\Omega(u)$ графика называется пересечение всех положительных полупространств, определенных касательными плоскостями к нему. Если график функции u лежит в $\Omega(u)$, то существует овыпукленный график:

ОПРЕДЕЛЕНИЕ. Овыпукленным графиком называется

$$\bar{u}(v, s, x) = \{(v, s, x, u_*) : u_* = \min(y) : (v, s, x, y) \in \Omega(u)\}.$$

Внутренняя энергия имеет овыпукленный график — это аксиома физики. Равновесие устойчиво в точках, где $u = \bar{u}$, и неустойчиво в остальных точках. (Там, где график функции u локально выпуклый и $u \neq \bar{u}$, равновесие называется метаустойчивым.) Состояние u на исходном графике отвечает однородному состоянию смеси. Неустойчивое состояние (v, s, x, u) , $u \neq \bar{u}$, заменяется состоянием $(v, s, x, \bar{u})$, которое отвечает неоднородному состоянию смеси (сосуществованию разных фаз).

Вместо переменных v и s обычно рассматривают двойственные координаты — давление и температуру p, T : $p = -\partial u / \partial v$ и $T = \partial u / \partial s$. Соответственно вместо u рассматривается ее преобразование Лежандра $g = u + pv - Ts$ по переменным v и s , называемое (молярным) потенциалом Гиббса. Образ преобразования Лежандра — это проекция («видимый контур») трехмерного лежандрова подмногообразия (заданного производящей функцией u) на базу с координатами $(-p, T, x, g)$

контактного пространства с формой $dg - v dp + s dT + \mu dx = du + p dv - T ds + \mu dx$ (кстати, $\mu = \mu_1 - \mu_2$ — это разница химических потенциалов компонент). Итак, вообще говоря, $g(p, T, x)$ — многозначная функция от (p, T, x) с особенностями. Ее часто рассматривают как семейство $g = g[p, T](x)$ функций одной переменной x , зависящих от параметров p и T .

Покажем, что $g = g[p, T](x)$ можно получить как семейство видимых контуров (множеств критических значений) проекции двумерной поверхности на плоскость (g, x) .

Действительно, преобразование Лежандра по v, s можно представить как композицию двух преобразований Лежандра: сначала по v , а затем по s , или наоборот. Другими словами, сначала в координатном пространстве (s, x, p, T, g) рассматривается график X функции $g = h(p, s, x) - Ts$, где $h = u + pv$ — так называемая (молярная) энтальпия, а затем каждое сечение $X_{p,T}$ четырехмерной поверхности X , отвечающее фиксированным p, T , проектируется вдоль оси s . Кривая $g = g[p, T](x)$ представляет собой множество критических значений этой проекции, поскольку $\partial h / \partial s - T = 0$.

Аналогично, в пространстве (v, x, p, T, g) можно взять график Y функции $g = f(v, T, x) + pv$, где $f = u - Ts$ — так называемая свободная энергия, а затем сечения Y спроектировать вдоль оси v . В общем случае для наших размерностей, хотя бы одна из поверхностей X или Y гладкая; поэтому интересующий нас график многозначной функции $g[p, T](x)$ является двухпараметрическим семейством видимых контуров проекции гладкой поверхности из трехмерного пространства на плоскость x, g .

Из факта существования овыпукленного графика $\bar{u}(v, s, x)$ вытекает существование овыпукленного графика $\bar{g}$ (в смысле последнего определения) функции $g = h(p, s, x) - Ts$ переменных s, x (при фиксированных p, T).

Устойчивое равновесие задается при фиксированных p, T двумерным овыпукленным графиком $\bar{g}(s, x)$ по отношению к s и x . Такой график имеет непустую проекцию на (x, g) -плоскость только при $g \geq \bar{g}[p, T](x)$, где $\bar{g}[p, T](x)$ — это овыпукленный график по отношению к x одномерной многозначной функции $g[p, T](x)$.

Таким образом, устойчивое равновесие задается (при фиксированных p, T), множеством особенностей проектирования графика $\bar{g}(s, x)$ вдоль s на (x, g) -плоскость, т.е. овыпукленным графиком многозначной функции $g[p, T](x)$ от x .

Термодинамическая фазовая диаграмма — это разбиение плоскости p, T на области с одинаковым поведением двухкомпонентной смеси как функции от концентрации x , т.е. на области с эквивалентными особенностями овыпукленных видимых контуров общего положения.

Овыпукленные видимые контуры коразмерности 1 соответствуют линиям границ этих областей. Как показано выше, эти линии коориентируемы: можно доказать, что единственный инвариант Васильева первого порядка фазовой диаграммы — это число листов C -поверхности над общей точкой, которое получает приращение 2 при положительном прохождении через критическую точку $\{(1, 4)\}$ или тройную точку $\{(1; 2), (1; 2), (1; 2)\}$, а также приращение 4 при прохождении через азеотропию $\{(2; 2, 2; 2)\}$. Значение инварианта на единицу меньше числа различных состояний (поочередно однородных и неоднородных), через которые система с данными (p, T) проходит при изменении x от 0 до 1.

Если система (или ее математическая модель) зависит еще от одного параметра λ , то необходимо исследовать трехпараметрическое семейство овыпукленных видимых контуров и однопараметрические семейства их сечений. При изолированных значениях параметров (p, T, λ) встречаются особенности коразмерности 3. При фиксированном λ общего положения фазовая (p, T) -диаграмма общая, т. е. имеет особенности коразмерностей 1 и 2. При прохождении через исключительные значения λ_* фазовая диаграмма содержит одну особую точку коразмерности 3.

Необщая фазовая диаграмма является сечением $\lambda = \lambda_*$ поверхности Σ в пространстве (p, T, λ) . Разным моделям Σ и разным направлениям оси λ по отношению к Σ отвечают, вообще говоря, топологически разные сечения и эволюции фазовой диаграммы.

В качестве примера на рис. 21 показаны три разных сечения Σ -поверхности особенности $\{(1; 4), (1; 2), (1; 2)\}$, отвечающие разным эволюциям фазовой диаграммы.

Всего имеется 41 тип эволюций фазовой диаграммы (p, T) при трансверсальном прохождении через нетривиальные особенности коразмерности 3. Эти эволюции описаны в [9].

Рис. 21.

ЛИТЕРАТУРА

1. Варченко А. Н. Перестройки выпуклых оболочек и фазовые переходы в термодинамике. Итоги науки и техники, Сер. Современные проблемы математики, Новейшие достижения, Т. 33, 1988, с. 157–190.
2. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Статистическая физика. Наука, М., 1964.
3. Aicardi F. On the classification of singularities in thermodynamics. Phys. D, **158**, 175–196 (2001).
4. Богаевский И. А. Особенности проектирований выпуклых гиперповерхностей. Функциональный анализ и его прил., **24**, вып. 2, 16–23 (1990).
5. Арнольд В. И. Особенности каустик и волновых фронтов. Библиотека математика, Фазис, М., 1996, с. 158–168.

6. *Платонова О. А.* Проектирования гладких поверхностей. Труды семинара им. Петровского, Т. 10, 1984, с. 135–149.
7. *Арнольд В. И.* Особенности систем лучей. УМН, **40**, вып. 5, 188 (1985).
8. *Encyclopaedia of Mathematical Sciences.* Vol. 39, Springer-Verlag, Berlin, 1993, p. 45.
9. *Aicardi F., Valentin P., Ferrand E.* On the classification of generic phenomena in one-parameter families of binary mixtures. *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 2002, p. 884–895.
10. *Fisher M. E., Kim Y. C.* Right and wrong near critical endpoints. *J. Chem. Phys.*, **117**, No. 2, 779–787 (2002).

Scuola Internazionale Superiore
di Studi Avanzati, Trieste, Italy
e-mail: aicardi@sissa.it

Поступило в редакцию
21 декабря 2001 г.