Вестник МИТХТ, 2014, т. 9, № 4

УДК 541.123

ХАРАКТЕРИСТИКА ЭЙЛЕРА КАК ТОПОЛОГИЧЕСКИЙ ИНВАРИАНТ ПРАВИЛ АЗЕОТРОПИИ

Л.А. Серафимов[1],*, профессор, А.К. Фролкова[1], заведующий кафедрой, Л.А. Хахин[2], старший научный сотрудник

[1]кафедра Химии и технологии основного органического синтеза
МИТХТ им. М.В. Ломоносова, Москва, 119571 Россия
[2]Объединенный центр исследований и разработок, Москва, 119333 Россия
**Автор для переписки, e-mail: serafimov@list.ru*

Показана роль характеристики Эйлера в обосновании двух независимых форм правила азеотропии и в исследовании сфер, симплексов и комплексов любых размерностей. Характеристика Эйлера рассмотрена в виде альтернативной суммы элементов симплекса или комплекса и в виде алгебраической суммы топологических индексов особых точек на сфере.

Ключевые слова: *азеотропия, правила азеотропии, топология, индекс Пуанкаре, характеристика Эйлера.*

Введение

Как известно, правила азеотропии широко используются в термодинамико-топологическом анализе динамических систем химической технологии [1]. Суть этих правил заключается в том, что согласно теореме Хопфа [2] алгебраическая сумма особых точек, взятых со знаком их индекса Пуанкаре на сфере любой размерности, равна характеристике Эйлера. Если при этом для представления траекторий развития динамических систем используются концентрационные симплексы, то основная задача получения правил азеотропии решается путем переноса основных свойств динамических систем, размещенных на сфере, на концентрационные симплексы, размерность которых равна размерности сферы. Такой перенос привел к двум независимым формам правил азеотропии.

Первая форма была предложена Л.А. Серафимовым в его работе [3] и развита в последующих публикациях, обобщенных в работе [4]. Вторая форма предложена В.Т. Жаровым [5]. Монография [6] построена, в основном, на использовании именно этой формы правила азеотропии (со ссылками на работы, посвященные как первой, так и второй форме). Впоследствии появились многие работы российских и зарубежных исследователей, ссылки на которые можно найти в обзоре [7].

Первая форма рассматриваемых правил предполагает общий топологический прием отображения результатов, получаемых на сфере, на концентрационный симплекс путем построения из двух симплексов так называемого диэдра, который гомеоморфен сфере [8].

Второй метод, чисто геометрический, основан на том, что исходный концентрационный симплекс входит составляющим в многомерные гомологи октаэдра. Число таких симплексов равно 2^k, где k – компонентность симплекса. Эта форма ограничена только случаем рассмотрения динамической системы в концентрационных симплексах и не распространяется на случаи, когда в системе протекают химические реакции или наблюдаются бифуркации через сложные особые точки, а также в общих случаях, когда вместо концентрационного симплекса динамическая система развивается в комплексе, например, в многоугольнике. Этих недостатков лишена первая форма.

Обе независимые формы в частном случае трехкомпонентных систем сводятся к уравнениям, приведенным в работе Ю.В. Гурикова [9]. В прошлом столетии и за последнее время появилось очень много работ, в которых наряду с дальнейшим развитием теории термодинамико-топологического анализа допускаются неточности, а часто и ошибки [10–20]. Не вдаваясь в подробный анализ этих ошибок и опуская изложение этих работ (что заняло бы много места, выходящего за объем статьи), авторы решили изложить основные свойства топологических инвариантов, используемые явно (и неявно) в правилах азеотропии.

Данная статья посвящена свойствам характеристики Эйлера, которая лежит в основе правил азеотропии и является главным топологическим инвариантом, используемым в этих правилах. В 1758 году крупнейший математик XVIII века Леонард Эйлер опубликовал в записках Петербургской академии наук доказательство соотношения граней, ребер и вершин для двумерного случая:

$$\alpha_0 - \alpha_1 + \alpha_2 = 2, \tag{1}$$

где α_0 - число вершин, α_1 - число ребер, α_2 - число граней любого выпуклого многоугольника.

Дальнейшие аналоги этого уравнения, распространенные на многомерные пространства, а именно: сферы, симплексы и комплексы любых размерностей получили общепринятое название «характеристика Эйлера». Общность этого топологического инварианта строго доказана [21–23] и активно используется в геоморфологии, химии, химической термодинамике и многих других областях знаний и дисциплинах.

В настоящее время характеристика Эйлера «Э» в общем виде записывается так:

$$Э = \alpha_0 - \alpha_1 + \alpha_2 - \alpha_3 + ... + (-1)^m \cdot \alpha_m, \quad (2)$$

где α - элемент, а нижний индекс – размерность этого элемента от 0 до m - максимальной размерности элемента рассматриваемого объекта.

Легко доказать, что пространству любой размерности m можно поставить в соответствие определенную характеристику Эйлера [21], равную $(-1)^m$. Поэтому если размерность m четная, то $Э = +1$, а если нечетная - $Э = -1$.

Рассмотрим несколько примеров.

Прямая как модель одномерного пространства может быть разбита любым количеством точек α_0 на отрезки и два луча, уходящие в бесконечность. Общее уравнение (2) при этом имеет вид:

$$Э = \alpha_0 - \alpha_1. \quad (3)$$

Если число точек обозначить α_0, то общее число отрезков и лучей будет равно $\alpha_1 = \alpha_0 + 1$, следовательно, $Э = -1$.

В случае плоскости уравнение (2) записывается следующим образом:

$$Э = \alpha_0 - \alpha_1 + \alpha_2. \quad (4)$$

Возьмем самый простейший случай разбиения данной плоскости любым количеством параллельных прямых, уходящих, как и плоскость, в бесконечность. Используем для подсчета уравнение $Э = -\alpha_1 + \alpha_2$, так как точек в этом случае нет ($\alpha_0 = 0$). α_1 прямых разобьет плоскость на $\alpha_2 + 1$ областей, две из которых уходят с трех сторон в бесконечность, а все остальные уходят с двух сторон в бесконечность. Очевидно, в этом случае $Э = +1$. Используя уравнение (2) для пространств измерения от 0 (точка) до 10, сведем полученные результаты в табл. 1.

Характеристика Эйлера любого плоского графа, состоящего из точек и ребер и имеющего вид дерева, равна +1 независимо от того, сколько точек и ребер имеет этот граф. Уравнение характеристики Эйлера в этом случае имеет вид:

$$Э = \alpha_0 - \alpha_1 = 1, \quad (5)$$

т.е. всегда число точек будет на единицу больше числа ребер. Для того же плоского графа, который замкнут:

Таблица 1. Характеристика Эйлера пространств различной размерности

Размерность пространств, m	Характеристика Эйлера, Э
0	+1
1	-1
2	+1
3	-1
4	+1
5	-1
6	+1
7	-1
8	+1
9	-1
10	+1

$$Э = \alpha_0 - \alpha_1 = 0. \quad (6)$$

Если же рассмотреть замкнутую фигуру не как граф, а как границу, которая разбивает плоскость на две части – внешнюю и внутреннюю, то в этом случае с учетом только внутренней части имеем:

$$Э = \alpha_0 - \alpha_1 + \alpha_2 = 1. \quad (7)$$

Топологически любая замкнутая фигура на плоскости гомеоморфна кругу, а ее граница гомеоморфна сфере. Таким образом, треугольник, который состоит из трех ребер, имеет характеристику Эйлера, равную нулю, в то же время треугольник как симплекс размерности, равной двум, т.е. взятый с внутренней частью, имеет характеристику Эйлера, равную +1.

Эта закономерность сохраняется для любого симплекса, т.е. характеристика Эйлера не зависит от размерности симплекса и является, таким образом, инвариантом относительно его размерности. В табл. 2 приведены различные элементы симплексов и их характеристика Эйлера, которая всегда равна единице. В качестве примера представлен ряд симплексов от точки до декатопа.

Нетрудно установить, что любая замкнутая фигура разделяет плоскость на две части: внутреннюю и внешнюю. Если учитывать не только внутреннюю часть фигуры, а и внешнюю часть плоскости, уходящую в бесконечность, то получим характеристику Эйлера, равную двум. Итак, пространство второй размерности согласно таблице 1 имеет характеристику Эйлера, равную единице, а разделенное на две части замкнутой кривой это же пространство приобретает характеристику Эйлера, равную двум. При этом характеристика Эйлера границы замкнутого многообразия, размерность которого равна единице, имеет характеристику Эйлера, равную нулю. Этой закономерностью мы воспользуемся несколько позже, пока же отметим, что в общем случае любой выпуклый многомерный многогранник,

Таблица 2. Количество элементов концентрационных симплексов и их характеристика Эйлера

m \ α	α_0	α_1	α_2	α_3	α_4	α_5	α_6	α_7	α_8	α_9	Э
m_0	1										1
m_1	2	1									1
m_2	3	3	1								1
m_3	4	6	4	1							1
m_4	5	10	10	5	1						1
m_5	6	15	20	15	6	1					1
m_6	7	21	35	35	21	7	1				1
m_7	8	28	56	70	56	28	8	1			1
m_8	9	36	84	126	126	84	36	9	1		1
m_9	10	45	120	210	252	210	120	45	10	1	1

который лежит по одну сторону от гиперплоскости, совпадающей с любой его гипергранью, имеет характеристику Эйлера равную единице. Подчеркнем, что здесь учитываются все элементы многогранника, включая его внутреннее пространство. В табл. 3 приведены количества элементов и характеристики Эйлера многомерных кубов.

Таблица 3. Количество элементов многомерных кубов и их характеристика Эйлера

Размерность куба, *n*	Количество элементов куба										Характеристика Эйлера, Э
	α_0	α_1	α_2	α_3	α_4	α_5	α_6	α_7	α_8	α_9	
2	4	4	1								1
3	8	12	6	1							1
4	16	32	24	8	1						1
5	32	80	80	40	10	1					1
6	64	192	240	160	60	12	1				1
7	128	448	672	560	280	84	14	1			1
8	256	1024	1792	1792	1120	448	112	16	1		1
9	512	2304	4608	5376	4032	2016	672	144	18	1	1

Тетраэдр и куб являются комбинаторно-правильными многогранниками, число которых в трехмерном пространстве равно пяти. Они имеют двухмерную поверхность. В число таких многогранников входят помимо тетраэдра и куба октаэдр, додекаэдр и икосаэдр. В табл. 4 представлены элементы и характеристики Эйлера этих многогранников.

Таблица 4. Комбинаторно-правильные многогранники и характеристика Эйлера их поверхности в трехмерном пространстве

№ п.п.	Название многогранника	α_0	α_1	α_2	Э пов-ти
1	Тетраэдр	4	6	4	2
2	Куб	8	12	6	2
3	Октаэдр	6	12	8	2
4	Додекаэдр	12	30	12	2
5	Икосаэдр	20	30	20	2

С учетом внутренней части (α_3) все эти многогранники имеют характеристику Эйлера, равную единице. Многогранники, рассмотренные в табл. 4, вложены в трехмерное пространство. На плоскости им соответствуют многоугольники, число которых бесконечно много. Такие многоугольники содержат разное количество вершин, но все они гомеоморфны одномерной сфере. В трехмерном пространстве располагаются рассмотренные выше многогранники. В четырехмерном пространстве таких комбинаторно-правильных многогранников будет шесть. Это пентатоп, четырехмерный куб, 16-гранник – аналог октаэдра, 24-гранник, 120-гранник и 600-гранник.

В пространстве пяти и более измерений имеется всего три комбинаторно-правильных многогранника. К ним относятся многомерный симплекс, многомерный куб и многомерный гомолог октаэдра [24]. Напомним, что многогранник любой размерности можно топологически отождествить с шаром той же размерности *m*, а можно, используя только поверхность многогранника, отождествить эту поверхность со сферой размерности, на единицу меньше. При этом размерность объектов отождествления будет равна $m-1$. Такая двойственность в определении симплексов, комплексов и особенно многогранников сегодня часто встречается в литературе [25]. В самом деле, например, треугольником и квадратом мы назовем фигуру, вырезанную из картона, и одновременно другую фигуру, полученную из спаянных отрезков проволоки. В первом случае речь идет о симплексе, где учитывается внутренний элемент, а во втором случае внутреннего элемента нет, а есть только граница того, что мы назвали треугольником или квадратом. Вместе с тем рассмотренные фигуры названы одинаково, но характеристики Эйлера у них разные. В первом случае речь идет о некотором многообразии с краем. Во втором случае мы имеем дело с замкнутым многообразием. В топологии эти случаи различимы [26].

Уже отмечалось, что любое многообразие с краем имеет характеристику Эйлера, равную единице. Все эти многообразия имеют границу, которая гомеоморфна сфере той же размерности. Для плоских многообразий эта граница и называется обычно краем. Размерность границы любого многообразия на единицу меньше размерности самого многообразия.

Для двухмерного многообразия с краем учет внешней части пространства увеличивает характеристику Эйлера на единицу, и она равна двум. В общем случае для всех четных пространств характеристика Эйлера всегда будет равна двум, а для нечетных – нулю (добавление единицы к соответствующим строкам табл. 1).Такой результат можно получить, если записать характеристику Эйлера в виде:

$$Э = 1 + (-1)^m . \qquad (8)$$

Пуанкаре [27] установил соответствие между точками сферы, поставленными на гиперплоскости той же размерности, и точками этой гиперповерхности. Такое соответствие наблюдается для всех точек, кроме одной, для которой прямая, определяющая проекцию точки сферы на гиперплоскость, становится параллельной этой гиперплоскости, т.е. когда гиперплоскость уходит в бесконечность.

Так как граница многообразия подобна сфере и имеет размерность, на единицу меньше размерности многообразия, то введем следующий прием представления многообразия и его границы. Так как нами рассматриваются концентрационные симплексы, то введем понятие компонентности любого элемента симплекса, которая на единицу больше его размерности.В самом деле, чистое вещество представлено в концентрационном симплексе точкой, размерность которой равна нулю. Эта точка соответствует одному компоненту. Отрезок размерности 1 отвечает двухкомпонентной (бинарной) смеси. Смесь, состоящая из трех компонентов, представлена треугольником, размерность которого равна двум, и т.д. Такое представление поможет нам избежать некоторых трудностей изложения и восприятия материала в дальнейшем.

Поскольку существует однозначное соответствие точек гиперплоскости и многомерной сферы, очевидно, уравнение (8) так же определяет характеристику Эйлера и замкнутого многообразия, т.е. сферы любой размерности. В общем случае, уравнение, определяющее характеристику Эйлера для замкнутого многообразия, имеет вид [27]:

$$Э = (1 - R) \times \left[1 + (-1)^m\right], \qquad (9)$$

здесь R – род замкнутого многообразия [28], равный числу дыр в этом многообразии.

Уравнение (9), как и все рассуждения до этого, предусматривает, что рассматриваемые объекты, независимо от того, являются ли они многообразием с краем или замкнутым многообразием, являются многообразиями, обладающими свойствами связности и ориентированности [29].

Допустим, в сфере четной размерности вырезан некоторый круг, диаметр которого меньше диаметра сферы (рис. 1а). Характеристика Эйлера в этом случае уменьшится на единицу. В самом деле, вырезанная часть есть многообразие с краем четной размерности *m*, равной размерности сферы. Характеристика Эйлера такого многообразия равна единице. Оставшаяся часть сферы тоже имеет характеристику Эйлера, равную единице, так как является так же многообразием с краем четной размерности. В сумме имеем размерность сферы 2.

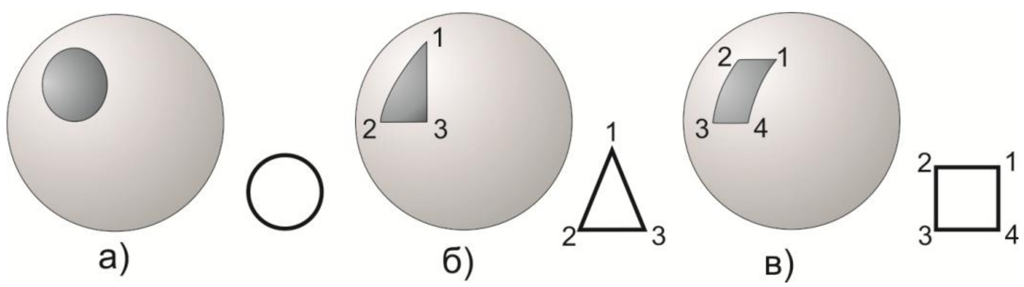

Рис. 1. Получение из сферы четной размерности двух многообразий с краем одинаковой конфигурации: а) двух кругов, б) двух треугольников, в) двух квадратов.

Теперь рассмотрим сферу нечетной размерности и вырежем в ней некоторую замкнутую часть. Мы получим многообразие с краем нечетной размерности, характеристика Эйлера которого будет равна +1.Так как характеристика Эйлера сферы нечетной размерности равна нулю, оставшаяся часть сферы после вырезания будет иметь характеристику Эйлера, равную минус 1.

Вместе с тем ориентация многообразия с краем выявляется тогда, когда сравниваются два разно ориентируемых многообразия, поэтому если рассматривать оставшуюся часть сферы отдельно, не принимая во внимание вырезанную часть, то можно считать ориентацию этой оставшейся части положительной, что и характеризуется табл. 1.

Характеристика Эйлера многообразия с краем не зависит от конфигурации многообразия. В связи с этим, если мы вырезали круглую часть, то оставшаяся часть также будет кругом. Если вырезали треугольник, то оставшаяся часть будет также треугольником (рис. 1б). Если вырезали квадрат, то оставшаяся часть сферы будет квадратом (рис. 1в). В общем случае, вырезая любой многоугольник, мы получим оставшуюся часть в виде многоугольника. Чтобы получить рассмотренные пары фигур, нужно преобразовать оставшуюся часть в плоскую фигуру той же конфигурации (рис. 1). Это понятно, так как многообразие с краем любой размерности, независимо от того, четная эта размерность или нечетная, всегда имеет Э=+1. Вместе с тем, согласно табл. 1, пространство нечетной размерности имеет характеристику Эйлера, равную -1. Отсюда следует, что сфера нечетной размерности состоит из двух полусфер, ориентированных в противоположных направлениях (рис. 2). Так как любой симплекс размерности m гомеоморфен кругу той же размерности, из приведенных рассуждений следует, что любая сфера может быть склеена из двух полусфер. В пространстве четной размерности эти полусферы одной и той же ориентации, а в пространстве нечетной размерности эти полусферы имеют противоположную ориентацию. Поскольку полусфера есть многообразие с краем независимо от ориентации, а симплекс той же размерности также является многообразием с краем, то их характеристики Эйлера равны друг другу в случае как четных, так и нечетных пространств. Следовательно, для четных пространств из двух симплексов одной и той же ориентации можно получить две полусферы и склеить их с получением сферы. Аналогичную процедуру можно провести для сфер нечетной размерности [30].

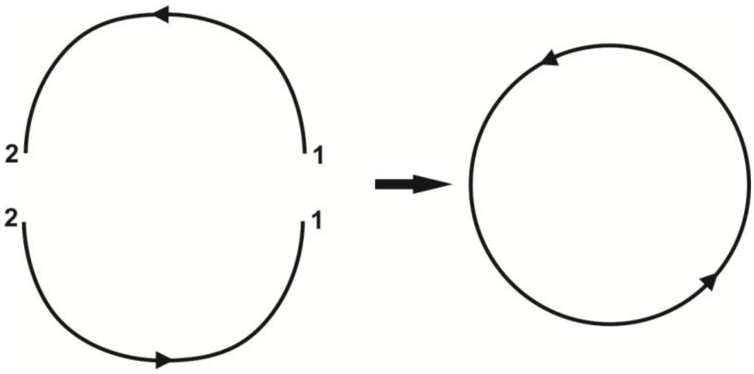

Рис. 2. Получение сферы нечетной размерности из двух нелинейных противоположно ориентированных симплексов путем склеивания их границ.

Если рассматривается поверхность трехмерного замкнутого многообразия, то границей такого многообразия является двухмерная замкнутая поверхность. На рис. 3 представлены некоторые замкнутые поверхности, размерность которых равна двум и которые имеют род, равный нулю (R=0) (рис. 3а), единице (R=1) (рис. 3б) и двум (R=2) (рис. 3в). Это сфера, тор и крендель. В табл. 5 представлены характеристики Эйлера гиперповерхностей разных размерностей и рода [31].

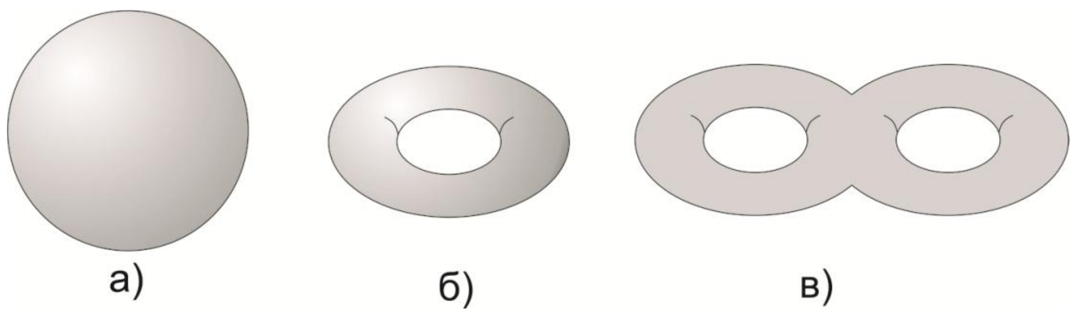

Рис.3. Двумерные многообразия разного рода: а) R=0; б) R=1; в) R=2.

Таблица 5. Характеристика Эйлера для замкнутых многообразий как функция их размерности и рода

m \ R	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
0	2	0	2	0	2	0	2	0	2	0	2
1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
2	2	0	-2	-4	-6	-8	-10	-12	-14	-16	-18
3	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
4	2	0	-2	-4	-6	-8	-10	-12	-14	-16	-18
5	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
6	2	0	-2	-4	-6	-8	-10	-12	-14	-16	-18
7	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
8	2	0	-2	-4	-6	-8	-10	-12	-14	-16	-18
9	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
10	2	0	-2	-4	-6	-8	-10	-12	-14	-16	-18

Сфера является замкнутым многообразием нулевого рода. В правилах азеотропии используются именно сферы, имеющие в зависимости от компонентности исследуемой смеси любую размерность.

Отметим, что характеристика Эйлера подчиняется правилу аддитивности.

В основу правил азеотропии в форме, предложенной Серафимовым, положена идея диэдра. Согласно этой идее, два симплекса размерности m склеиваются по своим границам с получением диэдра, т.е. многогранника с двумя гранями той же размерности, который подобен сфере. Необходимость получения сферы диктуется тем, что на сфере, согласно теореме Хопфа [2, 26], алгебраическая сумма индексов особых точек равна характеристике Эйлера. Для отдельно взятого симплекса получить такой результат не представляется возможным, так как на границе симплекса, как уже отмечалось, всегда имеются особые точки, минимальное число которых равно двум. Определить же индекс многообразия с краем можно только согласно теореме Кронекера-Пуанкаре-Хопфа в случае, когда на границе отсутствуют особые точки. Кстати, Пуанкаре определял характеристику Эйлера как общий индекс сферы [27]. Действительно, для замкнутых многообразий их обобщенный индекс как алгебраическая сумма индексов особых точек и является в рассматриваемом случае характеристикой Эйлера. Разница заключается в том, что в отличие от многообразий с краем, не имеющим особых точек на границе, характеристика Эйлера может быть вычислена независимым путем как функция размерности и рода замкнутой поверхности с помощью уравнения (9).

Если многообразие с краем не имеет особых точек на границе, то характеристика Эйлера, выраженная как алгебраическая сумма индексов особых точек, равна +1 независимо от четности или нечетности пространства. Однако уже выше сказано, что среди диаграмм фазового равновесия, которым и соответствуют правила азеотропии, подобные случаи исключены.

В связи с этим необходимо подробно рассмотреть и уяснить разницу в выражениях характеристики Эйлера сферы как альтернативной суммы отдельных элементов симплекса или комплекса и как алгебраической суммы индексов особых точек на сфере любой размерности. В первом случае, согласно уравнению (2), элементы замкнутого многообразия четной размерности имеют знак плюс, а нечетной - знак минус. Для представления поверхностей замкнутых фигур разного рода удобно использовать многомерные графы, которые в силу гомеоморфности идентичны фигурам, приведенным на рис. 3. На рис. 4 представлены многообразия разного рода, размерность поверхности которых равна двум, но выраженные трехмерными графами. Характеристика Эйлера их поверхности равна соответственно двум, нулю и минус двум.

Во втором случае эти знаковые отличия принимают на себя простые особые точки определенных индексов (+1 или -1) или сложные особые точки, если их индекс отличен от нуля. Таким образом, одну и ту же сферу любой размерности можно выразить или с помощью уравнения (2), используя элементы поверхности соответствующего симплекса, или с помощью уравнения (4), которому соответствует алгебраическая сумма индексов особых точек на поверхности того же симплекса.

Индекс простой особой точки обычно называют индексом Пуанкаре. Он определяется степенью вращения векторного поля равновесных нод в окрестности этой точки, иными словами, каждая простая особая точка располагается в центре замкнутого многообразия. Разработаны различные способы определения индекса Пуанкаре простых особых точек любого типа, в частности, знак индекса равен знаку произведения характеристических корней системы линейного приближения, описывающей поведение системы в окрестности особой точки [32]. Если особая точка является сложной и ее индекс Пуанкаре равен нулю, то она не входит в уравнение правила азеотропии.

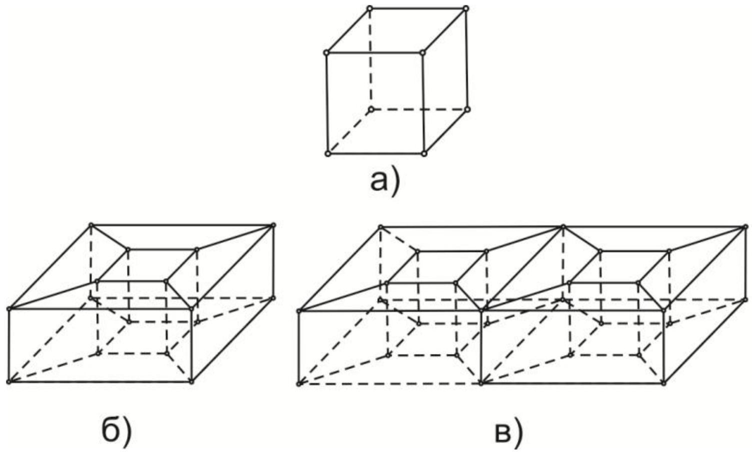

Рис. 4. Конфигурации двумерных многообразий разного рода, выраженные трехмерным графом: а) R=0; б) R=1; в) R=2. Грани в этом случае являются виртуальными и представляют собой замкнутые точками и прямыми фигуры, топологически подобные квадрату.

Сложные особые точки, имеющие индекс, отличный от нуля и не равный единице, знак которого плюс или минус, входят в алгебраическую сумму особых точек с этим индексом, однако, они не встречаются в диаграммах фазового равновесия [4].

Сложные особые точки образуются как в случае бифуркации динамической системы, так и в случае склеивания границы любого концентрационного симплекса. Так, в случае использования уравнения (2) для нечетных пространств необходимы минимум два симплекса противоположной ориентации. На рис. 2 приведен пример склеивания сферы из двух отрезков. При этом получается регулярная система, допускающая циркуляцию на одномерной сфере [33]. Происходит это потому, что в этом случае используются противоположно ориентируемые отрезки (т.е. противоположно ориентируемые одномерные симплексы). В случае любых размерностей склеиваемых симплексов с образованием диэдров ориентация их является одинаковой, так как знаковую нагрузку в случае перехода от числа элементов различной размерности к особым точкам, расположенным на этих элементах, несут индексы особых точек; все элементы в этом случае являются элементами одинаковой ориентации.

Таким образом, уравнения (2) и (4) выражают одну и ту же характеристику Эйлера, но в разных переменных.

Необходимо отметить, что характеристике Эйлера равна и сумма так называемых чисел Бетти [22]. Обсуждение этих чисел, являющихся также топологическими инвариантами, выходит за рамки данной статьи. Вместе с тем, мы упомянули эти числа, чтобы подчеркнуть универсальность характеристики Эйлера как топологического инварианта.

Вернемся к правилу азеотропии в форме Серафимова. Общее уравнение этой формы имеет вид [4]:

$$2\left(N_m^+ - N_m^- + C_m^+ - C_m^-\right) + \sum_{0}^{m-1}\left(N_k^+ - N_k^-\right)^{Г} = 1+\left(-1\right)^m, \qquad (10)$$

$$M = M^{+-} + M^0.$$

Здесь N – число узлов, C – число седел, M – общее число особых точек, M^{+-}- число особых точек, имеющих индекс, равный +1 или -1, M^0 – число особых точек, индекс которых равен нулю:

$$M^0 = C^0 + C^+N^- + C^-N^+ + C^+C^-.$$

Эти точки являются устойчивыми, но сложными и образуются в результате склеивания двух симплексов с образованием диэдра [3, 34].

В табл. 6 приведены количество элементов диэдров разной размерности и характеристика Эйлера их границы $Э_г$.

Использование системы уравнений (10) для определения фазовых портретов различной размерности показало их точность и обоснованность. Более того, данные уравнения применены для описания не только симплексов [6, 35], но и комплексов любой размерности, а также фазовых портретов, которые содержат сложные особые точки разных типов и кратности [36]. Таким образом, рассматриваемая форма носит универсальный характер и может с успехом использоваться в бифуркационных состояниях исследуемой диаграммы, т.е. в случае, когда фазовый портрет содержит граничные тангенциальные азеотропы первой и второй кратности [36, 37].

Рассмотрим более подробно форму правила азеотропии, предложенную Жаровым, так как ее использование и попытки дальнейшего развития в ряде случаев связаны с неточностями и ошибками. Последнее, по-видимому, можно объяснить следующим. С одной стороны, именно данная форма подробно изложена в монографии [6], в то время как форма Серафимова в ней

Таблица 6. Количество элементов диэдров разной размерности и характеристика Эйлера их границы

Базовый симплекс	α_0	α_1	α_2	α_3	α_4	α_5	α_6	α_7	α_8	α_9	$Э_г$
Точка	2										2
Отрезок	2	2									0
Треугольник	3	3	2								2
Тетраэдр	4	6	4	2							0
Пентатоп	5	10	10	5	2						2
Гексатоп	6	15	20	15	6	2					0
Гептатоп	7	21	35	35	21	7	2				2
Октатоп	8	28	56	70	56	28	8	2			0
Нонатоп	9	36	84	126	126	84	36	9	2		2
Декатоп	10	45	120	210	252	210	120	45	10	2	0

представлена весьма кратко, хотя и с большим количеством ссылок на соответствующие публикации. С другой стороны, представляется заманчивым, что форма Жарова оперирует всем набором особых точек, имеющихся в исходном симплексе.

Форма Жарова, в отличие от формы Серафимова, базируется на замечательном свойстве октаэдра и его многомерных гомологов. Если рассматривается концентрационный симплекс размерности m как многообразие с краем, то, сопоставляя этот симплекс с гомологом октаэдра, поверхность которого имеет ту же размерность, можно убедиться, что общее количество элементов симплекса компонентности k, умноженное на коэффициент повторяемости, равный 2^k, будет равно элементам той же компонентности гомолога октаэдра. В работе [38] введено понятие замкнутого многообразия Θ, или сокращенно Θ-многообразия, которое включает все многомерные гомологи октаэдра и сам октаэдр. Таким образом, в форме правила азеотропии Жарова использованы Θ-многообразия. В табл. 7 приведены Θ-многообразия различной компонентности для каждого исходного концентрационного симплекса. Там же приведена характеристика Эйлера гомолога октаэдра. При этом приведены числовые значения $\dfrac{\alpha_k^\Theta}{\alpha_k^c}$, позволяющие вычислить коэффициенты повторяемости.

Таблица 7. Характеристика Эйлера гомологов октаэдра и отношение числа их элементов соответствующей размерности к числу элементов базового симплекса той же размерности

Базовый симплекс	$\alpha_0^\Theta/\alpha_0^c$	$\alpha_1^\Theta/\alpha_1^c$	$\alpha_2^\Theta/\alpha_2^c$	$\alpha_3^\Theta/\alpha_3^c$	$\alpha_4^\Theta/\alpha_4^c$	$\alpha_5^\Theta/\alpha_5^c$	$\alpha_6^\Theta/\alpha_6^c$	$\alpha_7^\Theta/\alpha_7^c$	$\alpha_8^\Theta/\alpha_8^c$	$\alpha_9^\Theta/\alpha_9^c$	$Э_о$
Точка	2/1										1
Отрезок	4/2	4/1									1
Треугольник	6/3	12/3	8/1								1
Тетраэдр	8/4	24/6	32/4	16/1							1
Пентатоп	10/5	40/10	80/10	80/5	32/1						1
Гексатоп	12/6	60/15	160/20	240/15	192/6	64/1					1
Гептатоп	14/7	84/21	280/35	560/35	672/21	448/7	128/1				1
Октатоп	16/8	112/28	448/56	1120/70	1792/56	1792/28	1024/8	256/1			1
Нонатоп	18/9	144/36	672/84	2016/126	4032/126	5376/84	4608/36	2304/9	512/1		1
Декатоп	20/10	180/45	960/120	3360/210	8064/252	13440/210	15360/120	11520/45	4608/45	1024/1	1
Коэффициент повторяемости	2	4	8	16	32	64	128	256	512	1024	

Сравнение с элементами диэдров (табл. 6) показывает, что число элементов Θ-многообразия намного больше числа элементов соответствующего диэдра. В обеих формах размерность сферы всегда равна размерности симплекса. В силу специфического метода переноса результатов со сферы на симплекс в уравнении Жарова особую роль играют коэффициенты повторяемости 2^kэлементов концентрационного симплекса в октаэдре или его многомерных гомологах. Само уравнение в этом случае имеет вид:

$$\sum_1^n 2^k\left(N_k^+ - N_k^- + C_k^+ - C_k^-\right) = 1 + (-1)^{n-1}, \qquad (11)$$

где k - компонентность элемента, на котором расположена простая особая точка; n – наивысшая компонентность рассматриваемой смеси.

Уравнение Жарова допускает сокращения на 2 независимо от того, является ли величина n-1четной или нечетной.

В этом случае уравнение (11) переходит в следующее уравнение:

$$\sum_0^m 2^{k-1}\left(N_{k-1}^+ - N_{k-1}^- + C_{k-1}^+ - C_{k-1}^-\right) = \\ = \frac{1+(-1)^{n-1}}{2}. \qquad (12)$$

Для четных пространств правая часть уравнения (12) будет равна единице, а для нечетных – нулю.

Уравнение Жарова в силу своей структуры применимо строго к определению числа и типов особых точек в симплексах различной размерности. Оно не может быть в общем случае использовано для так называемых концентрационных комплексов, диаграммы которых соответствуют системам с химической реакцией и, в частности, к так называемым взаимным системам.

Применение этого уравнения становится проблематичным также в случае тангенциальных азеотропов второй кратности даже в случае трехкомпонентных смесей, не говоря уже о смесях более высокой компонентности. В то же время уравнение в форме Серафимова описывает, как уже было сказано, эти сложные случаи.

В работе [39] была предпринята попытка получить аналог уравнения Жарова для комплексов различной размерности. Для этого был осуществлен переход от уравнения Серафимова к уравнению Жарова с помощью уравнения, предложенного в работе [40], которое связывает эти две независимые формы правил азеотропии. При переходе было получено уравнение для квадрата и многомерных кубов.

Более того, были проанализированы различные многоугольники Пуанкаре с числом вершин от трех (реализуется треугольник) до 10. Полученные результаты приведены в табл. 8. Как видно, правая часть уравнения является функцией рода поверхности R, т.е. равна $(1-R)\times 2$. Род поверхности определяется, в свою очередь, соотношением (13):

$$R=\alpha_0-3. \qquad (13)$$

При этом все многоугольники и поверхности соответствующего рода имеют размерность, равную двум. Вместе с тем, уравнение правил азеотропии в форме Серафимова, в отличие от полученного уравнения с сохранением формы Жарова, где замкнутое многообразие изменяет свой род, дает в правой части неизменно характеристику Эйлера, равную двум.

Таблица 8. Уравнения алгебраической суммы индексов особых точек в зависимости от числа вершин многоугольника *A* по уравнению Жарова

Число вершин многоугольника, *A*	Род поверхности, R	Уравнение алгебраической суммы индексов Пуанкаре особых точек
3	0	$\sum_{k=0}^{k=2} 2^k\left(N_{k-1}-C_{k-1}^{-}\right)=2$
4	1	$\sum_{k=0}^{k=2} 2^k\left(N_{k-1}-C_{k-1}^{-}\right)=0$
5	2	$\sum_{k=0}^{k=2} 2^k\left(N_{k-1}-C_{k-1}^{-}\right)=-2$
6	3	$\sum_{k=0}^{k=2} 2^k\left(N_{k-1}-C_{k-1}^{-}\right)=-4$
7	4	$\sum_{k=0}^{k=2} 2^k\left(N_{k-1}-C_{k-1}^{-}\right)=-6$
8	5	$\sum_{k=0}^{k=2} 2^k\left(N_{k-1}-C_{k-1}^{-}\right)=-8$
9	6	$\sum_{k=0}^{k=2} 2^k\left(N_{k-1}-C_{k-1}^{-}\right)=-10$
10	7	$\sum_{k=0}^{k=2} 2^k\left(N_{k-1}-C_{k-1}^{-}\right)=-12$

В настоящее время закономерности, полученные в работе [39], носят характер гипотезы, так как пока нет строгих доказательств существования многообразий разного рода, выступающих в качестве Θ-многообразий различных многоугольников.

Заключение

Решение ряда принципиальных вопросов создания технологий ректификационного разделения смесей напрямую связано со структурой концентрационного пространства, которая позволяет выделить области развития процесса ректификации, выявить предельно возможные составы продуктовых фракций и разные последовательности их выделения и в конечном итоге предложить оптимальную схему, состоящую из последовательности ректификационных колонн непрерывного действия.

Структура концентрационного пространства многокомпонентной системы, в свою очередь, определяется правилами азеотропии, которые представляют фундаментальные уравнения нелокальных закономерностей фазовых диаграмм и являются составляющей термодинамико-топологического анализа (ТТА) фазовых диаграмм. Необходимость создания ТТА (в 1960-е годы) была вызвана тем, что решить обозначенные выше проблемы только физико-химическими методами практически оказалось невозможным. Термодинамико-топологический анализ является ветвью физико-химического анализа, предложенного Н.С. Курнаковым, и дальнейшее его развитие на современном этапе требует определенных знаний в области топологии, часть из которых и изложена в настоящей работе.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект № 13-03-00222-а).

ОБОЗНАЧЕНИЯ:

A – число вершин многоугольника; C – число седел; k – компонентность симплекса; M – общее число особых точек; M^{+-}- число особых точек, имеющих индекс, равный +1 или -1; M^0 – число особых точек, индекс которых равен нулю; N – число узлов; n – общее число компонентов смеси; R – род замкнутого многообразия; α – число элементов объекта одинаковой размерности (α_0 - число вершин, α_1- число ребер, α_2- число граней любого выпуклого многоугольника); *Э* – характеристика Эйлера.

ИНДЕКСЫ:

k – компонентность симплекса; *m* – максимальная размерность элемента рассматриваемого объекта; г – граница.

ЛИТЕРАТУРА:

1. Серафимов Л.А. Термодинамико-топологический анализ и проблемы разделения многокомпонентных полиазеотропных смесей // Теор. основы хим. технологии. 1987. Т. 21. № 1. С. 74–85.

1. Hopf H. Vektorfelder in *n*-dimensionalen Mannigfaltigkeiten // Math. Ann. 1927. V. 96. P. 225–249.

2. Серафимов Л.А. Правило азеотропии и классификация многокомпонентных смесей III. Распределение особых точек на диаграммах фазового равновесия жидкость-пар в четырех-компонентных смесях // Журн. физ. химии. 1968. Т. 42. № 1. С. 252–256.

3. Серафимов Л.А. Термодинамико-топологический анализ диаграмм гетерогенного равновесия многокомпонентных смесей // Журн. физ. химии. 2002. Т. 76. № 8. С. 1351–1365.

4. Жаров В.Т. Термодинамико-топологическое исследование открытых фазовых процессов и нелокальных закономерностей диаграмм фазового равновесия в гетерогенных системах различного типа: автореф. дис. … д-ра хим. наук. Л., 1969. 22 с.

5. Жаров В.Т., Серафимов Л.А. Физико-химические основы дистилляции и ректификации. М.: Химия, 1975. 240 с.

6. Kiva V.N., Hilmen E.K., S. Skogestad. Azeotropic phase equilibrium diagrams: a survey // Chem.Eng.Sci. 2003. V. 58. № 10. P. 1903–1953.

7. Серафимов Л.А. Правило азеотропии и классификация многокомпонентных смесей. XII. Различные формы обобщенного правила азеотропии // Журн. физ. химии. 1971. Т. 45. № 12. С. 3022–3026.

8. Гуриков Ю.В. Некоторые вопросы структуры диаграмм двухфазного равновесия жидкость-пар тройных гомогенных растворов // Журн. физ. химии. 1958. Т. 32 № 9. С. 1980–1996.

9. Коган В.Б. Азеотропная и экстрактивная ректификация. Л.: Химия. 1971. 432 с.

10. Бабурина Л.В., Платонов В.М., Слинько М.Г. Термодинамическое исследование фазовых диаграмм трехкомпонентных азеотропных смесей // Докл. АН СССР. 1983. Т. 269. № 1. С. 129–132.

11. Doherty M.F., Caldarola G.A. Design and synthesis of homogeneous azeotropic distillations. 3. The sequencing of columns for azeotropic and extractive distillation // Ind. Eng. Chem. Fundam. 1985. V. 24. P. 474–485.

12. Николаев Е.С., Платонов В.М. Исследование азеотропных систем с особыми точками различных порядков // Хим. пром. 1983. № 8.С. 496–500.

13. Николаев Е.С., Платонов В.М., Слинько М.Г. Универсальность правила азеотропии (метод анализа тонких структур) // Докл. АН СССР. 1982. Т. 226. № 1. С. 187–191.

14. Doherty M.F., Perkins J.D. On the dynamics of distillation processes. III. The topological structure of ternary residue curve maps // Chem. Eng.Sci. 1979. V. 34. № 12. P. 1401–1414.

15. Платонов В.М., Кац Г.А., Морозова Л.В.Описание паро-жидкостного равновесия гомогенных растворов и определение структуры фазовых диаграмм по характеристикам бинарных составляющих смеси // Теор. основы хим. технологии. 1971. Т. 5. № 3. С. 368–372.

16. Бабурина Л.В., Платонов В.М., Слинько М.Г. Исследование классификации диаграмм жидкость-пар гомоазеотропных смесей // Теор. основы хим. технологии. 1988. Т. 22. № 4. С. 535–542.

17. Doherty M.F., Perkins J.D. On the dynamics of distillation processes. I. The simple distillation of multicomponent non-reacting, homogeneous liquid mixtures // Chem. Eng. Sci. 1978. V. 33. № 3. P. 281–301.

18. Doherty M.F., Perkins J.D. On the dynamics of distillation processes. II. The simple distillation of model solutions // Chem. Eng. Sci. 1978. V. 33. № 5. P. 569–578.
19. Barbosa D., Doherty M.F. Theory of phase diagrams and azeotropic conditions for two-phase reactive systems // Proc. R. Soc. Lond. A. 1987. № 413. P. 443–458.
20. Шашкин. Ю.А. Эйлерова характеристика. М.: Наука. 1984. 96 с.
21. Понтрягин Л.С. Основы комбинаторной топологии. М.: Наука. 1976. 136 с.
22. Болтянский В.Г., Ефремович В.А. Наглядная топология. М.: Наука. 1982. 160 с.
23. Борисович Ю.Г., Близняков Н.М., Израилевич Я.А., Фоменко Т.Н. Введение в топологию. М.: Наука. 1995. 416 с.
24. Александров П.С., Маркушевич А.И., Хинчин А.Я. Энциклопедия элементарной математики: в 5 кн. Книга четвертая: Геометрия. М.: Госиздат физ.-мат. лит. 1963. 568 с.
25. Милнор Дж., Уоллес А. Дифференциальная топология. Начальный курс: пер. с англ. / под ред. Д.В. Аносова. М.: Мир. 1972. 280 с.
26. Пуанкаре А. О кривых, определяемых дифференциальными уравнениями: пер. с франц. / под ред. А.А. Андронова. М.: Гостехиздат, 1947. 392 с.
27. Мантуров О.В., Солнцев Ю.К., Соркин Ю.И., Федин Н.Г. Толковый словарь математических терминов: пособие для учителей. М.: Просвещение. 1965. 540 с.
28. Гаврилов Н.И. Методы теории обыкновенных дифференциальных уравнений. М.: Высшая школа, 1962. 259 с.
29. Фролкова А.В., Серафимов Л.А., Семин Г.А. Характеристика Эйлера как инвариант структуры диаграмм состояния многокомпонентных многофазных систем // Теор. основы хим. технологии. 2014. Т. 48. № 2. С. 173–181.
30. Серафимов Л.А., Фролкова А.В. Закон алгебраической суммы стационарных точек диаграмм фазового равновесия жидкость-пар многокомпонентных смесей // Теор. основы хим. технологии. 2013. Т. 47. № 6. С. 680–689.
31. Красносельский М.А., Забрейко П.П. Геометрические методы нелинейного анализа. М.: Наука. 1975. 511 с.
32. Аминов Ю.А. Геометрия векторного поля. М.: Наука. 1990. 208 с.
33. Серафимов Л.А. Правило азеотропии и классификация многокомпонентных смесей.VI. Смеси, содержащие n компонентнов // Журн. физ. химии. 1969. Т. 43. № 7. С. 1753–1758.
34. Серафимов Л.А. Правило азеотропии и классификация многокомпонентных смесей. V. Анализ диаграмм фазового равновесия жидкость-пар четырехкомпонентных смесей // Журн. физ. химии. 1969. Т. 43. № 5. С. 1343–1346.
35. Серафимов Л.А. Правило азеотропии и классификация многокомпонентных смесей. X. Двукратно тангенциальные азеотропы // Журн. физ. химии. 1971. Т. 45. № 7. С. 1620–1625.
36. Серафимов Л.А., Челюскина Т.В. Сложные особые точки диаграмм векторных полей нод трехкомпонентных смесей // Теор. основы хим. технологии. 2005. Т. 39. № 6. С 634–643.
37. Серафимов Л.А. Свойства Θ-многообразий и одна из форм правила азеотропии // Теор. основы хим. технологии. 2000. Т. 34. № 5. С. 508–513.
38. Серафимов Л.А., Благов С.А. Правила алгебраической суммы индексов особых точек для комплексов различной размерности // Теор. основы хим. технологии. 2001. Т. 35. № 1. С. 42–48.
39. Серафимов Л.А., Бабич С.В. Новые формы правила азеотропии // Теор. основы хим. технологии. 1996. Т. 30. № 2. С. 140–150.

THE EULER CHARACTERISIC AS A TOPOLOGICAL INVARIANT OF THE AZEOTROPY RULES

L.A. Serafimov[1,@], A.K. Frolkova[1], L.A. Khakhin[2]

[1]*M.V. Lomonosov Moscow State University of Fine Chemical Technologies, Moscow, 119571 Russia*

[2]*«United Research and Development Centre», Moscow, 119333 Russia*

[@]*Corresponding author e-mail: serafimov@list.ru*

The role of the Euler characteristic inconfirmation of two independent forms of azeotropy rule and in studyingof spheres, simplexes and complexes of any dimension was shown. The Euler characteristic was considered as an alternative sum of simplex or complex elements and as the algebraic sum of topological indices of singular points on the sphere.

Keywords: *azeotropy, azeotropy rules, topology, Poincare index, Euler characteristic.*