

**Геологический институт КНЦ РАН  
Кольское отделение РМО**

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

**10-11 октября 2013 г. Апатиты**

*Геологический институт КНЦ РАН  
Кольское отделение РМО*

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

*Апатиты, 10-11 октября 2013 г.*



*Апатиты, 2013*

УДК 548.12 + 549.21 + 552.122

ISSN 2074-2487

**Математические исследования в естественных науках. Труды IX Всероссийской научной школы. Апатиты, Геологический институт Кольского НЦ РАН, Кольское отделение РМО, 10-11 октября 2013 г. / Ред. Ю.Л. Войтеховский. – Апатиты: Изд-во К & М, 2013. - 168 с.**

Сборник содержит материалы ежегодной Всероссийской научной школы «Математические исследования в естественных науках», посвящённой 130-летию со дня рождения акад. А.Е. Ферсмана, проводимой Геологическим институтом Кольского НЦ РАН и Кольским отделением РМО и объединяющей специалистов, творчески применяющих математические методы в естественных науках. IX школа охватила пленарные и молодёжные доклады, в которых приняли участие иногородние сотрудники институтов РАН и университетов в геологии и минералогии, кристаллографии, геофизике и биологии. Издание представляет интерес для геологов широкого профиля, а также аспирантов и студентов соответствующих специальностей.

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

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

Научный редактор: проф., д.г.-м.н. Ю.Л. Войтеховский  
Компьютерный дизайн: Л.Д. Чистякова, Н.А. Мансурова  
Фоторепортаж: А.В. Чернявский

© Учреждение Российской академии наук Геологический институт  
Кольского научного центра РАН, 2013

© Российское минералогическое общество, Кольское отделение, 2013

© Коллектив авторов, 2013

## Содержание

Предисловие редактора . . . . . 5-6

### ПЛЕНАРНЫЕ ДОКЛАДЫ

- Войтеховский Ю.Л.** Выпуклые полиэдры: статистика комбинаторных типов и точечных групп симметрии, хорошие имена, строгое упорядочение на прямой... . . . . . 8-17
- Войтеховский Ю.Л.** Пространство кристаллической горной породы: к 150-летию со дня рождения В.И. Вернадского . . . . . 17-23
- Жижин Г.В.** Соотношения для числа граней различной размерности в башне  $n$ -мерных выпуклых правильных политопов 24-32
- Жижин Г.В.** Образы выпуклых правильных и полуправильных  $n$ -мерных политопов . . . . . 32-42

### МАТЕМАТИЧЕСКИЕ ИССЛЕДОВАНИЯ В ГЕОЛОГИИ И МИНЕРАЛОГИИ

- Гульбин Ю.Л.** Построение модели нуклеации и роста метаморфического граната I. Постановка задачи и вычислительный алгоритм. . . . . 44-48
- Гульбин Ю.Л.** Построение модели нуклеации и роста метаморфического граната II. Результаты численных экспериментов, ограничения . . . . . 48-53
- Мартынов Е.В.** Реконструкция геодинамических обстановок формирования геобъектов по петрогеохимическим данным . . . . . 53-63
- Пушкин А.А., Белов Р.В., Римкевич В.С.** Допустимость применения метода наименьших квадратов для расчета энергии активации химических реакций . . . . . 63-68
- Пушкин А.А., Леонтьев М.А.** Программа для расчёта термодинамических величин на основе приложения Microsoft Access 2007 . . . . . 68-72
- Шуйский А.В., Петров Т.Г.** Параметрическое описание рисунка цветного камня . . . . . 73-75
- Ялышева А.И., Вдовин А.С.** Геостатистический анализ значений показателей зрелости песчаников ашинской серии верхнего Венда (Башкирский мегатиклиорий, Ю. Урал) . . . . . 75-79

### МАТЕМАТИЧЕСКИЕ ИССЛЕДОВАНИЯ В КРИСТАЛЛОГРАФИИ

- Степенщиков Д.Г., Войтеховский Ю.Л.**  
SW-трансформация фуллеренов . . . . . 81-84
- Талис А.Л.** Конструкции алгебраической геометрии, спиральные подструктуры политопов и структура  $\alpha$ -спирали . . . . . 84-93
- Талис А.Л.** Спираль с двумя углами вращения и другие некристаллографические симметрии (био)полимеров . . . . . 93-101

<b>Малеев А.В., Шутов А.В.</b> О числе трансляционных разбиений плоскости на полимино . . . . .	101-106
<b>Ярыгин О.Н., Безгинов А.А.</b> Построение 3D-визуализации полиэдра на основании проекции Шлегеля . . . . .	106-111

### **МАТЕМАТИЧЕСКИЕ ИССЛЕДОВАНИЯ В ГЕОФИЗИКЕ**

<b>Бурцев А.В.</b> Использование математического и логического аппарата для преобразования данных программы Astrogenic NexStorm Lite для регистрации атмосферных электрических разрядов . . . . .	113-118
<b>Дёмин В.И.</b> Оценка естественной изменчивости температуры воздуха на Кольском полуострове . . . . .	119-127
<b>Ильченко В.Л.</b> Генетическая геоморфология и моделирование рудообразующих систем . . . . .	127-131
<b>Ильченко В.Л.</b> Квантовомеханические эффекты в геодинاميке . . . . .	131-135
<b>Ипатова В.М.</b> Существование аттрактора дифференциального включения для модели циркуляции атмосферы. . . . .	135-139
<b>Пчёлкин В.В.</b> Эффект квантования характеристик квазидрейфового движения заряженных частиц в поле диполя как результат современного численного развития теории Штермера . . . . .	139-143

### **МАТЕМАТИЧЕСКИЕ ИССЛЕДОВАНИЯ В БИОЛОГИИ**

<b>Денисов Д.Б.</b> Методы количественного учёта водных организмов при экологических исследованиях на примере сообществ фитоперифитона . . . . .	145-151
<b>Петрашова Д.А., Михайлов Р.Е.</b> Использование счётных и метрических признаков <i>Cucumis sativis</i> в биоиндикации ионизирующего излучения . . . . .	151-159
<b>ФОТОРЕПОРТАЖ</b> . . . . .	160-167



## **ПРЕДИСЛОВИЕ РЕДАКТОРА**

10-11 октября 2013 г. в Геологическом институте КНЦ РАН состоялась IX Всероссийская научная школа «Математические исследования в естественных науках», поддержанная Комиссией президиума РАН по работе с молодёжью, Кольским отделением РМО, Комиссией по истории РМО и посвящённая 130-летию со дня рождения акад. А.Е. Ферсмана. Последнее может показаться странным, ведь акад. А.Е. Ферсман не был математиком. Но он был минералогом, а применение математических методов к описанию кристаллов минералов – сквозная тема наших школ. Кроме того, он окружал себя молодёжью, доверял ей, вдохновлял её, и это давало свои плоды. Наконец, ему был свойственен междисциплинарный подход к изучению природы, что как нельзя лучше соответствует духу нашей школы.

В этом году пленарными докладчиками были д.ф.-м.н. Г.В. Жижин (Институт химии силикатов РАН, С.-Петербург) и д.г.-м.н. Ю.Л. Войтеховский (Геологический институт КНЦ РАН, Апатиты). Далее работа шла по секциям «Геология и минералогия», «Кристаллография», «Геофизика» и «Биология». Было заслушано более 20 докладов, опубликованных в Трудах школы. Она завершилась активной дискуссией. Кроме молодых учёных из

Кольского НЦ РАН (Геологический институт, Полярный геофизический институт, Институт проблем промышленной экологии Севера, Центр физико-технических проблем энергетики Севера, Научный отдел медико-биологических проблем адаптации человека в Арктике), в школе приняли участие иногородние сотрудники институтов РАН и университетов: С.-Петербургский госуниверситет, Горный университет (С.-Петербург), Московский физико-технический институт (Долгопрудный), Институт элементоорганических соединений РАН (Москва), Владимирский госуниверситет (Владимир), Тольяттинский госуниверситет (Тольятти), Институт геологии и геохимии УрО РАН (Екатеринбург), Институт геологии и природопользования ДВО РАН (Благовещенск). Тем самым подтверждён Всероссийский статус школы.

#### **Решение школы:**

1. Считать IX Всероссийскую научную школу «Математические исследования в естественных науках» проведённой на высоком научном и организационном уровне.
2. Выразить благодарность Комиссии по работе с молодёжью президиума РАН за финансовую поддержку школы.
3. Издать Труды школы в виде сборника полнотекстовых статей.
4. Опубликовать информацию о школе на сайтах Геологического института КНЦ РАН и Российского минералогического общества.
5. Провести X Всероссийскую научную школу «Математические исследования в естественных науках» в Геологическом институте КНЦ РАН в октябре 2014 г.

Во исполнение п. 3 решения издан настоящий сборник статей. Надеюсь, он будет интересен широкому кругу естествоиспытателей и привлечёт к участию в будущих школах научную молодёжь, тяготеющую к математическому описанию природы.

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

Ю.Л. Войтеховский

# Пленарные доклады





## ВЫПУКЛЫЕ ПОЛИЭДРЫ: СТАТИСТИКА КОМБИНАТОРНЫХ ТИПОВ И ТОЧЕЧНЫХ ГРУПП СИММЕТРИИ, ХОРОШИЕ ИМЕНА, СТРОГОЕ УПОРЯДОЧЕНИЕ НА ПРЯМОЙ...

**Войтеховский Ю.Л.**

Геологический институт КНЦ РАН, г. Апатиты, [woyt@geoksc.apatity.ru](mailto:woyt@geoksc.apatity.ru)

*Статья представляет собой популярное введение в дискуссионную проблему о симметрии и асимметрии в объектах природы. Остроту проблеме придаёт то, что пока не удаётся определить асимметрию конструктивно, без отрицающей приставки «а». Между тем, на примере выпуклых полиэдров показано, что с ростом числа граней «почти все они» – комбинаторно асимметричны. Предлагается оригинальный способ именованья выпуклых полиэдров (с точностью до комбинаторного типа), приводящий к их строгому упорядочению на числовой прямой (новый критерий сложности), переименованию асимметричных полиэдров в факториальные (и наоборот). Последнее позволяет переопределить в новых терминах категории порядка группы автоморфизмов, точечной группы симметрии и др. Статья предназначена для научной молодёжи различных специальностей, принимающей участие в работе IX Всероссийской научной школы «Математические исследования в естественных науках».*

**Введение: интуиция или точное знание?** Что позволяет нам ориентироваться в мире – интуиция или точное знание? Конечно, то и другое. Но что движет нами в большей степени? Акценты всяк может расставить по-своему. Казалось бы, представитель науки должен отдать приоритет точному знанию. Но не всё так просто. Если вдуматься, интуиция рождается вместе с нами и преподносит мир понятным, не раскладывая на детали и причинно-следственные цепочки. Научное знание делает его таковым лишь после трудного процесса понимания. Есть проблема, в которой каждый может проверить свою интуицию – о симметрии и асимметрии в мире. В год 150-летия со дня рождения акад. В.И. Вернадского эта тема особенно актуальна, ведь именно по характеристическим типам симметрии он предложил различать состояния пространств земной реальности [1, 2].

Меня с годами всё больше занимает асимметрия природных объектов. Она всё чаще бросается в глаза. Симметрия кажется грубой аппроксимацией действительности. Отклонения от симметрии уже не кажутся досадными флуктуациями... Впрочем, я не одинок. Вот что пишет член Союза писателей РФ Г.И. Спичак в своём новом романе: «Наши предки, наверно, не случайно боялись симметрии, зеркальных отражений, и Зло рисовалось ими в строгой «правильности». Ни дома, ни храмы не строились симметрично. Святая София в Великом Новгороде, как и сотни храмов домонгольского периода, не имели похожих стен и даже стен одинакового размера. Но сегодня нет тех храмов – несимметричных, как природа, дисгармоничных, как грешная человеческая душа. Домонгольских осталось одиннадцать... Вряд ли больше. Зато потом пошла строгая геометрия масонских архитекторов, по-

стигающих Природу гармонии математикой. Чего не смогли сделать внутри себя, постарались сделать снаружи...» [3, с. 269-270]. Взяв ключевое слово в кавычки, автор откровенно усомнился в «правильности» симметрии, если под таковой понимать фундаментальные законы организации природы. Предоставляю историкам искусства, этнографам, археологам и архитекторам дискутировать по поводу приведенного тезиса. Для дальнейшего достаточно того, что Г.И. Спичак акцентировал внимание на фундаментальном характере асимметрии.

А вот пример из совсем другой культуры, слывущей самой продвинутой в созерцательном анализе природных форм и художественном формотворчестве. Tumi-ishi, гора камней – национальная японская игра для всех возрастов. Не странно ли видеть, как взрослые сосредоточенно пытаются выстроить из асимметричных полиэдрических «камней» как можно более высокую башню (рис. 1)? Понятно, что она раз за разом падает. При этом игроку надлежит сохранять спокойствие. В том и состоит развивающий подтекст игры – воспитывать в ребёнке и поддерживать во взрослом японце невозмутимый дух самурая, побеждающий превратности судьбы. Я не помню похожей игры в своём славянско-прибалтийском детстве. Здесь ощущается невидимый психологический рубеж. Кто-то играет устойчивыми пирамидками и кубиками – и вырастает подготовленным к детерминированной природе и стабильной экономике. Другой упорно строит падающие башни – и вырастает готовым к стохастической природе и экономическим кризисам. Если угодно – два различных мировоззрения. Возможно, я утрирую, но сказанное кажется мне важным даже в дискуссионной форме, как тест на интуицию. Что вам больше нравится, симметрия или асимметрия, покой или движение? Впрочем, далее речь пойдёт не о детской педагогике или психологии творчества, а о симметрии и асимметрии в объектах природы. Тема сложна, даже неподъёмна для одной научно-популярной статьи. Но давайте хотя бы прикоснёмся к ней.



Рис. 1. Tumi-ishi. Правила игры очевидны [<http://www.omami.ru/shtuki/tumi-ishi/>].

**Исходные понятия и неожиданные результаты.** В рассуждениях о симметрии и асимметрии для наглядности используем выпуклые полиэдры, подсказанные игрой Tumi-ishi. Потому что они наглядным образом организованы из граней, пересекающихся по рёбрам, встречающимся в вершинах. Потому что они пробуждают представления о кристаллах минералов и тем самым перебрасывают смысловой мост от математических абстракций к объектам природы. Потому что выпуклый полиэдр, рассмотренный как 3-связный планарный граф, допускает много других интерпретаций и приложений. Говоря о симметрии, будем подразумевать комбинаторную (топологическую) симметрию самого симметричного полиэдра данного комбинаторного типа. Под последним будем понимать принцип устройства полиэдра из данного набора граней. Ясно, что в каждом комбинаторном типе содержится бесконечное число полиэдров. Удобно заменить их самым симметричным представителем с точностью до подобия, а набор его граней выразить символом  $\langle n_3, n_4 \dots n_k \rangle$  – кортежем чисел  $k$ -угольных граней.

Несмотря на кажущуюся ясность категории симметрии, её не просто определить по сути. Обычно под симметрией конечной формы понимают её составленность из равных частей. Некоторым движением, физически реализуемым (повороты) или не реализуемым (отражения), одна часть формы переводится (или вовсе не переводится) в другую. Группа (понимаемая в точном алгебраическом смысле) движений, переводящих форму в себя, и характеризует её симметрию. Что касается асимметрии, то сегодня не существует иного способа определить её иначе, как через отрицание симметрии. Интуиция подсказывает, что она фундаментальным образом связана с движением, неустойчивостью и должна быть приспособлена к описанию именно этих функций природных систем.

Первый и удручающий результат на сегодня состоит в том, что по символу  $\langle \dots \rangle$  в общем случае даже нельзя сказать, существует ли соответствующий полиэдр. Есть теоремы, утверждающие обратное – каких полиэдров быть не может. Так, теорема Эйлера говорит, что нет выпуклого полиэдра, на котором одновременно отсутствовали бы 3-, 4- и 5-угольные грани. Другая теорема говорит, что на каждом выпуклом полиэдре обязаны присутствовать четвёрка, или тройка и пара, или три пары одноимённых граней. Других выпуклых полиэдров нет. Второй результат состоит в том, что точечные группы симметрии (оставляющие при каждом движении хотя бы одну неподвижную точку фигуры), используемые в минералогии и кристаллографии для описания форм кристаллов, и гранные символы в общем случае не связаны. Это скорее хорошо, чем плохо, поскольку две характеристики можно использовать как дополнительные при описании полиэдра.

Богатая история систематического изучения комбинаторного многообразия выпуклых полиэдров, охватившая вторую половину XIX и весь XX век, описана в монографиях [4, 5]. Результат может показаться скромным, ведь

на сегодня перечислены, охарактеризованы точечными группами симметрии, гранными символами и нарисованы (!) «всего лишь» все 4- ... 12-эдры и простые (в каждой вершине сходятся ровно три грани) 13- ... 16-эдры. Но обратите внимание на числа выпуклых  $n$ -эдров с ростом  $n$  от 4 до 12: 1, 2, 7, 34, 257, 2606, 32300, 440564, 6384634; и простых выпуклых  $n$ -эдров с ростом  $n$  от 13 до 16: 49566, 339722, 2406841, 17490241 – они растут быстрее, чем экспонента. А ведь это лишь начало многообразия. Разбиения классов  $n$ -эдров по числу вершин дано в табл. 1.

Таблица 1. Числа комбинаторных типов  $n$ -эдров с  $v$  вершинами.

$\downarrow n, v \rightarrow$	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16		
4	1														
5		1	1												
6			1	2	2	2									
7				2	8	11	8	5							
8				2	11	42	74	76	38	14					
9					8	74	296	633	768	558	219	50			
10					5	76	633	2635	6134	8822	7916	4442	1404	233	
11						38	768	6134	25626	64439	104213	112082	79773	36528	
12							14	558	8822	64439	268394	709302	1263032	1556952	1338853

Таблица 1 (продолжение).

$\downarrow n, v \rightarrow$	16	17	18	19	20	22	24	26	28
10	233								
11	36528	9714	1249						
12	1338853	789749	306470	70454	7595				
13						49566			
14							339722		
15								2406841	
16									17490241

Что можно сказать о симметрии этого огромного числа выпуклых полиэдров? Все 4-, 5- и 6-эдры комбинаторно симметричны. Среди 7-эдров комбинаторно асимметричных 7 (20.588 %), 8-эдров – 140 (54.475), 9-эдров – 2111 (81.005), 10-эдров – 30014 (92.923), 11-эдров – 430494 (97.714), 12-эдров – 6336013 (99.238), среди простых 13-эдров – 47030 (94.884), 14-эдров – 331796 (97.667), 15-эдров – 2382352 (98.983), 16-эдров – 17411448 (99.550). В многообразии установлены полиэдры 24 кристаллографических (1, 2,  $m$ ,  $-1$ , 3, 222,  $mm2$ , 4,  $2/m$ ,  $-4$ , 32,  $-6$ ,  $3m$ ,  $4mm$ ,  $mmm$ ,  $-42m$ ,  $-6m2$ ,  $-3m$ ,  $6mm$ , 23,  $4/mmm$ ,  $6/mmm$ ,  $-43m$ ,  $m3m$ ) и 20 некристаллографических ( $5m$ ,  $7m$ ,  $-82m$ ,  $8mm$ ,  $9m$ ,  $-10m2$ ,  $-5m$ ,  $10mm$ ,  $11m$ ,  $-12m2$ ,  $-7m$ ,  $-14m2$ ,  $8/mmm$ ,  $-18m2$ ,  $10/mmm$ ,  $-22m2$ ,  $12/mmm$ ,  $-26m2$ ,  $14/mmm$ ,  $-3-5m$ ), большей частью встречен-

ных в биологических объектах, видов симметрии. Не найдены простейшие выпуклые полиэдры кристаллографических классов  $\bar{3}$ ,  $4/m$ ,  $422$ ,  $6$ ,  $6/m$ ,  $622$ ,  $m\bar{3}$ ,  $432$ , что представляет интересную задачу.

Главный и неожиданный вывод состоит в том, что с ростом  $n$  доля комбинаторно асимметричных  $n$ -эдров асимптотически стремится к 100%! Но она возникает на определённом уровне сложности, а именно с 7-эдров (7 из 34, рис. 2) и далее стремительно нарастает. Среди малой толики симметричных форм преобладают (по убыванию) точечные группы симметрии  $m$ ,  $2$  и  $mm2$ . На их фоне прочие группы симметрии встречаются крайне редко.



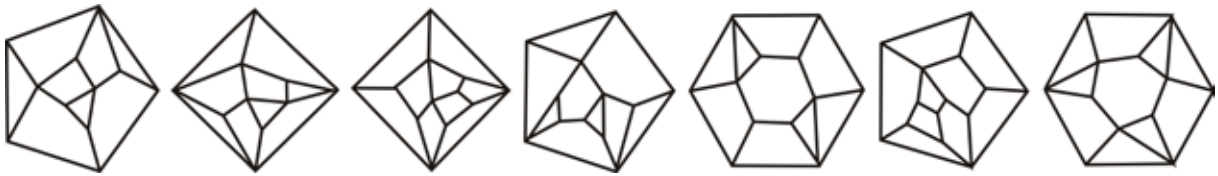
*Рис. 2. Простейшие комбинаторно асимметричные полиэдры в проекции Шлегеля на одну из граней. Опрошенные мной минералоги не смогли нарисовать ни одного комбинаторно асимметричного полиэдра. Не потому ли, что в детстве они играли симметричными кубиками и пирамидками?*

Энантиоморфизм (т.е. способность иметь зеркально-симметричного двойника, как правая и левая рука) допускают не только комбинаторно асимметричные формы. Важно, чтобы в их точечной группе симметрии содержались лишь повороты. Такая форма с группой симметрии  $2$  (ось симметрии 2-го порядка, при полном повороте вокруг неё форма совмещается с собой 2 раза) впервые появляется среди 6-эдров, среди 7-эдров их уже 4 (рис. 3), среди 8-эдров – 22, далее их число быстро растёт.



*Рис. 3. Простейшие полиэдры с точечной группой симметрии 2. Ось симметрии хорошо видна на проекциях 2-5, поскольку перпендикулярна плоскости рисунка. На проекции 1 она занимает косое положение, проходя через середины рёбер, соединяющих пару 4- и пару 3-угольных граней.*

С ростом  $n$  постепенно проявляются новые энантиоморфные группы: 3 среди 9-эдров,  $222$  среди 10-эдров,  $32$  среди 11-эдров (рис. 4) и т.д. По-видимому, выявленные симметричные свойства комбинаторного многообразия выпуклых полиэдров – в особенности тотальная асимметрия – в целом характеризуют 3D евклидово пространство. Но тогда они должны отражаться в морфогенезе природных минеральных и биологических форм.



*Рис. 4. Простейшие полиэдры с точечными группами симметрии 3, 222 и 32. Чтобы отыскать косые (не перпендикулярные плоскости рисунка) оси симметрии, здесь придётся потрудиться.*

**Назревает революция?** Выше установлено, что с ростом числа граней доля комбинаторно асимметричных выпуклых полиэдров в их многообразии стремится к 100 %. Результат обескураживает, ведь категория асимметрии как таковая определена через отрицание симметрии. Самые симметричные полиэдры – тела Платона, Архимеда, Каталани – выделены в геометрии и философии как те, которыми стоит заниматься и восхищаться. Ими восхищаются и сегодня, приравнивая к архитектуре вселенной в диапазоне от атомного ядра до галактик. Симметричные формы кристаллов распределены по 31 классу. В 32-ой – «примитивный» – собраны асимметричные кристаллические полиэдры. Но ведь их асимптотически 100 %! О них – геометрических и кристаллографических изгоях – мы ничего не можем сказать, кроме того лишь, что они асимметричны. Налицо исторически сложившееся и терминологически закреплённое торжество меньшинства над довлеющим большинством. Похожие ситуации бывали в социальной истории... Так что же, назревает революция? Сама собой напрашивается идея о поиске спасительного принципа, который позволил бы переопределить асимметрию выпуклого полиэдра позитивно и конструктивно, без отрицающей приставки «а». Как ни странно может показаться, для этого надо поговорить об именах.

**Что содержится в имени полиэдра?** Согласитесь, тема интересная и богатая. Каждый из нас интересовался своим именем и радовался, если оно происходит от греческого корня. А что же в мире выпуклых полиэдров?

Рассмотрим полиэдры, приятные глазу минералога – кристаллические закрытые простые формы. Вот куб, знакомый с детства. И нечего стесняться. У меня были замечательные кубики с буквами на гранях. Достались от старшего брата и перешли к младшей сестрёнке. Постепенно терялись и, наконец, куда-то пропали. Но своё дело сделали. Не только в смысле изучения азбуки, но и в смысле узнавания куба. Согласитесь, вы ведь тоже его ни с чем не спутаете: 6 квадратных граней сходятся по 3 в каждой из 8 вершин. Но вся эта конструкция возникает в сознании как рефлекс, а вовсе не из содержания слова «куб». Отдавая должное традиции, мы и впредь будем употреблять это краткое слово. Но давайте признаем, что это ярлык и не более того. Иногда куб называют гексаэдром. Это имя указывает на 6 граней. Но всего существуют 7 комбинаторно различных 6-гранников, 2 из них – с 8 вершинами [4, с. 15]. Ещё менее информативны имена «октаэдр» и «доде-

каэдр», ведь 8-гранников 257, а 12-гранников 6384634 [4, с. 16-19, 390-832]. Среди «эдров» однозначно лишь одно имя – «тетраэдр». И то потому только, что есть единственный 4-эдр, все грани 3-угольные и сходятся по 3 в каждой из 4 вершин. Предельная простота подчёркивается его другим именем – симплекс.

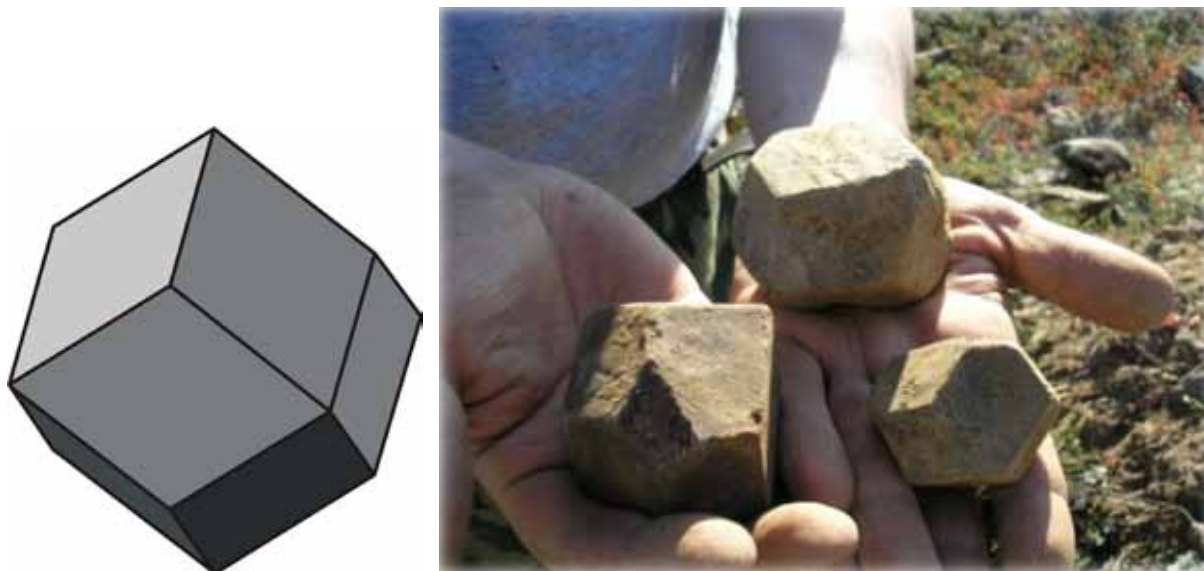


Рис. 5. Ромбододекаэдр идеальный (слева) и реальный в форме гранатов Зап. Кейв, Кольский п-ов (справа).

А вот ромбододекаэдр. Он замечательно проявлен на кристаллах алмадина из месторождений гг. Макзапахк и Берёзовая в Зап. Кейвах на Кольском п-ове (рис. 5). Нравится вам это имя? Оно говорит о том, что у полиэдра 12 граней, все – ромбы. Эта элегантная форма легко запоминается студентами. А если отвлечься от метрических соотношений, то можно ли её с чем-то спутать? Есть ли другие 12-эдры, у которых все грани 4-угольные? Оказывается, их 11 с разными симметриями [4, с. 520-521]:  $2$  №№ 1-3,  $m$  №№ 4-5,  $222$  № 6,  $mm2$  № 7,  $-3m$  № 8,  $-6m2$  № 9,  $-12 2m$  № 10,  $m3m$  № 11 (рис. 6). По

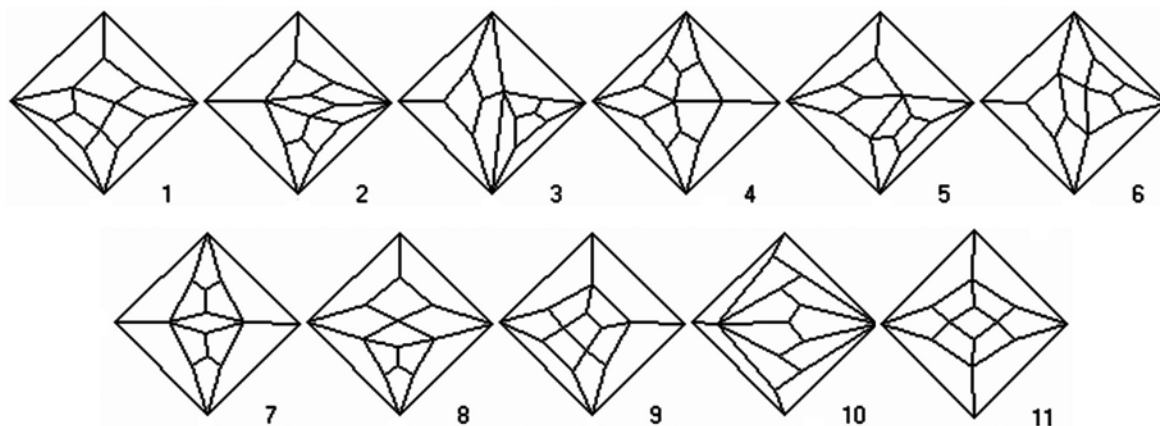


Рис. 6. Все выпуклые 12-эдры с 4-угольными гранями.

точечной группе симметрии  $m\bar{3}m$  легко догадаться, что «наш» прячется под № 11. А вот пентагондододекаэдр, то есть 12-эдр со всеми 5-угольными гранями, уникален [4, с. 778, 782]. И всё равно это плохое имя, поскольку не из него следуют единственность и устройство полиэдра.

Целый ряд кристаллических полиэдров носит «конструктивистские» имена, например, пентагонтриоктаэдр, гексоктаэдр и тетрагексаэдр (рис. 7). У первого все грани – пентагоны, по 3 восстановленные над гранями октаэдрического каркаса. У второго все грани – треугольники, по 6 восстановленные над тем же каркасом. У третьего все грани – тоже треугольники, по 4 восстановленные над каркасом гексаэдра. Из второго и третьего имён выпало указание на треугольный характер граней. Их полные имена – тригонгексоктаэдр и тригонтетрагексаэдр. Предлагаю читателям самостоятельно убедиться в том, что и все не рассмотренные здесь кристаллические полиэдры служат ярлыками (ничего не говоря о строении полиэдра), указывают на элементы строения (чаще всего не однозначно) или способ устройства (где это наглядно). Это плохие имена, хотя и звучные, происходящие от греческих корней.



Рис. 7. Слева направо: пентагонтриоктаэдр, гексоктаэдр и тетрагексаэдр.

**Хорошие имена.** Есть ли более рациональные способы именования выпуклых полиэдров? Есть, мы рассмотрим лишь один из них. Для простоты представьте себе тетраэдр. Понумеруйте его вершины в любом порядке цифрами от 1 до 4. Заполните матрицу  $4 \times 4$  единицами и нулями по правилу: если  $i$ -я и  $j$ -я вершины соединены ребром, то в положении  $(i, j)$  ставьте 1, иначе – 0. Ясно, что матрица симметрична относительно главной диагонали, на которой стоят нули. Она полностью задана верхним треугольником. Что получили для тетраэдра? Одни единицы! Выпишите их построчно – это и есть имя тетраэдра в двоичной системе счисления: 111111. Оно кажется вам длинным? Запишите рядом свои фамилию, имя и отчество и сравните... А в привычной нам десятичной системе счисления имена ещё короче. Имя тетраэдра – 63.

Из-за высокой симметрии тетраэдра и малого числа граней все способы нумерации его вершин дают одно и то же имя. Все остальные полиэдры допускают нумерации, приводящие к различным именам. Так, есть всего два



комбинаторных типа выпуклых 5-эдров: 4-гранная пирамида и 3-гранная призма. У первой – 15 (507, 509, 510, 751, 759, 766, 863, 887, 893, 927, 943, 955, 990, 1005, 1011), у второй – 60 имён. Убедитесь в этом кропотливыми расчётами, чтобы оценить стоимость информации, заключённой в предыдущем предложении. Но какие имена выбрать? Естественно – самые простые, и тогда имя 4-гранной пирамиды – 507. Чтобы узнать имя 3-гранной призмы, не обязательно перебирать все нумерации вершин. Используя её симметрию и свою смекалку, найдите такую нумерацию, чтобы в каждой строке матрицы единицы были смещены вправо... Задача сродни несложному кроссворду, а имя 3-гранной призмы – 7916. Предлагаю найти имена всех выпуклых 6-эдров (рис. 8).

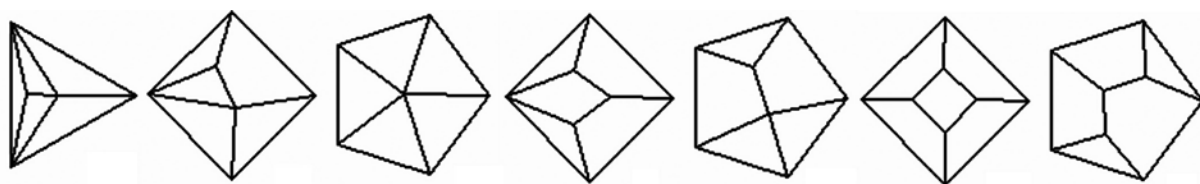


Рис. 8. Все выпуклые 6-эдры.

**Строгий порядок.** Итак, выше предложен принцип номенклатуры выпуклых полиэдров на основании имён-чисел. Но ради чего мы именуем что бы то ни было? Только ли для того, чтобы, называя, указать на предмет? Могут ли нести имена другие функции? Давайте поговорим об этом.

Чем интересна предложенная номенклатура? Все выпуклые полиэдры именуется единообразно. Каждый получает имя, по которому однозначно восстанавливается переводом в двоичный код, заполнением матрицы и построением рёберного графа. Рутинные процедуры можно поручить компьютеру. По именам всё многообразие выпуклых полиэдров строго упорядочивается на числовой прямой в точном алгебраическом смысле [6, с. 119]. С ростом  $n$  имена всех  $n$ -вершинников вкладываются в неперекрывающиеся интервалы, располагающиеся всё правее. Отныне в мире выпуклых полиэдров – строгий порядок. Но самое главное я приберёг напоследок.

Сколько имён у комбинаторно асимметричного  $n$ -вершинника? Очевидно, все нумерации его вершин приводят к различным именам. Поэтому их  $n!$  – «эн факториал». На этом основании назовём их факториальными полиэдрами. В тот же миг симметричные полиэдры стали афакториальными. Приставка «а» – достойная компенсация за тысячелетия непризнания асимметричных форм. Наконец, большинство торжествует! А если серьёзно, то введение «имени» полиэдра позволяет пересмотреть прежние понятия. Так, порядок группы автоморфизмов полиэдра (характеристика, несколько более общая, чем точечная группа симметрии) есть  $n!$ , делённое на число его имён. Убедитесь в этом для тетраэдра, 4-гранной пирамиды и 3-гранной призмы.

Для этого в статье есть всё необходимое. Просматриваются контуры и других теорем, но это уже специальная тема.

«Благодаря связи мира мыслей с вселенской гармонией, свод мыслей превращается сам собою в верное отображение и формулу вселенной. Но трудно искусство бесстрастного созерцания и творческого воззрения: исполнение требует непрерывного мышления, строгой трезвости, и наградою будет не одобрение современников, но одна только радость ведения и трезвления, сердечное соприкосновение со вселенной» [7, с. 45]. Иначе говоря, что внутри – то и снаружи, человек – мерило всех вещей. Интуиция, подкреплённая точным знанием из разных разделов науки, подсказывает мне, что «формулой» вселенной является асимметрия, которую надо определить позитивно, без отрицающего «а», что сделано выше на относительно простом примере выпуклых полиэдров. Овладеть асимметрией – вот достойная междисциплинарная проблема!

### Список литературы

1. Вернадский В.И. Химическое строение биосферы Земли и её окружения. М.: Наука, 1965. 364 с.
2. Вернадский В.И. Философские мысли натуралиста. М.: Наука, 1988. 520 с.
3. Спичак Г.И. Цитала. Украденный посох. Сыктывкар, 2009. 320 с.
4. 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.
5. 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.
6. Шрейдер Ю.А. Равенство, сходство, порядок. М.: Наука, 1971. 256 с.
7. Новалис. Ученики в Саисе: магические романы и философические фрагменты. СПб.: Издательский дом «Леонардо», 2011. 352 с.

## ПРОСТРАНСТВО КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ ГОРНОЙ ПОРОДЫ: К 150-ЛЕТИЮ СО ДНЯ РОЖДЕНИЯ В.И. ВЕРНАДСКОГО

Войтеховский Ю.Л.

Геологический институт КНЦ РАН, г. Апатиты, [woyt@geoksc.apatity.ru](mailto:woyt@geoksc.apatity.ru)

*Показаны возможные пути развития категории пространства, предложенной акад. В.И. Вернадским, применительно к кристаллической горной породе. Она представлена как топологическое, толерантное, измеримое, метрическое и коррелированное пространство. Для одной горной породы могут быть определены различные топологии, меры и метрики. Тем самым она получает различные, взаимно дополняющие представления. Статья предназначена для научной молодежи различных специальностей, принимающей участие в работе IX Всероссийской научной школы «Математические исследования в естественных науках».*



**Введение.** В 2013 г. исполнилось 150 лет со дня рождения В.И. Вернадского. Обычно с его именем связывают создание основ геохимии (с У. Кларком, В.М. Гольдшмидтом и А.Е. Ферсманом), в том числе биогеохимии и геохимии радиоактивных элементов. 75 лет назад постановлением XVII Международного геологического конгресса в Москве он был избран сопредседателем тогда же созданной постоянной Комиссии по изучению возраста Земли. С его именем (с Т. де Шарденом и Е. Ле-Руа) связывают и создание учения о ноосфере – сфере человеческого разума, эволюционном продукте биосферы. Но есть и другие плодотворные идеи В.И. Вернадского, ко-

торые на наших глазах превращаются в «болевы́е точки» естествознания. Одна из них – о пространствах земной реальности в границах естественных геологических тел.

**Пространства земной реальности и принцип П. Кюри.** Категория пространства земной реальности вводится В.И. Вернадским, например, следующим рассуждением. «Натуралист, исходя из школьной рутины, всё время мыслил о едином пространстве, но не о разных природных пространствах, не о состояниях пространства. Он не сознавал, что пространство нашей планеты и вообще пространство планет есть особые пространства, нигде, кроме планет, не наблюдаемые. В течение тысячелетий, говоря о природных или естественных телах, он не сознавал и не утверждал (что сейчас приходится делать), что каждое природное тело и каждое природное явление имеет своё собственное материально-энергетическое пространство, которое натуралист изучает, изучая симметрию. Утверждая это, я ввожу в геологию новое определение – пространство земной реальности, то, которое всегда изучает неизбежно натуралист» [1, с. 166, 2].

Уже в этой фразе видно, что для описания состояний пространств земной реальности В.И. Вернадский нашёл в качестве инструмента адекватное по широте охвата эмпирическое обобщение – принцип диссимметрии П. Кюри. «Продолжающиеся до сих пор попытки свести все природные проявления пространства или пространства-времени в их эмпирическом выявлении к одному Эвклидову пространству не привели к точным результатам и не дают ясной картины окружающего. Мне представляется безнадёжным и неоправданным научной логикой продолжать эти попытки. Мысль Кюри о диссимметрии как состояниях пространства открывает, мне кажется, нам новые возможности, новые пути понимания окружающих нас земных явлений» [1, с. 169].

В чём состоит принцип диссимметрии П. Кюри? «Характеристическая симметрия некоторого явления есть максимальная симметрия, совместимая с существованием явления. Явление может существовать в среде, обладающей своей характеристической симметрией или симметрией одной из подгрупп ее характеристической симметрии. Иными словами, некоторые элементы симметрии могут существовать с некоторыми явлениями, но это не обязательно. Необходимо, чтобы некоторые элементы симметрии отсутствовали. Это и есть та диссимметрия, которая создает явление... Когда некоторые причины производят некоторые действия, элементы симметрии причин должны обнаруживаться в этих произведенных действиях. Когда некоторые действия проявляют некоторую диссимметрию, то эта диссимметрия должна обнаруживаться и в причинах, их порождающих» [7, с. 101-102; 12, 13].

Разрабатывая принцип диссимметрии в форме, пригодной для эмпирических приложений, П. Кюри ввёл представление о предельных (с хотя бы одной осью  $\infty$  бесконечного порядка) группах симметрии. Считается, что найденные им 7 (с учётом энантиоморфных – 10) таких групп характеризуют все пространства земной реальности, в том числе кристаллообразующие среды (в скобках даны геометрические интерпретации):  $\infty$  (вращающийся конус),  $\infty/m$  (вращающийся цилиндр),  $\infty m$  (покоящийся конус),  $\infty 2$  (скрученный цилиндр),  $\infty/m m$  (покоящийся цилиндр),  $\infty/\infty$  (вращающаяся сфера) и  $\infty/\infty m$  (покоящаяся сфера). Представляется, что эта формулировка требует уточнения.



Известно, сколь много внимания В.И. Вернадский уделил изучению живого вещества. Но в чём состоит его специфика как пространства земной реальности? «Изучать живой организм только как пространственное тело, не учитывая в нём одновременного проявления времени, натуралист не имеет возможности, к сожалению, сознательно он это не подчёркивает. В случае всякого живого вещества <...> натуралист имеет дело в действительности всегда <...> не с пространством, а с пространством-временем. <...> Это есть единственный случай, когда натуралист в окружающей его природе реально сталкивается с пространством-временем, а не с пространством только» [1, с. 192]. Если принять, вслед за В.И. Вернадским, что первейшее свойство живого вещества – его мгновенная изменчивость, нетождественность с собой (не только и не столько по внешней конфигурации, сколько по внутреннему состоянию) через как угодно малое время, то какой предельной группой симметрии П. Кюри его можно описать? Таковая отсутствует.

Система групп симметрии П. Кюри полна как система предельных (с хотя бы одной осью  $\infty$ ) групп. Но она неполна как система групп симметрии, описывающих пространства земной реальности. Современное философское и естественнонаучное понимание живого вещества требует введения для его описания ещё одной группы симметрии, характеризующей его предельную диссимметрию (топологическую асимметрию), по сути противоположной предельной группе симметрии  $\infty/\infty$ m покоящейся сферы. Как сказано, она определена не асимметрией внешней формы живого организма (для её описания было бы достаточно примитивной кристаллографической группы 1), не правизной или левизной живого вещества, рассмотренного физико-химически наравне с неживым веществом, а неустранимым из рассмотрения его внутренним движением, которое и есть – жизнь.

**Горная порода как пространство земной реальности.** Возможный путь развития категории пространства покажем на примере кристаллических горных пород, слагающих верхнюю часть литосферы и занимающих самостоятельное место в иерархии пространств земной реальности, по В.И. Вернадскому. И.И. Шафрановский [9] описал горные породы предельными группами симметрии П. Кюри как текстурированные среды, т.е. в первом приближении. Наша идея состоит в том, чтобы в структурной теории пространства кристаллической горной породы использовать фундаментальные математические концепции. На этом пути предложенная В.И. Вернадским категория пространства крайне плодотворна, поскольку указывает направление поиска.

В этой связи напомним, что в геологии очень популярны «генетические» объяснения. Между тем, ещё Гегель писал: «Смысл и дух процесса составляет внутренняя связь, необходимое соотношение образований, к которому временная смена ничего не прибавляет. Требуется познать всеобщий закон этой последовательности, для чего нет надобности в форме исто-

рии... Внутренняя связь существует в настоящем как рядоположность... Весь интерес заключается в том, что дано – в наличной системе различённых образований» [5, § Геологическая природа].



В отличие от категории множества, категория пространства требует не только указания на элементы, но также анализа отношений между ними. Фундаментальных отношений между минеральными зёрнами в горной породе всего три: субстанциальная (не) тождественность, видовая (не) тождественность и пространственное (не) контактирование. Этого достаточно, чтобы высказать о кристаллической горной породе нетривиальные суждения.

«Множество  $\mathfrak{R}$  элементов любой природы называется топологическим пространством, если оно может быть представлено как объединение некоторого семейства  $\mathfrak{T}$  своих подмножеств, замкнутого относительно объединения любого числа и пересечения любых двух из них.  $\mathfrak{T}$  называется топологией  $\mathfrak{R}$ . Если в  $\mathfrak{R}$  можно выбрать семейство  $\mathfrak{N}$  подмножеств так, что каждое множество из  $\mathfrak{T}$  есть объединение некоторых множеств из  $\mathfrak{N}$ , то  $\mathfrak{N}$  называется базой топологии  $\mathfrak{R}$ » [4]. Одно множество допускает различные топологии. И тогда это будут различные топологические пространства. Известно, что на всяком множестве можно задать тривиальную ( $\mathfrak{T}$  состоит из самого  $\mathfrak{R}$ ) и дискретную ( $\mathfrak{T}$  содержит любое подмножество  $\mathfrak{R}$ ) топологии. Применительно к пространству горной породы, в первом случае в качестве топологии предъясвляется пространство как целое:  $\mathfrak{T} = \{\mathfrak{R}\}$ , во втором – топология включает все возможные сочетания минеральных зёрен:  $\mathfrak{T} = \{2^{\mathfrak{R}}\}$ . В первом случае базой топологии является сама горная порода, во втором – слагающие её минеральные зёрна. Дискретная топология пространства горной породы позволяет выполнять все логические процедуры: выделять отдельные зёрна и их агрегаты; мономинеральные, парагенетические и любые другие ассоциации. Но следует признать, что поиски «правильного» представления об устройстве пространства горной породы имеют под собой желание увидеть в нём промежуточную – между двумя указанными крайностями – топологию.

«Отношение  $\clubsuit$  называется: рефлексивным, если  $\forall$  (для любого)  $x$ :  $x \clubsuit x$ ; симметричным, если  $\forall x, y$ :  $x \clubsuit y \Rightarrow$  (следует)  $y \clubsuit x$ ; транзитивным, если  $\forall x, y, z$ :  $x \clubsuit y, y \clubsuit z \Rightarrow x \clubsuit z$ ; антирефлексивным, если  $\forall x, y$ :  $x \clubsuit y \Rightarrow x \neq y$ ; антисимметричным, если  $\forall x, y$ :  $x \clubsuit y, y \clubsuit x \Rightarrow x = y$ . Сочетаясь, эти элементарные отношения порождают отношения сложные: транзитивность + рефлексивность + симметричность = эквивалентность; транзитивность + антирефлексивность = строгий порядок; транзитивность + рефлексивность + антисимметричность = нестрогий порядок; транзитивность + рефлексивность = квазипорядок; рефлексивность + симметричность = толерантность» [8, 10]. Анализ приведенных выше отношений (и их логических отрицаний) показывает, что горная порода есть пространство толерантности с образующим отношением неконтактирования минеральных зёрен или – другой вариант – непустого перекрытия их произвольных ассоциатов. Как интерпретировать этот результат? Если изучение природы состоит в поиске структур, подразумевающих один из названных выше порядков, то ответ выглядит так. Пространство толерантности – не структура. Этому препятствуют наличие симметричности и отсутствие транзитивности у порождающего отношения. Но именно благодаря отказу от транзитивности толерантность есть логическое расширение эквивалентности, а пространства толерантности суть обобщения классификаций, лежащих в основаниях всех естественных наук как первый шаг, требующий шага второго. Если класси-

фикации разбивают целое на части, то пространства толерантности возвращают им целостность (именно поэтому их часто называют классификациями с размытыми границами). Концепция толерантности нетривиальным образом – через отношения неконтактирования минеральных зёрен или непустого перекрытия их произвольных ассоциатов – выражает идею целостности пространства горной породы.

«Мерой  $\mu$  в множестве  $\mathfrak{R}$  называется вещественная, неотрицательная, монотонная, аддитивная и ограниченная функция с областью определения в некоторой алгебре  $\mathfrak{S}$  подмножеств множества  $\mathfrak{R}$ . Множество с мерой называется измеримым пространством» [4]. Применительно к пространству горной породы мерами будут: число минеральных зёрен данного вида в конечном объёме пространства; их парциальные объёмы; площади их сечений, измеряемые под микроскопом и др. Таким образом, горная порода – измеримое пространство.

«Множество  $\mathfrak{R}$  элементов любой природы называется метрическим пространством, если для его любых двух элементов  $i$  и  $j$  определено вещественное число  $h_{ij}$ , называемое метрикой (расстоянием) и обладающее свойствами: (i)  $h_{ij} \geq 0$ , причём  $h_{ij} = 0$  тогда и только тогда, когда  $i = j$ ; (ii)  $h_{ij} = h_{ji}$  для любых  $i$  и  $j$ ; (iii) для любых  $i, j, k$  выполнено  $h_{ij} + h_{jk} \geq h_{ik}$ » [4]. Математика представляет большой список метрик [6], позволяющих вычислять расстояния между отдельными минеральными зёрнами и их любыми ассоциатами. Многие метрики выражаются через меры, тем самым связывая разделы теории.

Определение метрики позволяет построить следующий этаж теории для анализа пространственных корреляций любых выделенных элементов в горной породе. В терминах матероновской геостатистики автором построено представление о горной породе как пространственно распределённой случайной функции [11, 14]. Показано, что горные породы (по крайней мере магматического генезиса) не являются случайной мозаикой. Каждое минеральное зерно в них корректирует априорные вероятности минеральных зёрен в своём окружении [3]. В этом смысле кристаллическая горная порода – коррелированное (частично упорядоченное) пространство. Насколько сильны и каким физическим механизмом реализуются пространственные корреляции – это составляет предмет специального исследования конкретной горной породы.

**Заключение.** Историкам и философам естественных наук ещё предстоит понять, почему до сих пор не построена теория строения кристаллической горной породы из видимых элементов – минеральных зёрен, при том, что теория строения кристалла из невидимых атомов химических элементов построена уже 100 лет назад. Мы не знаем, какую математическую идею заложила природа в строение кристаллической горной породы, в том смысле, что в строение кристаллов она заложила идею 230 пространствен-

ных групп Фёдорова-Шёнфлиса. Автором разработано представление о кристаллической горной породе как топологическом, толерантном, измеримом, метрическом и коррелированном (частично упорядоченном) пространстве. Для одной горной породы могут быть определены различные топологии, меры и метрики. Тем самым одно пространство получает различные, взаимно дополняющие представления. Такая относительность представлений не противоречит тому, что одно из них может оказаться фундаментальным, характеризующим пространство горной породы наиболее рационально. Например, кристаллическое пространство «строится» на волновых и корпускулярных представлениях. Но лишь во втором случае выводимы фёдоровские группы, признанные фундаментальным представлением этого пространства. Подчеркнём, что в предложенных подходах ключевую роль играет категория пространства, систематически введенная в естественные науки В.И. Вернадским.

### Список литературы

1. Вернадский В.И. Химическое строение биосферы Земли и её окружения. М.: Наука, 1965. 375 с.
2. Вернадский В.И. Философские мысли натуралиста. М.: Наука, 1988. 520 с.
3. Войтеховский Ю.Л. 12 этюдов на темы кристалломорфологии, минералогии и петрографии. Апатиты: К & М, 2011. 204 с.
4. Вулих Б.З. Краткий курс теории функций вещественной переменной. М.: Наука, 1965. 304 с.
5. Гегель. Философия природы // Сочинения. Т. 2. М.-Л.: Соцэкгиз, 1934. 683 с.
6. Деза Е., Деза М.М. Энциклопедический словарь расстояний. М.: Наука, 2008. 446 с.
7. Кюри П. О симметрии в физических явлениях: симметрия электрического и магнитного полей // Избр. труды. М.-Л.: Наука, 1966. С. 95-113.
8. Усманов Ф.А. Основы математического анализа геологических структур. Ташкент: ФАН, 1977. 205 с.
9. Шафрановский И.И. Группы симметрии в структурной петрологии // Зап. ВМО. 1956. № 4. С. 491-497.
10. Шрейдер Ю.А. Равенство, сходство, порядок. М.: Наука, 1971. 256 с.
11. Armstrong M. Basic linear geostatistics. Springer: Heidelberg, 1998. 149 p.
12. Curie P. Sur la symetrie dans les phenomenes physiques, symetrie d'un champ electrique et d'un champ magnetique // J. de Phys. 1894. N 3. P. 393-416.
13. Curie P. Sur la symetrie dans les phenomenes physiques, symetrie d'un champ electrique et d'un champ magnetique // Oeuvres de P. Curie. Paris. 1908. P. 118-141.
14. Rivoirard J. Introduction to disjunctive kriging and non-linear geostatistics. Oxford: Clarendon Press, 1994. 181 p.



# СООТНОШЕНИЯ ДЛЯ ЧИСЛА ГРАНЕЙ РАЗЛИЧНОЙ РАЗМЕРНОСТИ В БАШНЕ $n$ -МЕРНЫХ ВЫПУКЛЫХ ПРАВИЛЬНЫХ ПОЛИТОПОВ

**Жижин Г.В.**

Институт химии силикатов РАН, г. Санкт-Петербург, genzhizhin@gmail.com

*В [2, 4] получены формулы для расчёта максимального числа граней размерности  $n-1$  политопов размерности  $n$ . В [3], используя топологические свойства политопов, выведена формула Эйлера для политопов размерности  $n$ . Но при построении политопов требуется знание не только числа максимально возможного числа граней размерности  $n-1$ , но и точное значение для данного политопа числа граней любой размерности меньше  $n$ . Определив эти числа, можно доказать формулу Эйлера на основании комбинаторных свойств политопов. Решению этой задачи применительно к выпуклым правильным политопам, представляющим наибольший интерес для структурной химии [7], посвящена эта работа.*

## **1. Определения**

Выпуклые многогранники высоких размерностей ( $n > 3$ ) называются выпуклыми политопами. Пучок линий, выходящий из одной точки  $n$ -мерного пространства – вершины политопа, образуют рёбра  $n$ -мерного угла. Прямых должно быть не менее чем  $n$ , так как иначе они будут лежать в пространстве меньшего, чем  $n$ , числа измерений. Линии, попарно взятые, образуют двумерные грани многомерного угла, взятые по три – трёхмерные грани и т.д.

Пусть задан выпуклый политоп  $P^n$  как выпуклая оболочка конечного множества точек  $S$  в  $n$ -мерном пространстве. Подмножество  $F = (a_1, \dots, a_k)$  множества  $S$  называется **гранью** политопа, если  $F$  порождает пространство размерности  $j$  ( $0 \leq j \leq n$ ). Политоп  $P^n$  называется **правильным**, если его **фасеты**, т.е. грани размерности  $(n-1)$ , правильные **Башней**  $\Phi$  политопа  $P^n$  называется множество  $\{F^{j_0}, \dots, F^{j_{r-1}}\}$  граней  $P^n$ , таких [3], что  $F^{j_0} \subset F^{j_1} \subset \dots \subset F^{j_{r-1}}$ , т.е. их последовательность подчиняется строгому включению. Таким образом, размерности граней в башне  $\Phi$  удовлетворяют неравенствам  $0 \leq j_0 < j_1 < \dots < j_{r-1} \leq n-1$ .

Политоп, в котором число вершин на единицу больше размерности пространства, называется **симплексом** независимо от размерности пространства. Правильный политоп, в котором число вершин на единицу больше размерности пространства, называется **правильным симплексом**. Политоп  $P^*$  двойственен к политопу  $P$ , если существует взаимно однозначное соответствие между множеством граней политопа  $P$  и множеством граней политопа  $P^*$ , которое обращает отношение включения. Если множество вершин выпуклой оболочки имеют координаты  $\{\pm 1, \pm 1, \dots, \pm 1\}$ , то соответствующий  $n$ -политоп называется  **$n$ -кубом**. Симплекс есть пример самодвойственного политопа. Политоп, двойственный  $n$ -кубу, называется  **$n$ -кроссполитоп** [3, 5].

Символ Шлефли [6] политопа  $P^n$  имеет вид  $\{i_1, i_2, \dots, i_{n-1}\}$ , где  $i_1$  – число вершин политопа, инцидентных одной плоской (двумерной) грани политопа;  $i_2$  – число плоских граней, инцидентных одной вершине;  $i_3$  – число трёхмерных граней, инцидентных одному ребру; ... ;  $i_{n-1}$  – число  $(n-1)$ -мерных граней, инцидентных  $(n-3)$ -мерной грани политопа.

Многомерный угол в результате комбинаций различных рёбер, исходящих из вершины угла, имеет грани разной размерности, т.е.  $n$ -мерный угол имеет  $C_n^k = \frac{n!}{k!(n-k)!}$   $k$ -мерных граней, т.е.  $C_n^1 = n$  рёбер,  $C_n^2 = \frac{n(n-1)}{2}$  двумерных граней и т.д.

## 2. Число граней различной размерности в башне правильного симплекса $\{3, 3, \dots, 3\}$

Обозначим  $f_j$  число граней размерности  $j$  в политопе  $P^n$ . В соответствии с определением правильного симплекса имеем

$$f_0 = n + 1 \quad (3.1)$$

Число рёбер равно числу сочетаний из общего количества вершин по 2, т.е.

$$f_1 = C_{n+1}^2 = \frac{(n+1)n}{2} \quad (3.2)$$

Если все двумерные грани есть правильные треугольники, то число двумерных граней равно

$$f_2 = C_{n+1}^3 = \frac{(n+1)n(n-1)}{2 \cdot 3} \quad (3.3)$$

Если трёхмерные грани составлены из четырёх двумерных граней (т.е. имеют четыре вершины – тетраэдры), то число трёхмерных граней равно т.д.

$$f_3 = C_{n-1}^4 = \frac{(n+1)n(n-1)(n-2)}{2 \cdot 3 \cdot 4} \quad (3.4)$$

При  $n = 4$  соответственно имеем  $f_0 = 5$  – число вершин,  $f_1 = 10$  – число рёбер,  $f_2 = 10$  – число двумерных граней (треугольников),  $f_3 = 5$  – число трёхмерных граней (тетраэдров),  $f_4 = C_5^5 = 1$  – число четырёхмерных политопов. Эта фигура называется четырёхмерный правильный симплекс. Его изображение в проекции на двумерную плоскость (при изображении многомерных тел в проекции на плоскость используется параллельная проекция, т.е. центр проекции помещается в бесконечность; такой способ проектирования имеет то преимущество, что параллельные прямые остаются параллельными) имеет вид на рис. 1.

По рис. 1 можно перечислить 5 тетраэдров  $abde, acde, abcd, abce, ebcd$ . Каждая плоская грань любого из тетраэдров закрыта некоторой гранью другого тетраэдра из этих пяти. Каждое ребро на рис. 1 принадлежит каким-то трём тетраэдрам из перечисленных пяти. Например, ребро  $ab$  принадлежит тетраэдрам  $abde, abcd, abce$ .

При  $n = 5$ , соответственно, имеем  $f_0 = 6$  – число вершин,  $f_1 = 16$  – число

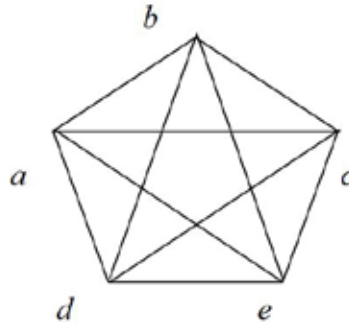


Рис. 1. 4-мерный правильный симплекс.

рёбер,  $f_2 = 20$  – число двухмерных граней,  $f_3 = 15$  – число трёхмерных граней,  $f_4 = 6$  – число четырёхмерных граней,  $f_5 = 1$  – число пятимерных граней.

В проекции на плоскость 5-мерный правильный симплекс представлен на рис. 2. По рис. 2 можно перечислить 15 тетраэдров и 6 4-мерных правильных симплексов. Причём, каждая плоская (двумерная) грань принадлежит каким-то трём 4-мерным правильным симплексам. Например, грань  $afe$  принадлежит 4-мерным правильным симплексам  $fabde$ ,  $afecb$ ,  $afecd$ .

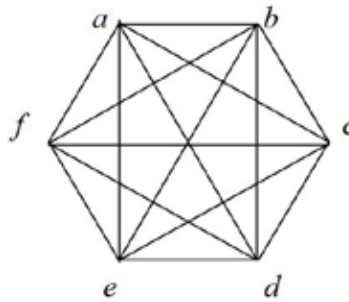


Рис. 2. 5-мерный правильный симплекс.

Так можно построить правильный симплекс любой конечной размерности. Например, в  $8^n$  – мерном пространстве ( $n = 8$ ) имеем  $f_0 = 9$  – число вершин,  $f_1 = 36$  – рёбер,  $f_2 = 84$  – двухмерных граней,  $f_3 = 168$  – трёхмерных граней,  $f_4 = 168$  – четырёхмерных граней,  $f_5 = 84$  – пятимерных граней,  $f_6 = 36$  – шестимерных граней,  $f_7 = 9$  – семимерных граней,  $f_8 = 1$  – восьмимерных граней. На рис. 3 представлена проекция на двумерную плоскость правильного симплекса в 8-мерном пространстве.

Таким образом, общая формула для расчёта чисел граней размерности  $j = 0, 1, 2, \dots, n$  для правильного симплекса в пространстве произвольной конечной размерности  $n > 3$  имеет вид

$$f_j(n) = C_{n+1}^{j+1} \quad (3.5)$$

Вычислим сумму

$$\begin{aligned} \sum_{j=0}^{n-1} f_j(n)(-1)^j &= \sum_{j=0}^{n-1} C_{n+1}^{j+1} (-1)^j = \\ &= (-1)^0 C_{n+1}^1 + (-1)^1 C_{n+1}^2 + (-1)^2 C_{n+1}^3 + \dots + (-1)^{n-1} C_{n+1}^n \end{aligned} \quad (3.6)$$

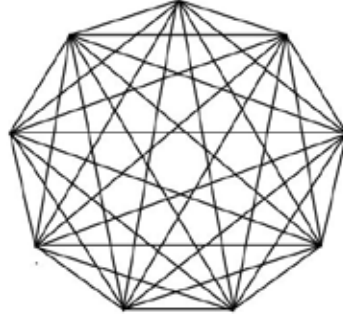


Рис. 3. Правильный симплекс в 8-мерном пространстве.

Учитывая, что  $C_{n+1}^k = C_{n+1}^{n+1-k}$ , находим, что в правой части (3.6) при чётном  $n$  все слагаемые попарно сокращаются, т. е. сумма  $\sum_{j=0}^{n-1} f_j(n)(-1)^j$  равна нулю. Если  $n$  нечётное, то все слагаемые в правой части (3.6) попарно складываются за исключением центрального слагаемого, расположенного на месте  $\frac{n+1}{2}$ . При этом правая часть (3.6) после преобразований принимает вид  $2 \left[ 1 + \frac{n!}{n!} (1 - 1) \right]$ , т. е. равна 2, а всё уравнение (3.6) записывается так

$$\sum_{j=0}^{n-1} (-1)^j f_j(P) = 1 + (-1)^{n-1} \quad (3.7)$$

Это формула Эйлера, выведенная комбинаторным путём.

### 3. Число граней различной размерности в башне правильного $n$ -куба $\{4, 3, \dots, 3\}$

Четырёхмерный куб (4-куб) образуется движением 3-куба в четвёртое измерение, перпендикулярно трёхмерному пространству, в котором куб находился. При этом каждая вершина порождает ребро, каждое ребро – квадрат, каждый квадрат – трёхмерный куб. Поэтому при определении числа вершин в окончательной фигуре надо к первоначальным вершинам добавить число вершин в конечном положении  $8 + 8 = 16 = f_0$ . При определении числа рёбер в 4-кубе надо к числу рёбер первоначального куба добавить число рёбер в кубе в окончательном положении и число рёбер, образованных движением вершин первоначального куба,  $12 + 12 + 8 = 32 = f_1$ . Число плоских граней вычисляется как сумма начального числа плоских граней, числа плоских граней у куба в конечном положении и числа плоских граней, образованных движением 12 рёбер куба  $6 + 6 + 12 = 24 = f_2$ . Число трёхмерных граней получается в виде суммы исходного куба, конечного куба, 6 кубов, образованных движением плоских граней исходного куба.

$$1 + 1 + 6 = 8 = f_3.$$

Очевидно, что 4-мерный куб один, т.е.  $f_4 = 1$ .

Таким же образом можно рассчитать число вершин, рёбер и т. д. у куба любой размерности. Процесс вычисления можно описать рекуррентными соотношениями

$$\begin{aligned} f_{0(n)} &= 2f_{0(n-1)}, \\ f_{1(n)} &= 2f_{1(n-1)} + f_{0(n-1)}, \\ f_{2(n)} &= 2f_{2(n-1)} + f_{1(n-1)}, \end{aligned} \quad (4.1)$$

$$\dots \\ f_{n(n)} = 1$$

где первый нижний индекс указывает размерность грани, а второй нижний индекс – размерность пространства.

Последовательно подставляя рекуррентные соотношения друг в друга, и учитывая, что  $f_{0(2)} = 4, f_{1(2)} = 4, f_{2(2)} = 1$ , получим более удобные для вычисления формулы при любой конечной размерности пространства  $n$ :

$$\begin{aligned} f_0 &= 2^n C_n^0, \\ f_1 &= 2^{n-1} C_n^1, \\ f_2 &= 2^{n-2} C_n^2, \\ &\dots \\ f_n &= 2^{n-n} C_n^n = 1, \end{aligned}$$

или в общем виде

$$f_i = 2^{n-i} C_n^i, i = 0, 1, \dots, n. \quad (4.2)$$

Рассмотрим сумму

$$\begin{aligned} \sum_{i=0}^n (-1)^i 2^{n-i} C_n^i &= 2B + (-1)^n, \\ B &= (-1)^0 2^{n-1} + (-1)^1 2^{n-2} n + (-1)^2 2^{n-3} \frac{n(n-1)}{2} + \dots \\ &\dots + (-1)^{n-2} 2 \frac{n(n-1)}{2} + (-1)^{n-1} 2^0 n. \end{aligned}$$

Можно заметить, что  $B = 0$  для чётных  $n$  и  $B = 1$  для нечётных  $n$ . Это подтверждает формулу Эйлера (3.6) для политопов в случае  $n$ -куба. Можно точно доказать уравнение (3.6) для  $n$ -куба, если записать (3.6) в виде

$$\sum_{i=0}^n (-1)^i f_{i(n)} = 1 \quad (4.3)$$

и воспользоваться рекуррентными соотношениями (4.1), последовательно понижая размерность политопов в левой части (уменьшая индекс  $n$  до 2). В результате получим

$$\sum_{i=0}^n (-1)^i f_{i(n)} = (-1)^0 f_{0(2)} + (-1)^2 f_{1(2)} + (-1)^2 = 4 - 4 + 1 = 1$$

На рис. 4 представлено изображение проекции 4-куба на двумерную плоскость, а на рис. 5 – изображение проекции 5-куба на двумерную плоскость. В случае 5-куба расчёты по формуле (4.2) приводят к значениям

$$f_0 = 32, f_1 = 80, f_2 = 80, f_3 = 40, f_4 = 10, f_5 = 1.$$

Из рис. 4 видно, что каждая вершина 4-куба есть общая вершина четырёх 3-кубам. Например, вершина  $c$  есть общая вершина кубов  $bcdnefar$ ,  $bcdnn'b'a'c'$ ,  $bcc'b'rr'aa'$ ,  $cdc'd'rr'ee'$ .

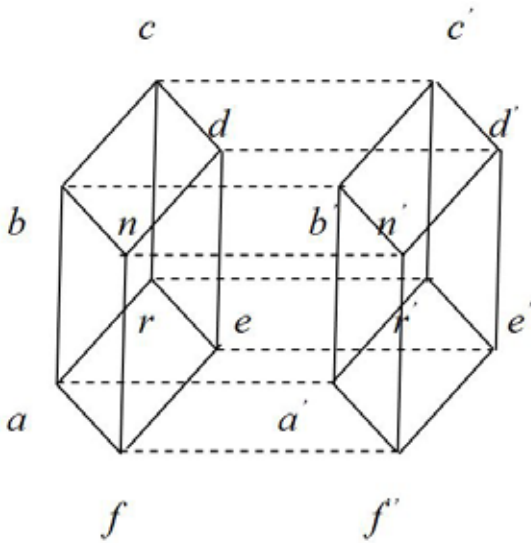


Рис.4. 4- куб,  $\{4,3,3\}$ .

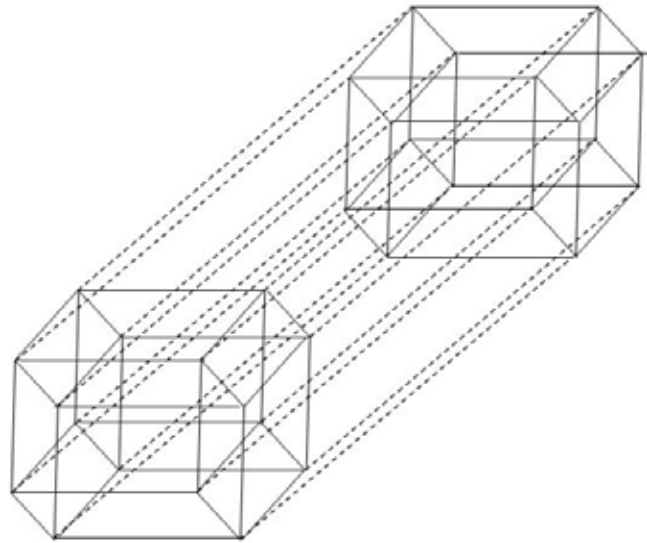


Рис.5. 5-куб,  $\{4,3,3,3\}$ .

#### 4. Число граней различной размерности в башне $n$ -кроссполитона $\{3,3,\dots,3,4\}$

Двойственным политопом по отношению к  $n$ -кубу является  $n$ -кроссполитоп, который имеет обратённое отношение включения. Это означает замену грани с большей размерностью на грань с меньшей размерностью, т. е. на месте грани с  $(n-1)$  размерностью у  $n$ -куба должна появиться грань с нулевой размерностью (вершина) у  $n$ -кроссполитоба и т.д. Если, в соответствии с условием двойственности, центры восьми 3-мерных кубов в 4-кубе считать вершинами нового политопа и соединить эти центры друг с другом за исключением противоположащих центров, то и получим 4-кроссполитоп, состоящий из 16 тетраэдров, расположенных на октаэдрической основе. Соответствующее изображение этого политопа на двумерную плоскость представлено на рис. 6. Впервые такое изображение, полученное в соответствии с условием двойственности, было приведено в [8]. Оно имеет 6 вершин политопа на периферии рисунка и 2 вершины внутри контура рисунка. Из рис. 6 видно, что каждая вершина политопа является общей для

8 тетраэдров. Например, вершина 1 есть общая вершина тетраэдрам 1-2-7-6, 1-6-7-5, 1-2-8-6, 1-8-6-5, 1-2-3-7, 1-2-3-8, 1-5-3-8, 1-5-3-7. Из рис. 6 видно, что 24 ребра 4-кроссполитопа разделяются на 12 пар параллельных рёбер. Причём, возможны перестановки вершин, не изменяющие существования 12 пар параллельных рёбер. Эти перестановки образуют группу. Поэтому в этом смысле все вершины политопа равноправны, т. е. 4-кроссполитоп есть правильный политоп. Однако, позже у Коксетера [1] появилось другое изображение 4-кроссполитопа, называемого Коксетером 16-ячейка (по числу трёхмерных фигур, входящих в политоп), у которого все 8 вершин находятся на внешнем контуре рисунка (рис. 7). Такое изображение противоречит условию двойственности, так как не может быть получено в процессе получения двойственной фигуры. Можно заметить, что на рис. 7 имеются 4 множества рёбер, каждое из которых включает 4 параллельных ребра (12, 65, 83, 74; 23, 14, 85, 76; 34, 25, 16, 87; 45, 36, 72, 81). Кроме того, есть 4 множества рёбер, каждое из которых имеет 2 параллельных ребра (13, 75; 35, 17; 24, 86; 82, 64). Существование в изображении на рис. 7 множеств из 4-х параллельных рёбер означает, что изображение на рис. 7 не эквивалентно изображению на рис. 6. На рис. 7 появились дополнительные параллельные рёбра, а это противоречит принципу проектирования из бесконечности, при котором параллельность линий сохраняется.

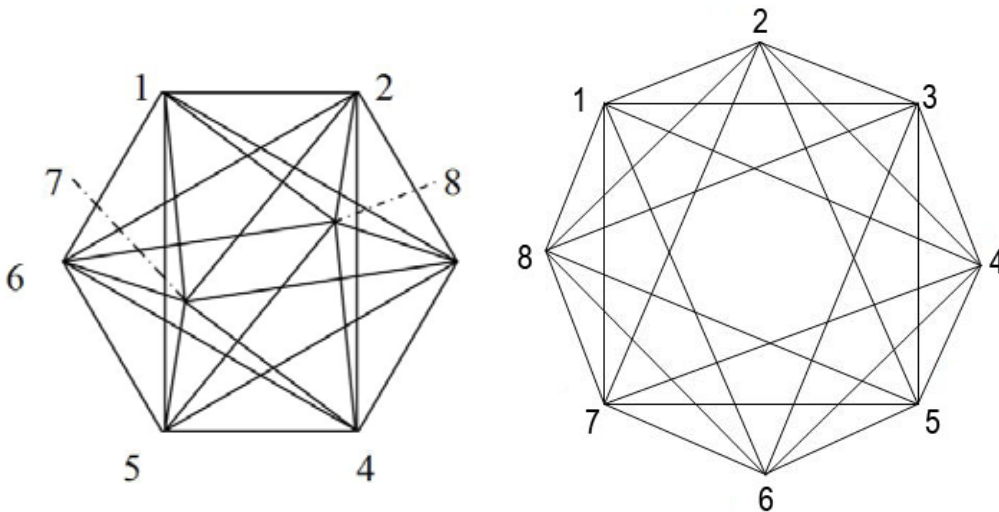


Рис. 6. 4-кроссполитоп,  $\{3,3,4\}$ . Рис. 7. 16-ячейка (по Коксетеру).

В силу двойственности 4-куба и 4-кроссполитопа количество вершин, рёбер, двумерных и трёхмерных граней у 4-кроссполитопа находятся в соответствии с обращением отношения включения, т. е.

$$f_{0(\overline{4-c})} = f_{3(4-c)} = 8 ,$$

$$f_{1(\overline{4-c})} = f_{2(4-c)} = 24 ,$$

$$f_{2(\overline{4-c})} = f_{1(4-c)} = 32 ,$$

$$f_{3\overline{(4-c)}} = f_{0(4-c)} = 16 .$$

Здесь первый индекс соответствует размерности грани, а второй индекс отвечает либо 4-кубу –  $(4 - c)$ , либо 4-кроссполитопу –  $\overline{(4 - c)}$ .

Указанную процедуру можно применить для получения  $n$ -кроссполитопов при любых  $n$ . Их характеристики выражаются в общем виде через соответствующие характеристики  $n$ -кубов

$$\begin{aligned} f_{0\overline{(n-c)}} &= f_{(n-2)(n-c)} , \\ f_{2\overline{(n-c)}} &= f_{(n-3)(n-c)} , \\ &\dots \\ f_{(n-1)\overline{(n-c)}} &= f_{0(n-c)} , \\ f_{n\overline{(n-c)}} &= 1 . \end{aligned} \tag{5.1}$$

По формулам (5.1) можно построить  $n$ -кроссполитоп при любом  $n$ .

Построим, например, 5-кроссполитоп. Для этого воспользуемся изображением 5-куба на рис. 5. Соединяя центры 10 4-кубов за исключением расположенных противоположно относительно центра 5-куба, получим 5-кроссполитоп. Его изображение представлено на рис. 8.

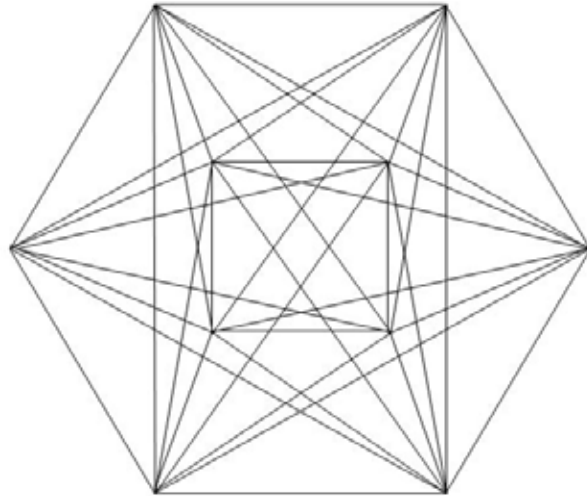


Рис. 8. 5-кроссполитоп  $\{3,3,3,4\}$ .

Политоп на рис. 8 включает в себя 4 четырёхмерных фигуры (4-кроссполитоп), 80 трёхмерных фигур (тетраэдров), 80 плоских граней (треугольников), 40 рёбер, 10 вершин.

### **Заключение**

Для выпуклых правильных политопов, существующих при любых размерностях, больших 3, получены уравнения для расчёта числа граней различной размерности в башнях политопов. Эти уравнения обеспечивают воз-



возможность построения двумерных проекций политопов, в принципе, при любой конечной размерности политопа. На основании этих уравнений проведено комбинаторное доказательство формулы Эйлера для политопов. Показано, что изображение  $n$ -кроссполитопа, приведённое в работах Коксетера ( $n = 4$ ), некорректно, так как нарушает условие двойственности  $n$ -куба и  $n$ -кроссполитопа.

### Список литературы

1. Coxeter H. S. M. Regular Polytopes. New York, London, 1963. 321 p.
2. Gale D. On the number of faces of a convex polytope // Canad. J. Math., 1964. V. 16. P. 12-17.
3. Grunbaum V. Convex Polytopes. London: Springer, 1967.
4. Klee V.L. On the number of vertices of a convex polytopes// Canad. J. Math., 1964. V. 16. P. 701-720.
5. McMullen P., Shephard G.C. Convex polytopes and upper bound conjecture. Cambridge: Cambridge at University Press, 1971.
6. L. Schläfli. Reduction d'une Integrale Multiple qui comprend l'are du cercle et l'are du triangle spherique comme cas particuliers. Journal de Mathematiques, 20(1855), P. 359-394.
7. Shevchenko V.Ya. Search in Chemistry, Biology and Physics of the Nanostate. Saint-Petersburg: Lema, 2011. 324 p.
8. Stringham W.I. Regular figures in  $n$ -dimensional space // American Journal of Mathematics, 1880. V. 3. P. 1-14.

## ОБРАЗЫ ВЫПУКЛЫХ ПРАВИЛЬНЫХ И ПОЛУПРАВИЛЬНЫХ $n$ -МЕРНЫХ ПОЛИТОПОВ

**Жижин Г.В.**

Институт химии силикатов РАН, г. Санкт-Петербург, genzhizhin@gmail.com

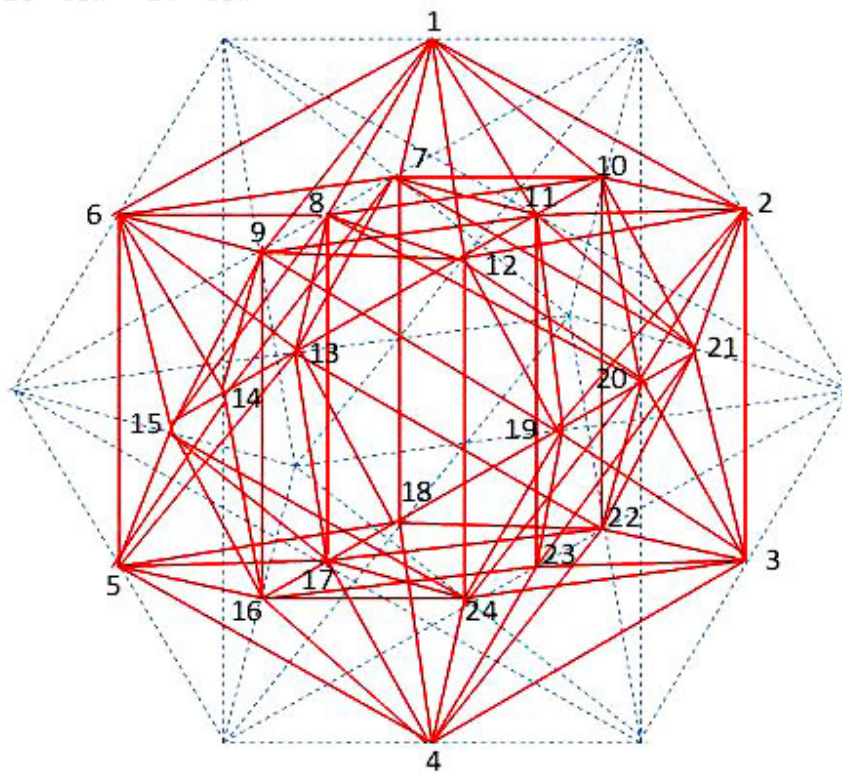
*Согласно современным исследованиям в структурной химии, размерность пространства наномира больше 3 [8]. Поэтому вновь актуальна задача заполнения  $n$ -мерного пространства  $n$ -мерными выпуклыми политопами. Ранее [1-3] она решалась в предположении, что политопы есть параллелоэдры, т.е. имеют специальную форму, при этом особенности геометрии форм известных в структурной химии политопов не учитывались. В процессе математических исследований многомерных политопов необходимо использовать какие-то их образы. Наибольшее распространение получили двумерные проекции 4-мерных политопов, приведённые в работах Коксетера [9]. Но в [5] показано, что двумерная проекция 4-кроссполитопа Коксетера противоречит необходимому условию двойственности 4-кубу. Так как двумерные проекции более сложных политопов у Коксетера основаны на двумерной проекции 4-кроссполитопа, требуется проверить их корректность. Для структурной химии, кроме правильных выпуклых политопов, представляют интерес политопы, отклоняющиеся от правильных, в частности,*

полуправильные. До последнего времени никаких образов полуправильных политопов не существовало. В этой работе приведены двумерные проекции известных и неизвестных ранее полуправильных политопов и рассмотрены выпуклые правильнотетраэдральные политопы.

### 1. Политоп $\{3,4,3\}$ , (24-ячеечник)

Для получения изображения политопа  $\{3,4,3\}$  обозначим середины рёбер 4-кроссполитопа как вершины нового политопа и соединим эти вершины новыми рёбрами. Так как число рёбер у 4-кроссполитопа равно 24, то у нового политопа будет 24 вершины. В этот политоп входят 16 октаэдров, полученных от операции отсечения вершин тетраэдров вплоть до середины рёбер, и 8 октаэдров, образовавшихся в местах между вновь образовавшимися гранями этих 16 октаэдров. Проекция полученного политопа на двумерную плоскость представлена на рис. 1. Назовём его 24-ячеечник или, в обозначениях Шёнфлиса –  $\{3,4,3\}$ . В соответствии с нумерацией вершин политопа на рис. 1 можно перечислить все 24 октаэдра, входящие в политоп. Они перечислены рядом с рис. 1. У политопа  $\{3,4,3\}$  каждая вершина есть вершина 6 октаэдров. Например, вершина 6 принадлежит октаэдрам 1, 4, 10, 12, 18, 22.

$$t^2 \text{ 16-cell} = \text{24-cell}$$



- 1) 6-15-13-17-5-8
- 2) 8-20-24-15-12-17
- 3) 9-19-15-24-12-16
- 4) 6-7-5-18-14-13
- 5) 7-21-13-22-10-18
- 6) 8-20-13-22-10-17
- 7) 9-19-14-23-11-16
- 8) 11-2-3-23-19-21
- 9) 1-10-11-21-2-7
- 10) 1-6-8-12-9-15
- 11) 18-21-3-23-4-22
- 12) 6-1-10-7-8-13
- 13) 5-22-17-4-18-13
- 14) 14-18-4-16-5-23
- 15) 9-19-11-12-1-2
- 16) 1-10-20-12-2-8
- 17) 2-3-21-20-22-10
- 18) 6-14-9-15-16-5
- 19) 15-24-17-16-5-4
- 20) 17-20-3-4-24-22
- 21) 14-11-23-18-21-7
- 22) 6-1-11-14-9-7
- 23) 19-3-4-16-23-24
- 24) 12-2-3-24-19-20

Рис. 1. Политоп  $\{3,4,3\}$ .

Изображение политопа  $\{3,4,3\}$  на рис. 1 принципиально отличается от изображения политопа  $\{3,4,3\}$ , приводимого в работах Коксетера [9], полученного из ошибочного изображения 4-кроссполитопа. Можно убедиться, что все плоские грани октаэдров, входящих в политоп  $\{3,4,3\}$ , закрыты другими гранями октаэдров, и вся совокупность 24 октаэдров замкнута, т.е. представляет собой политоп. Перечислить же 24 октаэдра на изображении политопа  $\{3,4,3\}$ , приводимого Коксетером (рис. 2), не представляется возможным.

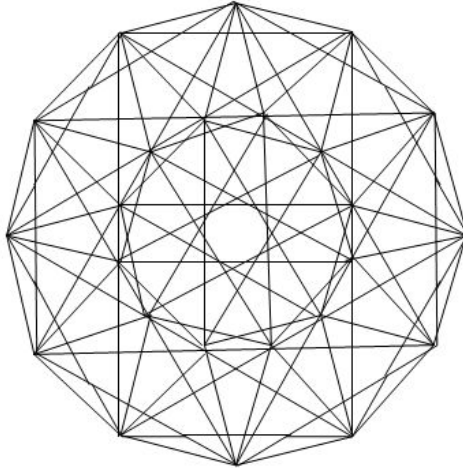
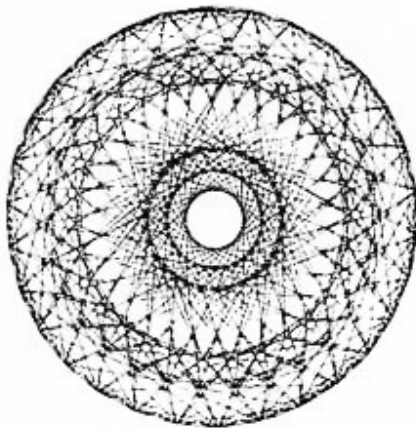


Рис. 2. Политоп  $\{3,4,3\}$  по Коксетеру.

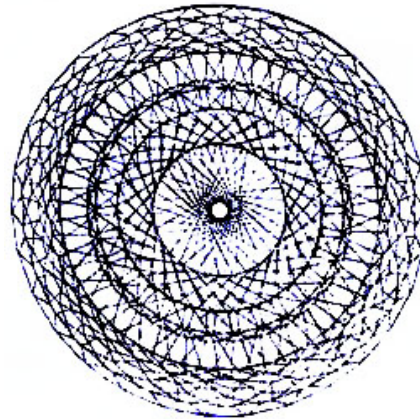
## 2. Политоп $\{3,3,5\}$ (600-ячеечник) и политоп $\{5,3,3\}$ (120-ячеечник)

Политопы  $\{3,3,5\}$  и  $\{5,3,3\}$  двойственны друг другу. Политоп  $\{3,3,5\}$  состоит из 600 тетраэдров, причём каждому ребру любого тетраэдра из этого множества инцидентно 5 тетраэдров. Политоп  $\{5,3,3\}$  состоит из 120 додекаэдров, и каждому ребру любого из додекаэдров инцидентно 3 додекаэдра из этого множества. Впервые о существовании этих политопов было заявлено в работе В. Стрингхема в 1880 г. [13]. Однако цельных изображений этих политопов в указанной работе нет. Более того, доказательство существования этих правильных политопов основано у Стрингхема на исходном допущении о заполнении трёхмерного пространства вокруг некоторой точки 20-ю правильными тетраэдрами. Телесный угол при вершине правильного тетраэдра составляет 0.551286 стерадиан. Поэтому 20 тетраэдров в общей вершине, приложенных друг к другу по целым сторонам, составят телесный угол, равный 11.02572 стерадиан. Это примерно на 1.5 стерадиан меньше полного телесного угла, равного  $4\pi$  12.56637 стерадиан. Поэтому следует признать, что существование 600-ячеечника и 120-ячеечника пока не доказано. В работах Г.С.М. Коксетера [9] приводятся изображения политопов  $\{3,3,5\}$  и  $\{5,3,3\}$  (рис. 3, 4). Но они, как утверждается в [9], получены на основании изображения 24-ячеечника на рис. 2. Однако, как только что было показано, это изображение ошибочно, и оно не позволяет перечис-

лить 24 октаэдра, которые должны входить в этот политоп. На изображениях политопов  $\{3,3,5\}$  и  $\{5,3,3\}$  в [9] также невозможно выделить и перечислить 600 тетраэдров и 120 додекаэдров, декларируемых в [9]. Можно предложить следующий путь рассмотрения вопроса о существовании 600-ячеечника и 120-ячеечника. Изобразим каждый тетраэдр во множестве тетраэдров 600-ячеечника некоторой точкой на плоскости, а соединение тетраэдра с другим тетраэдром по целой стороне изобразим отрезком, соединяющим две точки, являющиеся образами тетраэдров. Обозначим соединяющий их отрезок совокупностью вершин общей треугольной грани этих тетраэдров. Так мы приходим к изображению четырёхмерного политопа в виде взвешенного графа на двумерной плоскости. Обозначим, например, начальный тетраэдр цифрой 1, а его вершины укажем цифрами в скобках у номера тетраэдра  $1(1,2,3,4)$ . Обозначим также номером 2 тетраэдр, прилегающий к тетраэдру 1 по стороне  $(1,2,3) - 2(1,2,3,5)$ . При этом в перечне вершин тетраэдра 2 появилась новая вершина – 5. Пусть к тетраэдру 2 прилегает тетраэдр 3 по стороне  $(1,2,5)$ . Тогда у тетраэдра 3 появляется новая вершина  $6 - 3(1,2,5,6)$  и т. д. Задача состоит в построении последовательности тетраэдров с введением новых вершин до тех пор, пока новые вершины уже не будут появляться. Здесь, ввиду сложности задачи, целесообразно численное исследование с использованием метрических соотношений, определяющих значения координат вершины правильного тетраэдра в четырёхмерном пространстве по координатам трёх остальных вершин тетраэдра при заданных координатах четырёх вершин тетраэдра 1. Построенный граф 600-клеточника по условию двойственности одновременно будет изображением 120-клеточника.



*Рис. 3. Политоп  $\{3,3,5\}$   
по Г. С. М. Коксетеру.*



*Рис. 4. Политоп  $\{5,3,3\}$   
по Г. С. М. Коксетеру.*

### **3. Выпуклые полуправильные политопы**

Выпуклыми полуправильными политопами будем называть выпуклые политопы, все вершины которых совместимы движением и равномерно распределены по телу политопа на его фасетах. В настоящее время полупра-

вильные политопы исследованы очень мало. Впервые было заявлено о существовании выпуклых полуправильных политопов в четырёхмерном пространстве в работе Т. Госсета в 1900 г. [12]. Это была краткая заметка, содержащая лишь утверждения о существовании 3 полуправильных конечных политопов с указанием их состава. К этим же результатам в 1912 г. пришёл Е.Л. Ельте [11]. Лишь в 1988 г. была публично математически подтверждена правильность утверждения Госсета [7]. В [7, 11, 12] рассматривались полуправильные политопы в узком смысле, т.е. политопы, у которых все двумерные грани – одинаковые правильные треугольники, но трёхмерные грани в одной и той же фигуре могли быть различны. В 1910 г. была опубликована работа А.Б. Стотта [14], в которой независимо от заметки Госсета рассматривались полуправильные политопы в широком смысле, т. е. допускалось присутствие в множестве двумерных граней в одной и той же фигуре различных правильных многоугольников. К сожалению, работы [11, 14] отсутствовали в библиотеках СССР и до сих пор в печатном виде отсутствуют в библиотеках России. Таким образом, за всё время развития науки можно указать лишь 4 работы, в которых рассматривались полуправильные политопы, и ни в одной из этих работ не содержится ни одного изображения какого-нибудь полуправильного политопа. Кроме того, в работе [14] применён очень трудоёмкий метод исследования, результаты которого затруднительно проверить.

При получении и классификации четырёхмерных выпуклых полуправильных политопов (в широком смысле) будем последовательно применять операцию отсечения рёбер политопа на одну треть с каждой стороны ребра (операция  $t$ ) и операцию отсечения рёбер политопа до половины ребра с каждой стороны ребра (операция  $t^2$ ). Получение полуправильных политопов разумно начать с анализа простейшего правильного политопа четырёхмерного правильного симплекса  $\{3,3,3\}$ .

Применяя операцию отсечения  $t$ , т. е. заменяя рёбра в  $\{3,3,3\}$  на одну третью часть ребра в его середине, получим полуправильный политоп  $t\{3,3,3\}$ , состоящий из 5 тетраэдров и 5 усечённых тетраэдров (рис. 5).

Применяя операцию отсечения  $t$  к правильному политопу  $\{4,3,3\}$ , получим полуправильный политоп  $t\{4,3,3\}$ , состоящий из 16 тетраэдров и 8 усечённых кубов (рис. 6).

Применяя операцию отсечения  $t$  к правильному политопу  $\{3,3,4\}$ , получим полуправильный политоп, состоящий из 8 октаэдров и 16 усечённых тетраэдров (рис. 7).

Применяя операцию  $t^2$  к правильному политопу  $\{3,3,3\}$ , получим полуправильный политоп  $t^2\{3,3,3\}$ , состоящий из 5 октаэдров и 5 тетраэдров (рис. 8). Ввиду того, что в проекции на рис. 9 часть рёбер накладывается друг на друга, проследить существование 5 октаэдров и 5 тетраэдров на рисунке трудно. Для того, что бы они стали явно видимы, достаточно несколько

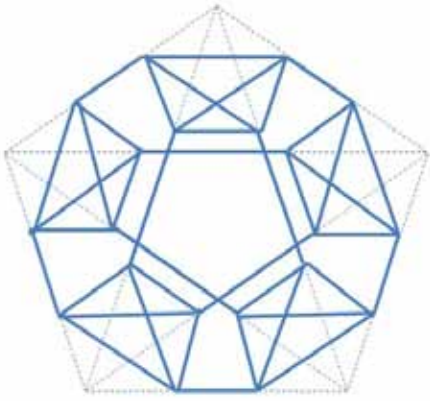


Рис. 5.  $t\{3,3,3\}$ ; 5 тетраэдров,  
5 усечённых тетраэдров.

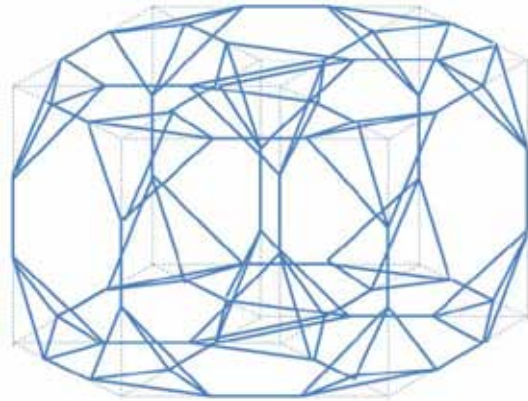


Рис. 6.  $t\{4,3,3\}$ ; 16 тетраэдров,  
8 усечённых кубов.



Рис. 7.  $t^2\{3,3,4\}$ ; 8 октаэдров,  
16 усечённых тетраэдров.

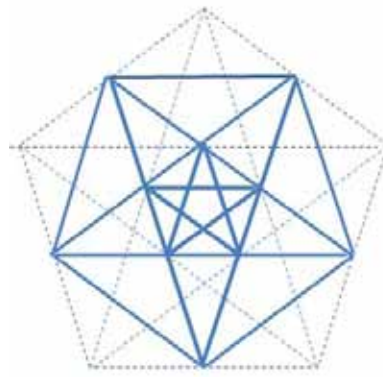


Рис. 8.  $t^2\{3,3,3\}$ ; 5 октаэдров,  
5 тетраэдров.

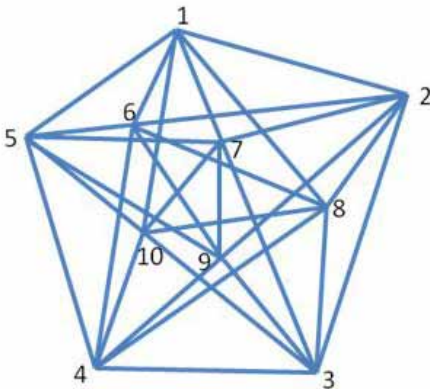


Рис. 9.  $t^2\{3,3,3\}$  со смещёнными  
вершинами.

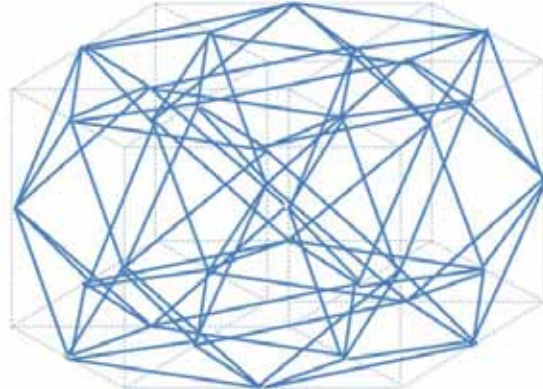


Рис. 10.  $t^2\{4,3,3\}$ ; 16 тетраэдров,  
8 кубооктаэдров.

сместить друг относительно друга совпадающие вершины. Это сделано на рис. 9, там же перечислены октаэдры и тетраэдры.

Применяя операцию  $t^2$  к политопу  $\{4,3,3\}$ , получим полуправильный политоп  $t^2\{4,3,3\}$ , состоящий из 16 тетраэдров и 8 кубооктаэдров (рис. 10).

Если обозначить О – октаэдр, Т – тетраэдр, И – икосаэдр, Д – додекаэдр, С – куб, ИД – икосадодекаэдр, СО – кубооктаэдр, то можно перечислить список всех полученных полуправильных четырёхмерных политопов. Он представлен в таблице 1.

Три первых полуправильных политопа из таблицы были установлены Госсетом. Кроме операций  $t$  и  $t^2$  при получении полуправильных политопов использовалось известное преобразование октаэдра в икосаэдр [9]. Очевидно, что по известным проекциям на двумерную плоскость правильных политопов больших размерностей ( $n > 4$ ), применяя рассмотренные операции, можно получить полуправильные политопа размерности  $n > 4$ .

Таблица 1.

N	Состав	N	Состав
1	O(5), T(5)	8	tD(120), T(600)
2	I(24), T(120)	9	tT(600), I(120)
3	I(120), O(600)	10	CO(8), T(16)
4	tT(5), T(95)	11	tI(120), tT(600)
5	tC(8), T(16)	12	CO(24), C(24)
6	tT(16), O(8)	13	ID(120), T(600)
7	tO(24), C(24)	14	I(10), T(85)

#### 4. Выпуклые полуправильные политопа с разной степенью использования рёбер

Кроме правильных и полуправильных политопов для структурной химии представляют интерес политопа, грани которых есть правильные фигуры, но имеются отклонения от однородности в свойствах элементов фигур. В общем случае такие политопа можно назвать правильногранными. Трёхмерные правильногранные выпуклые многогранники рассмотрены в [4, 6].

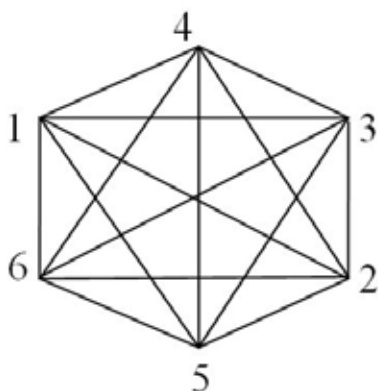


Рис. 11. Политоп со степенью использования рёбер 3 и 4.

В качестве доказательства существования правильногранных выпуклых политопов введём в рассмотрение, например, следующие 9 тетраэдров с вершинами, указанными в скобках: 1(1,2,3,4), 2(1,2,3,5), 3(1,2,5,6), 4(1,2,4,6), 5(2,3,4,6), 7(1,4,5,6), 8(1,3,4,5), 9(3,4,5,6). Очевидно, что фигура, составленная из этих тетраэдров, есть политоп, так как каждая грань любого из тетраэдров закрыта гранью некоторого другого из тетраэдров указанного множества тетраэдров. Легко заметить, что каждая из 6-и вершин 9-и тетраэдров связана рёбрами с остальными вершинами. Поэтому проекция на плоскость этого политопа совпадает с проекцией 5-и мерного правильного симплекса (см. [5]) на двумерную плоскость (рис. 11).

Построим граф этого политопа (рис. 12).

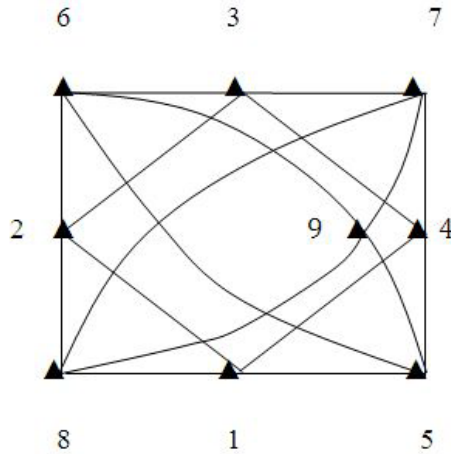


Рис. 12. Граф политопа со степенями использования рёбер 3 и 4.

Соответствие рёбер графа сторонам соединяемых тетраэдров задаётся таблицей 2.

Таблица 2.

Ребро	Сторона	Ребро	Сторона	Ребро	Сторона
1-2	1, 2, 3	1-5	2, 4, 3	1-4	1, 2, 4
1-8	1, 4, 3	2-8	1, 3, 5	2-3	1, 2, 5
2-6	2, 3, 5	3-6	6, 2, 5	3-4	1, 2, 6
3-7	1, 5, 6	4-5	2, 4, 6	4-7	1, 4, 6
6-9	3, 5, 6	6-5	2, 6, 3	5-9	3, 6, 4
7-8	1, 5, 4	7-9	5, 6, 4	8-9	3, 4, 5

По графу и таблице 1 легко определить, что 6 рёбер политопа инцидентны трём тетраэдрам, а 9 рёбер тетраэдров инцидентны четырём тетраэдрам (таблица 3).

Таблица 3.

Ребро политопа	Инцидентные тетраэдры	Ребро политопа	Инцидентные тетраэдры	Ребро политопа	Инцидентные Тетраэдры
2-5	2, 6, 3	1-6	3, 7, 4	2-4	1, 4, 5
1-3	1, 2, 8	5-4	8, 7, 9	6-3	5, 6, 9
1-2	1, 2, 3, 4	6-4	9, 7, 4, 5	3-5	9, 6, 2, 8
2-3	6, 5, 1, 2	1-4	8, 7, 4, 1	1-5	8, 2, 3, 7
5-6	7, 9, 6, 3	2-6	6, 3, 4, 5	4-3	5, 1, 8, 9

Построенный политопа имеет 6 вершин, 15 рёбер, 18 плоских граней, 9 трёхмерных граней, 1 четырёхмерную фигуру (удаление из 5-мерного правильного симплекса 6 тетраэдров привело к переходу политопа в пространство меньшей размерности, при сохранении замкнутости и выпуклости по-



литопы). По формуле Эйлера должно выполняться равенство [5].

$$\sum_{i=0}^n (-1)^i f_{i(n)} = 1,$$

где  $f_{i(n)}$  – число элементов размерности  $i$  в политопе размерности  $n$ .

Подставляя в правую часть равенства полученные значения чисел вершин, рёбер, плоских, трёхмерных и четырёхмерных фигур, находим

$$6 - 15 + 18 - 9 + 1 = 1,$$

т. е. уравнение Эйлера выполняется. Это окончательно доказывает существование политопа в четырёхмерном пространстве.

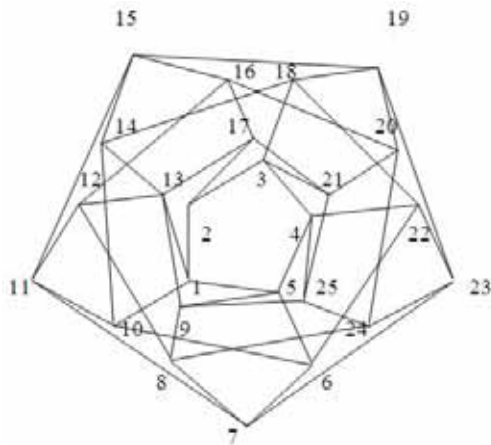


Рис. 13. Граф политопа со степенями использования рёбер 4 и 5.

Введём в рассмотрение 25 тетраэдров с соответствующими вершинами: 1(1,2,3,4), 2(1,2,3,5), 3(1,2,5,6), 4(1,2,6,7), 5(1,2,4,7), 6(2,4,7,8), 7(4,7,8,9), 8(4,7,9,10), 9(4,7,1,9), 10(2,3,4,8), 11(3,4,8,10), 12(3,4,9,10), 13(3,4,1,9), 14(2,3,5,8), 15(5,3,8,10), 16(5,3,9,10), 17(5,3,1,9), 18(2,5,8,6), 19(6,5,8,10), 20(5,6,9,10), 21(1,5,6,9), 22(2,6,7,8), 23(6,7,8,10), 24(6,7,9,10), 25(1,6,7,9). Очевидно, что фигура, составленная из этих фигур, есть политоп, т.к. каждая грань любого из политопов закрыта гранью другого политопа из

этого множества тетраэдров. Граф этого политопа изображён на рис. 13.

Соответствие рёбер графа сторонам соединяемых тетраэдров задаётся таблицей 4.

Таблица 4.

Ребро	Сторона	Ребро	Сторона	Ребро	Сторона
1-2	1, 2, 3	1-5	1, 2, 4	1-10	3, 2, 4
1-13	1, 4, 3	2-3	1, 2, 5	2-14	3, 2, 5
2-17	1, 3, 5	3-21	6, 1, 5	3-4	1, 2, 6
3-18	2, 5, 6	4-5	2, 1, 7	4-22	2, 7, 6
4-25	1, 7, 6	6-5	2, 4, 7	5-9	1, 7, 4
6-7	7, 8, 4	6-10	2, 8, 4	6-22	2, 7, 8
7-8	4, 7, 10	7-11	4, 8, 10	7-23	7, 8, 10
8-9	4, 9, 7	8-12	4, 9, 10	8-24	7, 9, 10
9-13	1, 4, 9	9-25	1, 7, 9	10-14	2, 3, 8
10-11	3, 4, 8	11-12	3, 4, 10	11-15	3, 8, 10
12-13	3, 4, 9	12-16	3, 9, 10	13-17	1, 3, 9
14-15	3, 5, 8	14-18	2, 5, 8	15-16	3, 5, 10
15-19	5, 8, 10	16-17	3, 5, 9	16-20	5, 9, 10
17-21	1, 5, 9	18-19	5, 6, 8	18-22	2, 6, 8
19-20	5, 6, 10	19-23	6, 8, 10	20-21	5, 6, 9
20-24	6, 9, 10	21-25	1, 6, 9	22-23	6, 7, 8
23-24	6, 7, 10	24-25	6, 7, 9		

По графу на рис. 13 и таблице 4 легко определить, что 10 рёбер политопа инцидентны пяти тетраэдрам, а 25 рёбер тетраэдров инцидентны четырём тетраэдрам (таблица 5).

Построенный политоп имеет 10 вершин, 35 рёбер, 50 плоских граней, 25 трёхмерных граней, 1 четырёхмерную фигуру. Подставляя в правую часть равенства полученные значения чисел вершин, рёбер, плоских, трёхмерных и четырёхмерных фигур, находим

$$10 - 35 + 50 - 25 + 1 = 1,$$

т.е уравнение Эйлера выполняется. Это окончательно доказывает существование этого политопа в четырёхмерном пространстве.

Таблица 5.

Ребро политопа	Инцидентные тетраэдры	Ребро политопа	Инцидентные тетраэдры	Ребро политопа	Инцидентные тетраэдры
2-3	1, 2, 6, 5, 7	1-4	1, 11, 16, 4, 21	1-5	2, 3, 12, 17, 22
2-6	3, 4, 8, 9, 10	5-7	5, 8, 13, 18, 22	7-8	14, 6, 19, 9, 24
4-8	7, 10, 15, 20, 25	6-9	11, 12, 13, 14, 15	9-10	16, 17, 18, 19, 20
10-3	21, 22, 23, 24, 25	1-2	2, 3, 4, 1	1-3	1, 2, 21, 22
4-2	1, 7, 4, 10	4-3	1, 7, 21, 25	2-5	5, 2, 8, 3
3-5	2, 5, 22, 23	1-6	3, 4, 11, 12	5-6	3, 8, 12, 13
4-6	4, 10, 11, 15	2-7	5, 6, 8, 9	3-7	5, 6, 23, 24
2-8	6, 7, 9, 10	3-8	6, 7, 24, 25	6-7	8, 9, 13, 14
6-8	9, 10, 14, 15	1-9	11, 12, 16, 17	4-9	11, 15, 16, 20
5-9	12, 13, 17, 18	7-9	13, 14, 18, 19	8-9	14, 15, 19, 20
1-10	16, 17, 21, 22	4-10	16, 20, 21, 25	5-10	17, 18, 22, 23
7-10	18, 19, 23, 24	8-10	19, 20, 24, 25		

### 5. Политопы, двойственные политопам из тетраэдров с разной степенью использования рёбер

Для построения политопов, двойственным политопам из тетраэдров с разной степенью использования рёбер, надо принять вершины соответствующего графа за вершины политопа, рёбра графа – за рёбра политопа. Тогда политопом, двойственным политопу на рис. 11 с графом рис. 12, будет треугольный призмаэдр на рис. 14.

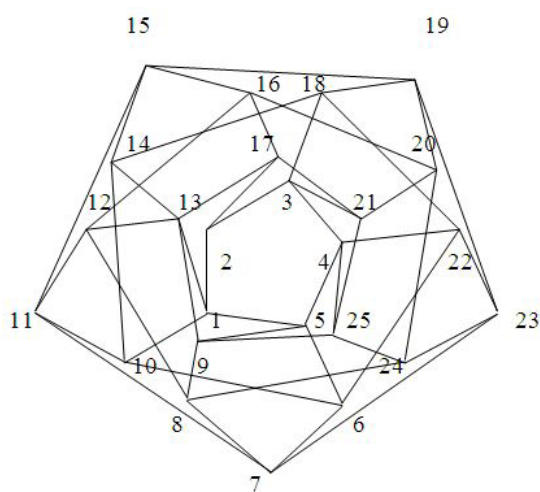


Рис. 14. Треугольный призмаэдр.

Политоп, двойственный политопу, граф которого изображён на рис. 13, является пятиугольным призмаэдром на рис. 15.

Из предыдущего следует, что можно построить политопы из тетраэдров (не обязательно правильных) с различными степенями использования рёбер, одна из степеней которых равна 4, и

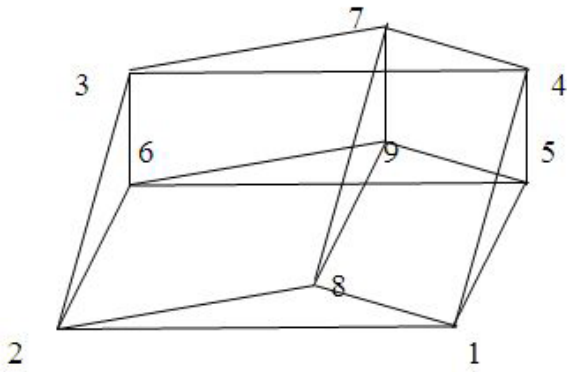


Рис. 15. Пятиугольный призмаэдр.

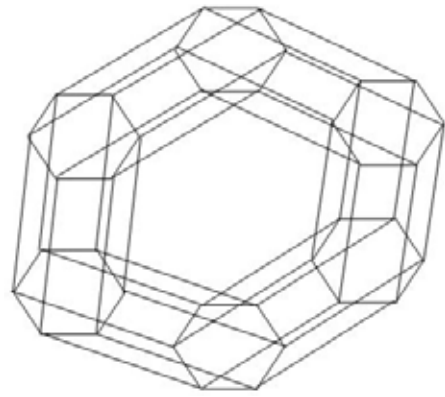


Рис. 16. Шестиугольный призмаэдр.

соответствующие им двойственные политопы. Например, шестиугольный призмаэдр на рис. 16, который есть параллелоэдр, один из систематики 4-х мерных параллелоэдров Делоне [14]. Можно заметить, однако, что изображение этого параллелоэдра в [14], в отличие от рис. 16, не соответствует своему обозначенному содержанию – 12 восьмисторонников.

### Список литературы

1. Александров А.Д. О заполнении пространства многогранниками // Вестник ЛГУ. Серия математики, физики и химии. 1954. № 2. С. 33-43.
2. Венков Б.А. Об одном классе эвклидовых многогранников // Вестник ЛГУ. Серия математики, физики и химии. 1954. № 2. С. 11-31.
3. Делоне Б.Н. Доказательство основной теоремы стереоэдров // Докл. АН, 1961. Т. 138. № 6. С. 1270-1272.
4. Жижин Г.В. Выпуклые правильные многогранники. С-Пб: Политехника – сервис, 2009. 85 с.
5. Жижин Г.В. Соотношения для числа граней различной размерности в башне  $n$  – мерных выпуклых правильных политопов // Тр. IX Всерос. школы «Математические исследования в естественных науках». Апатиты: КНЦ РАН, 2013.
6. Залгаллер В.А. Выпуклые многогранники с правильными гранями. Ленинград: Наука, 1966. 200 с.
7. Макаров М.В. О выводе четырёхмерных полуправильных многогранников // Вопросы дискретной геометрии. Матем. исследования. Инст. матем. АН Молдавской ССР. Т. 103. Кишинёв: Штииница, 1988. С. 139-150.
8. Шевченко В.Я., Жижин Г.В., Маккей А.Л. О структуре квазикристаллов в пространстве высшей размерности // Изв. РАН. Сер. хим., 2013. № 2. С. 1-6.
9. Coxeter H.S.M. Regular Polytopes. New York, London, 1963. 321 p.
10. Elte E.L. The semi-regular polytopes of the higerspace. Groningen, 1912.
11. Gosset T. On the regular and semi-regular figures in space of  $n$  dimensions // Messenger of Mathematics. 1900. V. 29. P. 43-48.
12. Stringham W.I. Regular figures in  $n$ -dimensional space // Ameri. J. Math., 1880. V. 3. P. 1-14.
13. Stott A.B. Geometrical deduction of semiregular from regular polytopes and space fillings // Verhandelingen der Koninklijke Akademie van Wetenschappen te Amsterdam, 1910. P. 11-1 .
14. Delaunay B. Sur la partition re`guile`re de l`espace a 4 dimensions // Bulletin de L`Acade`mie des Sciences de L`URSS. 1929. P. 147-164.

# **МАТЕМАТИЧЕСКИЕ ИССЛЕДОВАНИЯ В ГЕОЛОГИИ И МИНЕРАЛОГИИ**



# ПОСТРОЕНИЕ МОДЕЛИ НУКЛЕАЦИИ И РОСТА МЕТАМОРФИЧЕСКОГО ГРАНАТА

## I. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ И ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЙ АЛГОРИТМ

Гульбин Ю.Л.

Горный университет, г. Санкт-Петербург, gulbin@spmi.ru

*В докладе приводится описание модели нуклеации и роста метаморфического граната, которая учитывает уравнения классической теории нуклеации, а также уравнение, описывающее кинетику роста сферического кристалла в условиях диффузионного лимита.*

В последние годы, наряду с  $P$ - $T$ - $X$  условиями, в центре внимания исследователей оказались кинетические закономерности метаморфизма. Во многом этому способствовало интенсивное развитие количественных методов анализа фазовых равновесий и интерпретации зональности в таких устойчивых к наложенным изменениям минералах метаморфических пород, как гранат. Были предложены модели, описывающие механизмы порфиروبластеза с учётом зональности в гранате и особенностей структуры его агрегатов [5-7, 10].

Упомянутые модели отражают важные черты кинетики порфиروبластеза и вместе с тем характеризуются рядом ограничений. В частности, они в явном виде не учитывают тепловой баланс в процессе нуклеации, ключевой для понимания термальной истории пород при метаморфизме [9]. Ещё одним недостатком моделей является то, что температурный интервал, в пределах которого образуются зародыши в численных экспериментах, не превышает нескольких градусов. Это не согласуется с данными изучения зональности в гранате среднетемпературных метапелитов, свидетельствующими о прогрессивном характере нуклеации в ходе порфиروبластеза [8], температурный интервал которого достигает многих десятков градусов [1].

Строгое решение задачи может быть получено на базе классической теории нуклеации (КТН), основы которой заложены в работах У.Дж. Гиббса, М. Фольмера, А. Вебера, Р. Беккера, В. Деринга, Я.Б. Зельдовича и др. В качестве моделируемого процесса может быть рассмотрена одна из реакций дегидратации, протекающих в ходе регионального метаморфизма в условиях зеленосланцевой и нижней амфиболитовой фаций. Согласно КТН, кристаллизация первых зародышей граната начинается в тот момент, когда перегрев породы  $\Delta T_0 = T_0 - T_{eq}$  относительно равновесной температуры фазовой реакции  $T_{eq}$  становится заметной величиной (составляет по разным оценкам от нескольких до многих десятков градусов). Для заданной величины перегрева можно оценить радиус критического зародыша, свободную энергию его образования и интенсивность нуклеации.

Допуская, что рост зародышей происходит в условиях диффузионного лимита [2, 3] при постоянном пересыщении межгранулярной среды  $\Delta C = C - C_0$ , где  $C$  – мольная концентрация растворенного вещества на удалении от кристалла,  $C_0$  – равновесная концентрация при заданной температуре  $T$ , можно рассчитать радиус зародышей первой генерации (и более поздних генераций) для всех последующих моментов времени. Например, в случае сферического зародыша, возникшего в момент времени  $\xi$ , в более поздний момент  $\zeta$  ( $\zeta > \xi$ )

$$r(\xi, \zeta) = [2\bar{V}D\Delta C(\zeta - \xi)]^{1/2}. \quad (1)$$

Через малый промежуток времени после начала кристаллизации, благодаря тому, что часть тепла, поступающего извне, расходуется на осуществление фазовой реакции (главным образом на разрушение кристаллических решёток водосодержащих силикатов), величина перегрева изменяется. Это изменение, в свою очередь, вызывает изменение скорости нуклеации (зависящей от перегрева). На первых порах (пока зародышей мало) тепловой эффект фазовой реакции невелик, но впоследствии его роль становится доминирующей (и он подавляет нуклеацию).

С целью количественного выражения рассмотренного сценария запишем формулу интенсивности гетерогенной нуклеации [4]

$$J_s = N_1 \Omega \frac{k_B T}{h} \exp\left(-\frac{\Delta G_A}{RT}\right) \exp\left(-\frac{\Delta G_S^*}{k_B T}\right), \quad (2)$$

где  $N_1$  – число молекул в единичном объёме материнской среды,  $\Omega$  – вероятность образования центра гетерогенной нуклеации,  $\Delta G_A$  – свободная энергия активации перемещения молекул через поверхность раздела фаз,  $\Delta G^*$  – изменение свободной энергии при образовании критического зародыша,  $k_B$  – постоянная Больцмана,  $h$  – постоянная Планка,  $R$  – универсальная газовая постоянная. Перепишем последнее выражение в удобном для расчётов виде. Для этого примем во внимание соотношение между приращением свободной энергии, энтропией фазовой реакции и перегревом:  $\Delta G = -\Delta S \Delta T$ . Тогда, при известных  $T$  и  $\Delta T = T - T_{eq}$  для малого промежутка времени ( $\zeta - d\zeta, \zeta$ )

$$J(\zeta) = K_1 \exp\left(\frac{K_2}{T(\Delta T)^2}\right), \quad (3)$$

где

$$K_1 = N_1 \Omega \frac{k_B T}{h} \exp\left(-\frac{\Delta G_A}{RT}\right),$$

$$K_2 = \frac{4\pi\sigma^3}{3k_B\Delta S^2} (2 - 3\cos\theta + \cos^3\theta) ,$$

$\Delta S$  – энтропия фазовой реакции (приходящаяся на моль граната).

Поскольку объём единичного зародыша, возникшего в момент  $\xi$ , в момент  $\zeta$  составляет

$$V(\xi, \zeta) = \frac{4\pi}{3} [r(\xi, \zeta)]^3 = \frac{4\pi}{3} [2\bar{V}D\Delta C(\zeta - \xi)]^{3/2} , \quad (4)$$

то приращение объёма этого зародыша за малый промежуток времени  $(\zeta - d\zeta, \zeta)$  равно

$$dV(\xi, \zeta) = 4\pi [r(\xi, \zeta)]^2 d\zeta = 8\pi\bar{V}D\Delta C(\zeta - \xi) d\zeta . \quad (5)$$

Приращение объёма всех зародышей, возникших в промежутке времени  $(\xi - d\xi, \xi)$ , в промежутке  $(\zeta - d\zeta, \zeta)$  равно

$$J(\xi) dV(\xi, \zeta) = 8\pi\bar{V}D\Delta C J(\xi)(\zeta - \xi) d\zeta . \quad (6)$$

Количество тепла, расходуемое на это приращение, составляет

$$Q(\xi, \zeta) = \frac{J(\xi) dV(\xi, \zeta)}{\bar{V}} \Delta H = K_3 J(\xi)(\zeta - \xi) d\zeta , \quad (7)$$

где  $K_3 = 8\pi D\Delta H\Delta C$ ,  $\Delta H$  – энтальпия фазовой реакции, пересчитанная на моль граната.

Полное количество тепла, расходуемое в промежутке  $(\zeta - d\zeta, \zeta)$ , получится, если учесть приращение объёма всех зародышей, возникших к моменту  $\zeta$ :

$$Q(\zeta) = K_3 \int_0^{\zeta} J(\xi)(\zeta - \xi) d\zeta d\xi . \quad (8)$$

Отсюда изменение температуры за тот же промежуток времени составляет

$$dT(\zeta) = \frac{\delta Q^{in} - \delta Q(\zeta)}{C_p} = \frac{\delta Q^{in} - K_3 \int_0^{\zeta} J(\xi)(\zeta - \xi) d\zeta d\xi}{C_p} , \quad (9)$$

где  $\delta Q^{in}$  – скорость нагрева (количество тепла, поступающего в систему за малый промежуток времени),  $C_p$  – теплоёмкость породы. На основе записанного выражения величина перегрева в момент  $\zeta$  может быть представлена как

$$\Delta T(\zeta) = \Delta T(0) + \int_0^{\zeta} dT(\zeta) , \quad (10)$$

где

$$\int_0^{\zeta} dT(\zeta) = \frac{Q^{in}\zeta - K_3 \int_0^{\zeta} d\zeta \int_0^{\zeta} J(\xi)(\zeta - \xi)d\zeta d\xi}{C_p}. \quad (11)$$

Заменяя в (10)  $\Delta T(0)$  на  $T(0)$ , можно записать аналогичную формулу для расчёта температуры

$$T(\zeta) = T(0) + \int_0^{\zeta} dT(\zeta). \quad (12)$$

Подставляя (10) и (12) в (3), получаем итоговое выражение для интенсивности нуклеации в момент  $\zeta$

$$J(\zeta) = K_1 \exp \left[ K_2 \left( T(0) + \int_0^{\zeta} dT(\zeta) \right)^{-1} \left( \Delta T(0) + \int_0^{\zeta} dT(\zeta) \right)^{-2} \right]. \quad (13)$$

Заменяя интегралы дискретными суммами, получаем рекурсивную последовательность

$$J_0 = K_1 \Delta t \exp \left[ K_2 T_0^{-1} (\Delta T_0)^{-2} \right],$$

$$J_k = K_1 \Delta t \exp \left[ K_2 \left( T_0 + \frac{Q^{in}k - K_3 \sum_{j=1}^k \sum_{i=0}^{j-1} J_i [(j-i)^{3/2} - (j-i-1)^{3/2}]}{C_p} \right)^{-1} \left( \Delta T_0 + \frac{Q^{in}k - K_3 \sum_{j=1}^k \sum_{i=0}^{j-1} J_i [(j-i)^{3/2} - (j-i-1)^{3/2}]}{C_p} \right)^{-2} \right], k = 1, 2, \dots, n, \quad (14)$$

где,

$$K_3' = \frac{4\pi}{3} (2D\Delta C)^{3/2} \bar{V}^{1/2} \Delta H$$

$\Delta t$  – временной шаг. На её основе задаётся шкала модельного времени  $t_0, t_1, \dots, t_n$  и строится кинетическая кривая нуклеации  $J_k - t_k$ .

Полученный результат можно использовать для расчёта распределения кристаллов граната по размерам. С этой целью достаточно вычислить радиусы зародышей каждой генерации на момент завершения кристаллизации

$$r_{k,n} = \left[ 2\bar{V}D\Delta C(n-k) \right]^{1/2},$$

и нанести их на диаграмму в координатах  $r_{k,n} - N_k$  ( $N_k = J_k$ ).



## Список литературы

1. Гульбин Ю.Л. Гранат-биотитовый геотермометр и оценка температур кристаллизации зональных гранатов метапелитов. I. Реконструкция термальной истории порфиروبласта // Зап. РМО. 2011. № 6. С. 1-19.
2. Гульбин Ю.Л. Композиционная зональность в гранате и реконструкция кинетики метаморфической кристаллизации // Зап. РМО. 2012. № 6. С. 1-17.
3. Гульбин Ю.Л. Моделирование кинетики нуклеации и роста в среднетемпературных метапелитах. I. Теоретические основы // Зап. РМО. 2013. № 6 (в печати).
4. Скрипов В.П., Коверда В.П. Спонтанная кристаллизация переохлажденных жидкостей. М.: Наука, 1984. 232 с.
5. Carlson W.D. The significance of intergranular diffusion to the mechanisms and kinetics of porphyroblast crystallization // Contrib. Mineral. Petrol. 1989. V. 103. P. 1-24.
6. Carlson W.D., Denison C., Ketcham R.A. Controls on the nucleation and growth of porphyroblasts: Kinetics from natural textures and numerical models // Geol. J. 1995. V. 30. P. 207-225.
7. Gaidies F., Pattison D.R.M., de Capitani C. Toward a quantitative model of metamorphic nucleation and growth // Contrib. Miner. Petrol. 2011. V. 162. P. 975-993.
8. Kretz R. A garnet population in Yellowknife schist, Canada // J. Metamorph. Geol. 1993. V. 11. P. 101-120.
9. Ridley J. The effect of reaction enthalpy on the progress of a metamorphic reaction // Metamorphic Reactions: Kinetics, Textures and Deformation. Advances in Physical Geochemistry. 1985. V. 4. P. 80-97.
10. Schwarz J.-O., Engi M., Berger A. Porphyroblast crystallization kinetics: the role of the nutrient production rate // J. Metamorph. Geol. 2011. V. 29. P. 497-512.

## ПОСТРОЕНИЕ МОДЕЛИ НУКЛЕАЦИИ И РОСТА МЕТАМОРФИЧЕСКОГО ГРАНАТА

### II. РЕЗУЛЬТАТЫ ЧИСЛЕННЫХ ЭКСПЕРИМЕНТОВ, ОГРАНИЧЕНИЯ

**Гульбин Ю.Л.**

Горный университет, г. Санкт-Петербург, gulbin@spmi.ru

*Охарактеризованы результаты моделирования кинетических кривых нуклеации и распределений кристаллов граната по размерам. Проанализирована роль уменьшения содержания компонентов новообразованной фазы в межзерновой среде на заключительных стадиях фазовой реакции как фактора, ограничивающего образование зародышей. Обсуждается возможность использования уравнений теплового баланса для описания кинетики дивариантных реакций.*

Ранее были рассмотрены теоретические основы модели нуклеации и роста, которая учитывает уравнения КТН, а также кинетическое уравнение роста сферического кристалла в условиях диффузионного лимита [4]. Обсуждаемая модель реализована в виде двух компьютерных программ на базе Microsoft® Office Excel и Mathcad®. Список параметров, использованных для расчётов, приведен в таблице.

В ходе моделирования значения свободных параметров ( $\Omega$ ,  $\theta$ ,  $\Delta T_0$ ,  $\eta$ ), а также временной шаг  $\Delta t$  подбирались таким образом, чтобы достигалось наилучшее соответствие между рассчитанной гранулометрической кривой и распределением кристаллов граната по размерам в изученном образце – биотит-гранат-ставролитовом сланце из Северного Приладожья [3].

В последнем случае для построения гранулометрического распределения использовались данные измерений истинных размеров кристаллов, наблюдаемых на сколах образца. Это распределение сходно с распределением, рассчитанным методом стереологической реконструкции распределения размеров случайных сечений зёрен [1, 2].

Как показали численные эксперименты, при равномерном нагреве породы кинетическая кривая нуклеации проходит через максимум, после чего величина  $J$  плавно уменьшается (рис. 1 а). Подобная форма кривой нуклеации влияет на форму гранулометрического распределения и служит главной причиной систематического расхождения рассчитанных и наблюдаемых частот встречаемости кристаллов малых размеров (рис. 1 б, 1, 3). Существование такого расхождения, скорее всего, означает, что на заключительных стадиях фазовой реакции, помимо теплового баланса, действует еще один механизм, ограничивающий образование зародышей. Этим механизмом может служить уменьшение содержаний компонентов новообразованной фазы в межзерновой среде, вызванное расходом фаз-реагентов, участвующих в реакции. Данное явление допускает формальное описание в рамках модели проточного реактора с ограниченным количеством осадка (Приложение). Параметрами модели выступают: исходная масса растворяющегося вещества  $M_1$ , концентрация насыщенного раствора  $x^*$ , коэффициенты массообмена  $k_1$  и растворимости  $k_2$ . Графиком зависимости является кривая с очень быстро возрастающим углом наклона (рис. 2).

Для учёта этого эффекта в модель было введено выражение, устанавливающее взаимосвязь между перегревом и пересыщением

$$RT \ln(C/C_0) = \Delta S \Delta T.$$

С его помощью на каждом шаге расчётов: 1) по известному значению  $\Delta T$  вычислялось отношение  $C/C_0$ , 2) это отношение пересчитывалось на базе зависимости вида  $x = \exp(-k't^4)$ , аппроксимирующей кинетическую кривую в модели проточного реактора (рис. 2, врезка).

Уравнения КТН, положенные в основу рассматриваемой модели, разработаны для описания фазовых превращений в простых однокомпонентных системах. В метаморфических системах их аналогом являются моновариантные реакции с участием минералов постоянного состава. Использование подобных уравнений для описания дивариантных реакций требует учё-

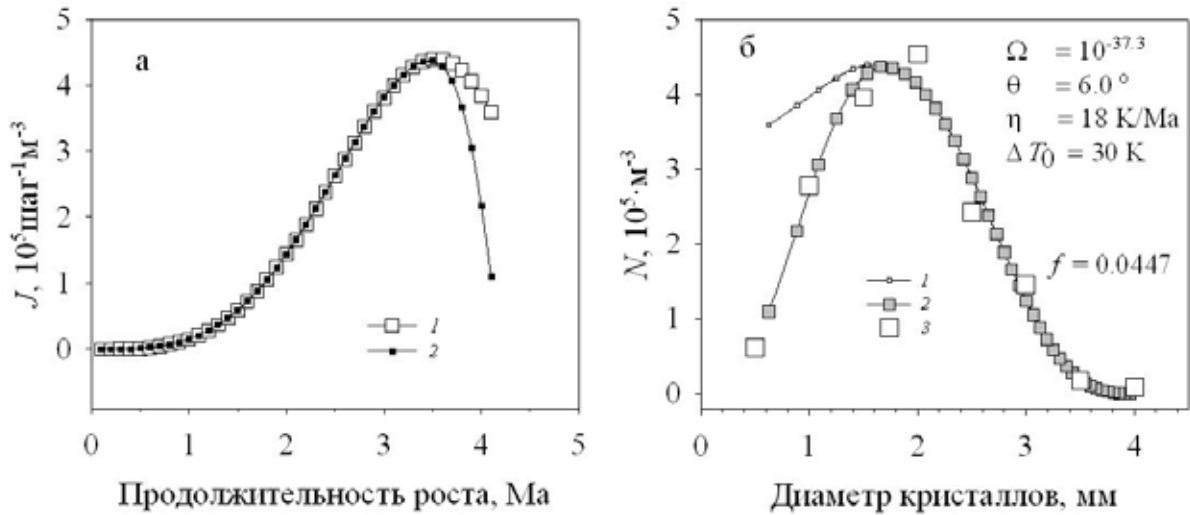


Рис. 1. Результаты моделирования кинетики нуклеации и роста граната. а – кинетические кривые нуклеации, б – granulометрические кривые (1-2 – модельные кривые, построенные на основе уравнений теплового баланса без учёта (1) и с учётом (2) кинетической зависимости концентрации Al в межзерновой среде, описываемой моделью проточного реактора, 3 – наблюдаемое распределение кристаллов граната по размерам в обр. Н 4/1). Шаг моделирования  $\Delta t = 100 \text{ ka}$ .  $f$  – объёмная доля граната.

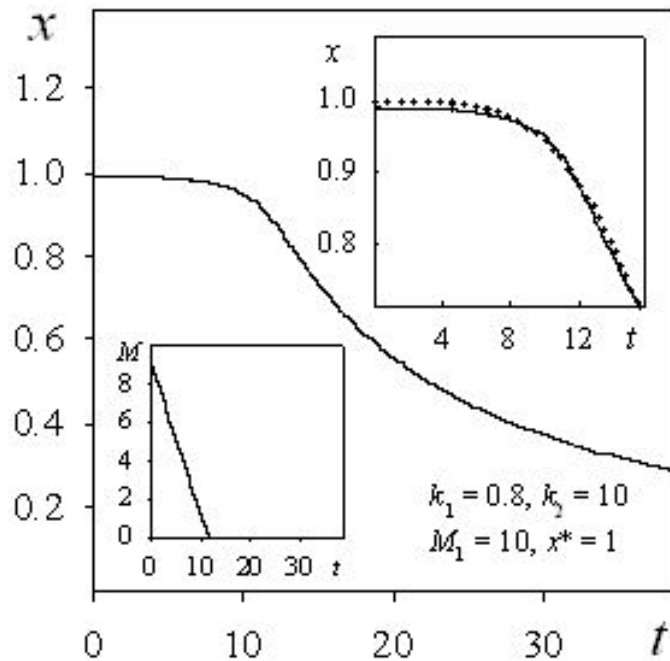


Рис. 2. Модель проточного реактора с ограниченным количеством осадка. Прерывистой линией показана кривая вида  $x = \exp(-k't)$ ,  $k' = 6 \cdot 10^{-6}$ , аппроксимирующая зависимость  $x - t$ .

та зависимости равновесной температуры реакции  $T_{eq}$  от степени завершенности фазового перехода. На рис. 3 показаны примерные результаты моделирования, полученные с учётом этой зависимости.

Таблица. Входные параметры

Символ	Параметр, единица измерения	Численное значение
$T_0$	Температура породы в момент начала фазовой реакции, К	793
$\Delta T_0$	Перегрев породы в момент начала фазовой реакции, К	14–120
$U$	Поверхностная энергия граната, Дж/м <sup>2</sup>	1.0
$\bar{V}$	Мольный объём граната, м <sup>3</sup> /моль	$1.15 \cdot 10^{-4}$
$\Delta H$	Энтальпия образования граната, Дж/моль	220,000
$\Delta S$	Энтропия образования граната, Дж/моль·К	237
$\theta$	Краевой угол, °	5–11
$C_{Al}$	Концентрация Al в межзерновой среде, моль/м <sup>3</sup>	270
$\Omega$	Вероятность образования центра гетерогенной нуклеации	$10^{-39}$ – $10^{-33}$
$D$	Коэффициент межгранулярной диффузии, м <sup>2</sup> /с	$10^{-18}$
$\Delta G_A$	Энергия активации роста зародыша, Дж/моль	137,000
$\eta$	Скорость нагрева метаморфической толщи, К/Ма	5–45
$\Gamma$	Плотность кристаллического сланца, кг/м <sup>3</sup>	2700
$C_p$	Удельная теплоёмкость кристаллического сланца, Дж/кг·К	982
$k_B$	Постоянная Больцмана, Дж/К	$1.38 \cdot 10^{-23}$
$h$	Постоянная Планка, Дж·с	$6.63 \cdot 10^{-34}$
$R$	Универсальная газовая постоянная, Дж/моль·К	8.314

### Приложение

Рассмотрим проточный реактор или резервуар, на дне которого находится слой растворимого осадка. В резервуар втекает чистая вода, вытекает водный раствор, объём системы при этом остается неизменным. Если осадка много, а скорость растворения многократно превышает скорость массообмена, то в системе долгое время присутствует насыщенный раствор. Баланс между растворением и выносом сохраняется до какого-то момента, затем, вследствие уменьшения массы осадка, концентрация раствора начинает быстро падать.

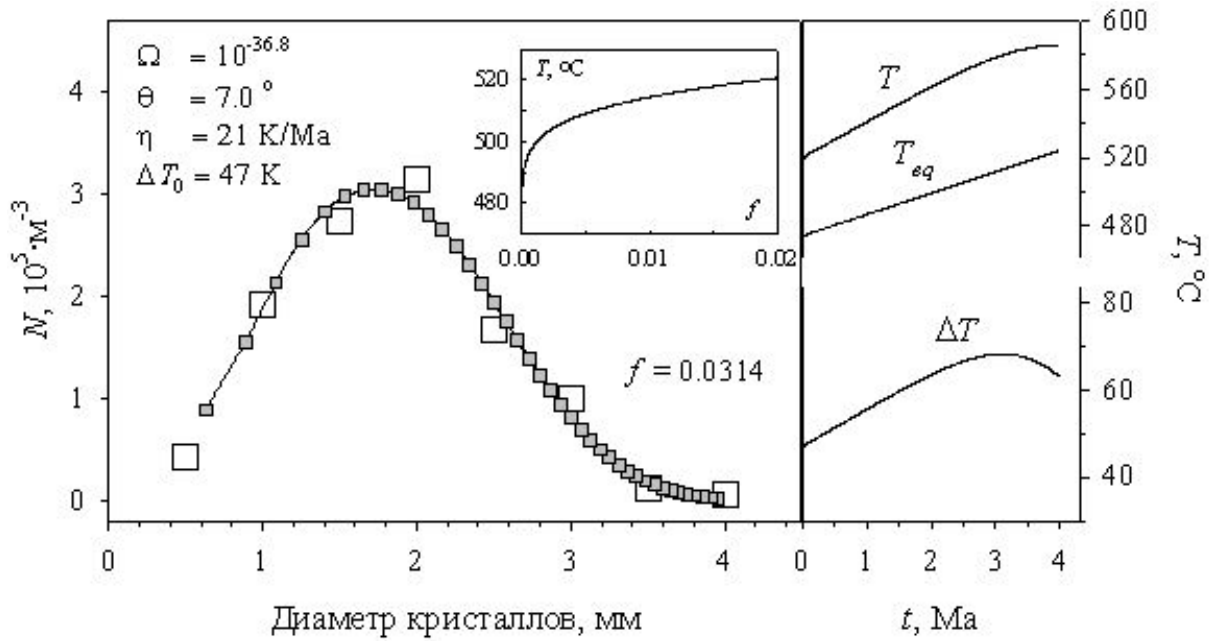


Рис. 3. Результаты моделирования кинетики нуклеации и роста граната, полученные с учётом зависимости  $T = T_0 + 1.25t$ .

Пусть исходная масса вещества, содержащегося в резервуаре и отнесённого к единичному объёму раствора, равна

$$M^0 = M_1 + x,$$

где  $M_1$  – исходная масса осадка,  $x$  – массовая концентрация раствора. Если в начальный момент времени ( $t = 0$ ) раствор насыщен ( $x = x^*$ ), то

$$M_1 = M^0 - x^*.$$

В момент времени  $t$ , предшествующий полному растворению осадка, его масса равна

$$M_1(t) = M^0 - x^* - k_1 \int_0^t x dx,$$

где  $k_1$  – коэффициент массообмена (зависящий от скорости течения раствора).

Известно, что в закрытой системе скорость убывания массы растворимого осадка задаётся выражением [5]

$$-\frac{dM_1}{dt} = kF(x^* - x),$$

где  $k$  – коэффициент растворимости,  $F$  – поверхность растворяющегося вещества, связанная с массой соотношением  $F = g \cdot M_1^{2/3}$ , где  $g$  – постоянная, зависящая от формы и количества частиц осадка. Эта скорость численно равна скорости увеличения концентрации раствора в закрытой системе. В рассматриваемой открытой системе скорость изменения концентрации раствора определяется дифференциальным уравнением

$$\frac{dx}{dt} = k_2 M(t)(x^* - x) - k_1 x$$

где  $k_2 = kg$ ,  $M(t) = [M_1(t)]^{2/3}$  при  $t < t_s$  или обращается в 0 при  $t \geq t_s$  ( $t_s$  – момент полного растворения осадка). Первое слагаемое в записанном уравнении определяет скорость растворения, второе слагаемое – скорость массообмена. Его решением служит зависимость концентрации раствора от времени. С помощью численных методов решения ОДУ (например, разностных методов Адамса) может быть построен график изучаемой зависимости.

### Список литературы

1. Гульбин Ю.Л. Стереологические реконструкции при петрографических исследованиях: новые подходы и решения // Тр. Всерос. научн. школы «Математические исследования в кристаллографии, минералогии и петрографии». Апатиты, 3-7 окт. 2005 г. Апатиты: Изд-во К & М, 2005. С. 195-202.
2. Гульбин Ю.Л. Статистический анализ задачи стереологической реконструкции размеров зёрен в агрегате // Тр. II Всерос. научн. школы «Математические исследования в кристаллографии, минералогии и петрографии». Апатиты, 16-17 окт. 2006 г. Апатиты: Изд-во К & М, 2006. С. 108-113.
3. Гульбин Ю.Л. Гранат-биотитовый геотермометр и оценка температур кристаллизации зональных гранатов метапелитов. I. Реконструкция термальной истории порфиروبластеза // Зап. РМО. 2011. № 6. С. 1-19.
4. Гульбин Ю.Л. Построение модели нуклеации и роста метаморфического граната. I. Постановка задачи и вычислительный алгоритм // Тр. IX Всерос. научн. школы «Математические исследования в естественных науках». Апатиты, 10-11 окт. 2013 г. Апатиты: Изд-во К & М, 2013. С. 44-48.
5. Каражанов Н.А. Основы кинетики растворения солей. 1989. Алма-Ата: Наука, 1989. 189 с.

## РЕКОНСТРУКЦИЯ ГЕОДИНАМИЧЕСКИХ ОБСТАНОВОК ФОРМИРОВАНИЯ ГЕООБЪЕКТОВ ПО ПЕТРОГЕОХИМИЧЕСКИМ ДАННЫМ

**Мартынов Е.В.**

Геологический институт КНЦ РАН, г. Апатиты, mart@geoksc.apatity.ru

*В статье изложен авторский подход к решению задачи реконструкции геодинамических режимов формирования геологических объектов докембрия на основе петрогеохимических параметров горных пород. Дана математическая модель на основе поиска оптимального решения с использованием дополнительной информации в виде системы частично упорядоченных множеств.*

Методы реконструкции геодинамических обстановок формирования геобъектов по петрогеохимическим данным представляют большой интерес

для геологов. Но корректно решить эту задачу с помощью существующих методов сопоставления параметров химического состава горных пород объектов докембрия и фанерозоя невозможно. Необратимость эволюции Земли приводит к изменению химического состава пород и невозможности ретроспективного прогноза их исходных составов для объектов, сформированных в различных геодинамических обстановках. Это приводит к необходимости разработки новых математических моделей для такого рода исследований. Изучение этого вопроса автором работы позволило сформулировать принципы решения задачи реконструкции с помощью поиска трендов на совокупностях частично упорядоченных множеств. Это предполагает введение отношения частичного порядка на совокупности множеств (в частности, «временного» тренда) [1, 3] и поиск трендов относительно этого отношения через решение задачи оптимизации.

Трудность решения такого рода проблемы заключается в том, что при сравнении характеристик исследуемых множеств приходится учитывать существенное отличие распределений параметров для этих множеств от классических распределений (в частности, от нормального). Это, в свою очередь, предполагает использование критериев непараметрической статистики. Последнее обстоятельство приводит к необходимости решения задачи оптимизации (поиск абсолютного экстремума) с наличием многих локальных экстремумов целевой функции. Более того, структура целевой функции меняется при переходах от итерации к итерации. Выход из этой ситуации может быть найден в использовании «базы знаний». Последнее предполагает наличие базы, состоящей из широкого набора трендов, имеющих в литературных источниках и интерпретированных с точки зрения конкретной области знания. Эти тренды используются в качестве начального приближения для поиска оптимального решения задачи, для выбора направления поиска в интерактивном режиме с использованием симплекс-метода [6]. Частичный порядок может быть представлен в виде орграфа (рис. 1).

Решение задачи реконструкции геодинамических режимов формирования объектов докембрия и моделирования их петрогеохимических характеристик предлагается начинать с формирования банка данных, содержащего информацию о химических составах горных пород метаморфических комплексов докембрия  $D = \{D_j\}$  [2] и образований фанерозоя  $A = \{A_i\}$ . Совокупности объектов фанерозоя, охарактеризованные составами слагающих их пород, используются в качестве эталонов обстановок формирования породных ассоциаций. Удобной математической моделью для представления химического состава отдельного комплекса горных пород, охарактеризованных  $n$  параметрами, является  $n$ -мерная случайная величина. В этом случае химические составы совокупности разновозрастных структур  $A$  и  $D$  могут быть формально представлены совокупностями  $n$ -мерных случайных величин  $X = \{X_j\}$  и  $Y = \{Y_j\}$ . Для комплексов фанерозоя  $A$  известны некоторые ха-

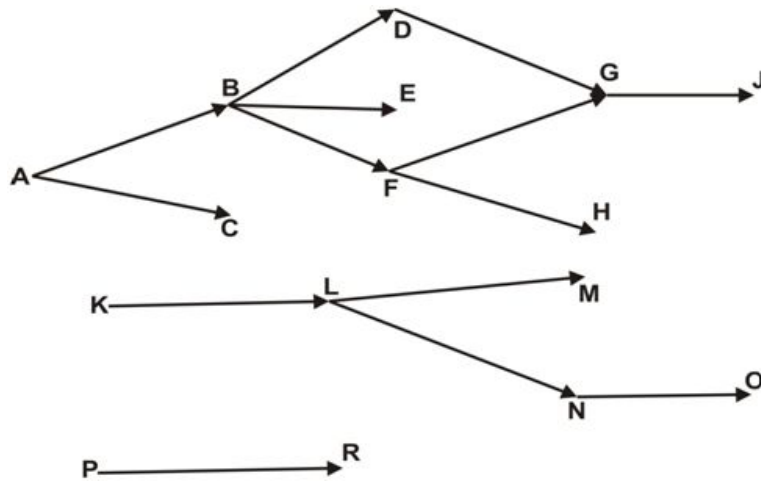


Рис. 1. Пример орграфа, реализующего частичный порядок.

характеристики обстановок их формирования  $\{p_i\}$ , причём значения каждой из них заданы в виде отношения частичного порядка на множестве  $A^*A$ . Аналогичным образом могут быть заданы возрастные характеристики.

Пусть  $Z = \{Z_i\}$  – множество  $n$ -мерных случайных величин  $Z = \{Z_i\}$  и на множестве  $Z^*Z$  задано отношение частичного порядка « $\ll$ ». Если  $c$  –  $n$ -мерный вектор единичной длины, то скалярное произведение  $(c, Z_i)$  является одномерной случайной величиной. Её можно охарактеризовать математическим ожиданием  $M\{(c, Z_i)\}$ . Для сравнения математических ожиданий использовался ранговый статистический критерий Пури-Сена-Тамуры о равенстве средних. При этом необходимо произвести оценку средних (в качестве этой оценки выбирается медиана  $Me\{(c, Z_i)\}$ ) и вычислить статистику Пури-Сена-Тамуры:

$$\Lambda((c, Z_i), (c, Z_j)).$$

Статистическое моделирование характеристики, множество значений которой задано отношением « $\ll$ », заключается в поиске такого  $n$ -мерного вектора  $c$  единичной длины, для которого, при выбранном уровне значимости  $\delta$ , выполняются условия:

$$\begin{aligned} Me\{(c, Z_i)\} &< Me\{(c, Z_j)\}, \\ \Lambda((c, Z_i), (c, Z_j)) &> \chi^2(\delta); \end{aligned}$$

(здесь  $\chi^2(\delta)$  – значение квантили  $\chi^2$ -распределения для уровня значимости  $\delta$  для всех пар  $\langle Z_i, Z_j \rangle$  таких, что  $Z_i \ll Z_j$ ).

Выбор указанного статистического критерия определяется его устойчивостью относительно нарушения условия нормальности (и даже унимодальности) распределений случайных величин, а также относительно наличия в выборках аномальных наблюдений. Эти нарушения (и наличие аномальных наблюдений) характерны для реальных выборок.

Содержательно задача моделирования сводится к аппроксимации отношения частичного порядка линейной функцией  $F: Z \rightarrow R$ , связанной с параме-



трами химического состава образований в виде  $F(Z_i)=M\{(c,Z_i)\}$ . Качество аппроксимации оценивается значением функционала:

$$J(c) = \min_U (\Lambda(c, Z_i) (c, Z_j)),$$

где  $U = \{ \langle Z_i, Z_j \rangle | Z_i < Z_j \}$ .

Вектор  $c$ , который будем называть фактором частичного порядка, характеризует общую направленность изменчивости  $F$  (рис. 2) химических составов относительно частичного порядка.

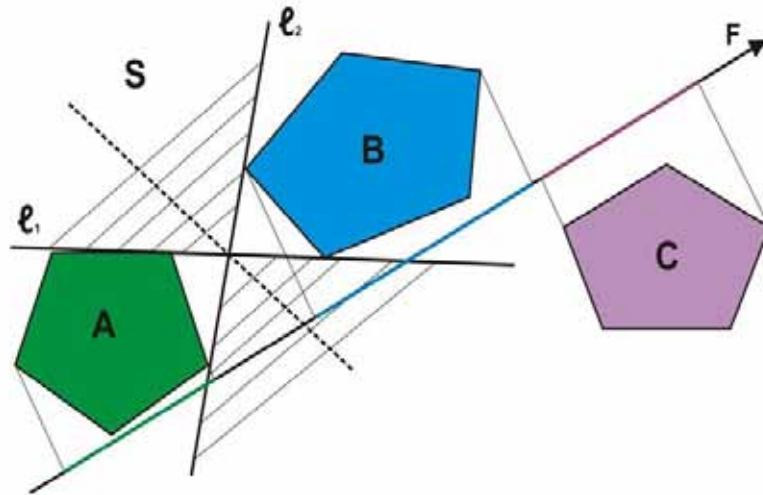


Рис. 2. Иллюстрация к способу аппроксимации отношения частичного порядка  $A < B < C$  линейной функцией  $F$ .

Предлагается начинать процедуру реконструкции геодинамических режимов по петрогеохимическим данным с решения задачи распознавания первичной природы пород, слагающих эти комплексы. Основой распознавания служит классификация горных пород по «однородным» группам в рамках выбранной систематики. Автор остановился на классификации по А.А. Предовскому [4]. Решение этой задачи осуществляется методом, который позволяет описать первичную природу метаморфитов в виде двух совокупностей выборок. Во-первых, выборками, состоящими только из однозначно классифицированных образцов. Во-вторых, выборками, расширенными за счёт образцов, отнесённых к нескольким группам одновременно.

Выборки этих совокупностей, соответствующие одноимённым группам, сравниваются между собой по критерию Пури-Сена-Тамуры о равенстве средних. В случае, когда гипотеза о равенстве средних относительно одной из групп, для выбранного уровня значимости, отвергается, необходимо осуществить два варианта реконструкции обстановок формирования протолитов изучаемых комплексов докембрия (отдельно для каждой совокупности) с последующим сопоставлением результатов, полученным по этим вариантам. В противном случае, результаты реконструкции по обоим вариантам совпадают.

В качестве следующего этапа процедуры реконструкции предлагается использовать предлагаемую ниже схему моделирования характеристик обстановок формирования комплексов фанерозоя. Для этих целей необходимо сравнить разновозрастные комплексы по химизму слагающих их пород относительно данной характеристики. Для этого нужно обеспечить переход  $n$ -мерных случайных величин  $\{X_i\}$  к некоторой линейной функции, связанной с этими величинами и обладающей некоторыми оптимальными свойствами. Такой переход может быть осуществлен путём аппроксимации введенного отношения частичного порядка линейной функцией  $P$ , которому соответствует фактор частичного порядка  $c$ , с максимальным значением функционала качества  $J(P)$ . Для этого следует решить оптимизационную задачу:

$$J(P) \rightarrow \max$$

при ограничениях:

$$Me\{(c, X_i)\} < Me\{(c, X_j)\} \text{ и } \Lambda((c, X_i), (c, X_j)) > \chi^2(\delta)$$

для всех пар  $\langle X_i, X_j \rangle$  таких, что  $X_i < X_j$ . Тогда в качестве функционала выбирается такая линейная функция  $P$ , что выполняется условие  $P(X_i) = M\{(c, X_i)\}$ .

При решении этой задачи мы исходим из того, что каждая обстановка  $G_i$  из эталонного множества  $\{G_i\}$  должна быть охарактеризована совокупностью объектов фанерозоя  $A_i = \{A_{ik}\}$ , сформировавшихся в соответствующих условиях. Химические составы породных ассоциаций  $\{A_{ik}\}$  представлены в виде совокупности  $n$ -мерных случайных величин  $X_i = \{X_{ik}\}$ . Для построения системы характеристик отличий фанерозойских комплексов необходимо для каждой пары  $\langle G_i, G_j \rangle$  построить систему дискриминантных функций, заданных на множестве случайных величин и обеспечивающую оптимальное разделение совокупностей  $X_i$  и  $X_j$ . Так как для каждой пары  $\langle G_i, G_j \rangle$  можно ввести отношение частичного порядка « $<$ » ( $X_{ik} < X_{jr}$ , если  $i < j$ ), то для каждой пары совокупностей случайных величин  $\langle X_i, X_j \rangle$  строится линейная функция  $P_{ij}$  с максимальным значением качества аппроксимации  $J(P_{ij})$ . Если для выбранного уровня значимости такой показатель найден, то задача решена. В противном случае, необходимо одну из совокупностей, например  $X_i$ , разбить на несколько, возможно пересекающихся, множеств  $\{Z_{il}\}$ .

Основой для такого разбиения может служить информация алгоритма о случайных величинах наиболее «препятствующих» разделению на множества. Затем для каждой пары  $\langle Z_{il}, X_j \rangle$  осуществляется поиск линейной функции, аппроксимирующей отношение частичного порядка  $P_{ijl}$ . Если и в этом случае окажется, что для некоторой  $\langle Z_{il}, X_j \rangle$  невозможно построить линейную функцию с требуемым уровнем значимости, то следует произвести более дробное разбиение множества  $X_i$  и повторить попытку построения новой системы  $\{P_{ijl}\}$ . Процедура заканчивается построением  $\{P_{ijl}\}$  (и соответственно  $\{c_{ijl}\}$ ) либо выводом об отсутствии отличий по химизму между совокупностями  $A_i$  и  $A_j$ .

В случае, когда построенная система состоит из нескольких линейных функций, ее следует оптимизировать. Этот шаг определяется требованием выбора наиболее устойчивого, из всех возможных, описания отличий. Для оптимизации системы  $\{P_{ijl}\}$  разработан метод, суть которого заключается в следующем. Охарактеризуем построенную систему критерием качества:

$$J_0 = \min \{J(P_{ijl})\}.$$

Степень устойчивости описания предлагается характеризовать функционалом:

$$J = \min \{(c_{ijk}, c_{ijr})\},$$

принимая значения в промежутке  $[-1, 1]$ . Такой выбор определяется представлением о максимальной устойчивости в случае линейной разделимости выпуклых оболочек множеств  $\{M(X_{ik})\}$  и  $\{M(X_{jk})\}$  и, следовательно, достаточности одной линейной функции для описания отличий рассматриваемых совокупностей.

Исходя из изложенного, выбор устойчивого описания может быть осуществлён в результате решения, для выбранного уровня значимости  $\delta$ , оптимизационной задачи:

$$J \rightarrow \max$$

при ограничениях:

$$J_0 > \chi^2(\delta), \quad \text{Me}\{(c_{ijl}, X_{ik})\} < \text{Me}\{(c_{ijl}, X_{jr})\}, \quad \Lambda((c_{ijl}, X_{ik}), (c_{ijl}, X_{jr})) > \chi^2(\delta)$$

для всех  $\langle X_{ik}, X_{jr}, l \rangle$  таких, что  $X_{ik} < X_{jr}$  и  $X_{ik}$  из  $Z_{il}$ .

Содержательно эта задача сводится к установлению характера отличий параметров химического состава комплексов фанерозоя, сформировавшихся в разных геодинамических обстановках. Учёт особенностей химических составов комплексов докембрия при реконструкции обстановок формирования их протолитов можно осуществить следующим методом.

Особенности химических составов пород для комплексов докембрия  $\{M(Y_l)\}$  относительно фанерозоя  $\{M(X_k)\}$  можно определить системой  $\{f_i\}$  факторов частичного порядка  $X < Y$ , полученной при моделировании характеристик отличий по химическому составу фанерозойских и докембрийских образований. Для учёта этих особенностей автором предлагается процедура многовариантной (каждому фактору  $f_i$  соответствует вариант  $V_i$ ) реконструкции.

В основе способа реконструкции по каждому варианту  $V_i$  лежит метод, позволяющий получать оценки, характеристик обстановок формирования протолитов докембрийских комплексов, которые не зависят от возможных смещений  $\{M(X_k)\}$  и  $\{M(Y_l)\}$  относительно фактора отличий  $f_i$ . Такая независимость достигается в результате снижения размерности признакового пространства в результате перехода от исследования  $n$ -мерных случайных вели-

чин к  $(n-1)$ -мерным путём проектирования реализаций  $\{X_k\}$  и  $\{Y_l\}$  на гиперплоскость, ортогональную  $f_i$ , с последующим моделированием изучаемых характеристик в пространстве меньшей размерности.

Необходимость моделирования характеристик в новом признаковом пространстве определяется возможным отсутствием, для выбранного уровня значимости, аппроксимации в этом пространстве какой-либо характеристики линейными функциями. Для оценки соответствия обстановок формирования протолитов докембрийских комплексов эталонам фанерозоя введена мера сходства, которая определяется как независимая, от выявленных отличий образований фанерозоя и докембрия, функция параметров химического состава.

Процедура многовариантной реконструкции (рис. 3) завершается сопоставлением результатов, полученным для каждого из вариантов. Степень их соответствия определяет уровень достоверности результатов реконструкции.

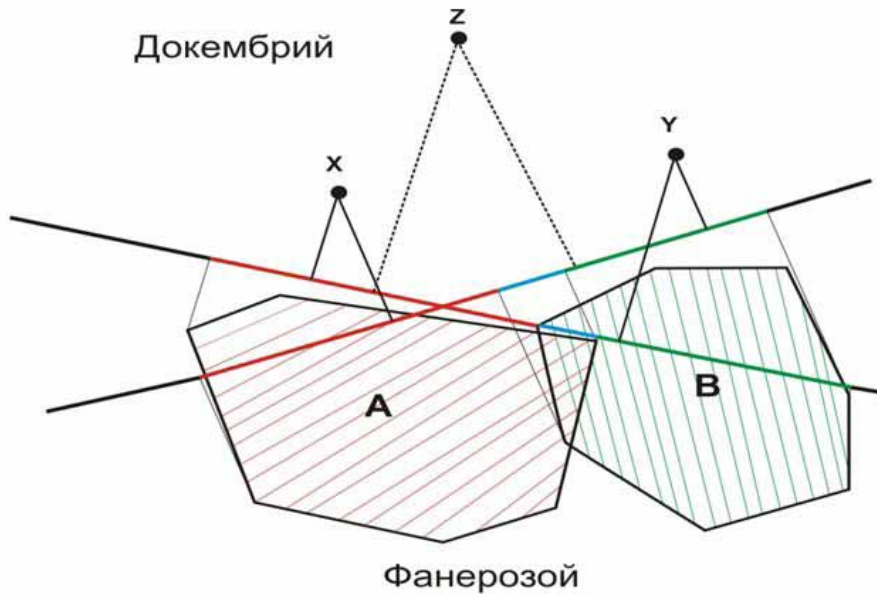


Рис. 3. Иллюстрация процедуры многовариантной реконструкции: объект  $x$  относят к обстановке  $A$ , объект  $y$  – к обстановке  $B$ , а для объекта  $z$  достоверного решения задачи нет.

Следует иметь в виду, что химические составы пород геологических объектов обычно представлены неоднородными выборками (полимодальное распределение составов, наличие аномальных значений и т. п.), поэтому использование методов прямого сопоставления на основе известных статистических критериев представляется некорректным. Кроме того, сравниваемые объекты часто представлены несколько различающимися по набору разновидностей пород ассоциациями.

В такой ситуации сначала необходимо провести сравнение для каждой породной разновидности, входящей в состав обеих ассоциаций, и только затем будет возможно получить оценку степени соответствия этих ассоциаций «в целом». При этом вывод о степени соответствия образований должен осуществляться с учётом степени соответствия спектров породных разновидностей в ассоциациях и статистических оценок соответствия составов однотипных пород [3].

Ввиду того, что проблема выбора меры близости (отличия) составов породных ассоциаций является одной из ключевых при выборе похожих объектов, остановимся на ней более подробно. Рассмотрим, к примеру (рис. 4), условные ассоциации горных пород – А и В. Первая представлена выборкой составов пород, слагающих эту ассоциацию,  $X = \{x_i\}$ , где  $x_i$  –  $n$ -мерный вектор состава соответствующей пробы,  $n$  – число измеренных параметров состава. Аналогично, вторая представлена выборкой  $Y = \{y_j\}$ . Таким образом, каждая из породных разновидностей ассоциации А представлена соответствующей выборкой ( $k$ -ой разновидности соответствует выборка  $X_k$ ). При этом выполнено соотношение  $X = \cup X_k$  (для ассоциации В имеет место соотношение  $Y = \cup Y_l$ ).

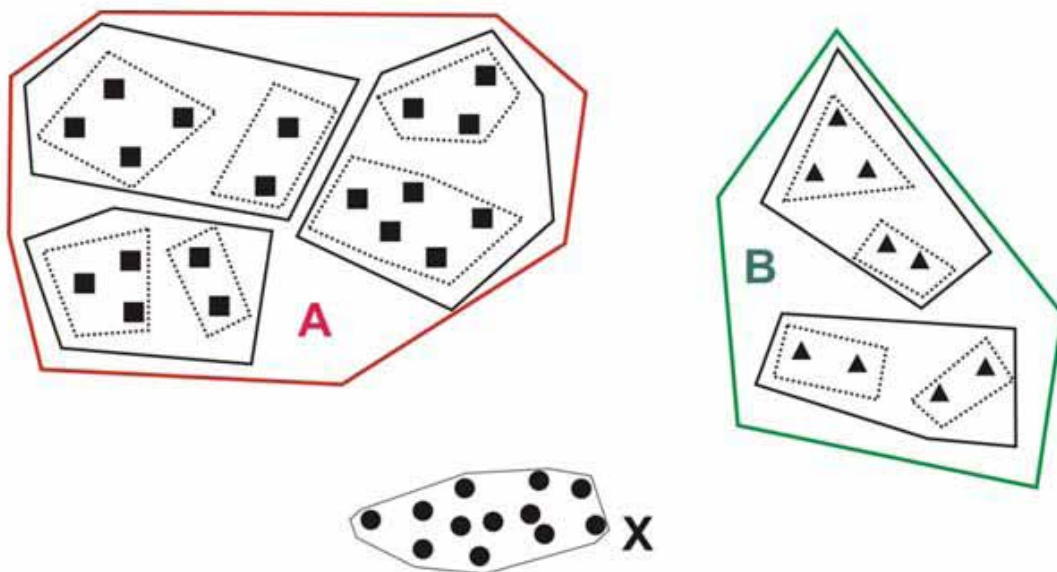


Рис. 4. Иллюстрация к задаче оценки степени «сходства-отличия» объектов, охарактеризованных неоднородными выборками (степень сходства  $X$  с А и В).

Для сравнения однотипных породных разновидностей (в рамках выбранной классификации) из ассоциаций А и В, представленных выборками  $X_k$  и  $Y_l$ , введём меру их близости (отличия). А именно, будем говорить об их полном соответствии ( $X_k \equiv Y_l$ ), если многомерные средние этих выборок отличаются статистически незначимо при выбранном уровне значимости  $\alpha$  (обычно выбирается  $\alpha=0.05$  или  $\alpha=0.01$ ). При сравнении средних можно использовать непараметрический критерий Пури-Сена-Тамуры. В случае, ког-

да нет полного соответствия между  $X_k$  и  $Y_j$ , для оценки степени отличия составов можно воспользоваться значением статистики Пури-Сена-Тамуры  $\Lambda(X_k, Y_j)$ , а именно: чем больше значение этой статистики, тем выше степень отличия составов.

Если сравниваемые ассоциации  $A$  и  $B$  представлены одним и тем же набором породных разновидностей, то в качестве меры близости (отличия) может быть выбрана следующая величина:  $\rho(A, B) = E\{r(x_{ki}, co(Y_k))\}$ , где  $r(x_{ki}, co(Y_k))$  – обычное евклидово расстояние от состава пробы  $x_{ki}$  из  $k$ -ой породной разновидности ассоциации  $A$  до выпуклой оболочки  $co(Y_k)$  выборки составов  $k$ -ой разновидности ассоциации  $B$ ,  $E\{\cdot\}$  – среднее этих расстояний для всех проб породной ассоциации  $A$ .

При сравнении некоторой эталонной ассоциации  $A$  с некоторой совокупностью ассоциаций  $\{B_1, \dots, B_m\}$  ассоциация  $B_j$  будет наиболее близка к  $A$ , по сравнению с другими, если при выбранном уровне значимости выполняются статистические гипотезы:  $\rho(A, B_j) < \rho(A, B_k)$  для всех  $k \neq j$ . Причём для проверки гипотезы  $\rho(A, B_j) < \rho(A, B_k)$  предлагается использовать упомянутый выше критерий Пури-Сена-Тамуры.

При сравнении ассоциаций пород, подвергнувшихся метаморфизму, использование этой меры связано с рядом ограничений. Во-первых, в ходе метаморфических преобразований в породах могут существенно меняться содержания некоторых компонентов. Во-вторых, использование указанной меры предполагает, что все породы исследуемых ассоциаций надёжно классифицированы относительно их первичной природы по породным разновидностям. Поэтому сначала необходимо осуществить пересчёт химических составов пород, слагающих изучаемые ассоциации, исключив влияние компонент состава, наименее устойчивых в процессах метаморфизма.

Это можно сделать следующим образом: выбрав устойчивые компоненты состава, пересчитать их на 100%, исключив из рассмотрения остальные. После этого, сравнение ассоциаций  $A$  и  $B$  предлагается проводить по схеме, приведённой ниже. Одна из выборок составов, например  $Y$  (ассоциация  $B$ ), подвергается кластеризации (разделению на некоторое заранее неизвестное число статистически однородных непересекающихся групп):  $Y = \{Y_j\}$ . Алгоритм такого рода кластеризации известен [5]. Затем вычисляется мера сходства между  $A$  и  $B$ :

$$\rho(A, B) = E\{\min_k r(x_i, co(Y_k))\}.$$

Здесь  $r(x_i, co(Y_k))$  – обычное евклидово расстояние от состава пробы  $x_i$  из ассоциации  $A$ , охарактеризованной выборкой  $X$ , до выпуклой оболочки кластера, представленного выборкой  $Y_k$ , а  $E\{\cdot\}$  – оценка среднего этих расстояний для всех проб породной ассоциации  $A$ . В качестве этой оценки можно выбрать медиану.

Отметим, что соотношение  $\rho(A,B)=\rho(B,A)$  чаще всего не выполняется. Поэтому наиболее надёжный результат при сравнении эталонной ассоциации  $A$  с некоторой совокупностью ассоциаций  $\{B_1, \dots, B_m\}$  будет получен в следующем случае: ассоциация  $B_j$  наиболее близка к  $A$ , по сравнению с другими, если  $\rho(A,B_i) < \rho(A,B_j)$ ,  $\rho(B_i,A) < \rho(B_j,A)$  для любого  $i \neq j$  и эти отношения статистически значимы при выбранном уровне значимости.

Если сравниваемые объекты представлены различающимися по набору разновидностей пород ассоциациями, то для оценки степени отличий породных ассоциаций необходимо предварительно выполнить определённые действия. В частности, необходимо провести процедуру реконструкции пород по их первичной природе.

Породы сравниваемых ассоциаций классифицируются по группам (породным разновидностям). Затем формируются выборки составов пород из разновидностей, присутствующих одновременно во всех сравниваемых ассоциациях. И уже для построенных таким образом выборок проводится оценка их соответствия указанным способом.

Для более полной реализации процедуры реконструкции геодинамических режимов докембрия автор предложил метод «смещений» образов в признаковом пространстве. Суть его заключается в следующем. Вначале вычисляется вектор  $v$ , который определяет «направление смещения» совокупности образов объектов докембрия ( $Y$ ) относительно эталонов (объектов фанерозоя), характеризующих химические составы объектов, сформированных в различных режимах ( $X$ ), т.е.  $Y=v+X$ . Это производится путём аппроксимации направления с помощью задания отношения частичного порядка (т.е. последовательности формирования геобъектов во времени) и нахождения вектора «направления смещения» химического состава в ходе эволюции Земли указанным способом. Возможно существование нескольких таких векторов («независимых» друг от друга). При этом используются оценки «сходства-отличия», полученные описанным способом, для нескольких уровней значимости. Совпадение результатов реконструкции для разных уровней значимости повышает достоверность выводов.

Проблема заключается в получении оценки уровня «смещения» химического состава объектов докембрия относительно фанерозоя в заданном направлении  $v$ . Автор видит выход из этого положения в введении поправки  $Y=\lambda*v+X$ , где  $\lambda$  – вещественное число, которое необходимо определить. Поиск  $\lambda$  предлагается осуществлять подбором, исходя из принципа постепенного приближения к решению. Как показывает опыт решения задачи, постепенное увеличение  $\lambda$  ведёт к монотонному приближению к решению, а затем результат изменяется скачкообразно. Это придаёт уверенности в правомерности использования метода. Хотя проблема требует дальнейших исследований.

### Список литературы

1. Мартынов Е.В. Реконструкция обстановок формирования протолитов метаморфических комплексов докембрия на основе статистического моделирования их характеристик по петрогеохимическим данным. Автореф. дисс. уч. ст. к.г.-м.н. СПб., 1997. 25 с.
2. Антонюк Е.С., Мартынов Е.В., Предовский А.А., Квашнина Г.В. Основы создания автоматизированного информационного банка данных по петрогеохимической характеристике докембрия Мурманской области «Тиетта». Методические рекомендации. Апатиты, 1984. 51 с.
3. Мартынов Е.В. Математические методы моделирования параметров геологических процессов и явлений. Мурманск, 2011. 136 с.
4. Предовский А.А. Геохимическая реконструкция первичного состава метаморфизованных вулканно-осадочных образований докембрия. Апатиты: Изд-во КФ АН СССР, 1970. 115 с.
5. Родионов Д.А. Статистические методы разграничения геологических объектов по комплексу признаков. М.: Недра, 1968. 158 с.
6. Nelder J.A., Mead R. A Simplex method for function minimization // Comp. J. 1964. N 7. P. 308-313.

## ДОПУСТИМОСТЬ ПРИМЕНЕНИЯ МЕТОДА НАИМЕНЬШИХ КВАДРАТОВ ДЛЯ РАСЧЕТА ЭНЕРГИИ АКТИВАЦИИ ХИМИЧЕСКИХ РЕАКЦИЙ

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

ИГиП ДВО РАН, г. Благовещенск, pushkin@ascnet.ru

*В данной работе предлагается метод наименьших квадратов для расчёта энергии активации химических реакций. Изучается вопрос о допустимости метода для расчёта энергии активации путем проверки гипотезы о значимости коэффициента корреляции между данными, используемыми для расчёта. Апробация метода проводится на примере исследования химических процессов, протекающих при переработке алюмосиликатного сырья. Проводится сравнение результатов расчётов по методу наименьших квадратов с использовавшимся ранее расчётным методом.*

Россия входит в число стран с развитой алюминиевой промышленностью, занимая второе место по производству первичного алюминия в мире (4.173 млн. т в 2012 г.) [1]. Однако, как и другие развитые страны, вследствие недостатка высококачественных бокситов она вынуждена их импортировать. В то же время Россия обладает почти неограниченными запасами небокситового алюмосиликатного сырья. Амурская область также обладает значительными запасами небокситовых руд: каолинов, сланцев, гнейсов, лабрадоритов. Кроме того, Амурская область богата гидроресурсами: в об-



ласти действует Зейская ГЭС (1,33ГВт) [2] и завершается строительство Бурейской ГЭС (2,01ГВт) [3], которая уже выведена на полную мощность.

Огромные запасы небокситовых руд, а также хорошая обеспеченность гидроресурсами делают актуальной задачу получения алюминия и кремния из небокситового сырья. В АмурКНИИ АмурНЦ ДВО РАН разработан метод фторидного обогащения небокситового сырья. В процессе поиска новых технологических процессов, которые могут быть положены в основу данного метода производства алюминия, кремния и других полезных компонентов, 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 2007 разработана программа расчёта изменений термодинамических потенциалов в ходе протекания химических реакций, которые могут быть положены в основу того или иного технологического процесса [4].

При детальном изучении физико-химического процесса возникает задача сопоставления скоростей различных химических реакций. С этой целью нами разработаны программы расчёта констант скорости и энергии активации химических реакций в гомофазных [5] и гетерофазных системах [6].

Энергия активации реакций вычислялась в программах [5, 6] на основе уравнения Аррениуса для констант скорости. В чистом виде эта формула используется в случае независимости энергии активации от температуры. При расчёте энергии активации химических реакций мы, как правило, имеем дело с существенной зависимостью энергии активации от температуры. Поэтому значения энергии активации, вычисляемые нами для каждой из двух пар температур, отличаются. В результате мы вынуждены рассчитывать попарные комбинации констант скоростей для двух разных температур, получая при этом для каждой пары разные значения энергии активации. В случае трёх температур имеем три комбинации, в случае четырёх – шесть. Затем, в качестве энергии активации химической реакции в данном интервале температур, мы принимаем среднее значение энергий активации для каждой пары температур [7].

С другой стороны, если из уравнения Аррениуса для константы скорости выразить энергию активации и провести предельный переход от приращений к дифференциалам, то получим, что энергия активации представляет собой угловой коэффициент линейной регрессии, построенной в координатах  $\left(\frac{1}{T}, \ln(k)\right)$ , умноженный на универсальную газовую постоянную  $R$ . Процедура вычисления углового коэффициента линейной регрессии автоматизирована в приложении Microsoft Excel 2007. Поэтому в данной работе мы для расчёта энергии активации используем метод наименьших квадратов. В этом случае формулу для энергии активации, полученную из уравнения Аррениуса для констант скоростей, представим в виде

$$E_A = \left| -R \frac{d \ln(k)}{d \left( \frac{1}{T} \right)} \right| \quad (1)$$

В этой формуле производная  $\frac{d \ln k}{d \left( \frac{1}{T} \right)}$  имеет смысл коэффициента  $a$  в уравнении линейной регрессии и вычисляется по формуле метода наименьших квадратов для вычисления этого коэффициента, в которой производится замена  $x \rightarrow \left( \frac{1}{T} \right)$ ,  $y \rightarrow \ln(k)$ .

Расчёты энергии активации с использованием метода наименьших квадратов проводились нами по данным о реакциях спекания каолина, кварца и кианита с гидродифторидом аммония, а также последующей термообработке спёков каждого из них с гидродифторидом аммония. При этом термообработка спёков проводилась в восстановительных и окислительных условиях. Термообработка в окислительных условиях представляла собой пирогидролит.

Данные для расчёта по каолину, кварцу и кианиту, взятые из ранних публикаций [8-10], приведены в табл. 1. По ним проводились расчёты выборочных значений коэффициентов корреляции с использованием приложения Microsoft Excel 2007.

Проверка допустимости применения МНК проводится при помощи проверки гипотезы о значимости коэффициента корреляции  $r$  [11, 12]. В качестве основной выберем гипотезу  $H_0$ : линейная связь между данными отсутствует  $r=0$ . Конкурирующая гипотеза  $H_1$ : между данными существует линейная связь. Выборочный коэффициент корреляции  $r_B$  является точечной оценкой коэффициента корреляции  $r$ .

Для проверки гипотезы об отсутствии корреляции вычисляют статистику

$$t = r_B \sqrt{(n-2)/(1-r_B^2)}, \quad (2)$$

которая имеет распределение Стьюдента с  $k = n-2$  степенями свободы.

Для проверки гипотезы по уровню значимости  $p$  и числу степеней свободы  $k$  находим по таблице распределения Стьюдента критическое значение  $t_{p,k}$ , удовлетворяющее условию

$$P(|t| \geq t_{p,k}) = p. \quad (3)$$

Если  $|t| \geq t_{p,k}$ , то гипотезу  $H_0$  об отсутствии корреляционной зависимости следует отвергнуть и принять гипотезу  $H_1$ , т.е. следует считать, что между величинами  $X$  и  $Y$  существует линейная связь и применение МНК обоснованно. В работе, в каждом случае, мы определяем уровень значимости  $p$ , при котором гипотеза  $H_1$  справедлива. Результаты расчётов уровней значимости  $p$  для каждой из химических реакций приведены в табл. 2.

Таблица 1. Исходные данные для расчёта энергий активации химических реакций взаимодействия каолина, кварца и кианита с гидродифторидом аммония, а также последующей термообработки полученных спёков.

Спекание						
T, °C	Обратные температуры	Константы скорости (каолин) [7]	T, °C	Константы скорости (кварц +0.01-0.04см) [8]	Константы скорости (кварц -0.01см) [8]	Константы скорости (кианит) [9]
50	0.003096	0.0000687	100	0.000928	0.002202	0.004482
100	0.002681	0.0000885	150	0.002941	0.005031	0.007126
150	0.002364	0.0001872	175	0.004485	0.006382	0.010961
200	0.002114	0.0004635	200	0.006552	0.008230	0.013127
Еа.	Аррениус	31.0	Еа.	28.0	18.3	27.4
кДж/моль	МНК	15.9	кДж/моль	28.8	19.4	16.1
Термообработка						
T, °C	Обратные температуры	Константы скорости (кварц) [8]	T, °C	Обратные температуры	Константы скорости (каолин) [7]	Константы скорости (кианит) [9]
300	0.001745	0.002268	350	0.001605	0.001099	0.015610
350	0.001605	0.010620	450	0.001383	0.001595	0.020309
450	0.001383	0.044069	550	0.001215	0.002997	0.024583
550	0.001293	0.061729				
Еа.	Аррениус	10.8	Еа.	Аррениус	8.0	9.7
кДж/моль	МНК	60.0	кДж/моль	МНК	21.0	9.7
Пирогидролиз						
T, °C	Обратные температуры	Константы скорости (каолин) [7]	T, °C	Обратные температуры	Константы скорости (кианит) [9]	
350	0.001605	0.001095	350	0.001605	0.016208	
450	0.001383	0.001497	450	0.001383	0.019608	
550	0.001215	0.002995	550	0.001215	0.026256	
Еа.	Аррениус	9.1	Еа.	Аррениус	10.6	
кДж/моль	МНК	4.3	кДж/моль	МНК	10.1	

Результаты обработки экспериментальных данных показывают, что гипотеза о значимости коэффициента корреляции во всех случаях верна на уровне значимости 0,2. Во многих случаях гипотеза справедлива и на более высоких уровнях значимости. Так во всех экспериментах с кварцем метод наименьших квадратов допустим на уровне значимости не ниже 0,02. Это, по-видимому, связано с тем, что измерения во всех случаях проводились не менее чем для четырёх температур. Поэтому, хотя формально метод

наименьших квадратов применим, фактически необходимо не менее четырёх рядов данных, т.е. необходимо проводить измерения не менее чем для четырёх температур.

Таблица 2. Результаты проверки гипотезы о значимости коэффициента корреляции между данными таблицы 1.

Спекание				
Исследуемое вещество	Выборочный коэффициент корреляции между данными	Вычисляемая статистика	Квантиль распределения Стьюдента	Уровень значимости
Каолин	0.942804	4.00	2.92	0.1
Кианит	0.986732	6.08	4.30	0.05
Кварц недробленный	0.999425	42.69	31.6	0.001
Кварц дробленный	0.997259	19.06	14.09	0.005
Термообработка				
Каолин	0.974273	4.32	3.08	0.2
Кианит	0.999931	85.38	63.7	0.001
Кварц	0.985692	8.27	6.96	0.02
Пирогидролиз				
Каолин	0.994347	9.36	6.31	0.1
Кианит	0.97993	4.92	3.08	0.2

### Список литературы

1. <http://www.infogeo.ru/metalls/news/?act=show&news=40031>
2. [http://ru.wikipedia.org/wiki/Зейская\\_ГЭС](http://ru.wikipedia.org/wiki/Зейская_ГЭС)
3. [http://ru.wikipedia.org/wiki/Бурейская\\_ГЭС](http://ru.wikipedia.org/wiki/Бурейская_ГЭС)
4. Пушкин А.А., Римкевич В.С., Маловицкий Ю.Н. и др. Автоматизация расчётов термодинамических равновесий в процессе переработки алюмосиликатного сырья по фторидной технологии // Тр. V Всерос. научн. школы «Математические исследования в естественных науках». 12-14 октября 2009 г. Апатиты: изд-во К&М, 2009. С. 225-228.
5. Пушкин А.А., Белов Р.В., Римкевич В.С. Автоматизация расчётов кинетических характеристик физико-химических процессов при переработке силикатного сырья фторидным методом. Тр. VII Всерос. научн. школы «Математические исследования в естественных науках». Апатиты, 22-24 окт. 2011 г. Апатиты: Изд-во К & М, 2011. С. 280-283.
6. Пушкин А.А., Белов Р.В., Римкевич В.С. Автоматизация расчётов кинетических характеристик твердофазных физико-химических процессов // Тр. VIII Всерос. научн. школы «Математические исследования в естественных науках». Апатиты, 15-16 окт. 2012 г. Апатиты: Изд-во К & М, 2012. С. 26-30.
7. Пушкин А.А., Римкевич В.С. Автоматизация термодинамических расчётов в процессах фторидного обогащения алюмосиликатного сырья // Тр. II Всерос.

научн. конф. «Вопросы геологии и комплексного освоения природных ресурсов Вост. Азии». Благовещенск. 15-16 окт. 2012 г. С. 280-283.

8. Римкевич В.С., Пушкин А.А., Маловицкий Ю.Н. и др. Физико-химические процессы фторидной переработки алюминиевых руд // Теоретические основы химической технологии. 2010. Т. 44. № 6. С. 626-634.

9. Римкевич В.С., Пушкин А.А., Маловицкий Ю.Н. и др. Изучение процессов фторидной переработки кремнеземсодержащего сырья // Жур. прикладной химии. 2011. Т. 84. Вып. 3. С. 353-358.

10. Римкевич В.С., Пушкин А.А., Гиренко И.В. и др. Перспективы использования фторидного метода комплексной переработки кианитовых концентратов. V Конгресс «Цветные металлы». Красноярск, 2013.

11. Пушкина О.Н. Практикум по математической статистике. Благовещенск: Изд-во БГПУ, 2006. 60 с.

12. Колемаев В.А., Староверов С.В., Турундаевский В.Б. Теория вероятностей и математическая статистика. Уч. пособие для экономических специальностей вузов. М.: Высшая школа, 1991. 400 с.

## ПРОГРАММА ДЛЯ РАСЧЁТА ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ ВЕЛИЧИН НА ОСНОВЕ ПРИЛОЖЕНИЯ MICROSOFT ACCESS 2007

Пушкин А.А., Леонтьев М.А.

ИГиП ДВО РАН, г. Благовещенск, pushkin@ascnet.ru

*Разработана программа на основе приложения Microsoft Access 2007 для расчёта термодинамических характеристик химических реакций, включающая как предварительный расчёт тепловых эффектов и направлений химических реакций, так и кинетических характеристик (констант скоростей и энергий активации) реакций. Программа предусматривает расчёт погрешностей рассчитываемых характеристик.*

В [1-4] обсуждалась работа трёх различных программ, предназначенных для расчёта термодинамических величин, описывающих протекание химических реакций. В настоящий момент удалось сделать программу, включающую их в качестве составных частей. На рис. 1 показано окно программы, в области переходов которого видны три группы объектов: **Газы и жидкости**, **Твердые фазы**, **Потенциалы** и форма **Термодинамика**. Каждой группе объектов программы соответствует определённый блок программы. Форма **Термодинамика** представляет собой кнопочную форму для управления блоками (рис. 1). Нажатие на кнопки раскрывает одноименные блоки.

Программа содержит блок **Потенциалы**, позволяющий рассчитывать тепловые эффекты и направления химических реакций при различных температурах путем учёта высокотемпературных составляющих энтальпии и потенциала Гиббса. Для расчётов используется база данных со значениями

ми энтальпий, потенциалов Гиббса, энтропий и теплоемкостей для 150 веществ, взятых при стандартных условиях. Большинство из этих веществ используется при фторидной переработке силикатного и алюмосиликатного сырья Верхнего и Среднего Приамурья с получением ценных инновационных продуктов: алюминия, кремния, глинозёма, аморфного кремнезёма и других. Иногда является важным вопрос о температуре  $T_b$  начала химической реакции. В последней версии программы запрограммировано вычисление этой температуры.

Во-вторых, программа содержит два блока для расчета кинетических характеристик химических реакций: констант скоростей и энергий активации. Один из этих блоков (**Газы и жидкости**) посвящен расчёту констант скоростей химических реакций, для которых зависимость концентраций от времени описывается степенным законом [5]. К таким реакциям относятся реакции, протекающие в газовой или жидкой фазе. По сравнению с [2] программа усовершенствована. Удалось упростить ввод данных: удалить таблицу **Время реакции**, используя в форме **Кинетика** функцию **Dmin**. Функция используется в следующем виде: **DMin(«[Time]»; «Входные»; «[ConcentrationI]=[Max\_ConcI]»)**, что означает требование найти минимальное значение поля **[Time]** в таблице **Входные**, при максимальном значении поля **[ConcentrationI]**, где  $I=1, 2, 3, 4$ . В результате устранена избыточность во входных данных.

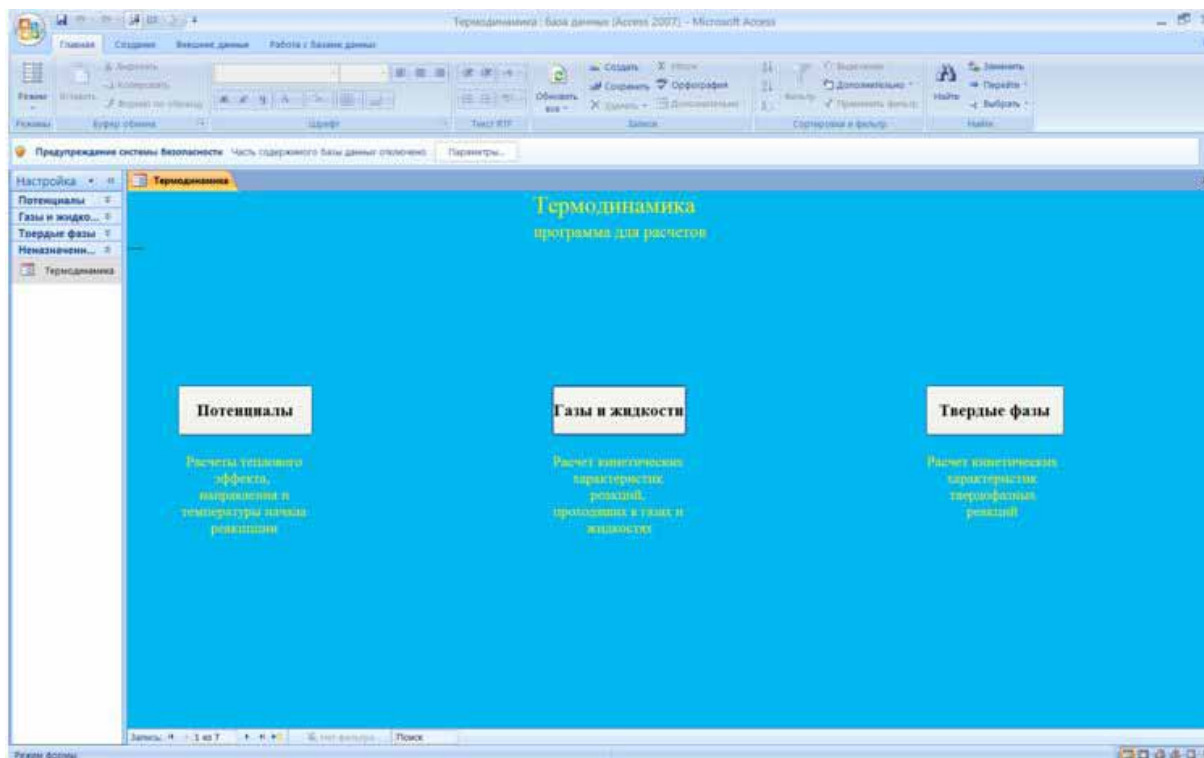


Рис. 1. Окно программы **Термодинамика**. Форма **Термодинамика** раскрыта. В ней видны кнопки управления блоками программы.

Второй блок (**Твердые фазы**) предназначен для расчёта реакций, зависимость концентраций которых от времени описывается экспоненциальной зависимостью. К таким реакциям относятся реакции, протекающие между веществами в твёрдых фазах, т.к. в этом случае скорость реакции ограничивается не скоростью взаимодействия частиц, а скоростью доставки частиц в зону реакции, т. е. скоростью диффузии атомов и молекул. Расчёт в данном случае проводим по уравнению Ерофеева-Авраами [5].

Изменена методика расчёта энергии активации. Расчёт в обоих случаях, как и ранее, проводится по уравнению Аррениуса для констант скоростей, только, в отличие от ранних работ (ранних версий программы) [2-4], обработка проводится методом наименьших квадратов.

Помимо расчёта изменений термодинамических потенциалов и кинетических характеристик химических реакций, в программе предусмотрен расчёт погрешностей вычислений. Рассмотрим основные методы вычисления погрешностей в данной программе.

### 1. Погрешность расчёта термодинамических потенциалов

Точность значений потенциалов  $\Delta G$ ,  $\Delta H$  в таблицах значений термодинамических потенциалов составляет  $\delta(\Delta G_{298}^0) \approx \delta(\Delta H_{298}^0) \approx 0.1 \text{ кДж/моль}$ , их производных  $\delta(\Delta S_{298}^0) \approx \delta(\Delta C_{298}^0) \approx 1 \text{ Дж/(моль} \cdot \text{K)}$ . Точность измерения температуры считаем равной 1К. Тогда точность вычисленных значений изменений термодинамических потенциалов составляет

$$\delta(\Delta G_p) = \delta(\Delta G_{298}^0) \cdot \sum/k_i + 0.001 \cdot (\delta(\Delta S_{298}^0)(T-298) + \delta(T) \cdot \Delta S_{298}^0) \cdot \sum/k_i \approx \\ \approx 0.1 \sum/k_i + 0.298 \cdot \sum/k_i + 0.001 \cdot \sum/k_i \cdot T \approx \sum/k_i \cdot (0.4 + 0.001 \cdot T).$$

В первой строке формулы пренебрегаем третьим слагаемым по сравнению с первым и вторым, второе расписываем на два слагаемых и независимое от температуры слагаемое группируем с первым. Формула для изменения энтальпии аналогична. Таким образом, точность вычисления  $\Delta G$ ,  $\Delta H$  будем определять по формуле

$$\delta(\Delta G_p) = \delta(\Delta H_p) = \sum/k_i \cdot (0.4 + 0.001 \cdot T) \quad (1)$$

### 2. Расчёт погрешностей вычисления кинетических характеристик

А) В случае гомогенных систем погрешность вычисления констант скорости рассчитываем по формуле

$$\frac{dk_T}{k_T} = \ln c_{\max} \cdot dm \quad (2)$$

В  $dm$  представляет собой погрешность вычисления коэффициента  $a$  в уравнении  $y=ax+b$  линейной регрессии, который вычисляется методом наименьших квадратов. Из [5] имеем для неё

$$dm = k_p \cdot \frac{\sigma_y}{\sigma_x}, \quad (3)$$

где  $k_p$  – коэф. Стьюдента на уровне значимости  $p$  для числа степеней свободы

$(n-2)$ ,  $\sigma_y = \sqrt{\frac{1}{(n-2)} \sum \left( \ln\left(\frac{c_i}{c_0}\right) - \overline{\ln\left(\frac{c_i}{c_0}\right)} \right)^2}$  – среднеквадратическое отклонение

$\ln(c_i/c_0)$ ,  $\sigma_x = \sqrt{\sum (\ln t_i - \overline{\ln t_i})^2}$ . Результирующая формула примет вид

$$\frac{dk_T}{k_T} = \ln c_{\max} \cdot dm = \ln c_{\max} \cdot k_p \cdot \frac{\sigma_y}{\sigma_x} \quad (4)$$

Б) В случае гетерогенных систем погрешность вычисления  $\ln k$  представляет собой погрешность вычисления коэффициента  $b$  в уравнении  $y=ax+b$  линейной регрессии. Для её вычисления из [5] имеем

$$\frac{dk}{k} = d \ln k = k_p \cdot \frac{\sigma_y}{\sqrt{n}}, \quad (5)$$

где  $\sigma_y$  вычисляется по формуле  $\sigma_y = \sqrt{\frac{1}{(n-2)} \sum \left( \ln\left(\frac{c_i - c_0}{c_0}\right) - \overline{\ln\left(\frac{c_i - c_0}{c_0}\right)} \right)^2}$ .

В) Погрешность вычисления энергии активации.

Вычисление энергии активации проводится по формуле Аррениуса для констант скоростей методом наименьших квадратов. При этом значение энергии активации представляет собой коэффициент  $a$  в уравнении  $y=ax+b$ , умноженный на  $8.31 \text{ Дж}/(\text{моль} \cdot \text{К})$ . Погрешность вычисления энергии активации рассчитывается по формуле

$$\frac{dE}{E} = \frac{8,31 \cdot k_p \cdot \frac{\sigma_y}{\sigma_x} \cdot 100\%}{E}, \quad (6)$$

где  $\sigma_y$ ,  $\sigma_x$  – среднеквадратическое отклонение  $\ln k$  и  $(1/T)$ , соответственно,  $k_p$  – коэффициент Стьюдента.

Выведем формулу для вычисления погрешности энергии активации для двух рядов данных

$$\begin{aligned} dE &= 8,31 \cdot d\left(\frac{\ln\left(\frac{k_2}{k_1}\right)}{\frac{1}{T_1} - \frac{1}{T_2}}\right) = 8,31 \cdot \frac{2 \frac{dk}{k}}{\frac{1}{T_1} - \frac{1}{T_2}} + 8,31 \cdot \frac{\ln\left(\frac{k_2}{k_1}\right) \cdot d\left(\frac{1}{T_1} - \frac{1}{T_2}\right)}{\left(\frac{1}{T_1} - \frac{1}{T_2}\right)^2} = \\ &= \frac{16,62}{\frac{1}{T_1} - \frac{1}{T_2}} \cdot \frac{dk}{k} + 8,31 \cdot \ln\left(\frac{k_2}{k_1}\right) \frac{dT \cdot \left(\frac{1}{T_1} + \frac{1}{T_2}\right)}{\left(\frac{1}{T_1} - \frac{1}{T_2}\right)} = \frac{16,62}{\frac{1}{T_1} - \frac{1}{T_2}} \cdot \frac{dk}{k} + E \cdot \left(\frac{1}{T_1} + \frac{1}{T_2}\right) dT \end{aligned}$$



В полученной формуле ввиду малости второго члена в области положительных температур ( $dT=1K$ ,  $1/T=1/(273+T(^{\circ}C))\approx<1/300$ ) им можно пренебречь. Полученную формулу представим в абсолютном виде

$$dE = \frac{16,62}{\left(\frac{1}{T_2} - \frac{1}{T_1}\right)} \cdot \frac{dk}{k}$$

и в относительном виде

$$\frac{dE}{E} = \frac{2}{\ln\left(\frac{k_2}{k_1}\right)} \cdot \frac{dk}{k} = \frac{2}{(\ln k_2 - \ln k_1)} \cdot \frac{dk}{k} \quad (7)$$

Таким образом, в данной работе представлена программа, ранее отдельными блоками представлявшаяся в [1-4], позволяющая автоматизировать процесс вычисления ряда термодинамических характеристик, наиболее интересующих исследователей. Разработаны формулы для вычисления погрешностей. Программа нуждается в тщательном апробировании и доводке.

### Список литературы

1. Пушкин А.А., Римкевич В.С., Маловицкий Ю.Н. и др. Автоматизация расчётов термодинамических равновесий в процессе переработки алюмосиликатного сырья по фторидной технологии. Тр. V Всерос. научн. школы «Математические исследования в естественных науках». 12-14 октября 2009 г. Апатиты: изд-во К&М, 2009. С. 225-228.
2. Пушкин А.А., Белов Р.В., Римкевич В.С. Автоматизация расчётов кинетических характеристик физико-химических процессов при переработке силикатного сырья фторидным методом // Тр. VII Всерос. научн. школы «Математические исследования в естественных науках». Апатиты, 22-24 октября 2011 г. Апатиты: Изд-во К & М, 2011. С. 280-283.
3. Пушкин А.А., Белов Р.В., Римкевич В.С. Автоматизация расчётов кинетических характеристик твердофазных физико-химических процессов // Тр. VIII Всерос. научн. школы «Математические исследования в естественных науках». Апатиты, 15-16 окт. 2012 г. Апатиты: Изд-во К & М, 2012. С. 26-30.
4. Пушкин А.А., Римкевич В.С. Автоматизация термодинамических расчётов в процессах фторидного обогащения алюмосиликатного сырья // Тр. II Всерос. научн. конф. «Вопросы геологии и комплексного освоения природных ресурсов Вост. Азии». Благовещенск. 15-16 окт. 2012 г. С. 280-283.
5. Стромберг А.Г., Семченко Д.П. Физическая химия. М.: Высшая школа, 1999. 528 с.
6. Колемаев В.А., Староверов С.В., Турундаевский В.Б. Теория вероятностей и математическая статистика. Уч. пособие для экономических специальностей вузов. М.: Высшая школа, 1991. 400 с.

## ПАРАМЕТРИЧЕСКОЕ ОПИСАНИЕ РИСУНКА ЦВЕТНОГО КАМНЯ

Шуйский А.В., Петров Т.Г.

Санкт-Петербургский государственный университет, г. Санкт-Петербург  
alexshuyskiy@gmail.com

*Описаны особенности рисунка цветного камня и предложен набор количественных характеристик, включающий шесть параметров: светлоту, контраст, сложность, связность, изотропию, ритмичность. Кодирование рисунка цветного камня может использоваться при работах по систематизации рисунков, подготовке исходного материала для облицовочных работ, реставрации облицовки сооружений и создания наборных инкрустационных изделий. Предложенный вид описания рисунков является необходимым и достаточным для перехода к кодированию рисунков и их систематизации с использованием информационного языка RHA, апробированного в качестве междисциплинарного.*

Под параметрическим описанием рисунка будем понимать такое, которое включает перечень свойств и их количественных характеристик. Запись результата такого описания можно назвать первым шагом в кодировании рисунков. С 2001 г. на «Материалы и изделия облицовочные из горных пород» действует ГОСТ 30629-99, принятый в 7 странах, который регулирует группу важнейших требований к декоративному камню. Согласно ему «*Рисунок горной породы – совокупная характеристика, оцениваемая сочетанием и числом цветов, характером структуры и текстуры, наличием прожилок, включений и т.п.*» [3]. Для использования математических методов столь конкретные свойства рисунка, как «прожилки и включения» и столь специальные как «структура и текстура» представляются неудобными. Поэтому под «рисунком» будем понимать *распределение интенсивности отражённого света и цвета в пределах выделенного участка плоскости.*

Простейшие элементы горной породы, совокупность которых порождает рисунок, это: 1) зёрна минералов, различающиеся по форме, цвету и блеску (примеры: гранит, лабрадорит), 2) срастания кристаллов минералов (турмалин, эгирин, малахит, селенит), 3) слои, в той или иной степени однородные (характерно для известняков, сланцев, гнейсов, турбидитов, флиша, в некоторой степени, малахита и агрегатов других минералов, обладающих «натёчной», «почковидной» формами их агрегатов).

Разные образцы одной и той же породы различаются, и различные ориентации сечения одного камня могут иметь разные рисунки. Поскольку неконкретный рисунок человек воспринимает в целом, без учёта мелких деталей, сжатое описание «цветного камня» должно давать обобщённое представление о многих его конкретных изображениях.

Большинство изображений, подвергаемых обработке и анализу, являются цветными. Для решения большинства задач по анализу изображений, цвет не является информативным признаком и только усложняет распозна-

вание изображения, поэтому, как правило, его преобразовывают в полутоновое. Кроме того, в одном образце, как и в картине, могут одновременно присутствовать сильно различающиеся цвета, усреднение которых бессмысленно.

В ГОСТе 30629-99 [3] для большинства облицовочных камней представлен способ оценки его декоративности по характеру рисунка, структуре, цвету, насыщенности, светлоте и ряду других параметров. Для некоторых из них мы вводим количественные характеристики, а некоторые не учитываем (например, цвет, о котором было сказано выше).

Свойства «цветного камня», учитываемые при его описании, предназначенном для систематизации, следующие:

1. Светлота. Это субъективно оцениваемая яркость всего изображения по отношению к поверхности, воспринимаемой человеком как белая.
2. Контраст – соотношение между максимальной и минимальной светлотами на рисунке [1].
3. Сложность рисунка – разнообразие (в смысле К. Шеннона) светлот [2].
4. Связность – степень коррелированности (в данном направлении) светлоты соседних элементов поверхности [4].
5. Изотропия – степень близости связности в разных направлениях на рисунке.
6. Ритмичность – повторение частей рисунка в каком-либо одном (или разных) направлениях.

Предложенный набор параметров для описания рисунков цветного камня (и, более широко – горных пород) позволяет сделать следующий шаг и предложить вариант их кодирования. Нормирование всех (кроме ритмичности) параметров к одной величине (единице) обеспечивает их соизмеримость и использование совокупности рейтинга параметров и их энтропийных характеристик в качестве кода рисунка. Коды упорядочиваются, как это многократно изложено, применительно к химическим, минеральным и иным составам [5], что автоматически породит систематику рисунков.

Представляется полезным создание фотогалереи (базы данных) кодированных рисунков камня с генетическим их описанием и анализом связи генезиса с его математическим отображением. Для геологии подобная база – средство обучения и объективизации описания горных пород; для камнеобрабатывающих предприятий – средство систематизации разновидностей камня по рисунку непосредственно на производстве; для архитектуры – способ быстрого поиска нужных материалов для облицовки и реставрации зданий и иных памятников культуры, где использование той же разновидности камня не даёт гарантии, что он подойдёт по рисунку и не будет выделяться на общем фоне. В этом случае речь может идти не только о природном камне, но и о любом облицовочном материале, рисунок которого является абстрактным. Что касается изотропии, то в учении о метаморфизме горных пород она может стать оценкой степени их изменения от исходно слоистых

осадочных пород до потерявших её следы. Мера изотропии может использоваться, в частности, при геокартировании.

Предложенный метод параметрического описания рисунка цветного камня находится в общем потоке работ, направленных на повышение объективности и определённости описания континуально изменчивой реальности, её систем, объектов, явлений.

### Список литературы

1. Воробель Р.А. Цифровая обработка изображений на основе теории контрастности: дис. докт. техн. наук. Львов, 1999. 369 с.
2. Моль А. Теория информации и эстетическое восприятие. М.: Мир, 1966. 352 с.
3. ГОСТ 30629-99. Материалы и изделия облицовочные из горных пород. 2 дек. 1999 г. URL: <http://files.stroyinf.ru/Data1/7/757> (дата обращения: 18.09.2013).
4. Heilbronner R. P. The autocorrelation function: an image processing tool for fabric analysis. // Tectonophysics. 1992. V. 212. N. 3-4. P. 351-370.
5. Petrov T.G., Moshkin S.V. RHA(T)-System for Coding of Discrete Distributions and Their Alteration Processes. Proc. 3rd Int. Multi-Conf. on Complexity, Informatics and Cybernetics. IMCIC, 2012. P. 12-16.

## ГЕОСТАТИСТИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ ПОКАЗАТЕЛЕЙ ЗРЕЛОСТИ ПЕСЧАНИКОВ АШИНСКОЙ СЕРИИ ВЕРХНЕГО ВЕНДА (БАШКИРСКИЙ МЕГАТИКЛИНОРИЙ, Ю. УРАЛ)

**Ялышева А.И.<sup>1</sup>, Вдовин А.С.<sup>2</sup>,**

<sup>1</sup> Институт геологии и геохимии им. А.Н. Заварицкого УрО РАН  
г. Екатеринбург, Yalysheva@igg.uran.ru;

<sup>2</sup> MP Plan GmbH, Deutschland, Sinsheim, Vdovin\_as@yandex.ru

*В работе рассматривается возможность применения геостатистики для решения литологической задачи по анализу показателей зрелости (сферичность и ZTR-индекс) лёгкой и тяжёлой фракции песчаников ашинской серии верхнего венда Ю. Урала. Полученные пространственные модели для Башкирского мегантиклинория позволяют подойти к установлению минералогической взаимосвязи и/или её отсутствия между различными литостратиграфическими комплексами верхнего докембрия.*

Геостатистический анализ наряду с методами классической математической статистики позволяет получить важные характеристики «немых» докембрийских отложений Урала. Построение модели поверхности/вариограммы распределения данных позволило подойти к вопросу о степени подобия/схожести характеристик литостратиграфических комплексов.

Методы геостатистики позволяют идентифицировать связи между геологическими объектами и в первом приближении демонстрируют детерминированную модель пространственно соподчиненных геологических объек-

тов на основе заданных признаков, другим словами, позволяет иллюстрировать детали сходства-различия объектов математическими методами. Таким образом, мы имеем возможность дополнять и верифицировать стратиграфические и палеогеографические построения для региона.

Исследования показателей зрелости проведены на терригенном материале ашинской серии верхнего венда Башкирского мегантиклинория (БМА): урюкской, басинской, куккараукской и зиганской свит. Песчаники урюкской свиты относятся к средне- и мелкозернистым структурным типам и представлены аркозовыми и полевошпат-кварцевыми разностями. Все исследованные образцы басинских песчаников представлены крупно- и среднезернистыми типами литокласто-кварцевого, полимиктового (литотип граувакко-аркозы) и полевошпат-кварцевого состава. Песчаники куккараукской свиты включают крупно- и среднезернистые литокластовые типы. Венчающие разрез докембрия Башкирского мегантиклинория песчаники зиганской свиты представлены средне-мелкозернистыми, реже крупно-среднезернистыми полимиктовыми (литотип граувакка) разностями.

В качестве показателя морфологической зрелости песчаников выбраны значения среднего арифметического сферичности кластогенного кварца [1, 3]. Для оценки минералогической зрелости песчаников выбран ZTR-индекс тяжелой фракции [7, 8] (таблица).

Таблица. Характеристики зрелости песчаников ашинской серии верхнего венда Башкирского мегантиклинория.

Индексы разрезов	Точки отбора	Координаты		X <sub>ср</sub> (φ)	ZTR – индекс
		N	E		
zn(A11-14)	трасса Уфа-Белорецк	54 17	57 16	0.558	11.65
кк(A11-21)	трасса Уфа-Магнитогорск	53 34	56 40	0.635	32.09
кк(A11-22)	ручей Кук-Караук	53 36	56 46	0.601	35.34
кк(A11-28)	трасса Уфа-Белорецк, 126 км	54 20	57 10	0.592	21.06
кк(A11-30)	трасса Уфа-Белорецк, 117 км	54 19	57 15	0.579	20.20
bs(A11-7)	трасса Уфа-Белорецк	54 20	57 08	0.552	13.06
bs(A11-1)	3.2 км на NW от г. Усть-Катав	54 57	58 11 965	0.566	10.04
ur(A11-3-1)	г. Усть-Катав	54 56	58 12	0.586	31.82

Для построения детерминированной модели использован метод линейной интерполяции данных в пространстве, а именно – естественного (ближайшего) соседства/*natural neighbor* [9]. Суть метода заключается в том, что анализируемые данные описываются некоторой функцией  $V(x)$ , определённой на области  $S$ , где  $x \in S$  – координаты точки. Таким образом, на основе полученных данных  $V_i = V(x_i)$  (значения характеристики) в точках  $x_i \in S$  (точка с координатами в пространстве) появляется возможность построить функ-

цию  $V(x)$  для всей области  $S$ . Любая точка  $x$  области  $S$  обладает значением функции  $V(x)$ , которое имеет ближайшая (по евклидовой дистанции) точка измерения. Областью влияния точки  $X_i$  является геометрическое место точек в пространстве координат  $A(X_i)$ , таких что  $\forall X \in A(x_i); \forall j \neq i: \|X_i, x\| < \|X_j, x\|$ . Всем точкам, принадлежащим области влияния  $A(X_i)$ , присваиваются значения исходной заданной точки. При использовании традиционных методов средневзвешенной интерполяции, например, основанных на расчёте расстояния, рассматриваются все соседства на определённом расстоянии от интерполяционной локации  $X$ . Вес каждого соседства обратно пропорционален его расстоянию до  $X$ . Эти методы могут быть наиболее эффективны, когда данные распределены равномерно. Однако трудно получить непрерывную поверхность, когда распределение данных анизотропно или существуют различия в плотности данных, что является одним из свойств распределения геологических данных. Интерполяция методом естественного соседства, напротив, не зависит от этих аспектов, так как выбор основывается на конфигурации данных [2, 6, 9].

Ранее с помощью дескриптивного (описательного) статистического и кластерного анализов получено, что для вендских отложений характерны низкие значения окатанности и сферичности кластогенного кварца, а также показателей зрелости тяжёлой фракции песчаников [3, 4]. В то же время, не были установлены детали распределения названных характеристик для территории, что и было восполнено с помощью геостатистического анализа.

Как приведено на рис. (вариограммы 1 и 2), несмотря на разницу в выбранных критериях зрелости песчаников, зафиксировано практически полное совпадение распределений сферичности кварца и ZTR-индекса акцессорных минералов из свит ашинской серии. Таким образом, выбранные оценки зрелости лёгкой и тяжёлой фракции песчаников хорошо дополняют друг друга.

С помощью приведённого анализа геостатистики выявлено несколько кластеров, которые объединяются по близким значениям показателей зрелости. Первый кластер на территории БМА образуют отложения урюкской (A11-3-1), басинской (A11-1, A11-7), куккараукской (A11-28, A11-30) и зиганской (A11-14) свит. Для этих уровней ашиния характерны очень низкие значения зрелости, что свидетельствует о том, что представленные литостратиграфические комплексы значительно обогащены петрогенным материалом. Объединение значений зрелости разных свит в общий кластер может указывать на то, что от нижних (урюкская и басинская) до верхних (зиганская) уровней венда размыву/денудации подвергались области, которые входили в состав единой питающей провинции.

Исключение составляют показатели зрелости терригенных пород куккараукской свиты. По данным, представленным на вариограммах 1 и 2 (рис),

отложения куккараукской свиты образуют два кластера. Показатели зрелости песчаников куккараукской свиты в центральном районе БМА входят в состав единого кластера ашинской серии, а в юго-западном районе БМА образуют отдельный кластер. В сравнении с другими литостратиграфическими комплексами ашиния, для куккараукской свиты установлено, что в юго-западном районе песчаники обладают существенно более высокими показателями зрелости.

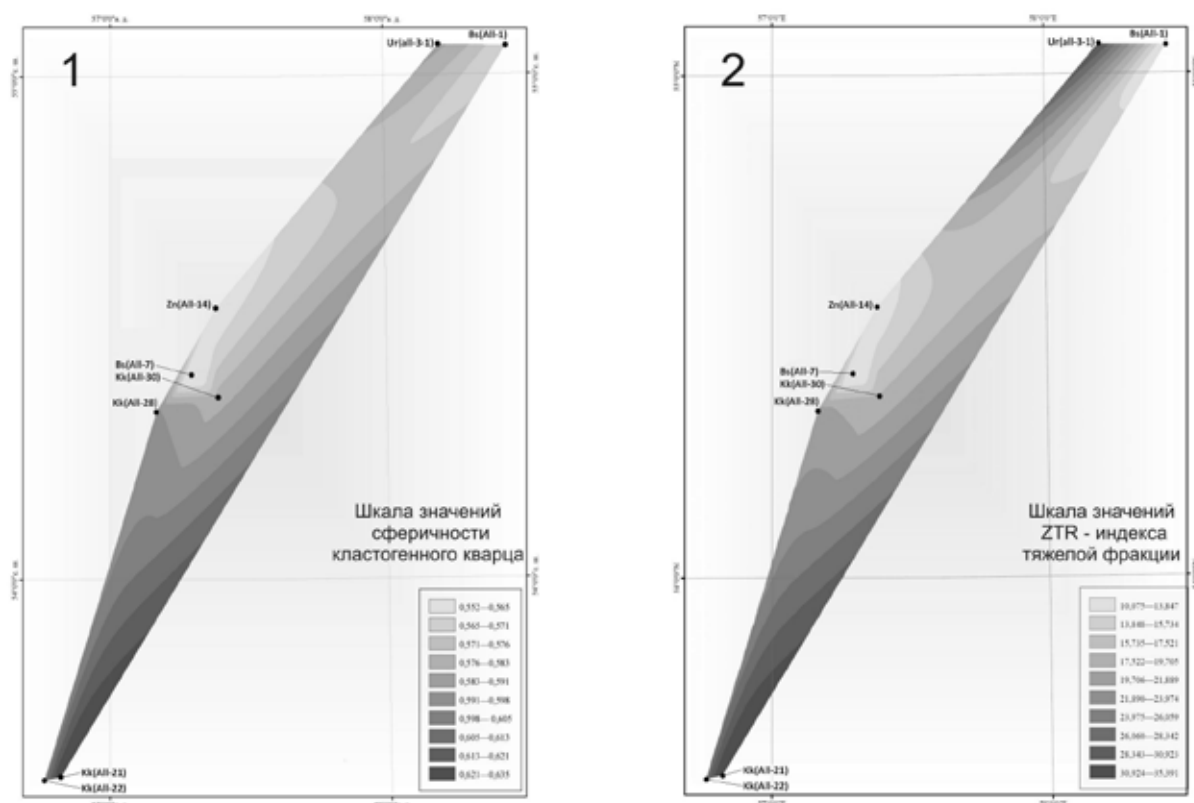


Рис. Вариограммы распределений значений показателей морфологической (1) и минералогической (2) зрелости песчаников ашинской серии венда Башкирского мегантиклинория. Свиты: *ur* – урюкская, *bs* – бассейнская, *kk* – куккараукская, *zn* – зиганская.

Исходя из полученных результатов в формировании отложений куккараукского уровня в юго-западном районе БМА, мог принимать участие иной, сложенный преимущественно терригенными осадочными породами, источник сноса. Проведенный геостатистический анализ подтверждает ранее полученные результаты петрографических и литохимических исследований конгломератов [5] о двух типах куккараукской свиты.

Авторы выражают искреннюю благодарность к.г.-м.н. Н.Д. Сергеевой (Институт геологии УНЦ РАН, Уфа) за предоставленные материалы тяжелой фракции. Исследования выполнены при финансовой поддержке грантов РФФИ № 12 – 05 – 00497 и № 12 – 05 – 31361 мол\_а.

### Список литературы

1. Анфимов Л.В. Критерии происхождения кластогенного кварца в терригенных породах Западного Урала // Геология и полезные ископаемые Западного Урала. Пермь: ПГУ, 2006. С. 60-62.
2. Демьянов В., Савельева Е. Геостатистика. Теория и практика. М.: Наука, 2010. 375 с.
3. Ялышева А.И. Типоморфизм кластогенного кварца из докембрийских отложений Ю. и Ср. Урала // Литосфера. 2010. № 1. С. 64-83.
4. Ялышева А.И. Кластерный анализ морфологических особенностей кварца вендских песчаников Ю. и Ср. Урала, Шкаповско-Шиханской впадины // Ежегодник – 2009. Екатеринбург: ИГГ УрО РАН, 2010. С. 103-107.
5. Ялышева А.И. Петрографические особенности отложений куккараукской свиты ашинской серии венда, Ю. Урал // Ежегодник-2011. Тр. ИГГ УрО РАН. Вып. 159. Екатеринбург: ИГГ УрО РАН, 2012. С. 144-148.
6. Boissonnat J.D., Cazals F. Natural neighbor coordinates of points on a surface // Comp. Geometry. 2001. N. 19. P. 155-173.
7. Garzanti E., Ando S. Heavy mineral concentration in modern sands: implications provenance interpretation // Heavy minerals in use. Elsevier, London, 2007. P. 517-546.
8. Hubert J. F. A zircon-tourmaline-rutile maturity index and the interdependence of the composition of heavy mineral assemblages with the gross composition and texture of sandstones // J. Sediment. Research. 1962. V. 32. N. 3. P. 440-450.
9. Sibson R. A brief description of natural neighbour interpolation // Interpreting multivariate data. Wiley, New York, 1981. P. 21-36.



# МАТЕМАТИЧЕСКИЕ ИССЛЕДОВАНИЯ В КРИСТАЛЛОГРАФИИ



## SW-ТРАНСФОРМАЦИЯ ФУЛЛЕРЕНОВ

Степенщиков Д.Г., Войтеховский Ю.Л.

Геологический институт КНЦ РАН, г. Апатиты, stepen@geoksc.apatity.ru

Одним из самых известных фуллеренов является «бакибол»  $C_{60}$  – сферическая молекула, поверхность которой, подобно поверхности футбольного мяча, составлена из 5- и 6-угольных углеродных циклов (пентагонов и гексагонов) (рис. 1). После открытия «бакибола» (в 1985 г.) получено большое множество изомеров  $C_{60}$ , и других молекул  $C_n$ , где  $n$  варьирует от минимально возможного 20 до нескольких тысяч [2, 7, 8]. Появление столь интересного объекта породило массу связанных с ним теоретических и практических задач. Число научных публикаций с ключевым словом «фуллерен» ежегодно растёт и измеряется тысячами (по данным системы Scirus, около 16 тыс. за этот год). Одна из задач – поиск связи между фуллеренами-изомерами – молекулами с одинаковым числом атомов, но разной структурой.



Рис. 1. Один из первооткрывателей фуллеренов Ричард Смолли с моделью фуллерена  $C_{60}$

### SW-трансформация

В работе [1] предложен механизм, позволяющий из одной молекулы фуллерена получить другой фуллерен-изомер, изменяя расположение углеродных связей в локальной области поверхности молекулы. Он назван по имени авторов трансформацией Стоуна-Валеса или, коротко, SW-трансформацией. Для осуществления этого механизма необходимо наличие на поверхности фуллерена конфигурации, показанной на рис. 2 (красное). После SW-трансформации молекула по-прежнему будет иметь на своей

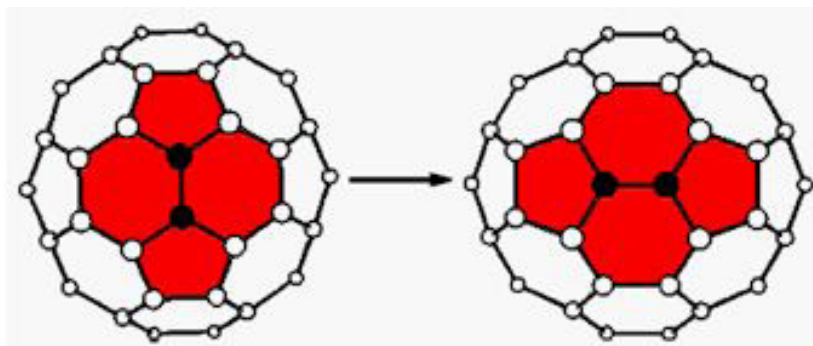


Рис. 2. Трансформация Стоуна-Валеса на фуллерене  $C_{60}$

поверхности только пентагоны и гексагоны, но их взаимное расположение, в общем случае, изменится.

Данная операция интересна тем, что позволяет разбить многообразие фуллеренов-изомеров  $C_n$  на клас-

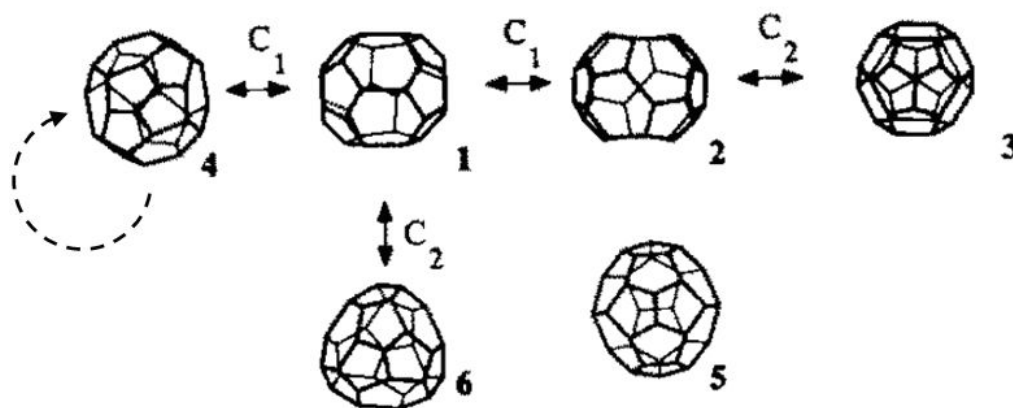


Рис. 3. Пример классификации фуллеренов  $C_{32}$ . Пунктирная стрелка добавлена автором (пояснения в тексте).

сы. А именно, два фуллерена относятся к тому же классу, если они переходят друг в друга с помощью конечного числа SW-трансформаций. Такая классификация проведена в работах [3-5]. На рис. 3 показан пример классификации многообразия фуллеренов-изомеров  $C_{32}$  [3]. Все шесть изомеров разделены на два класса. В одном из них находится единственный фуллерен № 5, на котором SW-трансформация невозможна. В другом классе находятся оставшиеся пять изомеров. Некоторые из них переходят друг в друга через несколько SW-трансформаций, например, № 3 и № 6, а фуллерен № 4 отличается тем, что одна из допустимых на нём SW-трансформаций переводит его в себя (вернее, в свой зеркально-симметричный аналог).

В работах [3] и [4] нами обнаружены расхождения в результатах. Было решено повторить классификацию фуллеренов с помощью SW-трансформации.

### **Практическая часть**

С увеличением  $n$ , число фуллеренов-изомеров  $C_n$  растёт по экспоненте [6]. Например, если общее число изомеров  $C_{20-30}$  не превышает десятка, то для  $C_{60}$  оно равно уже 1812, а для  $C_{100}$  достигает 285914. В наших исследованиях мы ограничились диапазоном  $C_{20-100}$ . С помощью доступных программ для генерирования фуллеренов и классифицирующей их авторской программы для каждого многообразия  $C_n$  рассчитано общее число классов, число фуллеренов в каждом классе и число фуллеренов (классов), для которых SW-трансформация невозможна. Результаты приведены в таблице. Графическая интерпретация некоторых дана на рис. 4.

Из графика видно, что с увеличением  $n$  доля фуллеренов-изомеров в максимальном классе убывает. Это означает, что многообразие  $C_n$  всё равномернее распределяется по классам. Число фуллеренов в максимальном классе сначала возрастает, достигая максимума для  $C_{92}$  (43708), затем резко падает.

Таблица. Классификация многообразий фуллеренов  $C_{20-100}$ .  $n$  – число атомов фуллера,  $N$  – число фуллеренов,  $N_c$  – число классов,  $N_{max}$  – число фуллеренов в максимальном классе,  $N_{-SW}$  – число фуллеренов (классов), для которых SW-трансформация невозможна.

$n$	$N$	$N_c$	$N_{max}$	$N_{-SW}$	$n$	$N$	$N_c$	$N_{max}$	$N_{-SW}$
20	1	1	0	1	62	2385	40	2241	23
22	–	–	–	–	64	3465	70	3236	47
24	1	1	0	1	66	4478	82	4093	53
26	1	1	0	1	68	6332	138	5489	91
28	2	2	1	1	70	8149	169	7441	92
30	3	1	3	0	72	11190	242	9729	123
32	6	2	5	1	74	14246	310	12659	156
34	6	2	3	0	76	19151	459	16270	254
36	15	2	14	1	78	24109	604	18156	268
38	17	3	15	2	80	31924	873	23717	401
40	40	3	38	2	82	39718	1137	25008	498
42	45	2	44	1	84	51592	1538	31856	619
44	89	7	83	6	86	63761	2163	36499	847
46	116	4	113	1	88	81738	3032	37692	1123
48	199	6	194	5	90	99918	3954	40511	1440
50	271	10	261	8	92	126409	5402	43708	1805
52	437	16	400	12	94	153493	7115	36194	2200
54	580	14	553	10	96	191839	9696	29111	3102
56	924	22	868	16	98	231017	12673	16298	3845
58	1205	28	1152	18	100	285914	16825	12491	4995
60	1812	44	1710	31					

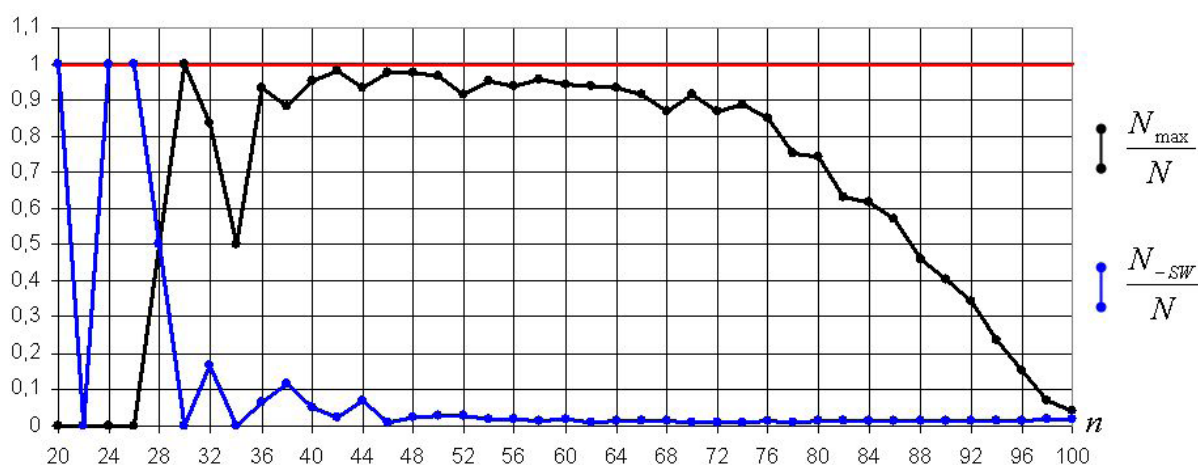


Рис. 4. Зависимость относительного числа фуллеренов в максимальной группе  $\frac{N_{max}}{N}$  и относительного числа фуллеренов без SW-фрагмента  $\frac{N_{-SW}}{N}$  от числа атомов  $n$  фуллера  $C_n$ .

Доля числа фуллеренов (классов), для которых SW-трансформация невозможна, сначала колеблется, затем медленно возрастает и составляет для  $C_{100}$  около 1.7 %. Этот рост можно объяснить тем, что с увеличением числа атомов фуллерена растёт площадь его поверхности, и пентагоны (которых всегда 12) всё больше «разбегаются», предотвращая появление конфигурации, показанной на рис. 2.

Результаты указывают на то, что в [4] авторами допущены ошибки в классификации многообразий  $C_{30}$  и  $C_{34}$ . Данные работ [3] и [5] нами подтверждены.

### Список литературы

1. Stone A.J., Wales D.J. Theoretical studies of icosahedral  $C_{60}$  and some related species // Chem. Phys. Letters. 1986. V. 128. P. 501-503.
2. Diederich F., Whetten R.L. Beyond  $C_{60}$ : The Higher Fullerenes // Accounts of Chem. Res. 1992. V. 25. P. 119-126.
3. Fowler P.W., Manolopoulos D.E., Ryan R.P. Isomerisations of the fullerenes // Carbon. 1992. V. 30. N. 8. P. 1235-1250.
4. Babić D., Trinajstić N. Pyracylene rearrangement classes of fullerene isomers // Computer & Chemistry. 1993. V. 17. N. 3. P. 271-275.
5. Austin S.J., Fowler P.W., Manolopoulos D.E., Zerbetto F. The Stone-Wales map for  $C_{60}$  // Chem. Phys. Letters. 1995. V. 235. P. 146-151.
6. Brinkmann G., Dress A.W.M. A constructive enumeration of fullerenes // J. of Algorithms. 1997. V. 23. N. 2. P. 345-358.
7. Prinzbach H., Weiler A., Landenberger P. *et. al.* Gas-phase production and photoelectron spectroscopy of the smallest fullerene  $C_{20}$  // Nature. 2000. V. 407. P. 60-63.
8. Huang J.Y. Real time microscopy, kinetics and mechanism of giant fullerene evaporation // Phys. Rev. Letters. 2007. V. 99. P. 1-4.

## КОНСТРУКЦИИ АЛГЕБРАИЧЕСКОЙ ГЕОМЕТРИИ, СПИРАЛЬНЫЕ ПОДСТРУКТУРЫ ПОЛИТОПОВ И СТРУКТУРА А-СПИРАЛИ

Талис А.Л.

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

*Отображение конструкций алгебраической геометрии на структурный уровень позволило определить некоторые спиральные биологические структуры. В частности,  $\alpha$ -спираль определена как результат размножения особого 7-вершинного объединения тетраэдров винтовой осью 40/11.*

### Введение

Стерические взаимодействия молекул связаны с их размерами и формами, накладывающими жёсткие структурные ограничения на способы размещения молекул в пространстве. Белки можно рассматривать как плотную

упаковку более или менее сферических единиц – аминокислот, аппроксимируемую упаковкой тетраэдров. Плотнейшая упаковка правильных тетраэдров достигается в 4-мерном полиэдре (политопа)  $\{3,3,5\}$ , связь подструктур которого с  $\alpha$ -спиралью продемонстрирована в [14, 15]. Тем не менее, и через 60 лет после опубликования статьи Полинга [13] вопрос о симметричном обосновании структуры  $\alpha$ -спирали (например, наличия именно 3.6 аминокислотных остатка на виток и возникновение стабилизирующих водородных связей между пептидными амидной  $i$ -ой и карбонильной  $(i+4)$ -ой группами остатков) остаётся актуальным. Иными словами, если кристалл является объединением орбит фёдоровской группы, то какие конструкции алгебраической геометрии определяют структуру  $\alpha$ -спирали? Данная статья посвящена решению этой задачи.

### ***1. Спиральное 60-вершинное объединение 60 тетраэдров политопа $\{3,3,5\}$***

Расположенная в 4-мерном евклидовом пространстве  $E^4$  трёхмерная сфера  $S^3$ , которой принадлежат вершины политопа  $\{3,3,5\}$ , может быть спроектирована в  $E^3$  в форме семейства коаксиальных торов [12]. Важнейшей характеристикой политопа является его многоугольник Петри – последовательность рёбер, в которой любые три, но не четыре принадлежат многоугольнику Петри ячейки политопа [10].

При проекции в  $E^3$  политопа  $\{3,3,5\}$  его многоугольник Петри отображается в цепочку из 30 рёбер 30 объединяемых по граням тетраэдров, образующих спираль Коксетера-Бердийка (спираль К-Б). Данная цепочка обходит 30 вершин, расположенных на поверхности тора, за 11 витков и обладает симметрией циклической группы  $30/11$ , состоящей из 30 степеней поворота на  $132^\circ = (360^\circ/12) \cdot 11$ . Спираль  $30/11$  образуют рёбра, принадлежащие трём тетраэдрам [6]. Рёбра, принадлежащие двум тетраэдрам, образуют 2 спирали  $-15/4$  (вращение на  $96^\circ$  в направлении, противоположном вращению  $30/11$ ), вершинами которых являются чётные и нечётные вершины  $30/11$ . Рёбра, принадлежащие только одному тетраэдру, образуют 3 геликоида  $10/1$ , каждый из которых расположен на окружности Вилларсо тора (рис. 1 а) [12, 14] и, в силу центросимметричности  $\{3,3,5\}$ , может быть представлен как объединение пятёрок вершин двух типов (рис. 1 в).

При проектировании на плоскость 120 вершин  $\{3,3,5\}$  попадают в вершины 4-х концентрических 30-вершинников А,В,С,Д; вершины двух из которых (А и Д) совпадают с вершинами «симметричных» многоугольников Петри. В  $\{3,3,5\}$  имеются и два «несимметричных» многоугольника Петри, один из которых (с вершинами А, В и С) изображен на рис. 1 в. Три последовательных ребра такого многоугольника Петри соединяют в  $E^3$  вершины правильного тетраэдра, в частности, тетраэдра с вершинами В, С и двумя вершинами А, принадлежащими разным спиральям  $15/4$  (рис.1 б, в). Винтовой поворот  $15/4$  переводит стартовый тетраэдр 1,2,4,6 в конгруэнтный

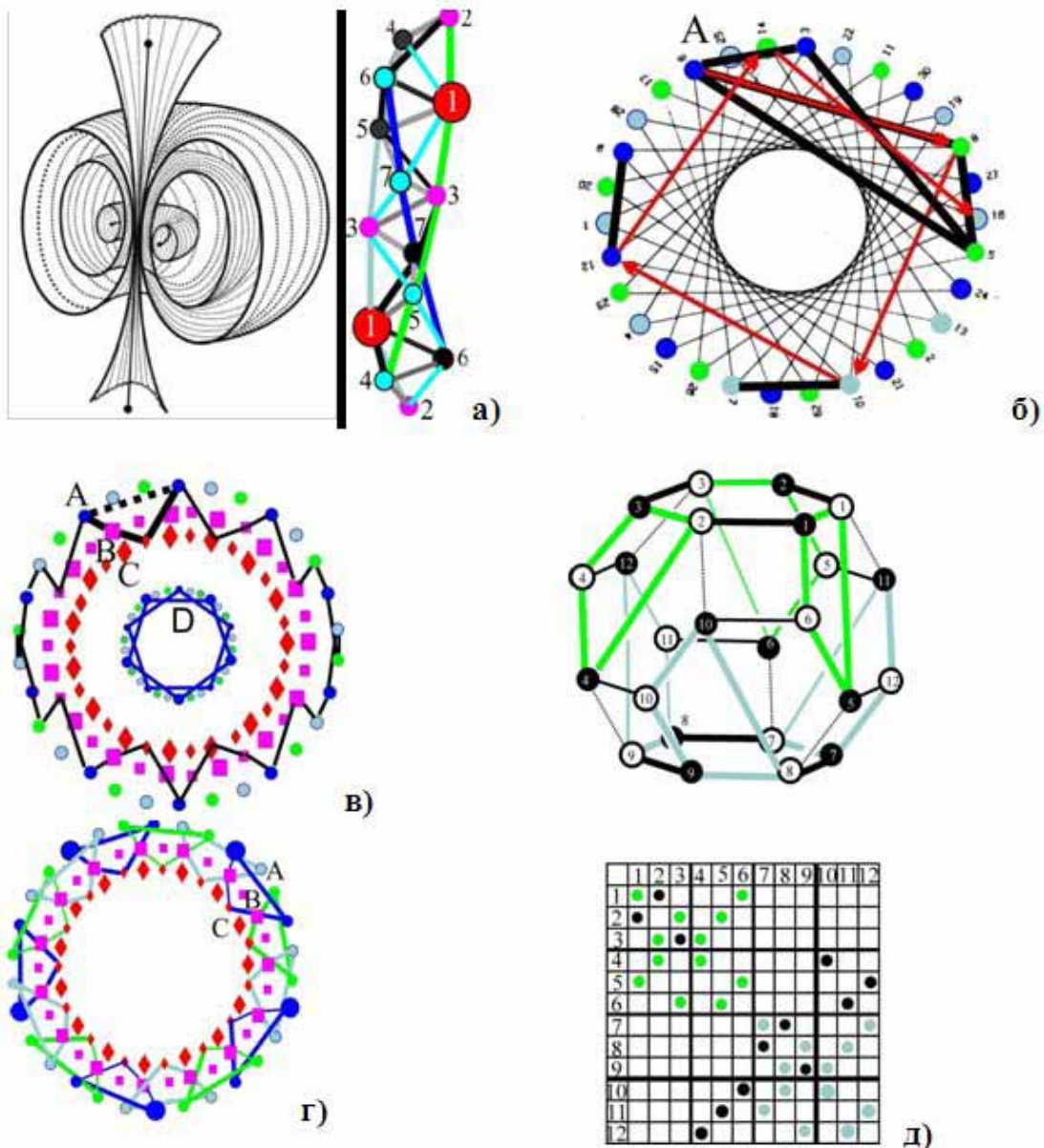


Рис. 1. а) Проекция сферы  $S^3$  в  $E^3$  в форме семейства коаксиальных торов. Тетраэдрическая спираль Коксетера-Бордийка (спираль К-Б), в которой спираль 30/11, две спирали 15/4 и 3 спирали 10/1 показаны серым; чёрным и голубым; синим, зелёным и сине-зелёным цветами. Два 7-вершинника с центрами в красных вершинах 1 объединены по закону связной суммы. б) Проекция спирали 30/11 на плоскость. Красные стрелки показывают действие оси 15/4. Рёбра спирали К-Б показаны жирными чёрными отрезками. в) Вершины политопа  $\{3,3,5\}$  проектируются в 4 концентрических 30-вершинника А, В, С, D (Рис. 13-6А[10]); вершины А и D совпадают с вершинами спиралей К-Б, вершины В и С показаны розовым и красным. «Несимметричная» спираль К-Б показана чёрными линиями, жирные чёрные отрезки – рёбра одного тетраэдра. г) Проекция 15 непересекающихся тетраэдров из  $\{3,3,5\}$ , 60 вершин которых охватывают все вершины А, чётные В и нечётные С. д) Отображение на чёрно-белый полиэдр Кельвина разбиения вершин политопа  $\{3,3,5\}$  на два 60-вершинника типа г), которым соответствуют зелёные и сине-зелёные тройки четырёхугольников. Отбрасываемые рёбра показаны пунктиром. В таблице инцидентности рёбрам четырёхугольников соответствуют знаки инцидентности такого же цвета.

ему тетраэдр  $1',3,5,7$ . Можно показать, что между ближайшими друг к другу гранями  $1,4,6$  и  $3,5,7$  данных тетраэдров находятся объединяемые по граням правильные тетраэдры  $1,4,6,5$ ,  $1,6,5,7$  и  $1,5,7,3$ . Такое объединение тетраэдров  $1,2,4,6$  и  $1',3,5,7$  представляет собой объединение симплексов  $E^3$  операцией связной суммы [1]. Объединение тетраэдра  $1,2,4,6$  с тетраэдрами  $1,4,6,5$ ;  $1,6,5,7$  и  $1,5,7,3$  представляет собой пересечение вершинной фигуры политопа  $\{3,3,5\}$  (икосаэдра) с его многоугольником Петри (рис. 2 а, б). Данное 7-вершинное 10-гранное объединение 4-х тетраэдров определяется нерегулярной картой  $\{3,6\}_{2,1}^6$  (рис. 2 в), задаваемой минимальной конечной проективной геометрией  $PG(2,2)$  [5].

Преобразование  $15/4$  переводит стартовое объединение 4-х тетраэдров (с общей вершиной 1) в конгруэнтное ему объединение (с общей вершиной  $1'$ ), граничащее со стартовым по общей грани  $3,5,7$  (рис. 2 а, б). Циклическая группа  $15/4$  имеет порядок 15, поэтому её орбита

$$15/4 \cdot \{3,6\}_{2,1}^6 = \{(15/4)^n \{3,6\}_{2,1}^6 \mid n=1,2,\dots,15, (15/4)^{15}=1\} \quad (1)$$

состоит из 15 конгруэнтных объединений тетраэдров  $\{3,6\}_{2,1}^6$  и представляет собой 60-вершинное объединение (по граням) 60 тетраэдров из политопа  $\{3,3,5\}$  (рис. 2 г). Данное объединение тетраэдров назовём Т-спиралью. Вершинами Т-спирали в  $\{3,3,5\}$  являются все вершины типа А, чётные вершины типа В и нечётные вершины типа С. В силу центросимметричности  $\{3,3,5\}$ , оставшиеся 60 вершин принадлежат (конгруэнтному Т-спирали) объединению 60 тетраэдров и являются всеми вершинами D, чётными вершинами С и нечётными вершинами В (рис. 1 в, г). Все вершины Т-спирали охватываются 15 непересекающимися тетраэдрами, что позволяет рассматривать её как объединение тетраэдров (симплексов  $E^3$ ) связной суммой. Т-спираль содержит 2 спирали  $15/4$  (и часть рёбер спирали  $30/11$ ) из спирали К-Б. Таким образом, спираль К-Б находится внутри тора, который снаружи обвивает Т-спираль (рис. 1 а, рис. 3 б [6], рис. 2 г). Изложенное позволяет определить Т-спираль как минимальную связную сумму ячеек политопа  $\{3,3,5\}$  (тетраэдров), охватывающую половину его вершин и все вершины его многоугольника Петри.

Представление 15 чётных (белых) и нечётных (чёрных) вершин типа А,В,С,Д (рис. 1 в) как объединения трёх пятёрок позволяет отобразить вершины политопа  $\{3,3,5\}$  на полиэдр Кельвина  $[4^6, 6^8]$  с чёрно-белыми вершинами (рис. 1 д). При таком отображении верхний и нижний гексагоны соответствуют спиралям  $30/11$  с вершинами типа D и А, Т-спирали (рис. 1 г) соответствует тройка четырёхугольников  $9-8-5-10$ ,  $7-7-6-12$ ,  $8-9-4-11$ , а конгруэнтной ей Т-спирали – конгруэнтная тройка четырёхугольников. Бинарный трёхкоординированный граф такого полиэдра отображается таблицей инцидентности [16], которая определяется подгруппой  $A_4 \times S_3$  группы  $M_{12}$  (рис. 1 д). Данная подгруппа действует на двух орбитах из 12 элементов в каждой. При



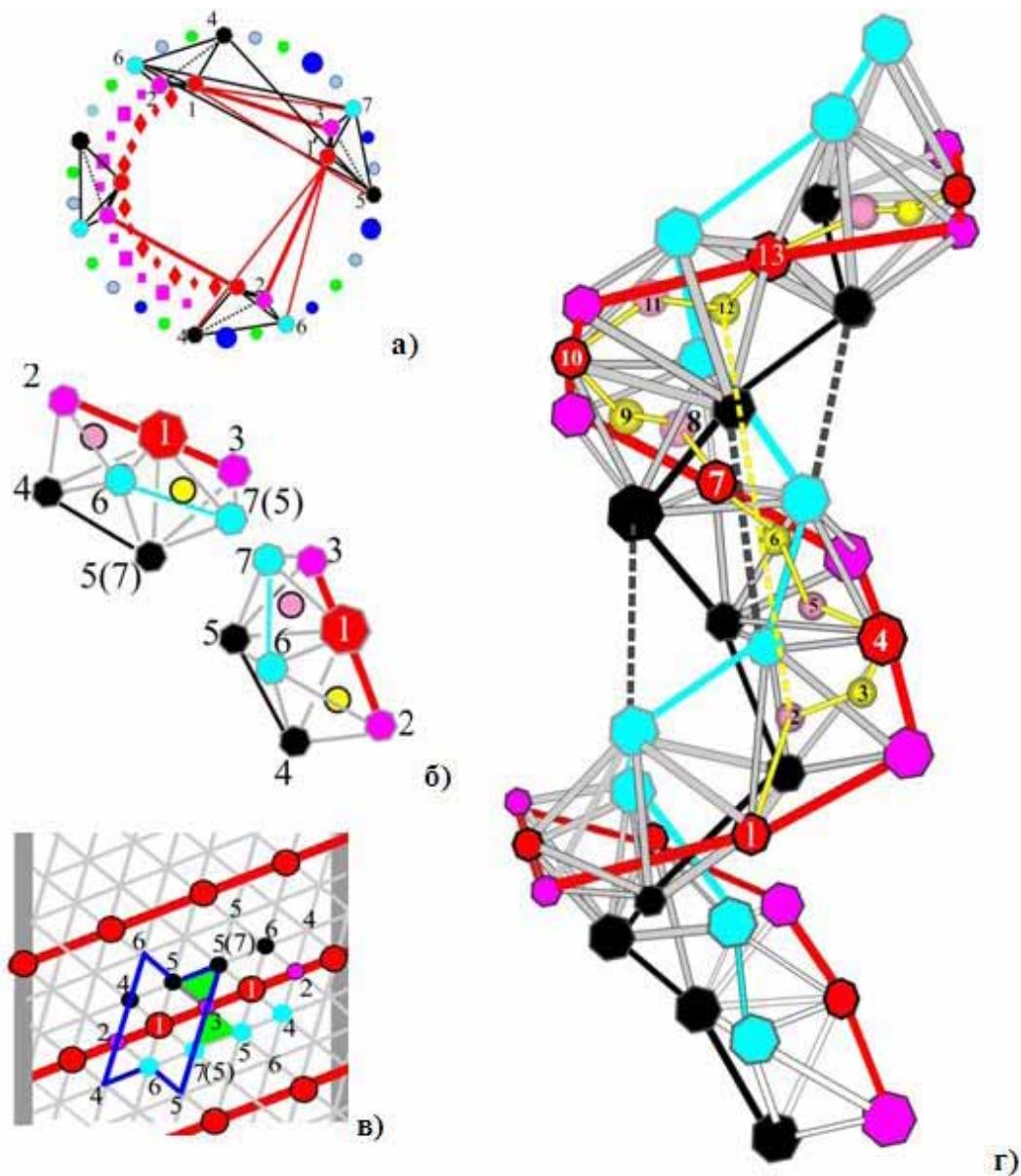


Рис. 2 а) Между двумя ближайшими тетраэдрами, представленными на рис. 1 г, находятся три объединяемых по граням правильных тетраэдра (с общей вершиной 1), которые образуют с первым тетраэдром 7-вершинное объединение  $\{3,6\}_{2,1}^6$ . б) Объединение двух 7-вершинников  $\{3,6\}_{2,1}^6$  по общей грани 3-5-7. Рёбра, принадлежащие одной спирали 10/1 из тетраэдрической спирали К-Б, показаны красным, чёрным и голубым цветами. В центрах двух «наружных» тетраэдров объединения  $\{3,6\}_{2,1}^6$  размещены жёлтый и розовый шары. в) Развёртка  $\{3,6\}_{2,1}^6$  показана синими линиями. Объединение двух  $\{3,6\}_{2,1}^6$  происходит при отождествлении зелёных треугольных граней. Объединение 15 развёрток  $\{3,6\}_{2,1}^6$  приводит к решётчатой развёртке цилиндра. г) Объединение 7-вершинников  $\{3,6\}_{2,1}^6$  в Т-спираль из правильных тетраэдров. Чёрная и голубая спирали 40/11 – две деформированные спирали 15/4, пробегающие все вершины деформированной спирали К-Б, которую обвивает Т-спираль, находящаяся внутри. Остальные вершины Т-спирали принадлежат красной спирали 40/11. Внутри Т-спирали жёлтым цветом показана  $\alpha$ -спираль, её пронумерованные атомы определяют цикл  $4_{13}$ , который замыкается жёлтым пунктиром [9]. Водородные связи параллельны чёрным пунктирным линиям.

этом каждая орбита состоит одновременно из 4-х импримитивных 3-элементных множеств и 3-х импримитивных 4-элементных множеств [2, с. 357].

## 2. Политопы {720}, {480}, T\*-спираль и $\alpha_0$ -спираль

Центрирование всех 600 тетраэдров политопы {3,3,5} определяет вершины дуального ему политопы {5,3,3}, задаваемого тетракоординированным разбиением  $S^3$  на 120 додекаэдров {5,3}. Объединение {5,3,3} и {3,3,5} приводит к нерегулярному политопу {720}. Группа симметрии {5,3,3} та же, что и {3,3,5}, поэтому (аналогично (1)) в {5,3,3} существует замкнутое спиральное объединение по граням 15 додекаэдров:

$$15/4 \cdot \{5,3\} = \{(15/4)^n \{5,3\} \mid n=1,2\dots 15, (15/4)^{15} = 1\} \quad (2),$$

представляющее собой орбиту 15/4. В каждом из 15 додекаэдров (2) можно выделить пентагональную грань {5}, 4 вершины которой, обозначаемые {4'}, соединяют три ребра. При соединении ближайших трёхреберников ребром додекаэдра (не принадлежащим граням с трёхреберниками) возникает 60-вершинная 60-рёберная спираль, вершины которой являются центрами тетраэдров T-спирали (рис. 3 а). Полученную таким образом спираль назовем T\*-спиралью:

$$15/4 \cdot \{4'\} = \{(15/4)^n \{4'\} \mid n=1,2\dots 15, (15/4)^{15} = 1\} \quad (3).$$

Центры тетраэдров, образующих спираль К-Б, являются вершинами {5,3,3}; они образуют спираль 30/11, которую обвивает T\*-спираль (рис. 3 а). Можно показать, что 5-рёберный фрагмент 1-2-3-4-5-6 спирали 30/11 конгруэнтен 5-рёберному фрагменту 1-2-3-4-5-6 T\*-спирали, в котором его трёхреберная часть 2-3-4-5 соответствует объединению 4-х тетраэдров  $\{3,6\}_{2,1}^6$ .

Трёхреберник 2-3-4-5 принадлежит додекаэдру, который имеет общие грани со вторым и третьим додекаэдрами спирали додекаэдров (2). На рис. 3 а показаны только эти общие грани, центр  $1_T$  данного додекаэдра (показанный квадратиком) является вершиной 1 в объединении  $\{3,6\}_{2,1}^6$  четырёх тетраэдров (рис. 2 б). Вершины T\*-спирали 2 и 5 являются вершинами тетраэдра с центром в  $1_T$ , поэтому угол 2- $1_T$ -5 является тетраэдрическим, а объединение двухреберников типа 2- $1_T$ -5 образует спираль из вершин T- и T\*-спиралей. Данную спираль назовем  $\alpha_0$ -спиралью (рис. 3 а).

Двухрёберник 2- $1_T$ -5 принадлежит нерегулярному политопу {240}, который образуют 120 вершин {3,3,5} и 120 вершин {5,3,3}. Группа симметрии политопы {240} обладает циклической подгруппой -40/9 [12], которая, в свою очередь, содержит подгруппу -20/9, соответствующую оси вращения на  $-162^\circ$ . Наличие такой подгруппы означает наличие и подгруппы 20/11, которая принадлежит и подгруппе 40/11 нерегулярного политопы {480}, возникающего при определённом «удвоении» {240}:

$$-40/9(240) \rightarrow -20/9(240) \rightarrow 20/11(240) \rightarrow 20/11(480) \rightarrow 40/11(480) \quad (4).$$

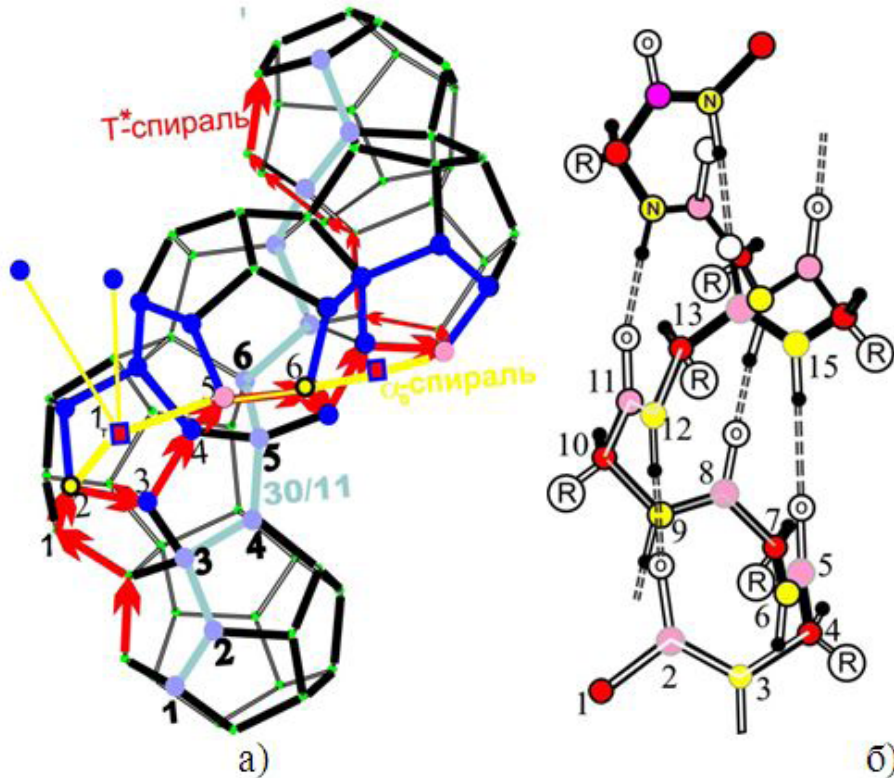


Рис. 3. а) Спираль с симметрией  $15/4$ , образованная додекаэдрами в политопе  $\{5,3,3\}$ . Красные стрелки соединяют вершины  $T^*$ -спирали, спираль  $30/11$  в  $\{5,3,3\}$  показана сине-зелёным цветом. Фрагменты 1-2-3-4-5-6 и 1-2-3-4-5-6 данных спиралей конгруэнтны. Додекаэдр с (показанным красным квадратиком) центром в  $1_T$  граничит по двум граням с соседними додекаэдрами спирали, показанными жирными синими линиями. Его 4 вершины, соединенные с  $1_T$  жёлтыми линиями, являются вершинами тетраэдра. Толстая жёлтая линия выделяет  $\alpha_0$ -спираль. б) Структура  $\alpha$ -спирали, боковые группы обозначены буквой R, водородная связь показана пунктиром. (рис. 7-5 [9]). Красные, розовые, жёлтые, белые и чёрные шары изображают атомы  $C_\alpha$ ,  $C'$ , N, O и H.

В отличие от  $\{240\}$ , вершины  $\{480\}$  не принадлежат политопу  $\{720\}$ , а группа его симметрии определяется соотношениями  $[7, 4]$ :

$$(30/11)^3 = (40/11)^4 = - (40/9)^4 = 10/1 \quad (5),$$

которые, при отбрасывании  $(40/11)^4$ , определяют  $\{240\}$ . Симметрия  $40/11$  обеспечивает спиральное вращение на  $99^\circ$ , весьма близкое к вращению на  $96^\circ$ , задаваемому осью  $15/4$ .

«Первичная» спираль К-Б и обвивающая её «вторичная» Т-спираль состоят из правильных тетраэдров только в политопе  $\{3,3,5\}$ . В  $E^3$  правильные тетраэдры спирали К-Б, либо обвивающей её Т-спирали (либо той и другой) должны быть незначительно искажены. В силу «первичной» симметрии  $30/11$  в политопе  $\{720\}$  и нерегулярном политопе  $\{480\}$ , незначительная деформация тетраэдров при отображении спиралей в  $E^3$  способна привести к замене «вторичной» симметрии  $15/4$  на близкую ей «вторичную»

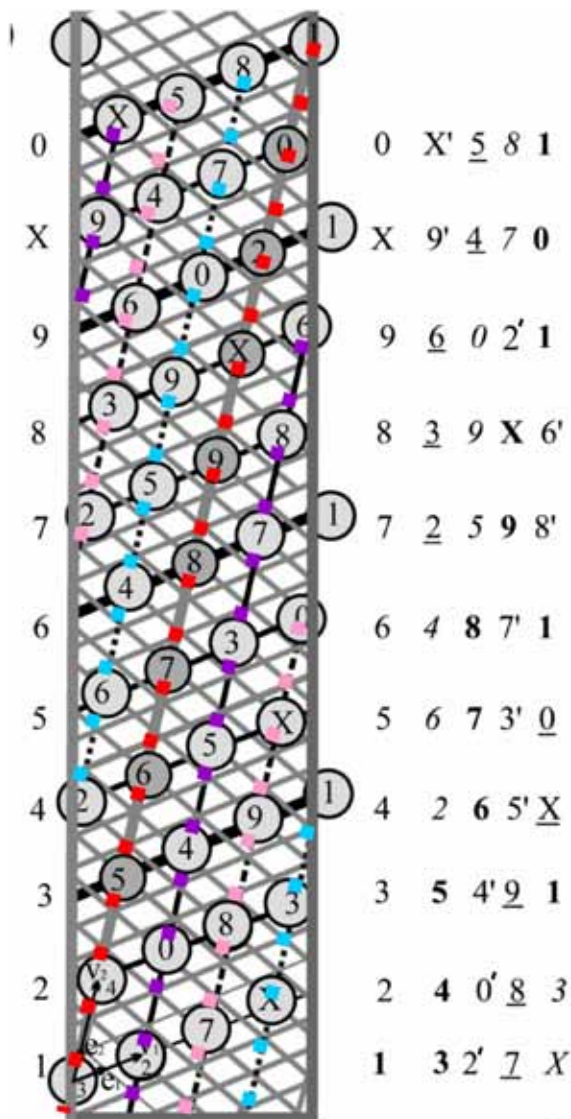


Рис. 4. Развёртка цилиндрической аппроксимации  $\alpha$ -спирали с осью 40/11 для атомов  $C_\alpha$  вкладывается в решётку с базисными векторами  $e_1$  и  $e_2$ , которая содержит подрешётку на базисных векторах  $V_1$  и  $V_2$ . На выделенных жирными линиями витках расположено по 3 атома, на остальных – по 4. Атомы  $i$  и  $i+4$  принадлежат (с учётом отождествления вертикальных границ полосы) одной из четырёх  $i$ -прямых,  $i=1,2,3,4$  показанных красной, фиолетовой, розовой и сине-зелёной пунктирными линиями. Биплоскость 2-(11,5,2), как матрица  $11 \times 5$  из 11 строк, по 5 чисел в каждой. Первый столбец биплоскости нумерует витки на развёртке  $\alpha$ -спирали. Без 1 оставшаяся матрица соответствует распределению атомов  $C_\alpha$  и по виткам, и по  $i$ -прямым. Соответствующие  $i$ -прямым числа показаны: жирными, со штрихом, подчеркнутыми, курсивом[4].

симметрию 40/11. При соответствии в  $\alpha_0$ -спирали вершин T- и T\*-спиралей атомам  $C_\alpha$ ,  $C'$  и N это обеспечивает её трансформацию в идеальную (геометрическую)  $\alpha$ -спираль (рис. 3 а, б) с  $40/11=3.63(63)$  остатками на виток и соотношением  $i \rightarrow (i+4)$  для групп остатков как реализацией соотношения  $(40/11)^4=10/1$  (рис. 3 б, рис. 4).

T-спираль может быть собрана из объединяемых по граням объединений тетраэдров  $\{3,6\}_{2,1}^6$  (рис. 2 б). Склеив развёртки соседних  $\{3,6\}_{2,1}^6$  (рис. 2 в), получим развёртку идеальной  $\alpha$ -спирали (рис. 4), на которой показаны лишь 40 атомов  $C_\alpha$  [4]. В [8] выделяются «относительные максимумы для длин из 7, 11 и 15 остатков, отвечающие 2, 3 и 4 виткам», что соответствует разбиению 40 атомов  $C_\alpha$  по этим виткам на 7,7,11 и 15:

$$(7+7+11+15)/(2+2+3+4)=3,63(63)=40/11 \quad (6)$$

Если каждое такое отношение остатков на число полных витков считать осью и усреднить их, то получим соотношение, связывающее ось 40/11 идеальной  $\alpha$ -спирали с осью  $\alpha$ -спирали, определённой Полингом [13]:

$$(7/2+7/2+11/3+15/4)/4=3,6042 \rightarrow 18/5 \quad (7).$$

### Заключение

Размещение остатков  $\alpha$ -спирали по 11 виткам и симметричные соотношения для T-спирали (рис. 1 д), позволяют предположить наличие соответствующей симметричной конструкции и для  $\alpha$ -спирали. Такой конструкцией оказалась 2-(11,5,2) схема блокового дизайна или биплоскость [11], которая представляет собой особое объединение 11 блоков (по 5 чисел в каждом), выделяемых из множества 11 чисел от 0 до 10 (число 10 обозначается X). Блоки выделяются таким образом, что каждое из чисел принадлежит 5 блокам, каждая пара чисел – 2 блокам, а каждая четвёрка чисел – только 1 блоку (рис. 4). Группой автоморфизмов (порядка 660), биплоскости является группа  $PSL_2(11)$  – предельная из 4-х особых групп, определённых Галуа [2, 11].

Использованные в работе (явно или неявно) конструкции можно условно объединить в цепочку: минимальное поле Галуа  $p=2 \rightarrow$  минимальная конечная проективная геометрия  $PG(2,2) \rightarrow$  карта  $\{3,6\}_{2,1} \rightarrow$  7-вершинное ( $7=2^2+2+1$ ) объединение тетраэдров  $\{3,6\}_{2,1}^6 \rightarrow$  T-спираль из политопа  $\{3,3,5\}$ , собираемая из  $\{3,6\}_{2,1}^6 \rightarrow$  T\*-спираль из политопа  $\{5,3,3\} \rightarrow$  ось 40/11 из политопа  $\{480\} \rightarrow$  распределение  $C_\alpha$  по виткам идеальной  $\alpha$ -спирали  $\rightarrow$  вложение данного распределения в биплоскость 2-(11,5,2)  $\rightarrow$  поле Галуа  $p=11 \rightarrow$  группа  $PSL_2(11) \rightarrow$  группа Матье  $M_{11} \rightarrow M_{12} \rightarrow M_{24} \rightarrow$  8-мерная кристаллографическая решётка корней  $E_8$  (максимальной исключительной алгебры Ли  $e_8$ ) с подгруппой автоморфизмов  $M_{24}$ .

Решётка  $E_8$  определяет класс из 35 винтовых осей, в который, помимо 30/11, 15/4, 18/5, 40/11 и других [3, 6], входят оси:  $30/7=4,2857$ ;  $10/3=3,3333$ ;  $30/13=2,3077$  и 24/11. Согласно табл. 5.1 [8], «линейные группы, образуемые полипептидными цепями» число остатков на виток равно: в  $\pi$ -спирали +4,3, в спирали коллагена в волокнах -3,3, в скрученной  $\beta$ -структуре -2,3. Согласно [9], угол закрутки  $\beta$ -тяжа составляет  $165^\circ$ , т.е.  $360^\circ: (24/11)$ . Таким образом, подобно тому как кубическая и гексагональная решётки определяют оси кристаллов, решётка  $E_8$  определяет оси  $\alpha$ -спирали и других спиральных подструктур биополимеров (вторичной структуры белка). Подробно рассмотренный в данной статье и в [4, 7] пример  $\alpha$ -спирали позволяет (с большой долей уверенности) утверждать, что симметрия объединений спиральных подструктур биополимеров (третичная структура белка), в итоге, также определяется подструктурами  $E_8$ .

Автор выражает глубокую признательность М.И. Самойловичу и В.С. Крапошину за многолетний постоянный интерес к работе и стимулирующие обсуждения. Автор благодарит Ю.Л. Войтеховского и Д.Г. Степенщикова за внимание и поддержку.

## Список литературы

1. Дубровин Б.Л., Новиков С.П., Фоменко А.Т. Современная геометрия. М.: Эдиториал, 2001. Т. 1, 336 с. Т. 2, 296 с. Т. 3, 288 с.
2. Конвей Дж., Слоэн Н. Упаковки шаров, решетки и группы. М.: Мир, 1990. Т. 1. 414 с.
3. Самойлович М.И., Талис А.Л. // Кристаллография. 2007. № 4. С. 599.
4. Самойлович М.И., Талис А.Л. // Кристаллография. 2013. № 4. С. 521-529; № 5. С. 659-671.
5. Талис А.Л. // Тр. V Всерос. научн. школы «Математические исследования в естественных науках». Апатиты: ГИ КНЦ РАН, 2009. С. 56-64.
6. Талис А.Л. // Тр. VI Всерос. научн. школы «Математические исследования в естественных науках». Апатиты: ГИ КНЦ РАН, 2010. С. 75-89.
7. Талис А.Л. // Тр. IX Всерос. Ферсмановской научн. сессии. Апатиты: ГИ КНЦ РАН, 2012. С. 81-86.
8. Шульц Г., Ширмер Р. Принципы структурной организации белков. М.: Мир, 1982. 242 с.
9. Финкельштейн А.В., Птицын О.Б. Физика белка. М.: Кн. дом Университет, 2005. 376 с.
10. Coxeter, H.S.M. Regular polytopes. New-York: Dauer, 1973. 321 p.
11. Kostant B. // Not. Amer. Mat. Soc. 1995. P. 959-965.
12. Mosseri R., Di Vincenzo D.P., Sadoc J.F., Brodsky M.H. // Phys. Rev. 1985. B32. P. 3974-4000.
13. Pauling, L., Corey R.B., Branson H.R. // Proc Nat. Acad. Sci. USA. 1951. N 37. P. 205-211.
14. Sadoc F.J., Rivier N. // Eur. Phys. J. 1999. B12. P. 309-316.
15. Sadoc F.J. // Eur. Phys. J. 2001. E5. P. 575-582.
16. Samoylovich M.I., Talis A.L. // Acta Cryst. 2010. A66. P. 616-625.

## СПИРАЛЬ С ДВУМЯ УГЛАМИ ВРАЩЕНИЯ И ДРУГИЕ НЕКРИСТАЛЛОГРАФИЧЕСКИЕ СИММЕТРИИ (БИО)ПОЛИМЕРОВ

Талис А.Л.

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

*Симметрия (био)полимеров различных типов отображается в рамках алгебраической геометрии. Определена упаковка правильных тетраэдров в спираль с двумя углами вращения, которая трансформируется в спираль 41 из ГЦК-решетки.*

### Введение

Эта статья является продолжением статей [5-9] и, в основном, посвящена определению такой принципиально некристаллографической симметрии как спираль с двумя углами вращения. Также будет продолжено рассмотрение симметрий (био)полимеров различных типов, отображаемых конструкциями алгебраической геометрии.

### 1. Обладающая двумя углами вращения спираль из тетраэдров и её трансформация в спираль из ГЦК-решётки

Винтовая ось  $10_1$  политопа  $\{3,3,5\}$  совпадает с одной из его двух главных осей и является осью 60-вершинного стержня (замкнутого в тор) из 10 пересекающихся икосаэдров [12]. На оси такого стержня расположены 10 вершин, между которыми располагаются 10 боковых пятёрок вершин (рис. 1 а). Если из каждой боковой пятёрки отбросить 2 вершины, то получим 40-вершинное объединение тетраэдров [8], которое представляет собой орбиту винтовой оси  $10/3$  (поворот на  $108^\circ$  и трансляция) 7-вершинных объединений тетраэдров  $\{3,6\}_{2,1}^6$ :

$$10/3 \cdot \{3,6\}_{2,1}^6 = \{(10/3)^n \{3,6\}_{2,1}^6 | n=1,2 \dots 10, (10/3)^{10} = 1\} \quad (1).$$

По аналогии с Т-спиралью [9], определяемой подобным соотношением, назовём данное спиральное объединение тетраэдров t-спиралью. Можно сказать, что t-спираль реализует допускаемое политопом  $\{3,3,5\}$  «совмещение» симметрии 5-ой (10-ой) оси с симметрией оси  $30/11$ . При проектировании на плоскость 120 вершин  $\{3,3,5\}$  попадают в вершины 4-х концентрических 30-вершинников А, В, С, D; вершины двух из которых (А и D) совпадают с вершинами «симметричных» многоугольников Петри [11]. «Несимметричный» 30-вершинный многоугольник Петри, например, с вершинами А, В и С разбивается на три 10-вершинные спирали  $10/1$ . Поэтому в  $\{3,3,5\}$  вершины одной такой спирали  $10/1$  являются и вершинами 10 непересекающихся тетраэдров, остальные вершины которых не принадлежат данному многоугольнику Петри. Эти 10 тетраэдров охватывают все вершины одной t-спирали (рис. 1 б). Спиралей  $10/1$  - три, поэтому определяемые ими t-спирали охватывают все 120 вершин  $\{3,3,5\}$ , реализуя обвивание центральной спирали Коксетера-Бордийка тремя конгруэнтными ей спиралями (рис. 1 в).

Переброски диагоналей в «ромбах» из двух соседних треугольников [6] t - и Т -спиралей (рис. 1 г, е) трансформируют эти спирали в одну и ту же спираль из ГЦК-решётки, которая является орбитой одношاپочных октаэдров (октаэдр и стоящий на нем тетраэдр) винтовой оси  $4_1$ . Подчеркнём, что все вершины ГЦК-решётки охватываются такими непересекающимися спиралями  $4_1$  (рис. 4 г [6]) аналогично тому, как все вершины  $\{3,3,5\}$  охватываются непересекающимися Т- и t-спиралями.

Перебрасываемая диагональ «ромба» является общим ребром трёх объединяемых по граням правильных тетраэдров, которые определяют топологическую операцию связной суммы (в форме разбиения цилиндра над симплексами рис. 35 [1]), обозначаемую символом #. В результате переброски данные тетраэдры трансформируются в октаэдр, а  $\{3,6\}_{2,1}^6$  в 7-вершинный одношاپочный октаэдр. Обратная трансформация спирали  $4_1$  из ГЦК в Т- и t-спирали осуществляется перебросками двух различных систем рёбер этой спирали. Таким образом, существует единая спираль  $T\#t$  с углами вращения

в  $\{3,3,5\}$  на  $96^\circ$  и  $108^\circ$ , которая объединяет Т- и t-спирали по трём тетраэдрам, соответствующим связной сумме.

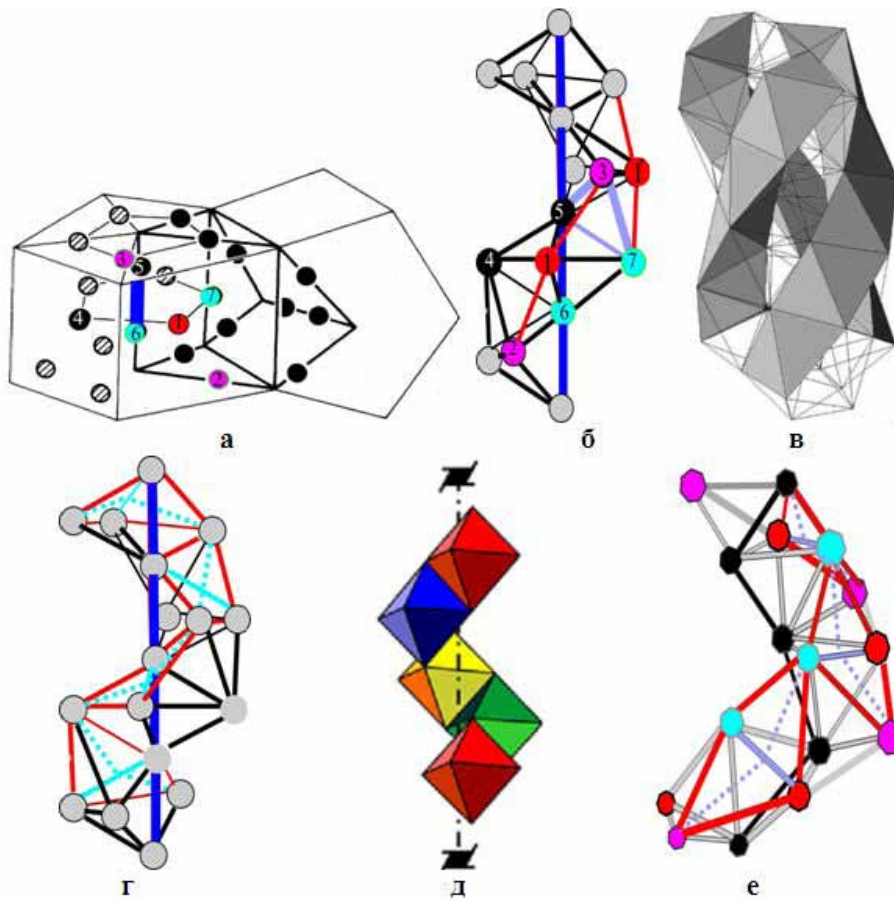


Рис. 1. (а) Расположение вершин политопа  $\{3,3,5\}$  в соответствии с разбиением сферы  $S^3$  на пентагональные призмы (рис. 12 [12]). (б) Часть t-спирали, являющаяся объединением 7-вершинников  $\{3,6\}_{2,1}^6$  по граням. Ось спирали показана синим цветом, общая грань двух 7-вершинников – фиолетовым, 7-вершинник  $\{3,6\}_{2,1}^6$  соответствует рис. 2 б [9]. Перпендикулярные оси тройки вершин являются (показанными на рис. а) вершинами пентагонов. (в) Симплициальный геликоид Коксетера и три обвивающих его геликоида из деформированных тетраэдров (рис. 4.8. [4]). (г) Спираль б), в которой замена голубого ребра на изображённое пунктиром приводит к трансформации в спираль д) из ГЦК-решётки. (д) Спираль  $4_1$  из граничащих по рёбрам октаэдров (рис. 4 в [6]). (е) Часть Т-спирали (рис. 2 г [9]). Замена фиолетового ребра на изображённое пунктиром приводит к трансформации спирали в спираль д) из ГЦК-решётки.

Политоп  $\{5,3,3\}$ , дуальный  $\{3,3,5\}$ , задаётся тетракоординированным разбиением  $S^3$  на 120 додекаэдров  $\{5,3\}$  и обладает той же группой симметрии. Поэтому в  $\{5,3,3\}$  существует замкнутое спиральное объединение по граням 10 додекаэдров:

$$10/3 \cdot \{5,3\} = \{(10/3)^n \{5,3\} \mid n=1,2,\dots,10, (10/3)^{10}=1\} \quad (2),$$

представляющее собой орбиту оси  $10/3$ . В каждом из 10 додекаэдров (2) можно выделить 4 вершины, которые соединяют три боковых рёбра. При



соединении ближайших трёхрёберников ребром основания додекаэдра возникает 40-вершинная 40-рёберная спираль, вершины которой являются центрами тетраэдров  $t$ -спирали. Полученную таким образом спираль назовём  $t^*$ -спиралью, её (показанные зелёным цветом на рис. 2 а) трёхрёберники соответствуют объединениям 4-х тетраэдров  $\{3,6\}_{2,1}^6$ .

Группе симметрии  $\{3,3,5\}$  свойственны соотношения:

$$(30/11)^6 = - (15/4)^3 = (10/1)^2 \quad (3),$$

которые определяют возможность объединения спиралей 10/1 и 15/4 (рис. 2 в). Замена вершин  $\{3,3,5\}$  дуальными им додекаэдрами позволяет получить единую спираль при объединении спиралей додекаэдров  $10/3\{5,3\}$  (рис. 2 а) и  $15/4\{5,3\}$  (рис. 3 а [9]) по додекаэдру (третьему снизу), входящему в обе спирали (рис. 2 б). При этом  $T^*$ - и  $t^*$ -спирали объединяются в  $T^*\#t^*$ -спираль по

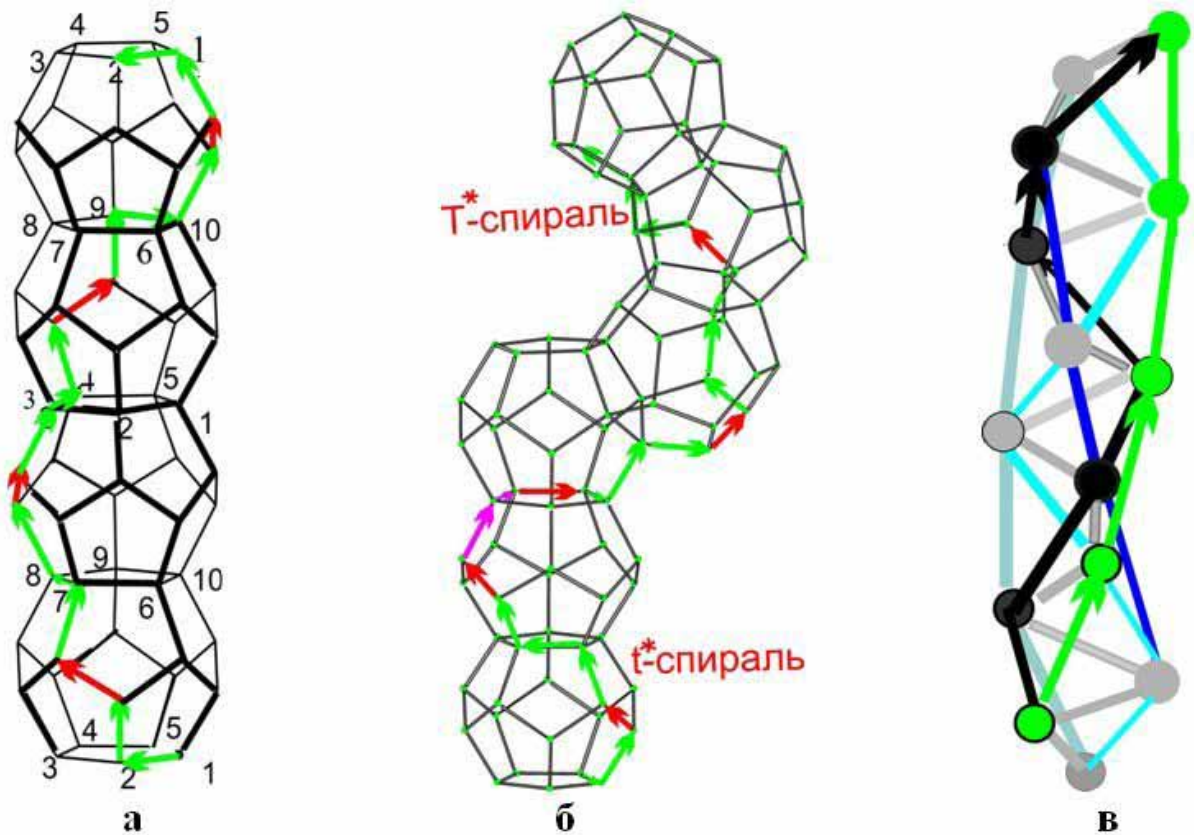


Рис. 2. (а) Стержень додекаэдров из политопа  $\{5,3,3\}$ , по рёбрам которого проходит показанная стрелками  $t^*$ -спираль. Три зелёных стрелки соединяют 4 вершины, соответствующие 4 тетраэдрам объединения  $\{3,6\}_{2,1}^6$ . Перпендикулярно красной стрелке проходит общая грань двух  $\{3,6\}_{2,1}^6$ . (б) Объединение стержня а) и спирали 15/4 из додекаэдров (рис. 3 а [9]) по общей грани. Объединение  $T^*$ - и  $t^*$ -спиралей происходит по фиолетовым рёбрам, которые соединяют 3 вершины – центры тетраэдров, соответствующих связной сумме. (в) Тетраэдрическая спираль Коксетера-Бордийка, в которой спираль 30/11, две спирали 15/4 и 3 спирали 10/1 показаны серым; чёрным, голубым; синим, зелёным и сине-зелёным цветами. Стрелки показывают ход спирали, объединяющей зелёную спираль 10/1 и чёрную 15/4.

двум фиолетовым рёбрам, соединяющим центры трёх тетраэдров с общим ребром, которые соответствуют операции связной суммы (рис. 2 б). Спирали  $T^* \# t^*$  и  $T \# t$  являются дуальными.

## 2. Упаковки $\alpha$ -спиралей в белках и некристаллографические симметрии различных типов (био)полимеров

Согласно оригинальной статье [13] и лекции [17], в глобулярных белках  $\alpha$ -спирали располагаются по рёбрам «квазисферических многогранников». Согласно [10], «упаковки и мотивы укладки цепи в белковую глобулу сосредотачивают наше внимание не просто на всевозможных (рыхлых, ажурных и т.п.) комплексах из структурных сегментов, а лишь на тех, где они, эти структурные сегменты, уложены плотно». В [17] справедливо указано, что белкам (как объединению глобул) должны соответствовать комбинации простых упаковок «квазисферических многогранников». Однако, как и для  $\alpha$ -спирали [5, 9], вопрос о симметричном определении упорядоченных некристаллических упаковок, реализующихся в белках, остается актуальным.

Как отмечено в [7], данные «квазисферические» многогранники представляют собой многогранники пустоты Бернала. В [14] они определены как результат введения вдоль пятерных осей икосаэдра  $72^\circ$ -дисклинаций (рис. 3 а), взаимодействие которых (рис. 3 б, в) определяется таблицей умножения группы  $Y'$  единичных кватернионов. Группе  $Y'$  однозначно соответствует множество вершин политопа  $\{3,3,5\}$ , который определяется 4-мерной системой  $H_4$  из 120 векторов. Особые 3-мерные подсистемы  $H_4$  определяют систему объединений правильных тетраэдров и равнорёберных, триангулированных полиэдров, которая представлена в табл. 4. [16]. Полиэдры пустоты Бернала (они же «квазисферические многогранники» [13, 10]) находятся в её последнем столбце.

Система  $H_4$  определяется системой  $E_8$ , от которой можно перейти к конструкциям проективной геометрии, позволяющим, в частности, определять и графы полиэдров Бернала. Например, граф удвоенного алмазоподобно-

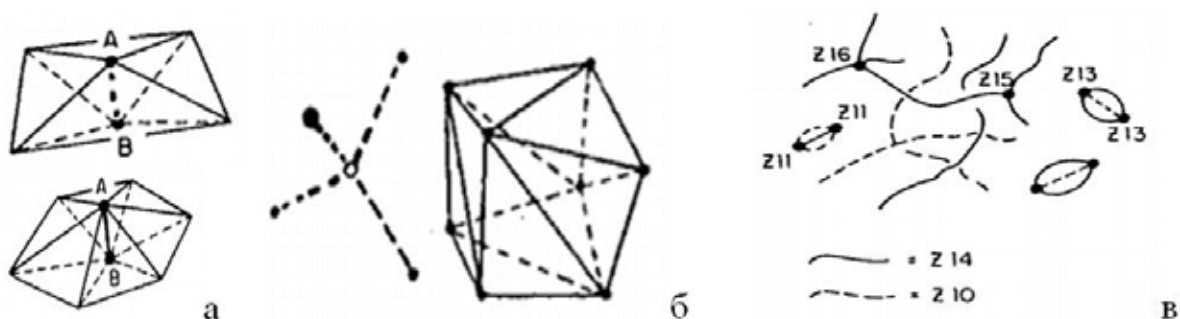


Рис. 3. (а).  $+(-)72^\circ$ -дисклинация, трансформирующая пятёрную шапочку икосаэдра в четверную (шестерную). (б) Полиэдр Бернала  $Z_8$  как результат введения в икосаэдр четырёх  $+72^\circ$ -дисклинаций (в) Пунктирные и сплошные линии дисклинаций в «икосаэдрической» среде проходят через четверные и шестерные шапочки (а).

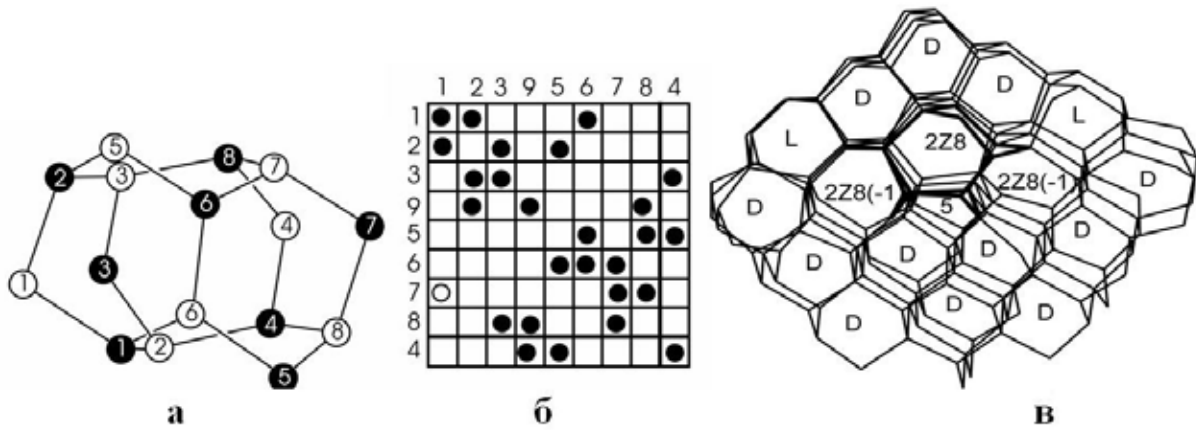


Рис. 4. (а) Объединение двух (чёрного и белого) полиэдров Бернала Z8 двойной осью (проходящей перпендикулярно середине ребра б-б') в 16-вершинный алмазоподобный кластер 2Z8. (б) Таблица инцидентности (ТИ), полученная перестановкой строк и столбцов 4, 9 из ТИ конфигурации  $(9_3)_2$ . Её подтаблица 8×8 определяет кластер 2Z8 лишь с одной неалмазоподобной связью, показанной белым кружком. (в) Генерирование кластером 2Z8 слоя упорядоченной некристаллической алмазоподобной структуры. Канал, обозначенный цифрой 5, принадлежит ядру краевой дислокации в алмазе. Буквами D и L обозначены каналы в алмазе и лонсдейлите.

го полиэдра Бернала 2Z8 (рис. 3 б, 4 а) определяется таблицей инцидентности (ТИ) 8×8, в которой белым вершинам соответствуют столбцы, чёрным – строки, а рёбрам – знаки инцидентности (рис. 4 б). Эта ТИ подконфигурации конфигурации  $(9_3)_2$  конечной проективной геометрии определяет и граф Z8. Например, первый столбец, т.е. белая вершина 1 пересекается только с 1-ой и 2-ой строками, которые пересекаются с 2, 3, 5 и 6 столбцами. Это означает наличие существующих у Z8 рёбер между белой вершиной 1 и белыми вершинами 2,3,5,6. В рамках развиваемого подхода получены и упорядоченные алмазоподобные некристаллические структуры, генерируемые, например, полиэдром 2Z8 (рис. 4 в). Объединение рёбрами вершин одного цвета позволяет получать упорядоченные некристаллические структуры, генерируемые полиэдрами Бернала. Таким образом, рассмотренные в [5, 16] алгоритмы построения упорядоченных некристаллографических разбиений могут быть использованы для априорного определения реализующихся в белках упаковок  $\alpha$ -спиралей.

Рассмотренная выше замена в «ромбе» из двух треугольников короткой диагонали на длинную не меняет числа вершин, рёбер и граней триангулированного полиэдра. Поэтому она определяется как  $2\pi$ -дисклинация (соответствующая -1 из группы  $Y'$ ) [6, 14] и может трактоваться как деформация ромба до квадрата, в котором бывшая короткая диагональ становится равной длинной диагонали и заменяется ею. Далее происходит деформация квадрата до «ромба» из двух правильных треугольников, которая реализуется, в частности, для квадратных граней кубооктаэдра при переводе его вершин

в вершины икосаэдра [3]. Осуществляется данная трансформация (сохраняющая подгруппу тетраэдра) и посредством синхронного вращения 4-х троек вершин кубооктаэдра на угол  $\Theta$  [18, 16]. Для троек вершин второй координационной сферы алмаза она приводит к возникновению 27-вершинного кластера (вершинной фигуры) политопа  $\{240\}$  (рис. 5 а, б). Алмаз – это объединение двух ГЦК-решеток, политоп  $\{240\}$  – объединение двух политопов  $\{3,3,5\}$  [12], поэтому такая трансформация – это алмазоподобный аналог рассмотренных ранее трансформаций подструктур ГЦК в подструктуры  $\{3,3,5\}$ .

Симметрии алмазоподобных структур используются, в частности, при теоретическом моделировании поверхностей раздела, возникающих в блок-сополимерах. При этом базовыми являются трижды периодические минимальные поверхности D, P и G, связанные трансформациями Бонне  $F \rightarrow e^{i\theta}F$  [4]. Можно показать, что угол  $\Theta$  синхронного вращения троек вершин од-

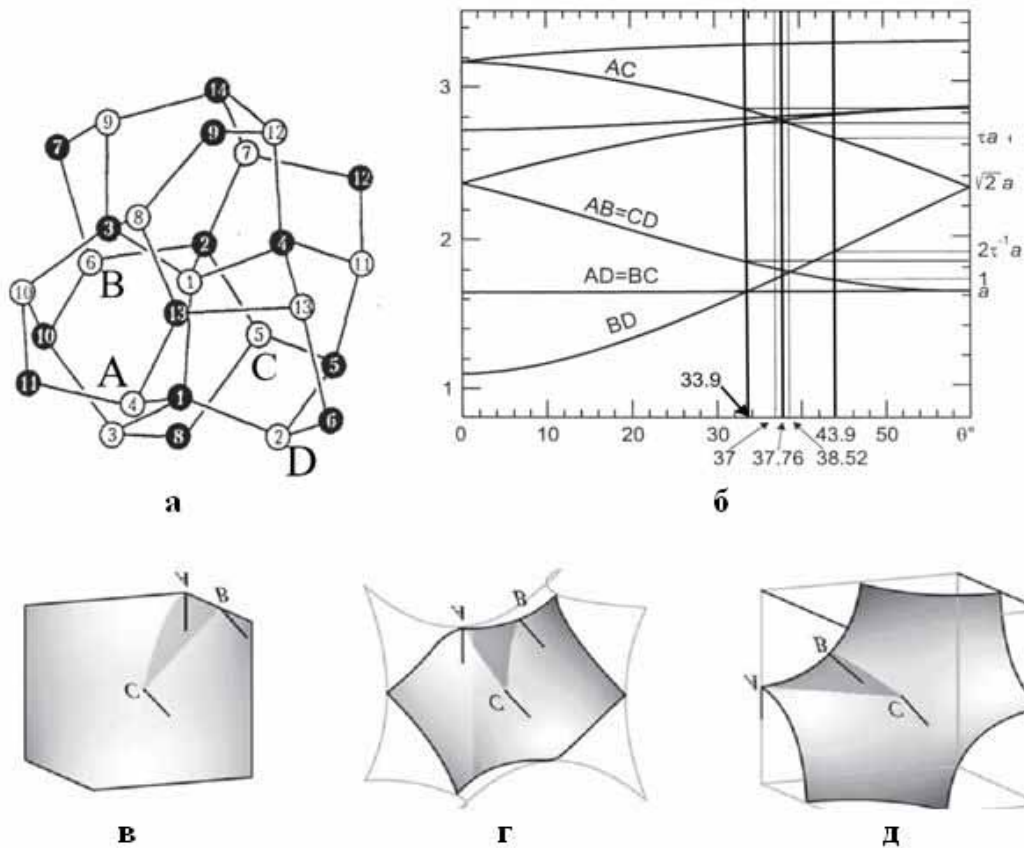


Рис. 5. (а) Синхронное вращение на угол  $\Theta$  четырёх троек атомов (2-4, 5-7, 8-10, 11-13) второй координационной сферы алмаза приводит к изменению расстояний между вершинами A и B, A и C, B и D. (б) График изменения расстояний во второй координационной сфере алмаза в зависимости от угла  $\Theta$  при синхронном вращении всех четырёх троек атомов. При  $\Theta = 38.52^\circ$  – возникает «косо-прямой» икосаэдр (18 и 12 равных между собой рёбер); при  $\Theta = 37.76^\circ$  косоугольный икосаэдр наиболее близок к икосаэдру [16, 18]. Трансформация Бонне  $F \rightarrow e^{i\theta}F$ , применённая к минимальной D-поверхности: (в) гексагональный участок D-поверхности ( $\theta = 0^\circ$ ); (г) гексагональный участок на гироиде G ( $\theta = 38.015^\circ$ ); (д) гексагональный участок P-поверхности ( $\theta = 90^\circ$ ) (рис. 9.7 [4]).

нозначно соответствует углу  $\theta$  из трансформаций Бонне, а гексагональные участки на минимальных поверхностях – гексациклам (креслу, твист-ванне) 27-вершинного кластера (рис. 5).

### **Заключение**

Использованные (явно или неявно) в данной работе конструкции, в итоге, определяются подструктурами решётки  $E_8$  [3,9]. Подобно фёдоровским группам, отображающим симметрию кристаллов с различными типами химической связи, развиваемый подход пригоден для отображения симметрии различных типов (био)полимеров. В частности, он позволяет отображать симметрии насыщенных и ненасыщенных углеводородных цепочек в молекулах липидов [2]. Для этого одинарной и двойной связи атома углерода сопоставляются два разных типа объединения одних и тех же симплицальных (тетраэдрических) комплексов, а всей цепочке – подструктура, определяемая  $E_8$ . Различие определённых таким образом симметрий способно объяснить различия в свойствах «близких по строению» цепочек.

Автор выражает глубокую признательность М.И. Самойловичу и В.С. Крапошину за многолетний постоянный интерес к работе и стимулирующие обсуждения. Автор благодарит Ю.Л. Войтеховского и Д.Г. Степенщикова за внимание и поддержку.

### **Список литературы**

1. Дубровин Б.Л., Новиков С.П., Фоменко А.Т. Современная геометрия. Методы теории гомологий. М.: Наука, 1984. 343 с.
2. Методы компьютерного моделирования для исследования полимеров и биополимеров. М.: Едиториал УРСС, 2009. С. 409-450.
3. Конвей Дж., Слоэн Н. Упаковки шаров, решётки и группы. Т. 1. М.: Мир, 1990. 414 с.
4. Лорд Э., Маккей А., Ранганатан С. Новая геометрия для новых материалов. М.: Физматлит, 2010. 270 с.
5. Самойлович М.И., Талис А.Л. // Кристаллография. 2013. № 4. С. 521-529; № 5. С. 659-671.
6. Талис А.Л. // Тр. VI Всерос. научн. школы «Математические исследования в естественных науках». Апатиты: ГИ КНЦ РАН, 2010. С. 75-89.
7. Талис А.Л. // Тр. IX Всерос. Ферсмановской научн. сессии. Апатиты: ГИ КНЦ РАН, 2012. С. 81-86.
8. Талис А.Л. // Тр. VIII Всерос. научн. школы «Математические исследования в естественных науках». Апатиты: ГИ КНЦ РАН, 2012. С. 44-55.
9. Талис А.Л. / Наст. сб. С. 84-93.
10. Финкельштейн А.В., Птицын О.Б. Физика белка. М.: Книжный дом, 2005. 376 с.
11. Coxeter H.S.M. Regular polytopes. New-York: Dauer, 1973. 321 p.

12. Mosseri R, Vincenzo D.P, Sadoc J.F, Brodsky M.H. // Phys. Rev. 1985. B32. P. 3974-4000.
13. Murzin A., Finkelstein A. // Mol. Biol. 1988. N 204. P. 749-769.
14. Nelson D. // Phys. Rev. 1983. B28. P. 5515-5535.
15. Sadoc F. J., Rivier N. // Eur. Phys. J. 1999. B12. P. 309-316.
16. Samoylovich M.I., Talis A.L. A foundation for the theory of symmetry of ordered nanostructures. Moscow: CNITI Technomash, 2007. 195 p.
17. Shakhnovich E. Harvard University Boulder, CO July 25-27, 2012.
18. Yasushi I. // Acta Cryst. 1988. A44. P. 987-998.

## О ЧИСЛЕ ТРАНСЛЯЦИОННЫХ РАЗБИЕНИЙ ПЛОСКОСТИ НА ПОЛИМИНО

Малеев А.В.<sup>1</sup>, Шутов А.В.<sup>2</sup>

Владимирский государственный университет, г. Владимир

<sup>1</sup>andr\_mal@mail.ru, <sup>2</sup>a1981@mail.ru

*В работе предложен подход к решению проблемы пересчёта всех возможных трансляционных (решётчатых) разбиений плоскости на полимино с заданной площадью фундаментальной области, основанный на использовании метода дискретного моделирования.*

Важной задачей современной кристаллографии является построение математических моделей для кристаллических структур. В качестве таких моделей могут использоваться точечные множества (системы Делоне), а также периодические упаковки и разбиения. В работах [1-3] предложен метод дискретного моделирования, в котором для представления кристаллических структур используются периодические упаковки поликубов в трёхмерном пространстве с высокими коэффициентами упаковки. Поликубом здесь называется связная фигура, состоящая из конечного числа кубов, геометрические центры которых лежат в узлах кубической решётки с периодом, равным стороне кубов. Данный подход был успешно применён к решению ряда важных задач: описания особенностей молекулярных упаковок [4], генерация моделей для априорного предсказания кристаллических структур [5, 6], геометрического моделирования кристаллообразования [7].

Разбиения можно рассматривать как частный случай упаковок с коэффициентом упаковки, равным единице. В связи с этим представляет интерес задача поиска и перечисления вариантов разбиения трёхмерного пространства на поликубы заданного объёма. Такие разбиения порождают атлас теоретически возможных вариантов кристаллических структур (ср. с атласом теоретически возможных кристаллических форм, составленным школой Ю.Л. Войтеховского [8]).

В настоящей работе мы рассматриваем двумерный случай описанной проблемы, то есть вместо разбиений трёхмерного пространства на поликубы мы изучаем разбиения плоскости на полимино – двумерного аналога поликуба. Кроме того, мы рассматриваем только частный случай периодических разбиений с единственным полимино в фундаментальной области решётки трансляций. Такие разбиения называются трансляционными. Оказывается, что даже в этой ситуации возникает целый ряд интересных задач.

В основе изучения решётчатых разбиений плоскости на полимино лежит понятие упаковочного пространства. Двумерным упаковочным пространством будем называть квадратную решётку  $G$ , каждому узлу которой приписан вес таким образом, что любое множество узлов с одинаковыми весами образует одну и ту же, с точностью до параллельного переноса, подрешётку  $\Gamma$  исходной решётки  $G$ . Индекс подрешётки  $\Gamma$  называется порядком упаковочного пространства.

Легко проверить, что упаковочное пространство однозначно определяется подрешёткой  $\Gamma$ , а значит, может быть задано матрицей, состоящей из координат базисных векторов решётки  $\Gamma$ . Доказано, что базис можно выбрать таким образом, что целочисленная матрица упаковочного пространства будет иметь вид  $\begin{pmatrix} a & b \\ 0 & c \end{pmatrix}$  с целыми коэффициентами, удовлетворяющими условиям  $a > 0, b > 0, c \geq 0, b < a$ . При этом порядок упаковочного пространства вычисляется по формуле  $n = ac$ .

В работе [9] предложена кодировка разбиений плоскости на полимино, на основе которой разработан алгоритм, позволяющий перебирать все трансляционные разбиения плоскости на полимино заданной площади. С помощью компьютерной программы, основанной на этом алгоритме, нами построены все возможные варианты трансляционных разбиений плоскости на полимино с площадью  $n = 1, 2, \dots, 23$ . Количество вариантов таких разбиений  $t(n)$  представлены в таблице 1.

Таблица 1.

$n$	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14
$t(n)$	1	2	3	10	12	43	48	171	253	632	815	3205	3236	9304
$n$	15	16	17	18	19	20	21	22	23					
$t(n)$	17434	39854	48693	162797	185199	595067	892322	1797590	2606893					

На рис. 1 представлен график этой зависимости (по оси ординат использована логарифмическая шкала). Из графика видно, что число вариантов разбиений растёт экспоненциально. Количественные оценки позволили установить, что функция  $t(n)$  близка к показательной функции  $2^{n-1}$  (штриховая линия на графике). Кроме тенденции к экспоненциальному росту прослеживается зависимость  $t(n)$  от количества независимых упаковочных пространств порядка  $n$ , которое в свою очередь определяется числом делителей  $n$ .

Все простые  $n$ , для которых число упаковочных пространств минимально, дают заметное отклонение от  $2^{n-1}$  в меньшую сторону. Отклонение в большую сторону дают составные  $n$  с большим числом делителей, например  $n = 4, 6, 8, 12, 16$ . Наилучший строгий результат о функции  $t(n)$  имеет следующий вид.

**Теорема 1.** Существуют положительные константы  $c_1, c_2$  такие, что для всех  $n$  справедливо неравенство  $c_1 2^n \leq t(n) \leq c_2 2.7^n$ .

Легко видеть, что строго доказанная верхняя оценка в настоящее время довольно далека от результатов вычислительных экспериментов.

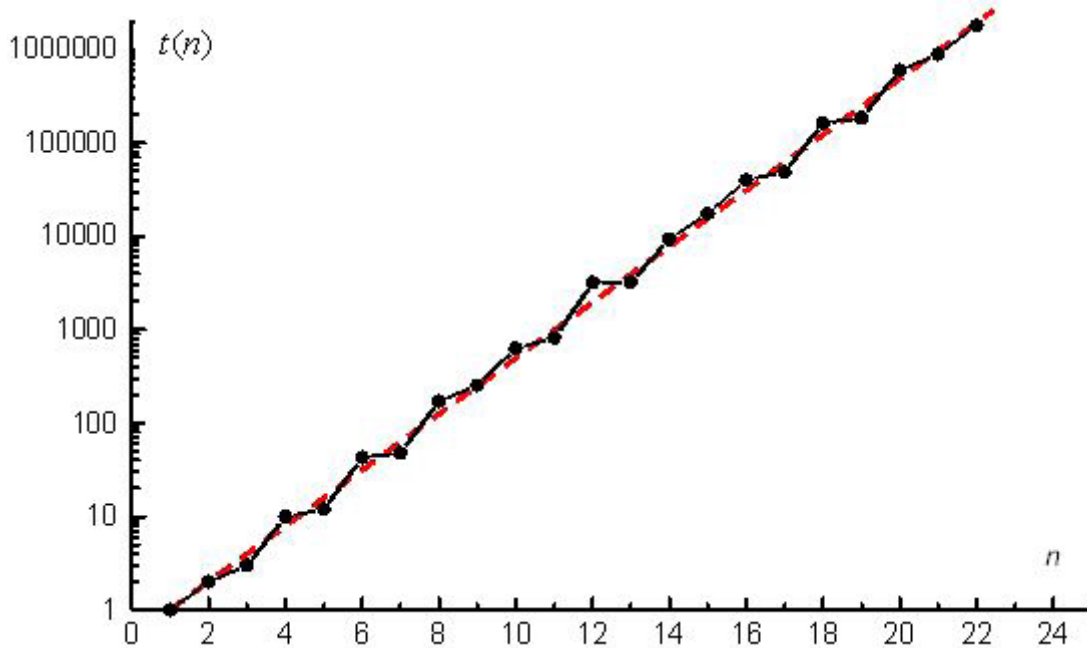


Рис. 1. Зависимость числа разбиений с одним трансляционно-независимым полимино от числа клеток в полимино.

С целью дальнейшего исследования функции  $t(n)$  естественно рассмотреть число трансляционных разбиений плоскости на полимино площади  $n$ , соответствующих заданным упаковочным пространствам. При этом наиболее интересными представляются семейства упаковочных пространств, существующие для всех достаточно больших значений  $n$ . Матрицы упаковочных пространств таких семейств имеют вид  $\begin{pmatrix} n & x \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$  с небольшими значениями  $x$ .

Обозначим через  $t_x(n)$  число трансляционных разбиений плоскости на полимино площади  $n$ , соответствующих упаковочному пространству, заданному матрицей  $\begin{pmatrix} n & x \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$ . Число вариантов разбиений  $t_x(n)$  для  $x = 1, 2, \dots, 7$  и  $n = 4, 5, \dots, 23$  представлены в таблице 2. Почти очевидна следующая теорема.



**Теорема 2.** Справедливо равенство  $t_0(n) = 1$ .

Более сложным является случай  $x = 1$ .

**Теорема 3.** Справедливо равенство  $t_1(n) = 2^{n-3} + 2^{\lfloor \frac{n-3}{2} \rfloor}$ .

Для  $x > 1$  точных формул для функции  $t_x(n)$  в настоящее время неизвестно. На рис. 2 показаны графики этих зависимостей для  $x = 2, 3, \dots, 7$  (по оси ординат использована логарифмическая шкала). Нами построены уравнения регрессии вида  $t_x(n) = a_x b_x^n$  и вычислены соответствующие коэффициенты корреляции. Приближённые значения коэффициентов  $a_x$  и  $b_x$ , а также коэффициент корреляции  $r_x$  представлены в таблице 3.

Таблица 2.

$n$	$x$						
	1	2	3	4	5	6	7
4	3	4	3	—	—	—	—
5	6	5	5	6	—	—	—
6	10	16	9	16	10	—	—
7	20	27	27	27	27	20	—
8	36	49	28	21	28	49	36
9	72	84	77	77	84	77	84
10	136	154	77	161	54	161	77
11	272	270	272	270	270	270	272
12	528	496	476	424	257	144	257
13	1056	886	848	848	445	886	886
14	2080	1629	1560	1598	1560	1640	405
15	4160	2946	2712	1419	2248	2834	2946
16	8256	5418	4917	4762	4917	5156	2666
17	16512	9871	8789	4404	9116	8789	9116
18	32896	18155	15726	16246	16641	12375	16246
19	65792	33217	28043	28923	28923	28043	29223
20	131328	61095	50456	50384	47816	52254	50456
21	262656	112047	89911	90724	90724	95328	67282
22	524800	206086	161128	164212	168148	170189	161128
23	1049600	378453	288110	292579	303215	288110	294935

Таблица 3.

$x$	2	3	4	5	6	7
$a_x$	0.356647	0.276302	0.349581	0.244153	0.334747	0.24655
$b_x$	1.827246	1.835671	1.804331	1.842494	1.81401	1.832498
$r_x$	0.99958	0.99881	0.99660	0.99630	0.99512	0.99142

Анализ представленных зависимостей  $t_x(n)$  позволяет сделать следующие выводы.

1) При достаточно больших  $n$  большинство трансляционных разбиений плоскости на полимино относятся к упаковочному пространству, заданному матрицей вида  $\begin{pmatrix} n & 1 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$ .

2) Для упаковочных пространств, заданных матрицей вида  $\begin{pmatrix} n & x \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$  с  $x > 1$ , заметное отклонение значений  $t_x(n)$  от экспоненциальной зависимости в большей степени характерно для упаковочных пространств с высокой собственной симметрией, а также для  $n$ , кратных  $x$ .

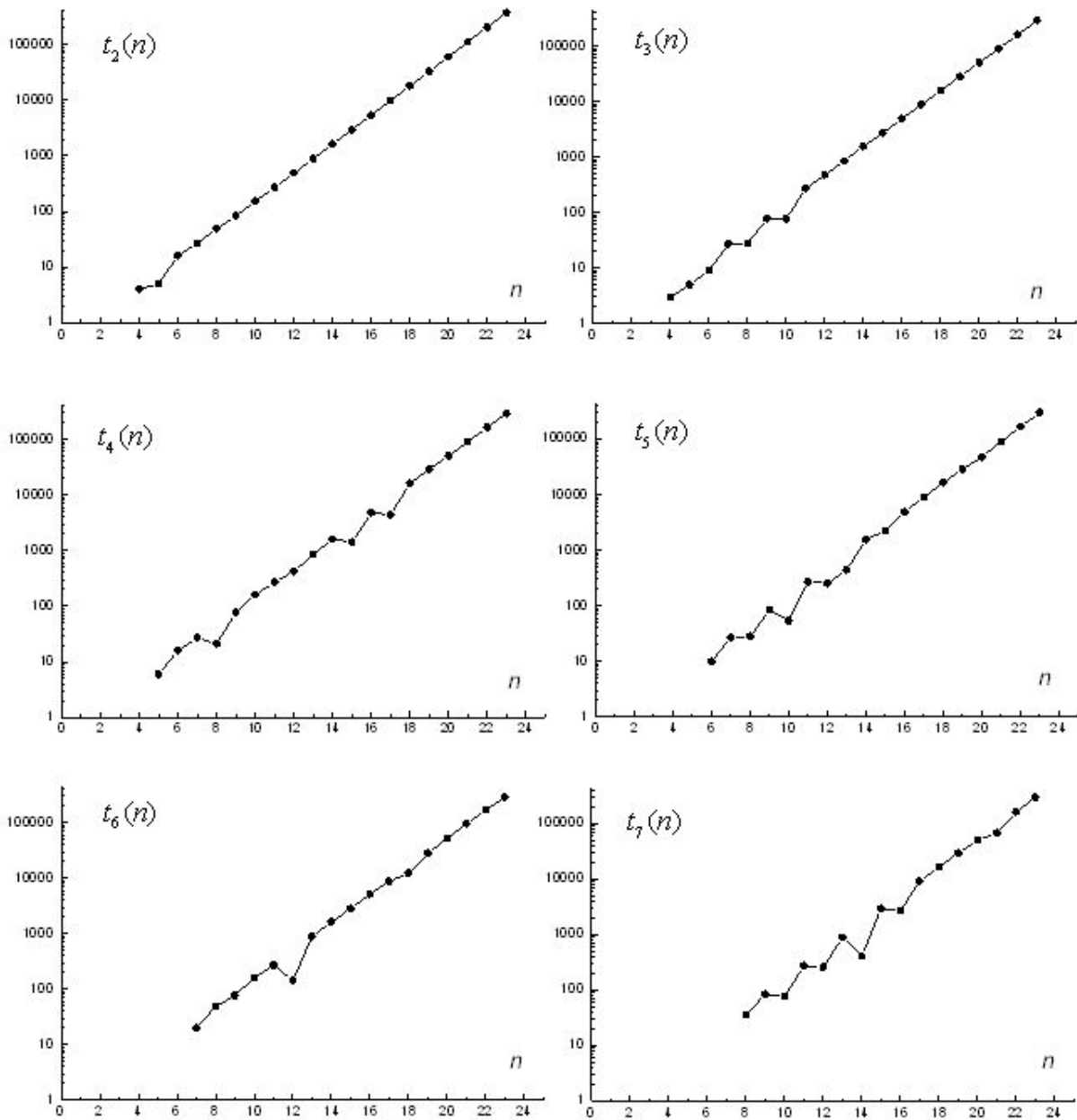


Рис. 2. Зависимость числа вариантов разбиений  $t_x(n)$  от числа клеток в полимино  $n$ .

### Список литературы

1. Малеев А.В., Рау В.Г. и др. Метод дискретного моделирования упаковок в молекулярных кристаллах // Докл. АН. 1990. Т. 315. С. 1382-1385.
2. Малеев А.В. n-мерные упаковочные пространства // Кристаллография. 1995. Т. 40. С. 394-396.
3. Малеев А.В. Алгоритм и компьютерная программа перебора вариантов упаковок полимино в плоскости // Кристаллография. 2013. Т. 58. С. 749-756.
4. Потехин К.А., Малеев А.В., Стручков Ю.Т. Молекулярные ячейки в органических кристаллах // Докл. АН. 1991. Т. 318. С. 1170-1173.
5. Малеев А.В., Рау В.Г., Житков И.К. Алгоритмы генерации структур молекулярных кристаллов методом дискретного моделирования упаковок // Ж. структ. химии. 2009. Т. 50. С. 5-11.
6. Житков И.К., Малеев А.В., Рау В.Г. Метод дискретного моделирования молекулярных упаковок и предсказание кристаллических структур // Тр. V Всерос. научн. школы «Математические исследования в естественных науках». Апатиты, 12-14 окт. 2009 г. Апатиты: Изд-во К & М, 2009. С. 18-20.
7. Рау В.Г., Журавлев В.Г., Рау Т.Ф., Малеев А.В. Морфогенезис кристаллических структур в методе дискретного моделирования упаковок // Кристаллография. 2002. Т. 47. С. 793-796.
8. Войтеховский Ю.Л., Степеничиков Д.Г. Комбинаторная кристалломорфология. Кн. 4: Выпуклые полиэдры. Апатиты: Изд-во К & М, 2008. 828 с.
9. Малеев А.В. Алгоритм и программа перебора разбиений плоскости на полимино // Кристаллография. 1998. Т. 43. С. 775-781.

## ПОСТРОЕНИЕ 3D-ВИЗУАЛИЗАЦИИ ПОЛИЭДРА НА ОСНОВАНИИ ПРОЕКЦИИ ШЛЕГЕЛЯ

Ярыгин О.Н.<sup>1</sup>, Безгинов А.А.<sup>2</sup>

Тольяттинский государственный университет, г. Тольятти

<sup>1</sup>onyx2602@rambler.ru, <sup>2</sup>alekseyy\_anatolevich@rambler.ru

*История исследования многогранников уходит корнями в древние времена. Недаром правильные полиэдры носят имя «платоновых тел». Проблемам, носившим теоретический и прикладной характер, уделили внимание великие умы от Архимеда и Евклида до Р. Декарта, Л. Эйлера, О. Коши, Е.С. Фёдорова. Основные общетеоретические выводы позволила сделать созданная Л. Эйлером теория графов, на основании которой удалось во многом «алгебраизовать» исследование свойств полиэдров и их классификацию. Современный научный подход к исследованию полиэдров всё больше смещается в сторону их моделирования с помощью компьютерных технологий. Значительные результаты в этом направлении достигнуты отечественной наукой. В работах Ю.Л. Войтеховского и Д.Г. Степеничикова представлены результаты, позволяющие на основании компьютерных моделей не только наблюдать свойства полиэдров, но и делать обобщённые выводы и теоретически определять существование важных явлений в кристаллографии, теории фуллеренов, минералогии.*

Многие задачи моделирования полиэдров ограничиваются использованием матриц смежности полиэдрического графа и проведением расчётов для извлечения всей возможной информации, сконцентрированной в этой матрице. Действительно, как показано в работах [2, 3 и др.], матрица смежности графа содержит всю информацию о полиэдре, в том числе и ту, которую наблюдатель не в состоянии выявить, видя перед собой реальный многогранник, будь то кристалл, деталь конструкции или просто кирпич. Но именно этого «внешнего вида» многогранника и возможной его модификации зачастую недостаёт исследователю для решения возникшей проблемы.

Поэтому остаётся важной задачей решение задачи 3D-визуализации полиэдра на основе имеющейся аналитической информации. Частичным решением задачи визуализации является построение графических образов полиэдров в виде их проекций на плоскость [1-3]. Указанные работы представляют собой результат алгоритмизации построения диаграмм Шлегеля для заданного типа полиэдров, реализованной в виде компьютерной программы, которая не только строит проекции, но и определяет комбинаторные типы, группы автоморфизмов, точечные группы симметрии и гранные символы полиэдров. Алгоритмические и теоретические проблемы, возникающие при решении задач, связанных с визуализацией полиэдров рассматривались в работах [5, 6]. Остаётся сделать ещё один большой шаг, чтобы увидеть воочию, например, 12-гранник под номером 2602 (рис. 1), представленный проекцией в атласе [1, с. 41]:

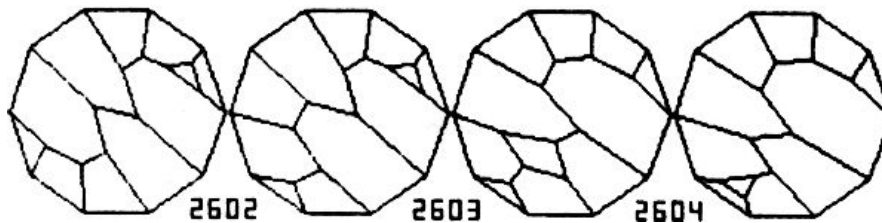


Рис. 1. Проекция Шлегеля для 12-эдров.

Вначале вспомним, что представление полиэдров в виде проекций на плоскость использовал ещё О. Коши, стремившийся свести изучение полиэдров к алгебраическому исследованию свойств соответствующих графов [7] (рис. 2).

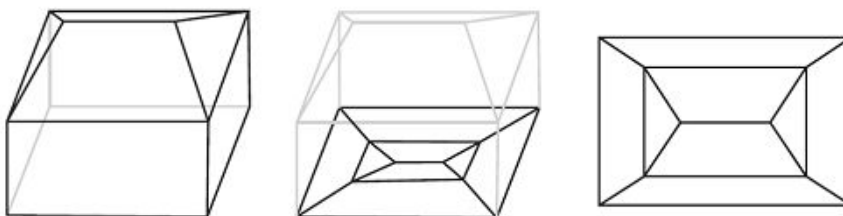


Рис. 2. Проекция полиэдра на нижнюю грань, по О. Коши [7, с. 114].

Он предлагал проецировать все рёбра многогранника на плоскость наибольшей грани, которую перед проектированием предполагалось растянуть.

Современник О. Коши французский математик Ж. Жергонн (1771-1859), описал проецирование следующим образом: «Возьмите многогранник, у которого одна из его граней является прозрачной, и представьте, что глаз приближается к этой грани извне так близко, что он может воспринимать все другие грани изнутри, это всегда возможно, когда многогранник выпуклый. При таком положении, давайте представим, что на плоскость прозрачной грани и сделана перспективная проекция множества всех остальных граней» [7]. И. Лакатос в книге «Доказательства и опровержения», целиком посвящённой многогранникам и формуле Эйлера, предложил современную версию идеи Жергонна, предполагая, что такая проекция снимается фотокамерой, размещённой рядом с удалённой гранью внутри многогранника [4]. Ещё один распространённый способ визуализации такого многогранника представляется тенями рёбер, когда источник света располагается рядом с удалённой гранью (рис. 3, [7]).

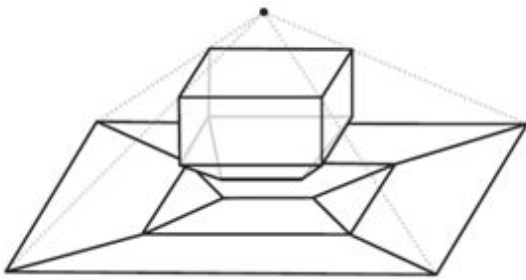


Рис. 3. Перспективная проекция полиэдра на плоскость [Richeson, с.115].

Чтобы проделать обратное действие, которое, разумеется, не обещает однозначного результата, требуется построить трёхмерное изображение полиэдра, породившего граф на плоскости по одной из приведённых процедур. Укрупнённый алгоритм «обратного перспективного проецирования» описывается следующим образом:

Шаг 1. Выбрать точку над плоскостью на высоте  $H$ , находящуюся над геометрическим центром имеющейся диаграммы, обозначенным  $C$ .

Шаг 2. Соединить все вершины графа с точкой  $H$ .

Шаг 3. Определить для каждой вершины её «уровень»  $u_i$ . Уровень вершин на внешнем многоугольнике (периметре) считается равным 0. Уровень вершины равен  $k$ , если длина кратчайшего пути от неё до внешнего многоугольника равна  $k$ .

Шаг 4. Определить максимальный уровень вершин:  $R = \max u_i$ .

Шаг 5. Сместить каждую вершину по отрезку, соединяющему её с точкой  $H$  до высоты  $H/(2R)$  над базовой плоскостью.

Шаг 6. Произвести сжатие к центру  $C$  по горизонтали уровней, не превосходящих  $[R/2]$ .

Для упрощения можно, начав с определения уровней вершин, произвести их подъём по вертикали на высоту  $h_i$  пропорциональную уровню  $u_i$ .

Реализация представленного алгоритма в среде пакета компьютерного 3D-моделирования CATIA позволяет поэтапно получать трёхмерную модель полиэдра из исходной проекции Шлегеля (рис. 4).

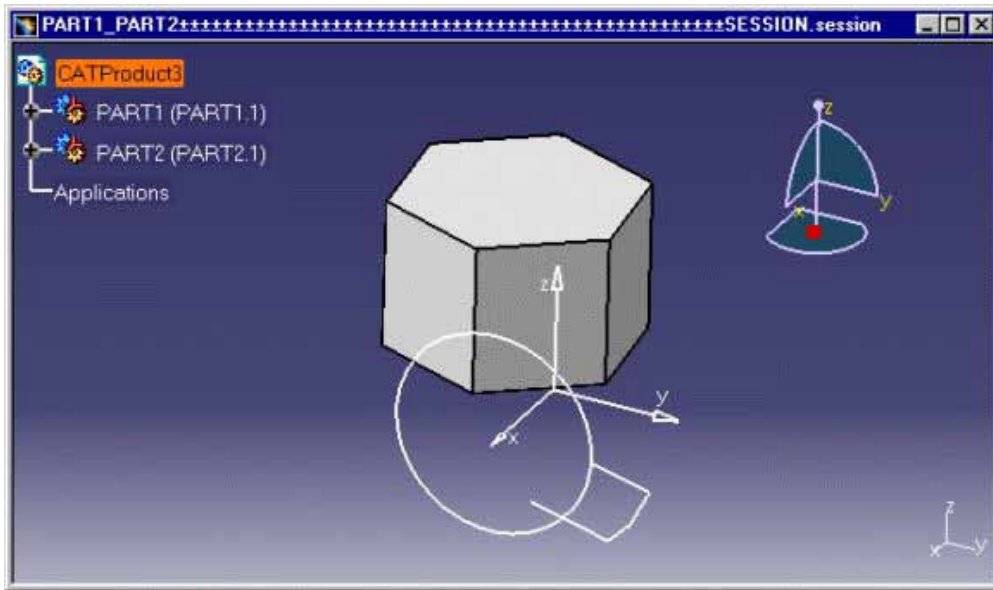


Рис. 4. Представление многогранника в среде CATIA.

Получаемый полиэдр можно рассматривать, вращая в различных направлениях в пространстве. Этапы построения представлены на рис. 5 а-е.

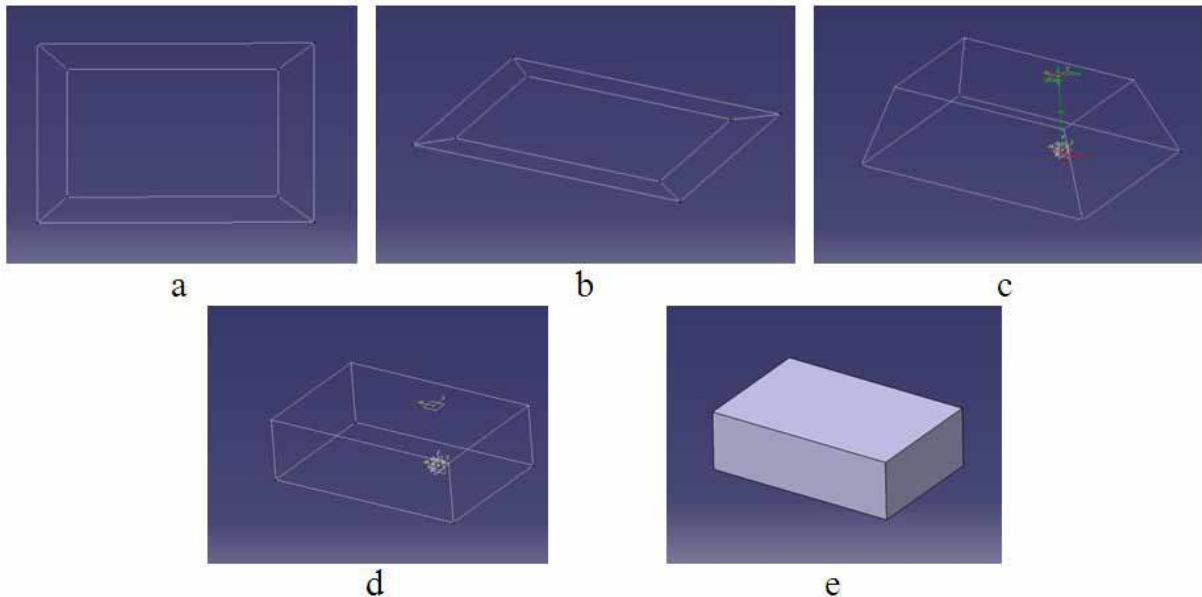


Рис. 5. Построение параллелепипеда (6-эдра с 4-угольными гранями).

Рис. 5 а: исходная проекция, заданная набором вершин и рёбрами;

Рис. 5 б: исходная проекция, привязанная к базовой плоскости;

Рис. 5 с: подъём над плоскостью вершин первого уровня (после выявления 4-х вершин 0-го уровня и 4-х вершин 1-го уровня);

Рис. 5 d: сжатие нижней грани к центру исходной проекции, до выравнивания с верхней гранью;

Рис. 5 e: «заливка граней» (можно оставлять их прозрачными) и вращение полученной 3D-модели.

Аналогичная последовательность шагов приводит от диаграммы октаэдра (рис. 6 а), через её плоскостное представление (рис. 6 b) к 3D-модели (рис. 6 с). Как видим, такая модель при сжатии по продольной оси может быть симметризована до правильного октаэдра.

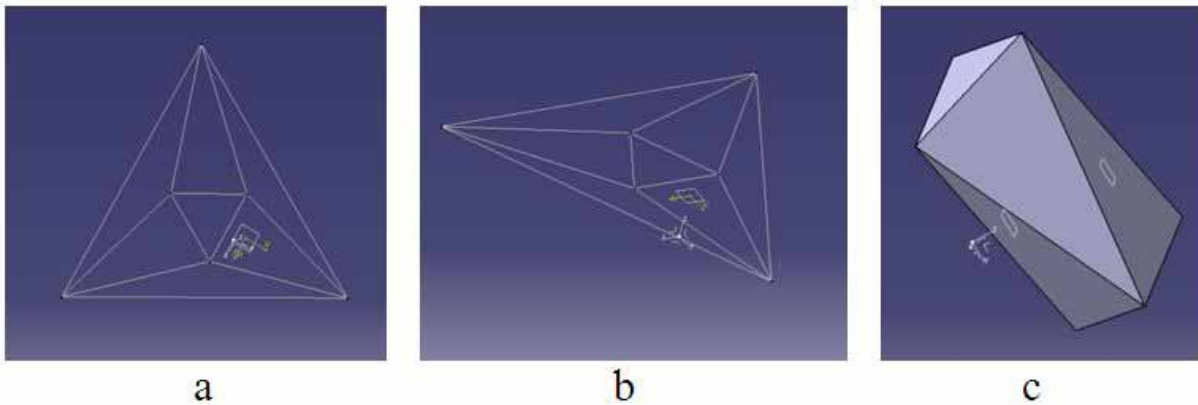


Рис. 6. Построение октаэдра (8-эдра с треугольными гранями).

Применяемый пакет программ, с одной стороны, предоставляет широкие возможности по манипуляции и трансформации готовой 3D-модели, а с другой стороны, ограничивает возможности пользователя по встраиванию автоматических процедур построения модели. Поэтому модели, представленные на данном этапе, построены в интерактивном режиме.

На рис. 7 а-с показаны этапы построения 3D-додекаэдра. На этапе расслоения возникают проблемы с сохранением прямолинейности трансформируемых рёбер (рис. 7 с). Подобные проблемы требуют реализации встроенных функций, что недопустимо в условиях использования защищённых программных продуктов. Поэтому перспективным представляется использование более простых, но свободно распространяемых программ.

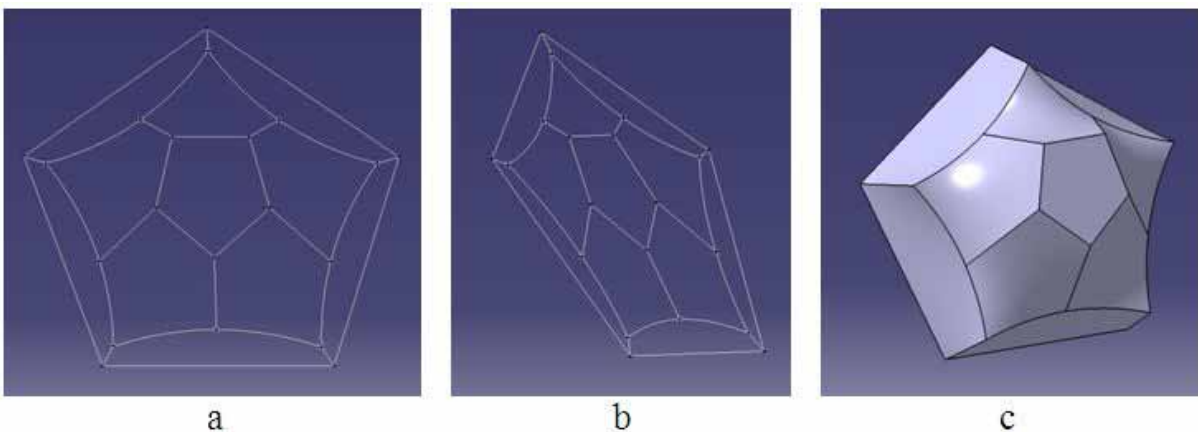


Рис. 7. Построение 3D-додекаэдра (12-эдра с 5-угольными гранями).

Для решения задачи 3D-моделирования возможно использование и таких форматов представления как VRML – стандартизированный формат файлов для демонстрации трёхмерной интерактивной векторной графики. VRML является текстовым форматом файлов, в котором, например, вершины и грани многогранников могут указываться вместе с цветом поверхности, текстурами, прозрачностью (рис. 8).

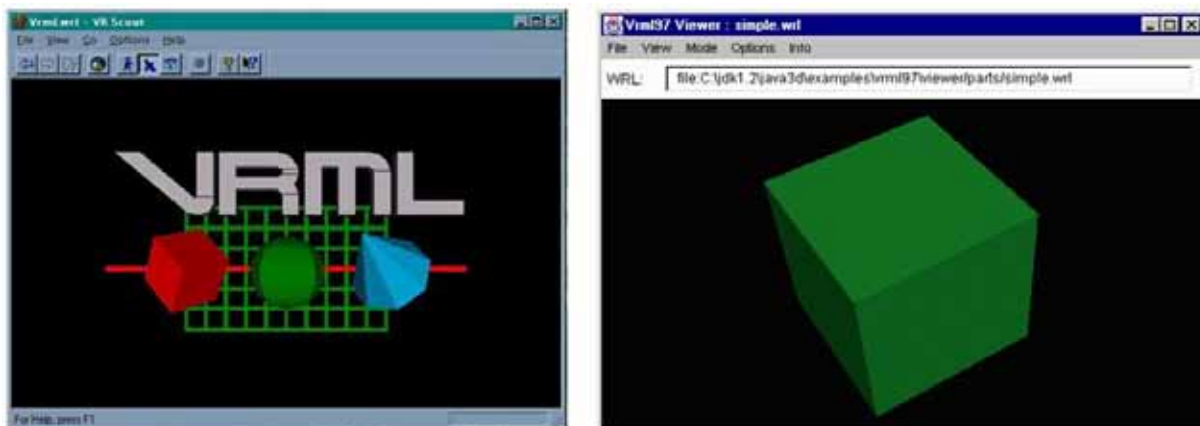


Рис. 8. Интерфейс и представление куба в VRML.

Но в этом случае всю работу по определению координат вершин полиэдров придётся рассчитывать с помощью отдельного алгоритма и другой программы, создание которой также представляет собой перспективную задачу.

### Список литературы

1. Войтеховский Ю.Л., Степенщиков Д.Г., Ярыгин О.Н. Грануломорфология: простые 12- и 13-гранники. Апатиты: Изд-во КНЦ РАН, 2000. 76 с.
2. Войтеховский Ю.Л., Степенщиков Д.Г. Фуллерены  $C_{20}$ - $C_{60}$ : каталог комбинаторных типов и точечных групп симметрии. Апатиты: Изд-во К & М, 2002. 55 с.
3. Войтеховский Ю.Л., Степенщиков Д.Г. Комбинаторная кристаллография. 1. Реальные кристаллографические простые формы. Апатиты: Изд-во К & М, 2004. 276 с.
4. Лакатос И. Доказательства и опровержения. Как доказываются теоремы. М.: Наука, 1967. 152 с.
5. Ярыгин О.Н. Построение изображения невыпуклых полиэдров по матрице смежности // Тр. III Всерос. научн. школы «Математические исследования в кристаллографии, минералогии и петрографии». Апатиты: Изд-во К & М, 2007. С. 94-99.
6. Ярыгин О.Н. О «максимальной» грани полиэдра // Тр. II Всерос. научн. школы «Математические исследования в кристаллографии, минералогии и петрографии». Апатиты: Изд-во К & М, 2006. С. 103-107.
7. Richeson D. Euler's Gem. The Polyhedron Formula and the Birth of Topology // Princeton University Press, 2012. 336 p.



# МАТЕМАТИЧЕСКИЕ ИССЛЕДОВАНИЯ В ГЕОФИЗИКЕ



## ИСПОЛЬЗОВАНИЕ МАТЕМАТИЧЕСКОГО И ЛОГИЧЕСКОГО АППАРАТА ДЛЯ ПРЕОБРАЗОВАНИЯ ДАННЫХ ПРОГРАММЫ ASTROGENIC NEXSTORM LITE ДЛЯ РЕГИСТРАЦИИ АТМОСФЕРНЫХ ЭЛЕКТРИЧЕСКИХ РАЗРЯДОВ

**Бурцев А.В.**

Центр физико-технических проблем энергетики Севера КНЦ РАН  
г. Апатиты, [tonyburt@rambler.ru](mailto:tonyburt@rambler.ru)

*В статье показан пример применения математического и логического аппаратов к данным, полученным программой Astrogenic NexStorm для регистрации атмосферных электрических разрядов, требующим особого преобразования для дальнейшего анализа.*

Система StromTracker канадской фирмы Voltek предназначена для обнаружения атмосферных электрических разрядов (молний) на удалении до 450 км от места расположения базовой станции и состоит из компьютерной платы формата PCI, полярной антенны и программного обеспечения NexStorm Lite фирмы Astrogenic. Она установлена в лаборатории Центра физико-технических проблем энергетики Севера КНЦ РАН для определения плотности разрядов молний на территории Кольского полуострова и прилегающих территорий, информация о которых позволит уменьшить аварийность линий электропередач ещё на стадии проектирования. Похожие системы длительное время функционируют и в других регионах России [1, 2]. Регистрация событий происходит круглосуточно в автоматическом режиме. Зарегистрированные события подразделяются на шумы (noises) и разряды (strikes). В свою очередь, разряды делятся по полярности на положительные и отрицательные, и по типу: междуоблачные (intracloud, IC) и в землю (cloud-ground, CG). События, соответствующие разрядам, отображаются на карте в полярной системе координат, центром которой является г. Апатиты (рис. 1).

Зарегистрированные события сохраняются в файлы в двоичном (бинарном) формате. События, произошедшие за одни сутки, хранятся в одном файле. Посредством программы NexStorm можно просмотреть все зарегистрированные события на карте, в реальном масштабе времени и в ускоренном до 1024 раз. Основным недостатком программы NexStorm Lite является отсутствие экспорта зарегистрированных данных в удобный для анализа вид и предоставление их только в визуальной форме. Одним из решений проблемы является разработка собственного программного обеспечения для экспорта данных в текстовый формат и состоит из аналитического (изучение структуры файла данных) и технического (написание программного обеспечения) этапов. В этой статье рассмотрен только аналитический этап.

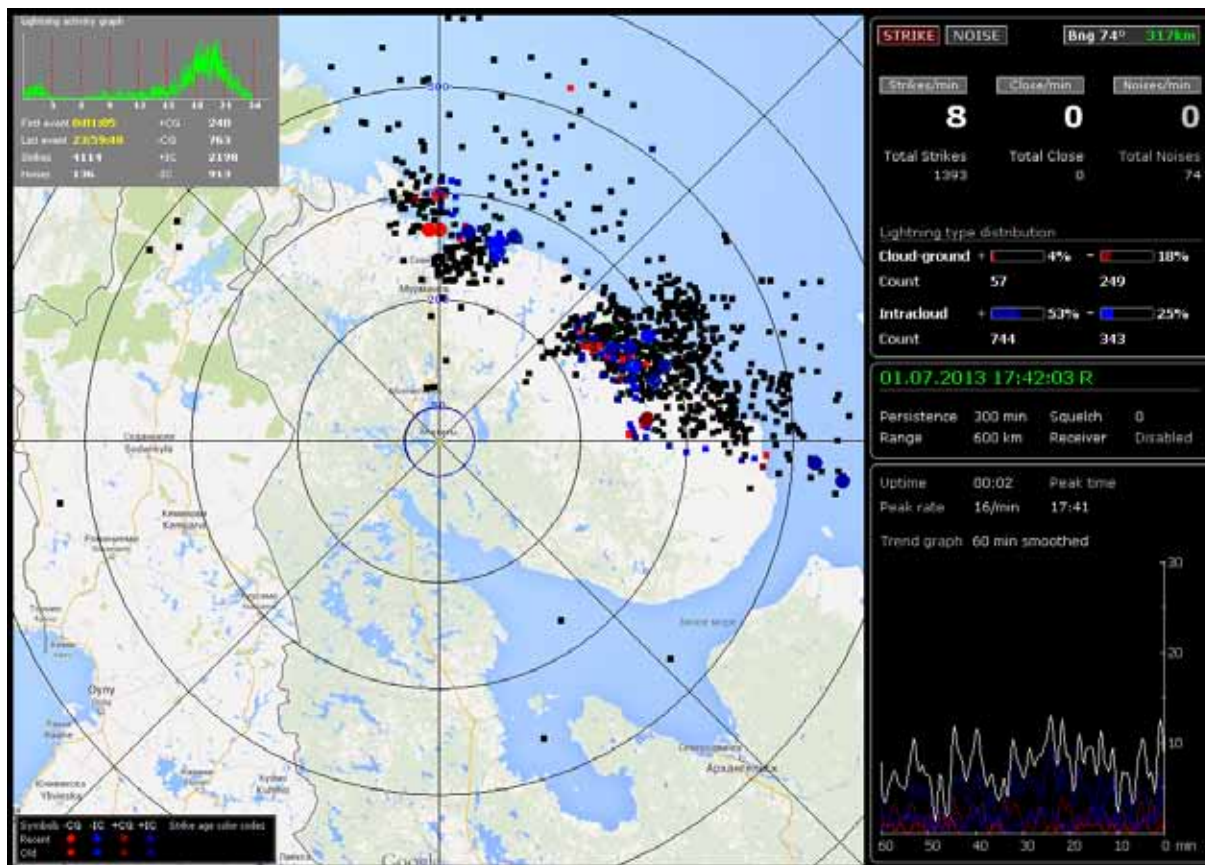


Рис. 1. Общий вид окна программы NexStorm Lite.

Для определения состава данных взяты два файла – с наименьшим числом событий за сутки (далее «первый файл») и контрольный, содержащий в себе все типы разрядов. Открыть файлы можно любой программой, способной представить данные в двоичном и шестнадцатеричном виде (рис. 2). Основную сложность в исследовании структуры файла данных составляет то, что она известна только разработчику оригинального программного обеспечения. Начинать исследование следует с определения интересующих нас параметров. В данном случае это дата и время, тип и полярность события, удалённость от центра и угол для определения положения в полярных координатах.

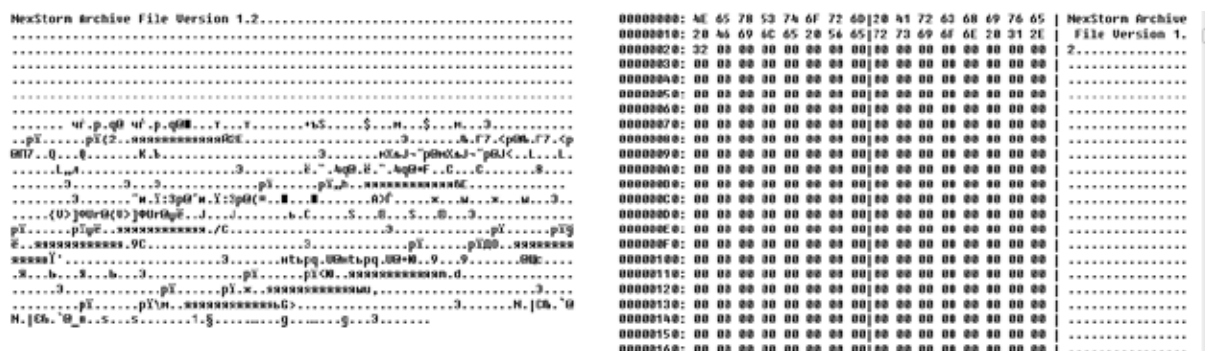


Рис. 2. Двоичное и шестнадцатеричное представление файла.





Byte																			(Angle)								
0532	A0	F7	83	02	F0	01	71	40	2B	FA	53	00	00	00	00	00	00	24	01	00	00	EC	01	00	00	-	272
0660	8A	01	C3	37	18	3C	70	40	CA	02	DA	00	00	00	00	00	00	01	01	00	00	1F	02	00	00	-	259
0724	EC	D5	9A	A3	AC	94	70	40	4C	84	EB	00	00	00	00	00	00	00	01	00	00	08	02	00	00	-	265
0788	00	B8	0B	93	0F	34	71	40	38	15	12	01	00	00	00	00	00	04	01	00	00	DD	01	00	00	-	275
0916	94	E8	02	BF	3A	C7	70	40	C0	3E	81	02	00	00	00	00	00	E6	00	00	00	FB	01	00	00	-	268
0980	7B	56	3E	5D	D4	55	72	40	FC	2E	D1	02	00	00	00	00	00	53	01	00	00	AE	01	00	00	-	293
1236	ED	74	FC	70	71	0E	55	40	40	D9	63	03	00	00	00	00	00	DF	02	00	00	DC	01	00	00	-	84
1492	4E	1E	7C	AA	8A	10	60	40	31	0C	A7	03	00	00	00	00	00	85	02	00	00	67	02	00	00	-	128

Рис. 6. Строки данных и соответствующие им углы в градусах.

чисел для любого формата точности представлено на рис. 7 и описывается формулой (4).

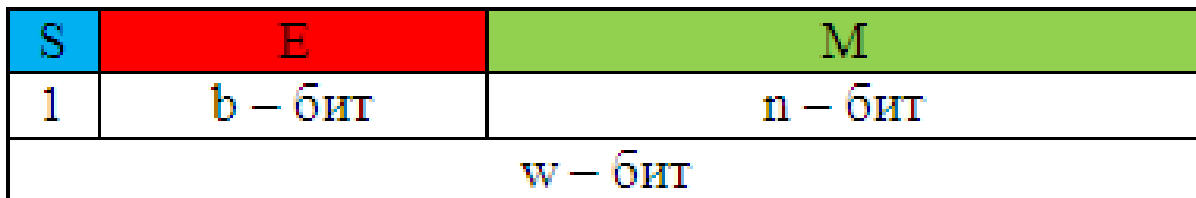


Рис. 7. Представление числа в формате IEEE-754.  $S$  – бит знака (0 – положительное число, 1 – отрицательное число);  $E$  – смещённая экспонента двоичного числа;  $exp_2 = E - (2^{(b-1)} - 1)$  – экспонента двоичного нормализованного числа с плавающей точкой;  $M$  – остаток мантиссы двоичного нормализованного числа с плавающей точкой,  $w$  – полное число бит (32 для одинарной точности, 64 для двойной точности);  $b$  – число бит для смещённой экспоненты (8 для одинарной точности, 11 для двойной точности);  $n$  – число бит мантиссы (23 для одинарной точности, 52 для двойной точности).

$$F = (-1)^S 2^{(E-2^{(b-1)}+1)} \left(1 + \frac{M}{2^n}\right) \quad (4)$$

Используя формулу (4) и рис. 8, можно вычислить формулы для нахождения десятичных чисел из форматов одинарной (5) и двойной (6) точности IEEE-754.

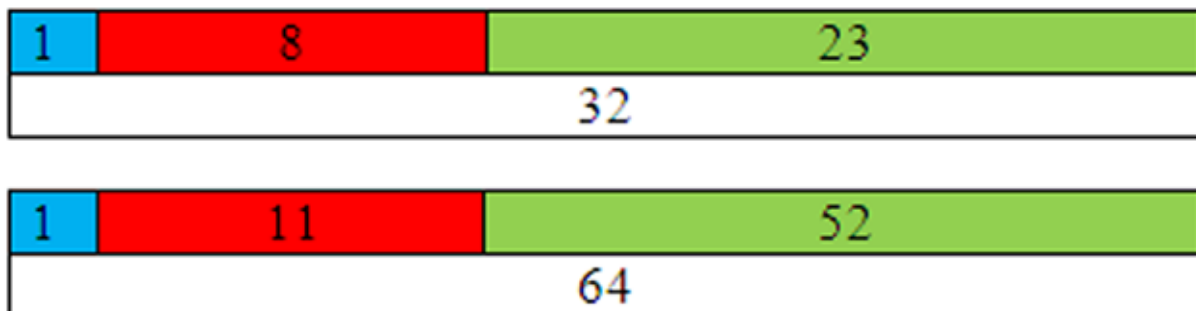


Рис. 8. Формат числа одинарной (32 бита) и двойной (64 бита) точности.

$$F = (-1)^S 2^{(E-127)} \left(1 + \frac{M}{2^{23}}\right) \quad (5)$$

$$F = (-1)^S 2^{(E-1023)} \left(1 + \frac{M}{2^{52}}\right) \quad (6)$$

На рис. 6 видно, что у нас образовалось три нерасшифрованных столбца, которые по нашим предположениям разбиты на 8 байт (64 бита). Применив формулу (6) для формата числа двойной точности к строке «A0 F7 83 02 F0 01 71 40», получим следующее решение (7):

40	71	01	F0	02	83	F7	A0
01000000	01110001	00000001	11110000	00000010	10000011	11110111	10100000
0	10000000111	00010000000111111000000000010100000111111011110100000					
0	1031	283605322692512					

откуда:

$$S = 0;$$

$$E = 1031;$$

$$M = 283605322692512$$

Подставив полученные значения S, E и M в формулу (6) получаем:

$$F = (-1)^0 2^{(1031-1023)} \left(1 + \frac{283605322692512}{2^{52}}\right) \approx 272,121 \quad (8)$$

Результат расчётов, представленных в формуле (8), совпадает с исходными данными, полученными из программы NexStorm Lite, и подтверждает наше предположение о дробности отображаемого числа. Проверка данного метода на других строках данных и контрольном файле полностью подтверждает правильность наших действий.

Таким образом с использованием математический и логический аппарата решены задачи аналитического этапа. Техническим этапом является разработка программного обеспечения, основой которого является результат аналитического этапа. Разработанное программное обеспечение позволит провести анализ полученных за время работы системы данных.

### Список литературы

1. Горбатенко В.П., Ершова Т.В., Константинова Д.А. Пространственное распределение плотности разрядов молнии в землю над Западной Сибирью // Вестник ТГУ. 2009. № 329. С. 215-221.
2. Шлюгаев Ю.В., Клименко В.В., Мареев Е.А. и др. Мониторинг опасных метеорологических явлений в Верхневолжском регионе // Тр. VII Всерос. конф. по атмосферному электричеству, 24-28 сент. 2012 г. Санкт-Петербург, 2012. С. 133-135.
3. IEEE Standard for Binary Floating-Point Arithmetic Copyright 1985 by the Institute of Electrical and Electronics Engineers, Inc 345 East 47th Street, New York, NY 10017, USA.

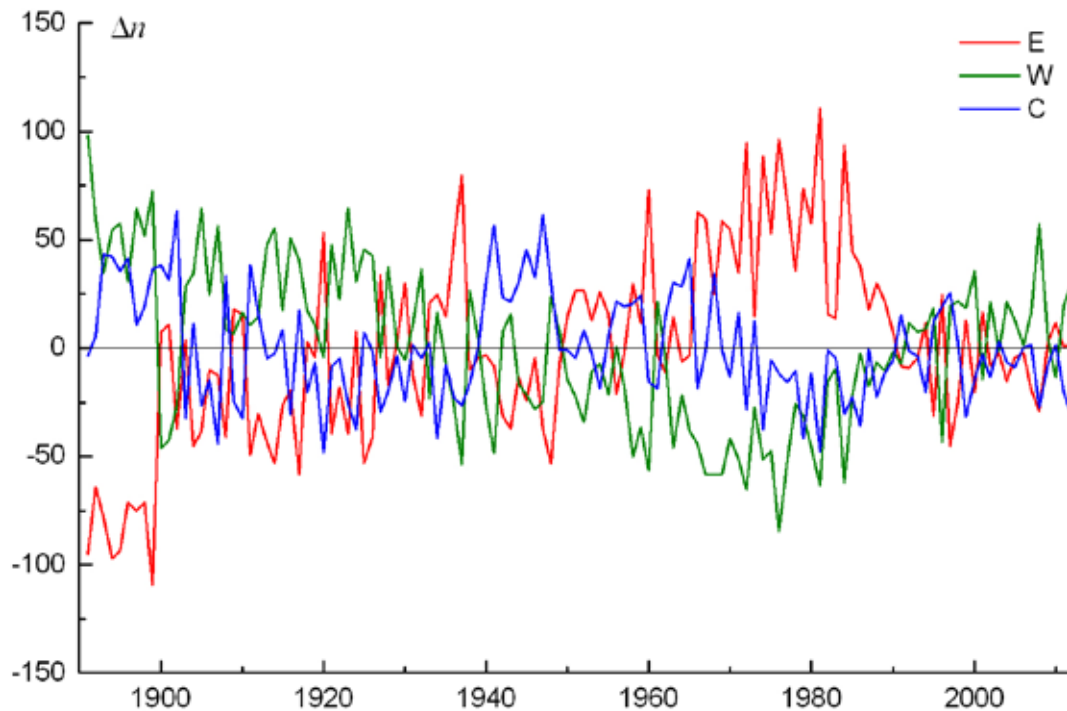
## ОЦЕНКА ЕСТЕСТВЕННОЙ ИЗМЕНЧИВОСТИ ТЕМПЕРАТУРЫ ВОЗДУХА НА КОЛЬСКОМ ПОЛУОСТРОВЕ

Дёмин В.И.

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

*Как и в предыдущих статьях, автор рассматривает проблемы статистической обработки метеорологических данных, например, способы выбора базового периода, от которого в сильной степени зависит климатический прогноз.*

Климатическими показателями принято считать обобщающие (статистические) характеристики рядов многолетних наблюдений за метеорологическими элементами и явлениями. Один из ключевых (и нерешённых) моментов – оптимальный выбор основного периода. Согласно рекомендациям Всемирной метеорологической организации (ВМО), для описания состояния современного климата достаточно 30-летнего периода. Опасность таких коротких рядов – существование в циркуляционном режиме атмосферы длительных периодов (от 10 лет и более) с аномальным развитием тех или иных динамических процессов [2, 8, 11]. Для иллюстрации на рис. 1 представлены изменения форм циркуляции W, C и E по классификации Гирса-Вангенгейма [2, 3], демонстрирующие смену так называемых циркуляционных эпох – периодов, когда одна из форм или комбинация двух форм получают аномальное (по сравнению с многолетней нормой) развитие.



*Рис. 1. Многолетняя динамика аномалий числа дней в году ( $\Delta n$ ) с формами циркуляции W, C, E по классификации Г.А. Вангенгейма. Аномалии рассчитаны от средних многолетних значений за столетний период 1891-2012 гг.*



Каждой форме циркуляции соответствуют определенная конфигурация барического поля в тропосфере и доминирующие направления движения циклонов и антициклонов (рис. 2).

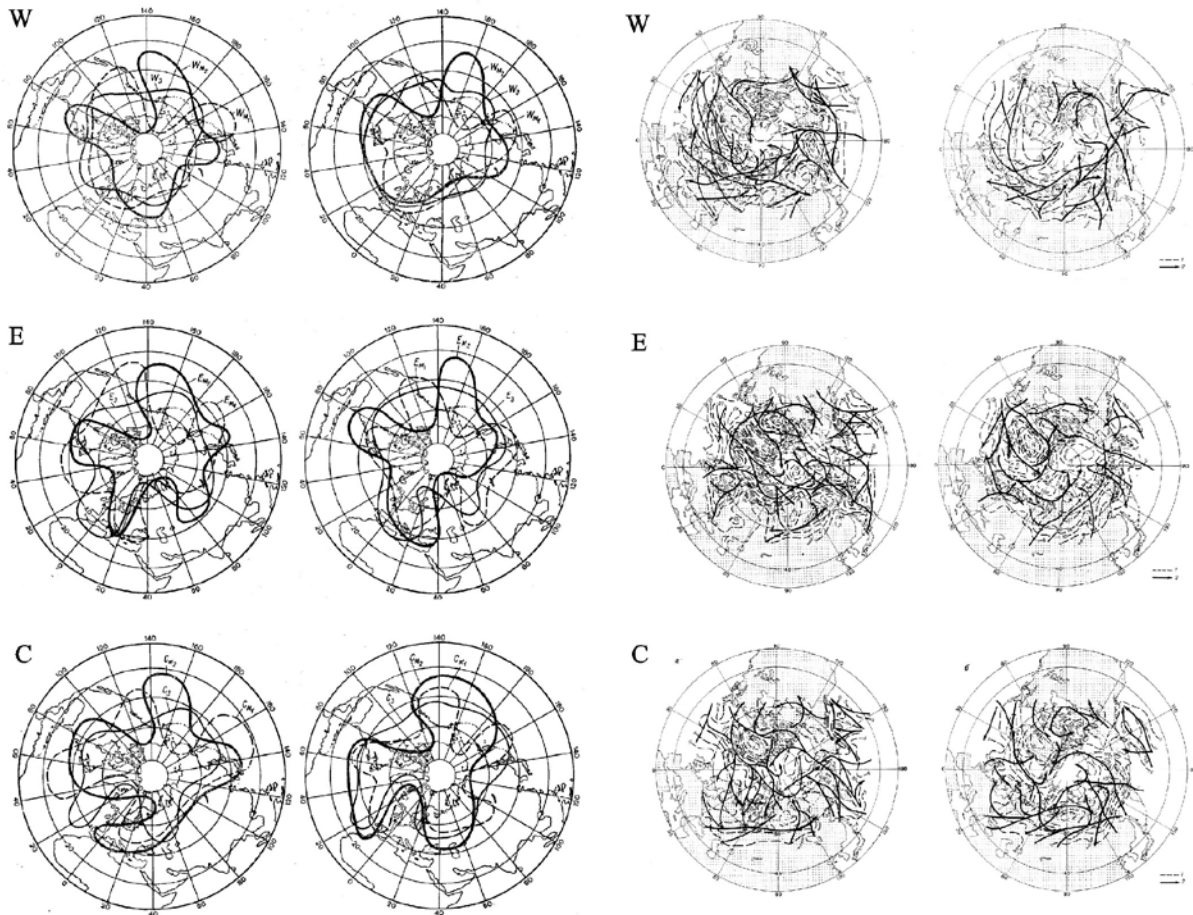


Рис. 2. Положение основных барических волн в тропосфере и преобладающие траектории циклонов при различных формах циркуляции [2].

При западной форме циркуляции W циклоническая деятельность развивается в средних широтах. Вдоль этих широт с запада на восток перемещаются циклоны и гребни. На Кольском п-ове в этот момент наблюдается преимущественно неустойчивая погода, прохладная летом и осенью [12]. Зимой и весной преобладание западного типа циркуляции – если он проявляется в чистом виде – вызывает положительную аномалию температуры в регионе. Однако если при западной форме циркуляции эпизодически происходят вторжения воздушных масс из Арктики, то на Кольском п-ове формируется значительная отрицательная аномалия температуры [12].

При меридиональных процессах формы С исландский минимум ослабевает или совсем исчезает давление в Арктике растёт. Над Кольским п-овом устанавливается северный, северо-восточный, иногда восточный перенос холодных арктических масс, что обуславливает возникновение отрицательной аномалии [12].

При восточной форме циркуляции Е за счёт углубления исландского минимума и антициклогенеза над ЕТР и Западной Сибирью усиливается поток тёплого воздуха с юго-запада на северо-восток, что вызывает значительное потепление на Кольском п-ове во всех сезонах. Похолодание возможно только в холодное полугодие, когда сибирский антициклон значительно распространяется на запад и северо-запад зимой или когда восточная циркуляция перебивается меридиональной С [12].

Учитывая сказанное, становится очевидным, что установление в циркуляционном режиме долговременного периода с аномальным (по сравнению с многолетней нормой) развитием той или иной формы циркуляции может привести к изменению траекторий движения барических образований и воздушных масс и соответствующим аномалиям в поле температуры [9].

Для иллюстрации на рис. 3 представлены среднемесячные значения температуры воздуха в г. Мурманске при различных формах циркуляции, полученные по ряду 1949-2012 гг.

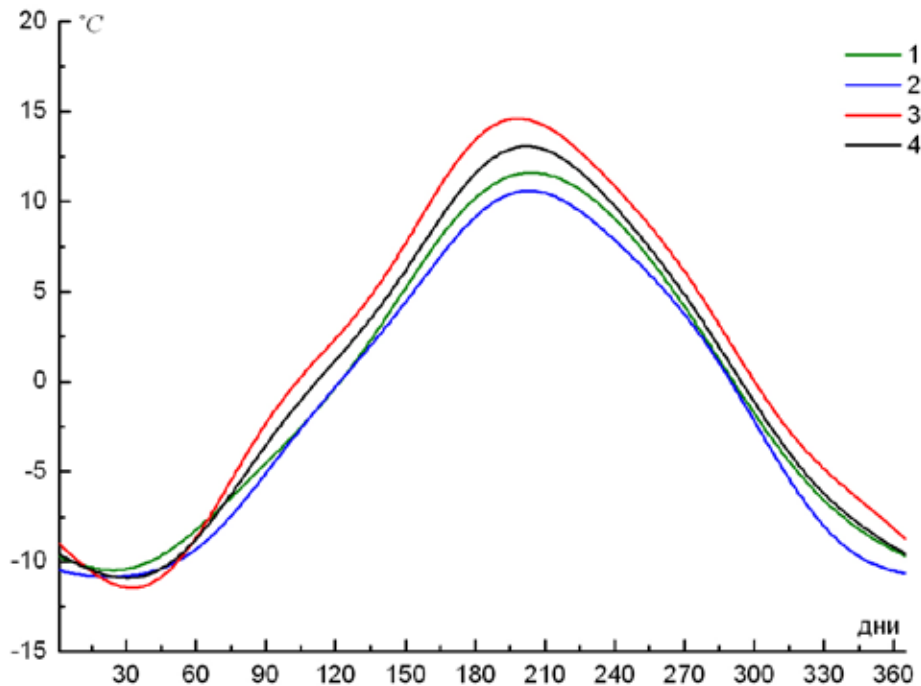


Рис. 3. Среднесуточные температуры воздуха в г. Мурманске при макропроцессах форм W (1), C (2), E (3) и по общей выборке (4) за период 1949-2012 гг.

Ряд получен из среднесуточных значений при той или иной форме циркуляции по данным за 1949-2012 гг. и впоследствии сглажен тригонометрической функцией вида:

$$t(x) = a_0 + \sum_{i=1}^n (a_i \sin iax + b_i \cos iax).$$

Необходимость сглаживания обусловлена присутствием сильных межсуточных вариаций на достаточно коротких рядах и принятого в климатологии предположения о «гладком» годовом ходе температуры [7].

Из рис. 3 видно, например, что средняя летняя температура при макропроцессах формы E большую часть года выше, чем при макропроцессах форм W и C (см. также [12]). В этой связи обращает на себя такой факт: рекомендованный для описания климатического режима период 1961-1990 гг. фактически пришёлся на циркуляционную эпоху формы E (табл. 1), в то время как последующие годы аномальное развитие получили процессы формы W (рис. 1).

Таблица 1. Многолетние нормы числа дней с формами циркуляции E, W, C ( $n_E, n_W, n_C$ ), числа дней с данными формами циркуляции для периода 1961-1990 гг. и отклонение от нормы в этот период.

Месяц	Норма 1891-2012 гг.			Фактически наблюдалось в 1961-1990 гг.			Аномалии		
	$n_E$	$n_W$	$n_C$	$n_E$	$n_W$	$n_C$	$n_E$	$n_W$	$n_C$
январь	12	11	7	15	8	8	3	-3	1
февраль	13	8	7	16	5	7	3	-3	0
март	14	10	7	17	8	6	3	-2	-1
апрель	14	8	9	18	5	8	4	-3	-1
май	14	8	10	20	4	7	6	-4	-3
июнь	11	9	10	17	5	8	6	-4	-2
июль	13	9	9	19	6	7	6	-3	-2
август	13	11	7	18	7	6	5	-4	-1
сентябрь	10	12	7	14	9	7	4	-3	0
октябрь	11	13	7	13	10	8	2	-3	1
ноябрь	13	11	6	14	10	7	1	-1	1
декабрь	13	11	6	13	10	8	0	-1	2

Отсюда сделать 2 заключения:

1) среднемесячные температуры, рассчитанные по периоду 1961-1990 гг. (базовый период при описаниях современного климата), по крайней мере, в тёплое полугодие, завышены;

2) современное (в регионе со второй половины 1980-ых) потепление климата, которое обнаруживается, например, сравнением параметров 1961-1990 и 1991-2012 гг. [4], пришлось на смену циркуляционных эпох, в результате чего реальный тренд потепления в регионе искажён изменением макроциркуляционных процессов.

По данным 1891-2012 гг. получены средние аномалии температуры в десятилетия, когда аномальное развитие получали та или иная циркуляционная форма (табл. 2). Как видно из табл. 2, на интервалах 10 лет возможно появление трендов до 0.3-0.4 C/10 лет, в том числе и отрицательного знака, в то время как глобальный тренд на потепление порядка 0.1 C/10 лет

(рис. 4), т. е., смена циркуляционного режима может перекрывать последний на интервалах в одно-два-три десятилетия, либо усиливая его, либо полностью маскируя его, меняя знак общей тенденции.

Таблица 2. Средние аномалии среднемесячной температуры воздуха, рассчитанные по десятилетиям с аномальным развитием форм циркуляции W, C, E.

Форма	I	II	III	IV	V	VI	VII	VIII	IX	X	XI	XII
W	-9.7	-10.3	-6.4	-1.4	3.4	9.0	12.6	11.0	6.7	0.8	-4.4	-7.9
C	-10.3	-10.6	-6.7	-1.9	3.1	8.5	12.1	10.8	6.6	0.8	-4.6	-8.2
E	-10.3	-10.5	-6.3	-1.3	3.6	9.3	12.9	11.2	6.6	0.6	-4.4	-7.8

Именно этим можно объяснить наличие температурного эскалатора, когда на фоне общего векового тренда к потеплению можно всегда найти периоды от 10 до 30 лет с тенденцией к похолоданию (рис. 5).

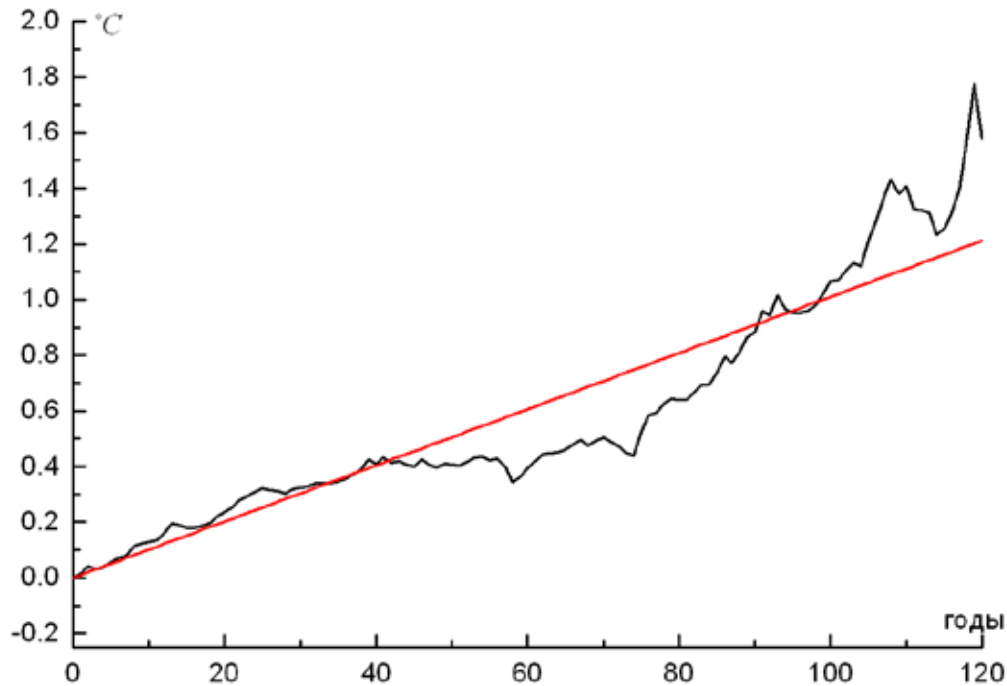


Рис. 4. Интегральная разность среднегодовых температур в г. Мурманске, разделённых числом лет  $n$ .

Важность учёта циркуляционного фона можно продемонстрировать следующим примером. На рис. 6 представлена зависимость среднемесячной июльской температуры воздуха в Мурманске от количества дней в месяце с циркуляцией формы E. Как видно, появление многолетнего периода с аномальным развитием макропроцессов формы E может вызвать тренд, многократно превышающий глобальный.

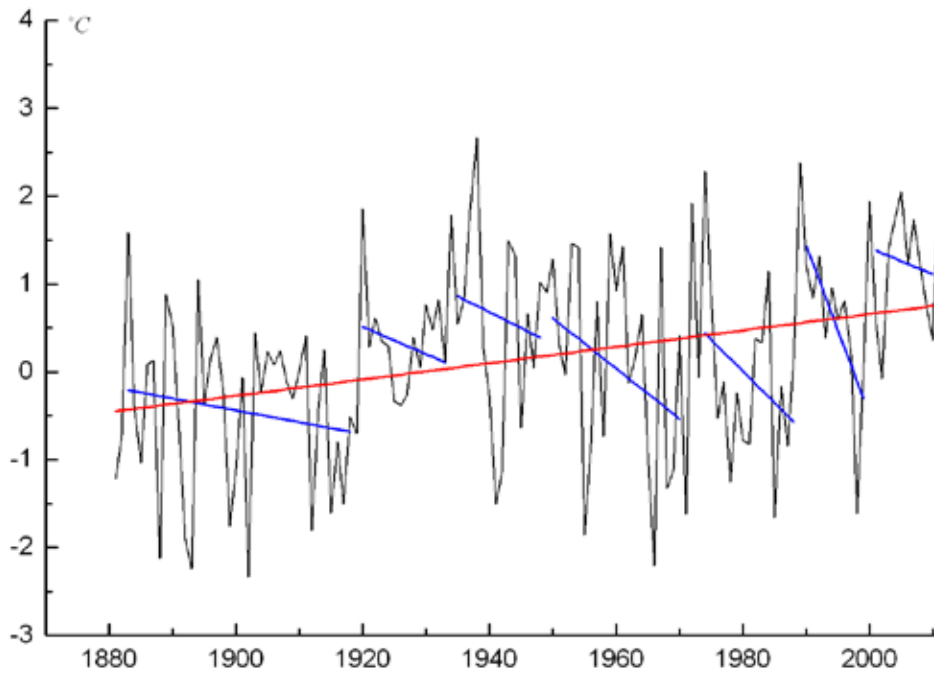


Рис. 5 Долговременные вариации среднегодовой температуры в г. Мурманске (ряд до 1881 года продлён по наблюдениям в Коле).

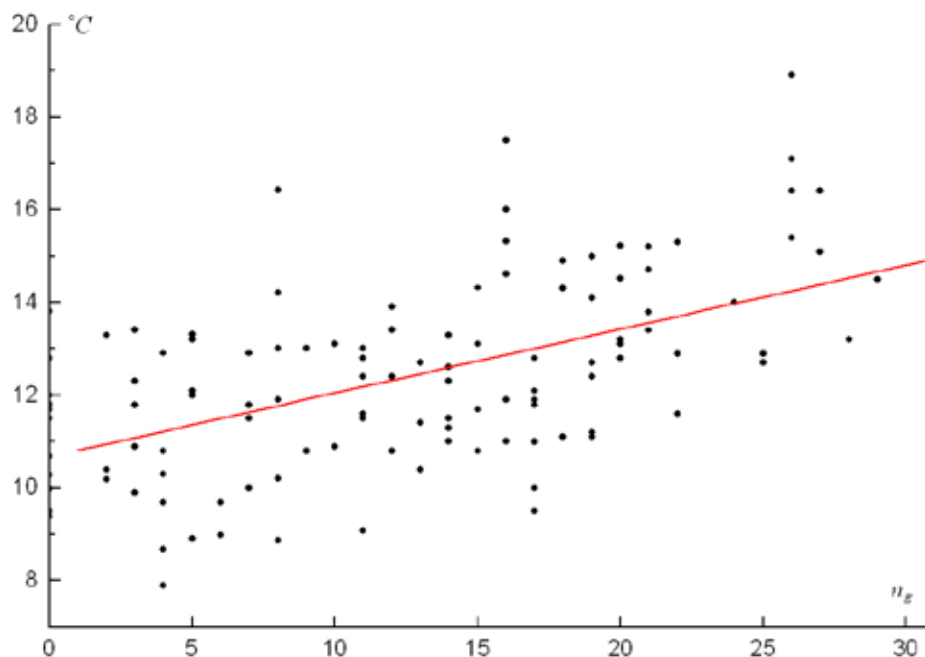


Рис. 6. Зависимость среднемесячной июльской температуры воздуха в Мурманске от количества дней в месяце с циркуляцией формы  $n_E$ .

Следует отметить, что только форма циркуляции не обеспечивает однородности. Погодный режим в заданном районе может иметь существенные различия при одной и той же форме циркуляции в зависимости от процес-

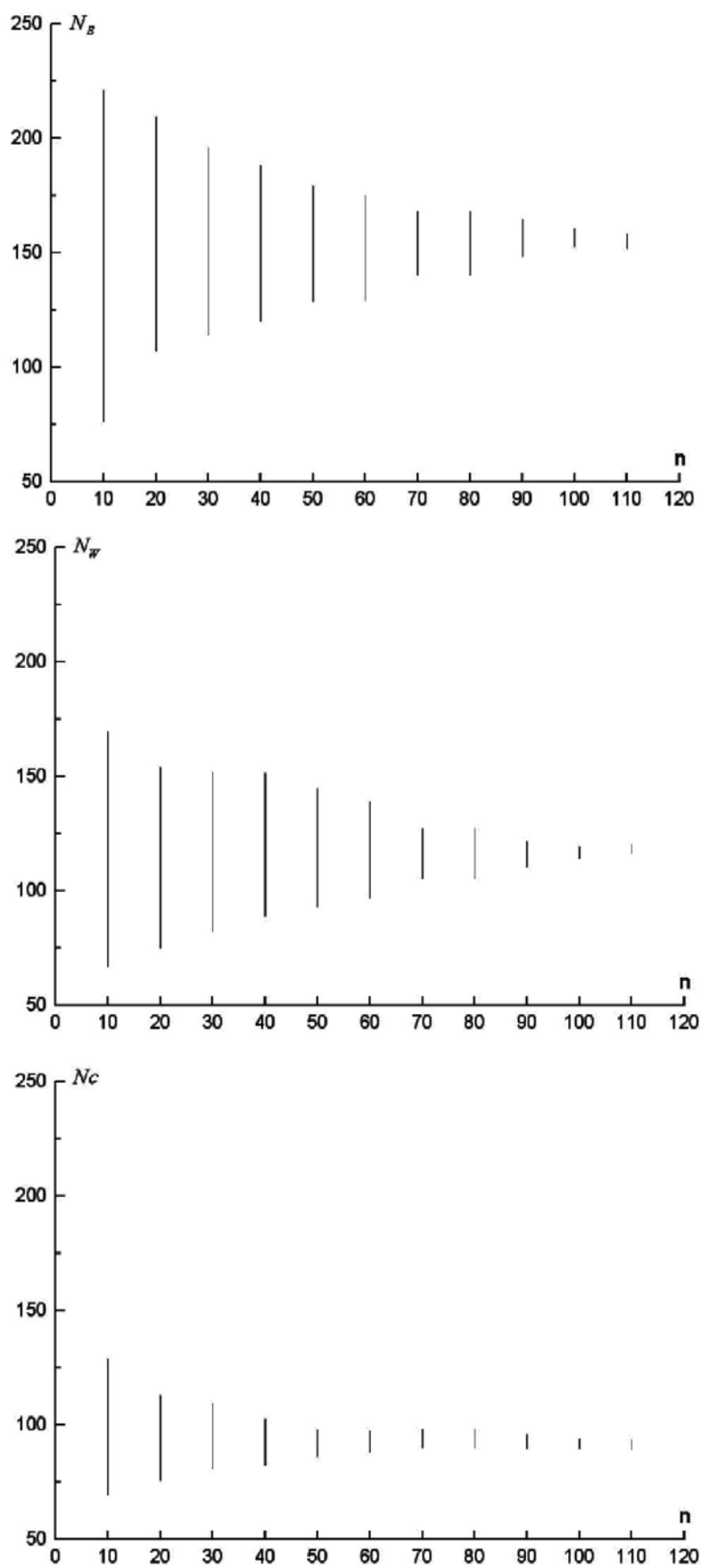


Рис. 7. Диапазоны изменений числа дней с формами циркуляции E, W, C внутри различных временных интервалов.

сов, предшествующих её возникновению и стадии преобразования в другие формы [1, 2]. По этой причине температура воздуха в конкретный день зависит не только от типа циркуляции, но и от довольно длительной предыстории наблюдаемого процесса (цепочки преобразований W, C, E). Более того, даже в течение каждой эпохи наблюдается развитие процессов нескольких разновидностей основной формы и отдельных разновидностей других форм, отражающих черты прошедшей эпохи или «ростки» следующей [2]. То есть представленная на рис. 6 зависимость может быть использована, главным образом, в климатических задачах.

Параллельно можно поставить и другой вопрос: при каком основном периоде климатическая норма окажется независимой от текущей циркуляционной эпохи. Для ответа на этот вопрос можно применить выводы из теории последовательного анализа [5, 6].

Предельное значение  $n$  (лет), когда разницы максимального и минимального числа дней с той или иной формой циркуляции становятся практически постоянными, и есть число членов ряда, которое обеспечивает вычисление средней многолетней нормы температуры. Как видно из рис. 7, этот период (по крайней мере, для Мурманска) составляет около 90 лет.

Рассчитанные за более короткие периоды, например, за 10-30 лет, средние значения температуры воздуха в большей степени отражают доминирующий циркуляционный фон. В этой связи смена циркуляционных эпох может ошибочно трактоваться как отсутствие вклада глобальных климатических процессов в вариации температуры в конкретном регионе и даже, что более неправильно, в самой отрицании глобальных изменений климата из-за их видимого несоответствия региональным наблюдениям.

### Список литературы

1. Болотинская М.Ш., Иванов В.В. Синоптико-статистические характеристики изменчивости естественных стадий развития макропроцессов различного временного масштаба // Тр. ААНИИ. 1999. Т. 441. С. 6-18.
2. Гирс А.А. Макроциркуляционный метод долгосрочных метеорологических прогнозов. Л.: Гидрометеиздат, 1974. 488 с.
3. Гирс А.А. Многолетние колебания атмосферной циркуляции и долгосрочные гидрометеорологические прогнозы. Л.: Гидрометеиздат, 1971. 280 с.
4. Дёмин В.И. Основные климатические тенденции на Кольском п-ове за период инструментальных метеорологических наблюдений // Тр. КНЦ РАН. 2012. № 2 (9). С. 97-109.
5. Дроздов О.А. О Свойствах интегрально-разностных кривых // Тр. ГГО. 1964. Вып. 162. С. 3-6.
6. Дроздов О.А., Орлова В.В., Швер Ц.А. К вопросу об оптимальной продолжительности периода осреднения при климатологических исследованиях // Тр. ГГО. 1965. Вып. 181. С. 14-45.

7. Кобышева Н.В., Наровлянский Г.Я. Климатологическая обработка метеорологической информации. Л.: Гидрометеиздат, 1978. 296 с.
8. Кононова Н.К. Классификация циркуляционных механизмов Северного полушария по Б.Л. Дзердзеевскому. М.: Воентехиниздат, 2009. 372 с.
9. Куражов В.К., Иванов В.В., Коржиков А.Я. Роль атмосферной циркуляции в формировании долгопериодных колебаний климата Арктики // Тр. ААНИИ. 2007. Т. 447. С. 33-43.
10. Руководство по специализированному обслуживанию экономики климатической информацией, продукцией и услугами. СПб.: ГГО, 2008. 336 с.
11. Циркуляционные механизмы современных колебаний климата. М: Наука, 1987. 192 с.
12. Яковлев Б.А. Климат Мурманской области. Мурманск: Мурманское кн. изд-во, 1961. 180 с.

## **ГЕНЕТИЧЕСКАЯ ГЕОМОРФОЛОГИЯ И МОДЕЛИРОВАНИЕ РУДООБРАЗУЮЩИХ СИСТЕМ**

**Ильченко В.Л.**

Геологический институт КНЦ РАН, г. Апатиты, vadim@geoksc.apatity.ru

*Рассмотрена динамика формирования рельефа и создания структурных условий развития гидротермально-метасоматических систем с переходом экзогенной динамической эволюционной фазы в эндогенную.*

Рельеф Земли – продукт избирательной эрозии поверхности, разнообразие которого связано с вариациями породной прочности, отражающей совокупное силовое воздействие, реализующееся в системе трещин. Уникальные для каждого блока формы рельефа состоят из элементов двух видов: прямой и криволинейной (кольцевой), причём кольцевые явно преобладают (рис. 1).

Система трещин служит предпосылкой развития гидротермальных процессов (при метаморфизме). Структура трещинного пространства блока зависит от его габаритов (размер, форма, симметрия), её основу (модель) или решётку рассчитать несложно [5]. При наложении такой решётки на оригинал (геолого-структурную карту реального объекта) сразу становятся видны совпадения решётки с прямыми формами рельефа и несовпадения – с кольцевыми. Совокупность этих несовпадений в значительной мере влияет на формирование уникальности строения каждого блока.

Прямые формы рельефа Земли отражают систему планетных трещин (рифты, трансформные разломы и др.) субмеридианного, субширотного и



«диагонального» простирания. Кольцевые формы эксплозивного (вулканы, трубки взрыва) и гравитационно-тектонического (провалы, купола) типа относят к структурам *эндогенного* происхождения.

Самый распространённый на Земле генотип кольцевых структур – метеоритные кратеры (астроблемы) – имеет *экзогенное* происхождение. Все генетические типы колец определяются по характерным признакам на месте. На топографических картах и аэрофотоснимках кольца (не самых древних) астроблем легко узнаются по характерному рельефу (рис. 1).

Метеоритный удар создаёт в оболочке Земли конический «пробой» – область тотальной деструкции пород с контрастным значением плотности и появлением гравитационной аномалии с искривлением геопространства (включая рельеф). Этот эффект – аналог релятивистского гравитационного искривления силовых линий в электромагнитных полях и потоков частиц [6]. Размеры области пробоя зависят от физических параметров (габариты, плотность) ударника и довольно точно вычисляются из радиуса «мишени».

Физические условия зон ударного пробоя благоприятны для развития гидротермальных процессов. Известно много рудных провинций и полей месторождений ценных полезных ископаемых (алмазы, уран, нефть и др.), которые связаны с кольцевыми структурами [3].

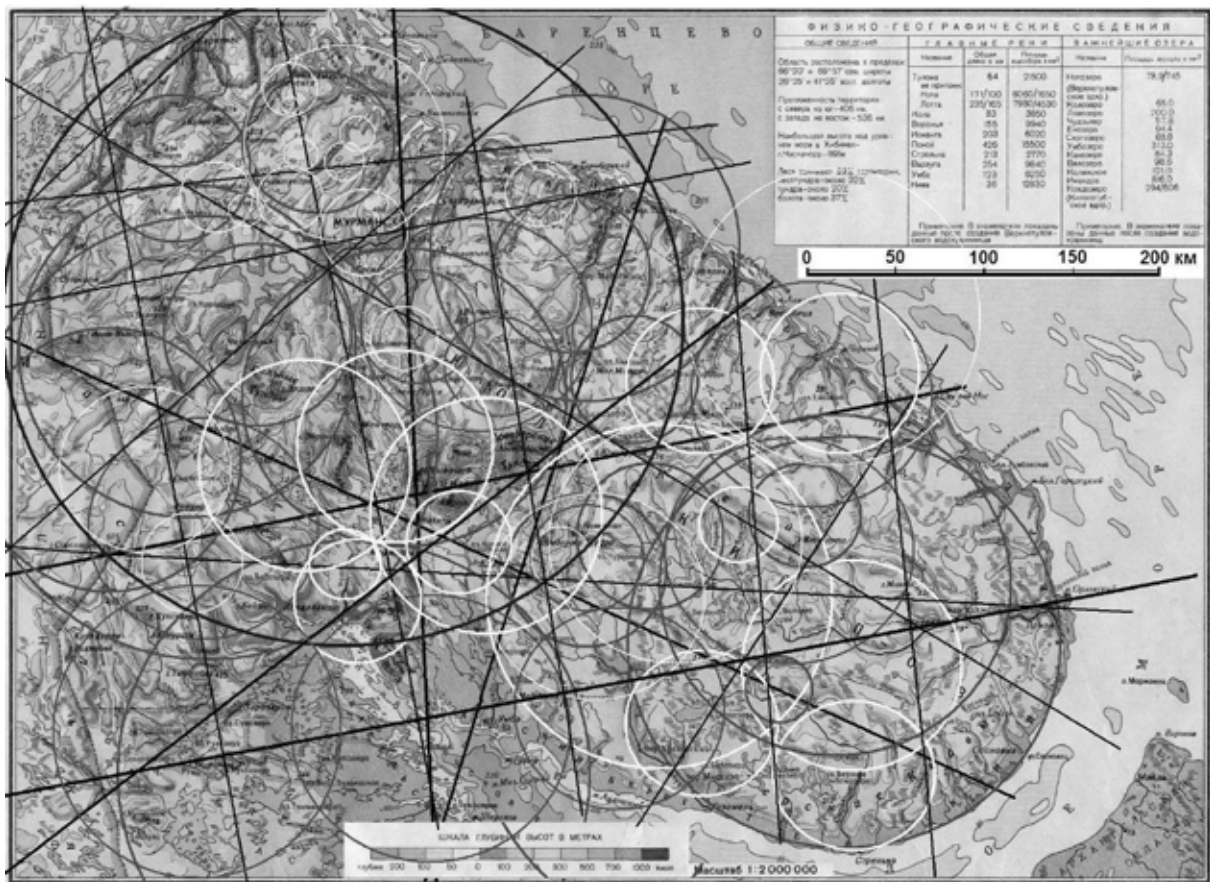


Рис. 1. Прямолинейные и кольцевые элементы на поверхности Кольского п-ова (вариации диаметра выделенных колец  $D \approx 10-400$  км).

Трещиноватые зоны пробоя – это «единицы» глобальной системы, объединённые системами нарушений вдоль сейсмических (тектонических) границ, которыми обусловлено расслоение земной оболочки [8].

Поле напряжений, структура тектонического расслоения пород и все геодинамические процессы в оболочке Земли реализуются в эффектах с ритмично-иерархическим фрактальным распределением свойств (признак динамических систем самоорганизованной критичности [2]) и находятся под контролем приливо-волнового фактора [4]. Приливная волна создаёт в породе импульсный всплеск деформаций (растяжение-сжатие), которые рожают волну. В результате её отражения от границ (интерференция) все объекты в оболочке Земли превращаются в колебательные системы с динамическими условиями стоячей волны. Расход энергии на поддержание колебательной системы ведёт к её затуханию (степенной закон убывания с делением волны на моды в шаговом ритме). По мере затухания колебаний породное пространство заполняется системой из множества узловых точек

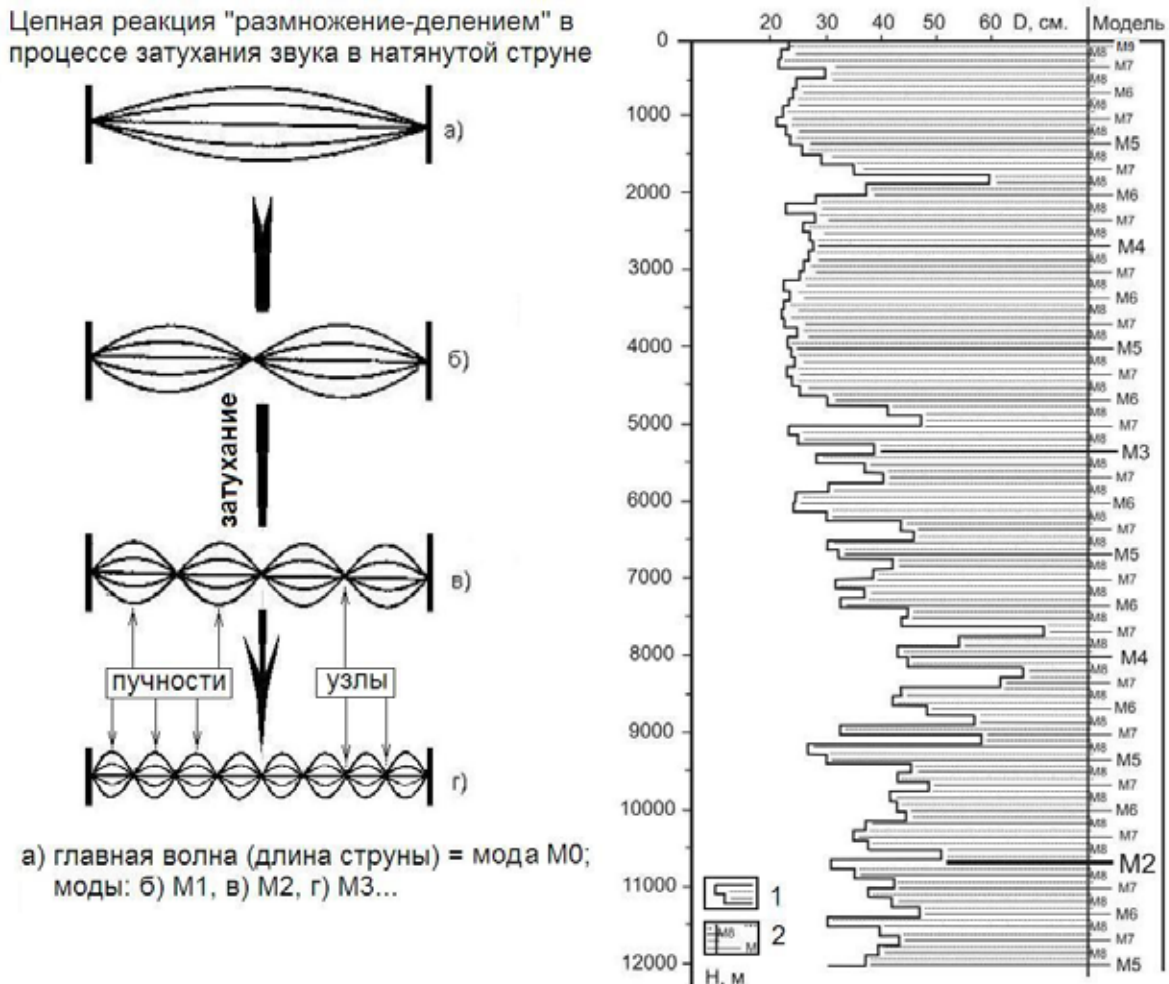


Рис. 2. Затухание звука в натянутой струне и модель расслоения ЗКПБ как колебательной системы: 1 – динамические эффекты в породах (вариации диаметра скважины) по разрезу СГ-3, 2 – модельные границы.

стоячей волны – концентраторов упругой энергии [4] (к узлам оттесняется часть упругих напряжений из зон пучностей). Узлы образуют ряды и сетки в «структуре волнового поля» с фрактально-иерархической организацией, предопределяющей последующее разрушение объекта (с тектоническим расслоением и вариациями прочности пород на поверхности).

Роль приливо-волнового фактора доказана построением модели тектонического расслоения земной коры Печенгского блока (ЗКПБ) как колебательной системы (рис. 2) [4]. Установление в блоке стоячей волны предполагает наличие двух параллельных отражателей, в роли которых в модели использованы земная поверхность и сейсмическая граница Мохо. Средняя глубина залегания границы Мохо:  $M=42\pm 2$  км [8]. Модельные элементы расслоения рассчитаны по формуле:  $M_n=M/2^n$  ( $n$  – номер моды ( $n = 0, 1, \dots$ , целые числа),  $M_n$  – длина  $n$ -й моды ( $M_n=L$ , в таблице).

№	M0	M1	M2	M3	M4	M5	M6	M7	M8	M9
L, км	42 $\pm 2$	21 $\pm 1$	10.5 $\pm 0.5$	5.25 $\pm 0.25$	2.62 $\pm 0.125$	1.31 $\pm 0.062$	0.656 $\pm 0.03$	0.328 $\pm 0.01$	0.164	0.082

Динамика гидротермальных рудообразующих систем контролируется внутренним теплом Земли [7]. Структурные предпосылки формирования рудообразующих систем Земли – тектонические нарушения – развивались с самого «начала»: это катастрофические столкновения планетозималей и метеоритные бомбардировки [7] – *экзогенная* фаза эволюции Земли.

Интенсивность метеоритных атак со временем постепенно снизилась. Экзогенная (конструктивно-шоковая) фаза земной эволюции перешла в *эндогенную* – с приливо-волновой активизацией всех геодинамических процессов (в т.ч. функции насоса для гидротермальных систем и триггера сейсмических событий [1]) в современном волнообразном пульсирующем [9] ритме.

В настоящее время падение крупных метеоритов маловероятно, хотя опасность сохраняется: удар метеорита способен внезапно активизировать геодинамический процесс, масштаб которого зависит от размера ударника.

### Список литературы

1. Адушкин В.В., Спивак А.А. Приливная сила как триггер геофизических процессов в окружающей среде // Триггерные эффекты в геосистемах (Москва, 22-24 июня 2010 года): Матер. Всерос. семинар-совещания. М.: ГЕОС, 2010. С. 8-18.
2. Бак П. Как работает Природа: теория самоорганизованной критичности. М.: УРСС, 2013. 276 с.
3. Горный В.Н., Караев Н.А., Гендерен, Ван Дж.Л., Фролов В.С. Камуфлетные взрывы как причина формирования структур индицирующих алмазоносные районы (по матер. дистанционных и геофизических методов) // Современные проблемы дистанционного зондирования Земли из Космоса. 2006. Т. 3. № 2. С. 225-241.

4. Ильченко В.Л. Моделирование тектонического расслоения земной коры как колебательной системы, возбуждаемой лунным приливом (на примере земной коры Печенгского блока, Балтийский щит) / Матер. XIII межд. конф. «Физико-химические и петрофизические исследования в науках о Земле». Москва, Борок, 1-4 окт. 2012 г. М.: ИЦЦ ОИФЗ РАН, 2012. С. 105-108.
5. Ильченко В.Л. Приливные волны и динамическая эволюция Земли. Саарбрюккен: LAMBERT Academic Publishing, 2013. 292 с.
6. Принцип относительности. М.: Атомиздат, 1973. 332 с.
7. Сорохтин О.Г., Ушаков С.А. Развитие Земли. М.: Изд-во МГУ, 2002. 506 с.
8. Трипольский А.А., Шаров Н.В. Литосфера докембрийских щитов северного полушария Земли по сейсмическим данным. Петрозаводск: Изд-во КарНЦ РАН, 2004. 159 с.
9. Черных В.А. Математические концепции гидрогеомеханики. М.: РУДН, 2013. 447 с.

## КВАНТОВО-МЕХАНИЧЕСКИЕ ЭФФЕКТЫ В ГЕОДИНАМИКЕ

**Ильченко В.Л.**

Геологический институт КНЦ РАН, г. Апатиты, [vadim@geoksc.apatity.ru](mailto:vadim@geoksc.apatity.ru)

*Родство квантовой механики и геодинамики выражается в «квантово-волновых» эффектах и помогает решить некоторые проблемы.*

По представлениям современной науки, динамическая эволюция Земли и Солнца сопровождается увеличением их объёма, вариациями угла наклона оси вращения в ритме волнообразной пульсации [4] в согласии с классической физикой и квантовой механикой [8].

Волновую природу электрона в квантовой механике описывает формула Луи де Бройля:  $\lambda = h/p$ , ( $\lambda$  – длина волны,  $h$  – постоянная Планка,  $p$  – импульс частицы), которая «на атомном уровне» объединяет все физические поля и, т.к. квантовые законы не противоречат классическим, их можно наблюдать в волновых геодинамических эффектах (интерференция, дифракция и т. д.).

Например, признак «квантования» обнаружен в шаговом развитии нарушенных породных зон вокруг глубоких горных выработок [9]. Позднее была установлена причина эффекта – стоячие волны в породах на контуре выработки [5]. Подобные эффекты можно наблюдать повсеместно (и на разной глубине). Обнаруженный 40 лет назад эффект превращения массива горных пород в колебательную систему послужил основой теории спектральной сейсморазведки [1].

В результате изучения упругой анизотропии горных пород (керна СГ-3 и образцы с земной поверхности) получены линейчатые спектры затухающе-

го колебания, из чего сделан вывод о динамической эволюции Земли в ритме колебательной системы. Он подтверждён на модели тектонического расчленения земной коры как колебательной системы, возбуждаемой энергией лунных приливов [4].

Гравитационное взаимодействие происходит по оси  $Z$  между центрами планетных масс. Вертикальные компоненты  $\sigma_z$  поля напряжений каждой из планет входят в состав этой оси. Под воздействием лунной приливной волны гравитационный потенциал Земли резко снижается с эффектом раскрытия-схлопывания трещин, «берега» которых расположены по нормали к оси  $Z$ . Этот эффект создаёт в земной коре колебание, которое, при наличии условий (парные параллельные отражающие поверхности, роль которых выполняют «границы» блока) может превратить любой объект в колебательную систему с динамическими условиями стоячей волны. Дискретность притока энергии (которая быстро расходуется) позволяет такой колебательной системе существовать лишь в фазе затухания [5].

Вершина квантовой физики – Теория Струн, где «струна» – это область, создаваемая колебаниями материальной частицы в одном направлении и, потому её можно измерить лишь длиной [11]. Механизм возмущения гравитационного потенциала Земли вдоль оси  $Z$  во многом напоминает «звучание» такой «струны».

Затухание стоячей волны в породном массиве не имеет принципиальных отличий от затухания звука в натянутой струне. Продолжительность затухания зависит от энергии ударного импульса. Расход ударной энергии на звучание стоячей волны (колебание в зоне пучности, равной длине струны, с неподвижными узлами на её концах) ведёт к затуханию звука. В середине струны возникает новый неподвижный узел, который разделяет её пополам. Звуковая волна делится на пару полуволен или мод. В новых модах появляются новые узлы и т.д. с обязательным соблюдением условия: между узлами всегда целое число полуволен ( $\lambda/2$ ) [10]. Затухание стоячей волны происходит в шаговом ритме:  $\lambda_n = \lambda/2^n$  ( $\lambda_n$  – длина  $n$ -й моды,  $\lambda$  – длина струны). Моды разной длины образуют геометрическую прогрессию. Средний импульс стоячей волны равен нулю, хотя его абсолютная величина такая же, как у соответствующей бегущей волны и связана с её длиной соотношением де Бройля:  $p_n = h/\lambda = nh/2l$ . Энергия  $E_n = p_n^2/2m$ , соответствующая  $n$ -му уровню, равна  $E_n = n^2h^2/8ml^2$  [8].

Колебательная система, в которую регулярно превращается блок земной коры, эволюционирует в шаговом ритме натянутой струны. Затухание поля стоячих волн приводит к появлению в породном пространстве системы узлов – концентраторов напряжений, формирующих структуру волнового поля. Из них образуются линии и сетки (тоже концентраторы упругой энергии), также способные выполнять роль дифракционной решётки. Эти

элементы предопределяют характер разрушения пород. Параметры решётки волнового поля вычисляются по формуле:  $M_n = M/2^n$  ( $M_n$  – длина  $n$ -й моды,  $M$  – расстояние между отражателями – «гранями» блока). Волновая структура зависит от формы (типа симметрии блока). Иерархию по уровням энергии в волновой структуре определяет шаговый ритм, по аналогии с квантованием энергии внутри «ящика-осциллятора», в котором возникают более короткие (по сравнению с размерами «ящика») волны любой длины [8]. Гравитационное возмущение определяется массой планеты – источника возмущений и расстоянием до него; масса планеты (шара) зависит от объёма и плотности ( $\rho$ ), а объём зависит от радиуса ( $R$ ), т.е. ключевые параметры для расчёта планетной массы – это радиус и плотность. Для ясности механизма гравитационного взаимодействия представим, что система «Луна-Приливная волна» = гравитационный диполь [3], где равновесие зависит от соотношения  $R_L \cdot \rho_L = R_{ЗПВ} \cdot \rho_{ЗПВ}$  (нижние индексы:  $L$  – Луна,  $ЗПВ$  – земная приливная волна). Луна повёрнута к Земле всегда одной стороной и находится на стабильном расстоянии, т. е. одинаково влияет на все точки поверхности Земли:  $R_L \cdot \rho_L = const$ .

Поддержание равновесия в диполе предполагает, что масса приливной волны эквивалентна лунной массе. Для оболочки Земли характерны пространственные вариации плотности и равновесие диполя сохраняется постоянным контролем размера (радиуса) области прилива:  $R_{ЗПВ} = R_L \cdot \rho_L / \rho_{ЗПВ}$ . Перемножив радиус и плотность Луны ( $R_L \approx 1737.1$  км,  $\rho_L \approx 3.3$  г/см<sup>3</sup>), найдём константу:  $K_L = 573.243$  (т/см<sup>2</sup>). Делим её на среднюю плотность корово-мантийной оболочки Земли ( $\rho_{вмз\ ср.} \approx 4.6$  г/см<sup>3</sup> [2]) и получаем средний радиус приливной области:  $R_{ЗПВ} \approx 1246.18$  км. Примечательно, что одна из сейсмических границ находится на глубинах 1200-1300 м [10], где уменьшается скорость сейсмических волн и увеличивается плотность пород. Замедление скорости волнового фронта в краевых областях породных тел предсказано экспериментами А.Г. Гликмана. Видимо, энергия лунных приливов проникает в недра Земли на такую же глубину, т.е. корово-мантийная оболочка служит надёжной защитой для земного ядра. Глубина приливного воздействия  $R_{ЗПВ} \approx 1246.18$  км определяет среднюю мощность слоя ГКС (Главная Колебательная Система), расслоение которого имеет параметры, приведенные в таблице 1.

Таблица 1. Граничные параметры первых 11 мод модели расслоения ГКС.

№	M0	M1	M2	M3	M4	M5	M6	M7	M8	M9	M10
L	1246.1	623.0	311.5	155.7	77.8	38.9	19.4	9.7	4.8	2.43	1.22

Средняя мощность континентальной земной коры  $M_{зКср.} \approx 50$  км. Если сравнить её с «квантованием», то видно, что в иерархии расслоения ГКС

мода  $M5 \approx M_{зкр}$ , при средней мощности ГКС  $= M_{ГКС} = M5 \cdot 2^n = 1600$  км. Все свойства сейсмических границ оболочки Земли зависят от пространственных вариаций плотности. «Тектоническим квантованием» вычисляются глубины сейсмических границ и средняя плотность вещества в слое ГКС.

Великое Японское землетрясение ретроспективно предсказано методом А.А. Любушина [7]. Он основан на анализе низкочастотной составляющей геоакустических шумов. Результативность метода сильно зависит от качества сейсмологической аппаратуры и количества (плотности) информации.

Из сейсмологического материала о Хонсю, где 11.03.2011 г. случилось Великое Японское землетрясение ( $M = 9$ ) следует, что 25.09.2003 г. здесь уже было зафиксировано сильное землетрясение ( $M = 8.3$ ) – на 2725 суток раньше.

На Земле наблюдается два лунных прилива в сутки и за 2725 суток её поверхность получила 5450 «зарядов» энергии. Так как мы имеем дело с колебательной системой стоячих волн в фазе затухания, разложим это число в ряд по формуле:  $k_n = 2^{2^n}$ :  $5450 = 2^{2 \cdot 6} + 2^{2 \cdot 5} + 2^{2 \cdot 4} + 2^{2 \cdot 3} + 2^{2 \cdot 2} + 2^{2 \cdot 1} + 2^{2 \cdot 0} + (-12)$ .

Если данную операцию рассматривать как новый «ретроспективный прогноз», то землетрясение 11.03.2011 случилось с задержкой на 12 приливов (6 суток); это время – *поправочный коэффициент*  $\phi$ . Количество упругой энергии в концентраторах напряжений на границах мод (в модели расслоения ЗКПБ) определяется степенным законом  $M_n = M/2^n$ . Возведение двойки в  $n$ -ю степень ( $n \geq 0$ , целые числа) даёт числовой ряд, в котором значение старшего члена на единицу меньше суммы остальных членов:  $2^6 = 64$ ,  $2^0 + 2^1 + 2^2 + 2^3 + 2^4 + 2^5 = 63$ .

Это свойство колебательной системы раскрывает природу поправочного коэффициента: каждый член числового ряда  $[2^{2 \cdot 6} + 2^{2 \cdot 5} + 2^{2 \cdot 4} + 2^{2 \cdot 3} + 2^{2 \cdot 2} + 2^{2 \cdot 1} + 2^{2 \cdot 0}]$  представим старшим членом семи других последовательностей, из которых в шести (кроме  $2^{2 \cdot 0}$ ) содержится «лишняя» единица, сумма которых равна 6. Землетрясение случилось на 6 суток (12 приливов) позже срока, что отражает формула поправочного коэффициента:  $\phi_n = 2 \cdot (n-1)$ , где  $n$  – количество членов в ряду разложения.

Последний «ретроспективный прогноз» явно точнее предыдущего [7].

### Список литературы

1. Гликман А.Г. Теория и практика спектральной сейсморазведки // <http://www.newgeophys.spb.ru/ru/book2/>
2. Грушинский Н.П., Сажина Н.Б. Гравитационная разведка. М.: Недра, 1981. 391 с.
3. Евзикова Н.З. Концепция дипольного строения геологических тел // Рос. геофиз. журнал. 1994. № 3-4. С. 89-95.
4. Зубков А.В. Периодическое расширение и сжатие Земли как вероятный механизм природных катаклизмов // Литосфера. 2013. № 2. С. 145-156.

5. Ильченко В.Л. Моделирование тектонического расслоения земной коры как колебательной системы, возбуждаемой лунным приливом (на примере земной коры Печенгского блока, Балтийский щит) // Матер. XIII межд. конф. «Физ.-хим. и петрофизич. исследования в науках о Земле». Москва, Борок, 1-4 окт. 2012 г. М.: ИЦЦ ОН ФЗ РАН, 2012. С. 105-108.
6. Ильченко В.Л., Медведева С.Г. О посттехногенных нарушениях в массиве горных пород // Геоэкология. Инженерная геология. Гидрогеология. Геокриология. 2013. № 5. С. 454-458.
7. Любушин А.А. Карты свойств низкочастотных микросейсм для оценки сейсмической опасности // Физика Земли. 2013. № 1. С. 11-22.
8. Мигдал А.Б. Квантовая физика для больших и маленьких. М.: Наука, 1989. 144 с.
9. Опарин В.Н., Тапсиев А.П., Чанышев А.И. I Китайско-Российская научн. конф. «Нелинейные геомеханико-геодинамические процессы при отработке полезных ископаемых на больших глубинах». ФТПРПИ. 2011. № 3. С. 111-115.
10. Пономарёв Л.И. Под знаком кванта. М.: Наука, 1989. 368 с.
11. Хокинг С., Млодинов Л. Высший замысел. СПб.: Амфора, 2012. 208 с.

## СУЩЕСТВОВАНИЕ АТТРАКТОРА ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНОГО ВКЛЮЧЕНИЯ ДЛЯ МОДЕЛИ ЦИРКУЛЯЦИИ АТМОСФЕРЫ

**Ипатова В.М.**

Московский физико-технический институт, г. Долгопрудный, ipatval@mail.ru

*Дается краткое введение в теорию аттракторов многозначных полупотоков. Рассмотрено автономное дифференциальное включение для квазигеострофической модели общей циркуляции атмосферы многозначной правой частью. Доказано, что это включение имеет компактный инвариантный глобальный аттрактор.*

Дадим краткое введение в теорию многозначных полупотоков и их аттракторов, необходимое для целей настоящей работы. Полное изложение теории можно найти в [3].

Пусть  $\mathbf{R}_+ = [0, +\infty)$ ,  $X$  – полное метрическое пространство с метрикой  $\rho(\cdot, \cdot)$ ,  $P(X)$  – множество всех непустых подмножеств  $X$ ,

$$B(X) = \{A \in P(X) \mid A \text{ ограничено в } X\}.$$

Для любых  $A, B \in P(X)$  положим:

$\text{dist}(A, B) = \text{dist}_X(A, B) = \sup_{x \in A} \inf_{y \in B} \rho(x, y)$  – уклонение множества  $A$  от множества  $B$ ;  $O_\delta(A) = \{x \in X \mid \text{dist}(x, A) < \delta\}$  –  $\delta$ -окрестность множества  $A$ ;  $cl_X A$  – замыкание множества  $A$  в пространстве  $X$ .



Графиком многозначного отображения  $F: X \rightarrow \mathcal{P}(X)$  называется множество  $\text{graph } F = \{(x, y) \in X \times X \mid y \in F(x)\}$ .

**Определение 1.** Отображение  $G: \mathbf{R}_+ \times X \rightarrow \mathcal{P}(X)$  называется многозначным полупотоком ( $m$ -полупотоком) на  $X$ , если:

1.  $G(0, \cdot) = I_X$  есть тождественное отображение на  $X$ ;
2.  $G(t, \cdot) \subset G(s, \cdot)$ ,  $\forall t, s \geq 0, \forall x \in X$ .

$M$ -полупоток называется строгим, если  $G(t, \cdot) = G(s, \cdot)$  при всех  $t, s \geq 0$  и всех  $x \in X$ .

**Определение 2.** Множество  $P \subset X$  называется притягивающим множеством  $m$ -полупотока  $G$ , если для любого  $B \in \mathcal{B}(X)$  верно, что  $\text{dist}(G(t, B), P) \rightarrow 0$  при  $t \rightarrow +\infty$ .

**Определение 3.** Множество  $A \subset X$  называется глобальным аттрактором  $m$ -полупотока  $G$ , если:

- 1)  $A$  есть притягивающее множество  $G$ ;
- 2)  $A \subset G(t, A)$  при всех  $t \geq 0$ ;
- 3) для любого притягивающего множества  $P$   $m$ -полупотока  $G$

выполняется условие  $A \subset \text{cl}_X P$ .

**Теорема 1.** Пусть  $m$ -полупоток  $G: \mathbf{R}_+ \times X \rightarrow \mathcal{P}(X)$  обладает компактным притягивающим множеством и при всех  $t \geq 0$  график отображения  $G(t, \cdot): X \rightarrow \mathcal{P}(X)$  замкнут, тогда  $G$  имеет компактный глобальный аттрактор  $A$ . В случае строгого  $m$ -полупотока аттрактор  $A$  инвариантен, то есть  $A = G(t, A)$  при всех  $t \geq 0$ .

**Определение 4** [2]. Пусть многозначное отображение  $F$  каждому значению  $t \geq 0$  сопоставляет непустое множество пространства  $E$ . Суммируемой ветвью  $F$  на отрезке  $[t_0, t_1]$  называется однозначная функция, принадлежащая пространству Лебега-Бохнера  $L_1(t_0, t_1; E)$ , для которой  $f(t) \in F(t)$  при почти всех  $t \in [t_0, t_1]$ . Множество всех суммируемых ветвей  $F$  на отрезке  $[t_0, t_1]$  будем обозначать  $L_F(t_0, t_1)$ .

Перейдём к рассмотрению квазигеострофической модели общей циркуляции атмосферы. Пусть  $\lambda \in [0, 2\pi)$  – долгота,  $\mu = \sin \vartheta$ ,  $\vartheta \in [-\pi/2; \pi/2]$  – широта,  $S$  – сфера единичного радиуса,  $\psi = \psi(\lambda, \mu, t)$  – функция тока. Рассмотрим задачу

$$\begin{cases} \frac{\partial}{\partial t} \Delta \psi + J(\psi, \Delta \psi + 2\mu) + \sigma \Delta \psi - \nu \Delta^2 \psi = f, \\ \int_S \psi dS = 0, \quad \psi|_{t=h} = \psi_0(\lambda, \mu), \end{cases} \quad (1)$$

где  $h \geq 0$ ,  $\sigma$  и  $\nu$  – положительные постоянные,  $\Delta$  – оператор Лапласа-Бельтрами,  $J(u, v)$  – якобиан.

Введём действительное гильбертово пространство

$L_0^2(S) = \left\{ u(\lambda, \mu) \mid u \in L_2(S), \int_S u dS = 0 \right\}$  со скалярным произведением  $(u, v) = \int_S uv dS$  и нормой  $\|u\| = (u, u)^{1/2}$ . С оператором  $\Delta$  свяжем шкалу гильбертовых пространств  $H_0^\alpha(S)$ ,  $\alpha \in \mathbf{R}$ , полагая

$$H_0^\alpha(S) = \left\{ u(\lambda, \mu) \mid \int_S u dS = 0, \|u\|_\alpha = \|u\|_{H_0^\alpha(S)} = \|(-\Delta)^{\alpha/2} u\| < +\infty \right\}.$$

Будем считать, что  $f = f(\lambda, \mu, t) \in L_2(h, T; L_0^2(S))$  для любого отрезка  $[h, T] \subset \mathbf{R}_+$ , и обозначать через  $\psi(\lambda, \mu, t) = U_f(t, h)\psi_0$  решение (1) в момент времени  $t \geq h$ . Тем самым определены непрерывные операторы  $U_f(t, h): H_0^2(S) \rightarrow H_0^2(S)$ , причём  $U_f(s, t)U_f(t, h) = U_f(s, h)$  для всех  $s \geq t \geq h \geq 0$ .

Пусть заданы функция  $f_0 = f_0(\lambda, \mu, t) \in L_0^2(S)$ ,  $\|f_0(t)\| = c_0$ , и радиус  $r_0 > 0$ .

Определим на  $\mathbf{R}_+$  многозначное отображение  $F(t) = \left\{ q \in L_0^2(S) \mid \|q - f_0\| \leq r_0 \right\}$  и рассмотрим дифференциальное включение

$$\begin{cases} \frac{\partial}{\partial t} \Delta \psi + J(\psi, \Delta \psi + 2\mu) + \sigma \Delta \psi - \nu \Delta^2 \psi \in F, \\ \int_S \psi dS = 0, \quad \psi|_{t=h} = \psi_0(\lambda, \mu), \end{cases} \quad (2)$$

Решением (2) на отрезке  $[h, T]$  будем называть решение задачи (1) с правой частью  $\mathbf{f} \in L_F(h, T)$ . Обозначим через  $G(t, \psi_0)$  множество решений (2) при  $h = 0$ ,  $t \geq 0$  и  $\psi_0 \in H_0^2(S)$ . Очевидно, что  $G(t, \psi_0)$  непусто и отображение  $G: \mathbf{R}_+ \times H_0^2(S) \rightarrow \mathcal{P}(H_0^2(S))$  является строгим  $m$ -полупотоком.

**Теорема 2.**  *$m$ -полупоток  $G: \mathbf{R}_+ \times H_0^2(S) \rightarrow \mathcal{P}(H_0^2(S))$ , порождаемый дифференциальным включением (2), имеет компактный инвариантный глобальный аттрактор  $A \subset H_0^3(S)$ .*

Доказательство. В [1] показано, что для решения (1) с  $h = 0$  и правой частью  $f \in L_\infty(\mathbf{R}_+; L_0^2(S))$ ,  $\|f(t)\| \leq c_0$ , верны оценки

$$\|U(t, 0)\psi_0\|_2^2 \leq \|\psi_0\|_2^2 e^{-(\sigma+2\nu)t} + \frac{c_0^2}{(\sigma+2\nu)^2} (1 - e^{-(\sigma+2\nu)t}) \quad \forall t \geq 0,$$

$$\|U(t, 0)\psi_0\|_3 \leq c_1 (\|\psi_0\|_2) \quad \forall t \geq 1,$$

где  $c_1(\cdot)$  – определенная на  $\mathbf{R}_+$  непрерывная положительная неубывающая функция. Из чего вытекает, что рассматриваемый м-полупоток имеет компактное притягивающее множество  $P = \{u \in H_0^3(S) \mid \|u\|_3 \leq c_1(c_0 / (\sigma + 2\nu))\}$ .

Покажем, что при всех  $T > 0$  график отображения  $G(T, \cdot)$  замкнут в  $H_0^2(S) \times H_0^2(S)$ . Введём пространство

$$W(0, T) = \left\{ \psi \mid \psi \in L_2(0, T; H_0^3(S)), \frac{\partial \psi}{\partial t} \in L_2(0, T; H_0^1(S)) \right\}.$$

Оно компактно вложено в  $L_2(0, T; H_0^2(S))$  и непрерывно вложено в  $C([0, T]; H_0^2(S))$ . Рассмотрим произвольную последовательность  $(x_n, y_n) \in \text{graph } G(T, \cdot)$ ,  $(x_n, y_n) \rightarrow (x, y)$  при  $n \rightarrow \infty$ . Существует последовательность  $f_n \in L_F(0, T)$  такая, что  $y_n = U_{f_n}(T, 0)x_n$ . Обозначим через  $u_n(t) = U_{f_n}(t, 0)x_n$ ,  $t \in [0, T]$ . Поскольку последовательность  $x_n$  ограничена в  $H_0^2(S)$  и  $f_n$  ограничена в  $L_2(0, T; L_0^2(S))$ , то  $u_n$  ограничена в  $W(0, T)$ . Выделим сходящиеся подпоследовательности  $f_n \rightarrow f$  слабо в  $L_2(0, T; L_0^2(S))$  и \*-слабо в  $L_\infty(0, T; L_0^2(S))$ ;  $u_n \rightarrow u$  слабо в  $W(0, T)$  и сильно в  $L_2(0, T; H_0^2(S))$ . Тогда  $u_n(T) \rightarrow u(T)$  слабо в  $H_0^2(S)$  и  $J(u_n, \Delta u_n) \rightarrow J(u, \Delta u)$  слабо в  $L_2(0, T; H_0^{-1}(S))$ . В пределе при  $n \rightarrow \infty$  получаем, что  $u(t) = U_f(t, 0)x$ ,  $t \in [0, T]$ . Так как  $f_n \rightarrow f$  \*-слабо в  $L_\infty(0, T; L_0^2(S))$ , то  $\|f(t) - f_0\| \leq \liminf_{n \rightarrow \infty} \|f_n(t) - f_0\| \leq r_0$  при п.в.  $t \in [0, T]$ , из чего заключаем, что  $f \in L_F(0, T)$  и  $(x, y) \in \text{graph } G(T, \cdot)$ . Для рассматриваемого м-полупотока выполнены все условия теоремы 1, что и доказывает нашу теорему.

Работа выполнена при поддержке ФЦП «Кадры» (соглашение 14.А18.21.1901).

### Список литературы

1. Ипатова В.М. Об аттракторах аппроксимаций неавтономных эволюционных уравнений // Матем. сб. 1997. Т. 188. № 6. С. 47-56.
2. Половинкин Е.С. Элементы теории многозначных отображений. М.: МФТИ, 1982. 127 с.
3. Kapustyan O.V., Mel'nik V.S., Valero J., Yasinsky V.V. Global attractors of multi-valued dynamical systems and evolution equations without uniqueness. Kyiv: Naukova Dumka, 2008. 215 p.

## ЭФФЕКТ КВАНТОВАНИЯ ХАРАКТЕРИСТИК КВАЗИДРЕЙФОВОГО ДВИЖЕНИЯ ЗАРЯЖЕННЫХ ЧАСТИЦ В ПОЛЕ ДИПОЛЯ КАК РЕЗУЛЬТАТ СОВРЕМЕННОГО ЧИСЛЕННОГО РАЗВИТИЯ ТЕОРИИ ШТЕРМЕРА

**Пчёлкин В.В.**

Полярный геофизический институт КНЦ РАН, г. Апатиты, pchelkin@pgia.ru

*В работе приведены результаты современных численных исследований движения квазизахваченных заряженных релятивистских частиц в поле магнитного диполя. В рамках подхода метода Монте-Карло на основе множественных траекторных расчётов получены статистические характеристики квазидрейфового движения релятивистских протонов. Впервые установлен квантованный характер некоторых из полученных характеристик.*

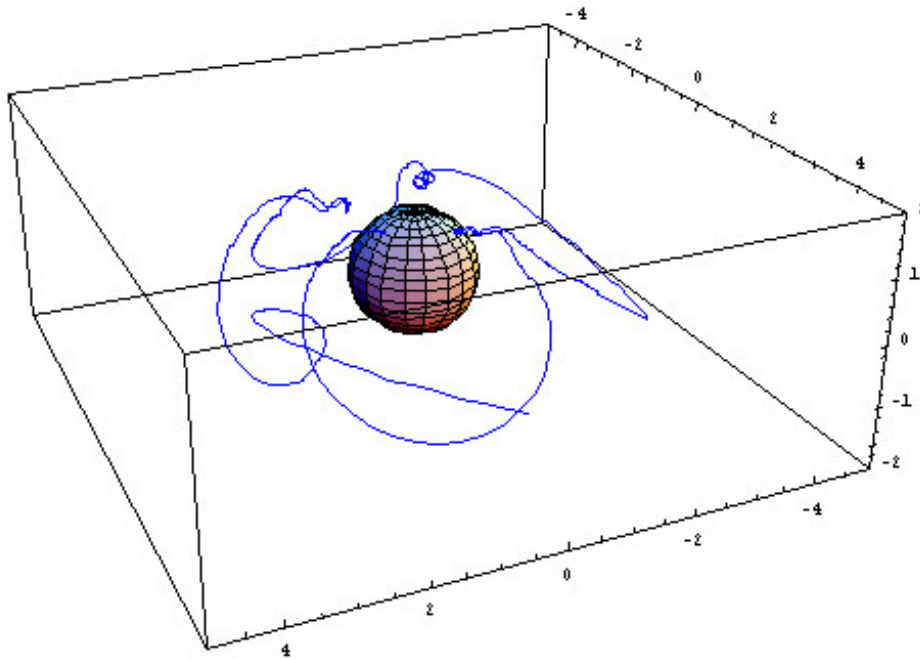
### **Введение**

Модельные исследования движения заряженных частиц в магнитосфере проводятся давно – почти с начала века. В пионерских работах Штёрмера [1, 3, 8] на основе теоретического анализа уравнения движения заряженных частиц в поле магнитного диполя и численных расчётов траекторий получены выводы о характере такого движения, сохраняющие фундаментальное значение по сей день. Метод траекторных расчётов, хотя и подвергающийся изменениям, обусловленным развитием представлений о магнитосфере, разработкой новых численных методов и увеличением производительности счётных машин, до сих пор лежит в основе большинства модельных исследований, связанных с распространением РСП в магнитном поле Земли.

Основными выводами анализа Штермера можно, пожалуй, считать классификации траекторий в зависимости от так называемого параметра Штермера  $\gamma$ . Согласно выводам теории Штермера [1, 3, 8, 9], при значениях  $\gamma \geq 1$  существуют две зоны разрешённого движения частиц, причем во внутренней происходит так называемое дрейфовое движение [7]. При  $\gamma \leq 1$  происходит смыкание зон («открытие» для доступа частиц внутренней), а сами

траектории частично теряют характерные признаки дрейфовых, очень сложны и их исследования возможны лишь на пути численных расчётов.

На рис. 1 показана типичная квазидрейфовая траектория в реальном магнитном поле Земли. Как видно, она имеет как черты морфологического сходства с дрейфовыми траекториями [2, 4, 5, 6] (элементы квазипериодичности – дрейф в экваториальной плоскости, периодические изменения координаты  $Z$ , участки с циклотронным вращением), так и существенные отличия от дрейфовых траекторий. Даже для квазидрейфа частиц меньших жёсткостей наблюдается разница в широте точек отражения в северном и южном полушариях [2, 4, 6]. Для рассматриваемых нами траекторий эта разница усиливается. Наблюдается полное отсутствие участка с циклотронным вращением в противоположном полушарии. Появляется (рис. 1) лепесткообразный (или дугообразный) элемент траектории, соединяющий две точки отражения частицы в одном полушарии.



*Рис. 1. Вид квазидрейфовой траектории.*

Лепесткообразный элемент присущ большинству траекторий пенумбры. В то же время он совершенно не свойственен дрейфовым и даже многим квазидрейфовым траекториям. Он отличается относительным морфологическим постоянством и может «выпадать» из траектории лишь целиком. Отсюда появилось предположение о возможности квазипериодичной модуляции или даже дискретности ряда характеристик квазидрейфого движения данного типа, например – асимптотических направлений, времён пребывания в геомагнитной ловушке, координат точек выхода и т.п. Проверить гипотезу можно лишь численно.

## **Техника расчётов**

Используемая техника траекторных расчётов традиционна и сводится к численному интегрированию релятивистского уравнения, описывающего движение одиночного протона в абсолютном вакууме в стационарном магнитном поле:

$$\gamma m (d^2 \mathbf{r} / dt^2) = Ze (d\mathbf{r} / dt) \times \mathbf{B},$$

где  $\gamma$  – Лоренц-фактор,  $\mathbf{r}$  – радиус-вектор частицы,  $\mathbf{B}$  – вектор магнитной индукции в точке нахождения частицы,  $Ze$  – её заряд.

В рамках этой техники обычно вводят новую переменную  $\mathbf{V} = d\mathbf{r}/dt$ , преобразуя уравнение второго порядка в систему уравнений первого порядка:

$$d\mathbf{V} / dt = -(e/m) \mathbf{V} \times \mathbf{B}$$

$$d\mathbf{r} / dt = \mathbf{V}$$

К особенностям данной работы на этом этапе следует отнести использование для скалярной записи декартовой системы координат (обычно применяется сферическая система [3]). Скалярная система интегрируемых уравнений представлена шестью уравнениями:

$$dV_x / dt = - (e / m\gamma) (V_y H_z - V_z H_y)$$

$$dV_y / dt = (e / m\gamma) (V_x H_z - V_z H_x)$$

$$dV_z / dt = - (e / m\gamma) (V_x H_y - V_y H_x)$$

$$dx / dt = V_x$$

$$dy / dt = V_y$$

$$dz / dt = V_z$$

Для представления магнитного поля мы использовали модель Цыганенко – 89 [10, 11] Интегрирование данной системы осуществлялось с помощью модифицированной подпрограммы RKF45 [12], реализующей метод Рунге-Кутты-Фельдберга 4-5 порядка точности. Для контроля точности решения применялся расчёт траектории в обратном направлении.

В рамках метода Монте-Карло далее проведены множественные серии подобных траекторных расчётов для протонов узкого диапазона энергий (жёсткостей), совершающих квазидрейфовое движение, и получены распределения направлений выхода частиц из магнитной ловушки, времени пребывания частиц в ней и координат мест «вылета» частиц из ловушки.

## **Обсуждение результатов**

Результаты расчётов представлены на графиках (рис. 2). Как видно из рис. 2 а, в распределении частиц по времени квазизахваченного пребывания в геомагнитной ловушке присутствуют отчётливые максимумы. Их четыре, и расстояния между ними равно примерно 0.12 с, что примерно соответствует времени прохождения протоном одного лепесткообразного элемента траектории. Мы получили, таким образом, убедительное подтверждение выдвинутой гипотезы о существовании квазипериодической модуляции для

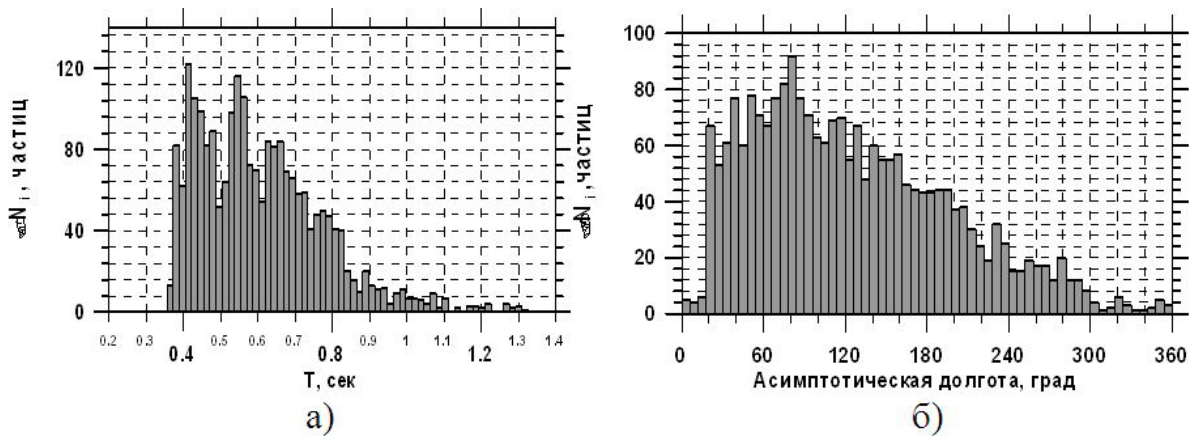


Рис. 2. Распределения частиц по времени квазизахваченного пребывания в геомагнитной ловушке и по асимптотическим направлениям прихода.

времени квазизахвата (квантованности), связанной с лепесткообразным элементом. Как можно судить по рис 2 б, аналогичной модуляции в асимптотических направлениях прихода не выявляется.

Полученный при исследовании траекторий релятивистских протонов, движущихся в магнитосфере Земли, результат, по-видимому, имеет более широкий характер. Проявления квазипериодичности характеристик квазизахваченного движения подобного типа можно ожидать в опытах по рассеянию магнитным диполем пучков заряженных частиц.

### Выводы

1) На основе численных расчётов квазидрейфового движения релятивистских частиц в дипольном магнитном поле в рамках метода Монте-Карло обнаружен принципиально новый качественный эффект – квазипериодическая модуляция функции распределения квазизахваченных частиц по времени пребывания в геомагнитной ловушке (квантование характеристик). В распределении асимптотических долгот квазизахваченных релятивистских протонов периодической модуляции не выявлено.

2) Представляется вполне реальным экспериментальное подтверждение обнаруженного эффекта квантования характеристик квазидрейфового движения частиц при экспериментальном изучении рассеяния потоков частиц близких энергий на магнитных диполях.

3) Обнаруженный эффект представляет возможность пространственного разделения частиц близких энергий.

### Список литературы

1. Stormer C. The Polar Aurora. Oxford University Press, Fair Lawn N.Y., 1955.
2. Амирханов И.В., Ильина А.Н., Ильин В.Д., Юшков Б.Ю. О неадиабатической теории движения заряженных частиц в геомагнитном дипольном поле // Космические иссл. 1991. Т. 29. Вып. 2. С. 282-288.

3. Дорман Л.И., Смирнов В.С., Тясто М.И. Космические лучи в магнитном поле Земли. М.: Наука, 1971. 400 с.
4. Ильин В.Д., Кузнецов С.Н., Юшков Б.Ю. Квазиadiaбатическое движение энергичных частиц в дипольном магнитном поле // Препринт НИИЯФ МГУ 92-23/272. Москва, 1992.
5. Пчёлкин В.В., Вашенюк Э.В. Квазидрейф частиц космических лучей высоких энергий в геомагнитном поле // Тр. научной сессии МИФИ – 2001. Москва, 22-26 янв. 2001. М.: Изд-во МИФИ, 2001. С. 57-58.
6. Пчёлкин В.В., Вашенюк Э.В. Эффекты квазидрейфа и проблема пенумбры космических лучей // Изв. РАН. Сер. физ. 2001. Т. 65. № 3. С. 416-421.
7. Редерер Х. Динамика частиц, захваченных геомагнитным полем. М.: Мир, 1972. 192 с.
8. Росси Б., Ольберт С. Введение в физику космического пространства // М.: Атомиздат, 1974. 250 с.
9. Cooke D.J., Humble J.E., Shea M.A., Smart D.F., Lund N., Rasmussen I.L., В. Byrnak, P. Goret, Petrou N. On Cosmic-Ray Cut-Off Terminology // Nuovo Cimento, 1991. V. 14. N. 3. P. 213-234.
10. Tsyganenko N.A. A magnetospheric magnetic field model with a warped tail current sheet // Planet. Space Sci. 1989. V. 37. N. 1. P. 5-20.
11. Tsyganenko N.A. Quantitative models of the magnetospheric magnetic field: methods and results // Space Sci. Rev., 1990. V. 54. P. 75-186.
12. Форсайт Дж., Мальком М., Моулер К. Машинные методы математических вычислений. М.: Мир, 1980. 350 с.



# МАТЕМАТИЧЕСКИЕ ИССЛЕДОВАНИЯ В БИОЛОГИИ



# МЕТОДЫ КОЛИЧЕСТВЕННОГО УЧЁТА ВОДНЫХ ОРГАНИЗМОВ ПРИ ЭКОЛОГИЧЕСКИХ ИССЛЕДОВАНИЯХ НА ПРИМЕРЕ СООБЩЕСТВ ФИТОПЕРИФИТОНА

Денисов Д.Б.

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

*Рассматриваются проблемы количественного учёта водных организмов в экологических исследованиях на примере фитоперифитона. Дан критический анализ некоторых методов подсчёта численности водорослей. Показано, что широко распространённые в гидробиологической практике методы содержат ряд спорных моментов и неточностей, что может вносить ошибки в результаты. Определяющее значение имеют субъективная оценка при использовании глазомерных шкал, используемый инструментарий и сложность учёта структуры покрытия водорослями субстрата.*

## **Введение**

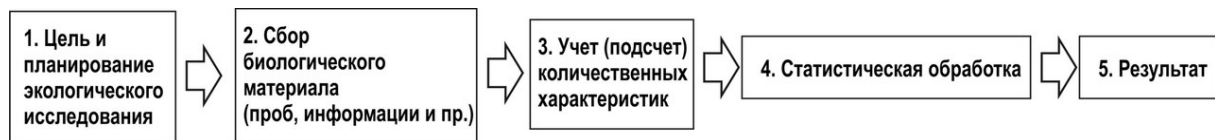
Оценка состояния водных ресурсов методами биоиндикации в настоящее время является наиболее широко используемой и перспективной. Именно сообщества живых организмов, непосредственно испытывающие воздействие тех или иных факторов и реагирующие на них, являются теми функциональными элементами водных экосистем, которые позволяют получить адекватную и объективную информацию о состоянии водоёмов. При этом важно знать не только видовой состав водных организмов, но и их количественные характеристики. Данные о численности гидробионтов являются базой для расчёта различных комплексных индексов (в том числе включённых в систему государственного комплексного экологического мониторинга), позволяющих сделать вывод о качестве среды, оценить продукционный потенциал, особенности распространения и соотношение видов в сообществах. Несмотря на давнюю историю специальных гидробиологических исследований [2, 3], количественный учёт водных организмов связан с целым рядом методических проблем, некоторые из которых рассматриваются далее на примере сообществ водорослевых обрастаний (фитоперифитона).

## **Методы количественного учёта водных организмов**

Численность организмов в экологических исследованиях занимает центральное место, как результирующая функция всего комплекса факторов, оказывающих влияние на мультивидовые сообщества гидробионтов. Ярким примером таких сообществ являются водоросли, где в одном местообитании могут встречаться до нескольких десятков и сотен видов. Именно это свойство водорослей делает их удобным инструментом биоиндикации качества вод. Соотношение и динамика численности различных видов в сообществе представляет собой чувствительный индикатор состояния водной эко-

системы. Они обладают быстрой, интегральной и избирательной реакцией на воздействие любых факторов, и позволяют оценивать токсичность среды, уровень солености, рН, наличие органического загрязнения, эффективность самоочищения водоёмов, их устойчивость и пр. Поэтому неизбежно возникает проблема корректного количественного учёта водорослевых сообществ. Именно полученные на этом этапе данные ложатся в основу последующих статистических манипуляций, что в первую очередь относится и к допущенным ошибкам. Как бы корректно не был подобран метод математической статистики для обработки полученных данных, он не избавляет от ошибок, связанных с неточным количественным учётом (рис. 1).

Без точного учёта численности видов, которые входят в состав сообществ, нельзя судить об их относительной роли в формировании стабильно-



*Рис. 1. Основные этапы экологического исследования.*

сти данного сообщества, а также рассчитать экологические индексы, базирующиеся на этих данных. Кроме того, при количественном учёте организмов необходимо придерживаться определённых методических правил, что позволяет проводить сравнительный анализ с результатами других аналогичных исследований.

Многолетний опыт исследований водорослевых сообществ фитоперифитона Кольского Севера позволил выделить несколько основных проблем [1]. Наиболее полный обзор методов количественного учёта водорослей перифитона систематизирован в работах С.Ф. Комулайнена [5], и других методических изданиях [6]. Погрешность первичного учёта количественных характеристик водорослевых сообществ связана с субъективностью оценки, выполняемой «на глаз». Так, к стандартным методам учёта относится визуальная оценка проективного покрытия водорослей [5, 6, 8], выполняемая в баллах (табл. 1).

В частности [6], приводятся следующие рекомендации: «Приблизительное количество каждого типа оброста в интегральной пробе должно быть пропорционально его обилию в створе наблюдений, оцененной по глазомерной шкале». Таким образом, сбор пробы и соотношение типов обрастаний в ней полностью определяются человеком, отбирающим эти пробы на месте. Естественно, при таком подходе определяющее значение имеет субъективное восприятие характера обрастаний и соотношение их типов.

Таблица 1. Глазомерная шкала оценки численности покрытия водорослями субстрата [6].

Баллы «обилия»	1	3	5	7	9
Занимаемая площадь	< 1	1-10	10-20	20-40	40-100

Для более точного учёта площади поверхности, на которой произрастают водоросли, применяется следующий способ. Поверхность (камень или другой объект) покрывают влажной бумагой или плёнкой и вырезают по контуру. Для расчёта площади на вырезанную бумагу накладывают плёнку, расчерченную на квадраты со стороной 1 см. После этого подсчитывают количество целых квадратов и по контуру частично перекрываемых. Общая площадь равна количеству целых квадратов плюс 1/2 неполных квадратов [4].

Инструменты, используемые при отборе проб, также имеют значение. В собранном материале необходимо установить количественное соотношение видов, поэтому необходимо собирать обрастания различного типа со всей площади поверхности субстрата. Для отбора фитоперифитона используются скребки, ножи, щётки и другие инструменты, позволяющие отделять обрастания от субстрата. Показано [7], что при использовании щётки отделяется только 28% водорослевого материала от соскабливаемого ножом. Хорошие результаты даёт использование комплекса различных инструментов (рис. 2).



Рис. 2. Сбор перифитона в малых реках.

Численность клеток водорослей пересчитывается на площадь, в то время как обрастания имеют определённую пространственную структуру, что весьма сложно поддается учёту (рис. 3).

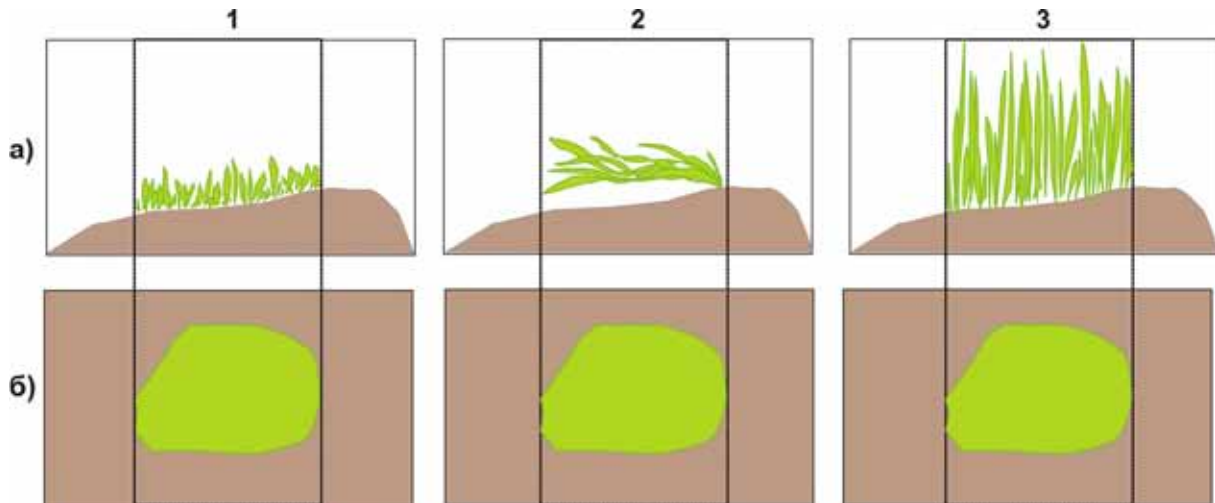


Рис. 3. Схема пространственной структуры обрастаний различного типа, занимающих одинаковую площадь: а) вертикальная структура обрастаний, б) проекция площади, занимаемой обрастаниями. 1 – плотные невысокие обрастания, 2 – кустистые нитчатые обрастания, 3 – плотные высокие обрастания.

При одинаковом проективном покрытии субстрата обрастания могут существенно отличаться по пространственной структуре и, соответственно, численности экземпляров.

### **Подсчёт численности водорослей**

После отбора материал фитоперифитона подсчитывается под микроскопом в счётных камерах или временных препаратах, что включает следующие этапы [5]:

Оценка обилия нитчатых и колониальных форм;

Подсчёт одноклеточных водорослей – пересчёт на единицу площади субстрата;

В каждом препарате подсчитывается 100-200 клеток, в пробе – 10-15 препаратов. Таким образом, общее число просчитываемых клеток достигает 1-3 тысяч, что соответствует общепринятой методике [9, 10]. Численность водорослей (N) определяется по формуле:

$$N = V_1 n / V_2 S,$$

где  $V_1$  – объём воды с пробой перифитона;  $V_2$  – объём просмотренной пробы, в которой обнаружено  $n$  клеток водорослей;  $S$  – площадь субстрата, с которой отобрана проба. Таким образом, используется величина площади, с которой проведён сбор обрастаний, и никак не учитывается проективное покрытие субстрата водорослями, оценка которого проводилась на этапе от-

бора. Опыт показывает, что сбор водорослей происходит там, где они растут, поэтому в приведенной выше формуле для расчётов используется только площадь, покрытая водорослями, и для реальной количественной оценки необходимо учесть проективное покрытие. Для оценки численности водорослей под микроскопом также применяется бальная шкала, для упрощения процедуры подсчёта:

Таблица 2. Шкала оценки численности водорослей под микроскопом [6].

Клеток в 100 полях зрения	Клеток	Баллы
1-50	< 1 в двух полях зрения	1
50-200	< 2 в поле зрения	2
200-1000	< 10 в поле зрения	3
1000-5000	< 50 в поле зрения	5
5000-25000	< 250 в поле зрения	7
>25000	> 250 в поле зрения	9

До сих пор дискуссионным является вопрос о минимальном количестве просчитываемых клеток, достаточном для получения репрезентативных данных. Это связано, в первую очередь, с трудоёмкостью и большими временными затратами. Помимо того, что количество клеток водорослей, достаточных для подсчёта, определяется самим материалом, можно выделить два основных положения, определяемых целью исследования:

1. Для задач оценки качества вод требуется меньшее количество: при расчете экологических индексов используются массовые и индикаторные виды, поэтому достаточно подсчитать 100-500 клеток на препарат.

2. Более 1000 клеток на препарат имеет смысл учитывать для флористических задач: оценки таксономического разнообразия, поиска редких форм, инвентаризации видового состава.

Показано, что при увеличении числа подсчитанных клеток количество определённых видов увеличивается, но значение экологических индексов изменяется не кардинально. Поэтому редкие виды с обилием менее 0.1% могут не подсчитываться при мониторинге или исключаться при оценке. В некоторых случаях для определения индексов достаточно учитывать только три первых по численности вида. Считается также, что для рек, не подверженных антропогенному воздействию, необходимо считать 8 тысяч, а для загрязнённых – 10 тысяч и более клеток [5].

Другая проблема, возникающая при подсчёте водорослей под микроскопом, это вытекающая из биологических особенностей строения водорослей и их колоний сложность определения того, что можно считать экземпляром, или клеткой. Некоторые клетки визуально не различимы в составе колонии, или колонии могут иметь форму плотных комковидных образований, что за-

трудняет выделение отдельных клеток и делает невозможным их количественный учёт. В этих случаях приходится учитывать сами колонии, как некий аналог экземпляра. Для нитчатых водорослей измеряется длина нитей и её диаметр, когда отдельные клетки нити неразличимы. Эти данные с успехом могут быть использованы для подсчёта биомассы, когда индивидуальные объёмы колоний и отдельных экземпляров формируют общую биомассу. При оценке численности следует учитывать, что колонии и нити могут сильно отличаться своими размерными характеристиками и фактически содержат сильно различающиеся количество клеток.

### **Выводы**

1. Учёт количественных характеристик фитоперифитона требует не только неукоснительного соблюдения процедуры всех этапов, но и материально-технического обеспечения. В идеальном случае все этапы должен осуществлять один специалист.
2. Основные ошибки при количественном учёте водорослей определяются используемыми инструментами сбора, отсутствием учёта пространственной структуры обрастаний на субстрате, погрешностью расчёта площадей, мозаичностью покрытия.
3. Существующие шкалы визуальной оценки являются субъективными и зависят от восприятия конкретного специалиста. Это же относится к таксономическому определению видовой принадлежности под микроскопом.
4. Повышение «точности расчётов» на отдельных этапах не всегда оправдано в связи с большой погрешностью на предыдущих.
5. Хороший результат даёт сочетание различных методов для формирования объективного представления о количестве организмов, что требует искать баланс между качеством результата и целесообразностью затрат (трудоемкость, экономические факторы и пр.).
6. Все существующие методы количественного учёта не лишены недостатков.
7. Необходимы как поиски новых методов, так и усовершенствование существующих с привлечением междисциплинарного подхода.

Работа поддержана грантом по Программе Президиума РАН № 4 «Живая природа: современное состояние и проблемы развития».

### **Список литературы**

1. Денисов Д.Б. Проблемы современной биоиндикации состояния субарктических водных экосистем на основе водорослевых сообществ // Биоиндикация в мониторинге пресноводных экосистем II. Матер. межд. конф. СПб.: Любавич, 2011. С. 68-73.
2. Дулаков С.Н. Материалы к изучению перифитона // Тр. лимнол. станции в Косине. Вып. 16. М., 1933. 160 с.

3. Научная хроника // Ж. микробиологии. Т. 3. Петроград, 1916. С. 201-224.
4. Ковтун О.А., Снигирева А.А. Методические указания по изучению фитомикробентоса и фитоперифитона. Одесса: Одесский нац. универ. им. И.И. Мечникова, 2012. 36 с.
5. Комулайнен С.Ф. Методические рекомендации по изучению фитоперифитона в малых реках. Петрозаводск: Изд-во КарНЦ РАН, 2003 43 с.
6. Руководство по методам гидробиологического анализа поверхностных вод и донных отложений. Л.: Гидрометиздат, 1982. 239 с.
7. MacLulich J.H. Experimental evaluation of methods for sampling and assaying intertidal epilithic microalgae // Marine Ecology, Progress series. 1986. N. 34. P. 275-280.
8. Thomas E.A., Schanz F. Beziehungen zwischen Wasserchemismus und primarproduction in Fliessgewassern, ein limnologisches Problem. Vjsschr. Natf. Ges. Ziurich. 1976. P. 309-317.
9. Tippet R. Artificial surfaces as a method of studding population of benthic microalgae in fresh water // Brit. Phycol. J. 1970. N. 5. P. 197-199.
10. Weber G.J. Biological field and laboratory methods for measuring the quality of surface waters and effluents. Cincinnati, 1973. P. 6.

## **ИСПОЛЬЗОВАНИЕ СЧЁТНЫХ И МЕТРИЧЕСКИХ ПРИЗНАКОВ *CUCUMUS SATIVIS* В БИОИНДИКАЦИИ ИОНИЗИРУЮЩЕГО ИЗЛУЧЕНИЯ**

**Петрашова Д.А., Михайлов Р.Е.**

Научный отдел медико-биологических проблем адаптации человека  
в Арктике КНЦ РАН, г. Апатиты, petrashova@admksk.apatity.ru

*В статье приведён алгоритм анализа асимметрии проявления мерных признаков на предмет соответствия флуктуирующей асимметрии (ФА). Проведено сравнение двух методов измерения мерных признаков листовой пластины огурца обыкновенного для определения ФА.*

Устойчивость (стабильность) развития и жизнеспособность организма поддерживаются за счёт сложной физиологической системы буферных гомеостатических механизмов. Под воздействием неблагоприятных факторов среды могут происходить нарушения механизмов гомеостаза, которые находят выражение на разных уровнях организации живого. Так, снижение эффективности гомеостаза приводит к появлению отклонений от нормального строения различных морфологических признаков [3]. Отклонения от генетически заложенного состояния симметрии характеризуются как нестабильность развития и могут быть оценены по величине флуктуирующей асимметрии (ФА) [8].

Считается, что ФА морфологических признаков может усиливаться под воздействием экстремальных стрессовых факторов [7]. Основываясь на дан-



ном явлении, ФА предлагается в качестве биомаркера при оценке здоровья среды [3].

Цель работы: оценить возможность использования ФА как биомаркера ионизирующего облучения на примере растительного культурного объекта.

### **Объекты и методы**

В качестве объекта исследований выбран вид *Cucumis sativis* (огурец обыкновенный, *Сорт Водолей, ВНИИССОК*). Выбор объекта исследований обусловлен несколькими причинами.

1. При проведении исследований мы следуем международным нормам по биоэтике, в частности, Европейской Конвенции о защите позвоночных животных, используемых в эксперименте и для других научных целей (№ 123, 1986 г.), включающей основные положения Этического кодекса СММНО, и Директиве Совета ЕС «О сближении законов, постановлений и административных положений государств ЕС по вопросам защиты животных, используемых для экспериментов и других научных целей» (86/609/ЕЕС). Для достижения цели нашего исследования нет необходимости использовать животных, эффекты можно оценить и на растительных объектах.

2. Возможность выращивания в лабораторных условиях для минимизации учитываемых факторов.

3. Быстрые темпы роста растения, крупный лист с чёткими жилками и очертаниями.

4. Заведомая симметричность листьев у выбранного вида растений [3].

5. Возможность параллельной оценки дополнительных критериев-биомаркеров воздействия ионизирующего облучения.

Огурец обыкновенный соответствует перечисленным критериям. В качестве дополнительного критерия-биомаркера выступает цитостатическая реакция (подавление процессов деления и роста клеток) на облучение ионизирующим излучением, которая проявляется в торможении образования боковых корешков у проростка. В корнях огурца, как и других тыквенных, боковые корни закладываются уже в меристеме и при прорастании появляются уже на третий день. Цитостатические воздействия, в том числе облучение ионизирующим излучением, тормозит появление боковых корней [4].

Семена проращивались в четырёх чашках Петри по 50 шт. в каждой. Когда семена набухли и дали проростки, одна чашка Петри с семенами была помещена в климатостат (НОМБП КНЦ РАН), три чашки Петри – одна за другой в контейнер с источником ионизирующего излучения, МЭД 18 мкЗв/ч (лаб. Радиохимии, ИХТРЭМС КНЦ РАН). Для всех четырёх групп проростков соблюдались одинаковые условия по влажности и температуре, освещённость отсутствовала. Время инкубации проростков составило 118 часов.

После окончания инкубации проведены замеры длины корешков и количества ответвлений. Затем по 10 проростков из каждой чашки Петри посажены в землю для получения молодых растений. Условия выращивания растений были идентичны. Растения выращивали до появления 5 листа у растений из контрольной группы. Для каждого растения листья с 1-го по 4-й собраны и высушены. На гербарном материале произведены промеры для оценки ФА [3]. Для измерения лист помещали перед собой внутренней стороной. С каждого листа снимали показатели по пяти промерам с левой и правой стороны (рис. 1, А).

Классическая методика требует большого количества измерений и занимает много рабочего времени. В литературе описана методика определения ФА с использованием компьютерных технологий. Она заключается в определении площади правой и левой стороны листа: сканирование листьев, стирание центральной жилки, выравнивание тонов, выделение областей, анализ площади [5]. Мы упростили процедуру благодаря программе ImagePRO+. Листовая пластинка размещалась на стекле сканера внутренней стороной вниз, сканирование производилось с разрешением 300 dpi. Листовая пластинка аккуратно, с соблюдением всех деталей рельефа края листа, обводилась автоматически по контуру от основания до вершины листа и вручную по срединной жилке от вершины до основания. В результирующем окне выдавалась площадь листа в пикселях, которая после пересчитывалась в квадратные сантиметры. Левая и правая половинки листа измерялись отдельно.

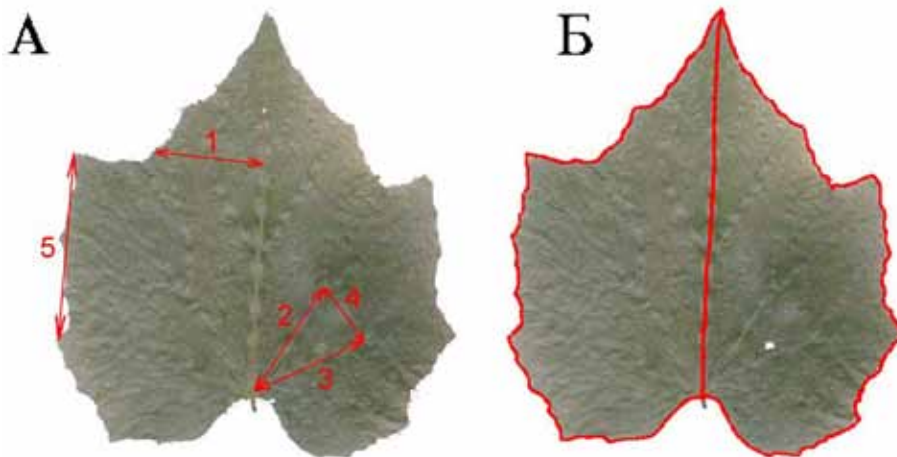


Рис. 1. Схема морфологических признаков для оценки стабильности развития огурца обыкновенного. А – классическая методика: 1 – ширина половины листа (посередине листовой пластинки); 2 – длина второй жилки до разветвления; 3 – длина первой жилки до разветвления; 4 – расстояние между первой и второй жилкой в месте разветвления; 5 – расстояние между концами первой и второй жилки. Б – площадь половинки листа.

## Результаты

### Определение типа асимметрии

Для билатерально-симметричных организмов существуют три типа асимметрии: флуктуирующая, направленная и антисимметрия. ФА – это такая изменчивость различий между обеими сторонами, когда значения слева и справа нормально распределены вокруг нуля. Направленная асимметрия характеризуется тем, что значение признака на одной из сторон в среднем больше чем с другой, что выражается в отличии от нуля среднего различия между сторонами. Антисимметрия – это когда проявление асимметрии признака является нормой. В данном случае различия между сторонами распределены вокруг нуля, но частоты распределения отклоняются от нормальности в сторону отрицательного эксцесса [1, 2, 9, 10].

Чтобы установить, является ли асимметрия флуктуирующей, необходимо провести статистический анализ контрольной выборки, состоящий из нескольких этапов [10].

1. **Анализ вида распределения** необходим для того, чтобы установить, отобрана ли выборка из генеральной совокупности, в которой исследуемый признак имеет нормальное распределение. Результаты по контрольной выборке приведены в таблице 1.

Таблица 1. Статистический анализ нормальности распределения значений асимметрии признаков огурца обыкновенного.

Признак	Статистические критерии				
	Колмогорова-Смирнова		Шапиро-Уилка		Лиллиефорса
	d	p	W	p	p
1	0.145	>0.20	0.954	0.133	<0.1
2	0.202	<0.1	0.905	0.004	<0.1
3	0.167	>0.2	0.917	0.010	<0.05
4	0.161	>0.2	0.914	0.007	<0.05
5	0.112	>0.2	0.975	0.546	>0.2
S	0.107	>0.2	0.963	0.249	>0.2

Примечание: 1 – ширина половины листа; 2 – длина второй жилки до разветвления; 3 – длина первой жилки до разветвления; 4 – расстояние между первой и второй жилками в месте разветвления; 5 – расстояние между концами первой и второй жилок; S – площадь половинки листа.

Как видно, только «длина второй жилки до разветвления» по всем трём критериям соответствует нормальному распределению. Распределение остальных признаков достоверно не соответствуют нормальному, что, вероятно, связано с малой выборкой.

2. *Определение направленность асимметрии* с помощью критерия Уилкоксона приведено в таблице 2.

Таблица 2. Статистический анализ направленности асимметрии признаков огурца обыкновенного (критерий Уилкоксона).

Признак	Объём выборки	Статистические показатели		
		T	z	p
1	31	232.0	0.314	0.754
2	26	139.5	0.914	0.361
3	28	176.5	0.603	0.546
4	32	216.5	0.888	0.374
5	35	299.5	0.254	0.800
S	37	321.0	0.460	0.645

Примечание: 1 – ширина половины листа; 2 – длина второй жилки до разветвления; 3 – длина первой жилки до разветвления; 4 – расстояние между первой и второй жилками в месте разветвления; 5 – расстояние между концами первой и второй жилок; S – площадь половинки листа.

Результаты анализа показали, что не установлено статистически значимых ( $p < 0.05$ ) различий по величине признаков с левой и правой стороны листа. Соответственно, имеет место флуктуация признаков вокруг нулевого среднего, что соответствует критерию ФА.

3. *Тест на отличие ФА от асимметрии*. Антисимметрия проявляется в виде отрицательного эксцесса распределения между сторонами. Данный тест весьма чувствителен к малому размеру выборки и обладает малой мощностью, поэтому используется сопоставление с критическими значениями эксцесса. Из табл. 3 видно, что антисимметрия у анализируемых признаков отсутствует.

Таблица 3. Статистический анализ эмпирических ( $k$ ) и критических ( $k_{crit}$ ) значений эксцесса признаков огурца обыкновенного.

Признак	Объём выборки	Статистические показатели	
		k	$k_{crit}$
1	37	0.716	2.030
2	37	3.763	2.030
3	37	2.269	2.030
4	37	2.306	2.030
5	37	0.302	2.030
S	37	0.098	2.030

Примечание: 1 – ширина половины листа; 2 – длина второй жилки до разветвления; 3 – длина первой жилки до разветвления; 4 – расстояние между первой и второй жилками в месте разветвления; 5 – расстояние между концами первой и второй жилок; S – площадь половинки листа.

Положительный эксцесс является нормой и указывает на генотипическую гетерогенность организмов в выборке по стабильности развития [11, 12].

### **Влияние облучения**

Проведено сравнение значений ФА, рассчитанных по классическим пяти промерам и площади половины листовой пластины. Из рис. 2 видно, что как ФА по пяти признакам, так и ФА по площади половины листовой пластины, имеют сходные тенденции к увеличению значений по мере уменьшения расстояния от источника облучения, причем для ФА по площади эта тенденция более чётко выражена. Вероятно, это связано с тем, что при определении площади половины листовой пластины с помощью компьютера минимизируются ошибки, связанные с человеческим фактором.

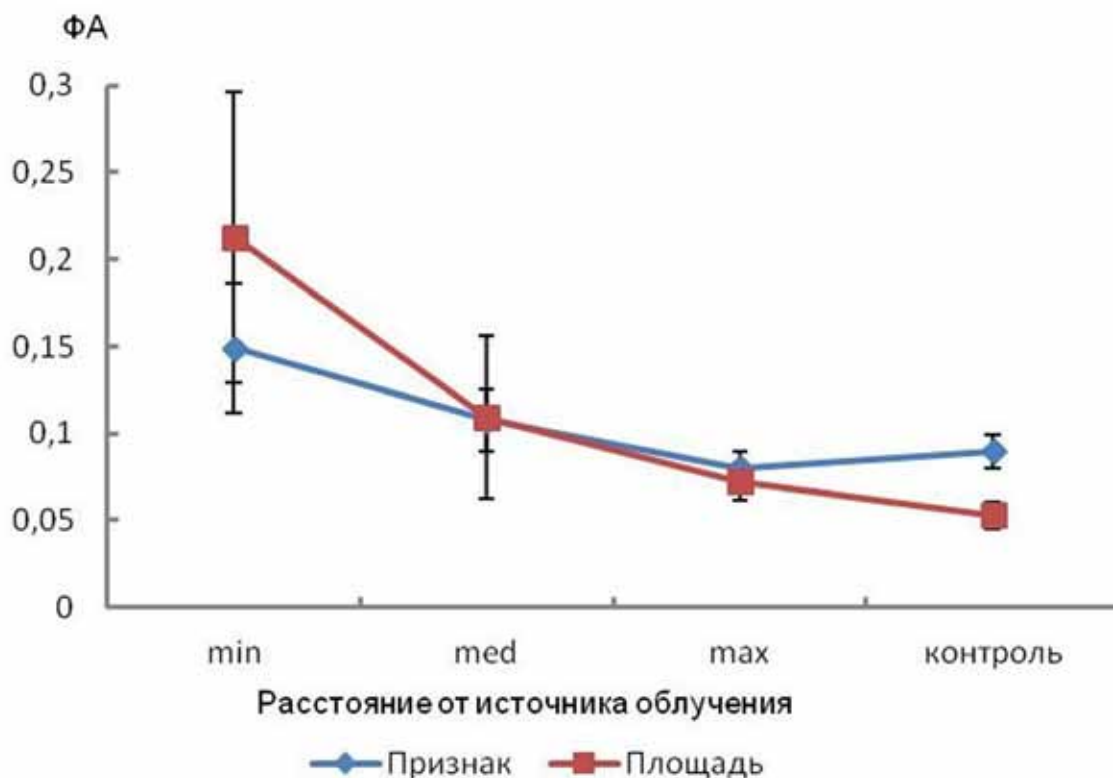


Рис. 2. Зависимость ФА по пяти мерным признакам и площади листовых пластин огурца обыкновенного от расстояния до источника облучения.

Проанализирована зависимость длины корня проростков и количества боковых ответвлений у огурца обыкновенного от расстояния до источника облучения. На рис. 3 видно, что чем ближе к источнику облучения находилась чашка Петри с семенами, тем короче были корни у проростков и меньше количество боковых корней. Фотографии проростков представлены на рис. 4. Результаты хорошо согласуются с литературными данными [4].

Корреляционный анализ показал, что значения ФА площади листовой пластины достоверно имеют отрицательную связь с длиной корня проростка ( $r = -0.97$ ,  $p < 0.01$ ) и количеством боковых корней ( $r = -0.87$ ,  $p < 0.05$ ).

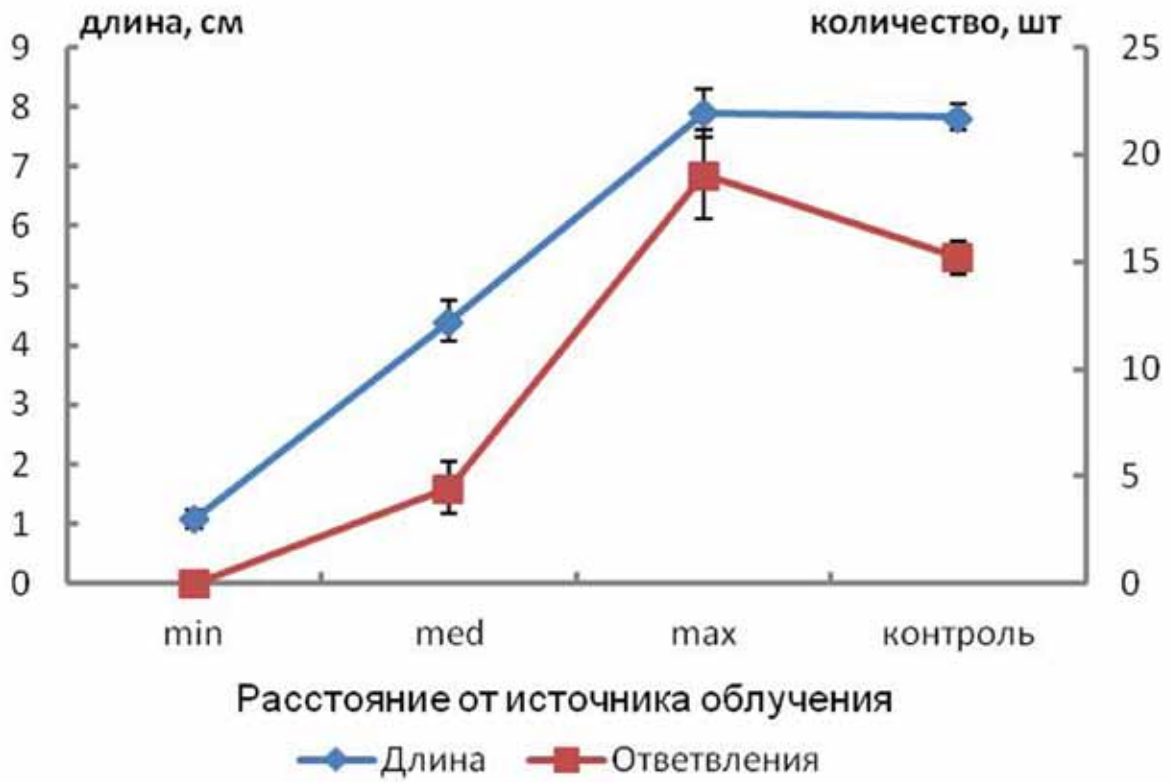


Рис. 3. Зависимость длины корня проростков и количества боковых ответвлений у огурца обыкновенного от расстояния до источника облучения.

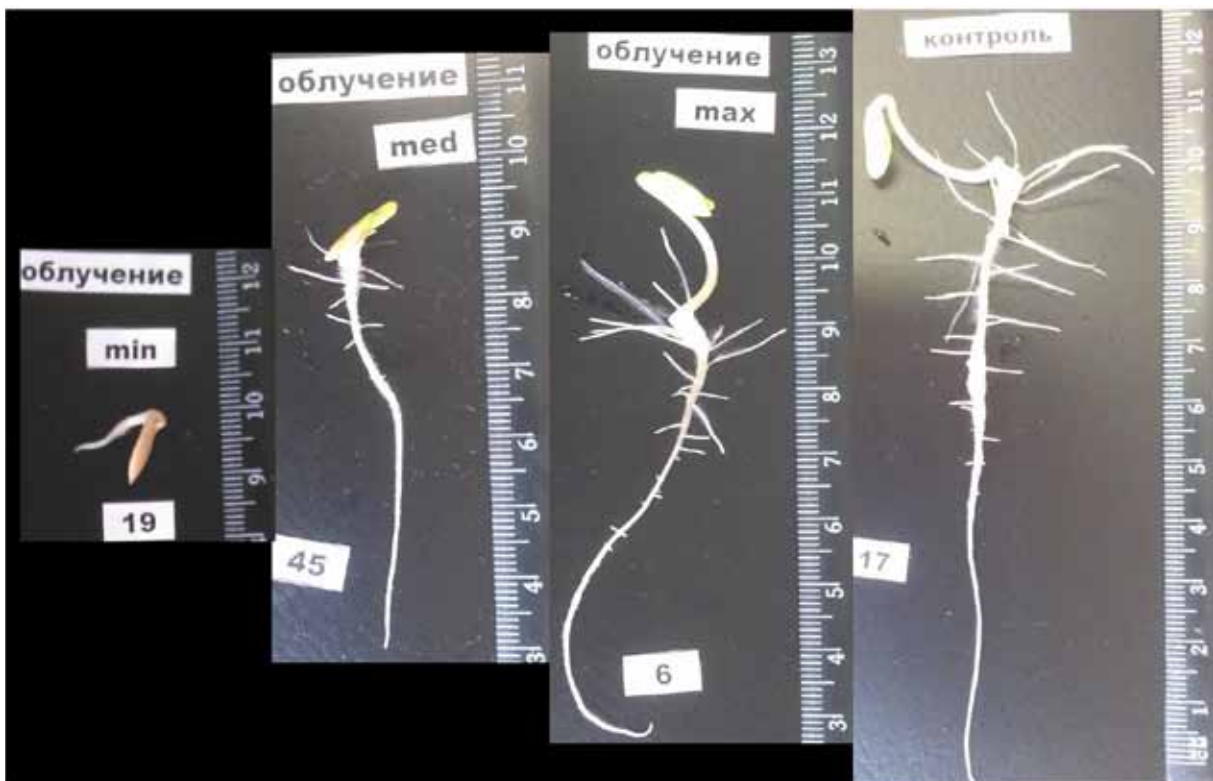


Рис. 4. Проростки огурца обыкновенного, располагавшиеся на разном расстоянии до источника облучения.

Полученный результат связан с общими механизмами воздействий ионизирующего облучения на развития корня и листа. В тканях клетки находятся на разных стадиях митоза (деления клеток), а часть клеток ещё не вступила в стадию митоза. В момент облучения происходит срабатывание защитного механизма, так называемый радиационный блок митозов. Следовательно, после облучения количество митозов уменьшается, а степень радиационного блока митозов зависит от дозы облучения. Через некоторое время радиационный блок снимается и все клетки (делившиеся и не делившиеся на момент облучения) начинают делиться одновременно, возникает компенсаторная волна митозов [6].

Цитостатический эффект ионизирующего облучения, который мы наблюдаем в корне огурца, является проявлением радиационного блока. Увеличение значений ФА по мере приближения к источнику облучения, следовательно, и по мере увеличения дозы, является проявлением нестабильности развития вследствие нарушений, возникших в делящихся клетках на момент облучения, и действия компенсаторной волны, которая не вписывается в сценарий стабильного развития.

### **Заключение**

В целом, следует отметить, что показатели ФА являются довольно чувствительным биомаркером радиационного облучения при минимизации участия других факторов. Такая минимизация воздействия возможна только в лабораторных условиях. Однако, определение ФА на растениях, выращенных в лаборатории, довольно трудозатратный процесс, не позволяющий в силу технических возможностей получить большую выборку. Более оправданным для оценки влияния ионизирующего облучения является использование счётных (количество боковых корней) и мерных (длина осевого корня) признаков корней проростков огурца обыкновенного.

Выражаем благодарность зав. региональной лаборатории радиационного контроля Института химии и технологии редких элементов и минерального сырья им. И.В. Тананаева КНЦ РАН к.т.н. Н.А. Мельник за организацию облучения исследованных образцов.

### **Список литературы**

1. Галашвили Д.Б., Якимов В.И., Логинов В.В., Епланова Г.В. Статистический анализ флуктуирующей асимметрии билатеральных признаков разноцветной ящурки *Eremias arguta* // Актуальные проблемы герпетологии и токсикологии.: Вып. 7. Тольятти, 2004. С. 45-49.
2. Захаров В.М. Асимметрия животных. М.: Наука, 1987. 216 с.
3. Захаров В.М., Баранов А.С., Борисов В.И. и др. Здоровье среды: методика оценки. М.: Центр экологической политики России, 2000. 68 с.

4. Иванов В.Б., Быстрова Е.И., Дубровский И.Г. Проростки огурца как тест-объект для обнаружения эффективных цитостатиков // Физиология растений, 1986. Т. 33. С. 195-199.
5. Марченко С.И. Методика определения величины асимметрии площадей половинок листьев с использованием компьютерных технологий // Лес-2006: VII межд. научно-тех. конф. Йошкар-Ола, 2006. С. 9-13.
6. Ярмоненко С.П. Радиобиология человека и животных. М.: Высшая школа, 1977. 368 с.
7. Hoffmann A.A., Parsons P.A. Evolutionary genetics and environmental stress. Oxford: University Press, 1991. 284 p.
8. Leary R.F., Allendorf F.W. Fluctuating asymmetry as an indicator of stress: Implication for conservation biology // Trends Ecol. Evol. 1989. V. 4. P. 214-217.
9. Palmer A.R., Strobeck C. Fluctuating asymmetry: measurement, analysis, patterns // Ann. Rev. Syst. 1986. V. 17. P. 391-421.
10. Palmer A.R., Strobeck C. Fluctuating asymmetry analysis revisited // Development: causes and consequences. New York: Oxford University Press, 2003.
11. Van Dongen S. How repeatable is the estimation of development stability by fluctuating asymmetry? // Proc. R. Soc. Lond, 1998. V. 265. P. 1423-1427.
12. Whitlock M. The repeatability of fluctuating asymmetry: a revision and extension // Proc. R. Soc. Lond, 1998. V. 265. P. 1429-1431.



# **Фоторепортаж**



















*Труды IX Всероссийской научной школы  
“Математические исследования в естественных науках”  
Апатиты, 10-11 октября 2013 г.*

*Отпечатано в ЗАО “К С М”*

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

*Тираж 100 экз.*

