



**Геологический институт Кольского НЦ РАН
Комиссия по работе с молодёжью РАН
Кольское отделение РМО**

**Труды VIII Всероссийской научной школы
«Математические исследования
в естественных науках»**

Апатиты, 15-16 октября 2012 г.

*Геологический институт КНЦ РАН
Комиссия по работе с молодёжью РАН
Кольское отделение РМО*

*Труды VIII Всероссийской
научной школы
“Математические исследования
в естественных науках”*

Апатиты, 15-16 октября 2012 г.



Апатиты, 2012

УДК 548.12 + 549.21 + 552.122

ISSN 2074-2487

Математические исследования в естественных науках. Труды VIII Всероссийской научной школы. Апатиты, Геологический институт Кольского НЦ РАН, Кольское отделение РМО, 15-16 октября 2012 г. / Ред. Ю.Л. Войтеховский. – Апатиты: Изд-во К & М, 2012. - 116 с.

Сборник содержит материалы ежегодной Всероссийской научной школы «Математические исследования в естественных науках», проводимой Геологическим институтом Кольского НЦ РАН и Кольским отделением РМО и объединяющей специалистов, творчески применяющих математические методы в естественных науках. VIII школа охватила пленарные и молодёжные доклады о применениях классических и эвристических методов для описания структур и процессов в геологии, геофизике и биологии. Издание представляет интерес для геологов широкого профиля, геофизиков, биологов, а также аспирантов и студентов соответствующих специальностей.

Научное издание: рекомендовано к печати Учёным советом Геологического института Кольского НЦ РАН и Советом Кольского отделения РМО

Школа поддержана Комиссией РАН по работе с молодёжью

Электронная версия: <http://geoksc.apatity.ru>

Научный редактор: проф., д.г.-м.н. Ю.Л. Войтеховский
Компьютерный дизайн: Л.Д. Чистякова, Н.А. Мансурова
Художественное оформление А.И. Маркова
Фоторепортаж: Н.А. Мансурова

© Учреждение Российской академии наук Геологический институт
Кольского научного центра РАН, 2012

© Российское минералогическое общество, Кольское отделение, 2012

© Коллектив авторов, 2012

Содержание

Предисловие редактора 5

МАТЕМАТИЧЕСКИЕ ИССЛЕДОВАНИЯ В ГЕОЛОГИИ

Амосова О.Е. Исследование ёмкостных и структурных характеристик трёхразмерных сыпучих смесей компьютерным моделированием 7

Войтеховский Ю.Л. Новейшие результаты о простейших полиэдрах с заданной комбинаторной симметрией 13

Войтеховский Ю.Л. Частично антисимметричные по А.В. Шубникову выпуклые полиэдры. 17

Малеев А.В., Рау В.Г., Шутов А.В. Построение квазипериодических мозаик с помощью Фурье-образов предфракталов 21

Пушкин А.А., Белов Р.В., Римкевич В.С. Автоматизация расчётов кинетических характеристик твёрдофазных физико-химических процессов 26

Слуковский З.И., Бубнова Т.П., Рыбаков Д.С. Графическое представление результатов гранулометрического анализа глинисто-алеврито-песчаных отложений малой городской реки 31

Смирнова Н.Л. О структуре формул составов 34

Степенщиков Д.Г. Динамика реальных форм кристаллов на примере октаэдра и ромбододекаэдра. 38

Талис А.Л. Кластерная сборка 3-мерных упорядоченных тетраэдрических (тетракоординированных) структур и 2-мерная проекция 8-мерной системы векторов E_8 44

Шутов А.В., Петросян Ж.Д. Математическое моделирование дифракции одномерных квазипериодических структур 55

Ярыгин О.Н. Подходы к проблеме реализуемости последовательности чисел как гранного символа полиэдра 59

МАТЕМАТИЧЕСКИЕ ИССЛЕДОВАНИЯ В ГЕОФИЗИКЕ

Ахметов О.И., Мингалёв И.В., Мингалёв О.В., Федоренко Ю.В.,

Мингалёв В.С. Численная модель распространения ультра- и сверхнизкочастотных сигналов в волноводе земля – ионосфера, учитывающая тензорную проводимость ионосферы 68

Дёмин В.И., Черноус П.А. Об измеренных и скорректированных значениях атмосферных осадков в Арктике 72

Мельник М.Н., Мингалёв О.В., Мингалёв В.С., Мингалёв И.В. Численное моделирование мелкомасштабных бесстолкновительных процессов в плазме F-слоя ионосферы методом макрочастиц при помощи новой схемы с 4-м порядком точности	81
Орлов К.Г., Мингалёв И.В., Родин А.В. Численная модель общей циркуляции атмосферы Венеры с учётом рельефа поверхности	82

МАТЕМАТИЧЕСКИЕ ИССЛЕДОВАНИЯ В БИОЛОГИИ

Денисов Д.Б. Обзор некоторых критериев оценки биологического разнообразия	90
Михайлов Р.Е. Математические методы в биологии применительно к малым выборкам	100
ФОТОРЕПОРТАЖ	104
О НАС ПИШУТ	114

ПРЕДИСЛОВИЕ РЕДАКТОРА

15-16 октября 2012 г. в Геологическом институте КНЦ РАН прошла VIII Всероссийская научная школа «Математические исследования в естественных науках». Финансовая помощь мероприятию оказала Комиссия Президиума РАН по работе с молодёжью. Информационная и организационная поддержка школе оказана Кольским отделением РМО и Комиссией по истории РМО. В течение двух дней на трёх секциях «Математические исследования в геологии», «Математические исследования в геофизике» и «Математические исследования в биологии» были заслушаны 12 устных докладов, представленных научными сотрудниками и аспирантами институтов РАН и университетов из Апатитов, Благовещенска, Владимира, Кировска, Москвы, Петрозаводска, Сыктывкара, Тольятти. Тем самым подтверждён всероссийский статус школы. Её работу завершила активная дискуссия. Как и в предыдущие годы, школа была ориентирована на поиск универсальных, междисциплинарных, пограничных подходов в естественных науках. Именно поэтому в большинстве докладов с разных сторон рассматривались вопросы классификаций, описания сложных природных систем, их математического моделирования, в том числе динамического.

Решение конференции

1. Считать VIII Всероссийскую научную школу «Математические исследования в естественных науках» проведенной на высоком научном и организационном уровне.
2. Выразить благодарность Комиссии Президиума РАН по работе с молодёжью за ежегодную поддержку школы.
3. Издать Труды VIII Всероссийской научной школы «Математические исследования в естественных науках» в виде сборника статей.
4. Опубликовать информацию о VIII Всероссийской научной школе «Математические исследования в естественных науках» на сайтах Геологического института КНЦ РАН и Российского минералогического общества, а также в газете «Хибинский вестник» (Кировск – Апатиты).
5. Провести IX Всероссийскую научную школу «Математические исследования в естественных науках» в Геологическом институте КНЦ РАН в октябре 2013 г.

Во исполнение п. 3 решения конференции издан настоящий сборник статей по материалам докладов, представленных на школе. Даже в неполном виде он передаёт широту охваченных проблем. Надеюсь, он будет полезен читателям и привлечёт к участию в последующих школах молодых учёных, тяготеющих к точному знанию в естественных науках.

Директор Геологического института КНЦ РАН
председатель Кольского отделения РМО
председатель Комиссии по истории РМО
проф., д.г.-м.н.

Ю.Л. Войтеховский

**МАТЕМАТИЧЕСКИЕ ИССЛЕДОВАНИЯ
В ГЕОЛОГИИ**



ИССЛЕДОВАНИЕ ЁМКОСТНЫХ И СТРУКТУРНЫХ ХАРАКТЕРИСТИК ТРЁХРАЗМЕРНЫХ СЫПУЧИХ СМЕСЕЙ КОМПЬЮТЕРНЫМ МОДЕЛИРОВАНИЕМ

Амосова О.Е.

Институт геологии Коми НЦ УрО РАН, Сыктывкар, kramosova@geo.komisc.ru

Проведено компьютерное моделирование трёхразмерных насыщенных средней и мелкой фракциями частиц сыпучих смесей. Вычислены ёмкостные и структурные характеристики модельных смесей. Проведён сравнительный анализ полученных характеристик моно- и трёхразмерных насыщенных смесей. Выявлены закономерности изменения ёмкостных и структурных характеристик смесей при изменении отношения размеров крупных и средних частиц.

Применение компьютерного моделирования для получения сыпучих смесей разного гранулометрического состава позволяет предсказывать структурные и ёмкостные свойства минерального сырья и имеет большое значение в различных областях науки и отраслях промышленности от обработки проб полезных ископаемых до получения композитных материалов с каркасом сыпучих смесей.

Для исследования ёмкостных и некоторых структурных характеристик сыпучих материалов мы прибегли к компьютерному моделированию. Ранее нами было проведено компьютерное моделирование моно-, двух- и трёхразмерных насыщенных смесей [1, 2, 3]. Последние были получены с учётом пористости только моноразмерной смеси.

В статье приведены результаты компьютерного моделирования трёхразмерных смесей, полученных с учётом значений пористости моно- и двухразмерных насыщенных мелкой фракцией смесей сферических частиц.

Для моделирования этих трёхразмерных насыщенных средней и мелкой фракциями смесей вычисляли n_1 – количество крупных d_K , n_2 – количество средних d_C , n_3 – количество мелких d_M частиц, необходимые для заполнения контейнера определенного объема V_K , используя, рассчитанные нами, средние значения пористости моноразмерной смеси и двухразмерных насыщенных мелкой фракцией смесей с соответствующими значениями отношения диаметров крупных и мелких частиц, изменяющимися от 2 до 6, следующим образом:

$$n_1 = V_K \cdot 0.58 / \left(\frac{4}{3} \pi \left(\frac{d_K}{2} \right)^3 \right), n_2 = V_K \cdot 0.42 \cdot 0.58 / \left(\frac{4}{3} \pi \left(\frac{d_C}{2} \right)^3 \right), n_3 = V_K \cdot k_{пор} \cdot 0.58 / \left(\frac{4}{3} \pi \left(\frac{d_M}{2} \right)^3 \right)$$

где $k_{пор}$ – доля объёма пустот (пор) двухразмерной насыщенной смеси частиц d_K и d_C .

Компьютерное моделирование и расчёт характеристик смесей проводились как на одном ПК AMD Athlon XP 2800+ 1Гб ОЗУ, так и на вычислительном кластере Коми научного центра [4, 5]. Число частиц в модельных смесях варьировалось примерно от 254500 до 295000. Размеры крупных d_K и мелких d_M частиц постоянны (отношение $d_K/d_M=12$), размер средних частиц d_C – величина переменная. Чтобы не «привязываться» к определённому размеру частиц, мы оперировали отношением d_K/d_C , которое варьировалось от 2 до 6. Для каждой гранулометрической характеристики проводилось 8 экспериментов.

Пористость образца трёхразмерной насыщенной смеси строго возрастает от 24.9% до 28.5% с увеличением отношения d_K/d_C от 2 до 6, т.е. с уменьшением размера частиц средней фракции (рис. 1). Эта же закономерность характерна и для образца каркаса смеси: с увеличением d_K/d_C пористость возрастает с 25.3% до 30.6%. Самой плотной (пористость 24.9%) является трёхразмерная насыщенная смесь при отношениях $d_K/d_C=2$ и $d_C/d_M=6$ и она же имеет самый плотный каркас (пористость 25.3%). Самая рыхлая трёхразмерная насыщенная смесь (пористость 28.5%) получена для отношений $d_K/d_C=6$ и $d_C/d_M=2$ и она же имеет самый рыхлый каркас (пористость 30.6%). Трёхразмерные насыщенные смеси значительно плотнее моноразмерной смеси.

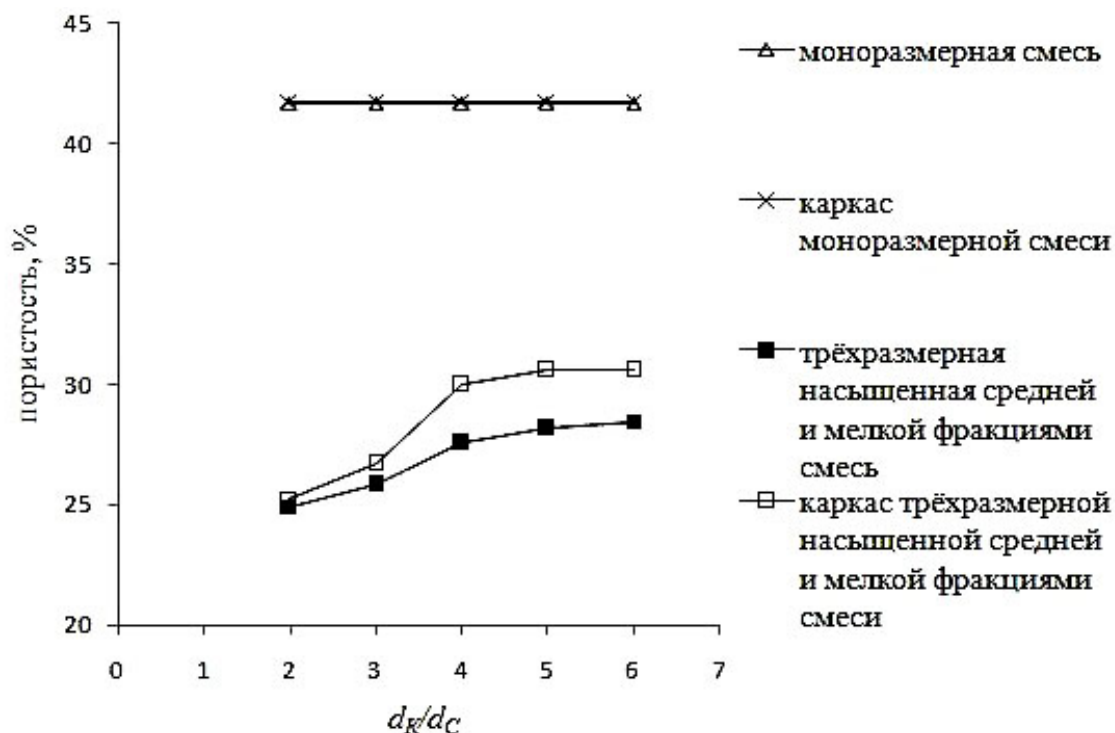


Рис. 1. Изменения значений пористости образцов трёхразмерной насыщенной смеси и её каркаса при изменении отношения размеров крупных d_K и средних d_C частиц.

В результате исследования принадлежности частиц трёхразмерной смеси её каркасу и матриксу установлено, что все крупные частицы образца

трёхразмерной смеси принадлежат каркасу. Доля средних частиц в каркасе образца от всех средних частиц образца велика – не менее 98% и только для смеси с отношением $d_K/d_C=2$ все средние частицы образца являются частицами каркаса. Доля мелких частиц в каркасе образца от всех мелких частиц образца тоже значительна – от 82% до, почти, 98%. Наибольшая доля мелких частиц в каркасе образца (98 %) наблюдалась у самой плотной трёхразмерной смеси (отношение $d_K/d_C=2$). Доля частиц каркаса в образце от всех частиц образца значительна и варьирует от 83% до 97.8%. От 14% до 20 % объёма каркаса образца трёхразмерной смеси составляют мелкие частицы, причём этот показатель уменьшается с увеличением отношения d_K/d_C . На средние частицы приходится от 22% до 24% объёма каркаса образца. Крупные частицы составляют от 57% до 62% объёма каркаса образца, причём этот показатель возрастает с увеличением отношения d_K/d_C . Доля объёма частиц каркаса в образце от объёма всех частиц образца значительна для всех смесей (96.7% – 99.5%). Максимум наблюдается для самой плотной смеси ($d_K/d_C=2$). Исходя из полученных данных, самой плотной и самой прочной из модельных трёхразмерных смесей, при условии, что прочными являются частицы, составляющие её, является смесь с отношением $d_K/d_C=2$. Разность соответствующих значений пористости образца каркаса и образца смеси в целом линейно зависит от доли объёма частиц каркаса образца от объёма всех частиц образца: чем больше доля объёма каркаса, тем меньше разность. Зная пористость образца и долю объёма каркаса в образце, можно прогнозировать пористость каркаса образца.

Среднее координационное число (КЧ) частиц образца трёхразмерной смеси варьирует около числа 6 (рис. 2). То же наблюдается для среднего КЧ каркаса смеси. Но оба они – и среднее КЧ образца смеси в целом, и среднее КЧ образца каркаса – не превосходят средних КЧ образца и образца каркаса моноразмерной смеси, соответственно.

Максимальные КЧ образцов смеси в целом и каркаса в отдельности убывают с увеличением d_K/d_C . Минимальные КЧ частиц образца смеси в целом и образца каркаса в отдельности равны 3 и 4, соответственно, во всех экспериментах. Максимальное КЧ матрикса увеличивается с 5.75 до 12.25 при увеличении d_K/d_C . Матрикс всех трёхразмерных смесей содержит частицы, которые изолированы от остальных частиц матрикса и контактируют только с частицами каркаса или, другими словами, располагаются в порах образованных частицами каркаса. КЧ (максимальное, минимальное и среднее) крупных, средних и мелких частиц уменьшаются с увеличением отношения d_K/d_C .

Заметим, что хотя средние КЧ крупных, средних и мелких частиц убывают с увеличением отношения d_K/d_C и, казалось бы, что и среднее КЧ частиц образца смеси в целом должно существенно уменьшиться, но этого, тем не менее, не происходит. Это объясняется тем, что при увеличении отношения d_K/d_C размер средних частиц уменьшается, их количество в смеси увеличи-

вается, а количество мелких частиц уменьшается, следовательно, вклад в значение среднего КЧ частиц образца смеси, который вносят КЧ средних частиц, увеличивается, а вклад мелких частиц – уменьшается. Причём среднее КЧ средних частиц всегда больше среднего КЧ мелких частиц.

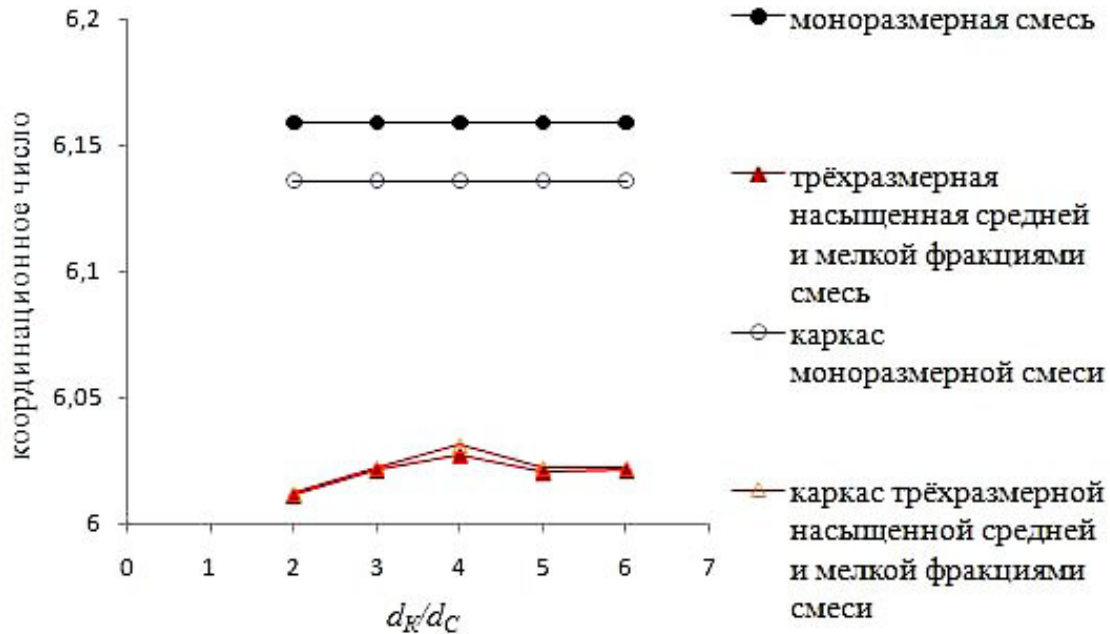


Рис. 2. Изменения средних координационных чисел частиц образцов трёхразмерной насыщенной смеси и её каркаса при изменении отношения размеров крупных d_K и средних d_C частиц.

Корреляционный анализ для всех модельных трёхразмерных насыщенных смесей в совокупности установил, что пористость и среднее КЧ не коррелируют (рис. 3). Пористость увеличивается с увеличением отношения d_K/d_C , а КЧ варьирует около числа 6. Это характерно и для каркаса – среднее КЧ и пористость не коррелируют. Корреляционным анализом, проведённым для каждого вида трёхразмерных смесей с соответствующим отношением d_K/d_C в отдельности, обнаружена значимая (уровень значимости $\alpha=0.05$) отрицательная корреляционная связь между пористостью и средним КЧ только у трёхразмерных насыщенных смесей с $d_K/d_C=6$ (коэффициент корреляции Пирсона = -0.75) и у их каркасов (коэффициент корреляции Пирсона = -0.72). Т.е. у этой смеси с увеличением среднего КЧ уменьшается пористость.

Для оценки механической прочности и структуры модельных сыпучих смесей кроме исследования среднего числа контактов, приходящихся на частицу, было проведено исследование сферического распределения точек касания по поверхности частицы (сферы). Точнее, было проведено исследование углового распределения точек касания от «экватора» частицы. Почему именно от экватора? Поскольку смесь формируется под действием силы тяжести, то её (силы тяжести) направление является *выделенным направлением*.

Плоскость, перпендикулярная этому выделенному направлению, также является выделенной – *латеральной плоскостью*. Для построения гистограммы распределения точек касания поверхность каждой частицы (шара) делилась на 10 широтных (горизонтальных) зон равной площади.

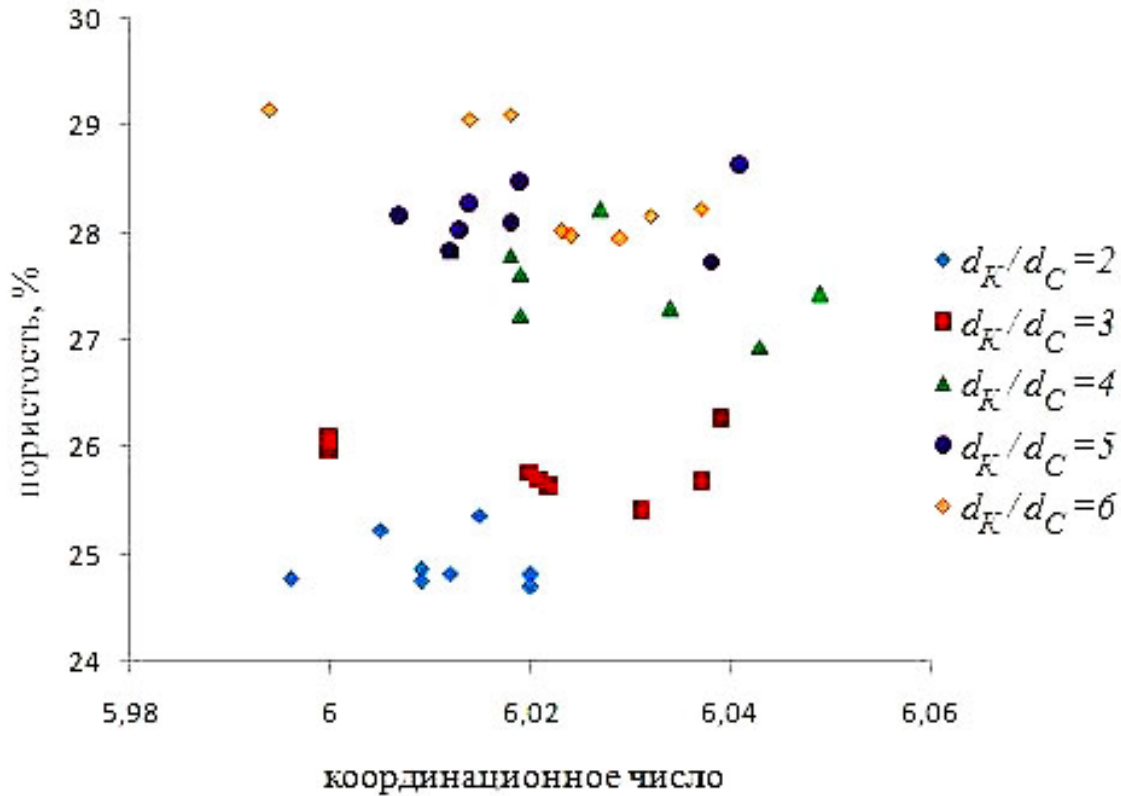


Рис. 3. Соотношение пористости и среднего координационного числа частиц трёхразмерных насыщенных средней и мелкой фракциями смесей.

В результате исследования выяснилось, что точки касания частиц неравномерно распределены (рис. 4, 5). Минимумы частот касания на единицу площади приходятся на экватор частицы и полюсы, максимумы – на «средние широты» верхнего и нижнего полушарий. Смесь в целом и каркас в отдельности подчиняются этой закономерности для моно- и трёхразмерных насыщенных средней и мелкой фракциями смесей при любых значениях d_K/d_C . На рис. 4 и 5 видно, что доли точек касания, приходящихся на экваториальную область и полюсы частиц трёхразмерных насыщенных смесей, больше, чем соответствующие доли точек касания моноразмерной смеси. Всё это характерно и для каркасов смесей. Для трёхразмерных смесей гистограммы распределения точек касания почти симметричны относительно линии экватора шара по сравнению с гистограммой распределения точек касания частиц моноразмерной смеси (она менее симметрична).

У трёхразмерных смесей (с уменьшением отношения d_K/d_C) с уменьшением пористости немного изменяется гистограмма сферического распре-

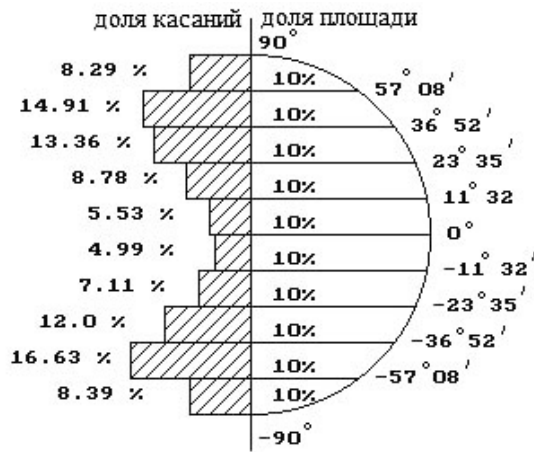


Рис. 4. Сферическое распределение точек касания частиц моноразмерной смеси.



Рис. 5. Сферическое распределение точек касания частиц трёхразмерной насыщенной смеси ($d_K/d_C = 2$, $d_K/d_M = 12$).

деления точек касания частиц: уменьшаются частоты касаний на единицу площади, приходящиеся на полюсы и на приэкваториальную и экваториальную области, увеличиваются частоты касаний на единицу площади, приходящиеся на средние широты. Гистограмма самой плотной из трёхразмерных насыщенных смесей показана на рис. 5.

В результате проведённых исследований установлено, что средние координационные числа частиц как моноразмерных, так и насыщенных мелкими фракциями трёхразмерных модельных сыпучих смесей в целом и их каркасов приближённо равны 6. Более того, средние координационные числа трёхразмерных насыщенных смесей строго меньше среднего координационного числа моноразмерной смеси. Такая же закономерность наблюдается для среднего координационного числа каркасов смесей. Все трёхразмерные насыщенные смеси плотнее, чем моноразмерная смесь. Самой плотной (пористость 24.9%) среди полученных модельных смесей является трёхразмерная насыщенная средней и мелкой фракциями смесь с $d_K/d_C=2$ и $d_C/d_M=6$. Доля объёма каркаса в образцах трёхразмерных насыщенных смесей больше 96%, а в моноразмерных смесях она составляет более 99%. Все крупные частицы образцов трёхразмерных смесей являются каркасными. Значительные доли средних (более 98%) и мелких (более 82%) частиц образцов трёхразмерных смесей составляют их каркасы.

Полученные результаты имеют большое значение для характеристики прочности и структуры сыпучих материалов.

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке Программы фундаментальных исследований РАН № 12-Т-5-1022.

Список литературы

1. Амосова О.Е. Компьютерное моделирование структуры и порового пространства терригенных осадков. Диссертация канд. геол.-мин. наук. 2000. Сыктывкар. Коми НЦ УрО РАН.

2. Амосова О.Е. Исследование ёмкостных и структурных характеристик терригенных осадков компьютерным моделированием (на примере трёхмерных моделей осадков) // Информационные технологии в горном деле: доклады Всероссийской научной конференции с международным участием. Екатеринбург. 2012. С. 20-25.
3. Амосова О.Е. Компьютерное моделирование структурных характеристик сыпучих смесей // Математические исследования в естественных науках. Труды VII Всероссийской (с международным участием) научной школы. Апатиты. 2011. С. 64-69.
4. Амосова О.Е. Компьютерное моделирование седиментационного процесса на вычислительном кластере // Вестник Института геологии. Сыктывкар. 2010. №9. Вып. 2. С. 9-10.
5. Амосова О.Е. Компьютерное моделирование седиментационного процесса на вычислительном кластере как основа оценки структурных и фильтрационно-ёмкостных свойств сыпучих смесей / Математические исследования в естественных науках. Труды VI Всероссийской (с международным участием) научной школы. Апатиты. 2010. С. 142-149.

НОВЕЙШИЕ РЕЗУЛЬТАТЫ О ПРОСТЕЙШИХ ПОЛИЭДРАХ С ЗАДАННОЙ КОМБИНАТОРНОЙ СИММЕТРИЕЙ

Войтеховский Ю.Л.

Геологический институт КНЦ РАН, Апатиты, woyt@geoksc.apatity.ru

Труды акад. Е.С. Фёдорова составляют платформу современной кристаллографии. Казалось бы, они досконально изучены. Но в том и проявляется гениальность учёного, что по прошествии века обнаруживается нерастроченный ресурс его работ. Такова статья [4]. Правда, сам автор писал в предисловии: «Если я решаюсь теперь же предать её опубликованию, то делаю это не потому, чтобы она представляла в моих глазах особое значение по своим приложениям; я делаю это потому, что недавнее появление книги известного немецкого математика Эбергардта «Zur Morphologie der Polyeder» может вызвать у многих лиц интерес к предмету и ряд новых исследований в этом направлении» [4, с. 241]. А в письме к П. Гроту от 6 декабря 1895 г. находим следующее замечание: «Работа о морфологии и систематике полиэдров ... имеет весьма ограниченный интерес для минералогов и кристаллографов, ибо она преследует чисто геометрические цели» [5, с. 68].

Анализируя аргументы против систематики по Эбергардту, в которой в один класс попадают полиэдры с числами разноименных граней, удовлетворяющими одному диофантову уравнению, убеждаемся, что акад. Е.С. Фёдоров вовсе не изменяет кристаллографическим пристрастиям. Именно поэтому он не согласен с тем, что в разные классы попадают кристаллографически

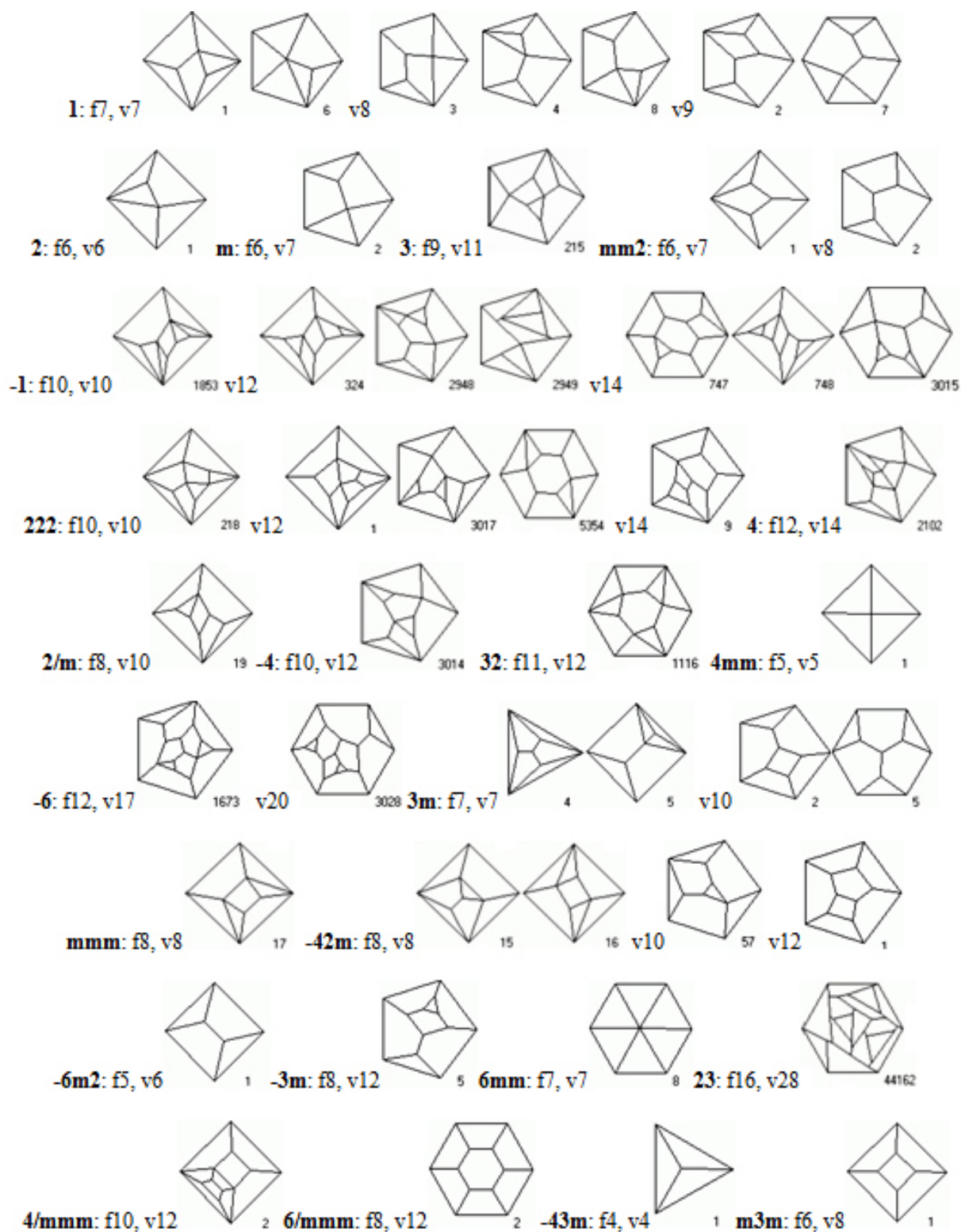


Рис. 1. Простейшие (с минимальным числом граней) выпуклые полиэдры с заданной точечной группой комбинаторной симметрии в проекции Шлегеля на одну из граней. f – число граней, v – вершин, справа от полиэдра показан его номер в каталогах [2, 3] при данных f и v .

родственные куб и октаэдр и, наоборот, в один класс попадают полиэдры, никогда не сочетающиеся в огранке одного минерала [1]. Он предложил не принцип систематики, а нечто большее – алгоритм генерирования полного комбинаторного многообразия выпуклых полиэдров из тетраэдра, обеспечивающий их генеалогическую систематику и сохранение кристаллографического родства. Сочетание кристаллографических и геометрических мотивов в алгоритме органично. Ведь притупления ребер новыми гранями, например, в соответствии с законом компликации В. Гольдшмидта – это классическая тема минералогической кристаллографии. С другой стороны, операций притупления в алгоритме ровно три, и они обеспечивают появление на полиэдре необходимых 3-, 4- и 5-угольных граней в силу известной геометрической теоремы.

В статье [4] акад. Е.С. Фёдоров вышел за пределы кристаллографии (хотя, строго говоря, основы математической кристаллографии в это время им же и закладывались) в область комбинаторной геометрии выпуклых полиэдров, предложив корректный способ их рекуррентного перечисления. По сути, комбинаторная геометрия выпуклых полиэдров превращена им в «оболочку» минералогической кристаллографии со многими смысловыми связями между ними. После него никто не охватил единым рассмотрением два мира – кристаллических и абстрактных полиэдров. Уже на выведенных им 4- ... 7- и простых 8- и 9-эдрах он заметил тенденцию к преобладанию комбинаторно асимметричных форм, что противоречило интуиции минералога. Возможно, этим и были стимулированы работы по изучению геометрии кристаллического пространства. Перечисление комбинаторных типов выпуклых полиэдров стало впоследствии важной математической задачей с приложениями в различных областях естествознания. Фёдоровский алгоритм оказался замечательно приспособленным для компьютеризации. Благодаря ему удалось получить результаты, возвратившие – впервые после акад. Е.С. Фёдорова – приоритет российской науке в этой области [2, 3].

В каталогах [2, 3] даны изображения и характеристики (гранные символы, порядки групп автоморфизмов, точечные группы комбинаторной симметрии) всех выпуклых 4- ... 12-эдров и простых (в каждой вершине сходятся ровно три грани) 13- ... 16-эдров. Такое обилие информации порождает множество интересных задач, для которых современная комбинаторная теория выпуклых полиэдров не имеет решений. Одна из них состоит в следующем. Следуя акад. Е.С. Фёдорову, в [2, 3] каждый полиэдр описан точечной группой комбинаторной симметрии, т.е. точечной группой симметрии самого симметричного представителя в классе эквивалентности. (Так, точечная группа комбинаторной симметрии любого параллелепипеда соответствует точечной группе симметрии куба, любого тетраэдра – симметрии

кубического тетраэдра.) Но если для всех 32 точечных групп симметрии известны полиэдрические представители – кристаллические полиэдры, то для их комбинаторных аналогов дело обстоит сложнее. На сегодня найдены простейшие (с наименьшим числом граней или – в силу дуального перехода, сохраняющего симметрию – вершин) полиэдры лишь для 24 «кристаллографических» классов комбинаторной симметрии: 1, 2, m , -1 , 3, 222 , $mm2$, 4, $2/m$, -4 , 32 , -6 , $3m$, $4mm$, mmm , $-42m$, $-6m2$, $-3m$, $6mm$, 23 , $4/mmm$, $6/mmm$, $-43m$, $m3m$ (рис. 1). Найдены также простейшие полиэдры для 20 «некристаллографических» классов комбинаторной симметрии: $5m$, $7m$, $-82m$, $8mm$, $9m$, $-10m2$, $-5m$, $10mm$, $11m$, $-12m2$, $-7m$, $-14m2$, $8/mmm$, $-18m2$, $10/mmm$, $-22m2$, $12/mmm$, $-26m2$, $14/mmm$, $-3-5m$ (в этой статье не рассматриваются).

Несоответствие лишь отчасти вызвано тем, что при переходе к описанию в терминах комбинаторной симметрии полиэдр может «уйти» в класс с более высокой симметрией. Будь это главной причиной, можно было бы ожидать отсутствия полиэдров в комбинаторных классах низших сингоний. Наоборот, они не найдены в комбинаторных классах средних и кубической сингоний: -3 , $4/m$, 422 , 6 , $6/m$, 622 , $m3$, 432 . Итак, задача состоит в том, чтобы найти простейшие выпуклые полиэдры с заданной комбинаторной симметрией, в частности, в перечисленных восьми классах. Другими словами, нужно найти выпуклый n -эдр с заданной точечной группой комбинаторной симметрии для минимального n . Не очевидно, впрочем, что таковой должен существовать для любой точечной группой комбинаторной симметрии и некоторого n . Доказательство этого положения – ещё одна нерешённая задача.

Список литературы

1. Богомолов С.А. Классификация выпуклых многогранников по Фёдорову и Эбергардту // Зап. РМО. 1929. Ч. 58. С. 265-277.
2. Войтеховский Ю.Л., Степенщиков Д.Г. Комбинаторная кристалломорфология. Кн. IV. Выпуклые полиэдры. Т. I. 4- ... 12-эдры. Апатиты: Изд-во КНЦ РАН, 2008. 833 с.
3. Войтеховский Ю.Л., Степенщиков Д.Г. Комбинаторная кристалломорфология. Кн. IV. Выпуклые полиэдры. Т. II. Простые 13- ... 16-эдры. Апатиты: Изд-во КНЦ РАН, 2008. 828 с.
4. Фёдоров Е.С. Основания морфологии и систематики многогранников // Зап. Импер. С.-Петербург. минерал. об-ва. 1893. Ч. 30. С. 241-341.
5. Шафрановский И.И., Франк-Каменецкий В.А., Доливо-Добровольская Е.М. (Сост.) Евграф Степанович Фёдоров. Переписка. Неизданные и малоизвестные работы. Сер.: Научное наследие. Т. 16. Л.: Наука, 1991. 320 с.

ЧАСТИЧНО АНТИСИММЕТРИЧНЫЕ ПО А.В. ШУБНИКОВУ ВЫПУКЛЫЕ ПОЛИЭДРЫ

Войтеховский Ю.Л.

Геологический институт КНЦ РАН, Апатиты, woyt@geoksc.apatity.ru

В 2012 г. исполнилось 125 лет со дня рождения акад. А.В. Шубникова, впервые нашедшего 58 точечных и 1651 пространственных групп антисимметрии [5]. В рамках развиваемой автором «комбинаторной кристалломорфологии» получен результат, добавляющий в теорию антисимметрии кристаллических полиэдров важную деталь.

В [6] определена «реальная» кристаллографическая простая форма как любой полиэдр, ограниченный гранями «идеальной» кристаллографической простой формы, находящимися в стандартной ориентации, но на произвольном расстоянии от начала координат. Реальные формы получаются из идеальных независимым движением граней вдоль нормалей. Комбинации реальных кристаллографических простых форм определяются очевидным образом. Если фиксировать реальные формы с точностью до комбинаторного типа, т.е. числа, вида и способа сочетания граней, то их перечисление для данной идеальной формы или комбинации форм становится разрешимой задачей. Результаты перечисления некоторых реальных простых форм и их комбинаций с помощью оригинальных алгоритмов и компьютерных программ изложены в [1-4].

Перенос грани полиэдра, не имеющего элементов симметрии 2-го рода, вдоль нормали через начало координат на то же расстояние иногда порождает форму, которую по отношению к исходной предлагается определить как «частично антисимметричную». Действительно, при параллельном переносе всех граней абстрактного (геометрического) полиэдра, не имеющего элементов симметрии 2-го рода, через начало координат на то же расстояние получается форма, энантиоморфная исходной. Та же процедура для кристаллического (телесного) полиэдра порождает антисимметричную форму, так как нормали, ранее ориентированные вовне, теперь ориентированы внутрь полиэдра. Из этого и следует, что перенос через начало координат лишь части граней полиэдра порождает частично антисимметричные формы. Метафорически ситуация выглядит так, как если бы в известном примере акад. А.В. Шубникова наизнанку выворачивалась не вся чёрно-белая перчатка, а лишь отдельные её пальцы [5].

На рисунке 1 показаны реальные тригональные бипирамиды. Упорядочение по порядкам групп автоморфизмов и точечным группам симметрии: 1 – 18 (1), 2 – 15 (2 – 8, m – 7), 4 – 2 ($mm2$, 222), 12 – 1 ($-6m2$). По гранным символам: [06] – 2, [222] – 9, [23] – 5, [24] – 4, [321] – 6, [4] – 3, [41] – 3, [42]

– 2, [6] – 2. По числу граней: 4-эдры: [4] 2 – № 1, m – 2, 222 – 3, 5-эдры: [23] 1 – 4-8, [41] 1 – 9-10, m – 11, 6-эдры: [06] 2 – 12, m – 13, [222] 1 – 14-17, 2 – 18-21, m – 22, [24] 1 – 23-24, 2 – 25, m – 26, [321] 1 – 27-30, m – 31-32, [42] 1 – 33, 2 – 34, [6] $mm2$ – 35, $-6m2$ – 36. Грани с внешними нормальными показаны кружками: видимые – черными, невидимые – белыми. Грани с внутренними нормальными не обозначены. Из 36 форм лишь 6 (№№ 1, 8, 11, 21, 32, 36) нормальны, т.е. обладают всеми внешними нормальными, остальные 30 частично антисимметричны.

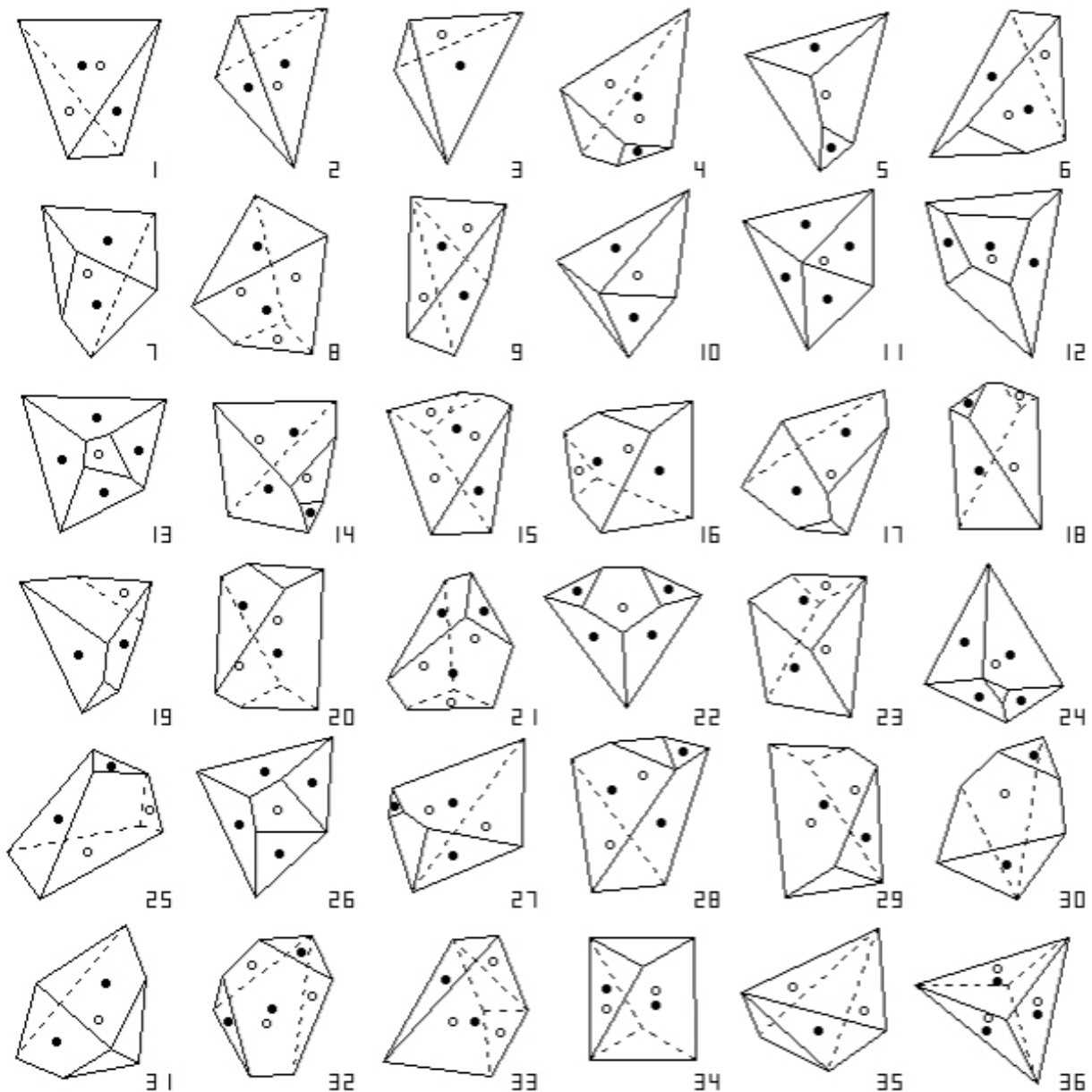


Рис. 1. Реальные тригональные бипирамиды.

На рис. 2 показаны реальные тригональные трапецоэдры. Упорядочение по порядкам групп автоморфизмов и точечным группам симметрии: 1 – 44

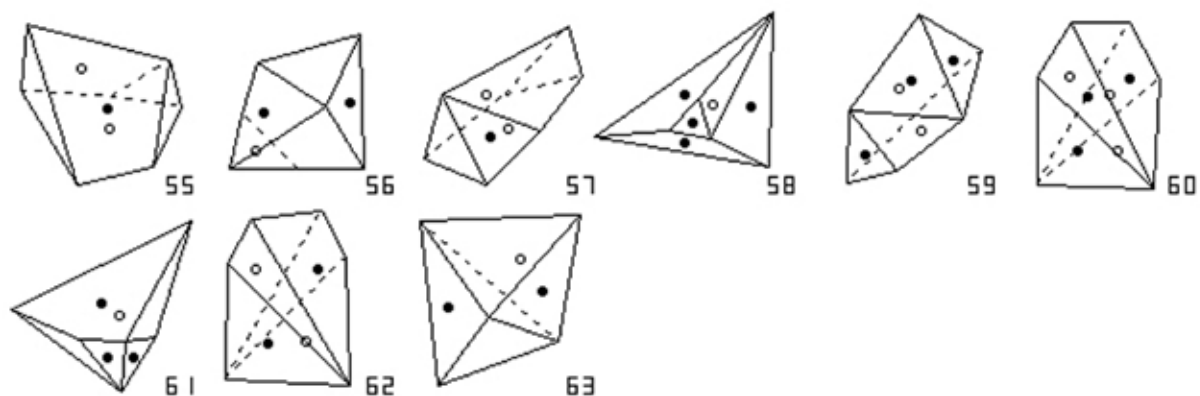


Рис. 2. Реальные тригональные трапецоэдры.

(1), 2 – 18 (2 – 17, $m - 1$), 6 – 1 (32). По гранным символам: $[06] - 4$, $[222] - 16$, $[23] - 10$, $[24] - 8$, $[321] - 10$, $[4] - 4$, $[41] - 5$, $[42] - 5$, $[6] - 1$. По числу граней: 4-эдры: $[4] 1 - \text{№ } 1, 2 - 2-4$, 5-эдры: $[23] 1 - 5-14$, $[41] 1 - 15-19$, 6-эдры: $[06] 1 - 20$, 2 – 21-22, 32 – 23, $[222] 1 - 24-33$, 2 – 34-39, $[24] 1 - 40-44$, 2 – 45-47, $[321] 1 - 48-57$, $[42] 1 - 58-59$, 2 – 60-62, $[6] m - 63$. Из 63 форм лишь 11 (№№ 2, 3, 5, 7, 15, 23, 34, 35, 45, 48, 60) нормальны, остальные 52 частично антисимметричны.

Очевидная генетическая интерпретация «нормальных» и «антисимметричных» граней на кристаллическом полиэдре – рост и растворение. Возможно, со временем обнаружатся и другие физические интерпретации.

Список литературы

1. Войтеховский Ю.Л., Степенщиков Д.Г. Реальные кристаллографические простые формы // Зап. ВМО. 2004 а. № 2. С. 112-120.
2. Войтеховский Ю.Л., Степенщиков Д.Г. Комбинаторная кристалломорфология. I. Реальные кристаллографические простые формы. Апатиты: К & М, 2004 б. 275 с.
3. Войтеховский Ю.Л., Степенщиков Д.Г. Комбинаторная кристалломорфология. II. Реальные кристаллографические ромбододекаэдры // Полиэдрические формы в живой и косной природе. Апатиты: К & М, 2005. С. 51-84.
4. Войтеховский Ю.Л., Степенщиков Д.Г. Комбинаторная кристалломорфология. III. Комбинации куба и октаэдра. Апатиты: К & М, 2007. 834 с.
5. Шубников А.В. Симметрия и антисимметрия конечных фигур. М.: Изд-во АН СССР, 1951.
6. Voytekhovsky Y.L. On the real crystal octahedra // Acta Cryst. 2002. A 58. P 622-623.

ПОСТРОЕНИЕ КВАЗИПЕРИОДИЧЕСКИХ МОЗАИК С ПОМОЩЬЮ ФУРЬЕ-ОБРАЗОВ ПРЕДФРАКТАЛОВ

Малеев А.В., Рау В.Г., Шутов А.В.

Владимирский государственный университет им. А.Г. и Н.Г. Столетовых,
Владимир, andr_mal@mail.ru

Рассмотрен способ построения квазипериодических разбиений плоскости на ромбы, аналогичных мозаикам Пенроуза, основанный на геометрическом анализе расположения максимумов на дифракционной картине, полученной от предфракталов с некристаллографической симметрией. Приведены рекуррентные формулы построения предфракталов с использованием операции свёртки.

Введение. Открытие квазикристаллов [1] усилило интерес исследователей к квазипериодическим разбиениям, и в последующие десятилетия появилось несколько различных подходов к построению таких разбиений. Свои знаменитые мозаики Пенроуз [2] строил, присоединяя очередную фигуру по правилам, которые определяются ближайшим окружением. Это построение квазипериодического разбиения по *локальным правилам* [3, 4]. Другой подход, основанный на замене фигуры определённым набором фигур, получил название *подстановочного* [5]. Подстановочный подход иначе называют подходом *дефляции-инфляции*. Существуют методы построения квазипериодических разбиений на основе использования *преобразования двойственности* [3, 6]. Особым образом выбираемые *сечения* периодических разбиений дают квазипериодические разбиения низшей размерности [7]. Так же используются периодические разбиения в различных методах, основанных на проектировании так называемых *ступенчатых поверхностей* [8, 9]. Обобщением проективных методов является метод *среза и проекции (cut-and-project)* [10], в котором квазипериодическое точечное множество, названное *модельным множеством (model set)*, получают как результат проекции определённого подмножества периодической решетки, расположенной в гиперпространстве высокой размерности.

Дифракционные методы играют решающую роль при экспериментальном исследовании строения твёрдых тел. Рентгеноструктурный анализ, электроно- и нейтронография базируются на интерпретации получаемой в ходе эксперимента дифракционной картины – распределения интенсивности рассеянного излучения.

В настоящей работе предлагается новый подход к построению квазипериодических разбиений, основанный на анализе полных дифракционных картин, для построения которых в качестве рассеивающих центров используются конечные точечные множества, представляющие собой предфракталы с некристаллографической симметрией.

Построение фрактала с поворотной симметрией. Для построения на плоскости фрактала Pol_n с поворотной симметрией n -го порядка используем следующую конструкцию. В качестве порождающего элемента Pol_n^0 возьмем произвольный правильный n -угольник на плоскости. Порождающее преобразование на k -ом шаге построения фрактала определим как объединение множества Pol_n^{k-1} , полученного на $(k-1)$ -ом шаге с n его копиями, полученными отражением Pol_n^{k-1} в сторонах правильного n -угольника, описанного вокруг Pol_n^{k-1} . Множество Pol_n^k назовём предфракталом k -ого порядка. На рис. 1 представлены предфракталы порядков $k = 0, 1, 2, 3$ фрактала Pol_5 .

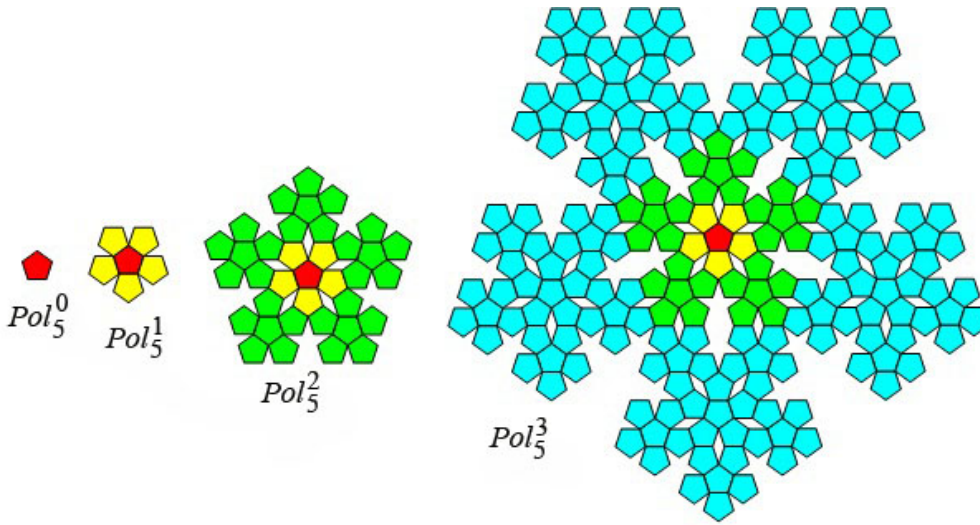


Рис. 1. Предфракталы порядков $k = 0, 1, 2, 3$, фрактала Pol_5 .

При рассмотрении дифракции в качестве рассеивающих центров мы будем использовать центры n -угольников, из которых состоят предфракталы, поэтому от фрактала Pol_n (предфрактала Pol_n^k) перейдём соответственно к фракталу P_n (предфракталу P_n^k) множества центров n -угольников, которые образуют фрактал Pol_n (предфрактал Pol_n^k).

Фрактал P_n удаётся задать с помощью функции ρ_n , используя операцию свертки \otimes . Напомним, что свертка $\varphi_1 \otimes \varphi_2$ двух функций $\varphi_1(x, y)$ и $\varphi_2(x, y)$, заданных на плоскости, определяется формулой

$$s(x, y) = \varphi_1 \otimes \varphi_2 = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \varphi_1(x, y) \varphi_2(x + u, y + v) du dv$$

Для задания функций, определяющих точечные системы используется δ -функция Дирака. Так предфрактал P_n^k задает функция $\rho_n^k(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{t} \in P_n^k} \delta(\mathbf{t} - \mathbf{r})$.

В этих обозначениях последовательность предфракталов P_n^k задается на-

чальным условием $\rho_n^0 = 0$ и рекуррентным соотношением:

$$\rho_n^{k+1} = \left(-1 - 2 \cos \frac{\pi}{n} \right)^k \overline{\rho_n^k} \otimes \overline{\pi} + \rho_n^k \quad \text{в случае нечётных } n,$$

$$\rho_n^{k+1} = 3^k \overline{\rho_n^k} \otimes \pi + \rho_n^k \quad \text{в случае чётных } n,$$

где $\pi = \left\{ \left(\sin \frac{2\pi j}{n}, \cos \frac{2\pi j}{n} \right) \middle| j = 0, 1, \dots, n-1 \right\}$ – множество вершин правильного

n -угольника, а черта над функцией означает её инверсию относительно начала координат: $\overline{f(x, y)} = f(-x, -y)$.

Фурье-образ предфрактала P_n^k . Падающая на образец монохроматичная волна, характеризуется волновым вектором \mathbf{k}_0 . Рассеянная в некотором направлении волна – волновым вектором \mathbf{k} . Тогда дифракционную картину можно считать функцией вектора $\mathbf{H} = \mathbf{k} - \mathbf{k}_0$. Интенсивность рассеянного излучения $I(\mathbf{H}) = |F(\mathbf{H})|^2$, определяется структурным фактором $F(\mathbf{H})$, который рассчитывается как Фурье-преобразование от функции рассеивающей способности [11]:

$$F(\mathbf{H}) = \int \rho(\mathbf{r}) \exp(2\pi i \mathbf{H} \mathbf{r}) d\mathbf{r}$$

Если вся рассеивающая способность сосредоточена в точках, то функция $\rho(\mathbf{r})$ определяется с помощью δ -функции Дирака, а при расчёте структурного фактора удаётся интегрирование заменить суммированием:

$$F(\mathbf{H}) = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N f_j \exp(2\pi i \mathbf{H} \mathbf{r}_j),$$

где N – число точек, \mathbf{r}_j – радиус-векторы точек, f_j – их рассеивающая способность. Для точечной системы, совпадающей с предфракталом P_n^k , и считая, что для всех точек $f_j = 1$, получим

$$F(\mathbf{H}) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{r} \in P_n^k} \exp(2\pi i \mathbf{H} \mathbf{r}).$$

Следует отметить, что в отличие от дифракции на кристаллах и квазикристаллах [12], для которых наблюдается точечная (брэгговская) дифракционная картина, при дифракции на конечном множестве точек структурный фактор представляет собой непрерывную функцию от $\mathbf{H} \in \mathbf{R}^2$, т.е. \mathbf{H}

пробегают все возможные векторы плоскости. Поэтому при компьютерном построении дифракционной картины нами рассчитывались интенсивности $I(\mathbf{H}) = |F(\mathbf{H})|^2$ для точек некоторой квадратной сетки с достаточно маленьким шагом s , и соответствующие точки на экране монитора раскрашивались в различные цвета в зависимости от уровня интенсивности.

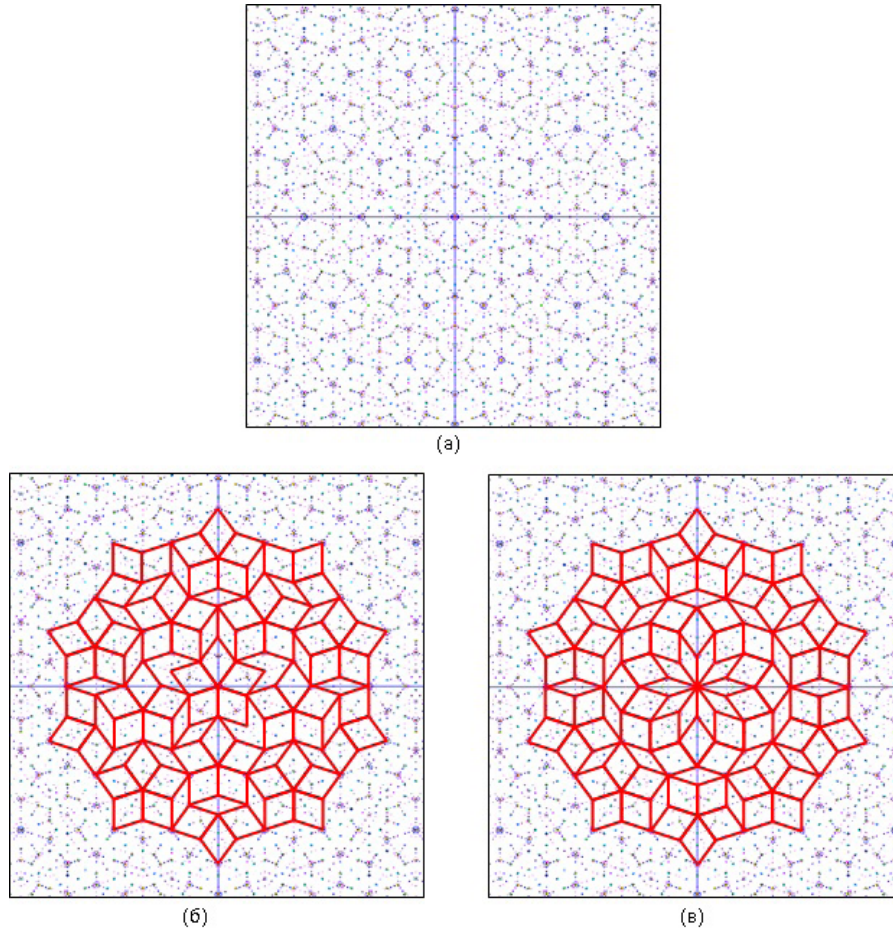


Рис. 2. Дифракционная картина, полученная для предфрактала P_5^3 (а) и построенные на её максимумах фрагменты мозаик Пенроуза с симметрией $5m$ (б) и $10m$ (в).

Построение квазипериодических мозаик. На рис. 2 а приведена дифракционная картина, полученная для предфрактала P_5^3 . Геометрический анализ расположения максимумов на дифракционной картине позволил предложить новый подход к построению квазипериодических разбиений плоскости на ромбы, с симметрией, определяемой симметрией предфрактала. Этот подход основан на последовательном объединении некоторых наиболее мощных максимумов в ромбы таким образом, чтобы эти ромбы примыкали друг к другу целыми сторонами. Так как сама дифракционная картина обладает некристаллографической симметрией $10m$, получаемые разбиения не могут обладать трансляционной симметрией, а значит, будут квазипериодическими.

На рис. 2 б и в представлены два способа объединения дифракционных максимумов в ромбы, в результате чего получены фрагменты мозаик Пенроуза с симметрией $5m$ и $10m$, соответственно. Аналогично, используя дифракционные картины от предфракталов P_7^3 , P_8^2 и P_9^2 , получены фрагменты квазипериодических разбиений с симметрией $7m$, $8m$ и $9m$.

Работа выполнена при поддержке гранта Российского фонда фундаментальных исследований (гранты № 11-01-00578).

Список литературы

1. Shechtman D., Blech I., Gratias D., Cahn J. W., Metallic phase with long-range orientational order and no translational symmetry // *Physical Review Letters*. 1984. V. 53. P. 1951-1953.
2. Penrose R. The role of aesthetics in pure and applied mathematical research // *Bull. Inst. Math. and its Appl.* 1974. V. 10. P. 266-271.
3. de Bruijn N.G. Algebraic theory of Penrose's non-periodic tilings // *Nederl. Akad. Wetensch. Proc. Ser. A*. 1981. V. 84. P. 39-66.
4. Ле Ты Коук Тханг, Пиунихин С.А., Садов В.А. Геометрия квазикристаллов // *Усп. мат. наук*. 1993. V. 48. P. 41-102.
5. Goodman-Strauss C. Matching rules and substitution tilings // *Annals of Mathematics, Second Series*. 1998. V. 147. P. 181-223.
6. Niizeki K. A classification of two-dimensional quasi-periodic tilings obtained with the grid method // *J. Phys. A: Math. Gen.* 1988. V. 21. P. 3333-3345.
7. Arnol'd V.I. Remarks on quasicrystalline symmetries // *Physica D: Nonlinear Phenomena*. 1988. P. 21-25.
8. Ito S., Ohtsuki M. Parallelogram Tilings and Jacobi-Perron Algorithm // *Tokio J. Math.* 1994. V. 17. P. 33-58. Penrose R. // *Math. Intelligencer*. 1979. V. 2. P. 32.
9. Duneau M., Katz A. Quasiperiodic Patterns // *Phys. Rev. Lett.* 1985. V. 54. P. 2688-2691.
10. Moody R.V. Model sets: A Survey. In: *From Quasicrystals to More Complex Systems*. Eds. F.Axel, F.D'enooyer and J.P.Gazeau, EDP Sciences, Les Ulis, Springer, Berlin. 2000. P. 145-166.
11. Современная кристаллография. Т. 1. Симметрия кристаллов и методы структурной кристаллографии. Ред. Б.К. Вайнштейн. М.: Наука. 1980. 384 с.
12. Janot C. *Quasicrystals: A primer*, 2nd ed., Monographs on the Physics and Chemistry of Materials, Oxford University Press, Oxford. 1994.

АВТОМАТИЗАЦИЯ РАСЧЁТОВ КИНЕТИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК ТВЁРДОФАЗНЫХ ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ

Пушкин А.А., Белов Р.В., Римкевич В.С.

Институт геологии и природопользования ДВО РАН, Благовещенск,
pushkin@ascnet.ru

В работе описывается созданная нами программа расчёта кинетических параметров (констант скорости и энергии активации) твердофазных химических реакций при помощи стандартных средств офисного приложения Microsoft Access 2003. Программа использовалась для расчётов параметров физико-химических процессов, возникающих при фторидном обогащении различных видов силикатного сырья Верхнего Приамурья.

Российская алюминиевая промышленность занимает второе место в мире по производству первичного алюминия. Однако, обеспеченность её высококачественным бокситовым сырьём, необходимым для получения алюминия по основному промышленному способу – методу Байера, составляет 35-40% [1].

В то же время, в России вообще и в Амурской области в частности, имеются огромные запасы небокситовых руд и богатые гидроресурсы, которые обещают решить сырьевую проблему и делают актуальной задачу получения алюминия и кремния из небокситового силикатного сырья.

В ходе поиска новых способов фторидного обогащения небокситового сырья, которые могут быть положены в основу технологического процесса производства алюминия и кремния, встаёт задача предварительного термодинамического расчёта различных возможных физико-химических равновесий с целью выявления оптимальных сочетаний реагентов. В связи с этим нами на основе приложения Microsoft Access 2003 разработана программа расчёта изменений термодинамических потенциалов в ходе протекания химических реакций, которые могут быть положены в основу того или иного технологического процесса [2].

При детальном изучении физико-химического процессов возникает задача сопоставления скоростей различных химических реакций. С этой целью разработана программа расчёта констант скорости и энергии активации химических реакций, протекающих в газовой или жидкой фазе [3], в данной работе рассматривается программа расчёта кинетических характеристик твердофазных реакций.

Эти два случая значительно отличаются друг от друга. В первом случае (в газах, жидкостях и растворах) все взаимодействующие атомы или молекулы могут контактировать друг с другом одновременно и равновероятно. Считается [4], что зависимость концентрации от времени химической реак-

ции, протекающая в гомогенной системе, достаточно хорошо описывается степенной зависимостью:

$$c = c_0 t^m, \quad (1)$$

где m представляет собой порядок реакции, а константа c_0 является исходной концентрацией. Программа для расчёта в случае степенной зависимости концентрации реакции от времени описана в статье [3].

Случай, когда атомы исходных веществ не могут одновременно принять участие в реакции, реализуется в гетерогенной системе, например, между веществами, взаимодействующими в твёрдой фазе. В этом случае в реакции участвуют только атомы, находящиеся на поверхности зерна, фронт такой реакции постепенно перемещается с поверхности зерна в глубину, определяя иной характер зависимости концентрации прореагировавшего вещества от времени. Считается [4], что реакция в гетерогенной системе достаточно хорошо описывается топохимическим уравнением Ерофеева-Авраами:

$$c = c_0(1 - \exp(-k \cdot t^m)), \quad (2)$$

где константы имеют те же значения, что и в первой формуле, а k – константа скорости.

Линеаризация уравнения осуществляется в данном случае двойным логарифмическим методом и приводит к следующему уравнению:

$$\ln \left(\ln \left(\frac{c_0 - c}{c_0} \right) \right) = \ln k - m \cdot \ln(t) \quad (3)$$

Итак, имеем уравнение (3), которое мы можем рассматривать как уравнение линейной регрессии, в котором необходимо определить свободный член. При помощи метода наименьших квадратов находим, что

$$\ln k = \frac{(\sum (\ln t_i)^2 \sum \ln(\ln(\frac{c_0 - c_i}{c_0})) - \sum \ln(t_i) \sum \ln(t_i) \cdot \ln(\ln(\frac{c_0 - c_i}{c_0})))}{(n \cdot \sum (\ln(t_i))^2 - (\sum \ln(t_i))^2)}, \quad (4)$$

и, следовательно,

$$k = e^{\ln k} \quad (5)$$

Энергию активации находим, исходя из вычисленных значений констант скоростей для каждой из температур. В предположении о том, что константы скорости связаны с температурой зависимостью Аррениуса, энергию активации определяем по формуле [5]:

$$E_{12} = 8.31 \cdot \frac{\ln \left(\frac{k_2}{k_1} \right)}{\frac{1}{T_1} - \frac{1}{T_2}} \text{ (Дж/моль)}, \quad (6)$$

где T_1 и T_2 – температуры, k_1 и k_2 – соответствующие им константы скоростей.

Расчёт энергии активации в программе проводится для шести попарных комбинаций из четырёх констант скорости (в случае четырёх различных температур) или для трёх попарных комбинаций (в случае трёх различных температур), с последующим усреднением по формулам:

$$E_A = \frac{(E_{12} + E_{13} + E_{14} + E_{23} + E_{24} + E_{34})}{6} \quad (7)$$

$$E_A = \frac{(E_{12} + E_{13} + E_{23})}{3}$$

Программа, реализованная в этой базе данных, содержит две ветви: одна для расчёта гомофазных реакций, вторая для гетерофазных реакций. Объекты, реализующие вторую ветвь, снабжены индексом $_tx$. В формах, показанных на рис. 1 и 2, приводятся два значения энергий активации: левое из них для случая трёх температур, правое – для случая четырёх температур. Например, на рис. 2 показан расчёт проведенный для четырёх температур ($T=300; 350; 450; 500^\circ\text{C}$). Энергия активации в данной реакции равна 38872 Дж/моль .

Температура, T	300	350	450	550
Порядок реакции	0,447798	0,912092	1,175149	1,186675
Скорость реакции	0,001250	0,006333	0,016650	0,022200
Константа скорости	0,003987	0,015308	0,016670	0,022226

Энергия активации	5 117	3 887
-------------------	-------	-------

Рис. 1. Окно базы данных Тд_кинетика, в котором показана раскрытая форма Кинетика и список объектов базы данных.

Время_тх	C1_тх	C2_тх	C3_тх	C4_тх	n_тх
0,10	0,10	0,10	0,10	0,10	6
2,00	0,28	1,87	7,33	11,00	6
15,00	2,10	14,00	55,00	68,00	6
30,00	3,90	25,70	81,20	96,30	6
45,00	5,50	34,00	95,00	99,99	6
60,00	6,50	38,00	99,99	99,99	6

Температура: 300, 350, 450, 500

Константа скорости: 0,003443, 0,009751, 0,023452, 0,030412

Энергия активации: 46 218, 38 872

Рис. 2 Окно базы данных Тд_кинетика, в котором раскрыта форма Кинетика_тх и показан список объектов базы данных.

Программа использовалась для расчётов параметров ряда химических реакций. Результаты расчётов приведены в таблице. Данные расчётов согласуются с результатами наших расчётов при помощи приложения Microsoft Excel 2003, а также с результатами других авторов [6,7,8].

Список литературы

1. Сизяков В.М. Состояние и проблемы развития алюминиевой промышленности России в условиях переходного периода (литературный обзор) // Цветные металлы. 2000. № 11-12. С. 29-33.
2. Пушкин А.А., Римкевич В.С., Маловицкий Ю.Н., Белов Р.В. Автоматизация расчётов термодинамических равновесий в процессе переработки алюмосиликатного сырья по фторидной технологии / Труды V Всероссийской научной школы «Математические исследования в естественных науках». 12-14 октября 2009 г. Апатиты: изд-во ГИ КНЦ РАН, 2009. С. 225-228.
3. Пушкин А.А., Белов Р.В., Римкевич В.С. Автоматизация расчётов кинетических характеристик физико-химических процессов при переработке силикатного сырья фторидным методом / Труды VII Всероссийской научной школы «Математические исследования в естественных науках». 22-24 октября 2011 г. Апатиты: изд-во ГИ КНЦ РАН. 2011. С. 118-123.

Таблица. Результаты расчётов кинетических характеристик реакций спекания, термообработки и пирогидролитза каолина, кварца и кианита.

Реакция Вещество	Спекание		Термообработка спёка		Пирогидролитз спёка	
	T	k	T	k	T	k
Каолин	50	0.008384	350	0.019033	350	0.019336
	100	0.008817	450	0.023855	450	0.022946
	150	0.010355	550	0.032289	550	0.034583
	200	0.059434				
	Еа, кДж/ моль	18.4	Еа, кДж/ моль	11.6	Еа, кДж/ моль	13.0
Реакция Вещество	Спекание		Термообработка спёка		Пирогидролитз спёка	
	T	k	T	k	T	k
Кианит	100	0.007415	100	0.004189	300	0.003443
	150	0.010736	150	0.008302	350	0.009751
	175	0.012421	175	0.010097	450	0.023452
	200	0.014973	200	0.012849	500	0.030412
	Еа, кДж/ моль	17.4	Еа, кДж/ моль	15.1	Еа, кДж/ моль	10.6
Реакция Вещество	Спекание дроблёного кварца		Спекание недроблёного кварца		Термообработка спёка	
	T	k	T	k	T	k
Кварц	100	0.004482	350	0.019883	350	0.016208
	150	0.007126	450	0.027752	450	0.019608
	175	0.010971	550	0.039954	550	0.026256
	200	0.013127				
	Еа, кДж/ моль	10.5	Еа, кДж/ моль	15.7	Еа, кДж/ моль	38.9

4. Стромберг А.Г., Семченко Д.П. Физическая химия. М.: Высшая школа, 1999. 528 с.
5. Киреев В.А. Краткий курс физической химии. М.: Химия. 1969. 620с.
6. Римкевич В.С., Пушкин А.А., Маловицкий Ю.Н., Еранская Т.Ю., Гиренко И.В. Физико-химические процессы фторидной переработки алюминиевых руд // Теоретические основы химической технологии. 2010. Т. 44. № 5. С. 1-9.
7. Римкевич В.С., Пушкин А.А., Маловицкий Ю.Н., Гиренко И.В. Изучение процессов фторидной переработки кремнеземсодержащего сырья // Журнал прикладной химии. 2011. Т. 84. Вып. 3. С. 353-358.
8. Мельниченко Е.И. Фторидная переработка редкометальных руд Дальнего Востока. Владивосток: Дальнаука. 2002. 268 с.

ГРАФИЧЕСКОЕ ПРЕДСТАВЛЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ ГРАНУЛОМЕТРИЧЕСКОГО АНАЛИЗА ГЛИНИСТО-АЛЕВРИТО- ПЕСЧАНЫХ ОТЛОЖЕНИЙ МАЛОЙ ГОРОДСКОЙ РЕКИ

Слуковский З.И., Бубнова Т.П., Рыбаков Д.С.

ФГБУН Институт геологии КарНЦ РАН, Петрозаводск, slukovsky87@gmail.com

В статье приводятся данные о гранулометрическом составе донных отложений малой реки Неглинки, протекающей по территории города Петрозаводска. При помощи компьютерной обработки данные проиллюстрированы в виде диаграмм и графиков. Благодаря этому можно выделить основные особенности зернового состава изучаемых речных осадков.

Под гранулометрическим анализом следует понимать комплекс мер, при помощи которых можно установить содержание частиц различного размера в осадочных горных породах [3]. В основном такому анализу подвергаются рыхлые образования. Данные о содержании той или иной фракции в породе дают представление о её генезисе, физико-механических свойствах, инженерно-геологических особенностях и минеральном составе [1, 3]. При исследовании донных отложений одно из ведущих значений приобретает представление о потенциальном загрязнении водоёма ввиду того, что от механического состава аллювиальных осадков зависит их способность накапливать различные поллютанты (тяжелые металлы, радиоактивные элементы, углеводороды и т. д.) [2].

Объект исследования и методы. Летние полевые работы проводились в 2011 г. Для исследования было отобрано 52 пробы из верхнего слоя (до 10 см) русловых отложений городской части малой реки Неглинки (Петрозаводск). Глубина водотока в точках наблюдения колеблется от 0 до 0.5 м. На пересохших участках реки пробы отбирались при помощи специальной лопатки из нержавеющей стали, а из-под слоя воды – с применением дночерпателя системы Экмана-Берджи. После просушки собранного материала до воздушно-сухого состояния при помощи стандартного сита с размером ячеек 2 мм из каждого образца была удалена часть фракций, стоящих (по классификации Л.Б. Рухина) выше границы галечно-гравийных пород с песками (табл.). Дальнейшему изучению были подвергнуты усредненные части проб с размером зёрен, соответствующим песчаной, алевритовой и глинистой фракциям.

Анализ распределения частиц образцов проб по размерам проводился на многофункциональном анализаторе частиц серии LS13 320 (Beckman Coulter) в лаборатории геологии, технологии и экономики минерального сырья Института геологии КарНЦ РАН.

Таблица 1. Классификация осадочных пород (по Рухину, 1956)

Название породы	Размер зёрен, мм
Глыбы	>1000
Валуны, камни	1000-200
Галька, щебень	200-10
Гравий, дресва, хрящ	10-2
Песок	2-0.05
Алеврит	0.05-0.005
Глина	<0.005

Определения выполнялись методом лазерной дифрактометрии в жидкой среде – воде – на основе использования физического принципа рассеяния электромагнитных волн различной длины. Это позволяет анализировать частицы размером от 0.04 до 2000 мкм (т.е. от коллоидных глинистых до грубозернистых песчаных частиц осадка) в соответствии со стандартом ISO 13320-1. Чтобы исключить погрешности измерений из-за процесса коагуляции (слипания мелких зёрен), все образцы были дополнительно обработаны ультразвуковыми волнами.

Обработка данных и их графическое представление осуществлялись при помощи программ Microsoft Excel 2007 и OriginPro 8.5.1.

Результаты и их обсуждение. Проведенные исследования показали, что для большинства проб характерно преобладание песчаных фракций (рис. 1), а именно фракций с размером зёрен от 0.1 до 0.25 мм и от 0.25 до 0.5 мм.

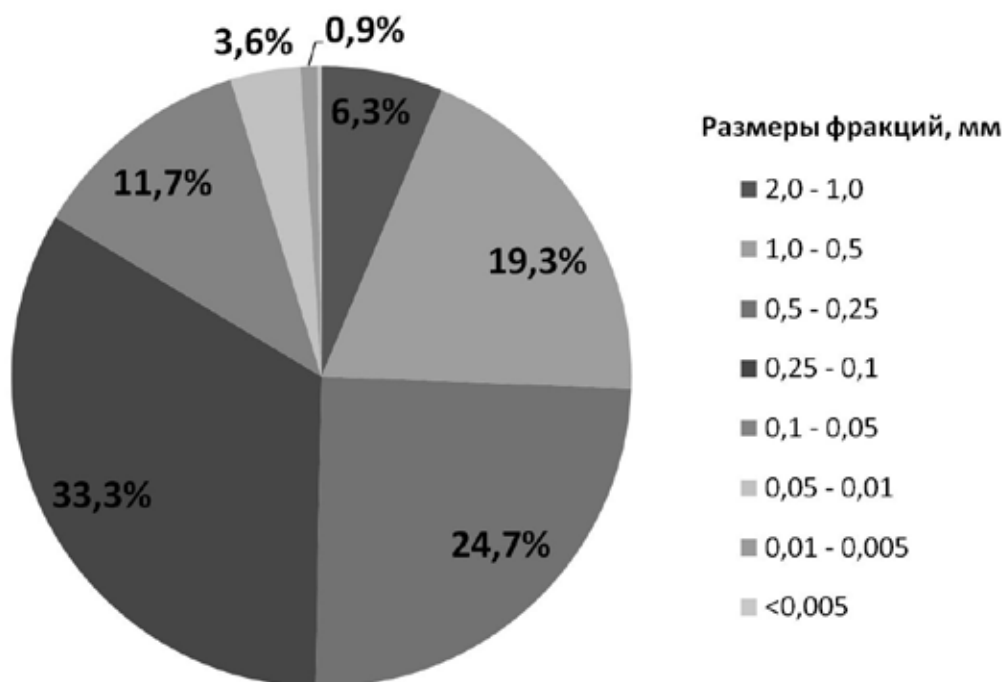


Рис. 1. Среднее содержание глинисто-алеврито-песчаных фракций по всем пробам донных отложений городской части р. Неглинки.

Суммарно средне- и мелкозернистая фракции составляют 58% в среднем по всем пробам. Тонкозернисто-песчаные (0.1-0.05 мм), алевритовые и глинистые частицы в сумме не превышают в среднем четверти от общей массы всех исследованных образцов донных отложений реки Неглинки.

Исходя из классификации смешанных пород [3], 20 из 52 изученных образцов следует отнести к алевритовым пескам, т.к. содержание в этих пробах песчаных частиц колеблется от 82% до 95%, а алевритовых от 5% до 18%. Остальные образцы донных отложений следует именовать «чистыми» песками.

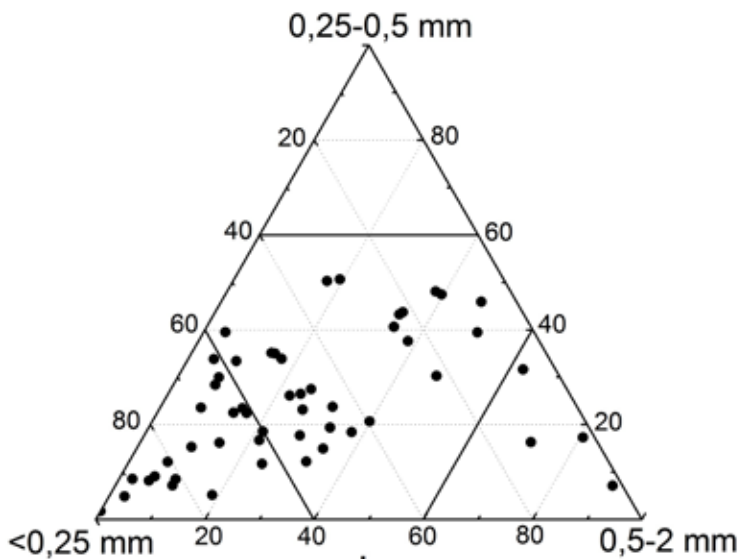


Рис. 2. Треугольная диаграмма соотношения песчаных частиц разного размера в донных отложениях городской части р. Неглинки.

каждой пробе, построены кумулятивные кривые, по крутизне наклона которых можно судить о сортировке осадочного материала. На представленных ниже графиках некоторых из образцов донных отложений реки (рис. 3) видно, что резкий изгиб кривой приходится на размеры зерен от 0.5 мм до 0.1 мм. Это также подтверждает заметное преобладание в пробах средне- и мелкозернисто-песчаной фракций.

Кроме того, резкий крутой подъём вверх кривых говорит о слабой сортировке осадочного материала. Среднее значение коэффициента сортировки (S_0), рассчитанного по этим образцам проб равно 1.75. У хорошо сортированных пород это значение близко к единице [1].

Выводы. Исследование образцов проб донных отложений малой городской реки Неглинки выявило значительное преобладание в них песчаной фракции. Около трети из изученных образцов следует отнести к тонко- и мелкозернистым пескам. Почти половину (52%) проб следует называть разномзернистыми песками. Слабая сортировка осадков подтверждается крутиз-

На треугольной диаграмме (рис. 2) видно, что всего в 4 образцах преобладают грубо- и крупнозернистые частицы (то есть в этих осадках их $\geq 60\%$); в 21 образце доминируют тонко- и мелкозернистая песчаные фракции. Оставшиеся 27 образцов (точки в центре треугольника) можно отнести к разряду разномзернистого песка.

На основе данных о конечных логарифмах размеров фракций [1] и их процентном содержании в

ной кумулятивных кривых и высоким средним значением (1.75) коэффициента сортировки.

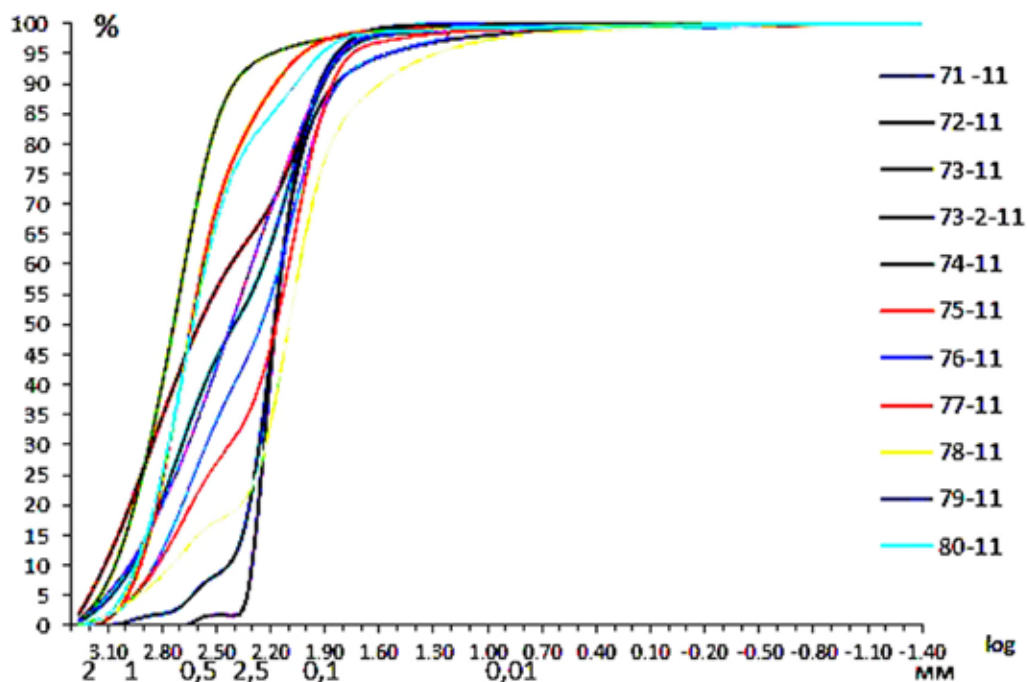


Рис. 3. Кумулятивные кривые некоторых образцов донных отложений р. Неглинка.

Список литературы

1. Коваль С.А., Войцеховский Г.В. Компьютерная обработка результатов гранулометрического анализа их генетическая интерпретация. Воронеж: ВГУ. 2001. 35 с.
2. Лукьянов С.А, Лебедев А.А., Шварцман Ю.Г. Гранулометрический состав донных отложений и его распределение в устьевой зоне р. Северной Двины // Вестник Северного (Арктического) федерального университета. Серия: Естественные науки. № 2. 2011. С. 12-19.
3. Рухин Л.Б. Основы литологии. Учение об осадочных породах. Изд. 3-е. Л.: Недра. 1969. 704 с.

О СТРУКТУРЕ ФОРМУЛ СОСТАВОВ

Смирнова Н.Л.

Московский Государственный Университет, г. Москва, snl194@mail.ru

Рассматриваются формулы из коэффициентов химических соединений и минеральных видов (примерно 3000). Формулы составлены в соответствии с рациональной номенклатурой. Установлена структура формул и их встречаемость. Вся система формул является производной от примерно 30 2-арных формул.

Вся Вселенная состоит из систем, а системы из объектов. Объекты состоят из одинаковых и разных элементов. Число одинаковых элементов, отображается коэффициентами.

Система химических соединений, а также минеральных видов состоит из химических элементов. Каждое соединение отображается формулой, которая составлена из качественной формулы и количественной формулы. Качественные формулы образованы разными символами – химическими элементами. Количественные формулы состоят из коэффициентов, означающих число одинаковых символов. Например, соединению $K_2Cr_2O_7$ соответствует качественная формула $KCrO$ и количественная формула 227 (два два семь).

Список формул неорганических соединений [3] составленный по правилам рациональной номенклатуры содержит около 3000 формул. Качественные формулы состоят из 1-7 химических элементов, то есть они представляют собой 1-,2-,...7-арные формулы. Некоторые из формул содержат одинаковые химические элементы. Например, в $Bi_2CO_3(OH)_4$ содержатся 2 атома кислорода O.

Количественные формулы составляем из всех коэффициентов формулы. Вышеупомянутое соединение будет иметь в этом случае формулу 21344. Если формулы имеют наибольший общий делитель (НОД), то все коэффициенты формулы делим на этот НОД. Например, формула $B_{18}H_{22}$ становится формулой B_9H_{11} , а все 1-атомные формулы имеют состав 1.

Для сопоставления формул коэффициенты пишем в порядке: больший, наибольший, а затем от наименьшего к меньшему. Например, формулу 21344 делим на 2 части и пишем 44(123). Частичную формулу 44 называем квази 2-арной.

В 2-арных формулах коэффициенты больший и наибольший различны и не имеют НОД. Только формула 11 состоит из 2 одинаковых коэффициентов. В этом случае, у всех 2-арных формул максимальные коэффициенты оказались равными 1-.13 (точка стоит перед двузначным коэффициентом).

Наибольший коэффициент .13 установлен только 1 раз, поэтому приводим 2-арные формулы с наибольшими коэффициентами 1-.12:

11; 12; 23, 13; 34, 14; 45, 35, 25, 15; -56, 16; 67, 57, 47, -37, 27, 17; 78, -58, 38,-18; 89, -79, 59, 49, -29, -19; -9.10, -7.10, -3.10, -1.10; -10.11, 9.11, -8.11, -7.11, 6.11, 5.11, -4.11, -3.11, -2.11, -1.11; -.11.12, -7.12, 5.12, 1.12;

Знаком минус в вышеуказанном списке, отмечены формулы, которые не были обнаружены. Всего реализованных формул 26, а не реализованных формул – 20. Кроме того, реализуется 2-арная формула 2.13. Из 27 реализованных 2-арных формул 8 (67, 57, 17, 89, 49, 9.11, 6.11, 5.11) не реализуются в виде квази 2-арных формул.

В 3-арных и более сложных формулах реализуются в виде квази 2-арных формул дополнительно 56, 3.10, 7.12. ,.20.21.

В 3-арных и более сложных формулах коэффициенты большой и наибольший могут содержать НОД и образовывать арифметические прогрессии: 11(разность 11), 22, 33, 44, 55, 66, 88, .10.10, .12.12, .24.24;

12(12), 24, 36, 48, 6.12, 9.18;

13(13), 26, 39, 4.12, 5.15, 6.18;

14(14), 28, 3.12, 4.16, 23(23), 46, 69, 34(34), 68, 35(35), 6.10, 25(25), 4.10, 15(15), 2.10;

37(37), 6.14, 47(47), 8.14, 79 (79), .28.36, 49(49) , 8.18.

Таких частичных квази 2-арных формул всего 31. Из формул этого списка не реализованы 2 квази 2-арные формулы 37, 79. Итак, всего формул из большого и наибольшего коэффициентов равно $26+1-8+4+31=54$.

Реализованные формулы. Ниже приводим все реализованные 2-арные и более сложные формулы. Количественные формулы можно представить в виде линейной complicationной схемы (ЛКС). Плоская complicationная схема для 2-арных отношений, составлена на основании закона Вейса [2], Форейем, Брокоччи, Голтштмитом [1]. Н.Л. Смирнова представила плоскую complicationную схему для n-арных формул с $n=2$ и более в виде линейной complicationной схемы. Все формулы коэффициентов приведены ниже в линейной схеме.

Линейная complicationная схема

11 (1, 11, 111), 22 (1, 11, 12, 112), 33 (1, 12, 111, 1111, 1113), 44 (1, 11, 12, 14, 111, 112, 122, 123, 124, 1111), 55 (1, 11, 13), [Д 11], 66 (1, 12, 13, 14, 136, 144), 88 (14, 122, 124), .10.10 (12), .12 .12 (136), [.21. 21 (56)], .24.24 (67), .20 .21 (156), 89, 78 (24), 67, -56 (1, 11), 9.11, 45 (1), [11], -79, .28 .36 (17.12), 34 (1, 11, 23, 1111, 11111) [12], 68 (12, 1236), 57;

23 (1, 2, 11, 12, 111, 112, 122), 46 (11, 12, 114) [Д 11, 12], 69 [16], (133), -58, 35 (1), 6.10 (14) [Д 14], 7.12 (13), 47 (2, 22)[12], 8.14 (144), 59 (14), 6.11;

12 (1, 11), 24 (1, 11, 12, 111, 112), 36 (1, 11, 12, 112, -222), [Д 11, Д 12], 48 (12, [22] 14, 112, 124) [Д 12], 6.12 (13, 112, 124)[16], 9.18 (136), 5.11, 49, 8.18 (18, 126) [Д 18], -37, [6 .14 (123)], 5.12 (13), 25 (11, 12, 112) [Д 11, 12], 4.10 (14), [6.15 (12)], 38 (2) [22];

13 (1, 11, 111), 26 (1, 11, 12) [Д 11], 39 (1,111), 4.12 (11, 12, 13, 114, 144), 5.15 (1122), 6.18 (12, 13), -3.10 (11) [Д 11], †2.40 (13, 15), 27 (1, 2, 22), 14 (1, 11), [Д 11], 28 (1, 11, 12, 122), 3.12 (1, 2), 4.16 (1), [-29 (11, 22)], 15 (11) [Д 11], 2.10 (11) [12], 16 (1), 2.13 (1), 17, -18, 1.12, **01**.

Из всех установленных нами 159 формул, 2-арных -27, 3-арных -29, 4-арных -58, 5-арных -37, 6-арных -6, и 7-арная -1. Таким образом, анионно-катионные соединения состоят из 1-7 составляющих, а не из 1-4 коэффициентов (катионный или анионный состав).

Не многие формулы содержат коэффициенты 5 и более. Из них 2-арные: 45, 35, 25, 15, 16, 67, 57, 47, 27, 17, 78, 38, 89, 59, 49, 9.11, 6.11, 5.11, 5.12,

Таблица.

Встречаемость	1	1	1	2	2	Сумма формул
Арность	2	3	4	5	6	
Сумма коэф. 2	1	1	0	0	0	2
Сумма коэф. 3	1	1	0	0	0	2
Сумма коэф. 4	1	1	1	0	0	3
Сумма коэф. 5	2	2	1	1	0	6
Сумма коэф. 6	1	2	2	0	0	5
Сумма коэф. 7	3	3	3	1	0	10
Сумма коэф. 8	2	2	3	1	0	8
Сумма коэф. 9	2	3	4	3	0	12
Сумма коэф. 10	0	3	3	2	1	9
Сумма коэф. 11	2	3	3	2	1	11
Сумма коэф. 12	1	1	5	1	2	10
Сумма коэф. 13	3	4	5	1	0	13
Сумма коэф. 14	1	0	2	2	0	5
Сумма коэф. 15	2	0	4	4	0	10
Сумма коэф. 16	1	2	1	3	0	7
Сумма коэф. 17	3	0	3	0	0	6
Сумма коэф. 18	0	0	1	0	0	1
Сумма коэф. 19	0	0	3	1	0	4
Сумма коэф. 20	1	0	1	0	0	2
Сумма коэф. 21	0	1	4	2	0	7
Сумма коэф. 22	0	0	1	3	0	4
Сумма коэф. 23	0	0	2	1	0	3
Общая сумма	27	29	52	28	4	140
Дополнит. суммы			6	7	2	157

1.12 и несколько 3-арных и более сложных. Лишь небольшое число формул не содержат коэффициент 1. Из них 20 2-арных формул 78 (24), 38 (2) [22], 23, 25, 27, 34, 35, 38, 45, 57, 49, 57, 59, 67, 78, 89, 9.11, 5.11, 6.11, 5.12, 1.12, 2.13, и 8 более сложных .24.24 (67), 78 (24), 8.18 (18, 126), 9.18 (136), .20 .21 (156), .28 .36 (17.12), 12.40 (1135), 68 (1236).

Валовые химические формулы. Валовые формулы, полученные из 5-, 6-, 7-арных химических формул содержат число составляющих 4 и 5. Эти формулы для сравнения включены в линейную компликационную схему в квадратных скобках. Буквой «Д» обозначены частичные формулы, ранее установленные для 4-арных химических (не валовых) формул. Из 37 5-арных формул 17 валовых имеют такую же формулу, что и исходные химиче-

ские, а 20 валовых становятся 4-арными. Лишь одна квази 2-арная формула 29 появляется впервые. Шести 6-арным формулам соответствует 5 валовых 4-арных. Одной 7-арной формуле соответствует 1 валовая 4-арная. Таким образом, валовые формулы закономерно включаются в линейную компликационную схему.

Суммы коэффициентов. Сумма коэффициентов соответствует числу всех атомов приходящихся на формулу. В таблице приведены суммы 2- 23 и соответствующие им числа 2-,...6-арных формул. Общая встречаемость формул находится в границах 1- 12 формул.

Помимо сумм 2-23 у 4-арных формул и более сложных установлены дополнительные суммы. У 4-арных имеется 6 дополнительных сумм со встречаемостью единица: 27, 28, 35, 56, 58, 61. У 5-арных формул имеются дополнительно суммы 25 (3 формулы), 31, 34, 35, 37, 53, 84 – со встречаемостью один. У 6-арных имеется 2 формулы с суммой больше 23, а именно 26 (2 формулы). Всем суммам больше 23 соответствует по 1 формуле за исключением сумм 25 и 26. Добавляем еще 2 формулы 1-, 7-арные, получаем 159 формул, которые приходятся на 36 сумм ($22+6+6+2=36$).

Полученные нами реализованные суммы и формулы будут закономерно пополняться. Можно предположить, что структура составов в других системах будет иметь такой же вид, что и в рассмотренной системе формул.

Список литературы

1. Гольдшмидт В. О компликации и диспликации. Апатиты / Геол. ин-т Кольского НЦ РАН. 1998. 69 с.
2. Смирнова Н.Л., Белов Н.В. / Возможные гомологические серии и встречаемость простых форм. // ДАН СССР. 1984. Т. 279. Вып. 3. С. 633-636.
3. <http://ru.wikipedia.org/wiki> / Список_неорганических_соединений_по_элементам - Список неорганических соединений по элементам.

ДИНАМИКА РЕАЛЬНЫХ ФОРМ КРИСТАЛЛОВ НА ПРИМЕРЕ ОКТАЭДРА И РОМБОДОДЕКАЭДРА

Степенщиков Д.Г.

Геологический институт Кольского научного центра РАН, Апатиты,
stepen@geoksc.apatity.ru

Введение. Для описания искажённой формы кристаллов, получаемой при росте кристалла в анизотропной среде, был предложен термин *реальная кристаллографическая форма* [2]. «Реальность» кристалла здесь ограничивается только неравным развитием на кристалле граней одной и той же про-

стой формы (различным расстоянием от условного центра кристалла) и не учитывает скульптуру граней или внутренние дефекты кристалла (рис. 1).

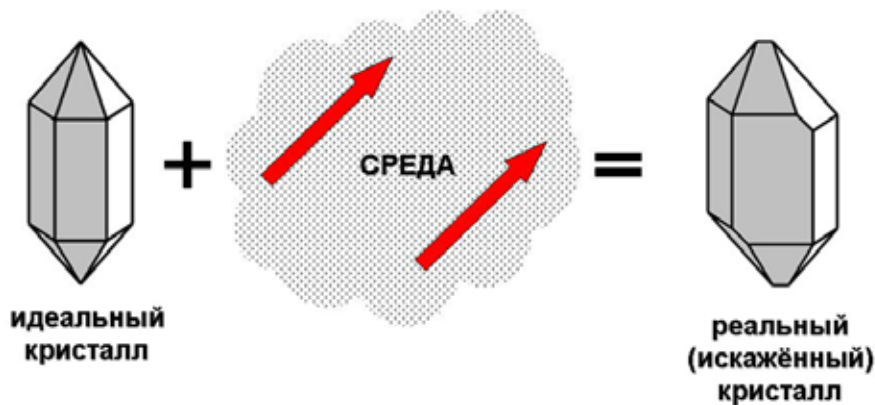


Рис. 1. К определению реальной формы кристалла (см. текст).

Так как расстояния от граней до центра кристалла могут варьироваться в широких пределах, число реальных форм для заданного набора граней кристалла бесконечно. Но это множество можно разбить на конечное число подмножеств, в каждом из которых реальные формы *комбинаторно эквивалентны*, то есть одни и те же грани кристалла имеют одинаковое число сторон и смежны друг с другом в одинаковом порядке) (рис. 2.). Будем считать, что все реальные формы в каждом подмножестве одинаковы, и наоборот, реальная форма, соответствующая данному подмножеству может быть представлена любой входящей в него формой.

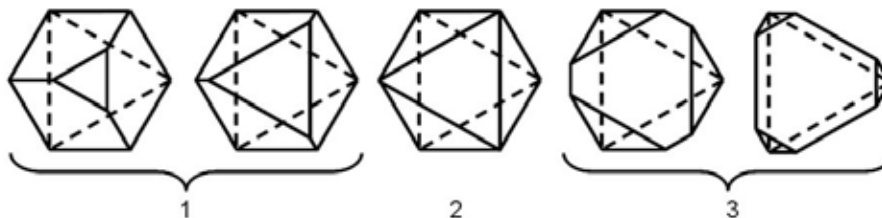


Рис. 2. Пример трёх реальных форм октаэдра. Формы, объединённые под одним номером – комбинаторно эквивалентны и представляют одну и ту же реальную форму.

Некоторые простые формы (тетраэдры, куб, ромбоэдр) имеют только одну реальную форму. Другие – гораздо больше (сотни, тысячи). Автором перечислены некоторые множества реальных простых форм, в частности, реальных форм октаэдра (всего 33) и ромбододекаэдра (всего 625).

Переходы между реальными формами кристаллов. *Тангенциальный рост* грани кристалла можно рассматривать как её параллельный сдвиг вдоль нормали. Скорости роста граней разных простых форм в изотропных условиях отличаются друг от друга, а если условия анизотропны – могут различаться и скорости граней одной простой формы. Реальная форма кри-

сталла при этом меняется сложным образом. Рассмотрим ростовой сдвиг какой-либо грани, при всех остальных неподвижных гранях. В зависимости от выбранной реальной формы и сдвигаемой грани результат может быть различным. Покажем это на примере реальной формы октаэдра № 8 (номера согласно рис. 1 из [4]), изображённой на рисунке 3. Подвижная грань обозначена стрелкой. При росте грани до определённого момента форма кристалла остаётся прежней (стадия I). Затем, в момент вырождения ребра грани в вершину, кристалл приобретает форму № 14 (II). Дальнейший рост грани приводит к смене формы на № 13 (III), и, наконец, растущая грань выклинивается, оставляя на кристалле форму № 5 (IV). В процессе роста грани реальная форма кристалла изменилась три раза, причём, на последней стадии число граней кристалла уменьшилось на единицу. На рис. 4 изображена та же реальная форма № 8, но уже с другой сдвигаемой гранью. В этом случае форма кристалла меняется пять раз: формы № 10, № 7, № 11, № 9 и № 4, для стадий II-VI, соответственно.

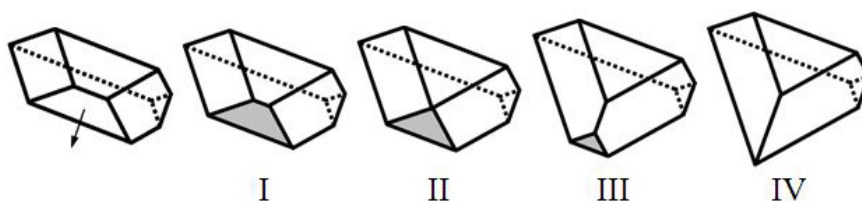


Рис. 3. Последовательное изменение реальной формы при смещении грани (серое).

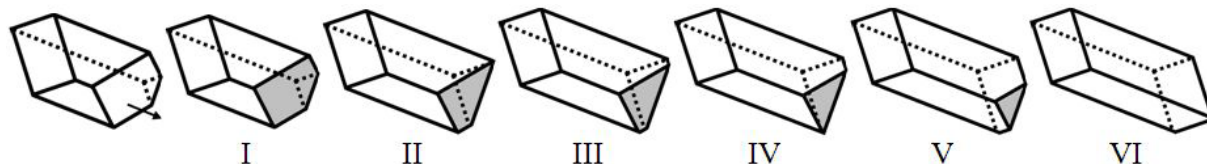


Рис. 4. Изменение реальной формы (см. рис. 1) при смещении другой грани (серое).

Всего при росте грани кристалла возможны три случая:

- а) реальная форма кристалла не изменяется;
- б) реальная форма изменяется, число граней остается прежним;
- в) реальная форма изменяется, число граней уменьшается на единицу.

Первый случай говорит о том, что реальная форма допускает вариации геометрических размеров кристалла (без изменения комбинаторики поверхности). Облик кристалла при этом может радикально меняться от изометрического, до столбчатого, таблитчатого или досковидного. Второй и третий случаи интересны тем, что растущий кристалл может менять свою реальную форму. В рассмотренном примере смещалась только одну грань. В реальности все грани растут одновременно, но в силу различия их скоростей роста и расстояния от центра кристалла, можно полагать, что смена реальной формы на другую происходит в момент сдвига какой-либо одной

грани. Все такие переходы между реальными формами для заданного набора граней кристалла (простая форма или их комбинация) можно свести в таблицу, которая показывает динамику изменения реальной формы кристалла. Номера строк и столбцов таблицы соответствуют номерам реальных форм (по порядку). На пересечении i -й строки и j -го столбца ячейка таблицы закрашивается чёрным цветом, если i -я реальная форма переходит в j -тую, и белым в противном случае.

Результаты и обсуждение. Для реальных форм октаэдра и полногранных форм ромбододекаэдра получены соответствующие таблицы переходов (рис. 5).

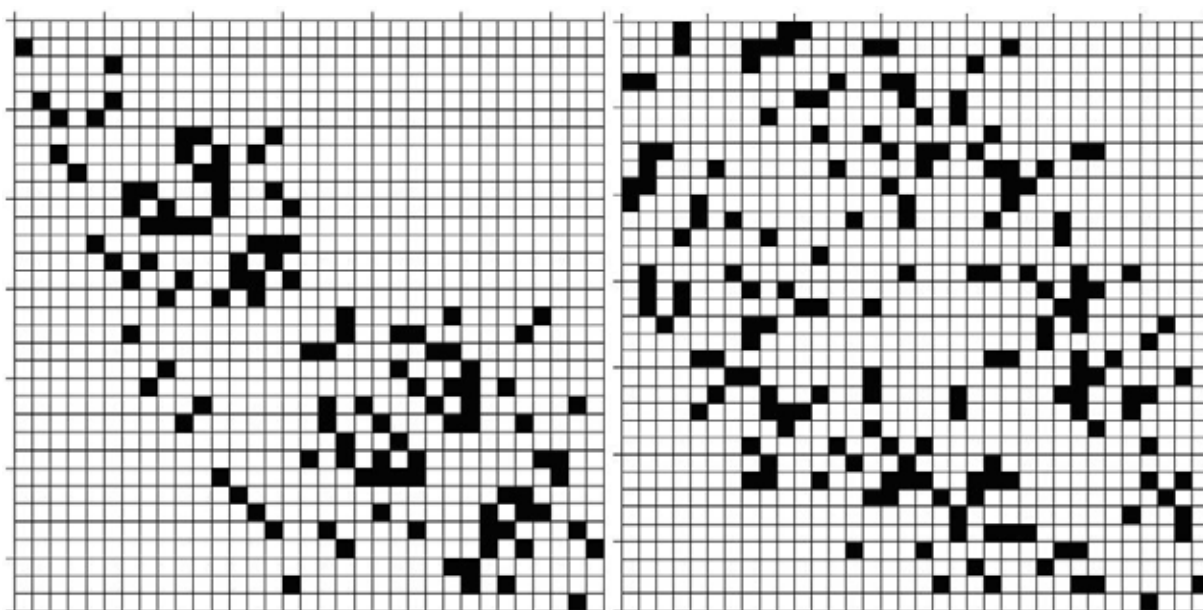


Рис. 5. Переходы между реальными формами октаэдра (слева) и полногранными реальными формами ромбододекаэдра (справа).

Анализ полученных таблиц позволяет сделать несколько выводов:

1. Почти все реальные формы октаэдра переходят в другие. Исключение представляют две формы № 1 и № 4: первая образована выклиниванием четырёх граней октаэдра в результате их быстрого роста и оставляет псевдотетраэдрический кристалл изометричным. Форма № 4 образована в результате выклинивания пары параллельных граней и допускает в дальнейшем любое изменение псевдоромбодоэдрического облика кристалла. Для полногранных реальных форм ромбододекаэдра таких исключений нет. Для обеих таблиц не существует реальных форм, в которые бы не переходили другие формы.

2. Обе таблицы не симметричны – есть как односторонние, так и взаимные переходы форм друг в друга. Каждый взаимный переход представляет собой простейший цикл, но существуют и более сложные циклы, например, №№ 32-26-31-25-30-33 (рис 5., слева) или №№ 11-17-15-21-27-23 (рис 5., справа), то есть в процессе эволюций роста реальная форма, сменившись ря-

дом других форм, может снова проявиться на кристалле. Т.о., переход между некоторыми реальными формами представляет собой последовательность элементарных переходов.

3. С повышением симметрии реальной формы, среднее число переходов её в другие формы падает. На рис. 6 показаны графики зависимости среднего числа переходов (N) реальных форм октаэдра и полногранного ромбододекаэдра от их порядка группы автоморфизмов (a.g.o.). Например, для октаэдра реальные формы с порядком группы автоморфизмов 8 (всего 2 формы) переходят каждая в среднем в две другие формы. Падение числа переходов объясняется тем, что на реальной форме присутствуют эквивалентные грани, отдельный рост каждой из которых приводит к одному и тому же результату.

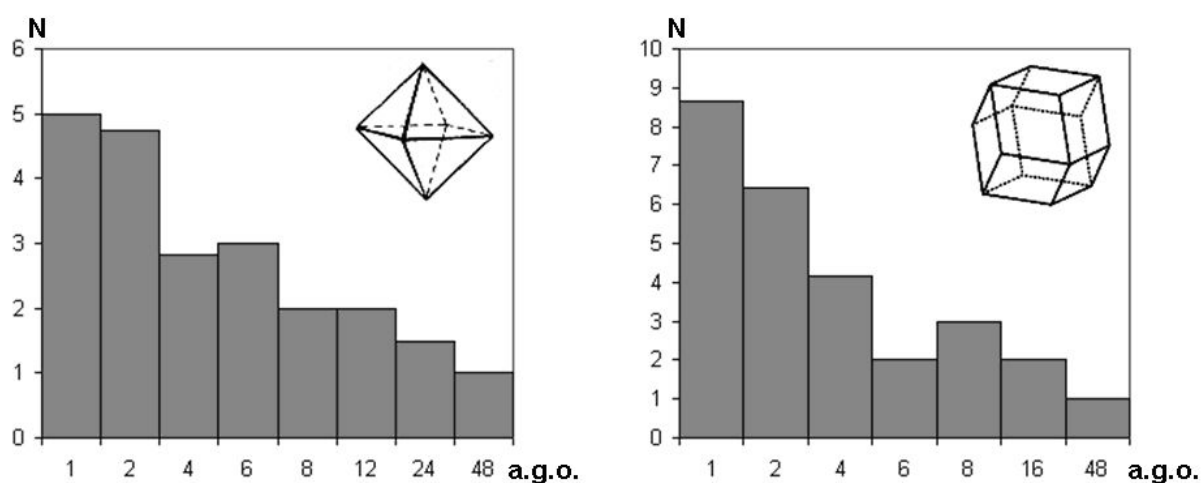


Рис. 6. Среднее число переходов реальных форм в зависимости от порядка группы автоморфизмов.

Смена реальной формы кристалла может происходить не только при изменении условий образования, вызвавших изменение скоростей роста граней, но и в стационарной изотропной среде. Если расстояния граней от центра кристалла не одинаковы, то сдвиг граней за некоторый отрезок времени приведёт к другим соотношениям расстояний и форма кристалла уже не будет подобна себе, что приведёт к смене его реальной формы.

На практике целесообразно использование обнаруженных взаимосвязей только между полногранными формами, т.к. неполногранные формы соответствуют сильно неизотропным, и поэтому, маловероятным природным условиям. Согласно [5], в природе встречаются полногранные формы октаэдра № 20, № 27, № 32 и № 33. Неполногранная форма № 15 там же встречается только один раз (таf. 33, fig. 135) и, вероятно, это осколок. В [1] отмечается также форма октаэдра № 31. Вопрос о том, все ли полногранные формы октаэдра могут быть реализованы на естественных кристаллах, остается открытым. Исследование доступного материала – кристаллов альмандина

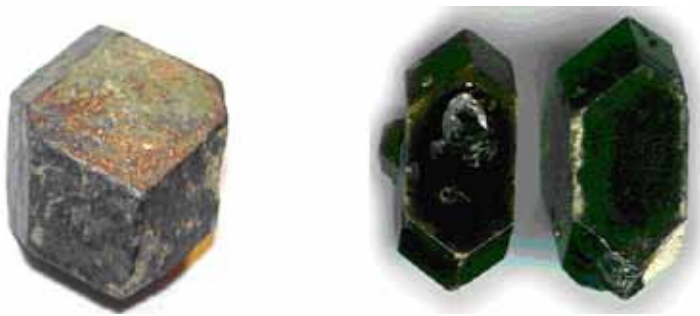


Рис. 7. Реальная форма (№ 29) кристаллов альмандина (Западные Кейвы, Кольский п-ов, слева) и андрадита (р. Ахтаранда, Якутия, справа).

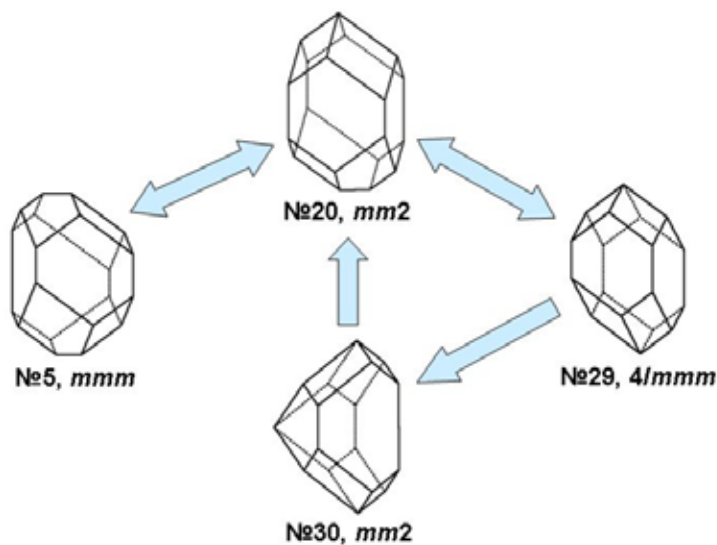


Рис. 8. Взаимосвязь между реальными формами кристаллов альмандина (Западные Кейвы, Кольский п-ов).

(Зап. Кейвы, Кольский п-ов) выявило всего 16 наблюдаемых реальных форм, чаще из которых встречаются 6 форм: №№ 5, 14, 20, 29, 30 и 34. Наиболее часты № 29 и № 34 (номера согласно рис. 1 из [3]). Форма № 29 наблюдалась и раньше на кристаллах якутских андрадитов, причём в более выраженной степени, чем для кейвских альмандинов (рис. 7). Форма № 34, отвечающая идеальному развитию кристалла, может говорить о слабой анизотропии среды кристаллообразования. Из указанных выше шести форм явными переходами связаны четыре: №№ 5, 20, 29 и 30 (рис. 8).

Заключение. Первые этапы исследования реальной формы кристалла демонстрируют своеобразный анализ – разбиение всего

многообразия форм кристалла на обособленные виды – реальные формы. Предполагалось, что в стационарных условиях симметрия каждой реальной формы соответствует определённым анизотропным условиям кристаллообразования. Дальнейшее развитие приводит к синтезу – объединению различных реальных форм, посредством переходов. Цепочки, или циклы, составленные из реальных форм, описывают систему динамически – изменение формы кристалла в процессе роста при определённых условиях (стационарных или динамических). Подобную картину можно наблюдать и при изменении габитуса кристалла в изменяющихся Р-Т условиях, с той лишь разницей, что габитус кристалла зависит от степени развития *граней различных простых форм*, а не от *различных граней одной простой формы*. Поэтому при нахождении некоторого разнообразия реальных кристаллических форм на одном и том же участке минералообразования, следует искать взаимосвязь между этими реальными формами, представляющими собой, возможно, различные этапы роста кристалла в определённых условиях.

Формы, встречающиеся в преобладающем количестве, вероятно, являются конечными звеньями таких цепочек.

Учёт реальной формы кристалла следует проводить с пониманием её возможных эволюций. Уже очевидно, что не стоит жестко привязывать симметрию конкретной реальной формы к симметрии кристалла и среды.

Работа выполнена при поддержке Фонда содействия отечественной науке.

Список литературы

1. Бартошинский З.В., Гневушев М.А. Внешняя симметрия якутских алмазов и условия их кристаллизации // Зап. ВМО. 1969. № 5. С. 560-567.
2. Войтеховский Ю.Л. О реальных кристаллографических кубе и октаэдре // Матер. Межд. конф. «Кристаллогенезис и минералогия». С.-Петербург, 17-21 сент. 2001 г. СПб.: Изд-во СПбГУ. 2001. С. 418-419.
3. Voytekhovskiy Y.L., Stepenshchikov D.G. On the real crystal rhombododecahedra // Acta Cryst. 2004. A 60. P. 582-584.
4. Войтеховский Ю.Л., Степенщиков Д.Г. Реальные кристаллографические простые формы // Зап. ВМО. 2004. № 2. С. 112-120.
5. Goldschmidt V. Atlas der Krystallformen. Heidelberg: Winter. 1916. V. III.

КЛАСТЕРНАЯ СБОРКА 3-МЕРНЫХ УПОРЯДОЧЕННЫХ ТЕТРАЭДРИЧЕСКИХ (ТЕТРАКООРДИНИРОВАННЫХ) СТРУКТУР И 2-МЕРНАЯ ПРОЕКЦИЯ 8-МЕРНОЙ СИСТЕМЫ ВЕКТОРОВ E_8

Талис А.Л.

Институт элементоорганических соединений РАН, Москва,
talishome@mail.ru

Введение. Фёдоровская группа «размножает» стартовые полиэдры жёсткими кристаллографическими движениями трёхмерного евклидова пространства E^3 , которые (в общем случае) не отображают локальную некристаллографическую симметрию этих полиэдров. Примером может служить квадратная решётка с правильным 5-угольником в каждом квадрате, которая возникает как результат размножения стартового пятиугольника фёдоровской группой. Очевидно, что некристаллографическая пятерная ось, действующая в пределах одного квадрата, не может быть отображена фёдоровской группой. Иными словами, фёдоровская группа отображает лишь часть симметричных закономерностей упорядоченной структуры, собранной из подструктур.

В [15] приведена схема (рис. 1), которую можно рассматривать как конкретизацию известной цитаты Е. Вигнера "Часто физики, развивая теорию

ров) E_8 максимальной исключительной алгебры Ли e_8 , строение которой, в конечном итоге, определяет и строение 3-мерных упорядоченных (не только кристаллических) структур. Конкретизация этого положения для тетраэдрических (тетракоординированных) структур и является целью настоящей статьи, в которой будут решены и некоторые вопросы, поставленные в [6].

1. Симметрии, определяемые решеткой E_8 , кластерная сборка и особый 40-вершинный геликоид в политопах $\{3,3,5\}$. Каждая из n -мерных, $n=1, 2, \dots, N$ систем корней (векторов), генерирующих решетки, характеризуется особыми числами

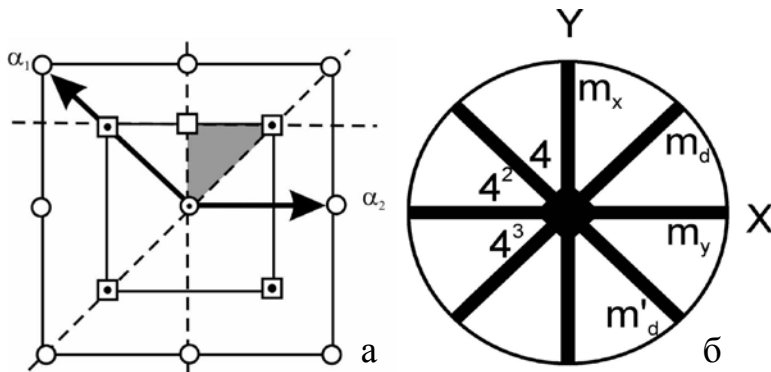


Рис. 2. а – система корней B_2 , порождаемая простыми векторами α_1 и α_2 , которые перпендикулярны показанным пунктиром плоскостям отражений; б – точечная группа симметрии квадратной решетки, состоящая из 4-х плоскостей отражений и 4-х вращений.

– показателями m_n , которые, в частности, определяют группу симметрии решетки [1-4, 7, 17, 18]. Например, для квадратной решетки (генерируемой системой векторов B_2) $m_1=1$, $m_2=3$, а группа симметрии состоит из 8 элементов: 1, m_x , m_y , m_d , m'_d , 4, 4^2 , 4^3 (рис. 2). Действительно, по теореме Шепарда-Тодда [3], число преобразований симметрии, представимых произведением плоскостей симметрии, равно: $(1+m_1t)(1+m_2t)=(1+1t)(1+3t)=1+4t+3t^2$, где t – плоскость симметрии, множество $4t$ определяет 4 плоскости: m_x, m_y, m_d, m'_d , а множество $3t^2$ – три поворота: 4, 4^2 , 4^3 .

Для решетки E_8 число корневых векторов $240=8 \times 30$ (рис. 3 а), где старший инвариант 30 – это период элемента Коксетера [3,4]. Согласно [3,9],

$$30=7+23=11+19=13+17=1+29, \quad (1)$$

где 1, 7, 11, 13, 17, 19, 23, 29 – показатели E_8 , что позволяет выделить 7-вершинное объединение 4-х тетраэдров (рис. 4 а) в качестве особого структурного элемента. Действительно, хотя этот 7-вершинник вкладывается и в политоп $\{3,3,5\}$, и в икосаэдр (рис. 1 а, 2 а, д. [6]), но наиболее полно определить его можно лишь конкретизируя соотношения связи E_8 с минимальной конечной проективной плоскостью $PG(2,2)$, которую образуют 7 точек (рис. 2 б, [5]). В частности, на взятом из [11] рис. 3 символ вектора, который находится между двумя треугольниками, соответствует вершине номер 4 семивершинника (рис. 4 а), а треугольники соответствуют граням 1-2-3 и 5-6-7.

Политоп $\{3,3,5\}$ представляет собой разбиение сферы S^3 на 600 правильных тетраэдров по алгоритму – «20 правильных тетраэдров у каждой вершины» [9, 13]. Алгоритм «4 объединяемых по граням тетраэдра у каждой вершины» определяет объединение 30 тетраэдров из $\{3,3,5\}$, вершины которого принадлежат его многоугольнику Петри – геликоиду из 30 рёбер (термин геликоид употребляется здесь и далее лишь для краткости, в действительности речь идёт об орбите рёбер винтовой оси) с нецелочисленной осью симметрии $30/11$ (рис. 2 а-в, [6]). Данное объединение тетраэдров из политопы $\{3,3,5\}$, обозначим $\{30/11(30)\}$, а генерирующее его 7-вершинное объединение 4-х тетраэдров – $\{30/11(7)\}$. При отображении в E^3 объединение правильных тетраэдров $\{30/11(30)\}$ вкладывается в бесконечный тетраэдрический геликоид Коксетера $\text{Cox}(30/11)$, который определяется (но не обладает!) осью $30/11$ и не имеет трансляции (рис. 2 а, [6]).

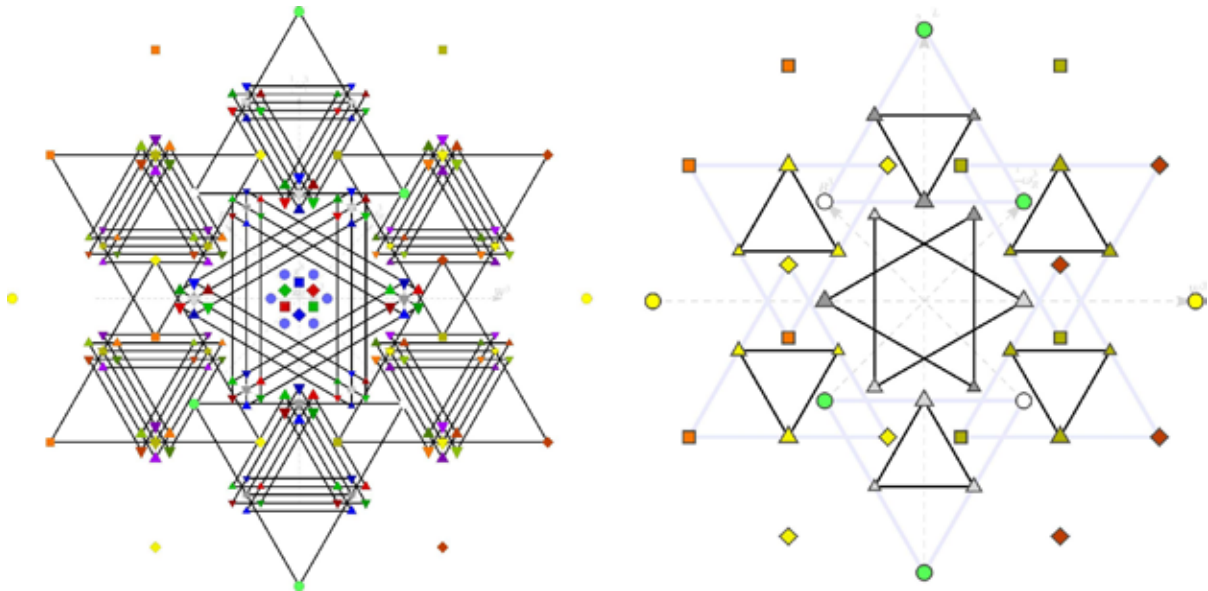


Рис. 3. а – проекция на плоскость 240 корней 8-мерной системы E_8 , которая отображает соотношения связи между системами E_8 , F_4 и G_2 [11]; б – проекция на плоскость 48 корней 4-мерной системы F_4 . Большие, средние и малые треугольники одного цвета располагаются по вершинам треугольника, символизирующего их объединение автоморфизмами F_4 [11].

Политоп $\{3,3,5\}$ строится по конструкции Госсета из 24-вершинного политопы $\{3,4,3\}$ [9]. Для этого каждое из 96 рёбер политопы $\{3,4,3\}$ центрируется, что приводит к 96-вершинному «политопу» $\text{sn-}\{3,4,3\}$ из 24 кубооктаэдров и 24 кубов (рис. 4 б). При добавлении к $\text{sn-}\{3,4,3\}$ вершин политопы $\{3,4,3\}$ * дуального $\{3,4,3\}$, кубооктаэдры политопы $\text{sn-}\{3,4,3\}$ центрируются, что приводит к 120-вершинному политопу $\text{Sn-}\{3,4,3\}$. Центры 24 октаэдров политопы $\{3,4,3\}$ образуют дуальный ему политоп $\{3,4,3\}$ *, вершинам таких политопов соответствуют 48 векторов системы F_4 (рис. 3 б). Группа Вейля системы F_4 определяется как централизатор группы Вейля системы

G_2 в группе Вейля системы E_8 , поэтому вложение (на 2-мерной проекции) системы F_4 в E_8 иллюстрирует рис. 3 а, б) [11].

Сдвиг каждой вершины $Sn-\{3,4,3\}$ из середины ребра $\{3,4,3\}$ в точку, делящую его в соотношении 1: τ (τ – золотое сечение), приводит к трансформации центрированного кубооктаэдра в центрированный икосаэдр – объединение 20 правильных тетраэдров, 7 из которых (в качестве $\{30/11(7)\}$) входят в геликоид $\{30/11(30)\}$. При этом куб, находящийся между двумя кубооктаэдрами в политопе $sn-\{3,4,3\}$, трансформируется в объединение 5 тетраэдров [9], из которых в $\{30/11(30)\}$ войдут лишь 3 (рис. 4 в). Вершины этих трёх тетраэдров являются и вершинами $\{30/11(7)\}$, между которыми они находятся. Такое объединение 3-х тетраэдров возникает при разбиении 14-вершинного фрагмента $\{30/11(14)\}$ геликоида $\{30/11(30)\}$ на объединение двух $\{30/11(7)\}$. Иными словами, если взять 2 изолированных $\{30/11(7)\}$ и объединить их по общей треугольной грани, то получим 11-вершинный фрагмент $\{30/11(11)\}$ геликоида $\{30/11(30)\}$. Если же эту общую грань «разрезать» и раздвигать 7-вершинники $\{30/11(7)\}$, не теряя при этом вершин $\{30/11(30)\}$, то получим $\{30/11(14)\}$ (рис. 4 в).

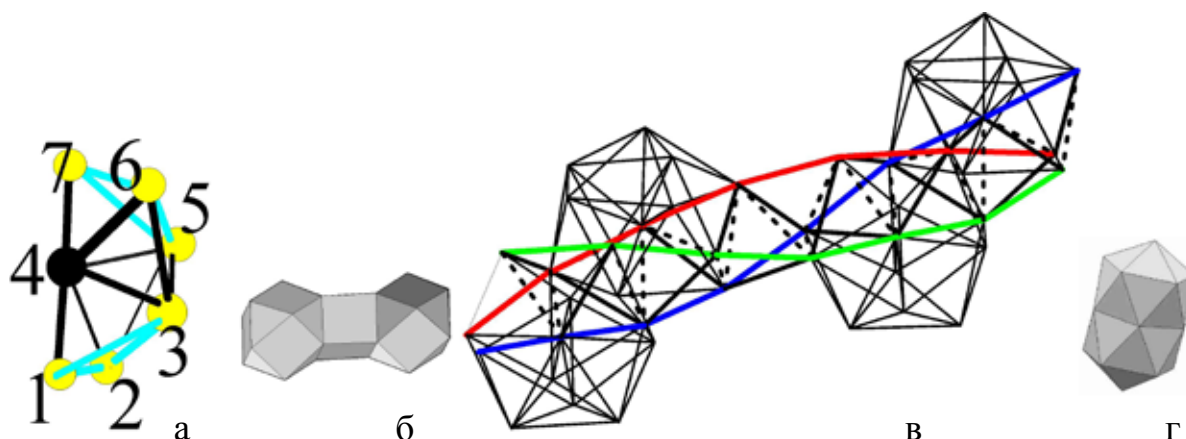


Рис. 4. а – объединение 4-х тетраэдров, общая вершина которых показана зачернённым кружком; б – фрагмент политопа $Sn-\{3,4,3\}$ – куб между двумя кубооктаэдрами; в – икосаэдр в политопе $\{3,3,5\}$ (соответствующий кубооктаэдру на рис. 4 б) граничит по 3-ой оси с икосаэдром, а по 2-ой – с объединением 5 тетраэдров (которое соответствует на рис. 4 б кубу). Вершины, расположенные на красной, зелёной и синей линиях принадлежат геликоиду $\{30/11(30)\}$; г – два взаимопересекающихся икосаэдра с общей 5-ой осью [12].

Рассмотренное выше объединение двух конгруэнтных $\{30/11(7)\}$ позволяет определить $\{30/11(30)\}$ в следующем виде:

$$\{30/11(30)\} = \cup k_{n-1,n} \{30/11(7)\}_{n-1}, \quad (2)$$

где $k_{n-1,n}$ – преобразование, отображающее на себя $\{30/11(11)\}$ или $\{30/11(14)\}$, $k_{0,1}=1$. Иными словами, $k_{n-1,n}$ может сохранять инвариантной об-

щую грань $\{30/11(7)\}_{n-1}$ и его конгруэнтной копии $\{30/11(7)\}_n = k_{n-1,n} \{30/11(7)\}_{n-1}$; или сохранять инвариантным тетраэдр, две вершины которого принадлежат $\{30/11(7)\}_{n-1}$, а две другие – $\{30/11(7)\}_n$.

Группами автоморфизмов политопов $\{3,3,4\}$, $\{3,4,3\}$ и $\{3,3,5\}$, являются группы единичных кватернионов [3,9,13]:

$$V' = (\pm 1, 0, 0, 0), (0, \pm 1, 0, 0), (0, 0, \pm 1, 0), (0, 0, 0, \pm 1) \quad (3)$$

$$T' = \bigcup_{n=0}^2 (1/2, 1/2, 1/2, 1/2)^n V' \quad Y' = \bigcup_{n=0}^4 T'(1/2 * 1/\tau, -1/2 * 1/\tau, 0, -1/2)^n$$

При этом группа 3-го порядка Ω_3 , состоящая из $(1/2, 1/2, 1/2, 1/2)^n$, $n=0,1,2$, отображает друг в друга векторы, входящие в один треугольник на проекциях (рис. 3 а, б). Можно показать, что группа $N_{E_8}(\Omega_3)$ – нормализатор Ω_3 в группе Вейля системы E_8 , будет содержать преобразование $k_{n-1,n}$, которое сохраняет общую грань двух $\{30/11(7)\}$:

$$W(E_8) \supset N_{E_8}(\Omega_3) \supset k_{n-1,n}, \quad (4)$$

где $W(E_8)$ – группа Вейля системы E_8 , представляющая собой группу отражений порядка $696729600 = 2^{14} \times 3^5 \times 5^2 \times 7$. Диаграмма Коксетера–Дынкина для E_8 [3, 4, 9] показывает, что оси 30/11 (как произведению 8 порождающих плоскостей) перпендикулярна ось 2-го порядка (как произведение 2-х плоскостей). Вершинами кластера $\{30/11(7)\}$ являются вершины 1,2...7 геликоида 30/11 (рис. 4 а), поэтому, в качестве удовлетворяющего (4) преобразования $k_{n-1,n}$ можно выбрать одну из трёх двойных осей, которая сохраняет грань 5-6-7 и проходит через вершину 6 этого кластера. Обозначив эту ось, действующую только на стартовый кластер $\{30/11(7)\}_1$, через $2^{[6]}_{1,2}$, получим кластер:

$$\{30/11(11)\} = \{30/11(7)\}_1 \cup 2^{[6]}_{1,2} \{30/11(7)\}_1, \quad (5)$$

в котором к исходному 7-вершиннику добавлен конгруэнтный ему 7-вершинник 5-6-7-8-9-10-11 геликоида 30/11. При совмещении полученного 7-вершинника с исходным, вершина 10 совпадает с вершиной 6, поэтому в полученном кластере $\{30/11(11)\}$ ось, сопряженная $2^{[6]}_{1,2}$ сохраняет грань 9-10-11 и вершину 10. Эта ось $2^{[6]}_{2,3}$ действует только на $2^{[6]}_{1,2} \{30/11(7)\}_1 = \{30/11(7)\}_2$, поэтому получаем кластер:

$$\{30/11(15)\} = \{30/11(7)\}_1 \cup 2^{[6]}_{1,2} \{30/11(7)\}_1 \cup 2^{[6]}_{2,3} \{30/11(7)\}_2 \quad (6)$$

Продолжая объединение кластеров $\{30/11(7)\}$ по алгоритму (6), получим при $n \rightarrow \infty$ бесконечный тетраэдрический геликоид Коксетера (рис. 2 а, [6]):

$$\text{Сох (30/11)} = \bigcup_{n-1,n} 2^{[6]}_{n-1,n} \{30/11(7)\}_{n-1} \quad (7)$$

Если вместо оси $2^{[6]}_{1,2}$ взять ось $2^{[5]}_{1,2}$, которая также сохраняет грань 5-6-7 инвариантной, но проходит через вершину 5, то по алгоритму (7) получим геликоид:

$$10/3 \{30/11(7)\} = \cup 2^{[5]}_{n-1,n} \{30/11(7)\}, \quad (8)$$

который представляет собой орбиту кластеров $\{30/11(7)\}$ винтовой оси $10/3$ (поворот на 108° и трансляция). Ось $10/3$ совпадает с винтовой осью 10_1 политопа $\{3,3,5\}$, которая совпадает с одной из его двух главных осей. Ось 10_1 является осью 60-вершинного стержня (замкнутого в тор) из 10 икосаэдров с общими пентагональными бипирамидами (рис. 4 г, 5 а). На оси такого стержня расположены 10 вершин, между которыми располагаются 10 боковых пятёрок вершин. Если из каждой боковой пятёрки отбросить 2 вершины, то получим 40-вершинный фрагмент геликоида (8). Геликоиды $30/11$ и стержни из пересекающихся икосаэдров широко используются для отображения симметрии металлов, сплавов и других тетраэдрических структур [12,16]. Развиваемый подход позволяет построить геликоид из икосаэдров с центрами в центрах 7-вершинников, принадлежащих геликоиду $10/3 \{30/11(7)\}$. Такой геликоид, фактически, реализует допускаемое политопом $\{3,3,5\}$ «совмещение» симметрии 5-ой (10-ой) оси с симметрией оси $30/11$.

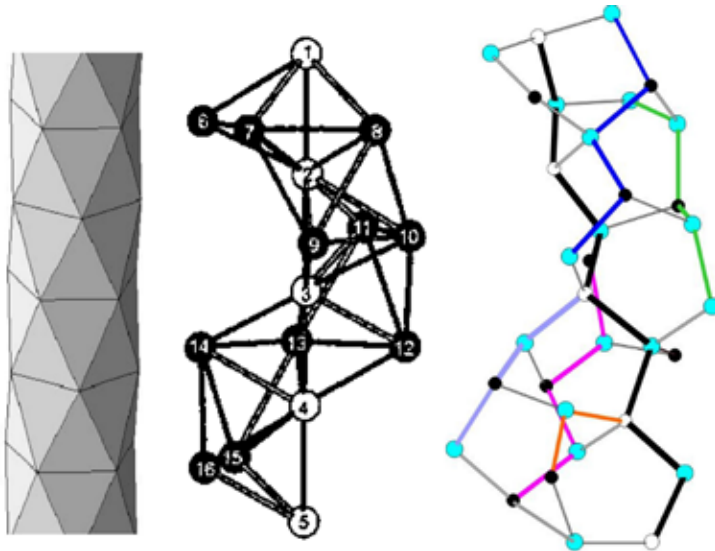


Рис. 5. а – стержень из пересекающихся икосаэдров с общей 5-ой осью [12]; б – геликоид $10/3 \{30/11(7)\}$ содержится в стержне а. Белые вершины расположены на оси стержня, тройки чёрных вершин являются вершинами перпендикулярных ей пентагонов; в – состоящий из гексациклов геликоид алмазоподобной структуры, обвивает показанную жирными линиями цепочку. Данная цепочка подобна 110-цепочке в алмазе, белые и чёрные вершины соответствуют белым и чёрным вершинам б, синие – центрируют тетраэдры стержня а. Зелёная, синяя, чёрная и фиолетовая, пастельная, оранжевая цепочки образуют каналы $\{2*30/11(7)\}$.

Переброски диагоналей в ромбах из двух соседних треугольников геликоида $10/3 \{30/11(7)\}$ трансформируют его в геликоид с кристаллографической осью 4_1 из 7-вершинных одношапочных октаэдров (октаэдр и стоящий на нём тетраэдр), который вкладывается в ГЦК-решётку (рис. 4 в, [6]). Все вершины ГЦК-решётки охватываются такими непересекающимися геликоидами 4_1 из одношапочных октаэдров (рис. 4 г, [6]), следовательно, трансформация каждого из них в геликоид $10/3 \{30/11(7)\}$ определяет трансформацию ГЦК-решётки в объединение параллельных геликоидов $10/3 \{30/11(7)\}$.

Решётка E_8 – алмазная упаковка в E^8 [4], определяет и политоп $\{240\}$ – алмазоподобную структуру на расположенной в E^4 3-мерной сфере (рис. 5, [5]). На рис. 2 б [5] изображён 14-вершинный кластер $\{2*30/11(7)\}$ политопа $\{240\}$, который получается при размножении $\{30/11(7)\}$ осью 2-го порядка. В [10] было установлено, что икосаэдрический и тетраэдрический порядки топологически совместимы только вдоль 3-ой и 2-ой осей икосаэдра. Иными словами, стержни тетракоординированных (алмазоподобных) структур могли обладать лишь этими (и кратными им) осями. Замена в $10/3\{30/11(7)\}$ каждого тетраэдрического кластера $\{30/11(7)\}$ на алмазоподобный $\{2*30/11(7)\}$ приводит к определению геликоида $10/3\{2*30/11(7)\}$ из политопа $\{240\}$ (рис. 5 в). Геликоид $10/3\{2*30/11(7)\}$ обвивается вокруг 5-ой оси икосаэдра (рис. 5), что позволяет говорить о совместимости икосаэдрического и тетраэдрического порядков для геликоидов, но не для стержней. Конструкции, построенные из геликоидов $10/3\{2*30/11(7)\}$, необходимы для отображения симметрии смешанных «тетраэдрическо-тетракоординированных» структур.

2. Проекция системы E_8 на плоскость и разбиения вершин многоугольника петри политопа $\{3,3,5\}$. Система E_8 определяет 120 векторов, задающих политоп $\{3,3,5\}$ (рис. 3 а). Соотношения (3) и конструкция Госсета построения политопа $\{3,3,5\}$ [9] определяют разбиение 30 вершин многоугольника Петри на 5 шестёрок, причем 4 шестёрки принадлежат одному типу, а одна – другому. Многоугольник Петри центросимметричен, поэтому каждая шестёрка вершин должна быть представлена двумя сопряжёнными треугольниками. Всем этим условиям отвечает представленная на рис. 6 а схема, которая совпадает с соответствующей 30-вершинной частью проекции E_8 на плоскость (рис. 3 а). Действительно, все треугольники попарно сопряжены, при этом 4 пары (красная, зелёная, синяя и розовая) относятся к первому типу, а пара треугольников из чёрных точек – ко второму. В силу конструкции Госсета, каждая пара первого типа относится к одному из 4-х политопов $\{3,4,3\}$, вкладывающихся в 96-вершинный политоп $Sn-\{3,4,3\}$, а пара треугольников второго типа относится к политопу $\{3,4,3\}^*$, который дуален исходному политопу $\{3,4,3\}$.

Если отбросить пару треугольников второго типа, а все пары треугольников первого типа покрасить в один цвет, то получим 2-мерную проекцию политопа $\{3,4,3\}$ на плоскость (рис. 6 б). Эта проекция совпадает с рис. 3 б и с рис. 12 [8], который демонстрирует наличие оси $12/5$ в политопе $\{3,4,3\}$. В этой же работе на рис. 7 была приведена и проекция, которая, фактически, показывает наличие в политопе $\{3,4,3\}$ и оси 8-го порядка. Раскраска нами вершин на рис. 7 [8] и соединение их жирной линией позволяет получить рис. 6 в, который демонстрирует наличие в $\{3,4,3\}$ и оси $8/3$. Действительно, две красные вершины, которые совмещаются поворотом на 45° , совмещаются и при движении по жирной линии, соединяющей красную, синюю,

зелёную и красную вершины. Таким образом, куб поворота, соединяющего красную и синюю вершины, равен 45° ; следовательно, сам поворот производится осью $8/3$ на 135° . Итак, если в (определяющей ось $30/11$) проекции на плоскость 30 векторов из E_8 отбросить два треугольника из чёрных точек (рис. 6 а), то можно перейти к проекции на плоскость вершин $\{3,4,3\}$ (рис. 6 б), которая в форме рис. 6 в определяет ось $8/3$.

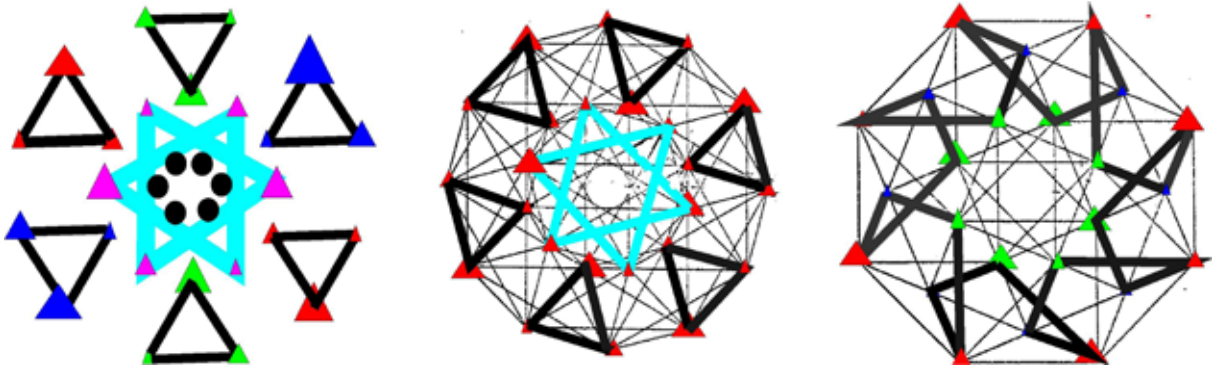


Рис. 6. а – разбиение множества 30 вершин многоугольника Петри политопа $\{3,3,5\}$ как подсистема (представленной на рис. 3 а) проекции E_8 на плоскость; б – проекция на плоскость вершин политопа $\{3,4,3\}$ [8], на которой жирными линиями выделены такие же как на рис. 3 б треугольники; в – проекция на плоскость вершин политопа $\{3,4,3\}$ [8], на которой жирной линией показан геликоид $8/3$.

Соотношения между осями $30/11$ и $8/3$ были подробно рассмотрены в [6]. Если применение особой проекции E_8 на плоскость позволяет (посредством проекций рис. 6) получить те же результаты, то данный подход должен объяснить и полученное в таблице 4 [6] распределение 30 вершин многоугольника Петри политопа $\{3,3,5\}$ по 11 виткам.

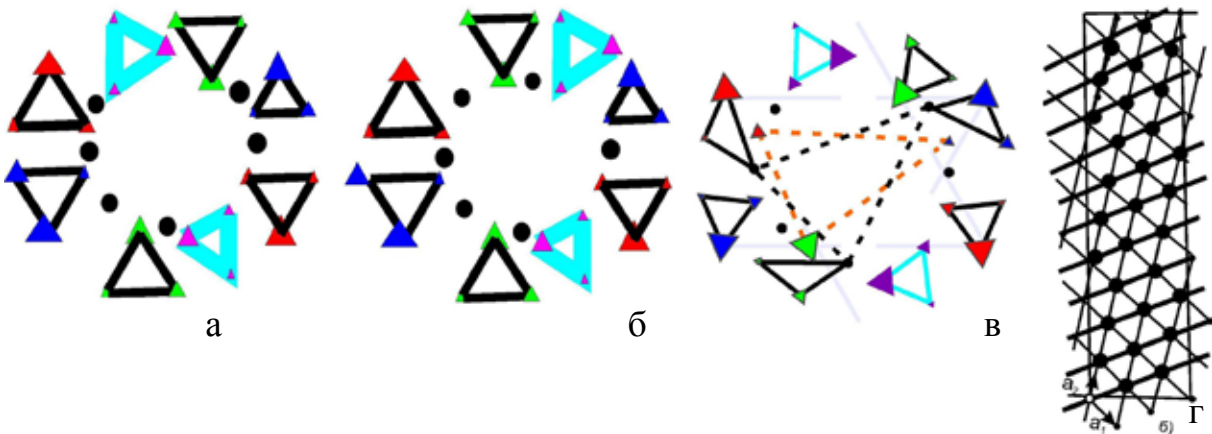


Рис. 7 а, б – разбиения множества 30 вершин многоугольника Петри политопа $\{3,3,5\}$, которые возникают при размещении всех треугольников рис. 6 а на одной окружности; в – вершины представленных на рисунке 7 а красного, зелёного и синего треугольников заменяются ближайшими к ним чёрными точками, что приводит к смене показанных пунктиром треугольников; г – распределение 30 вершин многоугольника Петри политопа $\{335\}$ по 11 виткам [16], которое определяется рис. 7 в.

Для этого от рисунка 6 (а) перейдем к рисунку 7 (а, б), в которых на одной окружности размещены все 8 треугольников первого типа, между которыми размещены по одной чёрной точке – вершине треугольника второго типа. Если чёрную точку соотнести с вершиной 4, а два треугольника, между которыми она находится, с треугольниками 1-2-3 и 5-6-7 кластера, изображенного на рисунке 4 (а), то схемы рисунка 7 (а, б) определяют (в соответствии с (1)) разбиение 30 на $11+19$ и $7+23$. Если в 3-х треугольниках (рис. 7 а) одну из вершин заменить на ближайшую к ней чёрную точку, то перейдем к рисунку 7 (в), в котором эта замена показана посредством смены пунктирных треугольников. Результатом подобной операции является возникновение между двумя треугольниками пары из чёрной точки и бывшей вершины треугольника. Рассматривая каждый треугольник и каждую пару точек как 3 и 2 точки в витке, получим распределение 30 точек по 11 виткам (рис. 7 г), представленное в [16] и в таблице 4 [6].

Заключение. Идеологическим основанием данной работы является цитата Вигнера, приведённая во введении. Рациональным развитием этого положения является (на мой взгляд) кредо автора [1]: в объектах природы ищи алгебраические структуры, даже если за ними придётся выйти в неевклидовы или многомерные пространства. Действительно, в данной работе использована 8-мерная решетка и политоп, вершины которого находятся на (неевклидовой) 3-мерной сфере. Согласно [1], природа организована в соответствии с единым принципом или с корпусом непротиворечивых и согласованных в актах природы физических, химических, биологических законов. Как следствие этого принципа, сознание обязано воспроизводить объекты природы в адекватных алгебраических формах. Почему алгебраических? Потому что именно эта дисциплина занята самыми общими структурами, лежащими в основании математики и, стало быть, физики, химии, биологии и геологии, ведь вся природа «написана языком математики». В настоящей работе алгебраические структуры конкретизированы в форме структур алгебраической геометрии, определённых, в частности, в [2-4].

Полученные результаты применимы для широкого класса тетраэдрических и тетракоординированных упорядоченных структур, симметрия которых не может быть отображена фёдоровскими группами. Примером реализации полученных результатов может служить и подробно рассмотренная в [6] уникальная структура $\beta - Mn$.

Конкретные результаты работы представлены в виде следующих выводов:

1. Симметрия 8-мерной системы векторов E_8 позволила выделить 7-вершинное объединение 4-х тетраэдров, которое посредством самосборки определяет высокосимметричные геликоиды из тетраэдров и икосаэдров.
2. Симметрия E_8 позволяет определить геликоид алмазоподобной структуры, который обвивается вокруг 5-ой оси икосаэдра. Это демонстрирует

совместимость икосаэдрического и тетраэдрического порядков для геликоидов, но не для стержней.

3. Проекция на плоскость 240 корней E_8 и вершин политопа $\{3,4,3\}$ позволили определить соотношения между симметриями $30/11$ и $8/3$, которые подтверждают результаты [6]. Были установлены определяемые этими проекциями возможные разбиения вершин многоугольника Петри политопа $\{3,3,5\}$, которые (в конечном итоге) определяют кластерную сборку 3-мерных упорядоченных структур.

Автор выражает глубокую признательность М.И. Самойловичу за многолетний постоянный интерес к работе и стимулирующие обсуждения. Автор благодарит А.А. Реу за большую помощь в оформлении статьи.

Список литературы

1. Войтеховский Ю.Л. 12 этюдов на темы кристалломорфологии, минералогии и петрографии. Апатиты: Изд-во К & М. 2011. 204 с.
2. Дубровин Б.Л., Новиков С.П., Фоменко А.Т. Современная геометрия: Методы и приложения. Т. 1-3. М.: Изд-во УРСС. 2001. 268 с.
3. Коксетер Г.С.М., Мозер У.О. Порождающие элементы и определяющие соотношения дискретных групп. М.: Наука. 1980. 240 с.
4. Конвей Дж., Слоэн Н. Упаковки шаров, решётки и группы. Т.1. М.:Мир, 1990. 415 с.
5. Талис А.Л. Конструкции алгебраической геометрии как основа моделирования тетраэдрических и тетракоординированных упорядоченных структур / Сб. Трудов V Всероссийской научной школы «Математические исследования в естественных науках». Апатиты. Геологический ин-т КНЦ РАН. 2009. С. 56-64.
6. Талис А.Л. Плотные геликоидальные упаковки шаров и закономерности строения тетраэдрических и тетракоординированных упорядоченных структур / Сб. Трудов VI Всероссийской научной школы «Математические исследования в естественных науках». Апатиты. Геологический ин-т КНЦ РАН. 2010. С. 75-89.
7. Самойлович М.И., Талис А.Л. Геликоиды Госсета. I. 8-мерная кристаллографическая решётка E_8 и определяемые ею кристаллографические, квазикристаллографические и нецелочисленные винтовые оси геликоидов // Кристаллография. 2007. Т. 52. № 4. С. 599-605.
8. Baake D., Joseph M., Schlotmann M. The root lattice D_4 and planar quasilattices with octagonal and dodecagonal symmetry // Int. J. Mod. Phys B. 1990. V. 5. № 1. P. 1927-1953.
9. Coxeter H.S.M. Regular polytopes. New York: Dauer. 1973. 321 p.
10. Ishii Y. Propagating local positional order in tetrahedrally bonded system // Acta cryst. A. 1988. V. 44. P. 987-998.
11. Lisi. A.G. An Exceptionally Simple Theory of everything. 2007. arXiv:0711.0770v1
12. Lord E.A., Ranganathan S. Sphere packing helices and polytope $\{3,3,5\}$ //Eur. Phys.J. D. 2000. P. 335-343.
13. Mosseri R, Di Vincenzo D.P., Sadoc T.F., Brodsky M.H. Polytope model and electronic and structural properties of amorphous semiconductors // Phys. Rev. 1985.

В. 32. № 6. P. 3974-4000.

14. O'Keeffe M, Anderson S. Rod packing and crystal chemistry // Acta Cryst. 1977. A 33. P. 914-923.

15. Tegmark Max. Is «the theory of everything» merely the ultimate ensemble theory? // Annals of Physics. 1998. V. 270. P. 1-51.

16. Sadoc J. F., Rivier N. Boerdijk-Coxeter helix and biological helices // Eur. Phys. J. 1999. B. 12, P. 309-318.

17. Samoylovich M.I., Talis A.L. A special class of simple 24-vertex polyhedra and tetrahedrally coordinated structures of gas hydrates // Acta Cryst. A. 2010. V. 66. P. 616-625.

18. Samoylovich M.I., Talis A.L. Gosset helicoids: II. Second coordination sphere of eight - dimensional lattice E_8 and ordered noncrystalline tetravalent structures // Crystallography Reports 2009. V. 54. №.7 P. 1117-1127.

19. Wigner E.P. The unreasonable effectiveness of mathematics in the natural sciences. // Comm. Pure Appl. Math. 1960. V. 13. № 1. P. 1-14.

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ДИФРАКЦИИ ОДНОМЕРНЫХ КВАЗИПЕРИОДИЧЕСКИХ СТРУКТУР

Шутов А.В. ¹, Петросян Ж.Д. ²

¹ Владимирский государственный университет, Владимир, a1981@mail.ru

² Владимирский государственный университет, Владимир,
petrosyanzhanna@gmail.com

В работе рассмотрены некоторые новые математические модели одномерных квазикристаллов. Исследованы их дифракционные спектры.

Дифракционные методы играют решающую роль при экспериментальном исследовании строения твёрдых тел. Рентгеноструктурный анализ, электроно- и нейтронография базируются на интерпретации получаемой в ходе эксперимента дифракционной картины – распределения интенсивности рассеянного излучения.

Возникновение понятия квазикристаллов связано с экспериментально обнаруженными в 1982 г. квазикристаллами – веществами, дающими дифракционную картину с функциональными брэгговскими пиками, и симметрией пятого порядка, не совместимой с трансляционной решеткой [1]. Наличие резких дифракционных максимумов в квазикристалле свидетельствует о присутствии в структуре дальнего порядка в расположении атомов, характерного для кристаллов. Однако симметрия наблюдавшейся дифракционной картины противоречит фундаментальным представлениям классической кристаллографии.

К настоящему времени сложилась весьма продуктивная точка зрения, рассматривающая кристаллы как один из частных случаев квазикристаллов,

допускающих чисто точечную дифракцию, обусловленную наличием дальнего статистического трансляционного порядка.

В качестве математических моделей квазикристаллов обычно выступают неперриодические точечные системы, полученные проектированием точек решёток более высокой размерности в иррациональном направлении с дополнительным ограничением попадания ортогональной проекции в некоторое окно. Соответствующий подход получил название «model sets» [2]. Математические квазикристаллы, в отличие от физических, могут быть определены в любой размерности. В настоящее время доказано, что все «model sets» имеют точечный дифракционный спектр [3].

Однако в настоящее время обнаружено, что «model sets» являются не единственными апериодическими множествами, дающими точечный дифракционный спектр [4]. Математическая задача описания таких множеств на данный момент далека от своего решения. В связи с этим интересным является рассмотрение дифракционного спектра различных апериодических множеств, обладающих дальним порядком. В настоящей работе рассматривается два типа таких множеств. При этом для простоты рассматривается случай одномерных моделей квазикристаллов.

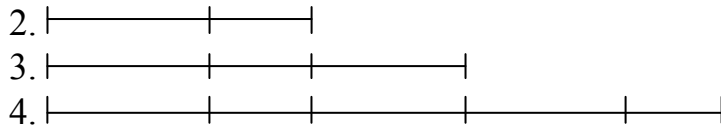
Первый рассматриваемый нами подход к построению одномерных моделей квазикристаллов основан на теории подстановочных динамических систем [5]. Пусть $A = \{a_1, \dots, a_n\}$ – некоторый конечный алфавит и A^m – множество всех слов алфавита, длина которых не превосходит m . Отображение s из A в A^m называется подстановкой. Отображение s очевидным образом может быть продолжено на множество любых слов над алфавитом A (включая как конечные, так и бесконечные слова). Можно показать, что подстановка s обязана иметь неподвижную точку $p = \{p_1, p_2, \dots, p_k, \dots\}$, где каждый символ p_j принадлежит алфавиту A . Зададим набор длин $\{l_1, \dots, l_n\}$ и определим последовательность вершин одномерного квазикристалла $\{x_j\}$ при помощи рекуррентной формулы $x_{j+1} = x_j + l_k$, если $p_j = a_k$. В качестве начального условия положим $x_0 = 0$. Частными случаями рассмотренной конструкции являются хорошо известные квазикристаллы Фибоначчи и Туэ-Морса.

Рассмотрим данную конструкцию на примере подстановки Фибоначчи [5]. В этом случае алфавит состоит из двух символов – «1» и «2». Каждому символу соответствует подстановка:

$$\begin{array}{l} 1 \longrightarrow 12 \\ 2 \longrightarrow 1, \end{array}$$

Предполагается, что соответствующие длины отрезков относятся как $1 : \tau$, где $\tau = (\sqrt{5} - 1)/2$ – золотое сечение. На первом шаге получаем 1, на втором – 12, на третьем – 121, на четвёртом – 12112, на пятом – 12112121 и т.д. Для каждого шага получаем соответствующие отрезки:

$$1. \text{ |-----|}$$



в пределе дающие квазикристалл Фибоначчи.

В данной работе разработана программа, которую можно использовать для моделирования рентгеновской дифракционной картины на одномерных квазикристаллах.

Напомним, что математически дифракционный спектр $Spec$ квазикристалла определяется как множество точек λ , для которых отношение $f_n(\lambda) = (\sum_{k=1}^n e^{2\pi i x_k \lambda}) / n$ не стремится к нулю при n , стремящемся к бесконечности.

Величина $A(\lambda) = \lim_{n \rightarrow \infty} f_n(\lambda) / n$ называется амплитудой дифракционного спектра квазирешетки, соответствующей длине волны λ .

На рисунке 1 изображен дифракционный спектр квазикристалла Фибоначчи и соответствующие ему амплитуды, а на рисунке 2 – дифракционный спектр квазикристалла Туэ-Морса.

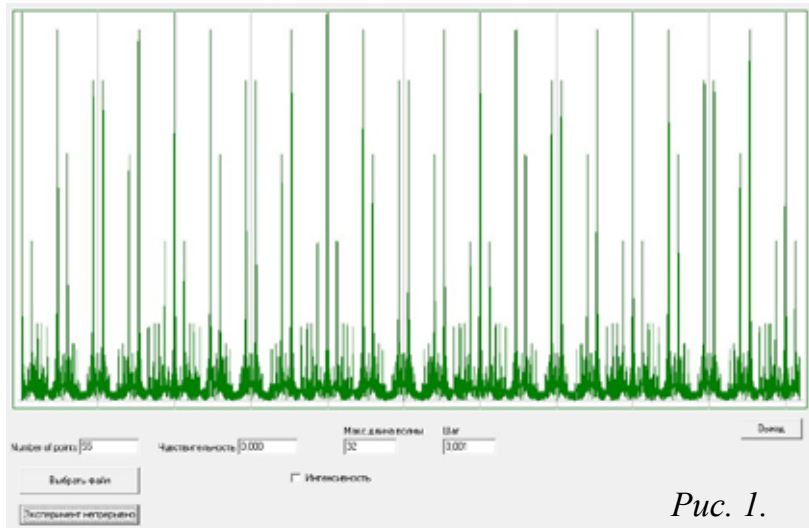


Рис. 1.

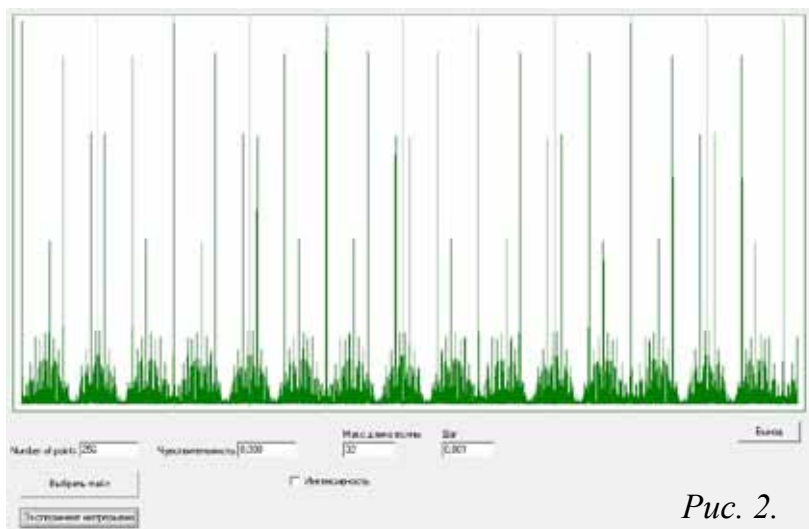


Рис. 2.

Второй подход к построению одномерных моделей квазикристаллов основан на параметризации их при помощи иррациональных сдвигов тора. Пусть T^N – N -мерный тор, на котором определен сдвиг R на вектор $\alpha = (\alpha_1, \dots, \alpha_N)$, координаты которого линейно независимы над кольцом целых чисел (вместе с 1). Хорошо известно, что тор T^N может быть разбит на $N+1$ область $\Omega_0, \dots, \Omega_N$. При $N=1$ такое разбиение единственно, в противном случае существует бесконечно много таких разбиений [6]. Вновь зададим набор длин $\{l_0, \dots, l_N\}$ и определим квазикристалл как последовательность точек $\{x_j\}$ рекуррентному соотношению $x_{j+1} = x_j + l_k$, если $R^n(0) \in \Omega_k$. В качестве начального условия вновь положим $x_0 = 0$. При $N=1$ и $\alpha = \tau$ мы вновь получаем квазикристалл Фибоначчи, однако в общем случае рассматриваемые нами конструкции неэквивалентны.

В случае рассматриваемой конструкции удастся получить математически строгое описание дифракционного спектра, который оказывается чисто точечным, хотя рассматриваемые нами множества в большинстве случаев не являются «model sets».

Теорема. Пусть $h_Q = \frac{1}{\text{vol}(T^N)} \sum_{k=0}^N \text{vol}(\Omega_k) l_k$ – параметр усреднённой решетки квазикристалла и $\lambda \neq \frac{a_0 + \sum_{k=1}^N a_k \alpha_k}{h_Q}$, $a_k \in \mathbb{Z}$. Тогда $A(\lambda) = 0$. В противном случае $A(\lambda) = e^{\pi i \sum_{k=1}^N \Gamma_k} \prod_{k=1}^N \frac{\sin \pi \Gamma_k}{\pi \Gamma_k}$, где $\Gamma_k = a_k - \lambda \sum_{j=1}^N e_{kj}^* (l_j - l_0)$ и $\{e_{kj}^*\}$ – координаты векторов базиса, двойственного к базису решетки, порожденной тором T^N .

При этом при $\Gamma_k = 0$ условно считается, что $\frac{\sin \pi \Gamma_k}{\pi \Gamma_k} = 0$.

Список литературы

1. Shechtman D et al. // Phys. Rev. Lett. 53 (1984). P. 1951-1953.
2. Moody, R. // From Quasicrystals to More Complex Systems, edited by F. Axel, F. Denoyer & J. P. Gazeau, Berlin: Springer-Verlag. 2000. P. 145–166.
3. Schlottman, M. // Quasicrystals and Discrete Geometry, edited by J. Patera, Fields Inst. Monogr. V. 10. Amer. Math. Soc., Providence, RI. 1998. P. 247-264.
4. Baake, M., Moody R., Richard, C., Sing, B. // Quasicrystals: structure and Physical Properties, edited by H.-R. Trebin, Wiley, Berlin. P. 188-207.
5. Pytheas Fogg, N. Substitutions in dynamics, arithmetics and combinatorics. Berlin: Springer-Verlag. 2002.
6. Шутов А.В. // Чебышевский сборник. 2012. Т. 12. Вып. 2(38). С. 151-162.

ПОДХОДЫ К ПРОБЛЕМЕ РЕАЛИЗУЕМОСТИ ПОСЛЕДОВАТЕЛЬНОСТИ ЧИСЕЛ КАК ГРАННОГО СИМВОЛА ПОЛИЭДРА

Ярыгин О.Н.

Тольяттинский государственный университет, Тольятти,
onyx2602@rambler.ru

В статье рассматриваются некоторые подходы к исследованию реализуемости конечной последовательности натуральных чисел как гранного символа полиэдра, основанные на диофантовых уравнениях полиэдров и условии связности.

При исследовании множества полиэдров возникают вопросы, связанные с наиболее компактным и однозначным описанием вида полиэдра, отражающим не только количества вершин (V), рёбер (E) и граней (F), но и порядок граней-многоугольников и степени вершин $d(v_i)$, а также их инцидентности.

Традиционно принято описывать полиэдр его эйлеровым классом (V, E, F) . В работе [2] используется «вектор многогранника», обозначаемый (f_0, f_1, f_2) , где f_0 – количество 0-граней (то есть 0-мерных граней, иначе говоря, вершин), f_1 – количество 1-граней (то есть рёбер), f_2 – количество 2-граней (то есть, собственно, граней), что является иначе обозначенным эйлеровым классом.

Гранный символ и диофантовы уравнения. При исследовании двойственности (дуальности) полиэдров [1], для описания набора граней полиэдра удобно использовать гранный символ (г.с.) $\{f_3, f_4, f_5, \dots\}$, где f_k – количество k -угольных граней, а для описания набора вершин – вершинный символ (в.с.) – $\{v_3, v_4, v_5, \dots\}$, где v_k – количество k -валентных вершин, при этом г.с. исходного полиэдра совпадает с в.с. дуального полиэдра.

Компоненты гранного символа служат переменными в уравнениях Эбергардта и других соотношениях, присущих множеству полиэдров [4].

В работе [2] дана формула, связывающая f_k и v_k . Учитывая, что $2E = \sum_{k \geq 3} k f_k$ (т.к. каждое ребро инцидентно двум граням), а также $2E = \sum_{k \geq 3} k v_k$ (т.к. каждое ребро инцидентно двум вершинам), получаем:

$$4E = \sum_{k \geq 3} k f_k + \sum_{k \geq 3} k v_k = 4V + 4F - 8 = 4 \sum_{k \geq 3} v_k + 4 \sum_{k \geq 3} f_k - 8,$$

$$\sum_{k \geq 3} (4 - k)(v_k + f_k) = 8. \quad (1)$$

Интересно отметить, что 4-валентные грани и вершины не влияют на величину левой части. Геометрически это объясняется тем, что вокруг k -й

вершины (на проекции Шлегеля) можно «обвести» v_k -угольник, каждая вершина которого будет иметь степень 4, при этом степени остальных вершин останутся неизменными (рис. 1). При этом, правда, изменятся количества граней разного порядка, но в в.с. изменится только v_4 .

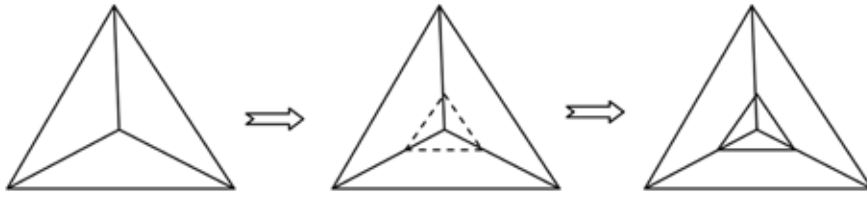


Рис. 1. Построение проекции Шлегеля нового полиэдра «обводом» вершины.

С другой стороны, каждая k -угольная грань, после построения проекции Шлегеля на эту грань, может быть «опоясана» лентой из k 4-угольных граней, что прибавит полиэдру и какое-то количество вершин 4-й степени, но даст проекцию нового полиэдра (рис. 2). При этом, аналогично предыдущему случаю, могут добавиться вершины других порядков, но в г.с. изменится только f_4 .

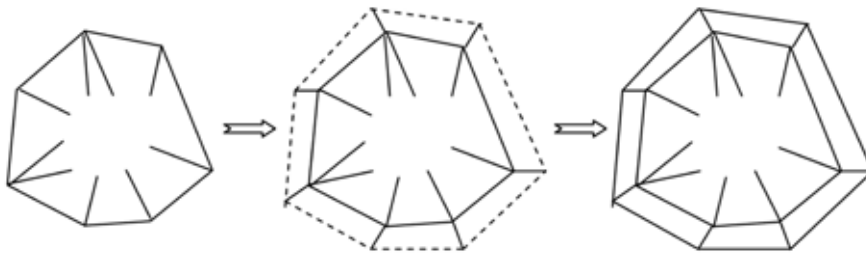


Рис. 2. Построение проекции Шлегеля нового полиэдра «опоясыванием» грани.

Таким образом, существуют преобразования полиэдров, весьма произвольно изменяющие количество 4-валентных элементов.

Возникает вопрос: существуют ли полиэдры, из которых при некотором преобразовании получаются полиэдры, отличающиеся только количеством 4-валентных элементов?

Положительный ответ на этот вопрос даёт простой полиэдр, «опоясываемый» лентой из 4-угольников. Действительно, при таком преобразовании проекции Шлегеля простого полиэдра изменяются только количества 4-валентных вершин v_4 и граней f_4 : $v_4^* = v_4 + k$, $f_4^* = f_4 + k$, где k – порядок любой из имеющихся граней полиэдра.

Но поскольку формула (1) справедлива для произвольного полиэдра, то количество 4-валентных элементов не должно влиять на величину константы, задаваемой суммой в левой части равенства (1). Это обеспечивается коэффициентом $(k-4)$, исключаяющим из суммы количества вершин и граней 4-го порядка.

Аналогично, из уравнения Эбергардта (2) можно сделать вывод о возможности произвольного количества 6-угольных граней.

$$3f_3 + 2f_4 + f_5 = 12 + f_7 + 2f_8 + \dots \quad (2)$$

(Заметим, что решения уравнений говорят лишь о возможности существования полиэдра с гранным символом, равным полученному результату, но не утверждают его существования. Например, решение диофантова уравнения Эбергардта $f_5=12, f_i=0, i \neq 5$, указывает лишь на возможность существования пентадодекаэдра, но не гарантирует этого. А Платон, живший задолго не только до Эбергардта, но и до Диофанта гарантировал, поэтому и тело это не «эбергардтово», а платоново).

Подобно тому, как из уравнения (2) делается вывод о невозможности существования полиэдра, не имеющего граней 3-го, 4-го и 5-го порядков одновременно, ввиду того, что

$$3f_3 + 2f_4 + f_5 \geq 12,$$

так и из равенства (1), приведённого к виду

$$v_3 + f_3 = 8 + \sum_{k \geq 5} (k-4)(v_k + f_k)$$

следует, что количество 3-валентных элементов у любого полиэдра не меньше 8.

Проведённые выше рассуждения о «неподчинении» количества 4-валентных элементов уравнению (1), и способах их увеличения при сохранении остальных элементов г.с. и в.с. служат конструктивным доказательством следующей теоремы.

Теорема. Если г.с. $\{f_3, f_4, f_5, \dots\}$ является реализуемым, то реализуемы и г.с. вида $\{f_3, f_4 + s, f_5, \dots\}$, где $s \in \{r | f_r \in \{f_3, f_4, f_5, \dots\}, f_r > 0\}$.

Действительно, достаточно построить проекцию Шлегеля на существующую s -угольную грань и построить «пояс» из 4-угольников, являющихся проекциями 4-угольных граней.

Например, из реализуемости г.с. $\{4\}$, следует реализуемость г.с. $\{4,3\}$, т.к. $s=3$. Проекция Шлегеля такого полиэдра соответствует рис. 1. Далее, из реализуемости г.с. $\{4,3\}$, следует реализуемость г.с. $\{4,6\}$, при $s=3$ и $\{4,7\}$, при $s=4$, и далее г.с. $\{4,9\}$, $\{4,10\}$, $\{4,11\}$, ...

Общий вид г.с., реализуемость которых следует из реализуемости г.с. $\{4\}$ (в виде тетраэдра), таков:

$$\{4, 3+3k+4r\}, \text{ где } k, r \in \mathbb{N} \cup \{0\}. (\mathbb{N} - \text{множество натуральных чисел}).$$

Но реализуемы и г.с. $\{4,1\}$, и г.с. $\{4,2\}$ и г.с. $\{4,4\}$. Этого достаточно, чтобы на основании представленной теоремы заключить, что реализуемы все г.с. вида $\{4,s\}$, где s – неотрицательное целое число, т.к. числа вида $1+3k+4r$, $2+3k+4r$, $3+3k+4r$, $4+3k+4r$, где $k, r \in \mathbb{N} \cup \{0\}$ охватывают всё множество натуральных чисел, не меньших 4. Последнее обеспечивается взаимной про-

стотой коэффициентов 3 и 4, что является достаточным условием для существования неотрицательных целых решений диофантова уравнения

$$3k+4r=m, \quad (3)$$

при $m > 6$. (Данное ограничение для m следует из общего решения уравнения (3), $k = -m + 4p$, $r = m - 3p$, $p \in \mathbb{Z}$, и требования $k, r \geq 0$. Действительно, неравенства $-m + 4p \geq 0$, $m - 3p \geq 0$ эквивалентны $4p \geq m \geq 3p$. Для того чтобы m было целым, должно выполняться $p \geq 2$. Откуда $m \geq 6$).

За счёт различных вариантов сочетаний k и r могут получаться различные реализации одного и того же гранного символа вида $\{4, p_4\}$.

Аналогично, рассмотрев в качестве базовых г.с. полиэдров $\{2, 3\}$, $\{2, 4\}$, можно сделать вывод о реализуемости г.с. $\{2, 6\}$, $\{2, 7\}$, $\{2, 8\}$, $\{2, 9\}$, $\{2, 10\}$ и т.д. Однако, не имея реализуемого г.с. $\{2, 2\}$, нельзя гарантировать реализуемости г.с. $\{2, 5\}$, каковой, как показано в [4], не удовлетворяет уравнениям полиэдра, то есть необходимому условию существования.

Предлагаемый подход может быть распространён на построение реализуемых г.с. с помощью «опоясывания» полосами не только 4-угольников, но и треугольников (получение новых значений f_3), и даже 6-угольников в случае с фуллеренами [1].

Гранный символ и связность. Числом вершинной связности (или просто числом связности) графа называется число k , равное наименьшему числу вершин, удаление которых приводит к несвязному или одновершинному графу.

Как доказано в [2], граф трёхсвязен тогда и только тогда, когда любой граф, полученный из него удалением двух вершин, будет связным.

Числом рёберной связности графа называется число λ , равное наименьшему числу рёбер, удаление которых приводит к несвязному графу.

Для таких характеристик полиэдра как рёберная связность λ , вершинной связности k , и наименьшей из степеней вершин δ доказано неравенство Уитни (Whitney) (1932 г.):

$$k \leq \lambda \leq \delta.$$

Более того, доказано, что для любых троек чисел, удовлетворяющих этому неравенству, существует хотя бы один соответствующий граф (не обязательно соответствующий полиэдру).

Имеется ли подобная обратимость в случае с гранными символами, то есть любая ли последовательность, вычисляемая как решение уравнения Эбергардта (или, что то же самое, системы из уравнения Эйлера $V - E + F = 2$,

условия простоты полиэдра $2E = 3V$ и равенства $\sum_i f_i = F$) представляет собой гранный символ, реализуемый в виде полиэдра? Увы, это не так.

Например, как показано в [4] уравнениям для простого 6-эдра удовлетворяют 4 гранных символа $\{3, 0, 3\}$, $\{2, 2, 2\}$, $\{1, 4, 1\}$, $\{0, 6, 0\}$. Реализуемы-

ми являются только г.с. $\{2,2,2\}$, описывающий пентагональный клин, и г.с. $\{0,6,0\}$, описывающий куб.

Разумеется, и $\{3,0,3\}$, и $\{1,4,1\}$ реализуются в виде графов, но полученные графы не являются полиэдрическими.

Поиск полиэдров с заданным г.с. выполняется матричным алгоритмом определения реализуемости гранного символа, описанным в работе автора [3]. Поиск же планарного графа, «гранями» которого будем считать области, ограничиваемые рёбрами на плоскости, включая внешнюю область, можно производить построением проекции Шлегеля. Например, для потенциального г.с. $\{1,4,1\}$ можно получить такой граф (рис. 3), который, действительно, делит плоскость на одну треугольную, четыре четырёхугольных и одну пятиугольную (внешнюю) «грани». Но такой граф не является полиэдрическим, поскольку имеет вершину степени 2, то есть имеет рёберную связность $\lambda=2$, и ввиду того, что вершинная связность $k \leq \lambda$, не является трёхсвязным, что является необходимым условием полиэдричности.

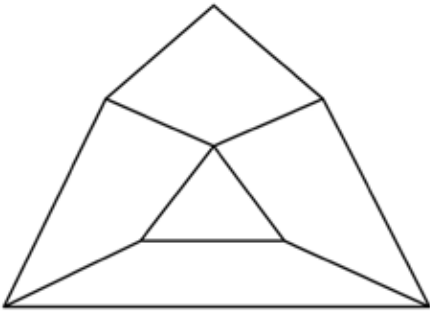


Рис. 3. Планарный граф, делящий плоскость на области в соответствии с г.с. $\{1,4,1\}$.

По той же причине граф, изображенный на рис. 3, не может представлять и простой полиэдр, а условие простоты учитывалось в уравнениях, из которых получены последовательности $\{3,0,3\}$, $\{2,2,2\}$, $\{1,4,1\}$, $\{0,6,0\}$. Однако, полученная псевдопроекция не исключает существования других решений, результатом которых может оказаться полиэдрический граф, и не запрещает реализуемости г.с. $\{1,4,1\}$.

Основная трудность реализации указанного выше матричного алгоритма состоит в том, что по матрице смежности довольно трудно устанавливать совокупность граней полиэдра. Поэтому непросто с помощью матрицы смежности задать полиэдр с количествами граней, соответствующих г.с. $\{f_3, f_4, f_5, \dots\}$.

В то же время, количество вершин полиэдра и их степени отражаются матрицей смежности очевидным образом, а именно, количество вершин определяется порядком матрицы, а степень каждой вершины задаётся количеством единиц в соответствующей строке (столбце) матрицы.

Отметим, что реализуемость полиэдра с гранным символом $\{f_3, f_4, f_5, \dots\}$ означает реализуемость двойственного полиэдра с вершинным символом $\{v_3, v_4, v_5, \dots\}$, где $v_i = f_i$, $i=3,4,\dots$ [1]. Следовательно, вопрос о реализуемости полиэдра для г.с. можно свести к реализуемости двойственного полиэдра с таким же в.с.

Что касается вопроса о том, в каких строках матрицы смежности искомого полиэдра будет то или иное количество единиц, соответствующее степени вершины, то это определяется нумерацией вершин, которая в данном

случае не существенна, поэтому можно считать, что в строках матрицы с 1-й по (v_3) -ю будет по 3 единицы, в следующих (v_4) -х строках по 4 единицы, и т.д.

Например, при рассмотрении г.с. $\{2,2,2\}$ переходим к рассмотрению в.с. $\{2,2,2\}$ и построению матрицы смежности 6-го порядка ($6=2+2+2$) в 1-й и 2-й строках которой будет по 3 единицы, в 3-й и 4-й строках – по 4 единицы, в 5-й и 6-й строках – по 5 единиц.

Подобная задача сводится к задаче линейного программирования и решается с помощью электронной таблицы и надстройки «Поиск решения» MS Excel (табл. 1).

Таблица 1. Получение матрицы смежности полиэдра с заданным в.с. $\{2,2,2\}$, двойственного полиэдру с г.с. $\{2,2,2\}$.

	А	В	С	Д	Е	Ф	Г	Н	І
1	Номер вершины	1	2	3	4	5	6	Степень вершины	Заданная степень вершины
2	1	0	0	1	0	1	1	3	3
3	2	0	0	0	1	1	1	3	3
4	3	1	0	0	1	1	1	4	4
5	4	0	1	1	0	1	1	4	4
6	5	1	1	1	1	0	1	5	5
7	6	1	1	1	1	1	0	5	5

Однако существование решения такой задачи представляет лишь необходимое, но не достаточное условие реализуемости исходного г.с., так как полученная матрица смежности может представлять граф, не являющийся полиэдрическим.

Остается пока не выясненным ответ на вопрос: может ли задача, поставленная подобным образом, иметь среди множества решений как матрицы полиэдрических, так и матрицы НЕполиэдрических графов?

Хотя, в некоторых случаях, полученная матрица дает однозначный ответ о нереализуемости. Например, в.с. $\{3,0,3\}$ позволяет построить только матрицу, представленную в таблице 2, с точностью до парных перестановок строк-столбцов. Полученная матрица указывает на наличие подграфа $K_{3,3}$, имеющего матрицу смежности:

$$C_{33} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix},$$

что исключает планарность, а следовательно, и полиэдричность графа.

Таблица 2. Получение матрицы смежности графа с заданным в.с. $\{3,0,3\}$.

	А	В	С	Д	Е	Ф	Г	Н	І
1	Номер вершины	1	2	3	4	5	6	Степень вершины	Заданная степень вершины
2	1	0	1	1	1	1	1	5	5
3	2	1	0	1	1	1	1	5	5
4	3	1	1	0	1	1	1	5	5
5	4	1	1	1	0	0	0	3	3
6	5	1	1	1	0	0	0	3	3
7	6	1	1	1	0	0	0	3	3

Excel-таблица для вычисления матрицы смежности графа по заданному в.с. не требует специального программирования и строится весьма просто (рис. 4).

	А	В	С	Д	Е	Ф	Г	Н	І	Ј	К
1	Проверка Реализуемости Гранного Символа										
2	Матрица Смежности Реализующая Заданный Поливершинник										
3		1	2	3	4	5	6	Степень			
4	1	0	1	1	1	1	1	5	5	0	
5	2	1	0	1	1	1	1	5	5	0	
6	3	1	1	0	1	1	1	5	5	0	
7	4	1	1	1	0	0	0	3	3	0	
8	5	1	1	1	0	0	0	3	3	0	
9	6	1	1	1	0	0	0	3	3	0	
10										0	
11											

Рис. 4. Excel-таблица для построения матрицы смежности с заданным в.с.

В диапазоне В4:G9 размещается матрица смежности. В ячейках Н4:Н9 – степени вершин с помощью формул $H4=СУММ(B4:G4), \dots, H9=СУММ(B9:G9)$, а в ячейках І4:І9 – требуемые степени вершин. В соответствующих ячейках столбца Ј вычисляется разница между текущим и требуемым значением степени вершины: $J4=H4-I4, \dots, J9=H9-I6$. Симметричность матрицы смежности обеспечивается формулами, задаваемыми в ячейках диапазона ниже главной диагонали: $B5=C4, B6=D4, \dots, B9=G4, C6=D5, \dots, C9=G5, \dots, F9=G8$. Ячейкам главной диагонали задается фиксированное значение 0, а ячейки выше главной диагонали образуют диапазон изменяемых ячеек в «Поиске решения». Целевой ячейкой для «Поиска решения» служит $J10=СУММ(J4:J9)$, а критерием – минимизация целевой ячейки. В ограничениях следует указать, что изменяемые ячейки должны быть «двоичными», то есть принимать значение 1 или 0 (рис. 5).

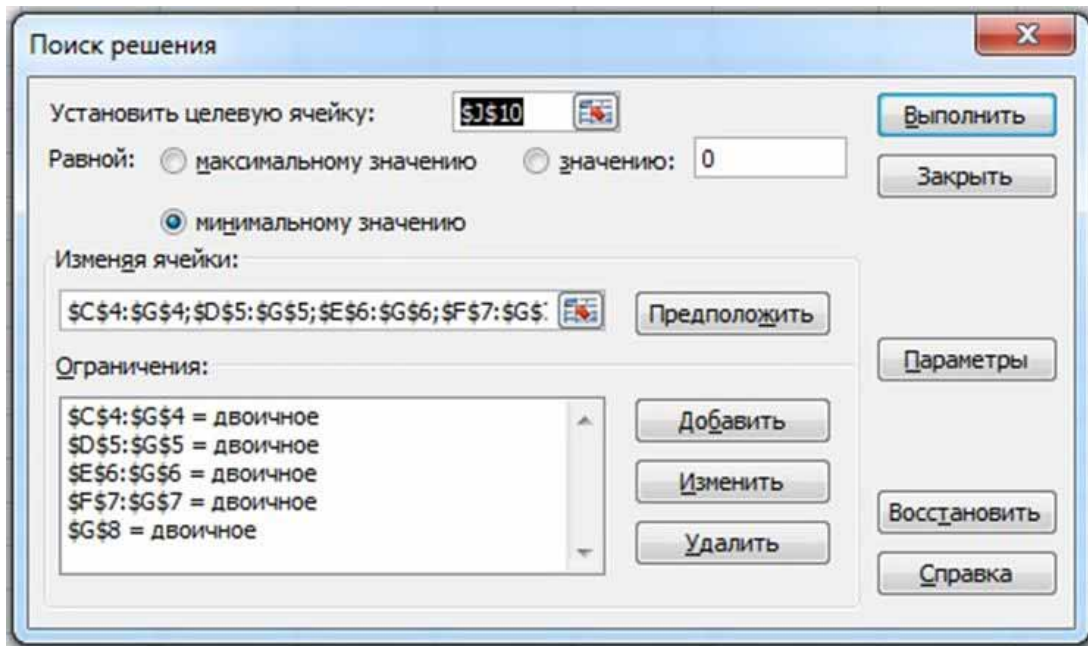


Рис. 5. Окно «Поиск решения» для построения матрицы смежности.

Описанный подход предоставляет ещё один инструмент для рассмотрения проблемы реализуемости г.с. и во многих случаях позволяет отвечать на вопрос о реализуемости г.с. без геометрических построений и специального программного обеспечения.

Список литературы

1. Войтеховский Ю.Л. 12 этюдов на темы кристаллографии, минералогии и петрографии. Апатиты: Изд-во К&М. 2011. 204 с.
2. Емеличев В.А., Ковалёв М.М., Кравцов М.К. Многогранники, графы, оптимизация (комбинаторная теория многогранников). М.: Наука. 1981. 344 с.
3. Ярыгин О.Н. Матричный алгоритм определения реализуемости гранного символа. «Математические исследования в естественных науках» / Труды VII Всероссийской (с международным участием) научной школы, посвящённой 300-летию со дня рождения М.В. Ломоносова. Апатиты. Геологический институт КНЦ РАН, Кольское отделение РМО, 3-6 октября 2011 г. Апатиты: Изд-во К&М. 2011. С. 143-148.
4. Ярыгин О.Н. Уравнение Эбергардта и другие диофантовы уравнения полиэдров. «Математические исследования в естественных науках» / Труды VII Всероссийской (с международным участием) научной школы, посвящённой 300-летию со дня рождения М.В. Ломоносова. Апатиты. Геологический институт КНЦ РАН, Кольское отделение РМО, 3-6 октября 2011 г. – Апатиты: Изд-во К&М, 2011. С. 152-156.

**МАТЕМАТИЧЕСКИЕ ИССЛЕДОВАНИЯ
В ГЕОФИЗИКЕ**



ЧИСЛЕННАЯ МОДЕЛЬ РАСПРОСТРАНЕНИЯ УЛЬТРА- И СВЕРХНИЗКОЧАСТОТНЫХ СИГНАЛОВ В ВОЛНОВОДЕ ЗЕМЛЯ – ИОНОСФЕРА, УЧИТЫВАЮЩАЯ ТЕНЗОРНУЮ ПРОВОДИМОСТЬ ИОНОСФЕРЫ

**Ахметов О.И., Мингалёв И.В., Мингалёв О.В.,
Федоренко Ю.В., Мингалёв В.С.**

Полярный геофизический институт Кольского научного центра РАН,
Апатиты, akhmetov@pgia.ru

Введение. Изучение распространения достаточно низкочастотных электромагнитных сигналов в волноводе Земля – ионосфера имеет большое прикладное значение. Такие сигналы с частотами ниже 100 Гц нельзя рассматривать в рамках приближения геометрической оптики. Ввиду большой сложности задачи, любая достаточно реалистичная постановка не поддаётся анализу чисто аналитическими методами. Начиная с 1994 г., за рубежом, главным образом в США, опубликовано большое число работ, в которых для исследования распространения электромагнитных сигналов в нижнем диапазоне частот используются различные численные модели, основанные на конечно-разностной аппроксимации уравнений Максвелла на сетке со 2-м порядком точности (см., например, обзоры [1, 2] и статьи [3, 4]). Это указывает на высокую актуальность и значительное финансирование данного направления исследований. Такие модели в англоязычной литературе называют FDTD-models. Рассматривались как локальные модели для определённого отрезка в нижней части диапазона частот, так и глобальные FDTD-модели для сверхнизкочастотных сигналов. Имеется несколько научных групп, которые развивают свои версии глобальных моделей.

В этой работе предложена 3-мерная численная модель распространения ультра- и сверхнизкочастотных сигналов (ниже 100 Гц) с малой амплитудой в волноводе Земля – ионосфера, основанная на конечно-разностной аппроксимации уравнений Максвелла, которая по сравнению с зарубежными моделями имеет ряд принципиальных новшеств как в плане физической постановки задачи, так и в плане численных методов.

Описание модели. В представленном варианте модели Земля считается сферой, область моделирования является сферическим слоем и делится на два таких же слоя: верхний от уровня моря до высоты 100 км, который включает атмосферу и нижнюю ионосферу, а также нижний слой, который соответствует литосфере. Литосфера считается однородной средой (либо океаном, либо сушей) с заданной скалярной проводимостью и диэлектрической проницаемостью.

Ток в атмосфере и ионосфере определяется из закона Ома с тензором проводимости (см. [5, 6]):

$$\mathbf{j}(\mathbf{x}, t) = \hat{\sigma}(\mathbf{x})\mathbf{E}(\mathbf{x}, t) = \sigma_{\parallel}(\mathbf{x}) \mathbf{E}_{\parallel} + \sigma_{p}(\mathbf{x}) \mathbf{E}_{\perp} + \sigma_{H}(\mathbf{x})[\mathbf{b}_0(\mathbf{x}) \times \mathbf{E}_{\perp}], \quad (1)$$

Здесь $\mathbf{b}_0(\mathbf{x}) = \mathbf{B}_0/|\mathbf{B}_0|$ – единичный вектор вдоль геомагнитного поля $\mathbf{B}_0(\mathbf{x})$, $\mathbf{E}_{\parallel} = (\mathbf{E}, \mathbf{b}_0)\mathbf{b}_0$ – проекция \mathbf{E} на направление геомагнитного поля $\mathbf{B}_0(\mathbf{x})$, $\mathbf{E}_{\perp} = \mathbf{E} - \mathbf{E}_{\parallel}$. Продольная $\sigma_{\parallel}(\mathbf{x})$, педерсеновская $\sigma_p(\mathbf{x})$ и холловская $\sigma_H(\mathbf{x})$ проводимости плазмы считаются равными соответствующим электронным проводимостям и определяются по формулам низкочастотного приближения как функции от концентраций электронов $n_e(\mathbf{x})$ и нейтралов $n_{N_2}(\mathbf{x})$, $n_{O_2}(\mathbf{x})$ температуры электронов $T_e(\mathbf{x})$, а педерсеновская и холловская проводимости зависят еще и от геомагнитного поля. Эти формулы имеют вид:

$$\sigma_{\parallel}(\mathbf{x}) = \sigma_{\parallel e} = \frac{\varepsilon_0 \omega_{pe}^2}{\nu_e}, \quad \sigma_p(\mathbf{x}) = \sigma_{pe} = \frac{\sigma_{pe}}{1 + |\omega_{ce}/\nu_e|^2}, \quad \sigma_H(\mathbf{x}) = \sigma_{He} = \frac{\omega_{ce}}{\nu_e} \sigma_{pe}, \quad (2)$$

где $\omega_{ce}(\mathbf{x}) = |e\mathbf{B}_0(\mathbf{x})|/m_e$ и $\omega_{pe}(\mathbf{x}) = \sqrt{e^2 n_e(\mathbf{x})/(\varepsilon_0 m_e)}$ – соответственно циклотронная (ларморовская) и плазменная частоты, $\nu_e(\mathbf{x})$ – частота столкновений электронов, которая с высокой точностью определяется столкновениями только с нейтральными молекулами:

$$\nu_e(\mathbf{x}) = \nu_{e,N_2}(\mathbf{x}) + \nu_{e,O_2}(\mathbf{x}) \quad (3)$$

для которых используются следующие формулы (см. [7]):

$$\nu_{e,N_2} = \frac{2.5 \cdot 10^{-17} \cdot n_{N_2} \cdot T_e}{1 + 0.0093 \cdot \sqrt{T_e}}, \quad \nu_{e,O_2} = 1.82 \cdot 10^{-16} \cdot n_{O_2} \cdot \sqrt{T_e} (1 + 0.0036 \cdot \sqrt{T_e}) \quad (4)$$

Для выбранной даты и заданных геофизических условий пространственные распределения для концентраций нейтралов определяются по эмпирической модели NRLMSISE-00, а для концентрации и температуры электронов определяются по эмпирической модели IRI 2007. Геомагнитное поле считается дипольным.

На верхней и нижней границе используется граничное условие свободного ухода волны, (пространственные производные в граничных и приграничных узлах сетки вычисляются только по узлам, лежащим в области моделирования). На границе атмосфера – литосфера помимо обычных условий для электромагнитного поля на границе раздела сред используется выведенное из этих условий и уравнения непрерывности заряда граничное условие, которое в системе СИ имеет вид:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\Delta D_n) = (\text{rot}(\Delta \mathbf{H}); \mathbf{n}) - \Delta j_n, \quad \mathbf{x} \in \Sigma \quad (5)$$

где Σ – поверхность раздела между средами (1) и (2), $\mathbf{n}(\mathbf{x})$ – единичная нормаль к Σ в точке \mathbf{x} , направленная в сторону среды (1),

$$\Delta \mathbf{H} = \mathbf{H}^{(1)} - \mathbf{H}^{(2)}, \quad \Delta D_n = (\mathbf{D}^{(1)} - \mathbf{D}^{(2)}; \mathbf{n}), \quad \Delta j_n = (\mathbf{j}^{(1)} - \mathbf{j}^{(2)}; \mathbf{n}),$$
 причём

верхний индекс обозначает номер среды. Условие (5) является нормальной проекцией уравнения Максвелла $\frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t} = \text{rot} \mathbf{H} - \mathbf{j}$ для изменений полей и плотности тока при переходе через границу раздела сред. Отметим, что, возможно, граничное условие (5) приводится здесь впервые, поскольку авторам не удалось найти это условие в литературе.

Вычисления проводятся на регулярной сетке в сферических координатах с одинаковыми шагами сетки по широте h_β и долготе h_α в атмосфере и литосфере. Здесь представлены расчёты для 2-х вариантов, в которых они составляли $h_\beta = h_\alpha = 0.5^\circ$ и $h_\beta = h_\alpha = 0.25^\circ$.

В атмосфере шаг сетки по высоте был равен $h_{r,a} = 1$ км, диэлектрическая проницаемость $\varepsilon_a = 1$. Толщина литосферного слоя в модели выбирается порядка толщины скин-слоя $\delta_0 = \frac{1}{2\pi} \sqrt{10^7 / \sigma v_0}$ для характерной частоты v_0 из рассматриваемого диапазона, а шаг сетки по вертикали в литосфере составляет достаточно малую часть от δ_0 , т.е. уменьшается на порядок и более по сравнению с атмосферой в зависимости от заданной проводимости литосферы. При расчётах вся литосфера считалась океаном с проводимостью $\sigma = 2$ (Ом×м)⁻¹ и диэлектрической проницаемостью $\varepsilon_L = 81$, шаг сетки и размер сетки по вертикали в ней составляли, соответственно, $h_{r,L} = 20$ м, $N_L = 20$. Магнитная проницаемость считалась всюду равной единице: $\mu = 1$. Шаг по времени τ составлял $\tau = 5 \cdot 10^{-7}$ с, т.е. условие Куранта $V_n = h_r / \tau > c / \sqrt{\varepsilon \mu}$ было выполнено с большим запасом как в атмосфере, так и в литосфере.

Т.о., в модели вместе с уравнением Фарадея $\frac{\partial}{\partial t} \mathbf{B}(\mathbf{x}, t) = -\text{rot} \mathbf{E}(\mathbf{x}, t)$ в атмосфере численно решалось уравнение Максвелла в форме

$$\frac{\partial}{\partial t} \mathbf{E}(\mathbf{x}, t) = c^2 \text{rot} \mathbf{B}(\mathbf{x}, t) - \frac{1}{\varepsilon_0} \hat{\sigma}(\mathbf{x}) \mathbf{E}(\mathbf{x}, t) \quad (6)$$

где тензор проводимости $\hat{\sigma}(\mathbf{x})$ определяется формулой (1), в то время как в литосфере численно решалось уравнение Максвелла в форме

$$\frac{\partial}{\partial t} \mathbf{E}(\mathbf{x}, t) = \frac{c^2}{\varepsilon_L} \text{rot} \mathbf{B}(\mathbf{x}, t) - \frac{\sigma}{\varepsilon_L \varepsilon_0} \mathbf{E}(\mathbf{x}, t) \quad (7)$$

Для численного решения уравнений Максвелла разработана и применена высокоэффективная явная схема с 4-м порядком в аппроксимации пространственных производных и 2-м порядком в аппроксимации по времени, а также разработана и использована методика моделирования, для которой граничное условие (5) выполнено в конечно-разностном виде.

Результаты расчётов. Для тестирования модели приводятся результаты расчетов распространения образовавшегося на экваторе атмосферика – сигнала от сильного разряда молнии.

Для достаточно реалистичной имитации начальных полей от разряда молнии в приземном слое разработана специальная методика аналитического задания этих полей, в которой молния считается прямым отрезком с заданными концами. Входными параметрами для методики являются дата и место разряда, его начальная и конечная точки, длительность разряда, а также начальная величина перетекающего заряда и зависимость заряда от времени. Последняя зависимость аппроксимируется аналитически на основе данных по измерениям в заземленных громоотводах временной зависимости тока молнии. В результате получается форма сигнала, которая содержит волновой пакет и является достаточно гладкой, что важно для устойчивости счёта.

Расчёты дают хорошее качественное соответствие с известными экспериментальными данными для трассы, проходящей через океан.

Отметим, что в модель заложена возможность последовательного и независимого введения усовершенствований. Наиболее важными из них являются переход на треугольную сетку, учёт рельефа земной поверхности и учёт структуры литосферы, использование геомагнитного поля, рассчитанного для данных геофизических условий по какой-либо эмпирической модели, использование более реалистичных начальных условий, задание возмущений ионосферной проводимости, вызванных различными явлениями.

Работа выполнена при частичной поддержке гранта РФФИ 10-01-00451.

Список литературы

1. Simpson J.J. Current and future applications of 3-D global Earth-ionospheric models based on the full-vector Maxwell's equations FDTD method // *Surveys Geophys.* 2009. V. 30. PP. 105-130. DOI 10.1007/s10712-009-9063-5.
2. Simpson J.J., Taflove A. A review of progress in FDTD Maxwell's equations modeling of impulsive subionospheric propagation below 300 kHz // *IEEE Transactions on Antennas and Propagation.* 2007. V. 55. №. 6 (June 2007). PP. 1582-1590. DOI 10.1109/TAP.2007.897138.
3. Paul D.L., Railton C.J. Spherical ADI FDTD method with application to propagation in the Earth ionosphere cavity // *IEEE Transactions on Antennas and Propagation.* 2012. V. 60. №. 1 (January 2012). PP. 310-317. DOI 10.1109/TAP.2011.2167940.
4. Yu Y., Simpson J.J. An collocated 3-D FDTD model of electromagnetic wave propagation in magnetized cold plasma // *IEEE Transactions on Antennas and Propagation.* 2010. V. 58. №. 2 (February 2010). PP. 469-478. DOI 10.1109/TAP.2009.2037706.
5. Акасофу С.-И., Чепмен С. Солнечно-земная физика. Москва: Мир. 1974.
6. Харгивс Дж.К. Верхняя атмосфера и солнечно-земные связи. Ленинград: Гидрометеиздат. 1982.
7. Гуревич А.В., Швацбург А.Б. Нелинейная теория распространения радиоволн в ионосфере. Москва: Наука. 1973.

ОБ ИЗМЕРЕННЫХ И СКОРРЕКТИРОВАННЫХ ЗНАЧЕНИЯХ АТМОСФЕРНЫХ ОСАДКОВ В АРКТИКЕ

Дёмин В.И.¹, Черноус П.А.²

¹Полярный геофизический институт КНЦ РАН, Апатиты, demin@pgia.ru

²Центр лавинной безопасности ОАО «Апатит», Кировск

Принятая в настоящее время методика наблюдений за атмосферными осадками [10] предусматривает введение в измеренные значения только поправки на смачивание. Именно в таком виде данные об осадках передаются в оперативных метеорологических сводках и хранятся в климатических архивах и наиболее часто используются в научных работах (в том числе и для задач климатологии).

Между тем, полученные таким образом значения не отражают реальное количество атмосферных осадков в данной местности. Многочисленные исследования на экспериментальных полигонах показывают, что данные режимных наблюдений по стандартным осадкомерам содержат существенные погрешности, особенно заметные в холодный период. Например, вследствие локальной деформации поля ветра, вызванной обтеканием осадкомерной установки, часть капель дождя или снежинок не попадает в приёмное отверстие. В зависимости от типа установленного осадкомерного прибора (с различной ветровой защитой) количество измеренных осадков в пределах одной и той же измерительной площадки может меняться от 30-40% до 90-95% от их фактического значения.

По данным [9] стандартный для метеорологической сети РФ осадкомер Третьякова при скоростях ветра на уровне приемного отверстия 3, 5 и 7 м/с улавливает в среднем 70, 50 и 35% общего количества твёрдых осадков, соответственно. Аналогичные ошибки характерны и для осадкомеров других конструкций [4]. В результате одно и то же количество осадков, но измеренное при разных скоростях ветра, даст разный результат, т.е. измеренная на метеорологической станции сумма осадков может не отражать их реального количества. Кроме того, два абсолютно идентичных осадкомера, расположенных в разных местах (например, на поляне и в открытом поле), зарегистрируют различное количество осадков, несмотря на их одинаковое «начальное» значение.

Такой ветровой недоучёт осадков ставит под вопрос использование данных прямых измерений с осадкомеров для задач климатологии и указывает на очевидную необходимость их предварительной корректировки при проведении научно-изыскательских работ, в частности, при любых водобалансовых расчётах. Варианты такой корректировки измеренных значений предложены в ряде работ, в том числе и в официальных документах ВМО [15].

Заметим, что расхождение и скорректированных данных может достигать многих десятков %, что ставит под вопрос использование прямых измерений в климатических задачах.

Для иллюстрации на рис. 1 представлены долговременные изменения январских осадков на г. Ловчорр в Хибинах. Ряд выбран с 1966 г. – с этого момента он считается однородным, так как никаких существенных изменений в методике измерения осадков в последующие годы не происходило. Если для измеренных значений виден заметный отрицательный тренд, то для скорректированных осадков он явно не проявляется.

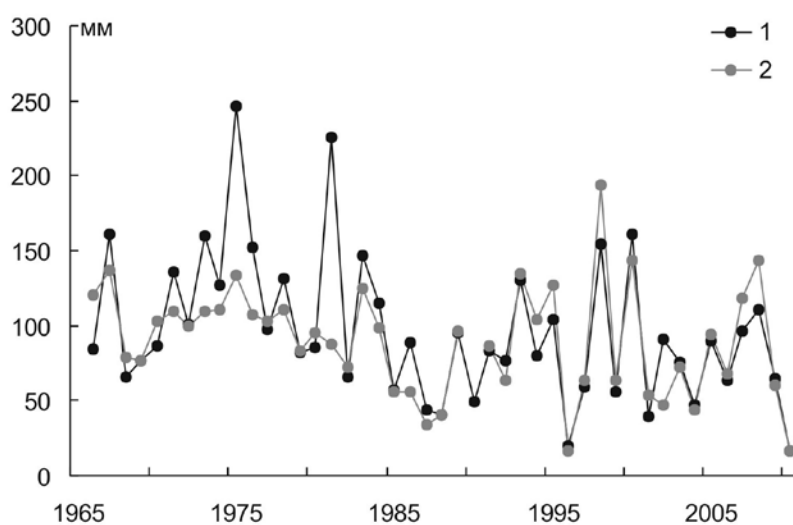


Рис.1. Вариации измеренной (1) и скорректированной (2) январской суммы на г. Ловчорр (Хибины, 1091 м).

Хорошо известно, что для станций, расположенных в районах с преобладанием сильных ветров и активной метелевой деятельностью (арктические и горные станции), количество твёрдых осадков, измеренных осадкомером, может оказаться сильно увеличенным за счет наметания осадков в прибор во время метелей или так называемых «ложных» осадков [15]. При последующем введении на измеренные осадкомером значения ветровой поправки ($K > 1$) может привести к значительному увеличению количества «исправленных» осадков, что, как показано в работе [14] едва ли климатически обосновано. Например, непосредственное введение ветровой поправки к измеренным значениям осадков на г. Ловчорр приведет к их увеличению в зимнее время в 1.5-2 раза, благодаря чему их годовое количество станет сопоставимым с количеством осадков, выпадаемых в экваториальном поясе. Причина очевидна – станция на г. Ловчорр расположена на обширном плато и подвержена активной метелевой деятельности. Продолжительность метелей здесь составляет в среднем 2330 час. Данный фактор приобретает еще большее значение, если учесть, что более 70% осадков холодного периода в Хибинах выпадают именно во время метелей [6].

Несмотря на то, что необходимость введения аэродинамического коэффициента к показаниям осадкомера довольно очевидна и давно известна, её непосредственное использование в арктических и горных регионах сталкивается со значительной проблемой.

Вместе с тем, следует отметить, что общепринятой методики расчёта «ложных» осадков до сих пор не существует.

Одно из возможных решений проблемы – отказ от использования данных с осадкомера в зимний период и замена их некими расчётными значениями, полученными, например, по содержанию воды в снежном покрове во время снегомерных съёмок на типовых (эталонных) участках, в качестве которых могут служить поляны в лесу, участки в лесу под кронами деревьев или среди кустарника [13]. Однако такое предложение едва ли возможно на открытых арктических пространствах, где нет деревьев и кустарников, и в горах, где имеется большое перераспределение снежного покрова. Единственным приёмом получения достоверных данных об осадках в этом случае остается корректировка измеренных осадкомером значений.

Целью данной работы является коррекция климатических норм атмосферных осадков в холодное полугодие в Хибинском горном массиве.

Так как горнолавиная станция на г. Ловчорр расположена на обширном и довольно выровненном плато, для коррекции измеренных осадков была применена процедура, ранее использованная в [1] для коррекции осадков в полярных районах.

Известно, что для сетевого в РФ осадкомера Третьякова основными погрешностями являются ветровой недоучёт, потери осадков на смачивание внутренней поверхности осадкосборника, искажения в результате процессов испарения и конденсации, а также наметания в осадкомер снега, поднятого с поверхности, во время сильных метелей. С учетом этого действительное количество осадков можно представить в следующем виде:

$$P = K(P_0 + \Delta P - P_f),$$

где K – коэффициент, учитывающий влияние аэродинамических факторов на измерение осадков, P_0 – количество измеренных осадков, ΔP – поправка на испарение осадков, конденсацию и смачивание, P_f – поправка, учитывающие количество ложных осадков, попавших в осадкомер, соответственно, за время метели.

Так как введение аэродинамической поправки и поправки на смачивание, испарение и конденсацию не вызывает существенных технических сложностей, основное внимание должно быть уделено оценкам P_f . Согласно предложенной процедуре, количество «ложных» осадков в работе определяется как произведение их интенсивности J_f на продолжительность метели τ_f .

$$P_f = J_f \cdot \tau_f$$

Уравнения для определения интенсивности «ложных» осадков, попадающих в осадкомер Третьякова, были получены Л.Р. Струзером [12] на основе формулы В.М. Котлякова [7], описывающей эмпирическую зависимость интегрального снегопереноса во время метелей от скорости ветра на высоте

2 м над поверхностью снежного покрова, вида метели и состояния снежного покрова. Формулы Страузера были позднее уточнены В.С. Голубевым [3] путём введения коэффициентов, учитывающих отличие реальной высоты осадкомера над поверхностью снежного покрова от 2 м, а также степень насыщенности снеговетрового потока метелевыми частицами в зависимости от длины разгона метели.

Интенсивность «ложных» осадков J_f при общей метели вычисляется по формуле:

$$J = 0.033(U_2^{2.2} - 4.2^{2.2}) \frac{BL}{K_f U_2}$$

$$J = 0, \text{ при } U_2 \leq 4.2 \text{ м/с,}$$

где U_2 – скорость ветра на высоте 2 м над уровнем снега.

Коэффициент K_f характеризует ветровой недоучёт частиц «ложных» осадков при общей метели и вычисляется по формуле

$$K_f = 1 + 0.0215 \mu^2 U_h^2 \text{ при } T_a \geq -7.0 \text{ }^\circ\text{C}$$

$$K_f = 1 + 0.033 \mu^2 U_h^2 \text{ при } T_a < -7.0 \text{ }^\circ\text{C}$$

Коэффициент μ (коэффициент перехода от значений плотности воздуха при стандартных параметрах атмосферы к плотности при реальных условиях) рассчитывается по значениям атмосферного давления на станции p (гПа) и парциального давления водяного пара e (гПа):

$$\mu = \frac{0.273 p^2}{(273 + t)(p + 0.4e)}$$

U_h – скорость ветра на высоте приёмного отверстия осадкомера:

$$U_h = U_H m(A) \frac{\ln \frac{h - h_s}{z_0}}{\ln \frac{H - h_s}{z_0}},$$

где U_H – скорость ветра во время осадков на высоте стандартного ветроизмерительного прибора, м/с; $m(A)$ – коэффициент, характеризующий искажение логарифмического профиля ветра под влиянием разного рода препятствий, окружающих осадкомер; H – высота установки ветроизмерительного прибора, м; h_s – высота снежного покрова в пункте наблюдений, м; z_0 – параметр шероховатости подстилающей поверхности в окружении установки осадкомера (при сплошном снежном покрове $z_0 = 0.01$ м).

Коэффициент $m(A)$ рассчитывается по формуле:

$$m(A) = 1 - 0.024 \alpha(A),$$

где $\alpha(A)$ – вертикальный угол закрытости горизонта в месте установки осадкомера в направлении ветра (A , град).

Коэффициент B учитывает отличие реальной высоты осадкомера над снежной поверхностью от высоты 2 м и вычисляется по формуле:

$$B = \frac{2}{h-h_s} \ln \frac{2}{z_0} (\ln \frac{h-h_s}{z_0})^{-1}$$

Коэффициент L учитывает степень насыщенности метелевого потока:

$$L = th(\epsilon l),$$

где th – гиперболический тангенс, l – расстояние (км) от осадкомера до границы снегосборного района в данном направлении ветра.

Интенсивность «ложных» осадков, попавших в осадкомер во время низовой метели:

$$J = 0.016(U_2^{2.8} - 4.2^{2.8}) \frac{B}{K_f U_2}$$

$$J = 0, \text{ при } U_2 \leq 4.2 \text{ м/с}$$

$$K_f = 1 + 0.0215 \mu^2 U_h^2, \text{ при } T_a \geq -7.0^\circ \text{C}$$

$$K_f = 1 + 0.01 \mu^2 U_h^2, \text{ при } T_a < -7.0^\circ \text{C}$$

Для позёмка:

$$J = 8.9 \cdot 10^{-6} (U_2^{5.1} - 8.5^{5.1}) \frac{BL}{K_f U_2}$$

$$K_f = 1 + 0.01 \mu^2 U_h^2$$

Сумма «ложных» осадков, попавших в осадкомер, складывается из суммы «ложных» осадков во время общей метели, низовой метели и позёмка (для Хибин их продолжительность составляет в среднем 63, 10 и 27%, соответственно, от общего времени метелевых явлений [6]).

При скоростях ветра порядка 9–10 м/с интенсивность «ложных» осадков становится соизмеримой со средней интенсивностью осадков, выпадающих из облаков, а суммарное количество «ложных» осадков в осадкомере может втрое (!) превышать уловленное осадкомером количество осадков из облаков [1].

По этой причине при скоростях ветра более 10 м/с Страузером и Брызгиным в [11] предлагается отказаться от измеренных значений осадков в пользу полностью расчётных. Этот приём основан на том, что нет физической обоснованной связи между интенсивностью реальных осадков и скоростью ветра: действительная интенсивность выпадающих осадков на полярных станциях во время метелей меняется мало и может в первом приближении считаться постоянной величиной, близкой к средней многолетней интенсивности осадков в данных климатических условиях. При таком подходе при скоростях ветра более 10 м/с измеренное количество осадков не принимается

ся во внимание и заменяется на величину P , рассчитанную по формуле:

$$P = I\tau,$$

где I – интенсивность осадков, τ – их продолжительность. Значения I для г. Ловчорр рассчитывались для каждого месяца по «скорректированным» значениям осадков при скоростях ветра 4-10 м/с и имеют значения от 0.21 до 0.50 мм/ час.

Несмотря на то, что в горных районах предположение о независимости интенсивности осадков от скорости ветра, вообще говоря, может оказаться неправильным, так как от значений последней зависит скорость орографических движений, а, следовательно, и величина орографических осадков, у нас нет физических предпосылок, чтобы отказаться от гипотезы Л.Р. Страузера. Так как во время снегопада метелевый перенос снега начинается уже при скорости ветра более 5 м/с, исследовать зависимость интенсивности осадков от скорости ветра на широком диапазоне скоростей не представляется возможным. Вместе с тем, как показывает анализ, связь интенсивности осадков в Хибинах со скоростью ветра в летние месяцы прослеживается примерно до 3-4 м/с, а далее становится неопределенной [5]. Очевидно, что примерно такая же связь должна наблюдаться и в холодное полугодие.

Таким образом, при скоростях ветра более 10 м/с интенсивность осадков принимается примерно постоянной величиной, равной средней интенсивности «исправленных» осадков, определённой при скоростях ветра 4-10 м/с. Наблюдаемое в действительности явное увеличение интенсивности осадков со скоростью ветра в общей выборке, включающей и метели, следует считать результатом надувания «ложных» осадков в осадкомер.

Проведенная процедура позволила установить, что средняя годовая сумма «ложных» осадков на г. Ловчорр составляет почти 250 мм [5]. Вклад «ложных» осадков в общую сумму измеренных осадкомером осадков меняется от 15-20% в весенний и осенний периоды (май, октябрь) и достигает 35-45% в декабре, январе и феврале (т.е. более трети осадков, оказавшихся в осадкомерном приёмнике в зимний период, – это снег, поднятый ветром с поверхности, а не выпавший из облаков). Вклад «ложных» осадков на г. Юкспор заметно меньше (не более 15%), благодаря, в первую очередь, положению станции на плато много меньшей площади.

В корректировке нуждаются также и установленные ранее вертикальные профили осадков [6, 9]. Однако представленная выше процедура расчета «ложных» осадков и последующей коррекции оказывается неприемлемой для станций, расположенных на склонах гор и в характерных для Хибин узких горных долинах, так как практически невозможно оценить количество «ложных» осадков из-за дополнительного сноса снега с окружающих вершин при сильном ветре. Вместе с тем и данные прямых измерений здесь менее всего надежны. Это обстоятельство потребовало от авторов работы создания отдельной процедуры.

С учётом рассчитанных значений «ложных» осадков определена средняя интенсивность осадков для внутренних районов Кольского п-ова (не расположенных на побережье) Эта величина в зимний период оказалась довольно слабо изменчивой. При этом, интенсивность осадков в предгорьях как летом, так и зимой является функцией высоты (рис. 2).

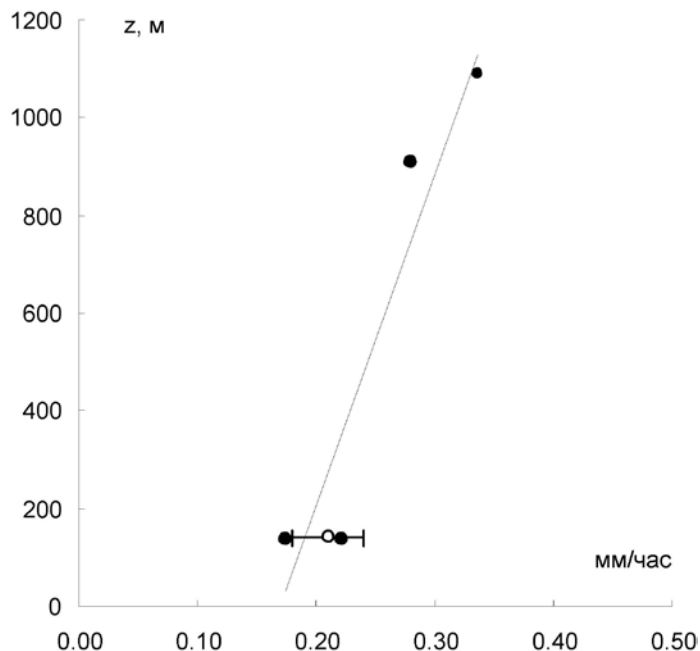


Рис. 2. Изменение интенсивности осадков с высотой по данным горно-лавиных станций Ловчорр (1091 м), Юкспор (910 м), мс. «Мончегорск» (135 м) и «Хибинь» (135 м); светлой точкой отмечено среднее значение и скв. отклонение для станций, расположенных в центральной части Кольского п-ова.

Так как летние осадки довольно надёжно улавливаются осадкомером, то нас, в первую очередь, интересуют зимние осадки. По мнению авторов, при проведении водобалансовых расчётов, основанных на многолетних данных, целесообразно полностью отказаться от измеренных значений осадков в горных долинах и на склонах гор и заменить их расчётными:

$$P = I \cdot \sum \tau,$$

где I – средняя многолетняя интенсивность осадков на данной высоте, $\sum \tau$ – средняя многолетняя продолжительность выпадения осадков в соответствующий период.

Попробуем оценить, насколько это может соответствовать действительности. На рис. 3 представлены суммы осадков за период ноябрь-апрель на ряде станций, расположенных на разных высотах по данным прямых инструментальных измерений и скорректированным значениям.

По данным прямых измерений осадков вертикальный профиль довольно сложный: от предгорных равнин к горным количество осадков сильно возрастает, затем падает к верхним частям склонов и на вершинах снова сильно возрастает. По нашему мнению, столь необычное для климатологии вертикальное распределение осадков обусловлено сильным сносом снега с вершин в горные долины, благодаря чему количество осадков внизу может

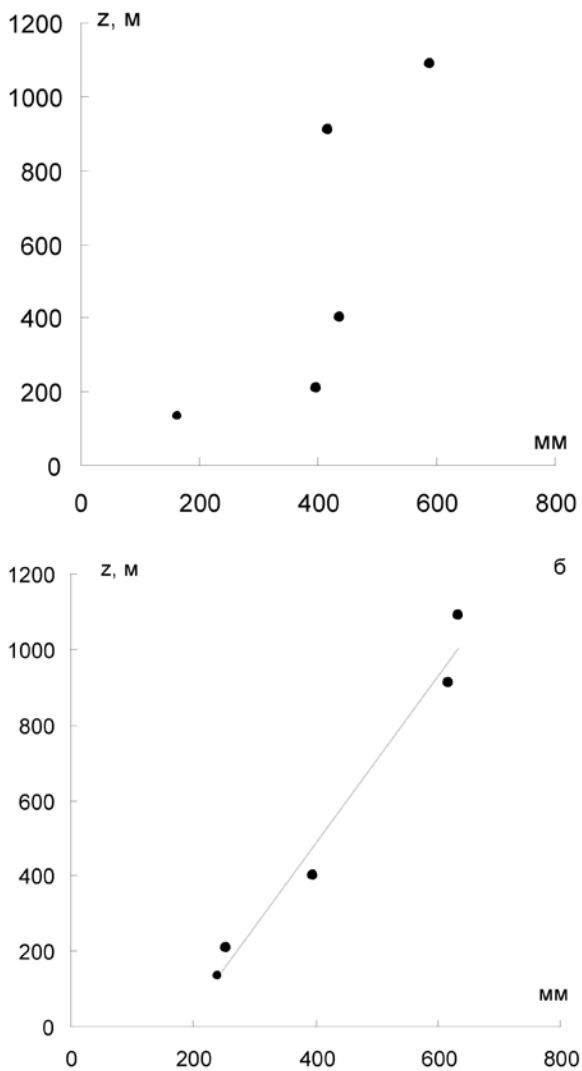


Рис. 3. Вертикальное распределение измеренных (а) и скорректированных (б) сумм осадков за период ноябрь-апрель в Хибинах и на предгорных станциях (г. Ловчорр (1091 м), г. Юкспор (910 м), Кировск (400 м), ГЛСВ (210 м), Мончегорск (150 м)).

превышать количество осадков на вершинах, сильным ветровым недоучётом осадков на вершине Юкспор и заметным количеством «ложных» осадков на г. Ловчорр, расположенном на обширном плато.

Значения осадков на вершинах Ловчорр и Юкспор и на мс. «Мончегорск» скорректированы путем удаления из измеренных значений «ложных» осадков и последующим введением аэродинамической поправки. Для станций ГЛСВ и «Кировск» ЦЛБ ОАО «Апатит» (показания обеих станций явно искажены за счёт наметания снега в осадкомер при сильных ветрах с расположенных вблизи них склонов) с графика, представленного на рис. 3 снимаем значения средней зимней интенсивности осадков для высот 210 и 400 м (0.20 и 0.22 мм/час), а также рассчитываем по данным наблюдений среднюю многолетнюю продолжительность выпадения осадков за холодный сезон с преимущественно твёрдыми осадками (ноябрь-апрель). Рассчитанные таким образом суммы осадков составляют 255 и 395 мм.

Как видно из рис. 3, после коррекции восстанавливается привычный вертикальный профиль осадков в горных районах. Обычная линейная регрессия между высотой и суммой осадкой описывает уже 97% дисперсии.

Следует признать, методика коррекции осадков, использованная в данной работе, не может считаться абсолютно надёжной, так как содержит целый ряд допущений. Например, в целом ряде случаев пришлось полностью отказаться от измеренных значений осадков в пользу расчётных. Вследствие этого её результаты имеют оценочное значение. Однако так как речь идет о многолетних среднемесячных значениях, она вполне работоспособна в первом приближении. Следует иметь также в виду, что в настоящее время не существует надёжных методов измерения атмосферных осадков (прежде всего

твёрдых) – все измеренные значения осадков требуют введения поправок, в результате чего окончательное значение может отличаться от первоначального на десятки процентов (и даже в разы); причём в ряде случаев приходится полностью отказаться от измеренных значений в пользу расчётных. Кроме того, как уже было сказано выше, общепринятой методики полной коррекции осадков не существует (см, например, [15]), т.е. следуя разным корректирующим методикам можно придти к различным результатам. Все исследования по данной проблематике носят экспериментальный характер. Вместе с тем, без полной коррекция измеренных осадков говорить об их долговременных вариациях может быть просто физически некорректно.

Список литературы

1. Богданова Э.Г., Голубь В.С., Ильин Б.М., Драгомилова И.В. Новая модель корректировки измеренных осадков и ее применения в полярных районах России // Метеорология и гидрология. 2002. №10. С. 68-93.
2. Брызгин Н.Н. Приведение рядов дождемерных наблюдений и корректировка месячных сумм осадков в Арктике // Тр. ААНИИ. 1976. Т. 328. С. 44-52.
3. Голубев В.С. Изучение точности учета атмосферных осадков // Труды ГГИ. 1969. Вып. 176. С. 149-164.
4. Голубев В.С., Кокнаева В.В., Симоненко А.Ю. Результаты измерений атмосферных осадков национальными стандартными приборами Канады, России и США // Метеорология и гидрология. 1995. № 2. С. 102-110.
5. Демин В.И., Мороз Н.В., Черноус П.А. Оценка количества «ложных» осадков при осадкомерных наблюдениях на г. Ловчорр (Хибины) // Материалы гляциологических исследований. 2012. № 1. С. 105-110.
6. Зюзин Ю.Л. Суровый лик Хибин. Мурманск. «Рекламная полиграфия». 2006. 236 с.
7. Котляков В.М. Снежный покров Антарктиды и его роль в современном оледенении материка. М.: Изд-во АН СССР. 1961. 243 с.
8. Кузьмин П.П. Формирование снежного покрова и методы определения снеготпасов. Л.: Гидрометеиздат. 1960. 271 с.
9. Мягков С.М., Бабурин В.Л., Баранова Т.Г. и др. Природные условия Хибинского учебного полигона. М.: Изд-во МГУ. 1986. 169 с.
10. Наставление гидрометеорологическим станциям и постам. Вып. 3. Ч. 1. Метеорологические наблюдения на станциях. Л.: Гидрометеиздат. 1985. 300 с.
11. Страузер Л.Р., Брызгин Н.Н. Методика вычисления поправок к измеренным величинам атмосферных осадков в полярных районах // Труды ГГО. Вып. 260. Л.: Гидрометеиздат. 1971. С. 61-76.
12. Страузер Л.Р. О Способах учета ошибок осадкомеров, вызванных попаданием в них «ложных» осадков во время метелей // Труды ГГО. 1971. Вып. 260. С. 35-60.
13. Швер Ц.А. Исследование результатов наблюдений по дождемеру и осадкомеру. Л.: Гидрометеиздат. 1965. 170 с.
14. Golubev V.S., Bogdanova E.G. and Simonenko A.Yu. The effect of blizzards on the correction method of precipitation data in Arctic region / In: Proc. of the Workshop

on the Implementation of the Arctic Precipitation Data Archive of the Global Precipitation Climatology. Center. Offenbach, Germany. July. 1996. WMO/TD-No. 804. 1997. P. 74-79.

15. WMO. Instruments and Observing Methods, Report No. 67. WMO Solid Precipitation Measurement Intercomparison. Final Report. WMO/TD-No. 872. 1998. 300 p.

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ МЕЛКОМАСШТАБНЫХ БЕССТОЛКНОВИТЕЛЬНЫХ ПРОЦЕССОВ В ПЛАЗМЕ F-СЛОЯ ИОНОСФЕРЫ МЕТОДОМ МАКРОЧАСТИЦ ПРИ ПОМОЩИ НОВОЙ СХЕМЫ С 4-М ПОРЯДКОМ ТОЧНОСТИ

Мельник М.Н., Мингалёв О.В., Мингалёв В.С., Мингалёв И.В.

Полярный геофизический институт КНЦ РАН, Апатиты, melnik@pgia.ru

На основе новой схемы разработан комплекс программ для сравнительного моделирования мелкомасштабных бесстолкновительных процессов в плазме F-слоя ионосферы в 2D2V постановке в плоскости, ортогональной магнитному полю. Сравнительные расчёты показали существенно более высокую точность новой схемы по сравнению со схемами 2-го порядка точности.

В плазме F-слоя ионосферы протекает ряд достаточно мелкомасштабных бесстолкновительных процессов, которые могут быть адекватно рассмотрены в рамках системы уравнений Власова-Пуассона с заданным сильным внешним однородным магнитным полем. Среди методов численного решения кинетических систем уравнений для бесстолкновительной плазмы (система Власова-Максвелла, Власова-Пуассона, Власова-Дарвина), которые состоят из уравнений Власова для каждого сорта заряженных частиц и уравнений для электромагнитного поля, наиболее широко используется метод макрочастиц. Все известные в литературе схемы для этого метода имеют 2-й порядок точности как по времени, так и по пространству. Однако, как показывает опыт, для достаточно точного моделирования некоторых сложных процессов 2-го порядка точности оказывается недостаточно.

Авторами разработана новая схема для численного решения системы уравнений Власова-Пуассона методом макрочастиц, которая имеет 4-й порядок точности как по времени, так и по пространству. Эта схема допускает как явный, так и неявный варианты, причем в неявном варианте стартовая итерация совпадает с шагом из явного варианта. При этом координаты и скорости частиц, а также электрическое поле вычисляются в одни и те же моменты времени, что важно и удобно для контроля системы.

ЧИСЛЕННАЯ МОДЕЛЬ ОБЩЕЙ ЦИРКУЛЯЦИИ АТМОСФЕРЫ ВЕНЕРЫ С УЧЁТОМ РЕЛЬЕФА ПОВЕРХНОСТИ

Орлов К.Г.¹, Мингалёв И.В.¹, Родин А.В.^{2,3}

¹ Полярный геофизический институт Кольского научного центра РАН,
Апатиты, mingalev_i@pgia.ru

² Московский физико-технический институт (государственный университет),
Москва, alexander.rodin@phystech.edu

³ Институт космических исследований РАН

В данной работе излагается описание модели общей циркуляции атмосферы Венеры в рамках полной системы уравнений газовой динамики с учетом рельефа поверхности и с использованием релаксационного приближения для расчёта нагрева/охлаждения атмосферы за счёт поглощения/испускания электромагнитного излучения. Также проводится сравнение результатов численного моделирования атмосферы Венеры с учетом рельефа поверхности с результатами, полученными для сферической поверхности. Работа выполнена при финансовой поддержке грантов РФФИ № 10–01–00451 и № 10–02–01260, а также программы фундаментальных исследований Президиума РАН №22.

Введение. Атмосфера Венеры состоит на 98% из углекислого газа и находится в состоянии регулярного движения в зональном направлении со скоростью, в десятки раз превышающей скорость собственного вращения планеты. Давление у поверхности Венеры достигает 92 бар, а температура в нижних слоях достигает 740 К. В работе [1] были изложены результаты численного моделирования общей циркуляции атмосферы Венеры, полученные при помощи созданной авторами модели, основанной на численном решении полной системы уравнений движения вязкого сжимаемого газа без каких-либо упрощений. В этой модели использовалась регулярная пространственная сетка в сферических координатах. Шаги сетки по долготе и широте одинаковы и составляют 45/32 градуса. На полюсах узлов сетки нет. Ближайшие к полюсам узлы сетки отстоят от них по широте на половину шага. Сетка имела 256 узлов по долготе и 128 узлов по широте. Шаг сетки по высоте 250 м. Поверхность Венеры считалась сферической. Область моделирования простиралась от поверхности до высоты 100 км. Для численного решения системы уравнений использовалась явная разностная схема, детально описанная в работе [2] и хорошо себя зарекомендовавшая при расчётах динамики сложных трёхмерных течений сжимаемого газа. Кроме того, использовался упрощённый способ расчёта нагрева/охлаждения атмосферы за счёт поглощения/испускания электромагнитного излучения (так называемое релаксационное приближение). Было проведено моделирование

процесса установления общей циркуляции атмосферы Венеры на время более 14000 часов физического времени. Через 2800 часов физического времени после начала моделирования (это примерно солнечные сутки на Венере) качественная картина циркуляции практически перестает меняться и имеет следующие особенности. На высотах 10-80 км заметно усиливается направленный на запад (в сторону вращения Венеры) зональный ветер, причем на дневной стороне зональный поток расширяется, достигая максимальной ширины в районе вечернего терминатора, а на ночной стороне зональный поток сужается и имеет наименьшую ширину в районе утреннего терминатора. Максимальной величины зональная компонента ветра для каждой высоты из интервала 20-80 км достигает в широтном интервале от 30 до 75 градусов в каждом полушарии, а в районе экватора величина зональной компоненты ветра в 2-2.5 раза меньше её максимальных значений. На высотах 40-80 км вблизи утреннего терминатора образуются приполюсные вихри. На этих же высотах на дневной стороне заметен термический прилив – подъем атмосферного газа на дневной стороне из-за нагрева атмосферы и опускание его на ночной стороне и в районе полюсов из-за охлаждения атмосферы. Значения вертикальной компоненты ветра получились относительно небольшими. В целом в случае сферической поверхности Венеры общая картина циркуляции получилась привязанной к подсолнечной точке и перемещается вместе с ней над поверхностью.

Описание модели. В модели атмосферный газ рассматривается как смесь газов, состав которой не меняется в пространстве и во времени. Модель основана на численном решении системы уравнений динамики вязкого сжимаемого газа без каких-либо упрощений. В этой работе учитывается реальный рельеф поверхности Венеры [3, 4]. Отметим, что на Венере имеются многочисленные горные массивы, причем высота многих из них превышает 5 км, а одна гора имеет высоту более 11 км. Область моделирования простирается от поверхности до высоты 120 км. Расчётная сетка в этой модели такая же, как и в модели [1]. Система уравнений состоит из уравнения неразрывности, уравнения для 3-мерного вектора гидродинамической скорости и уравнения для полной энергии единицы объема среды, записанных в консервативной форме, и может быть представлена в виде:

$$\frac{\partial \mathbf{Q}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial x} + \frac{\partial \mathbf{Y}}{\partial y} + \frac{\partial \mathbf{Z}}{\partial z} = \mathbf{R} + \frac{\partial \mathbf{X}_v}{\partial x} + \frac{\partial \mathbf{Y}_v}{\partial y} + \frac{\partial \mathbf{Z}_v}{\partial z} \quad (1)$$

где x, y, z – декартовы координаты, \mathbf{Q} – вектор консервативных переменных, $\mathbf{X}, \mathbf{Y}, \mathbf{Z}$ – вектора потоков этих переменных в направлении координатных осей за счёт конвекции и давления, а $\mathbf{X}_v, \mathbf{Y}_v, \mathbf{Z}_v$ – вектора потоков этих переменных в направлении координатных осей за счёт вязких напряжений и теплопроводности:

$$\begin{aligned}
\mathbf{X} &= \left(w_x; w_x^2 / \rho + p; w_y w_x / \rho; w_z w_x / \rho; (E + p) w_x / \rho \right)^T, \\
\mathbf{Y} &= \left(w_y; w_x w_y / \rho; w_y^2 / \rho + p; w_z w_y / \rho; (E + p) w_y / \rho \right)^T, \\
\mathbf{Z} &= \left(w_z; w_x w_z / \rho; w_y w_z / \rho; w_z^2 / \rho + p; (E + p) w_z / \rho \right)^T, \\
\mathbf{Q} &= \left(\rho; w_x; w_y; w_z; E \right)^T, \\
\mathbf{R} &= \left(0; \rho g_x; \rho g_y; \rho g_z; (\mathbf{w}, \mathbf{g}) + q \right)^T, \\
\mathbf{X}_v &= \left(0; \Pi_{xx}; \Pi_{xy}; \Pi_{xz}; \Pi_{xx} v_x + \Pi_{xy} v_y + \Pi_{xz} v_z - j_x \right)^T, \\
\mathbf{Y}_v &= \left(0; \Pi_{yx}; \Pi_{yy}; \Pi_{yz}; \Pi_{yx} v_x + \Pi_{yy} v_y + \Pi_{yz} v_z - j_y \right)^T, \\
\mathbf{Z}_v &= \left(0; \Pi_{zx}; \Pi_{zy}; \Pi_{zz}; \Pi_{zx} v_x + \Pi_{zy} v_y + \Pi_{zz} v_z - j_z \right)^T.
\end{aligned}$$

В этих формулах обозначено: ρ – плотность газа, \mathbf{v} – гидродинамическая скорость, v_x, v_y, v_z – её компоненты в декартовых координатах, $\mathbf{w} = \rho \mathbf{v}$ – плотность импульса, w_x, w_y, w_z – её компоненты, E – объёмная плотность суммы кинетической и внутренней энергии газа, \mathbf{g} – ускорение внешних сил, g_x, g_y, g_z – его компоненты, j_x, j_y, j_z – компоненты вектора потока тепла, $\Pi_{xx}, \Pi_{xy}, \Pi_{xz}, \Pi_{yx}, \Pi_{yy}, \Pi_{yz}, \Pi_{zx}, \Pi_{zy}, \Pi_{zz}$ – компоненты тензора вязких напряжений, q – объёмная плотность мощности источников/стоков энергии, p – давление, которое в случае идеального газа определяется уравнением $p = (\gamma - 1)(E - w^2 / (2\rho))$. Ускорение внешних сил \mathbf{g} складывается из ускорений силы тяжести, силы Кориолиса и центробежной силы.

Для численного решения этой системы использовалась явная гибридная разностная схема, детально описанная в работе [2]. Основная идея этой схемы заключается в следующем. Обозначим через $\hat{\mathbf{A}}, \hat{\mathbf{B}}, \hat{\mathbf{C}}$ матрицы Якоби функций, определяющих потоки консервативных переменных \mathbf{Q} по направлениям x, y, z :

$$\hat{\mathbf{A}} = \frac{\partial \mathbf{X}(\mathbf{Q})}{\partial \mathbf{Q}}, \quad \hat{\mathbf{B}} = \frac{\partial \mathbf{Y}(\mathbf{Q})}{\partial \mathbf{Q}}, \quad \hat{\mathbf{C}} = \frac{\partial \mathbf{Z}(\mathbf{Q})}{\partial \mathbf{Q}}.$$

Используя стандартную схему расщепления по пространственным направлениям и физическим процессам для численного решения системы (1) можно построить явную разностную схему, на каждом шаге которой решается 1-мерная система из 5-ти уравнений.

Рассмотрим решение одномерной системы уравнений:

$$\frac{\partial \mathbf{Q}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial x} = \frac{\partial \mathbf{Q}}{\partial t} + \hat{\mathbf{A}}(\mathbf{Q}) \frac{\partial \mathbf{Q}}{\partial x} = 0 \quad (2)$$

Эта система при переходе к характеристическим переменным сводится к решению 5-ти скалярных уравнений переноса. Обозначим через $\hat{\Omega}^{-1}$ матрицу, столбцы которой есть правые собственные векторы матрицы \hat{A} , а через $\hat{\Omega}$ обозначим матрицу, обратную к матрице $\hat{\Omega}^{-1}$. Строки матрицы $\hat{\Omega}$ есть левые собственные векторы матрицы \hat{A} . Тогда $\hat{A} = \hat{\Omega}^{-1} \hat{\Lambda} \hat{\Omega}$, где $\hat{\Lambda}$ - диагональная матрица, на диагонали которой стоят собственные числа матрицы \hat{A} : $\lambda_1 = v_x - c$, $\lambda_2 = \lambda_3 = \lambda_4 = v_x$, $\lambda_5 = v_x + c$, где $c = \sqrt{\gamma p / \rho}$ - скорость звука.

Обозначим через $\mathbf{H} = \hat{\Omega} \mathbf{Q}$ характеристических переменных по направлению x . Пусть пространственная сетка задана соотношениями:

$$x_i = x_0 + i\Delta x, \quad y_j = y_0 + j\Delta y, \quad z_k = z_0 + k\Delta z,$$

где Δx , Δy , Δz - шаги сетки по осям x , y , z . Для решения нелинейной системы (2) используется явная консервативная разностная схема:

$$\frac{\mathbf{Q}_{i,j,k}^{n+1} - \mathbf{Q}_{i,j,k}^n}{\Delta t} = - \frac{\mathbf{X}_{i+1/2,j,k}^n - \mathbf{X}_{i-1/2,j,k}^n}{\Delta x}, \quad (3)$$

в которой потоки $\mathbf{X}_{i+1/2,j,k}^n$ в полужелезном по x узле сетки вычисляются по следующей формуле (индексы j и k для краткости опущены):

$$\mathbf{X}_{i+1/2,j,k}^n = \mathbf{X}_{i+1/2}^n = \hat{\Omega}_{i+1/2}^{-1} \hat{\Lambda}_{i+1/2} \tilde{\mathbf{H}}_{i+1/2}. \quad (4)$$

В этой формуле матрицы $\hat{\Omega}_{i+1/2}^{-1}$ и $\hat{\Lambda}_{i+1/2}$ вычисляются на n -ом временном слое в полужелезном по x узле сетки, а компоненты вектора характеристических переменных в этом узле сетки $\tilde{\mathbf{H}}_{i+1/2} = (\tilde{H}_1, \tilde{H}_2, \tilde{H}_3, \tilde{H}_4, \tilde{H}_5)^T$ вычисляются следующим образом. Обозначим через $\tilde{\lambda}_l$ диагональный элемент матрицы $\hat{\Lambda}_{i+1/2}$ с номером l , а через $H_{l,m}$ элемент с номером l вектора $\mathbf{H}_m = \hat{\Omega}_{i+1/2} \mathbf{Q}_m^n = (H_{1,m}, H_{2,m}, H_{3,m}, H_{4,m}, H_{5,m})^T$, где $m=i-1, i, i+1, i+2$. В зависимости от знака $\tilde{\lambda}_l$ определяются числа \tilde{H}_l . Обозначим через $\alpha = (1 - |\tilde{\lambda}_l| \Delta t / \Delta x) / 2$ и будем полагать

$$\text{при } \tilde{\lambda}_l \geq 0 \quad \tilde{H}_l = H_{l,i} + \alpha \beta^- \quad (5)$$

$$\text{при } \tilde{\lambda}_l < 0 \quad \tilde{H}_l = H_{l,i+1} - \alpha \beta^+ \quad (6)$$

$$\beta^- = \begin{cases} \frac{1}{2}(H_{l,i+1} - H_{l,i-1}) & \text{при } \frac{1}{2}|H_{l,i+1} - H_{l,i-1}| = M^- \\ (H_{l,i} - H_{l,i-1}) & \text{при } |H_{l,i} - H_{l,i-1}| = M^- \\ (H_{l,i+1} - H_{l,i}) & \text{при } |H_{l,i+1} - H_{l,i}| = M^- \end{cases} \quad (7)$$

$$\text{где } M^+ = \min \left\langle |H_{l,i+2} - H_{l,i+1}|, |H_{l,i+1} - H_{l,i}|, \frac{1}{2}|H_{l,i+2} - H_{l,i}| \right\rangle$$

$$\beta^- = \begin{cases} \frac{1}{2}(H_{l,i+2} - H_{l,i}) & \text{при } \frac{1}{2}|H_{l,i+2} - H_{l,i}| = M^+ \\ (H_{l,i+2} - H_{l,i+1}) & \text{при } |H_{l,i+2} - H_{l,i+1}| = M^+ \\ (H_{l,i+1} - H_{l,i}) & \text{при } |H_{l,i+1} - H_{l,i}| = M^+ \end{cases} \quad (8)$$

$$\text{где } M^+ = \min \left\langle |H_{l,i+2} - H_{l,i+1}|, |H_{l,i+1} - H_{l,i}|, \frac{1}{2}|H_{l,i+2} - H_{l,i}| \right\rangle$$

Схема (3)-(8) устойчива при выполнении условия Куранта, консервативна, монотонна и имеет 2-й порядок аппроксимации по пространству и по времени на гладких решениях нелинейной системы (2). Аналогично формулам (4)-(8) получаются формулы для вычисления потоков $\mathbf{Y}_{i,j+1/2,k}^n$ и $\mathbf{Z}_{i,j,k+1/2}^n$. Описанная выше методика численного решения уравнений газовой динамики хорошо зарекомендовала себя при моделировании сложных 3-хмерных течений газа. Она обеспечивает хорошую точность расчётов даже на относительно грубых сетках.

Для проведения численных расчётов авторами был разработан комплекс программ, позволяющий проводить параллельные расчёты как на центральных многоядерных процессорах (CPU), так и на графических ускорителях фирмы Nvidia (GPU).

Результаты моделирования. Было проведено моделирование процесса установления общей циркуляции атмосферы Венеры на время более 5500 часов физического времени. В этом случае, также как и в случае сферической поверхности, на высотах 10-80 км сформировалось зональное движение атмосферы в сторону вращения Венеры. При этом распределения горизонтальных компонент ветра на этих высотах получились очень близкими к распределениям, полученным в случае сферической поверхности. На рис. 1 представлено распределение горизонтальной составляющей ветра на высоте 60 км через 4595 часов после начала моделирования с учетом рельефа поверхности. Видно, что горизонтальный ветер зависит от долготы и на-

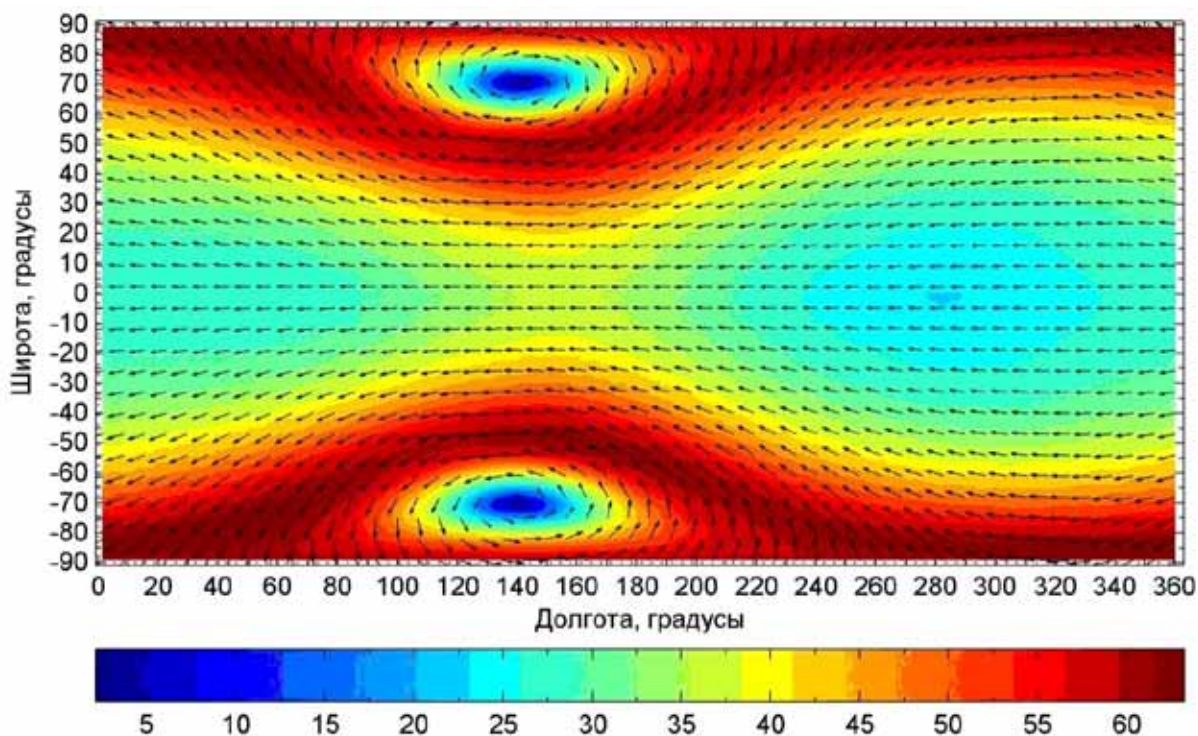


Рис 1. Распределение горизонтальной составляющей ветра (м/с) на высоте 60 км через 4595 часов после начала моделирования.

правлен преимущественно на запад, причем максимальной величины 65 м/с его скорость достигает в широтном интервале от 35 до 75 градусов в каждом полушарии. На дневной стороне зональный поток расширяется, достигая максимальной ширины при долготе 330°, а на ночной стороне он сужается, причём ширина потока минимальна при долготе 140°. На этой долготе вблизи полюсов при широтах примерно 75° расположены центры вихрей. В распределении вертикальной компоненты ветра для случая моделирования со сферической поверхностью и для случая моделирования с учётом рельефа поверхности можно увидеть большие отличия. При обтекании горных массивов зональным течением формируется система подветренных волн, которые распространяются на всю высоту области моделирования.

Над горным массивом вертикальная компонента ветра направлена вверх. Ниже по течению за ним имеется область, где вертикальная компонента ветра направлена вниз, затем идёт область, где эта компонента ветра снова направлена вверх. Величина вертикальной компоненты ветра в этих областях растёт с высотой. На высоте 60 км (рис. 2) ее максимальные значения превышают 5 м/с. Система подветренных волн здесь расположена в районе экватора в интервале широт от -15° до 10°, и в северном полушарии в интервале широт от 55° до 75°. На высотах более 80 км, вызванный подветренными волнами вертикальный перенос, заметно влияет на поле горизонтального ветра и приводит к существенно нестационарному режиму циркуляции.

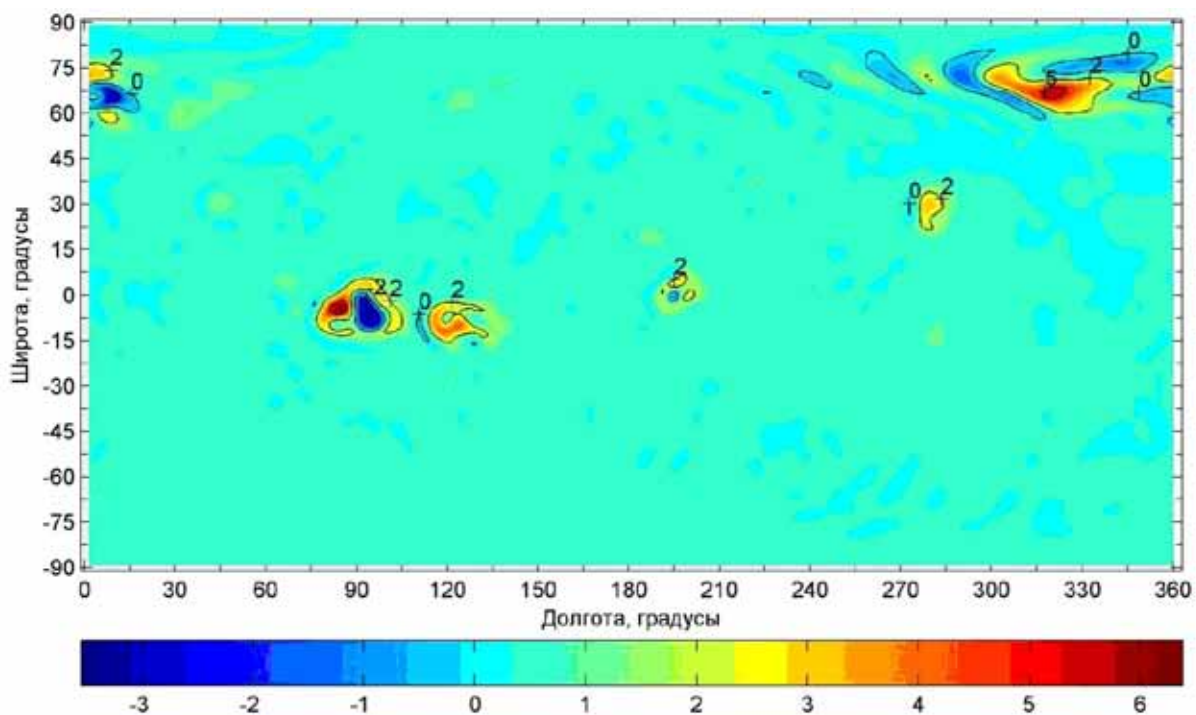


Рис 2. Распределение вертикальной составляющей ветра (м/с) на высоте 60 км через 4595 часов после начала моделирования с учетом рельефа поверхности.

Закключение. Таким образом, численное моделирование показало, что учёт наличия высоких гор на Венере существенно влияет на распределение вертикальной компоненты ветра на всех высотах, и на поле горизонтального ветра на высотах более 80 км.

Авторы выражают благодарность к.т.н. н.с. отдела исследований Луны и планет Государственного астрономического института им. П.К. Штернберга МГУ Лазареву Евгению Николаевичу за предоставленную цифровую карту рельефа поверхности Венеры.

Список литературы

1. Мингалёв И.В., Родин А.В., Орлов К.Г. Негидростатическая модель общей циркуляции атмосферы Венеры // Астрон. вестн. 2012. Т. 46. № 4. С. 282-296.
2. Мингалёв В.С., Мингалёв И.В., Мингалёв О.В., Опарин А.М., Орлов К.Г. Обобщение монотонной гибридной схемы второго порядка для уравнений газовой динамики на случай нерегулярной пространственной сетки // ЖВМ и МФ. 2010. Т. 50. № 5. С. 923-936.
3. Lazarev E., Rodionova J. Venus Mapping at small Scale: Source Data Processing and cartographic Interpretation // Lecture Notes in Geoinformation and Cartography, 1, Volume 6, Advances in Cartography and GIScience. V. 2. P. 4. 2011. P. 267-273.
4. Atlas of Venus 1:10 000 000, series V 10M 30/0 CMRN, prepared on behalf of the NASA Planetary Geology and Geophysics program and the Magellan Project Office of the Jet Propulsion Laboratory 1998.

**МАТЕМАТИЧЕСКИЕ ИССЛЕДОВАНИЯ
В БИОЛОГИИ**



ОБЗОР НЕКОТОРЫХ КРИТЕРИЕВ ОЦЕНКИ БИОЛОГИЧЕСКОГО РАЗНООБРАЗИЯ

Денисов Д.Б.

ФГБУН Институт проблем промышленной экологии Севера КНЦ РАН,
denisow@inep.ksc.ru

Введение. В настоящее время сохранение биологического разнообразия принадлежит к числу основных экологических проблем современности в связи с усиливающимся антропогенным влиянием на экосистемы. Актуальность приобретают методы и критерии его оценки, как научной основы организации мероприятий по изучению и прогнозированию динамики изменения биоразнообразия, наряду с изучением его функционального значения в экосистемах. Исследования биологического разнообразия базируются, преимущественно, на численном его выражении в результате вычисления различных индексов, на основе которых возможна оценка и сравнительный анализ. Такая оценка должна базироваться не только на надёжной инвентаризации таксонов организмов, но и на корректности использования математического аппарата.

История развития подходов к оценке биоразнообразия. Согласно Конвенции о биологическом разнообразии, принятой 22 мая 1992 г. в Найроби (Кения) и открытой для подписания 5 июня 1992 г. на Конференции ООН по окружающей среде и развитию в Рио-де-Жанейро (Бразилия), биологическое разнообразие было определено как «вариабельность живых организмов из всех источников, включая, среди прочего, наземные, морские и иные водные экосистемы и экологические комплексы, частью которых они являются; это понятие включает в себя разнообразие в рамках вида, между видами и разнообразие экосистем». Таким образом, биологическое разнообразие имеет определение, закреплённое на уровне международных соглашений. В то же время в литературе можно встретить множество других формулировок этого термина.

Принято считать, что впервые словосочетание «биологическое разнообразие», применил Г. Бейтс (Bates, Henry Walter) (1825 – 1892), английский учёный и путешественник, в своих работах, посвящённых бабочкам лесов бассейна р. Амазонка. Под этим термином первоначально подразумевалось число видов (таксонов), что и по сей день является одним из способов численного выражения биологического разнообразия. Формирование научной концепции анализа биологического разнообразия состоялось сравнительно недавно, во второй половине XX века, одновременно с развитием экологической теории и практики, а также накоплением знаний о функциональной роли биоразнообразия в экосистемах.

Значительным шагом в развитии оценочных критериев биологического разнообразия стало использование базовых понятий теории информации – энтропии, как меры разупорядоченности системы, и дисперсии, как меры рассеяния распределений вероятностей случайных величин. Основатель теории информации К. Шеннон (1916-2001) через энтропию выразил количество информации, а для обозначения единицы информации ввел понятие «бит», как выбор одного из двух равновероятных вариантов (Shannon, 1948; Shannon, Weaver, 1949). Впервые представленная в его классической работе (1948) формула энтропии для дискретного множества частот p_1, \dots, p_n впоследствии получила широкое распространение в различных областях научного знания, включая биологию и экологию:

$$H = -\sum p_i \cdot \log_2 p_i$$

В настоящее время до сих пор продолжают споры о первенстве и корректности наименования информационного индекса. Г.Р. Розенберг (2010), проанализировав исторические аспекты развития представлений об энтропии и теории информации, с учетом периодов их представления, предложил следующую последовательность: Р. Клаузиус – Л. Больцман – Р. Хартли – А. Колмогоров – Дж. фон Нейман – В. Котельников – Р. Фишер – Н. Винер, К. Шеннон, У. Уивер.

В дальнейшем, эффективность использования математического аппарата для оценки биоразнообразия была показана в работах Дж. Э. Хатчинсона (Hutchinson, 1953a) и Р. Мак-Артура (McArthur, 1971; Hutchinson, McArthur, 1959) в полевой экологии, теории экологических ниш и биогеографии. Р. Маргалев, на примере исследования сообществ планктона показал, что увеличение количества проб – объёма выборки, приводит к увеличению показателей видового разнообразия (Margalef, 1958). Он предложил следующую формулу, основанную на законе Л. Больцмана для энтропии изолированных термодинамических систем:

$$\bar{H} = \frac{1}{N} 1,443 \cdot \ln \frac{N!}{n_1! + n_2! + \dots + n_N!},$$

где $N!$ – факториальная величина всех исследуемых видов, $n_i!$ – факториал от числа особей каждого вида.

Р. Уиттекер структурировал уровни разнообразия экосистем в географическом отношении и пришёл к выводу, что разнообразие увеличивается от холодного к теплому климату и от морского к континентальному, а также при продвижении от высоких широт к экватору. В его работах отмечается эволюционное значение биоразнообразия (Whittaker, 1972). Следует отметить огромный вклад в развитие системы критериев оценки биологического разнообразия учёных-генетиков 1908-1953 гг., показавших генетическое

разнообразии организмов во внешне однородной популяции, и разработавших математический аппарат для его объективного описания.

Современные представления о биоразнообразии базируются на теории информации и системном подходе к анализу функционирования живых систем различного уровня во взаимосвязи между собой и с факторами внешней среды. К настоящему времени предложено несколько десятков индексов, характеризующих видовой разнообразие или отдельные его аспекты, причём подсчёт многих из них автоматизирован посредством компьютерных программных продуктов.

Индексы для оценки биоразнообразия. Существует несколько путей оценки биоразнообразия. Одно из направлений – подсчёт числа видов, находящихся в пробах, обитающих в данной экосистеме или её пространственной единице. Видовое разнообразие, выраженное числом видов (или таксонов, включая внутривидовые категории) отражает лишь степень *видового богатства*, то есть числа особей, причисленных к одному таксону, обитающих на анализируемой территории. Число видов, объективно, не всегда может рассматриваться как критерий биоразнообразия, так как зависит как от особенностей постановки задачи исследования, так и множества разнообразных факторов, связанных с выбором объекта. Тем не менее, число видов, как показатель общего числа организмов, которые могут быть обнаружены в данном местообитании, представляет собой наиболее простой критерий биоразнообразия, не зависящий от численности и соотношения организмов. Видовое богатство, или плотности видов, а также *выравненность* по мнению Ю. Одума, является одним из компонентов видового разнообразия (Одум, 1975). Выравненность представляет собой показатель, основанный на значимости отдельного таксона. Значимость отражает «участие» вида в сообществах относительно обилии, биомассе, положению в структуре доминирования и пр. Формальное определение биоразнообразия было предложено В.К. Шитиковым и Г.С. Розенбергом:

$$R = \psi[S, \Omega, F_s(p)],$$

где R – биоразнообразие, Ω – некоторая наиболее подходящая выборочная статистика, S – множество характеристически обособленных групп, $F_s(p)$ – выборочная функция распределения изучаемого показателя по этим группам (Шитиков, Розенберг, 2005).

Расчётные показатели, получаемые на основе различных формул модификаций мер дисперсии и энтропии в экологии принято называть *индексами видового разнообразия*.

Индекс Симпсона

Основан на формуле дисперсии. Другие названия – мера доминирования, индекс доминирования, концентрация доминирования. (Simpson, 1949).

$$D = \sum \left[\frac{n_i(n_i - 1)}{N(N - 1)} \right],$$

где N – сумма фактической значимости всех видов, n – значимость какого-либо одного вида, например число особей, биомасса, относительное обилие.

В качестве значимости чаще всего выступает численность экземпляров. По мнению А.Ф. Алимова, индекса Симпсона выражает отношение числа степеней свободы внутривидовых взаимодействий к общему числу степеней свободы внутренних элементов экосистемы, обеспечивающих её единство и функционирование (Алимов, 2000). Значение данного индекса слабо зависит от числа таксонов, поэтому область его применения ограничена индикацией доминирования. Величина Индекс Симпсона зависит и от видового богатства и от равномерности в соотношении обилий разных видов. Индекс Симпсона более чувствителен к изменению обилия самых массовых видов. При постоянном числе видов D возрастает с увеличением выравнивания в количественном соотношении разных видов, а при постоянной равномерности – с ростом видового богатства. При помощи индекса Симпсона можно количественно оценить равномерность распределения (выравнивание) – доля максимально возможной величины D , достигается при одинаковой численности всех видов. По сути, этот индекс описывает вероятность принадлежности любых двух особей, случайно отобранных из неопределённо большого сообщества к одному и тому же виду. Существует тесная связь между индексом Симпсона и дисперсией объёма таксонов.

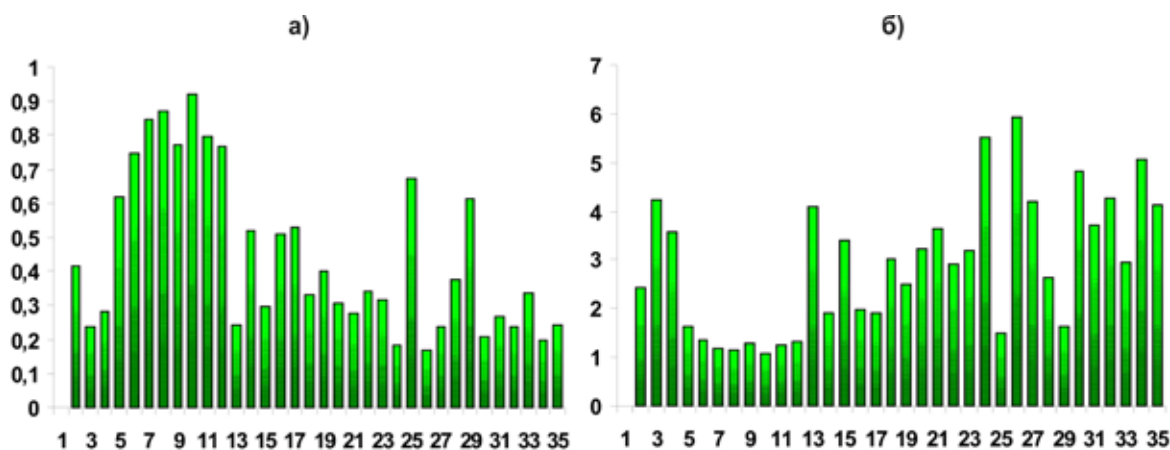


Рис. 1. Видовое разнообразие фитопланктона (июль 2012 г) различных участков озера Имандра, оценённое с помощью индекса Симпсона – а) и индекса полидоминантности – б).

Увеличение индекса Симпсона означает уменьшение разнообразия и увеличение степени доминирования одного вида. Поэтому на практике ча-

сто используют модификацию – *обратный индекс Симпсона*, или «индекс полидоминантности»:

$$D^{-1} = 1/D = \sum_{i=1}^s \frac{1}{p_i^2}$$

Пример использования индекса Симпсона и индекса полидоминантности представлен на рис. 1.

Индекс Шеннона. В литературе встречается множество названий данного индекса, но в данной статье, вслед за А.Ф. Алимовым (2000), принято название «индекс Шеннона». Это один из самых распространённых и повсеместно применяемых индексов, основанных на формуле энтропии. С точки зрения теории информации, интерпретация энтропийного индекса Шеннона состоит в том, что биологическое разнообразие трактуется как приходящееся на одну особь количество информации, заключённой в распределении по видам, особям или энергии по трофическим связям (MacArthur, 1955; Алимов, 2000). Для оценки гомогенности распределения и возможности выбора применяется величина энтропии, которая представляет собой количественную меру степени неопределённости исхода случайного опыта, зависящую от распределения плотности вероятностей. Энтропия дискретного множества вероятностей (энтропия дискретной случайной величины, средняя собственная информация), соответствующая общей неопределённости всех S возможных исходов, определяется по формуле Шеннона:

$$H = -\sum_i^s p_i \cdot \log_a p_i,$$

где $p_i = \frac{x_i}{\sum_{i=1}^n x_i}$ и соответствует числу признаков (например, особей) определённого объекта (например, вида) в выборке (например, в сообществе, в пробе и т.п.), $p_i \log_a p_i$ – среднее количество информации, приносимое исходом i при многократном осуществлении испытания; a – основание логарифма, выбранное для оценки величины энтропии (обычно, равное 2 или числу e). Теоретически H принимает максимальное значение тогда, когда имеет место полная выравненность распределения $\log_2 S$, (где S – общее число объектов (например, видов в сообществе, пробе)) что соответствует наибольшему разнообразию системы, а минимальное равно 0. Значение индекса Шеннона измеряется в битах на экземпляр – бит/экз. Иногда, чтобы не использовать единицу измерения «бит» производится нормирование индекса Шеннона по следующей схеме: $\frac{H}{H_{\max}}$. В литературе встречается также обозначение индекса Шеннона – H' .

Индекс Шеннона также называется информационным, но следует отметить, что информация о внутренней организации экосистемы, присутствующая в структурах организмов и потоках между этими структурами, не сводится только лишь к разнообразию (Розенберг, 2010). Поэтому этот индекс несёт информационную нагрузку для исследователей, но не для экосистемы (Алимов, 2000). Для понимания и оценки информационных процессов и потоков информации в экосистеме, информацию следует рассматривать как характеристику внутренней организации системы, которая проявляется при воздействии объектов и процессов.

Достоинством индекса разнообразия является его полная независимость от биоценотического сходства сравниваемых сообществ и возможность оценки степени разнообразия каждого местообитания (или пробы) в отдельности, так как между числом таксонов и индексом Шеннона существует прямая функциональная связь (Баканов, 2000; Розенберг, 2010). «Индекс почти не зависит от величины пробы и характеризуется нормальным распределением; это обстоятельство позволяет использовать обычные статистические методы для проверки значимости различий между средним» (Одум, 1986). Если число видов в анализируемом местообитании сравнительно невелико ($S < 30$), то на величину H преимущественно влияет видовое богатство – количества таксонов. С увеличением видового богатства влияние числа видов на величину H существенно ослабевает. Это ярко проявляется при анализе сообществ, характеризующихся значительным видовым богатством, например, альгоценозов или комплексов диатомовых водорослей донных отложений, где число таксонов измеряется сотнями.

Величина индекса Шеннона зависит от видовой плотности и выравниваемости, что позволяет характеризовать его как комплексный индекс, что объясняет его популярность. В то же время, по значению индекса Шеннона сложно оценить, что именно определяет биоразнообразие – число таксонов, или выравниваемость. Для расчётов на практике применяют величину численности организмов, или их биомассу.

Благодаря широкому распространению, индекс Шеннона служит для сравнения биоразнообразия различных экосистем, как в пространственном, так и во временном отношении. В связи с тем, что значение H само по себе исключает учёт каких-либо данных о количестве организмов или их биомассе. Например, можно получить одинаковое значение индекса, сравнивая малочисленные сообщества водорослей в аквариуме с континентальной альгофлорой: одинаковые значения p_i получаются как при больших (2000/10000), так и при малых (2/10) численностях особей. В интерпретациях индекса можно говорить только об относительном характере распределения информационных связей, вещества и энергии по отдельным таксонам, не затрагивая отдельный организм. Поэтому, корректность сравнения индексов Шеннона для различных биоценозов определяется примерно одина-

ковой соразмерностью видового пространства сравниваемых структурных комплексов (Розенберг, 2010). Индекс Шеннона мало «чувствителен» к редким видам.

Индекс Бергера-Паркера. Еще один индекс, позволяющий анализировать степень доминирования. В качестве меры гетерогенности выступает относительная значимость наиболее обильного вида:

$$d = \frac{N_{\max}}{N},$$

где N_{\max} – число особей самого обильного таксона, N – общее число экземпляров (Berger, Parker, 1970).

Индекс выражает относительную значимость наиболее обильного таксона. Увеличение индекса Бергера-Паркера, как и индекса Симпсона, означает уменьшение разнообразия и увеличение степени доминирования одного вида, поэтому на практике часто используется величина, обратная индексу Бергера-Паркера – $1/d$.

Индекс Маргалефа. Важнейшими характеристиками биоразнообразия являются видовое богатство (число таксонов) или плотность видов. Число таксонов может быть отнесено к площади (или объёму) или к числу особей. Р. Маргалефом (Margalef, 1956) предложен следующий индекс видового разнообразия:

$$I_{Mgf} = \frac{1}{Q} \log_2 \frac{Q!}{q_1! \cdot q_2! \cdot \dots \cdot q_N!},$$

где $Q!$ – факториальная величина всех исследуемых видов, $q_1!, q_2!, \dots, q_N!$ – факториальная величина числа особей какого-либо вида.

Исходя из того, что число видов пропорционально логарифму изученной площади, и считая, что общее число особей пропорционально площади, Р. Маргалеф предложил в качестве меры биоразнообразия следующее соотношение:

$$d = \frac{(s-1)}{\ln N},$$

где s – число видов, N – число особей (Margalef, 1958).

Достоинство этого индекса – простота расчётов. Большая величина индекса соответствует большему видовому разнообразию.

Индекс Менхиника

Е.Ф. Менхиникк (1964) предложил рассчитывать видовое богатство, используя в знаменателе функцию квадратного корня:

$$d_{Mn} = \frac{(s-1)}{\sqrt{N}},$$

где s – число видов, N – число особей

Индексы Менхиника и Маргалефа отличаются от всех остальных широко используемых индексов тем, что для их расчёта применяется абсолютная величина – численность (N), а не относительная – доля i -го вида (p_i) в сообществе. В результате этого данные индексы очень чувствительны к размеру выборки и точности расчётов. При изучении сообществ организмов, выборки которых могут носить случайный характер (например, водоросли планктона), применение этих индексов для оценки таксономического разнообразия несколько ограничено. Следует отметить, что низкое значение индекса Менхиника характерно для сообществ, где один-два вида обеспечивают более 70% общей численности.

Заключение

Представленные индексы видового разнообразия являются широко распространёнными в мировой и отечественной экологической практике, их повсеместное применение открывает широкие возможности для сравнительного анализа.

Использование данных индексов при различных экологических исследованиях и для задач биоиндикации во многом обусловлено традицией. Если разнообразие определённых сообществ организмов исторически (в традициях данной научной школы) принято оценивать с помощью определённого индекса (набора индексов), то это же входит в практику будущих исследований. Например, чрезвычайно широкое распространение имеет индекс Шеннона, хотя исследователь не всего может чётко объяснить, по каким причинам он использует именно этот критерий оценки таксономического разнообразия, а не какой-либо другой. Использование одних и тех же, ставших «традиционными» индексов, позволяет проводить сравнительный анализ многолетней динамики биоразнообразия исследуемых групп организмов, сравнение с данными предыдущих исследований, а также сопоставлять видовое разнообразие в различных регионах и местообитаниях. При таком подходе зачастую отсутствует какой-либо творческий поиск новых, может быть более адекватных критериев оценки биологического разнообразия в угоду «универсальности» и «традиции».

Проблемы при использовании индексов могут быть вызваны отсутствием у исследователя информации о сути, базовых принципах расчёта индекса, который в данном случае используется, как инструмент, позволяющий получить некую цифру. Выбор индекса для конкретных задач оценки биоразнообразия должен базироваться на знании принципов расчёта и физическом (математическом) смысле используемого показателя, с учётом особенностей биологических объектов: сложность структуры сообществ, набор групп организмов, объём выборок, их случайность и пр.

По мнению Г.С. Розенберга (2010), оценка биоразнообразия в пространстве видов в значительной мере является некорректной процедурой в силу того, что при этом не учитывается морфологическое, функциональное, эко-

логическое сходство/различие между самими видами. Каждый вид представляется как изолированный таксон, информационно равноудалённый от всех остальных.

Для расчёта индекса Шеннона в качестве эталона принимается экосистема с равными обилиями всех видов, когда данный показатель принимает максимальное значение, что не вполне соответствует структуре реальных природных сообществ и должно учитываться при проведении биоиндикации качества среды на базе данного критерия.

Применение индексов Маргалефа и Менхиника для оценки видового разнообразия сообществ организмов, выборки которых могут носить случайный характер, ограничено. Так, сложно на практике получить репрезентативную выборку планктонных организмов из водоёма, ибо их видовое богатство сравнительно велико, а в пробы попадает лишь некий набор таксонов, не всегда отражающий реальную картину видового разнообразия данного водоёма. До настоящего времени продолжают споры о методике количественных подходов, необходимом и достаточном количестве биологической информации (числа инвентаризированных таксонов, проб, повторностей) для адекватной оценки биологического разнообразия. Исследователи расходятся во мнениях, сколько, например, следует просчитать клеток водорослей под микроскопом, чтобы этого было достаточно для оценки видового разнообразия.

Исследования в области биологического разнообразия приобретают все большую актуальность. Наиболее разнообразное сообщество является «стратегическим запасом» биологической эволюции, а следовательно, количественное определение таких сообществ позволяет обеспечить таким уникальным сообществам охранный статус. Важнейшим направлением количественной оценки является определение доли редких и обильных таксонов, а также их влияния на структуру сообществ в целом; близким направлением является оценка доминирования видов, в рамках концепции которой используется понятие значимости вида.

Стратегия анализа биологического разнообразия требует, прежде всего, количественной и сравнительной оценки его в природных экосистемах различного уровня. Комплексная оценка всех критериев биоразнообразия позволяет понять степень устойчивости изучаемой экосистемы, уровень антропогенного воздействия на её структуру, роль и место редких видов растений и животных в данной экосистеме. Перспективным направлением в разработке новых и применении существующих критериев оценки биологического разнообразия является междисциплинарный подход, когда математический аппарат корректно используется в экологических исследованиях.

Исследования сообществ организмов и экосистем на основе математического моделирования показывают, что биоразнообразие является одним из основных критериев их стабильности и устойчивости. Формализация по-

нения «биоразнообразия» до уровня математического выражения упрощает разработку моделей и их анализ в вычислительном эксперименте, что может служить не только эффективным методом исследования роли биологического образования в эволюции и функционировании экосистем, но и позволяет разрабатывать элементы экологического нормирования для задач мониторинга и оценки качества окружающей среды.

Список литературы

1. Алимов А.Ф. Элементы теории функционирования экосистем. СПб.: ЗИН РАН. 2000. 147 с.
2. Баканов А.И. Использование зообентоса для мониторинга пресноводных водоемов (обзор) // Биол. внутр. вод. 2000. № 1. С. 68-82.
3. Лебедева Н.В., Дроздов Н.Н., Криволицкий Д.А. Биоразнообразие и методы его оценки: Учебное пособие. М.: МГУ. 1999. 94.
4. Розенберг Г.С. Информационный индекс и разнообразие: Больцман, Котельников, Шеннон, Уивер... // Самарская Лука: проблемы региональной и глобальной экологии. 2010. Т. 19. № 2. С. 4-25.
5. Одум Ю. Основы экологии. М.: Мир. 1975. 740 с.
6. Шитиков В.К., Розенберг Г.С., Зинченко Т.Д. Количественная гидроэкология: методы системной идентификации. Тольятти: ИЭВБ РАН. 2003. 463 с.
7. Шитиков В.К., Розенберг Г.С., Зинченко Т.Д. Количественная гидроэкология: методы, критерии, решения: в 2-х кн. М.: Наука. 2005. Кн. 1. 281 с.; Кн. 2. 337 с.
8. Шитиков, В.К. Оценка биоразнообразия: попытка формального обобщения / В.К. Шитиков, Г.С. Розенберг // Структурный анализ экологических систем. Количественные методы экологии и гидробиологии: сб. науч. тр., посвящ. памяти А.И. Баканова). Тольятти: СамНЦ РАН. 2005. С. 91-129.
9. Berger W.H., Parker F.L. Diversity of Planktonic Foraminifera in Deep Sea Sediments // Science. 1970. V. 168. P. 1345.
10. Biodiversity. National Forum on Biodiversity (1986: Washington, D.C.) / Wilson E.O. (Ed.) Washington: National Academy Press. 1988. 520 p.
11. Biodiversity: Measurement and Estimation / Hawksworth D. (Ed.). London: Chapman & Hall. 1995.
12. Evolution of Biological Diversity / Magurran A.E., May R.M. (Eds). N-Y: Oxford Univ. Press. 1999. 329 p.
13. Heywood V. E. (ed.). 1995. Global biodiversity assessment. Cambridge University Press. 1152 p.
14. Hutchinson G.E. The concept of pattern in ecology. Proc. Acad. Natur. Sci. Phila., 1953 a. 105:1-2.
15. Hutchinson G.E., MacArthur R.H. A Theoretical Ecological Model of Size Distribution among Species of Animal // American Nature. 1959. V. 93. P. 117-125.
16. Magurran A.E. Measuring biological diversity. – Oxford, UK.: Blackwell Publishing, 2004. 256 p.
17. Margalef R. Information theory in ecology // Gen. Syst. 1958. № 3. P. 36-71.
18. Margalef R. Information theory in ecology // Gen. Syst. 1958. № 3. P. 36-71.
19. McArthur R.H. Pattern of Terrestrial Bird Communities // Avian Biology. 1971. V. I. P. 189-221.

20. Shannon C.E. The mathematical theory of communication // Bell Syst. Techn. J. 1948. V. 27. P. 379-423, 623-656.
21. Shannon C.E., Weaver W. The Mathematical Theory of Communication. Urbana: Univ. Illinois Press. 1949. 117 p.
22. Simpson E.H. Measurement of species diversity. Nature. 1949. P. 163-688.
23. Whittaker R.H. Evolution and Measurement of Species Diversity // Taxon. 1972. V. 21. P. 213-251.

МАТЕМАТИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ В БИОЛОГИИ ПРИМЕНИТЕЛЬНО К МАЛЫМ ВЫБОРКАМ

Михайлов Р.Е.

Научный отдел медико-биологических проблем адаптации человека
в Арктике Кольского научного центра РАН, Апатиты, rem1987@mail.ru

Основными источниками информации для естественных наук являются наблюдения, сравнения и опыты. Биология по большей части остается наукой эмпирической, то есть опирается, главным образом, на сбор фактов в поисках закономерностей проявления природных феноменов, их описание и попытки трактования. Для медико-биологических исследований проведение опытов затруднено ввиду многочисленных этических и юридических препятствий. Даже при проведении наблюдений приходится сталкиваться с некоторыми трудностями, такими как нежелание добровольно и безвозмездно сотрудничать, отсутствие или дороговизна подходящего оборудования и реактивов, а также трудность в получении выборок достаточно большого размера. Основным инструментом для обработки данных является биометрия. Биометрия – раздел биологии, содержанием которого является планирование наблюдений и статистическая обработка результатов. Свои методы биометрия заимствует, главным образом, из математической статистики и теории вероятности.

Ведущим объектом исследований нашего научного отдела является человек и показатели его организма в зависимости от широтного градиента. Общеизвестно, что в условиях Крайнего Севера человек постоянно находится в стрессовых условиях изменяющегося циркадного ритма (отсутствие стабильной смены дня и ночи). Неблагоприятное воздействие также оказывает то, что хронотип жителей севера на 2 часа отличается от поясного времени. Из-за близости к северному магнитному полюсу над северными территориями находится более тонкий слой магнитосферы, вследствие чего население этих районов подвергается более сильному воздействию солнечной радиации и космических лучей.

Основными направлениями научных работ являются:

- изучение влияния природных источников смешанного ионизирующего излучения на горняков, добывающих лопаритовую руду в поселке Ревда;
- изучение процессов адаптации и динамики изменения показателей здоровья у школьников в период летнего отдыха в лагере «Донской»;
- изучение динамики изменений показателей организма у здорового населения города Апатиты в период повышенной солнечной активности;
- изучение распределения смертности и приступов эпилепсии у пациентов психоневрологического интерната в городе Апатиты по фазам цикла солнечной активности за период с 1984года по настоящее время.

В качестве контрольной группы используются волонтеры из числа сотрудников КНЦ РАН и студентов ПетрГУ.

Изучение всей генеральной совокупности невозможно ввиду её большого размера и трудности получения данных, поэтому на практике приходится иметь дело со сравнительно небольшими выборочными совокупностями [3]. Выборка – множество случаев (испытуемых, объектов, событий, образцов), выбранных из генеральной совокупности для участия в исследовании. При работе с выборкой важнейшим её свойством является репрезентативность. В самом общем виде – это свойство выборки, позволяющее переносить результаты, полученные на ограниченном числе объектов, на всю генеральную совокупность.

Начальным этапом статистической обработки данных является анализ основных показателей распределения, таких как среднее, стандартное отклонение и стандартная ошибка. Уже на этом этапе можно делать первые выводы о результатах исследования. Так по данным на основе отношения ошибки средней (m) к самой средней арифметической (M), выраженном в процентах:

$$P = \frac{m}{M} * 100\%$$

можно судить о надёжности полученных результатов и о том, было ли достаточным количество наблюдений в выборке, чтобы результат можно было экстраполировать на всю генеральную совокупность. Чем точнее определена средняя, тем меньше будет P , и наоборот. Точность считается хорошей, если P меньше 3%, и удовлетворительной при $3\% < P < 5\%$. Если относительная ошибка превышает 5%, полученные данные следует уточнить (повторить опыт, собрать дополнительный материал и т. д.) [1].

Основными задачами статистической обработки являются сравнение двух выборок (экспериментальная и контрольная) и поиск взаимной связи (зависимости) двух признаков. Задача сравнения двух выборок в большинстве случаев аналогична доказательству различия между выборками. Для этого в медико-биологической практике обычно используется критерий Манна-Уитни. U -критерий Манна-Уитни это непараметрический статисти-

ческий критерий, используемый для оценки различий между двумя выборками по какому-либо признаку. U-критерий является ранговым, поэтому он инвариантен по отношению к любому монотонному преобразованию шкалы измерения. Этот метод определяет, достаточно ли мала зона перекрещивающихся значений между двумя рядами, чем меньше значение критерия (зона перекрытия), тем вероятнее, что различия между значениями параметра в выборках достоверны [4]. Суть критерия сводится к следующему: из двух выборок размером m и n строится общий вариационный ряд объединённой выборки $x^{(1)} \leq x^{(2)} \leq \dots \leq x^{(m+n)}$. И каждому наблюдению присваиваются ранги в соответствии с возрастанием $r(x_i)$, $r(y_j)$ в объединённом вариационном ряду. Вычисляются суммарные ранги обеих выборок и статистика Манна-Уитни U :

$$R_x = \sum_{i=1}^m r(x_i), \quad U_x = mn + \frac{1}{2}m(m+1) - R_x$$

$$R_y = \sum_{j=1}^n r(y_j), \quad U_y = mn + \frac{1}{2}n(n+1) - R_y$$

$$U = \min(U_x, U_y)$$

По таблице для избранного уровня статистической значимости определяется критическое значение критерия для данных m и n . Если полученное значение U меньше табличного или равно ему, то признается наличие существенного различия между уровнем признака в рассматриваемых выборках. Достоверность различий тем выше, чем меньше значение U . Для проверки полученных результатов применяются другие методы сравнения (Q-Розенбаума, Колмогорова-Смирнова), но ввиду высокой точности и распространённости предпочтение отдаётся именно критерию Манна-Уитни.

Для поиска зависимости исследуемого параметра от внешних факторов используется корреляционный анализ. Коэффициент корреляции Пирсона характеризует существование линейной зависимости между двумя величинами. Вычисление коэффициента корреляции Пирсона производится по формуле:

$$r_{xy} = \frac{\sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^n (x_i - \bar{x})(y_j - \bar{y})}{\sqrt{\sum_{i=1}^m (x_i - \bar{x})^2 \cdot \sum_{j=1}^n (y_j - \bar{y})^2}}$$

Коэффициент корреляции изменяется в пределах $[-1, +1]$. Чем больше по модулю значение коэффициента, тем выше взаимосвязь изучаемых величин [5]. Значимость полученных коэффициентов определяется по формуле:

$$T = \frac{r_{xy} \sqrt{n-2}}{\sqrt{1-r_{xy}^2}}$$

полученное значение сравнивается с табличным значением критерия Стьюдента при $n-2$.

Наличие значимой корреляции между двумя величинами не всегда означает их взаимную обусловленность, из этого следует лишь стохастическая связь этих величин. Такая «ложная» взаимосвязь может обнаружиться в результате эффектов одновременного влияния неучтённых факторов на исследуемые переменные.

Применяемые методы являются классическими и общепринятыми. Однако с увеличением объёмов выборок и расширением количества исследуемых параметров возникает необходимость и в расширении применяемого математического аппарата, что ставит перед нами цели для освоения новых методов математической статистики и адаптации их к биологическим исследованиям.

Список литературы

1. Ивантер, Э.В. Введение в количественную биологию: учеб. Пособие / Э.В. Ивантер, А.В. Коросов; Петрозавод. гос. ун-т. – 2-е изд. Петрозаводск: Изд-во ПетрГУ. 2003. 302 с.
2. Применение методов статистического анализа для изучения общественного здоровья и здравоохранения. Учебное пособие для практических занятий / Под ред. В.З. Кучеренко. 4-е изд., перераб. и доп. М.: ГЭОТАР-Медиа. 2007. 256 с.
3. Рокицкий П.Ф. Биологическая статистика. Изд. 2-е. Минск: Высшая школа, 1967. 328 с.
4. Mann H.B., Whitney D.R. On a test of whether one of two random variables is stochastically larger than the other // *Annals of Mathematical Statistics*. 1947. № 18. P. 50-60.
5. Гмурман В.Е. Теория вероятностей и математическая статистика: Учебное пособие для вузов. 10-е издание, стереотипное. М.: Высшая школа. 2004. 479 с.

Фоторепортаж





















о нас нуиуиуи
о нас нуиуиуи
о нас нуиуиуи
о нас нуиуиуи



о нас нуиуиуи

Хибинский вестник

Еженедельная газета. Издаётся с 5 апреля 1989 года. Рекомендуемая цена – 15 рублей

25 октября 2012 года, № 43 (1211)

www.hibvest.ru

С Галилеем соглашаются, но...

Наталья Котляренко

**Как молодые учёные
говорили о природе
языком математики.**

«Природа написана языком математики». Это изречение Галилея – научное кредо участников VIII Всероссийской научной школы «Математические исследования в естественных науках», прошедшей в Геологическом институте КНЦ РАН на прошлой неделе.

– Эти школы не бывают многлюдными. С фразой гениального итальянца соглашаются все, но, когда дело доходит до математического описания природы, начинаются проблемы, – говорит создатель и руководитель Школы директор Геологического института КНЦ РАН Юрий Войтеховский. – Кажется парадоксальным, но люди, работающие в естественных науках, сплос и рядом несильны в математике.

Школа начала работу 8 лет назад, постепенно из моих студентов и аспирантов сложился её костяк. Мы смотрим на природу глазами математиков, ищем в ней математические структуры. Это и считаем пониманием природы, это нас и объединяет. Между прочим, примерно 40 лет назад в советской геологии было активное математическое течение, мечталось построить её на аксиоматических основаниях. Лет 20 назад течение почти иссякло. Я пытаюсь по мере сил продлить идею концептуальной математизации геологии в тех разделах, где это уже можно сделать, где пройдена описательная стадия развития, где определения, требующие нескольких абзацев, можно заменить лаконичными формулировками и развивать из них строгую теорию.

За 8 лет к Школе присоединились геофизики и биологи, причём со всех концов страны. В нынешней Школе приняли участие и молодые учёные из Апатитов, Благовещенска, Владимира, Кировска, Москвы, Петрозаводска, Сыктывкара и Тольяти.



■ Интерес в глазах, цифры в голове



■ Захар Слуковский рассказывает о городской речушке в математических схемах

Она прошла по трём секциям: геологической, геофизической и биологической. Молодые учёные расширили кругозор в смежных дисциплинах, поскольку убеждены, что мир един.

– Минеральное и биологическое разнообразие, сложность минерала или биологической системы – всё это можно охватить единой математической теорией, – уверены молодые исследователи. – Благодаря этой Школе и такой методологии мы становимся причастными к фундаментальной науке.

Профессор Юрий Войтеховский в своём докладе предложил математическое определение структуры полнокристаллической горной породы. Дмитрий Степенщиков смоделировал эволюцию плоскогранных форм кристаллов на примере октаэдров алмаза и ром-

бододекаэдров граната. Валерий Дёмин критически рассмотрел способы получения и обработки данных об атмосферных осадках в Арктике. Дмитрий Денисов дал обзор способов описания биологического разнообразия. Константин Орлов представил численную модель циркуляции атмосферы Венеры с учётом рельефа поверхности. Захар Слуковский связал анализ песчаных отложений малой городской реки с её гидрологическим режимом и экологическими следствиями. ... Другие доклады были столь же содержательны и разнообразны.

Дискуссии после докладов велись весьма жарко. То ли в силу молодости, то ли в силу глубокой убеждённости в своей правоте авторы покидали трибуну при своём мнении, в духе галилеевского «и всё-таки она вертится!». Заметим, что в этом с ними не все были согласны... А Земля продолжает вертеться. ■

*Труды VIII Всероссийской научной школы
“Математические исследования в естественных науках”
Апатиты, 15-16 октября 2012 г.*

Отпечатано в ЗАО “К.С.М.”

*184209 г. Апатиты Мурманской обл.
ул. Ферсмана, д. 17 а
тел./факс: (81555) 77329*

Тираж 100 экз.

