

*Труды XII Всероссийской (с международным участием)
научной школы «Математические исследования
в естественных науках», посвящённой
100-летию со дня рождения
д.г.-м.н. А.Б. Вистелиуса*

Апатиты, 26-27 октября 2015

*Геологический институт КНЦ РАН
Российское минералогическое общество
Кольское отделение и Комиссия по истории*

*Труды XII Всероссийской
(с международным участием)
научной школы
“Математические исследования
в естественных науках”,
посвящённой 100-летию со дня рождения
д.г.-м.н. А.Б. Вистелиуса*



Апатиты, 26-27 октября 2015 г.

УДК 548.12 + 549.21
ISSN 2074-2487

Математические исследования в естественных науках. Труды XII Всероссийской (с международным участием) научной школы, посвящённой 100-летию со дня рождения д.г.-м.н. А.Б. Вистелиуса. Апатиты, Геологический институт КНЦ РАН, Кольское отделение и Комиссия по истории РМО, 26-27 октября 2015 г. / Научн. ред. Ю.Л. Войтеховский. – Апатиты: Изд-во К & М, 2015. - 220 с.

В сборнике представлены материалы XII Всероссийской (с международным участием) научной школы «Математические исследования в естественных науках», посвящённой 100-летию со дня рождения д.г.-м.н. А.Б. Вистелиуса и состоявшейся в Геологическом институте КНЦ РАН, г. Апатиты, 26-27 октября 2015 г. при поддержке Кольского отделения и Комиссии по истории Российского минералогического общества. В секциях «Математика в кристаллографии, минералогии, геологии, геофизике» и «Математика в медицине, биологии, экологии» рассмотрены способы описания и моделирования сложных природных систем. 25 статей по материалам очных и заочных докладов составили этот сборник. Издание представляет интерес для геологов широкого профиля и студентов геологических специальностей.

Научное издание рекомендовано к печати Учёным советом Геологического института КНЦ 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: Н.А. Мансурова

© Коллектив авторов, 2015

© Российское минералогическое общество, Кольское отделение и Комиссия по истории, 2015

© Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Геологический институт Кольского научного центра Российской академии наук, 2015



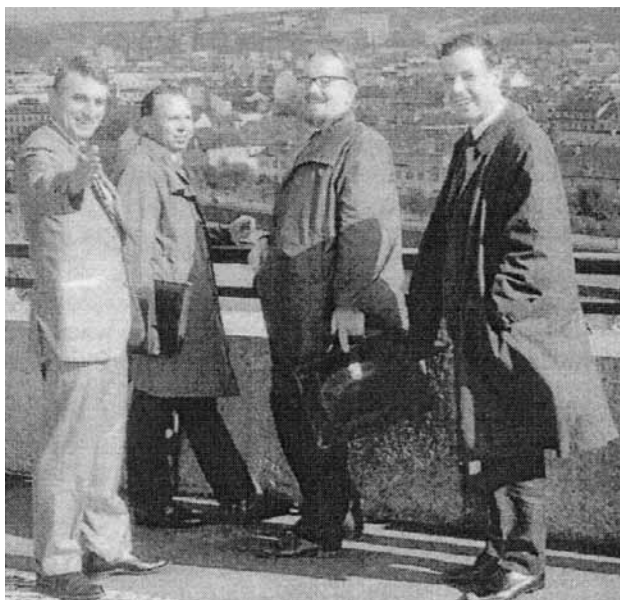
д.г.-м.н. А.Б. Вистелиус (1915-1995)

ПРЕДИСЛОВИЕ РЕДАКТОРА

С 26 по 27 октября 2015 г. в Геологическом институте КНЦ РАН при поддержке Кольского отделения и Комиссии по истории РМО прошла XII Всероссийская (с международным участием) научная школа «Математические исследования в естественных науках», посвящённая 100-летию со дня рождения д.г.-м.н. А.Б. Вистелиуса, одного из основателей и 1-го президента Международной ассоциации математической геологии (IAMG). В течение двух дней заслушаны 12 пленарных и секционных докладов о математических исследованиях в кристаллографии, минералогии, геологии, геофизике, медицине, биологии и экологии. К заочному участию приняты 13 докладов. Вместе они составили настоящий сборник. Среди авторов статей – сотрудники академических институтов, университетов и производственных организаций из Апатитов, Владивостока, Владимира, Москвы, Мурманска, Омска и Томска. Международное участие обеспечили коллеги из Израиля и Украины. Таким образом, статус конференции соответствует заявленному.



East (Vistelius on left) meets West (author on right) on Calton Hill in Edinburgh, Scotland in 1967 at the International Sedimentological Congress.

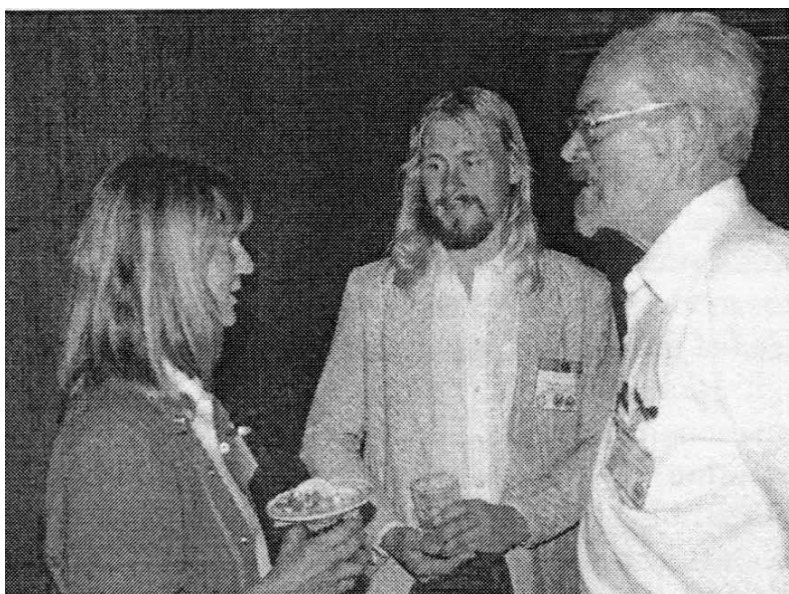


Prague, Czechoslovakia prior to start of IGC in 1968. From left to right: John Harbaugh (USA), B. Soukup (Czechoslovakia), Vistelius (USSR), and Frits Agterberg (Canada).

Что касается биографии д.г.-м.н. А.Б. Вистелиуса, отсылаю читателей к статье Д. Мерриاما [Merriam D.F. Andrey Borisovich Vistelius: a dominant figure in 20th century mathematical geology // Natural Resources Research. 2001. V. 10. N 4. P. 297-304; см. фото], 3-го президента IAMG. Его мнение особенно интересно, поскольку сталкивает американско-европейский и российский подходы к математизации геологических объектов и процессов. Главным выразителем российского математического менталитета в геологии до конца жизни был именно д.г.-м.н. А.Б. Вистелиус. Это дорогого стоит, поскольку



IAMG group at IGC in Moscow, USSR in 1984. From left to right: Frits Agterberg (Canada), Vistelius (USSR), Tim Whitten (USA), Nishi Nishiwaki (Japan), Dimitrii Rodionov (USSR), Andrea Fabbri (Canada), John Harbaugh (USA), author, and Vassil Vuchev (Bulgaria).



IGC in Washington, D.C. From left to right: 1992 President Prize receipant Ute Herzfeld (Germany), Helmut Mayer (Germany), and Vistelius (USSR).

отечественную математическую геологию всегда можно было уподобить не полноводному потоку, но ручейку, сочащемуся сквозь пласты всё ещё описательной геологии (физико-химическая аналитика, расчётные методы геофизики и элементарная математическая статистика – не в счёт). Обращаю внимание и на статью К.А. Пшеничного, опубликованную к юбилею

д.г.-м.н. А.Б. Вистелиуса в «Санкт-Петербургских ведомостях» 8 декабря 2015 г. Выражаю надежду, что XII школа «Математические исследования в естественных науках» достойно поддержала это научное направление.

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

Войтеховский Ю.Л.

PROFESSOR VISTELIUS

К.А. Пшеничный



Фото из семейного архива Вистелиусов.

На очередной конференции Международной ассоциации математической геологии (или, как ее называют с 2009 года, Международной ассоциации математических исследований в науках о Земле, IAMG) спрашиваю молодых ученых – европейцев, американцев, китайцев: знаете ли, кто основал вашу ассоциацию и всю вашу науку? Говорят: professor Vistelius. «А кто он, откуда?» – «Наверное, швед. Или американец». Ленинградец! Андрей Борисович Вистелиус.

Президент

Август 1968 года. Прага. XXIII Международный геологический конгресс – главное событие в жизни мировой геологической науки. Утром 21-го делегаты просыпаются от странного звука. Многие помнят войну и не верят своим ушам. Но, выйдя на улицу, ученые видят... танки.

Так закончилась «пражская весна» Александра Дубчека – на глазах мировой геологической общественности. Над советской делегацией повисло всеобщее где негласное, а где и внятно произнесенное: «Оккупанты!». Хотя при чем тут геологи, которые если и бывали в Чехословакии, то либо как освободители от фашизма, либо как наставники, помогая местным коллегам воссоздавать национальную геологию после войны?

На следующий день, 22-го, на конгрессе создается новое объединение ученых – Международная ассоциация математической геологии, а с ней получает «права гражданства» и сама новая наука – математическая геология. Проходят выборы президента. И ученые разных стран единодушно голосуют за... ленинградского геолога Андрея Борисовича Вистелиуса! Даже если не брать в расчет пражские события: как вообще мог в 1968 году ученый из едва ли не самой закрытой страны стать настолько уважаемым в мире?!

Дворянин

Новоизбранному президенту новорожденной ассоциации было 53 года. В них уместились события такого драматизма, какой и не снился его иностранным «коллегам по цеху».

Первый вызов эпохе он бросил самим фактом своего рождения. За два года до Октябрьской революции на свет появился отпрыск одной из старейших петербургских дворянских фамилий – и до конца жизни Андрей Борисович в графе «социальное происхождение» будет писать не «служащий»,

не «из крестьян», как велел инстинкт самосохранения, а гордое «дворянин».

Он поступил в Университет. Но в 1935-м после убийства С.М. Кирова власть с новой силой принялась изгонять из города «неблагонадежных». Вистелиусы оказались в глухой деревне, потом — в виде великой милости — в Куйбышеве (Самаре), но даже там о высшем образовании можно было забыть.

И тут выходит указ Сталина: «дети за отцов не отвечают». Отец Андрея Борисовича, в прошлом крупный юрист, в письме вождю логически безупречно доказывал, что его сын, советский студент, в соответствии с указом не должен нести ответственность за непринадлежность предков к мировому пролетариату.

И — чудо: молодому Вистелиусу разрешают вернуться в Ленинград и восстановиться в Университете, который он блестяще заканчивает в 1939 году по кафедре минералогии, руководимой профессором Е.М. Курбатовым, учеником академика В.И. Вернадского. И бросается в геологическую работу — впрочем, с оговоркой: в семье он приобщился к знаниям иностранных языков, литературы, философии, основ юриспруденции — и страсти к математике. Нет, не подходил он на роль «пролетария умственного труда». Он сравнивал методы разных наук.

Война. Вистелиус без колебаний идет в военкомат, но получает категорический отказ. Очень слабое зрение. Оставалось возвращаться к исследованиям. И тушить зажигалки, возить дрова и воду. И таять от истощения.

Именно тогда, самой страшной ленинградской зимой 1941/42 гг., когда дирижировал оркестром Карл Элиасберг, Ольга Берггольц создавала стихотворный памятник войне, Д.С. Лихачев размышлял о древнерусской литературе, Андрей Вистелиус заложил основы новой науки — математической геологии. Это был вызов всей мировой геологии, незыблемой, казалось, системе рассуждений, созданной еще в XIX веке.

Через пять лет, в 1947 году, ведущий естественно-научный журнал мира Nature публикует ни много ни мало обзор работ Вистелиуса! А через 50 лет в Японии ученый поднимет бокал на всемирном конгрессе за наследие тех блокадных дней — полувековой юбилей созданной им науки.

Геолог, математик

Первые послевоенные годы ознаменовались небывалым подъемом науки. В разрушенной стране, где научные школы были выкошены и войной, и репрессиями, чудом уцелевшие на фронте, в блокаде и лагерях ученые творили чудеса. А.Б. Вистелиус занимается вопросами, имевшими как теоретический интерес, так и прямое отношение к восстановлению страны: изучает т. н. нефтематеринские породы Поволжья, Азербайджана, Туркмении. Его поддерживают ведущие умы как геологии — В.И. Вернадский, Д.С. Коржинский, Д.С. Белянкин, так и математики — А.Н. Колмогоров, Ю.В. Линник.

В 1948-м защищает докторскую – в возрасте 33 лет. Но в том же году знаменитая сессия Всесоюзной академии сельскохозяйственных наук не только срезала под корень едва поднявшуюся после репрессий 1930-х генетику, но и дала четкий сигнал остальной советской науке (за исключением, может быть, физики, ковавшей «ядерный щит»): никакой результат не будет востребован, если достигнут свободой мысли и духа. Счетно-решающие устройства нужны, но кибернетике не быть. Новые сорта растений необходимы, но генетику уничтожить. А новые месторождения? О гонениях в геологии той поры известно меньше, но А.Б. Вистелиус знал о них не понаслышке.

Из Всесоюзного нефтяного научно-исследовательского геологоразведочного института (ВНИГРИ) его «ушли». И начался долгий, на десятки лет, путь скитаний по институтам и лабораториям. Прибываясь то к геологическому «берегу», то к математическому, А.Б. Вистелиус работал и в Лаборатории аэрометодов АН СССР, и в Ленинградском отделении Математического института АН СССР, и в Институте геологии и геохронологии докембрия АН СССР, но всегда в родном Ленинграде.

Годы полупризнания-полугонений закалили. Расширялась тематика исследований: Вистелиуса интересовали уже закономерности эволюции нефтегазоносных бассейнов, осадочных бассейнов вообще, а затем и проблемы происхождения магматических пород и рудообразования. Постепенно росло здание новой науки, рос коллектив единомышленников, геологов и математиков – Д.Н. Иванов, А.В. Фаас, М.А. Романова, Б.П. Харламов, В.А. Глебовицкий, Л.Б. Клебанов, В.Н. Деч, Л.Д. Кноринг, Б.Н. Писакин, В.Н. Зинченко, С.Р. Котов. Идеи оттачивались в диспутах с пошедшими своим путем учениками М.Д. Белониным (впоследствии директором ВНИГРИ), Ю.В. Подольским, с друзьями-оппонентами из Всесоюзного научно-исследовательского геологического института имени А.П. Карпинского (ВСЕГЕИ) – И.Г. Клушиным, С.И. Романовским, В.В. Грузой, И.И. Абрамовичем, Р.А. Жуковым...

Борец

А.Б. Вистелиус отличался от всех. Бескомпромиссностью, бесстрашием перед системой, перед жизнью, перед трудностями. С его зрением каждая экспедиция, или, как говорят геологи, каждое поле было подвигом. С его происхождением каждая заграничная поездка была тяжелой победой в неравном бою. В 1980 году выходит монография Вистелиуса «Основы математической геологии» – спустя 12 лет ее английский перевод издает одно из ведущих академических издательств мира «Клювер».

Андрея Борисовича интересует уже не только развитие собственной школы – он мыслит категориями мировой науки, борется за качество математической геологии вне национальных границ. Он выступает против бездумного применения в геологии «всесильных» программных средств – против того, что восторжествовало сейчас даже на бытовом уровне.

Распад СССР, развал отечественной геологической школы оказались так же бессильны перед волей Вистелиуса, как и советский строй. В эпоху разрушения он умудрялся создавать. В 1991-м при поддержке академика Н.П. Лаверова он наконец возводит свой научный «дом» – Институт математической геологии (ИМАГ). И целых четыре года – последние годы жизни – великий ученый имел возможность работать со своим коллективом в своем институте. Работать так, как хотел и считал нужным.

В 1995 году Андрея Борисовича Вистелиуса не стало. ИМАГ существовал еще 10 лет под руководством В.Н. Деча. Институт начал ряд новых исследований, расширял международные связи. Но эпоха разрушения взяла свое. ИМАГ теперь существует только на бумаге. На бумаге осталось и решение ученого совета СПбГУ, принятое незадолго до смерти А.Б. Вистелиуса, о создании на геологическом факультете кафедры математической геологии.

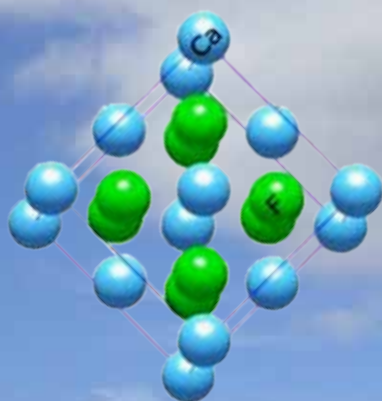
Ученики Вистелиуса продолжают исследования в разных организациях как нашего города, так и за рубежом – старшие ученики А.Б. Вистелиуса воспитали смену молодых геологов, глядящих на мир «математическим взглядом». Сегодня это поколение исследователей разрабатывает новую концепцию геологии на основе искусственного интеллекта. И опять «необычных геологов» из Петербурга активно публикуют на Западе и с большим трудом понимают дома.

А тем временем иностранные друзья А.Б. Вистелиуса, основавшие с ним новую науку, те ученые, без чьих разработок сейчас не обходится оценка ни одного месторождения, – Стивен Хенли из Великобритании, Дэнни Криге из Южной Африки, Дьердь Бардоши из Венгрии – предлагают создать международный центр фундаментальных исследований по математической геологии. В нашем городе. Они привыкли, что паруса их науки десятилетиями надувал свежий ветер из Ленинграда – Петербурга.

Кстати

От редакции добавим: дело А.Б. Вистелиуса продолжает и сам автор этой публикации – геолог К.А. Пшеничный. Он руководит исследовательской группой «Геогнозис» Университета ИТМО. «Символично, что как Вистелиуса в свое время принял Математический институт имени Стеклова, где он, геолог, плодотворно трудился несколько лет, – так и нас сейчас привлекает отнюдь не геологическая организация – Университет ИТМО, где мы наконец смогли развернуть наши исследования и свободно приглашать иностранных коллег», – говорит Пшеничный. На недавнем семинаре в ИТМО российские и иностранные геологи и математики обсуждали вопросы, находящиеся на стыке инженерии знаний и наук о Земле, а также геологические и геофизические проблемы.

Источник: газета «Санкт-Петербургские ведомости». 08.12.2015



**МАТЕМАТИЧЕСКИЕ ИССЛЕДОВАНИЯ В
КРИСТАЛЛОГРАФИИ, МИНЕРАЛОГИИ,
ГЕОЛОГИИ, ГЕОФИЗИКЕ**

К МАТЕМАТИЧЕСКИМ ОСНОВАНИЯМ ПЕТРОГРАФИИ

Войтеховский Ю.Л.

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

В концептуальном понимании своих объектов петрография отстала от кристаллографии и минералогии на столетие. Причина видится в описательном характере этой науки: сотни горных пород, структур и текстур перечислены в Петрографических словарях, и никто не знает, сколько ещё? Исторически петрография слишком быстро перешла к петрологии для изучения генезиса горных пород физико-химическими методами. Прогресс видится в математической теории горной породы через строгое и ясное определение её структуры. Лишь после этого следует создавать увязанные классификацию, номенклатуру и теорию преобразований.

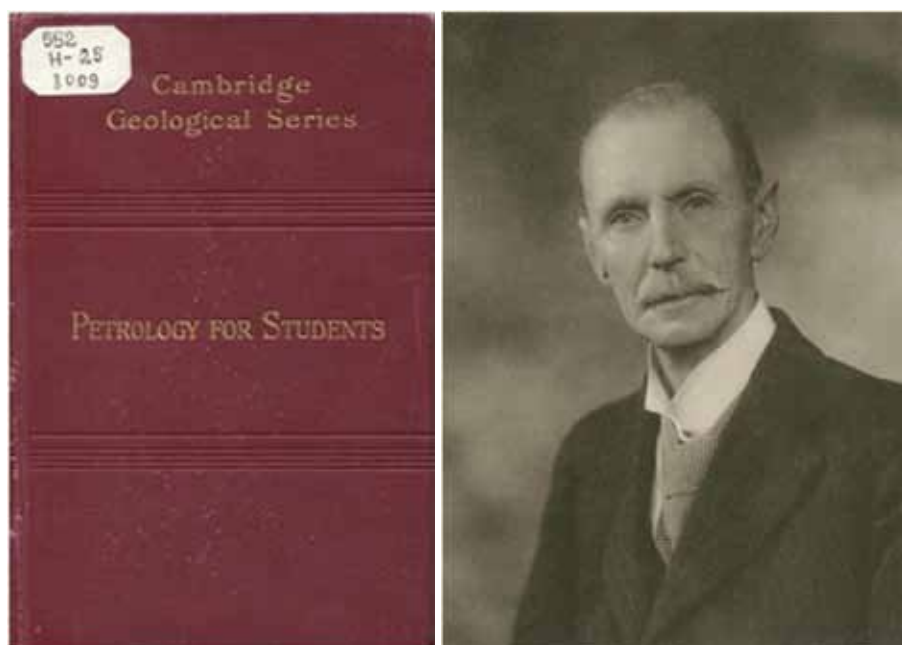
Petrography is a century behind of crystallography and mineralogy in conceptual understanding of its objects. The reason seems to be a descriptive character of this science: some hundreds of rocks, structures and textures are enumerated in the Petrographic glossaries and no one knows how many else? Historically, petrography turned too quickly into petrology to study the genesis of rocks in terms of physics and chemistry. The progress seems to be possible in a mathematical concept of a rock based on the strict and clear definition of its structure. Afterwards, the tied up classification, nomenclature and transformation theory should be created.

Введение

В кембриджском учебнике петрологии проф. А. Харкера в разделе «Классификация и номенклатура горных пород» читаем: *«Петрология до сих пор не выработала никакой философской классификации горных пород. Далее, легко видеть, что не может быть создана никакая классификация, которая обладала бы определённой и точностью, найденными в некоторых других областях науки. Математически точные законы химии и физики, которые придают индивидуальность минеральным видам, не помогают нам в работе со сложными минеральными агрегатами, и какой-то фундаментальный принцип, наподобие лежащего в основании классификации органического мира, ещё должен быть найден в петрологии. Горные породы различных типов часто связаны непрерывными переходами, так что никакая искусственная классификация с резкими разделительными границами не может истинно представлять факты природы. На сегодня, следовательно, наилучшей систематикой является та, которая объединяет, насколько это возможно ради удобства описания, горные породы с общими свойствами, в первую очередь имея в виду те свойства, которые наиболее прямо зависят от важных генетических условий. Используемая ниже систематика должна рассматриваться как одно из соглашений, а не как*

принцип. В идеальной системе номенклатура должна сочетаться с классификацией. Конечно, сегодня это в петрологии невозможно. Более того, большая путаница возникла в номенклатуре горных пород ввиду быстрого развития описательной петрографии. Многие всё ещё употребляемые названия старше современных методов исследования: они были даны тогда, когда применялись тривиальные способы распознавания... [15, с. 20, пер. авт.]». А. Харкер различал плутонические, гипабиссальные, вулканические, осадочные и метаморфические (разных типов метаморфизма) горные породы с их дальнейшей классификацией по химическому и минеральному составам и структуре – примерно то же, что и сегодня изучают студенты-геологи.

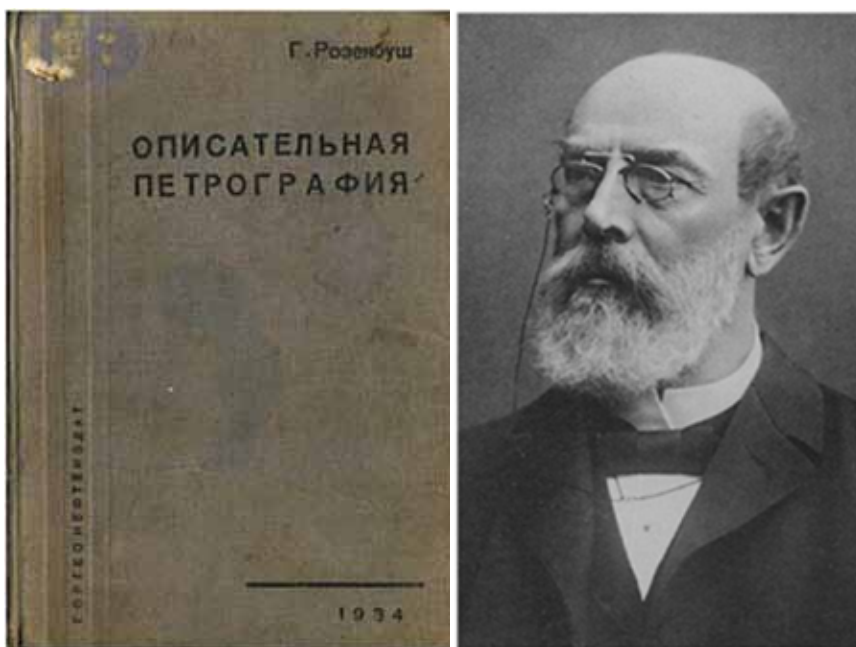
Приведенная мысль А. Харкера противоречива во многих отношениях. Например, как можно строго (математически) говорить о непрерывности



А. Харкер (1859-1939) и «Petrology for students».

переходов между петрографическими типами, если типы определены описательно (филологически)? Тем не менее, за прошедшее столетие ситуация принципиально не изменилась [7, 10-12]. Не решён ни один из дискутировавшихся классификационных вопросов. По-прежнему в центре внимания – проблема корректного определения индивида и вида горной породы. Её неудовлетворительное решение проявляется в целом ряде противоречий: разделительные границы классификаций по химическому и минеральному составам не совпадают, поля классификационных диаграмм перекрываются (неважно, химический или минеральный составы положены в их основу), пересчёт химического состава горной породы на минералы часто противоречит её реальному минеральному составу; неясно, является индивидом горной породы всё слагаемое ею геологическое тело или её минимальный объём (и как он оформлен в пространстве), представительно передающий

её минеральный и химический состав; неясно, достаточно ли использовать в химической классификации лишь главные породообразующие элементы (ведь стало нормой использовать малые элементы – напр., TR – как индикаторы условий и механизмов породообразования); неясно, достаточно ли использовать в минералогической классификации горных пород лишь породообразующие минералы (ведь изучение акцессориев – напр., циркона – даёт много важной информации об условиях и механизмах их образования); строго не определены понятия структуры и текстуры, поэтому неясно, фундаментально ли различие между ними и конечно ли их число (в «Петрографических словарях» их уже несколько сотен [9, 13]), по той же причине их значение в классификации и номенклатуре горных пород третьестепенно (после химического и минерального составов)...



Г. Розенбуш (1836-1914) и «Описательная петрография».

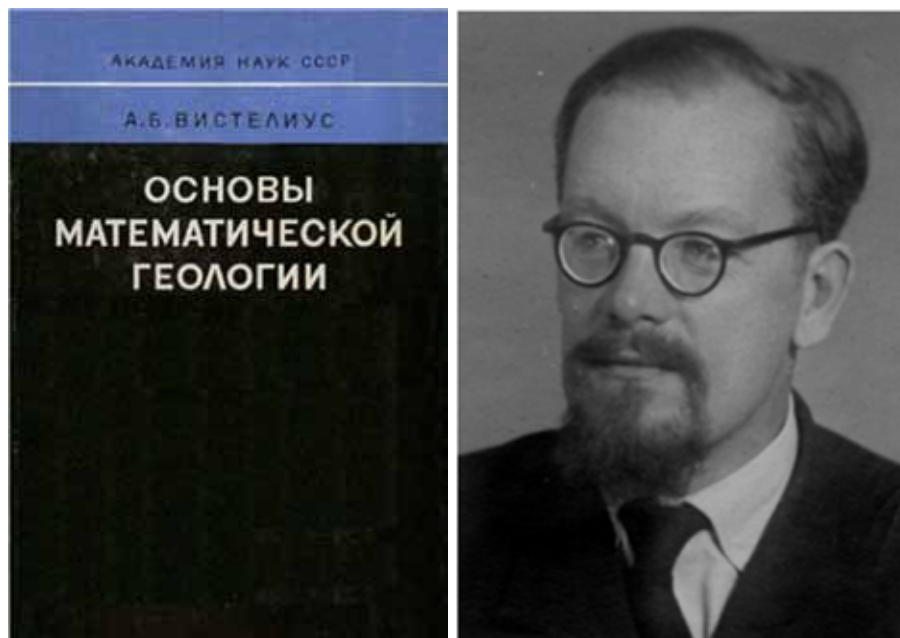
Названные противоречия носят системный характер и не устранимы косметическими средствами. Эклектичность современных классификаций и номенклатуры заложена на начальном этапе становления петрографии в попытке использовать всю доступную информацию для быстрой реконструкции условий и механизмов образования горных пород. Именно этим объясняется то, что в классификации петрографических структур возобладала идеология идиоморфизма-ксеноморфизма, пригодная для изучения условий и механизмов образования конкретных горных пород, но непригодная для построения их строгой систематики и номенклатуры. Этот подход, в значительной мере благодаря немецкому проф. Г. Розенбушу, внедрён в российскую высшую школу благодаря его переводным учебникам [14]. Прогрессивный на определённом историческом этапе, сегодня он сдерживает развитие структурной теории в петрографии. Другими словами, петрогра-

фия слишком быстро, не построив фундаментальной структурной теории горных пород, перешла к петрологии для изучения их генезиса физико-химическими методами. Проведенная последовательно и до конца, идеология идиоморфизма-ксеноморфизма устанавливает между всеми минералами горной породы отношения «раньше – позже» и полагает их фундаментальными, определяющими её качественное своеобразие. При этом анализ пространственных соотношений в горной породе минеральных зёрен («атомов») почти игнорирован. (Интересует ли нас при диагностике минерала, какой из атомов встроен в его структуру раньше, а какой позже? Вопрос объективно решается рентгеновским аппаратом. Лишь потом, с учётом нюансов состава и структуры, мы решаем вопросы генезиса минерального индивида.) Фундаментальная проблема, с которой закономерно столкнулась петрография – необходимость разработки теории петрографического пространства, в рамках которой ключевую роль играет понятие петрографической структуры, выражающей устойчивый аспект организации горной породы в качественном и количественном своеобразии её минерального состава. Систематика и номенклатура петрографических структур должна стать фундаментальным ядром систематики и номенклатуры горных пород. Нельзя считать удовлетворительной ситуацию, когда структура гранита – гранитная, у габбро – габбровая... Сравним: структура кварца – кварцевая, циркона – цирконовая, алмаза – алмазная... Что сказали бы о такой систематике кристаллографы и минералогии?

Интересный в нескольких отношениях логический ход сделал д.г.-м.н. А.Б. Вистелиус, сформулировав модель идеального гранита, кристаллизующегося из тройной эвтектики. *«Рассмотрим теперь кристаллизацию участка гомогенного расплава, близкого по составу к эвтектике и удаленного от контактов с вмещающей полостью. При этом пусть кристаллизация идет так, что выделяющиеся кристаллы не претерпевают взаимного смещения. Поскольку кристаллизация носит эвтектический характер, естественно допустить, что кристаллы всех состояний растут примерно одновременно. В этом случае соотношение «кристалл состава I и его сосед – кристалл состава J» таково, что при росте I происходит в окрестности I обеднение расплава веществом, формирующим I... Вследствие этого рядом с I скорее всего появится зерно минерала не I... В таких условиях естественно предположить возникновение простой марковской цепи, обладающей обратимостью и стационарным начальным распределением»* [3, с. 241]. Казалось бы, вполне уместно положить в основу структурного представления (отрицательные пространственные корреляции минеральных зёрен одного вида и положительные – в силу необходимости заполнения пространства – разных видов) знание о генезисе. А далее – как в кристаллографии и минералогии – строить знание о реальной горной породе как нарушении идеала. Здесь даже просматривается идея «Онтогении горных пород» по аналогии с «Он-

тогией минералов» проф. Д.П. Григорьева. Но большинство изученных А.Б. Вистелиусом гранитоидов показали отклонения от идеальной модели. Применительно к каждому случаю можно искать объяснения в генезисе. Но применительно к пониманию горной породы как таковой, определению петрографической структуры, их классификации и номенклатуры правильным представляется единственный путь: сначала – максимально продвинутая структурная теория, затем – генезис. Структурная теория – не вместо, но как надёжная основа для охвата многообразия горных пород и лишь потом – познания их генезиса и прочих аспектов.

Автор убеждён в том, что лишь концепции математики могут помочь в строгом выражении идей о том, что представляет собой горная порода (для определённости – полнокристаллическая) как объект самостоятельного уровня в иерархии природы. Математическая теория находится в начале

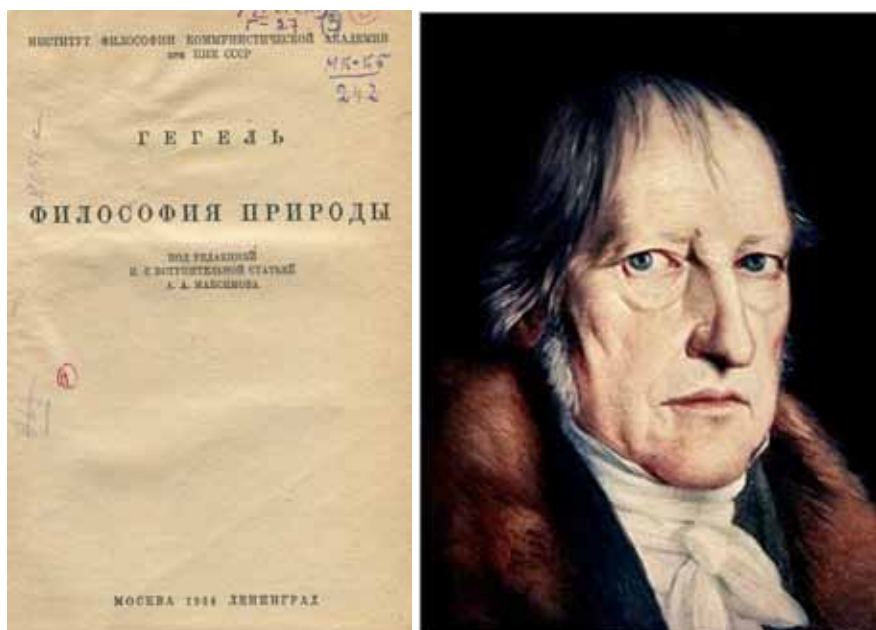


А.Б. Вистелиус (1915-1995) и «Основы математической геологии».

пути, но обещает решение обозначенных проблем. Назрела необходимость создания в Межведомственном петрографическом комитете подкомитета по развитию математических концепций и методов в петрографии.

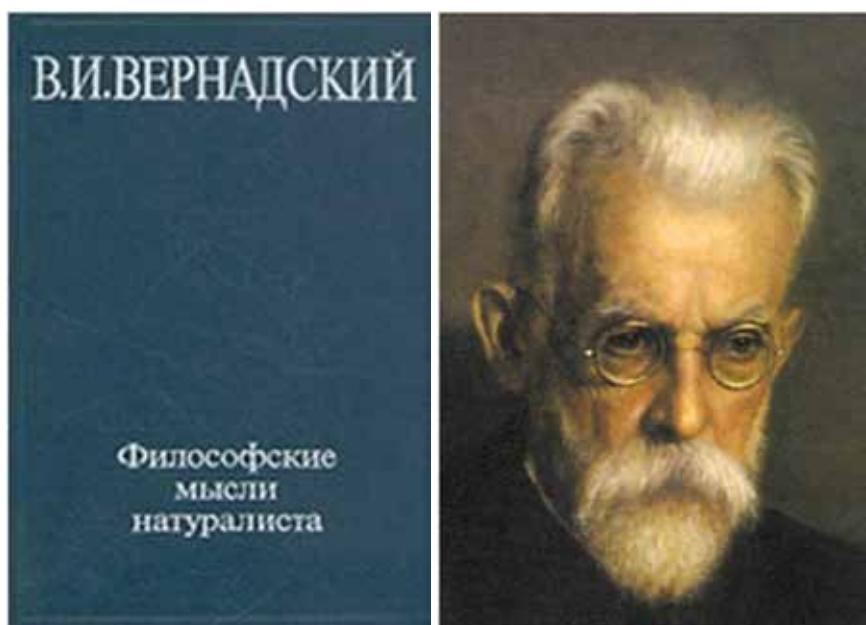
Историческое отступление

Не следует думать, что идея структурного (агенетического, догенетического) понимания (представления, описания) горной породы как таковой не возникала в умах предшественников, попутно ли с осмыслением иерархии всей неорганической природы, в целях ли специального петрографического изучения конкретных геологических объектов. Г.В.Ф. Гегель в «Философии природы», параграф «Геологическая природа» пишет: *«Гранит состоит, как известно, из кремня, кварца, абсолютной земли, упорствующей точечности; из слюды – поверхности, развивающейся в противоположность,*



Г.В.Ф. Гегель (1770-1831) и «Философия природы».

раскрывающейся точности, момента горючести, содержащего в себе зародыши всех абстракций; и наконец, из полевого шпата – намечающейся нейтральности...» В этом месте петрограф, утомлённый философскими метафорами, может оставить чтение. И зря, поскольку следующая фраза вполне вознаградит за труды: *«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 истории... Внутренняя связь существует в настоящем как рядоположность... Весь интерес заключается в том, что дано – в наличной системе различных образований»* [5]. Это прямое указание великого диалектика на приоритет структурного взгляда



В.И. Вернадский (1863-1945) и «Философские мысли натуралиста».

на природу перед генетическим (выяснение механизмов) и эволюционным (выяснение последовательности). Кто-то возразит, что Г.В.Ф. Гегель – не петрограф. Зато в методологических вопросах ему нельзя отказать в проницательности.

Акад. В.И. Вернадский в «Философских мыслях натуралиста» сформулировал идею о пространстве горной породы как специфическом состоянии пространства земной реальности [2]. Идея характеризовать пространства совместимыми с ними симметриями (здесь пригодился принцип диссимметрии П. Кюри) развита в работах проф. И.И. Шафрановского. Он рассмотрел горные породы как текстурированные среды, по А.В. Шубникову, без определения категории петрографической структуры. Тем не менее, важное понятие – пространство – прозвучало. Именно его мы используем далее.



А.Ф. Белоусов (1926-1998) и «К общей концепции горной породы».

Д.г.-м.н. А.Ф. Белоусов высказал простую и ясную мысль: *«Фактом является отсутствие в настоящее время достаточно мотивированного и конструктивного общего определения понятия горной породы... Классическая трактовка горной породы как природного минерального агрегата может считаться системно состоятельной. Но без дополнительной расшифровки она мало конструктивна»* [1]. Между прочим, она реабилитирует огромную армию (по меньшей мере отечественных) петрографов, возглавляемых Межведомственным петрографическим комитетом, ибо показывает биение мысли в основаниях дисциплины. Ведь признание непонимания и правильная формулировка проблемы – первый шаг к пониманию. По сути сказанного, «трактовка горной породы как природного минерального агрегата» не кажется нам системно состоятельной, поскольку не ясен именно системный характер горной породы. Систему делает таковой именно струк-

тура – устойчивый, инвариантный аспект организации. Но категория петрографической структуры сегодня как раз и не определена. Думающий иначе пусть ответит на вопрос: сколько существует петрографических структур и в каком смысле – подобно тому, как в кристаллографии есть 230 пространственных и 32 точечные группы симметрии. А если их бесконечно много, то и это требует логического обоснования.

Краткий исторический экскурс завершим замечательно ёмкой мыслью, в которой заложена целая программа математического описания геологических объектов: *«Сущность проблемы, по-видимому, состоит в том, чтобы обнаружить такие математические структуры и алгебры, которые были бы изоморфны геологическим системам, то есть позволяли бы их описывать на математическом языке»* [8]. Далее указаны математические понятия и методы, которые кажутся пригодными для описания природного объекта, который мы уверенно называем горной породой.

Основные математические понятия

Базируясь на естественных элементах (минеральных зёрнах) и их отношениях (видовой тождественности / нетождественности, пространственного контактирования / неконтактирования) в горной породе, её можно последовательно определить как топологическое пространство, пространство толерантности, измеримое пространство, метрическое пространство, коррелированное (частично упорядоченное) пространство. Определения даны и пояснены далее. Заметим, что элементы и отношения введены из соображений минимальности (все они есть в любой горной породе) и достаточности для развития нетривиальной теории. Читатель может начать с других элементов и отношений и построить свою теорию.

Определение 1. *Множество $\mathcal{R}$ элементов любой природы называется топологическим пространством, если оно может быть представлено как объединение некоторого семейства $\mathcal{T}$ своих подмножеств, замкнутого относительно объединения любого числа и пересечения любых двух из них. $\mathcal{T}$ называется топологией $\mathcal{R}$. Если в $\mathcal{R}$ можно выбрать семейство $\mathcal{N}$ подмножеств так, что каждое множество из $\mathcal{T}$ есть объединение некоторых множеств из $\mathcal{N}$, то $\mathcal{N}$ называется базой $\mathcal{R}$.*

Горная порода – топологическое пространство с целым спектром топологий от тривиальной (горная порода берётся целиком, без выделения частей) до дискретной (в горной породе позволительно выделять любые части). Очевидно, в дискретной топологии возможны любые мысленные процедуры: выделение минеральных парагенезисов, мономинеральных и любых других ассоциаций. Поиски фундаментального представления о принципах устройства горной породы означают не что иное, как поиски промежуточной – между указанными крайностями – топологии. Смысл этой конструкции в петрографии состоит в следующем. Петрограф мыслит горную породу, исходя из

очевидного, в буквальном смысле наблюдая её в образце и под микроскопом. Но всё увиденное (морфологические характеристики минеральных зёрен) и генетически интерпретированное (статистические распределения размеров в терминах кинетики роста, идеоморфизм–ксеноморфизм как признак последовательности кристаллизации) не привело к построению структурной теории горной породы. Категория топологического пространства ставит все дальнейшие математические процедуры на фундаментальную основу.

Определение 2. *Отношение $*$ называется рефлексивным, если $\forall x: x*x$; симметричным, если $\forall x, y: x*y \Rightarrow y*x$; транзитивным, если $\forall x, y, z: x*y, y*z \Rightarrow x*z$. Эквивалентность = рефлексивность + симметричность + транзитивность, толерантность = рефлексивность + симметричность, строгий порядок = антирефлексивность + транзитивность, нестрогий порядок = рефлексивность + транзитивность + антисимметричность, квази-порядок = рефлексивность + транзитивность. Отношение эквивалентности на множестве порождает классификацию, отношение толерантности – пространство толерантности, отношения порядка – структуры.*

Горная порода – пространство толерантности с определяющим (рефлексивным, симметричным, не транзитивным) отношением неконтактирования минеральных зерен или непустого перекрытия их агрегатов. Как интерпретировать этот результат? Если изучение природы состоит в поиске структур, подразумевающих один из названных порядков, то пространство толерантности – не структура. Этому препятствуют наличие симметричности и отсутствие транзитивности у порождающих отношений. 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 классификации разбивают целое на части, то пространства толерантности возвращают им целостность. Поэтому их иногда нестрого называют классификациями с размытыми границами. Концепция толерантности нетривиальным образом выражает идею целостности пространства горной породы. Акцентируем внимание на том, что строгое определение всего лишь двух межэлементных отношений в горной породе (контактирования / неконтактирования) позволило увидеть нетривиальный «замысел природы»: горная порода – пространство толерантности.

Определение 3. *Мерой в множестве $\mathfrak{X}$ называется вещественная, неотрицательная, монотонная, аддитивная и ограниченная функция, заданная в некоторой алгебре подмножеств множества $\mathfrak{X}$.*

Горная порода – измеримое пространство с целым спектром мер, требующих лишь её составленности из минеральных зёрен (различных) видов. Для горной породы мерами будут: число минеральных зёрен данного вида в данном объёме пространства; их объёмы; площади их сечений, измеряемые в полировке или петрографическом шлифе под микроскопом и др. Кроме

того, меры можно использовать для определения метрик, что связывает этот раздел теории со следующим.

Определение 4. Множество $\mathfrak{X}$ элементов любой природы называется метрическим пространством, если $\forall i, j$ определено вещественное число $h(i, j)$, называемое метрикой (расстоянием): (1) $h(i, j) \geq 0$, $h(i, j) = 0 \Leftrightarrow i \equiv j$, (2) $h(i, j) = h(j, i)$, (3) $\forall i, j, k \Rightarrow h(i, j) + h(j, k) \geq h(i, k)$.

Горная порода – метрическое пространство с целым спектром метрик, заданных через различные отношения минеральных зёрен и агрегатов, а также их меры. (1) $h(a, b) = \min [\text{dist}(a, b)]$, где $\text{dist}(a, b)$ – число бинарных границ на непрерывном пути из a в b в пространстве горной породы. Эта метрика (впрочем, как и все последующие) работает с минеральными зёрнами, а не точками в их границах, как это делается во всех современных автоматических анализаторах структур. Она хорошо известна в теории графов, для которых расстояние между вершинами измеряется минимальным числом соединяющих их рёбер. (2) Метрика Хаусдорфа $\sigma(A, B) = \max \{ \{ \zeta(a, B) \mid a \in A \}, \{ \zeta(b, A) \mid b \in B \} \}$, где $\zeta(a, B) = \max \{ h(a, b) \mid b \in B \}$, $\zeta(b, A) = \max \{ h(b, a) \mid a \in A \}$. Она позволяет находить расстояния между ассоциациями минеральных зёрен, не обязательно связными (т.е. агрегатами). (3) Метрика $\xi(A, B) = \mu(A \cup B) - \mu(A \cap B)$. (4) Метрика $\rho(A, B) = 1 - \mu(A \cap B) / \mu(A \cup B)$, где μ – мера. Две последние метрики позволяют включить в исследование широкий спектр характеристик, являющихся мерами минеральных зёрен. В целом корректное определение метрики позволяет создать следующий этаж теории – о коррелируемости минеральных зёрен и их различных ассоциаций в пространстве горной породы.

Определение 5. Ковариационная функция $c_{ij}(h) = E[(x - Ex)(y - Ey)]$, где E – математическое ожидание случайной величины.

Горная порода – пространственно распределённая случайная функция, значение которой в каждой точке (т.е. минеральный вид каждого зерна) вычисляемо по его окружению. По-видимому, это представление о горной породе фундаментально. Оно охватывает все её реализации и не нуждается – в отличие от кристаллографии – в противопоставлении идеального и реального. Горные породы (по крайней мере магматические) – частично упорядоченные пространства, в которых положение минеральных зёрен и их агрегатов на небольших расстояниях коррелировано: $c_{ij}(h) \neq 0$ [4, 6]. (Природа этой корреляции показана А.Б. Вистелиусом, см. выше). Но и предельному случаю некоррелируемости (т.н. случайная мозаика) соответствует $c_{ij}(h) = 0$.

Определение и классификация петрографических структур

Из системного анализа заимствуем представления об организации и структуре. Организация – совокупность всех отношений между частями целого. Структура – совокупность принципиально важных отношений, определяющих целое, без которых оно не существует. Организацию горной по-

роды мы фиксируем распределением вероятностей межзерновых контактов:

$$\sum_{i,j=1}^n p_{ij} m_i m_j = [m_1 \ m_2 \ \dots \ m_n] \begin{bmatrix} p_{11} & p_{12} & \dots & p_{1n} \\ p_{21} & p_{22} & \dots & p_{2n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ p_{n1} & p_{n2} & \dots & p_{nn} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} m_1 \\ m_2 \\ \dots \\ m_n \end{bmatrix}$$

По сути, из приведенного формализма следует, что горная порода представляет собой много-многозначное отображение определённого набора минералов на себя, управляемое оператором P_{ij} вероятностей межзерновых контактов:

$$\sum_{i,j=1}^n p_{ij} m_i m_j = \{m_i\}_1^n \xrightarrow{P_{ij}} \{m_i\}_1^n$$

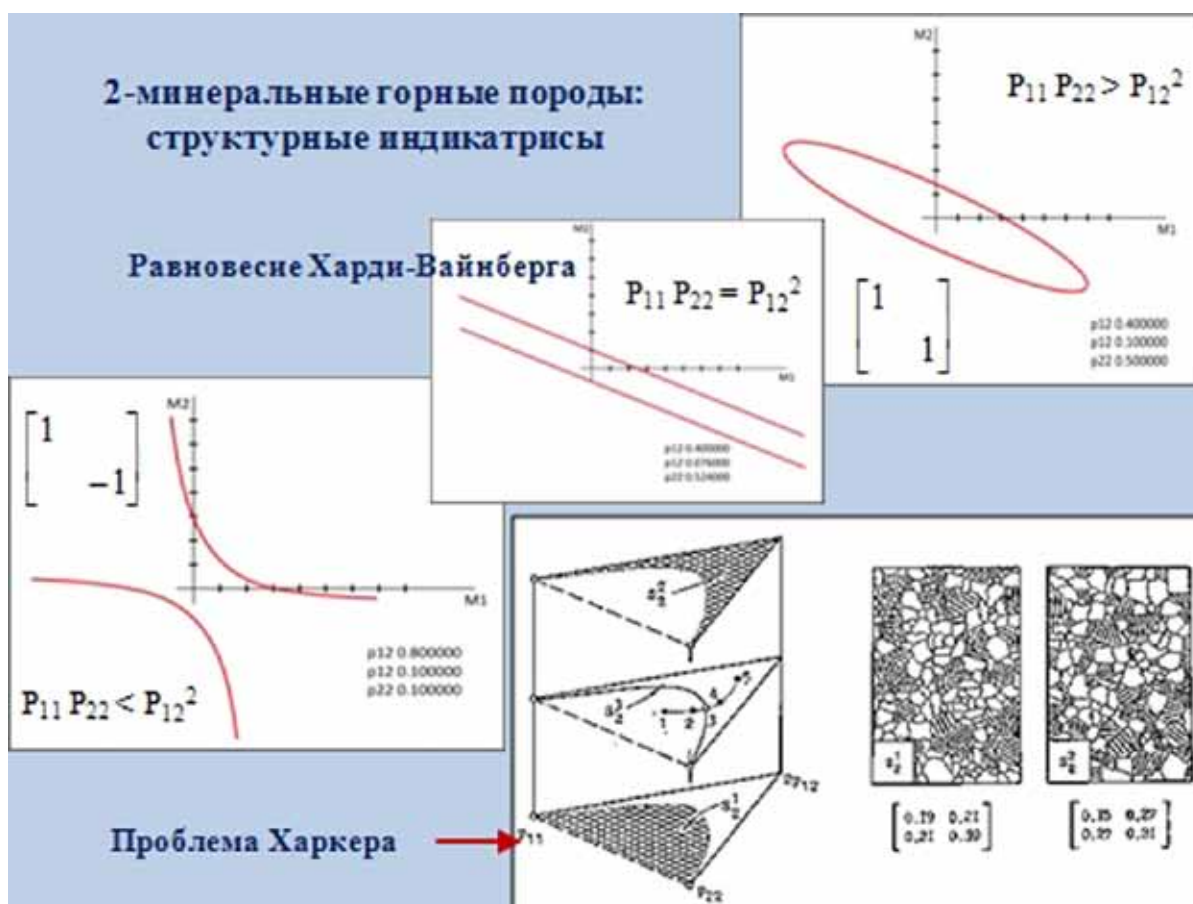
Это ответ на приведенное выше замечание д.г.-м.н. А.Ф. Белоусова: «Классическая трактовка горной породы как природного минерального агрегата ... без дополнительной расшифровки ... мало конструктивна». Оператор P_{ij} представляет собой симметрическую матрицу коэффициентов квадратичной формы от n переменных, где n – число минералов в горной породе. Соответствующую квадратичную поверхность в n -мерном пространстве назовём структурной индикатрисой. Отсюда следует сразу несколько идей. Во-первых, структуру горной породы удобно фиксировать (геометрически) индикатрисой и (алгебраически) диагональной формой матрицы вероятностей P_{ij} .

Определение 6. Петрографическая структура – инвариант горной породы, фиксируемый (геометрически) индикатрисой и (алгебраически) канонической диагональной формой матрицы вероятностей P_{ij} межзерновых контактов.

Тем самым классификация петрографических структур сведена к таковой для квадратичных форм (поверхностей). Здесь ещё раз уместно привести цитату: «Сущность проблемы, по-видимому, состоит в том, чтобы обнаружить такие математические структуры и алгебры, которые были бы изоморфны геологическим системам, то есть позволяли бы их описывать на математическом языке» [8]. Можно доказать, что в принятых определениях для n -минеральных горных пород существует ровно n структур – по числу $m = 1 \dots n$ положительных элементов в диагональной форме матрицы P_{ij} . Номенклатура структуры однозначно задаётся символом S_n^m . При этом каждая структура допускает C_n^m состояний в зависимости от расположения m положительных элементов в n позициях диагональной формы матрицы P_{ij} . Итого: $C_n^1 + \dots + C_n^n = 2^n - 1$ – именно столько структурных состояний возможны для n -минеральных горных пород. Между прочим, из этого следует,

что в характеристике петрографических структур не следует пренебрегать акцессорными минералами. С ростом n разнообразие структур растёт так же, но число структурных состояний – по степенному закону.

Для би- и триминеральных горных пород все возможные структуры найдены в норитах и габброноритах Фёдорово-Панского массива на Кольском п-ове. На рис. показан условный переход от состояния 1 (эллиптический тип) к 5 (гиперболический тип). Крайние точки соответствуют изученным норитам Фёдорово-Панского массива, Кольский п-ов. Границей между структурными типами C_2^1 и C_2^2 является условие $p_{11} p_{22} = p_{12}^2$ в точке 3 (пара параллельных прямых). В геометрических образах переход состоит в непре-



рывном повороте и удлинении эллипса, его разрыве в бесконечно удалённых точках, изгибании пары параллельных прямых в гиперболу и её непрерывной деформации. Соответствующие изменения вероятностей межзерновых контактов в петрографических шлифах неуловимы, что и сформировало мнение проф. А. Харкера (да и современных практикующих петрографов): «Не может быть создана никакая классификация, которая обладала бы определённой точностью, найденными в некоторых других областях науки ... Горные породы различных типов часто связаны непрерывными переходами, так что никакая искусственная классификация с резкими разделитель-

ными границами не может истинно представлять факты природы» [15]. Предложенный подход решает «проблему Харкера». Всякая петрографическая структура устойчива относительно некоторых непрерывных вариаций вероятностей p_{ij} межзерновых контактов. Но это не противоречит скачкообразному изменению типа структуры на (резких – других не бывает) границах классификации. Они определяются соотношениями Харди-Вайнберга, известными в биологии как условия равновесия конкурирующих аллелей.

Матричное описание преобразований

В предложенной классификации петрографических структур возможны преобразования двух типов – в пределах классов и между ними. Первые логично назвать количественными, поскольку они изменяют организацию, но сохраняют структуру, вторые – качественными, так как они меняют структуру. Преобразования первого типа хорошо известны в алгебре, называются преобразованиями подобия и легко интерпретируемы геометрически: петрографические структуры одного типа подобны в том же смысле, что и эллипсы, гиперболы (2D), эллипсоиды, гиперболоиды... (3D) – каждый в пределах своего класса. Для любых двух состояний $[P_{ij}]$ и $[*P_{ij}]$ горной породы с одной структурой найдётся связывающее их невырожденное преобразование подобия $[Q]$: $[*P_{ij}] = [Q]^T [P_{ij}] [Q]$. Преобразования подобия образуют мультипликативную группу.

Описание качественных преобразований представляет более интересную задачу. Её специфику легко пояснить геометрически в силу построенного выше изоморфизма структурных типов n -минеральных горных пород и их индикатрис – поверхностей 2-го порядка в n -мерном пространстве. Например, как преобразовать эллипс в гиперболу, эллипсоид в одно- или двуполостный гиперболоид? Казалось бы, для этого следует разорвать эллипс (эллипсоид), создав из его частей гиперболу (гиперболоиды)... Трудно представить, сколь сложные математические преобразования могут обеспечить нужный результат. Но средства алгебры позволяют решить задачу относительно просто, конечно, упаковав всю сложность в оболочку доступных формализмов. Идея состоит в том, чтобы сначала описать переходы между специальными представителями классов, характеризуемыми каноническими формами матриц $[P_{ij}]$ с ± 1 на диагоналях. Для этого использованы те же диагональные ± 1 матрицы, образующие мультипликативную группу на множестве структурных состояний (а не структур как таковых – это важно подчеркнуть). Далее, переход от канонической матрицы к любому представителю того же класса выполняется как преобразование подобия, описанное выше.

Так, на трёх структурных состояниях биминеральной горной породы (1 отвечает эллипсу, 2 – гиперболе) определена мультипликативная группа преобразований Γ_2 порядка 4 с неприводимой системой образующих порядка 2.

$$\begin{bmatrix} 1 & \\ & 1 \end{bmatrix} \quad \text{эллипс} \quad \begin{bmatrix} 1 & \\ & -1 \end{bmatrix} \quad \text{гипербола} \quad \begin{bmatrix} -1 & \\ & 1 \end{bmatrix}$$

$$\Gamma_2: \begin{matrix} 1 & m_y & m_x & -1 \\ \begin{bmatrix} 1 & \\ & 1 \end{bmatrix} & \begin{bmatrix} 1 & \\ & -1 \end{bmatrix} & \begin{bmatrix} -1 & \\ & 1 \end{bmatrix} & \begin{bmatrix} -1 & \\ & -1 \end{bmatrix} \end{matrix}$$

$$\text{Неприводимая система образующих для } \Gamma_2: \begin{matrix} m_x & m_y \\ \begin{bmatrix} -1 & \\ & 1 \end{bmatrix} & \begin{bmatrix} 1 & \\ & -1 \end{bmatrix} \end{matrix}$$

Аналогично, на семи состояниях 3-минеральной горной породы (1 отвечает эллипсоиду, 3 – 1-полостному, 3 – 2-полостному гиперboloиду) определена мультипликативная группа преобразований Γ_3 порядка 8 с неприводимой системой образующих порядка 3.

$$\Gamma_3: \begin{matrix} 1 & m_z & m_y & m_x & 2_x & 2_y & 2_z & -1 \\ \begin{bmatrix} 1 & & \\ & 1 & \\ & & 1 \end{bmatrix} & \begin{bmatrix} 1 & & \\ & 1 & -1 \\ & & -1 \end{bmatrix} & \begin{bmatrix} 1 & & \\ & -1 & \\ & & 1 \end{bmatrix} & \begin{bmatrix} -1 & & \\ & 1 & \\ & & 1 \end{bmatrix} & \begin{bmatrix} 1 & & \\ & -1 & -1 \\ & & -1 \end{bmatrix} & \begin{bmatrix} -1 & & \\ & 1 & -1 \\ & & -1 \end{bmatrix} & \begin{bmatrix} -1 & & \\ & -1 & \\ & & 1 \end{bmatrix} & \begin{bmatrix} -1 & & \\ & -1 & -1 \\ & & -1 \end{bmatrix} \end{matrix}$$

$$\text{Неприводимая система образующих для } \Gamma_3: \begin{matrix} m_x & m_y & m_z \\ \begin{bmatrix} -1 & & \\ & 1 & \\ & & 1 \end{bmatrix} & \begin{bmatrix} 1 & & \\ & -1 & \\ & & 1 \end{bmatrix} & \begin{bmatrix} 1 & & \\ & 1 & -1 \\ & & -1 \end{bmatrix} \end{matrix}$$

Почти очевидным образом результат обобщается на n -минеральные горные породы. А именно, на их $2^n - 1$ структурных состояниях определена мультипликативная группа преобразований Γ_n порядка 2^n с неприводимой системой образующих порядка n . Строение соответствующих матриц понятно из приведенных примеров. Любопытно, что все они имеют аналоги в симметрических преобразованиях на плоскости (Γ_2) и в пространстве (Γ_3) – отражениях относительно плоскостей, осей и начала координат (обозначено красным). Заметим также, что применение теории групп к описанию преобразований означает существенный шаг вперёд. Вспомним, что это ознаменовало для кристаллографии...

Заключение

Историкам и философам естественных наук ещё предстоит понять, почему до сих пор не была построена теория строения кристаллической горной породы из видимых элементов – минеральных зёрен, хотя теория строения кристалла из невидимых атомов известна уже 100 лет. Мы не знаем, какую математическую идею заложила природа в строение кристаллической горной породы, в том смысле, что в строение кристаллов она заложила идею 230 пространственных групп Фёдорова-Шёнфлиса. Автором разработано связанное представление о горной породе как топологическом, толерантном, из-

меримом, метрическом и коррелированном пространстве, не претендующее на полноту. Для одной горной породы могут быть определены различные топологии, меры и метрики. Тем самым одно пространство получает взаимно дополняющие представления. Такая относительность не противоречит тому, что одно из них может оказаться фундаментальным, характеризующим пространство горной породы наиболее рационально. Так, кристаллическое пространство строится на волновых и корпускулярных представлениях. Но лишь во втором случае выводимы фёдоровские группы, признанные его фундаментальным представлением. В конце концов, автор не настаивает на том, что предложенная теория – та самая, которая должна лечь в основание петрографии. Автор настаивает лишь на том, что такая теория должна и может быть построена. Пришло время...

Список литературы

1. Белоусов А.Ф. К общей концепции горной породы. Препринт. Н.: ИГГ СО АН СССР, 1987. 52 с.
2. Вернадский В.И. О состояниях физического пространства. Философские мысли натуралиста. М.: Наука, 1988. С. 255-274.
3. Вистелиус А.Б. Основы математической геологии (определение предмета, изложение аппарата). Л.: Наука, 1980. 389 с.
4. Войтеховский Ю.Л. 12 этюдов на темы кристалломорфологии, минералогии и петрографии. Апатиты: Изд-во «К & М», 2011. 204 с.
5. Гегель Г.В.Ф. Энциклопедия философских наук. Т. 2. Философия природы. М.-Л.: Ин-т философии Комкадемии при ЦИК СССР, 1934. 684 с.
6. Горная порода: опыты постижения. Сб. статей, посв. X Всерос. петрографическому совещанию «Петрография. XXI век». Апатиты, 28-30 июня 2005 г. Апатиты: Изд-во К & М, 2005. 167 с.
7. Классификация и номенклатура плутонических (интрузивных) горных пород. М.: Недра, 1975. 25 с.
8. Косыгин Ю.А., Соловьёв В.А. Статические, динамические и ретроспективные системы в геологических исследованиях // Изв. АН СССР. Сер. геол. 1969. № 6. С. 9-17.
9. Левинсон-Лессинг Ф.Ю., Струве Э.А. Петрографический словарь. М.: Госгеолтехиздат, 1963. 448 с.
10. Петрографический кодекс. Временный свод правил и рекомендаций. СПб.: Изд-во ВСЕГЕИ, 1992. 152 с.
11. Петрографический кодекс. Магматические и метаморфические образования. СПб.: Изд-во ВСЕГЕИ, 1995. 128 с.
12. Петрографический кодекс России. Магматические, метаморфические, метасоматические, импактные образования. СПб.: Изд-во ВСЕГЕИ, 2008. 200 с.
13. Петрографический словарь / Ред. В.П. Петров и др. М.: Недра, 1981. 496 с.
14. Розенбуш Г. Описательная петрография. Л. – М. – Грозный – Новоси�.: Горгеолнефтеиздат, 1934. 720 с.
15. Harker A. Petrology for students. Cambridge: University Press, 1908. 336 p.

КОРРЕКТИРОВКА РЕГИСТРАЦИИ МОЛНИЙ НА КОЛЬСКОМ ПОЛУОСТРОВЕ

Бурцев А.В., Невретдинов Ю.М.

Центр физико-технических проблем энергетики Севера КНЦ РАН,
Апатиты, tonyburt@rambler.ru, ymnevr@mail.ru

В статье сформулирована задача корректировки результатов регистрации грозовых разрядов, полученных с помощью грозопеленгатора Boltek StormTracker, а также предложен алгоритм решения поставленной задачи.

The adjusting problem of the lightning registration results is defined. The algorithm solving of the problem is proposed.

В 2013 г. в ЦФТПЭС КНЦ РАН начата опытная регистрация грозовой деятельности, цель которой – получение распределения плотности разрядов молний на территории Кольского п-ова и прилегающих территорий [3, 6]. В качестве измерительного устройства выбран грозопеленгатор StromTracker канадской фирмы Boltek. Устройство предназначено для обнаружения атмосферных электрических разрядов (молний) в радиусе 480 км от базовой станции. Система пеленгации состоит из компьютерной платы формата PCI, полярной антенны и программного обеспечения (ПО) NexStorm Lite фирмы Astrogenic. Опытный вариант системы установлен в лаборатории ЦФТПЭС КНЦ РАН в г. Апатиты. Такие же системы длительное время функционируют в других регионах России [4, 5] и мира [7]. Регистрация событий происходит круглосуточно в автоматическом режиме. Для преобразования [1] и обработки [2] информации разработано собственное ПО. За два года работы грозопеленгатора получены карты распределения грозовых разрядов на

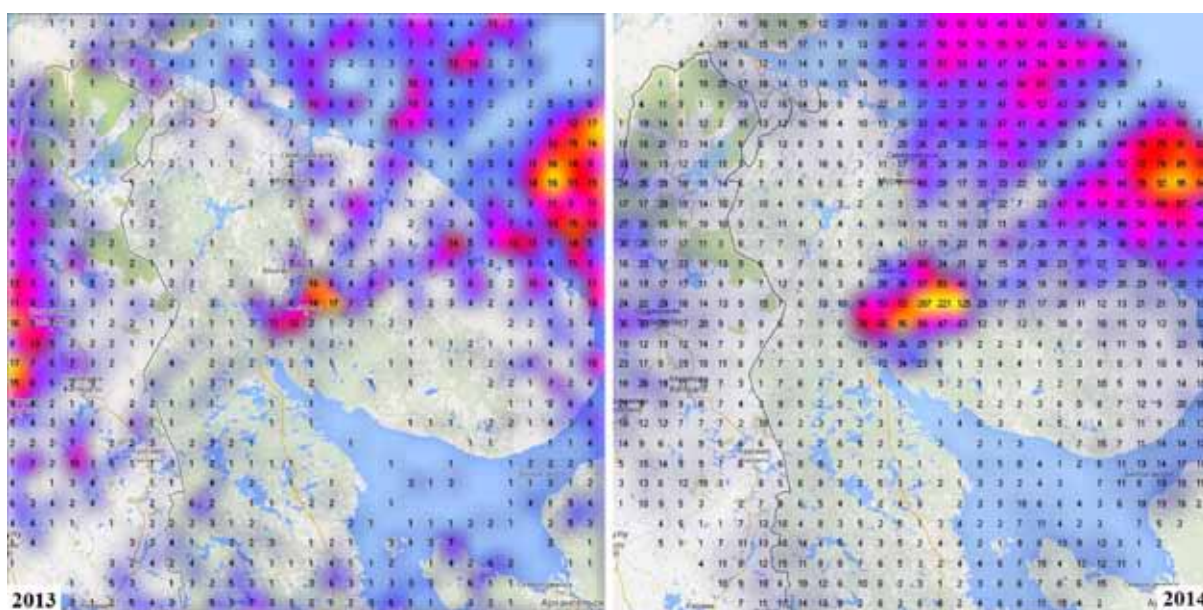


Рис. 1. Карты территориального распределения атмосферных разрядов в землю за 2013 и 2014 гг.

территории Кольского п-ова и прилежащих территорий и акватории (рис. 1). Для повышения точности регистрации планировалось установить вторую аналогичную систему на значительном удалении от первой (около 100 км) в районе г. Полярные Зори или севернее в районе г. Оленегорска. В процессе анализа регистраций 2013 и 2014 гг. выявлены неравномерности распределения грозовых разрядов, имеющих системный характер в виде участков, расположенных по диагоналям, в которых не зарегистрированы разряды (пустоты). Предположительно, это связано с особенностью приемной полярной антенны, конструкция которой экранирует указанные области. Данное обстоятельство определило задачу корректировки результатов регистрации атмосферных разрядов.

Вертикальная и горизонтальная симметричность пустот позволяет рассматривать любую четверть полученной карты (рис. 2). При детальном изучении пустых участков можно выделить несколько особенностей. Ширина указанной пустоты составляет около 7° . На границе между пустотой и областью с зарегистрированными разрядами находится область с пониженной концентрацией разрядов, ширина которой составляет 2.5° . Суммарно область в 11° является областью с нелинейным распределением. Остаточные две области по 34° в рассматриваемой четверти для упрощения будем считать областями с линейным распределением.

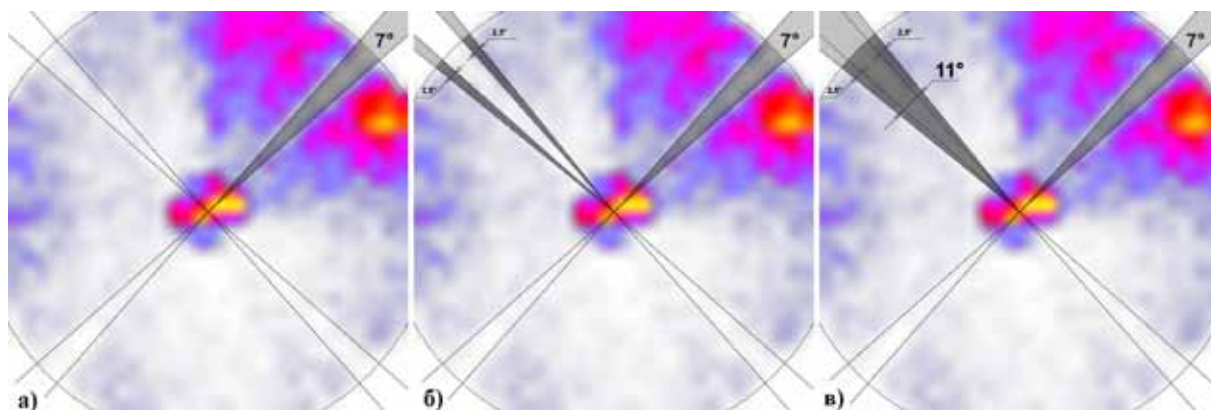


Рис. 2. Ширина областей, нуждающихся в корректировке: а) пустая область 7° ; б) области пониженной концентрации $2 \times 2,5^\circ$; в) суммарная нелинейная область 11° .

В данной ситуации для корректировки полученных регистраций установлена вторая аналогичная система регистрации атмосферных разрядов в том же месте, где и первая, но с поворотом полярной антенны на 45° относительно неё. Наложив зарегистрированные разряды с одной антенны на разряды с другой, можно получить нелинейные области первой антенны, перекрытые линейными областями второй, компенсировав тем самым пустоты на карте (рис. 3).

В линейных пересекающихся областях размером 34° результирующие значения распределения атмосферных разрядов можно получить средним арифметическим. В областях шириной 7° результирующие значения при-

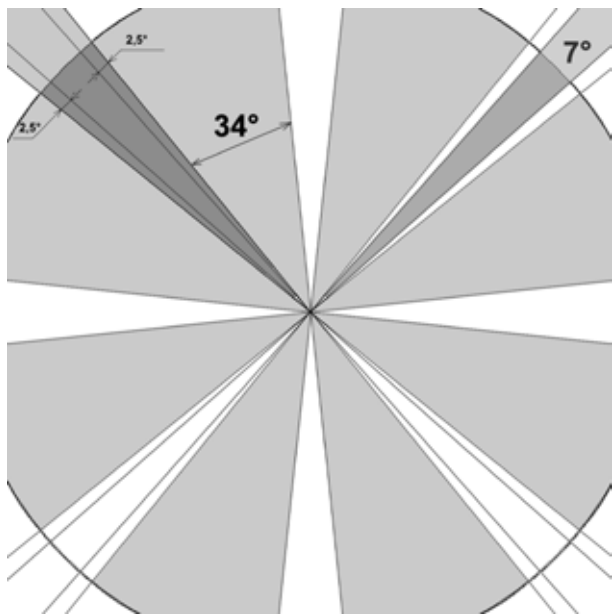


Рис. 3. Области с линейным (34° и 7°) и нелинейным распределениями (2.5°).

вмещение данных с первой антенны и развернутых данных со второй антенны на рисунке 4 г.

Таким образом, поставлена задача корректировки регистрации грозовых разрядов и предложен алгоритм её решения. Ключевым параметром при корректировке результатов является точная синхронизация по времени двух систем. Использование поставляемого в комплекте с антенной ПО не позволяет использовать синхронизацию нескольких устройств. Для решения этой задачи производитель предлагает установить GPS-синхронизатор на каждую систему, что обойдется в \$3000. Выход из ситуации — разработка собственного ПО, которое будет построено по принципу клиент-сервер. Клиентский модуль будет регистрировать грозовые разряды так же, как и серверный модуль, но информацию о времени события будет брать с сервера.

Список литературы

1. Бурцев А. В. Использование математического и логического аппарата для преобразования данных программы Astrogenic Nexstorm Lite для регистрации атмосферных электрических разрядов // Математические ис-

нимаются с той антенны, которая полностью перекрывает область. Области в 2.5° требуют уточнения, поскольку требуется сравнение областей с линейным и нелинейным распределениями. Для проверки предположения установлена вторая система с выполнением указанных условий. В качестве примера (рис. 4 а) даны результаты регистрации атмосферных разрядов, зарегистрированных во время грозы 8 июля 2015 г. с помощью первой антенны. На рисунке 4 б те же данные, полученные второй антенной. Результат поворота данных со второй антенны на 45° показан на рисунке 4 в, а со-

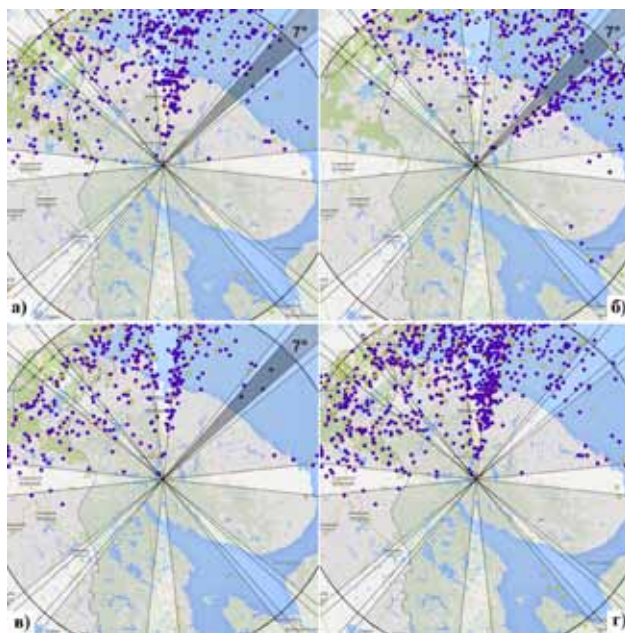


Рис. 4. Совмещение данных с двух антенн.

- следования в естественных науках. Тр. IX Всерос. научн. школы. Апатиты, 10-11 окт. 2013 г. Апатиты: Изд-во К & М, 2013. С. 113-118.
2. Бурцев А.В. Разработка программного обеспечения и получение данных по грозовой активности для сопоставления с аварийными отключениями оборудования энергосистемы Мурманской обл. // Тез. XXI Межд. конф. молодых ученых «Ломоносов 2014». М.: МГУ, 2014. С. 78-79.
 3. Бурцев А.В., Невретдинов Ю.М., Сытина А.Н. Опыт регистрации грозовой активности на территории Кольского п-ова // Вестник Кольского НЦ РАН. 2014. № 2(17). С. 126-133.
 4. Горбатенко В.П., Ершова Т.В., Константинова Д.А. Пространственное распределение плотности разрядов молнии в землю над Зап. Сибирью // Вестник ТГУ. 2009. № 329. С. 215-221.
 5. 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. Санкт-Петербург, 24-28 сент. 2012 г. СПб.: СПбГУ, 2012. С. 133-135.
 6. Burtsev A.V., Nevretdinov Y.M. Lightning discharges distribution on the Kola Peninsula in 2013 // Proc. 3rd Int. Conf. on GIS and remote sensing. Tsaghkadzor, Armenia, Nov. 17-19, 2014. Yerevan: Envir. Res. and GIS Center, 2014. P. 93-98.
 7. Davis C.J., Kin-Hing Lo. An enhancement of the ionospheric sporadic-E layer in response to negative polarity cloud-to-ground lightning // Geophys. Res. Lett. 2008. V. 35. L05815, DOI: 10.1029/2007GL031909.

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ КОМПЛЕКСА КВАНТОВО-МЕХАНИЧЕСКИХ РАСЧЕТОВ ДЛЯ РЕШЕНИЯ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫХ ЗАДАЧ КОМПЬЮТЕРНОЙ ХИМИИ

Воробьева В.И.¹, Чигиринец Е.Э.¹, Скиба М.И.², Трус И.Н.¹

¹ Политехнический институт, Киев, viktorkathebest@yandex.ru;

² Химико-технологический университет, Днепропетровск, Rita-vorobyuva@yandex.ru

На основе квантово-химических расчетов дана прогнозная оценка адсорбционной способности бензойного, коричного и сиреневого альдегидов. С помощью программы HyperChem7.00 рассчитаны электронные параметры: энергия высшей занятой вакантной орбитале (Е ВЗМО), энергия низшие вакантной молекулярной орбитали (Е НВМО), энергия щели ($\Delta\epsilon$). Установлено, что все исследуемые молекулы обладают способностью выступать в качестве донора электронов при адсорбции на поверхности железа, имеют низкое значение энергии щели и электроотрицательности, что указывает на высокую реакционную способность.

It has been established that their major components are aldehydes and terpene compounds. On the basis of quantum chemical calculations carried predictive estimate the

adsorption capacity of the major components of the extract: benzoic, cinnamic aldehyde and lavender and terpene compounds - nerol and linalool. The electronic parameters calculated include: E (HOMO), E (LUMO), energy gap (ΔE) etc.

Одним из распространённых видов коррозионного разрушения металлов является атмосферная коррозия. Широкое применение для борьбы с атмосферной коррозией находят летучие ингибиторы [1, 2]. Их эффективность в общем виде зависит от давления его насыщенного пара при температуре применения, коэффициента диффузии, минимальной защитной концентрации в воде по отношению к защищаемому металлу. В соответствии со взглядами, разделяемыми в настоящее время большинством исследователей, закономерности адсорбции ингибиторов на металлах, их влияние на кинетику частных электродных реакций и коррозионный процесс в целом, определяющие эффективность вещества, зависят от многих факторов, наиболее существенным из которых является электронное строение адсорбата и адсорбента. Поэтому развитие квантово-химических методов органической химии способствует разработке теоретических предпосылок подбора и целенаправленного синтеза эффективных ингибиторов коррозии. Все больше внимания уделяется изучению особенностей связи электронной структуры вещества с его ингибиторным действием.

В большинстве случаев первой стадией защиты ингибитором металла является его адсорбция на поверхности этого металла. Общеизвестно [3-5], что образование связи «ингибитор – металл» происходит за счет перераспределения электронов занятой и свободной орбиталей металла и вещества. При этом защитная эффективность органических соединений можно оценить по электронным характеристикам исследуемых структур (верхней занятой (ВЗМО) и нижней вакантной молекулярной орбитали (НВМО), атомных зарядов, электронных плотностей) полученных на основании квантово-химических расчетов и получивших названия индексов реакционной способности [5]. Поэтому адсорбционную способность ингибитора можно прогнозировать из оценки реакционной способности органических молекул, полученной в результате математических, квантово-химических расчетов электронной и энергетической характеристики системы. Цель работы – прогноз реакционной способности сиреневого, коричневого и бензойного альдегидов.

HyperChem – комплексный программный продукт для квантово-механического моделирования атомных структур. Он включает в себя программы, реализующие методы молекулярной механики, квантовой химии и молекулярной динамики. Силовые поля, которые могут использоваться в HyperChem – это MM+ (на базе MM2), Amber, OPLS и BIO+ (на базе CHARMM). Реализованы полуэмпирические методы: расширенный метод Хюккеля, CNDO, INDO, MINDO/3, MNDO, AM1, PM3, ZINDO/1, ZINDO/S. Представлены неэмпирические методы расчета и методы функционала плот-

ности. Данный пакет предназначен в первую очередь для решения вычислительных задач компьютерной химии и нанофизики.

Квантово-химические расчеты молекулярных диаграмм проводили по программе HyperChem Version Professional Release 6.03, полуэмпирическим методом MNDO и методом молекулярной механики MM+ при полной оптимизации геометрии молекул с использованием стандартных длин связей и углов с заданием модели *Build* в режиме *Single Point*. При расчете дипольных моментов проводилась оптимизация по геометрии с алгоритмом Polak – Ribiere. На основании расчетов электронных зарядов, расположения электронной плотности, значений волновой функции высшей занятой молекулярной орбитали (ВЗМО) и низшей свободной молекулярной орбитали устанавливали наиболее вероятные адсорбционные центры. Для исследуемых молекул после геометрической оптимизации представлены структурные формулы (рис. 1).

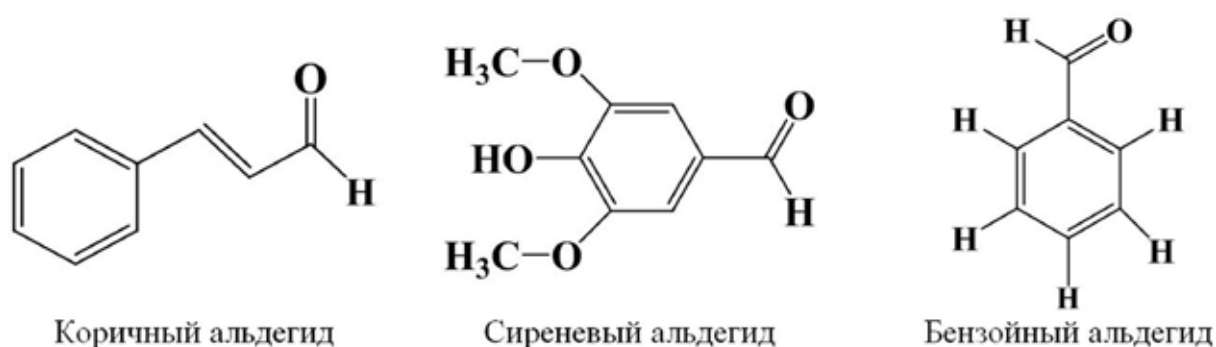


Рис. 1. Структурная формула альдегидов.

Более вероятным путем образования связи молекул с корродирующей поверхностью является связь с переносом электронной плотности на металл. На основе расчетов электронных зарядов на атомах молекул можно прогнозировать, что взаимодействие с поверхностью металла будет происходить по атомам, где сконцентрирована наибольшая электронная плотность. К тому же известно [5-8], чем более отрицательный заряд на реакционном центре, тем лучше передача электронов от донора. Поэтому связь металл – ингибитор будет тем прочнее, а степень защиты от коррозии тем больше, чем выше электронная плотность на адсорбционно активной области органической молекулы.

Значение энергии ВЗМО обычно связывают со способностью молекулы отдавать электрон (т.е. выступать в качестве донора электронов), в то время как энергия НСМО указывает на способности молекулы принимать электрон. Поскольку вероятна взаимодействие по донорно-акцепторных механизм, то, соответственно [5-8], более высокое значение энергии ВЗМО молекулы ингибитора свидетельствует о его повышенные адсорбционные свойства (за счет влияния на процесс переноса заряда через адсорбционный слой) и ингибирующее эффективность. Из анализа данных (табл. 2) видно,

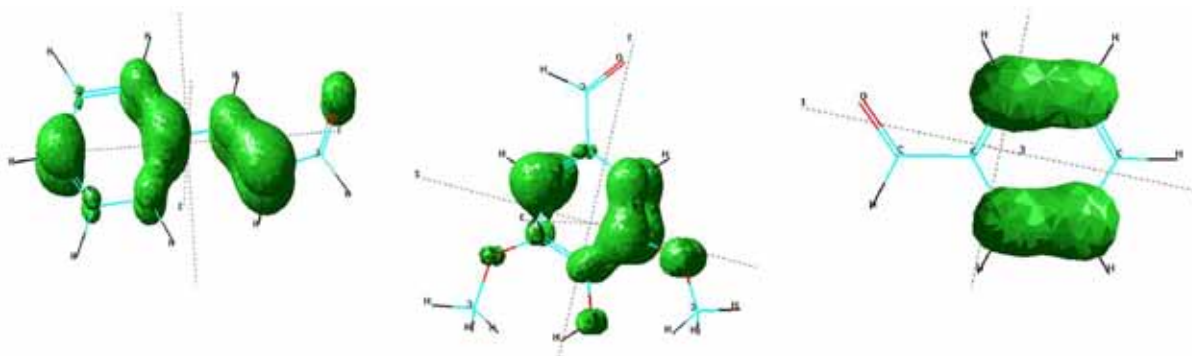


Рис. 2. Оптимизированная структура молекул ингибиторов 1-5. Плотность высшей занятой молекулярной орбитали (значение плотности 0.005).

что более высокие значения энергии ВЗМО имеют коричный, что указывает на его большую ингибирующую активность. Чем меньше значение энергии ниже свободной орбитали молекулы E (НСМО), тем больше способность молекулы принимать электрон из металла.

Согласно расчётным данным, исследуемые молекулы по способности выступать в качестве акцептора электронов из металла, можно разместить в последовательности: коричный альдегид > сиреневый альдегид > бензойный альдегид. В таблице 1 даны расчётные значения энергии щели молекул. Известно, что высокие значения $\Delta\epsilon = E(\text{ВЗМО}) - E(\text{НСМО})$ свидетельствуют об увеличении электронной стабильности и уменьшении реакционной способности. Низкие значения указывают на большую реакционную способность и высокую ингибирующую эффективность, поскольку энергия для удаления электрона с последней занятой молекулярной орбитали низка [9]. Энергия щели для исследуемых молекул увеличивается в ряду коричный альдегид < сиреневый альдегид < бензойный альдегид.

Таблица 1. Квантово-химические характеристики альдегидов.

Молекула	$E_{\text{ВЗМО}}$ (eV)	$E_{\text{НСМО}}$ (eV)	$\Delta\epsilon_{(\text{В-Н})}$ (eV)
Бензойный альдегид	-10.220	-0.560	9.660
Коричный альдегид	-9.400	-1.000	8.400
Сиреневый альдегид	-9.440	-0.686	8.754

Список литературы

1. Vorobyova V., Chygyrynets O. Evaluation of various plant extracts as vapor phase corrosion inhibitor for mild steel // British J. Sci., Education and Culture. 2014. N 2(6). P. 43-49.
2. Чигиринец Е.Э. Воробьева В.И., Бережницкая А.С. Исследование химического состава спиртового состава шрота рапса // Химия растительного сырья. 2014. № 1. С. 209-214.
3. Gökhan G. The use of quantum chemical methods in corrosion inhibitor studies // Corr. Sci. 2008. V. 50. P. 2981-2992.

4. Xiao-Ci Y., Hong Z., Ming-Dao L. *et al.* Quantum chemical study of the inhibition properties of pyridine and its derivatives at an aluminum surface // *Corr. Sci.* 2000. V. 42. P. 645-653.
5. Fang J., Li J. Quantum chemistry study on the relationship between molecular structure and corrosion inhibition efficiency of amides // *J. Mol. Structure (Theochem)*. 2002. V. 593. 179-185.
6. Gökhan G. The use of quantum chemical methods in corrosion inhibitor studies // *Corr. Sci.* 2008. V. 50. P. 2981-2992.
7. Obot I.B. Umoren molecular level understanding of the mechanism of aloes leaves extract inhibition of low carbon steel corrosion: a DFT Approach // *Int. J. Electrochem. Sci.* 2014. N 9. P. 510-522.
8. Пирсон Р. Дж. Жесткие и мягкие кислоты и основания // *Успехи химии*. 1971. Т. 40, № 7. С. 1259-1282.
9. Walters H.F. Design of corrosion inhibitors: use of the hard and soft acid-base (HSAB) theory // *J. Chem. Educ.* 1991. V. 68. N 1. P. 29-33.

ОЦЕНКА ПРОСТРАНСТВЕННОЙ НЕОДНОРОДНОСТИ КЛИМАТА НА КОЛЬСКОМ ПОЛУОСТРОВЕ

Дёмин В.И.

Полярный геофизический институт, Апатиты, demin@pgia.ru

Проведен расчет линейных трендов сезонных температур для 10 гидрометеорологических станций в разных частях Кольского п-ова и обладающих однородными климатическими рядами в 1965-2014 гг. Несмотря на различные значения коэффициентов угла наклона регрессий, при множественных попарных сравнениях ни в одной из пар и ни в одном из сезонов не обнаружено статистически значимого различия. Это говорит о единых скоростях потепления климата в регионе за последние 50 лет.

Окончание XX и начало XXI вв. ознаменовалось на Кольском п-ове значительным потеплением климата. Оно уверенно проявляется во всех районах, но учитывая большую протяженность п-ова, разную степень континентальности и многообразие рельефа, можно предположить, что оно может быть неоднородным. Так, в [1-2] отмечается, что потепление среднегодовых температур в наибольшей степени происходит в западной части области, а наименьшее – на побережье Баренцева и Белого морей. Физический смысл таких различий не очевиден. При разности скоростей повышения среднегодовых температур на СЗ области и на юге всего в $0.25^{\circ}\text{C}/10$ лет за столетие контраст между севером и югом области должен увеличиться на 2.5°C (зимой – до 3.5°C), что выглядит невероятным. Целью данной работы – оценка пространственной неоднородности современного потепления на Кольском п-ове.

Исходные данные и методы

Для анализа отобраны среднемесячные значения температуры воздуха на гидрометеорологических станциях (ГМС) Мурманской обл. из ВНИИ ГМИ-МЦД (г. Обнинск) и Университета Вост. Англии. В качестве характеристики климатических изменений за выбранный интервал времени традиционно используется коэффициент линейного тренда, определенный методом наименьших квадратов и характеризующий среднюю скорость изменения климатической переменной [3]. Рассчитанные таким образом скорости изменений сезонных температур за последние 50 лет на ряде ГМС Кольского п-ова, выраженные в °C/10 лет, даны на рис. 1. Как видно, значения заметно отличаются. Но дает ли это основание говорить о разной скорости в различных районах?

Согласно данному выше определению, скорость потепления – это коэффициент наклона b в уравнении линейной регрессии, описывающей тренд температуры: $Y = a + bX$. Но при статистических расчетах этот коэффициент определяется с некоторой ошибкой [4]. Следовательно, гипотезу о разной скорости потепления на двух сравниваемых ГМС можно принимать только после подтверждения статистической значимости разницы углов наклона

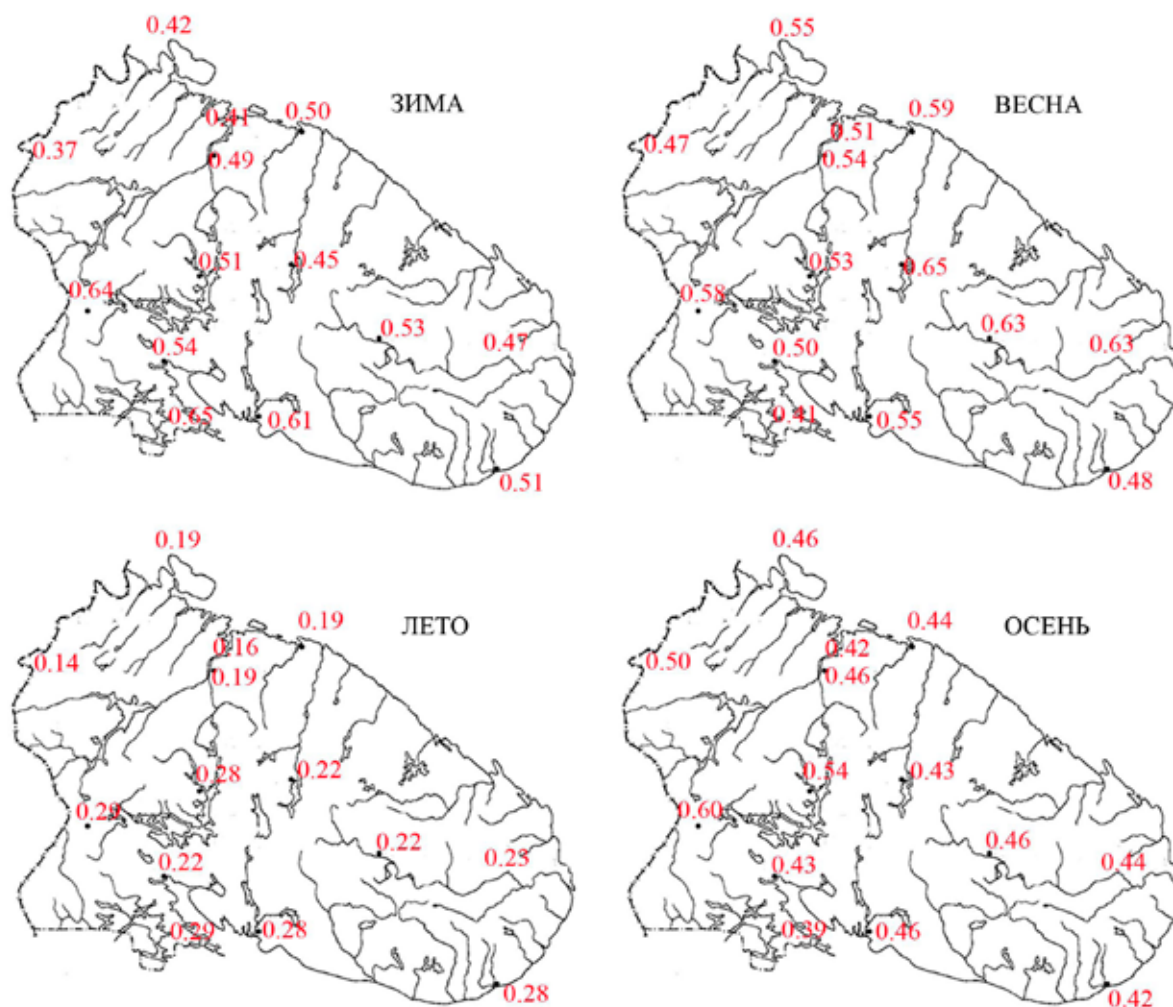


Рис. 1. Скорости сезонного потепления на Кольском п-ове в 1965-2014 гг., °C / 10 лет.

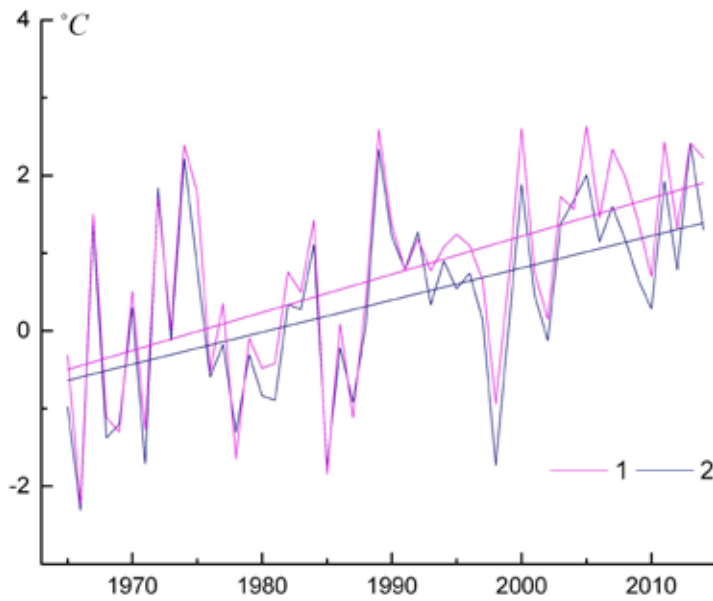


Рис. 2. Динамика среднегодовой температуры в пос. Умбе (1) и г. Мурманске (2).

соответствующих регрессий. Для примера на рис. 2 показана динамика среднегодовой температуры в г. Мурманске и пос. Умбе.

Уравнение линейной регрессии для Мурманска: $y = 0.0413x - 81.848$, для Умбы: $y = 0.0490x - 96.850$.

Как видно, угол наклона в регрессии для Умбы больше, чем в Мурманске. Если ограничиться лишь этим фактом, можно сделать вывод о разной скорости потепления. Но проверим, значимо ли различие. Для этого вычислим критерий

$$t = \frac{b_1 - b_2}{S_{b_1 - b_2}},$$

где $b_1 - b_2$ – разность коэффициентов наклона, $S_{b_1 - b_2}$ – ее стандартная ошибка [5]:

$$S_{b_1 - b_2} = \sqrt{\frac{s_{y/x_1}^2}{(n_1 - 1)s_{x_1}^2} - \frac{s_{y/x_2}^2}{(n_2 - 1)s_{x_2}^2}}, \quad s_{y/x}^2 = \frac{(n_1 - 1)s_{yx_1}^2 + (n_2 - 1)s_{yx_2}^2}{n_1 + n_2 - 4}, \quad s_{yx_1}^2 \text{ и } s_{yx_2}^2$$

– остаточные дисперсии.

В нашем примере $s_{x_1}^2 = s_{x_2}^2 = 10412.5$, $s_{yx_1}^2 = 51.76$, $s_{yx_2}^2 = 54.23$, $n_1 = n_2 = 50$, $S_{b_1 - b_2} = 0.0144$, $b_1 - b_2 = 0.0077$ и $t = 0.53$. Вычисленное значение сравним с критическим t_α (критерий Стьюдента), имеющим $n_1 + n_2 - 4$ степени свободы. Так как $0.53 < t_{0.95, 98} = 1.985$, нулевая гипотеза о равенстве углов наклона не отклоняется – линии можно считать параллельными. Рассмотренный пример показывает, что различия в численных значениях коэффициентов углов наклона в линейных регрессиях может оказаться недостаточно для заключения о разных скоростях изменения температуры.

Чтобы ответить на вопрос о том, насколько значимо различие скоростей потепления на разных ГМС области, необходимо попарно сравнить между собой все ГМС. Так как критерии Стьюдента и Уэлча используются только для парных сравнений, воспользуемся критерием Тьюки [7]:

$$q = \frac{|b_i - b_j|}{\sqrt{MSE/n}} = \frac{|b_i - b_j|}{SE},$$

где MSE – внутригрупповая дисперсия, SE – стандартная ошибка. Благодаря тому, что в приведенную формулу входит внутригрупповая дисперсия MSE ,

обеспечивается контроль над групповой вероятностью ошибки 1-го рода. Это делает критерий Тьюки подходящим для большого числа попарных сравнений, так как позволяет избежать проблемы множественных сравнений [8]. Нулевая гипотеза (углы наклона одинаковы) отклоняется, если

$$q > q_{\alpha, m, n-m},$$

где $q_{\alpha, m, n-m}$ – значение статистики q для уровня значимости α и m , $n-m$ степеней свободы (m – число групп, n – их суммарная численность).

Таблица 1. Зима

№№ пар	b1-b2	SE	q	$q_{\alpha, m, n-m}$	p
10 - 4	0.0203	0.0188	1.0799	4.4950	0.9990
2 - 4	0.0190	0.0191	0.9976	4.4950	0.9995
8 - 4	0.0159	0.0188	0.8452	4.4950	0.9999
7 - 4	0.0089	0.0188	0.4755	4.4950	1.0000
5 - 4	0.0084	0.0188	0.4486	4.4950	1.0000
3 - 4	0.0067	0.0188	0.3570	4.4950	1.0000
9 - 4	0.0061	0.0188	0.3252	4.4950	1.0000
1 - 4	0.0047	0.0188	0.2531	4.4950	1.0000
6 - 4	0.0027	0.0188	0.1441	4.4950	1.0000
10 - 6	0.0176	0.0188	0.9358	4.4950	0.9997
2 - 6	0.0163	0.0191	0.8557	4.4950	0.9999
8 - 6	0.0132	0.0188	0.7012	4.4950	1.0000
7 - 6	0.0062	0.0188	0.3314	4.4950	1.0000
5 - 6	0.0057	0.0188	0.3045	4.4950	1.0000
3 - 6	0.0040	0.0188	0.2130	4.4950	1.0000
9 - 6	0.0034	0.0188	0.1812	4.4950	1.0000
1 - 6	0.0020	0.0188	0.1090	4.4950	1.0000
10 - 1	0.0155	0.0188	0.8268	4.4950	0.9999
2 - 1	0.0143	0.0191	0.7484	4.4950	1.0000
8 - 1	0.0111	0.0188	0.5921	4.4950	1.0000
7 - 1	0.0042	0.0188	0.2224	4.4950	1.0000
5 - 1	0.0037	0.0188	0.1955	4.4950	1.0000
3 - 1	0.0020	0.0188	0.1040	4.4950	1.0000
9 - 1	0.0014	0.0188	0.0722	4.4950	1.0000
10 - 9	0.0142	0.0188	0.7546	4.4950	0.9999
2 - 9	0.0129	0.0191	0.6773	4.4950	1.0000
8 - 9	0.0098	0.0188	0.5200	4.4950	1.0000
7 - 9	0.0028	0.0188	0.1502	4.4950	1.0000
5 - 9	0.0023	0.0188	0.1233	4.4950	1.0000
3 - 9	0.0006	0.0188	0.0318	4.4950	1.0000
10 - 3	0.0136	0.0188	0.7228	4.4950	1.0000
2 - 3	0.0123	0.0191	0.6460	4.4950	1.0000
8 - 3	0.0092	0.0188	0.4882	4.4950	1.0000
7 - 3	0.0022	0.0188	0.1184	4.4950	1.0000
5 - 3	0.0017	0.0188	0.0916	4.4950	1.0000
10 - 5	0.0118	0.0188	0.6313	4.4950	1.0000
2 - 5	0.0106	0.0191	0.5559	4.4950	1.0000
8 - 5	0.0074	0.0188	0.3966	4.4950	1.0000
7 - 5	0.0005	0.0188	0.0269	4.4950	1.0000
10 - 7	0.0113	0.0188	0.6044	4.4950	1.0000
2 - 7	0.0101	0.0191	0.5294	4.4950	1.0000
8 - 7	0.0069	0.0188	0.3698	4.4950	1.0000
10 - 8	0.0044	0.0188	0.2347	4.4950	1.0000
2 - 8	0.0031	0.0191	0.1653	4.4950	1.0000
10 - 2	0.0013	0.0191	0.0658	4.4950	1.0000

Таблица 2. Весна

№№ пар	b1-b2	SE	q	$q_{\alpha, m, n-m}$	p
4 - 10	0.0242	0.0130	1.8651	4.4949	0.9491
6 - 10	0.0222	0.0130	1.7088	4.4949	0.9709
5 - 10	0.0219	0.0130	1.6848	4.4949	0.9735
2 - 10	0.0171	0.0130	1.3171	4.4949	0.9954
8 - 10	0.0137	0.0130	1.0545	4.4949	0.9992
1 - 10	0.0128	0.0130	0.9835	4.4949	0.9995
3 - 10	0.0115	0.0130	0.8874	4.4949	0.9998
7 - 10	0.0086	0.0130	0.6632	4.4949	1.0000
9 - 10	0.0066	0.0130	0.5058	4.4949	1.0000
4 - 9	0.0177	0.0130	1.3593	4.4949	0.9942
6 - 9	0.0156	0.0130	1.2030	4.4949	0.9977
5 - 9	0.0153	0.0130	1.1790	4.4949	0.9980
2 - 9	0.0105	0.0130	0.8113	4.4949	0.9999
8 - 9	0.0071	0.0130	0.5487	4.4949	1.0000
1 - 9	0.0062	0.0130	0.4777	4.4949	1.0000
3 - 9	0.0050	0.0130	0.3816	4.4949	1.0000
7 - 9	0.0020	0.0130	0.1574	4.4949	1.0000
4 - 7	0.0156	0.0130	1.2019	4.4949	0.9977
6 - 7	0.0136	0.0130	1.0456	4.4949	0.9992
5 - 7	0.0133	0.0130	1.0216	4.4949	0.9994
2 - 7	0.0085	0.0130	0.6540	4.4949	1.0000
8 - 7	0.0051	0.0130	0.3913	4.4949	1.0000
1 - 7	0.0042	0.0130	0.3203	4.4949	1.0000
3 - 7	0.0029	0.0130	0.2242	4.4949	1.0000
4 - 3	0.0127	0.0130	0.9776	4.4949	0.9996
6 - 3	0.0107	0.0130	0.8214	4.4949	0.9999
5 - 3	0.0104	0.0130	0.7974	4.4949	0.9999
2 - 3	0.0056	0.0130	0.4297	4.4949	1.0000
8 - 3	0.0022	0.0130	0.1670	4.4949	1.0000
1 - 3	0.0012	0.0130	0.0961	4.4949	1.0000
4 - 1	0.0115	0.0130	0.8815	4.4949	0.9998
6 - 1	0.0094	0.0130	0.7253	4.4949	1.0000
5 - 1	0.0091	0.0130	0.7012	4.4949	1.0000
2 - 1	0.0043	0.0130	0.3336	4.4949	1.0000
8 - 1	0.0009	0.0130	0.0709	4.4949	1.0000
4 - 8	0.0105	0.0130	0.8106	4.4949	0.9999
6 - 8	0.0085	0.0130	0.6543	4.4949	1.0000
5 - 8	0.0082	0.0130	0.6303	4.4949	1.0000
2 - 8	0.0034	0.0130	0.2627	4.4949	1.0000
4 - 2	0.0071	0.0130	0.5479	4.4949	1.0000
6 - 2	0.0051	0.0130	0.3916	4.4949	1.0000
5 - 2	0.0048	0.0130	0.3676	4.4949	1.0000
4 - 5	0.0023	0.0130	0.1803	4.4949	1.0000
6 - 5	0.0003	0.0130	0.0240	4.4949	1.0000
4 - 6	0.0020	0.0130	0.1563	4.4949	1.0000

Условия применимости критерия Тьюки: нормальность распределения данных и однородность групповых дисперсий. Устойчивость к отклонению

Таблица 3. Лето

№№ пар	b1-b2	SE	q	$q_{\alpha,m,n-m}$	p
2 - 1	0.0115	0.0114	1.0052	4.4949	0.9994
10 - 1	0.0112	0.0114	0.9775	4.4949	0.9996
9 - 1	0.0109	0.0114	0.9540	4.4949	0.9996
8 - 1	0.0105	0.0114	0.9175	4.4949	0.9997
3 - 1	0.0102	0.0114	0.8874	4.4949	0.9998
6 - 1	0.0052	0.0114	0.4520	4.4949	1.0000
5 - 1	0.0047	0.0114	0.4113	4.4949	1.0000
7 - 1	0.0042	0.0114	0.3673	4.4949	1.0000
4 - 1	0.0041	0.0114	0.3547	4.4949	1.0000
2 - 4	0.0074	0.0114	0.6506	4.4949	1.0000
10 - 4	0.0071	0.0114	0.6229	4.4949	1.0000
9 - 4	0.0069	0.0114	0.5994	4.4949	1.0000
8 - 4	0.0064	0.0114	0.5628	4.4949	1.0000
3 - 4	0.0061	0.0114	0.5327	4.4949	1.0000
6 - 4	0.0011	0.0114	0.0974	4.4949	1.0000
5 - 4	0.0006	0.0114	0.0567	4.4949	1.0000
7 - 4	0.0001	0.0114	0.0126	4.4949	1.0000
2 - 7	0.0073	0.0114	0.6380	4.4949	1.0000
10 - 7	0.0070	0.0114	0.6103	4.4949	1.0000
9 - 7	0.0067	0.0114	0.5868	4.4949	1.0000
8 - 7	0.0063	0.0114	0.5502	4.4949	1.0000
3 - 7	0.0060	0.0114	0.5201	4.4949	1.0000
6 - 7	0.0010	0.0114	0.0848	4.4949	1.0000
5 - 7	0.0005	0.0114	0.0441	4.4949	1.0000
2 - 5	0.0068	0.0114	0.5939	4.4949	1.0000
10 - 5	0.0065	0.0114	0.5662	4.4949	1.0000
9 - 5	0.0062	0.0114	0.5427	4.4949	1.0000
8 - 5	0.0058	0.0114	0.5062	4.4949	1.0000
3 - 5	0.0054	0.0114	0.4761	4.4949	1.0000
6 - 5	0.0005	0.0114	0.0407	4.4949	1.0000
2 - 6	0.0063	0.0114	0.5532	4.4949	1.0000
10 - 6	0.0060	0.0114	0.5255	4.4949	1.0000
9 - 6	0.0057	0.0114	0.5020	4.4949	1.0000
8 - 6	0.0053	0.0114	0.4655	4.4949	1.0000
3 - 6	0.0050	0.0114	0.4354	4.4949	1.0000
2 - 3	0.0013	0.0114	0.1178	4.4949	1.0000
10 - 3	0.0010	0.0114	0.0901	4.4949	1.0000
9 - 3	0.0008	0.0114	0.0666	4.4949	1.0000
8 - 3	0.0003	0.0114	0.0301	4.4949	1.0000
2 - 8	0.0010	0.0114	0.0877	4.4949	1.0000
10 - 8	0.0007	0.0114	0.0600	4.4949	1.0000
9 - 8	0.0004	0.0114	0.0365	4.4949	1.0000
2 - 9	0.0006	0.0114	0.0512	4.4949	1.0000
10 - 9	0.0003	0.0114	0.0235	4.4949	1.0000
2 - 10	0.0003	0.0114	0.0277	4.4949	1.0000

Таблица 4. Осень

№№ пар	b1-b2	SE	q	$q_{\alpha,m,n-m}$	p
2 - 10	0.0201	0.0134	1.5021	4.4950	0.9880
3 - 10	0.0148	0.0132	1.1230	4.4950	0.9987
5 - 10	0.0067	0.0132	0.5086	4.4950	1.0000
8 - 10	0.0066	0.0132	0.5031	4.4950	1.0000
1 - 10	0.0064	0.0132	0.4835	4.4950	1.0000
6 - 10	0.0047	0.0132	0.3532	4.4950	1.0000
7 - 10	0.0036	0.0132	0.2754	4.4950	1.0000
4 - 10	0.0032	0.0132	0.2459	4.4950	1.0000
9 - 10	0.0022	0.0132	0.1659	4.4950	1.0000
2 - 9	0.0179	0.0134	1.3388	4.4950	0.9948
3 - 9	0.0126	0.0132	0.9571	4.4950	0.9996
5 - 9	0.0045	0.0132	0.3427	4.4950	1.0000
8 - 9	0.0045	0.0132	0.3372	4.4950	1.0000
1 - 9	0.0042	0.0132	0.3176	4.4950	1.0000
6 - 9	0.0025	0.0132	0.1873	4.4950	1.0000
7 - 9	0.0014	0.0132	0.1095	4.4950	1.0000
4 - 9	0.0011	0.0132	0.0800	4.4950	1.0000
2 - 4	0.0169	0.0134	1.2600	4.4950	0.9967
3 - 4	0.0116	0.0132	0.8771	4.4950	0.9998
5 - 4	0.0035	0.0132	0.2626	4.4950	1.0000
8 - 4	0.0034	0.0132	0.2572	4.4950	1.0000
1 - 4	0.0031	0.0132	0.2375	4.4950	1.0000
6 - 4	0.0014	0.0132	0.1073	4.4950	1.0000
7 - 4	0.0004	0.0132	0.0295	4.4950	1.0000
2 - 7	0.0165	0.0134	1.2309	4.4950	0.9972
3 - 7	0.0112	0.0132	0.8476	4.4950	0.9999
5 - 7	0.0031	0.0132	0.2332	4.4950	1.0000
8 - 7	0.0030	0.0132	0.2277	4.4950	1.0000
1 - 7	0.0027	0.0132	0.2081	4.4950	1.0000
6 - 7	0.0010	0.0132	0.0778	4.4950	1.0000
2 - 6	0.0155	0.0134	1.1543	4.4950	0.9983
3 - 6	0.0102	0.0132	0.7698	4.4950	0.9999
5 - 6	0.0021	0.0132	0.1553	4.4950	1.0000
8 - 6	0.0020	0.0132	0.1499	4.4950	1.0000
1 - 6	0.0017	0.0132	0.1302	4.4950	1.0000
2 - 1	0.0138	0.0134	1.0260	4.4950	0.9993
3 - 1	0.0084	0.0132	0.6395	4.4950	1.0000
5 - 1	0.0003	0.0132	0.0251	4.4950	1.0000
8 - 1	0.0003	0.0132	0.0196	4.4950	1.0000
2 - 8	0.0135	0.0134	1.0067	4.4950	0.9994
3 - 8	0.0082	0.0132	0.6199	4.4950	1.0000
5 - 8	0.0001	0.0132	0.0055	4.4950	1.0000
2 - 5	0.0134	0.0134	1.0013	4.4950	0.9995
3 - 5	0.0081	0.0132	0.6144	4.4950	1.0000
2 - 3	0.0053	0.0134	0.3963	4.4950	1.0000

Примечания к таблице 3-4: 1-ый столбец – пары ГМС: 1 – Мурманск, 2 – Ковдор, 3 – Мончегорск, 4 – Ловозеро, 5 – Краснощелье, 6 – Каневка, 7 – Кандалакша, 8 – Умба, 9 – Пялица, 10 – Ковда; 2-ой – разности коэффициентов линейных регрессий; 3-ий – стандартная ошибка, 4-ый и 5-ый – q и $q_{\alpha,m,n-m}$, 6-ой – P .

от этих условий, равно как и статистическая мощность критерия возрастают при одинаковом числе наблюдений во всех сравниваемых группах [7]. Распределение температуры воздуха действительно близко к нормальному с небольшими отклонениями в зимний сезон [6]. Критерий однородности дисперсии Левиня [9] показал, что дисперсии для каждой из групп стати-

стически достоверно не различаются (со значимостью 0.93, 0.09, 0.87, 0.99). Таким образом, условия для применения критерия Тьюки для выбранной задачи выполняются. В случае неравных выборок и неравенства дисперсий, вместо критерия Тьюки можно было воспользоваться критерием Тамхейна T2 [10].

Результаты и обсуждение

Рассчитанные q и табличные значения $q_{\alpha, m, n-m}$ для каждой пары сравниваемых станций даны в табл. 1-4. Число ГМС в таблицах ограничено, так как с увеличением числа групп m растет число парных сравнений: $m(m-1)/2$. Но заметим, что в таблицах представлены все районы Кольского п-ова, а ряды по выбранным ГМС климатически однородны. Как видно из табл. 1-4 (путем сопоставления q и $q_{\alpha, m, n-m}$), несмотря на различия в значениях, ни в одной из пар нет статистически значимого различия в углах наклона линейного тренда сезонных температур. То есть, для 1965-2014 гг. можно говорить о примерно одинаковой скорости потепления на территории Мурманской обл.

Список литературы

1. Комплексные климатические стратегии для устойчивого развития регионов российской Арктики в условиях изменения климата: модельный пример Мурманской обл. Программа развития ООН в России, Российский региональный экологический центр. М., 2009. 47 с.
2. Семенов А.В. Инструментальные климатические наблюдения на Кольском п-ове и особенности обслуживания региональных потребителей климатической информацией // Межд. конф. «Адаптация к изменению климата и ее роль в обеспечении устойчивого развития регионов». Мурманск, 13 мая 2008 г. <http://www.myshared.ru/slide/378692>.
3. Оценочный доклад об изменениях климата и их последствиях на территории РФ. Т. 1. Изменение климата. М.: Росгидромет, НИЦ «Планета», 2008. 230 с.
4. Закс Л. Статистическое оценивание DJVU. М.: Статистика, 1976. 598 с.
5. Гланц С. Медико-биологическая статистика. М.: Практика, 1998. 459 с.
6. Кобышева Н.В. Косвенные расчеты климатических характеристик. Л.: Гидрометеиздат, 1971. 191 с.
7. Zar H.J. Biostatistical Analysis. Pearson, 2009. 946 p.
8. Maxwell, Scott E., Harold D. Delaney designing experiments and analyzing data: a model comparison perspective series. Lawrence Erlbaum Associates, 2004. 1104 p.
9. Lyman R., Longnecker M.T. An introduction to statistical methods and data analysis. Duxbury Thomson Learning, 2010. 1152 p.
10. Charles W. Dunnett pairwise multiple comparisons in the unequal variance case // J. Amer. Stat. Assoc. 2005. V. 75, N 372. P. 796-800.

АНТРОПОГЕННОЕ ВЛИЯНИЕ НА ПОКАЗАНИЯ МЕТЕОРОЛОГИЧЕСКИХ СТАНЦИЙ

Демин В.И.¹, Анциферова А.Р.², Мокротоварова О.И.²

¹ Полярный геофизический институт, Апатиты

² Мурманское управление по гидрометеорологии и мониторингу окружающей среды, Мурманск

Проведен анализ изменений температуры воздуха на ГМС «Мурманск» и ближайших ГМС «Полярное» и «Кола». В рядах сезонных температур на ГМС «Мурманск» не проявляются признаки большего потепления вследствие антропогенного «острова тепла». Обнаружено повышение минимальных температур на ГМС «Мурманск» относительно ГМС «Полярное» со скоростью $0.02\text{ }^{\circ}\text{C} / 10\text{ лет}$ в период с положительным радиационным балансом.

Введение

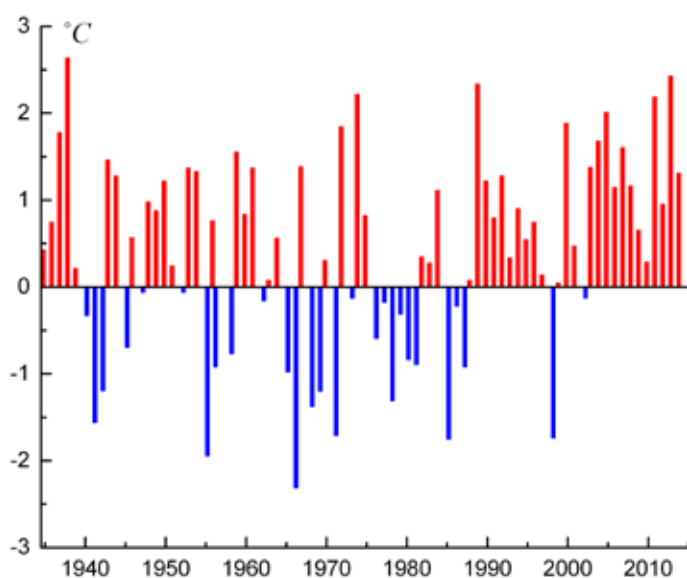


Рис. 1. Аномалии среднегодовой температуры в г. Мурманске относительно нормы для 1961-1990 гг.

Диагностика климатических изменений требует метеорологических измерений большой продолжительности при сохранении климатической однородности ряда. Но первые ГМС открывались, как правило, в городах, которые разрастались в крупные мегаполисы. Так, ГМС «Мурманск», обладающая наиболее длинным рядом наблюдений в регионе и включенная в Глобальную сеть наблюдений за климатом, расположена в черте города. Но с XIX в. известно, что воздух в городской застройке теплее,

чем в сельской (фоновой) местности вследствие так называемого городского «острова тепла» [1-3, 17].

Согласно [4] среднегодовая температура воздуха ($t_{\text{сг}}$) в г. Мурманске для 1881-1960 гг. составляла 0°C . Для базового периода 1961-1990 гг., используемого для описания современного климата, $t_{\text{сг}}$ также была около 0°C . С 1991 г. норма по среднегодовой температуре воздуха в г. Мурманск оказалась превышенной в 22 случаях из 24 (рис. 1). Но такое изменение порождает вопрос: насколько оно вызвано региональными изменениями климата и потеплением климата в городе.

Цель работы – изучение долговременных изменений температуры воздуха в г. Мурманске для обнаружения «острова тепла» и оценка репрезен-

тативности наблюдений на ГМС «Мурманск» для анализа климатических изменений ближайших территорий.

Исходные данные

Метеорологические наблюдения в г. Мурманск начались в 1917 г. на территории торгового порта (64 м н.у.м.). В 1924 г. станция перенесена на 1.5 км к ЮВ с изменением высоты (21 м н.у.м.). В ноябре 1934 г. станция перенесена на мыс Халдеев (51 м н.у.м.) [5]. С этого времени нарушилась однородность ряда: в связи с приближением станции к берегу Кольской губы и изменением высоты среднемесячные температуры в переходные и летние сезоны стали ниже [4]. По этой, в частности, причине в «Справочнике по климату СССР» [4] присутствуют данные станций «Мурманск, город» и «Мурманск, Халдеев мыс», а не объединенный ряд «Мурманск». С 1935 г. метеорологическая площадка на мысе Халдеев сохраняет положение, и несмотря на застройку территории ее температурный ряд считается однородным [5, 6]. В работе использованы данные ВНИИ Гидрометеорологической информации – Мировой центр данных (г. Обнинск) и Мурманского управления по гидрометеорологии и мониторингу окружающей среды.

Метод исследования

Городской «остров тепла» можно представить в виде температурного градиента на границе города с медленным повышением температуры к его центральной части [1]. Интенсивность и размеры явления изменяются во времени и пространстве под влиянием метеорологических условий, местных особенностей и характеристик города. «Остров тепла» отчетливо проявляется при слабом ветре и безоблачном небе. Но те же погодные условия способствуют проявлению микроклиматических особенностей отдельных районов, обусловленных неоднородностью подстилающей поверхности. Микроклиматическая изменчивость температуры воздуха даже на малой территории может измеряться градусами [7-10]. Мурманск расположен на восточном побережье Кольского залива на четырех террасах с перепадом высот до 300 м. К воздействию рельефа на термический режим приземного слоя воздуха добавляется взаимодействие воздуха с акваторией залива. В этой связи пространственное распределение температуры воздуха на территории города и без антропогенного воздействия должно быть неравномерным.

Некоторые особенности распределения температуры в г. Мурманске даны в работе [5]. Показано, что в застроенных районах города в дневное время в течение всего года теплее, чем на побережье залива. Наибольшие различия – между застроенными районами и прибрежной частью города при малооблачной или ясной погоде. При пасмурной или ветреной погоде различия в температуре отдельных районов сглаживаются. Но так как результат получен сравнением станций в разных условиях (одна внутри городской застройки, вторая на открытой площадке вблизи залива), уверенно приписать разницы температур «острову тепла» было бы преждевременно. Из-за

отсутствия масштабной сети метеорологических станций внутри города и ближайших пригородах вопрос о существовании «острова тепла» и его интенсивности в г. Мурманске остается открытым. По измерениям отдельных ГМС надежно можно проследить только многолетнюю эволюцию городского «острова тепла». По наблюдениям в европейских и северо-американских городах, «остров тепла» ΔT примерно пропорционален числу жителей P [1]:

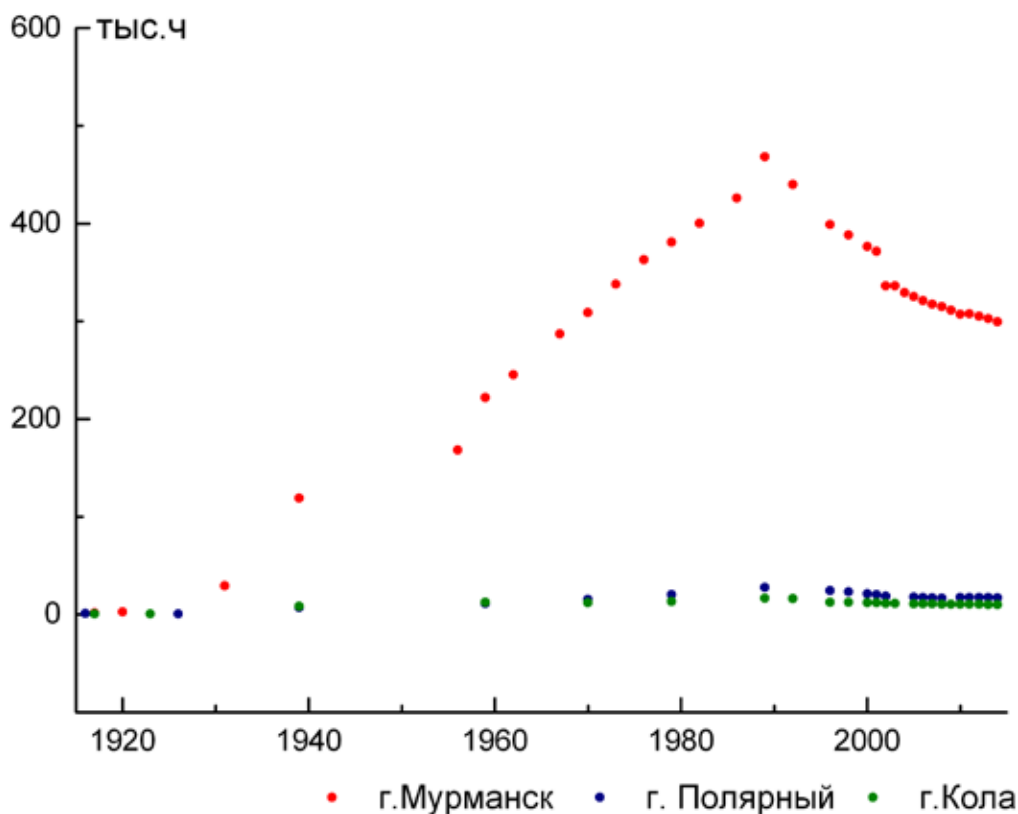


Рис. 2. Изменение населения в гг. Мурманск, Полярный и Кола.

$$\Delta T = aLgP + b \text{ или } \Delta T = aV^bP^c,$$

где V – скорость ветра, a , b , c – константы.

До 1930-х население Мурманска было невелико (рис. 2). Город стал застраиваться в 1915 г. В 1917 г. в нем жили 1.3 тыс. человек, в 1920 г. – 2.5 тыс., в 1926 г. – 9 тыс. Бурный рост начался в конце 1920-х в связи с развитием Мурманского морского порта, строительством гражданских и военных объектов. Во время Отечественной войны город был почти полностью сожжен (остались лишь портовые постройки и несколько каменных зданий), но к 1952 г. восстановлен. Значительное расширение Мурманска пришлось на 1970-е – начало 1980-ых. В конце 1980-ых население достигло 480 тыс. чел. Затем последовал экономический спад, снижение объемов промышленного производства, строительства, потребления тепло- и электроэнергии, отток населения. Исходя из динамики развития города, «остров тепла» должен был проявиться в виде устойчивого увеличения разности температуры воздуха между ГМС в черте города и ГМС в фоновых условиях (т.н. «ползучий» тренд). Наибольшие изменения должны были произойти до 1990 гг.

Результаты

Долговременные изменения сезонных температур в г. Мурманске удобнее всего сравнить с изменениями температуры на ГМС «Полярное», которая с 1913 г. расположена в том же климатическом районе [10] в 30 км от Мурманска на пустынном Екатерининском о-ве в Кольском заливе к северу от г. Полярный. В качестве характеристики климатических изменений традиционно используется коэффициент линейного тренда, определенный методом наименьших квадратов и характеризующий среднюю скорость изменения климатической переменной [11].

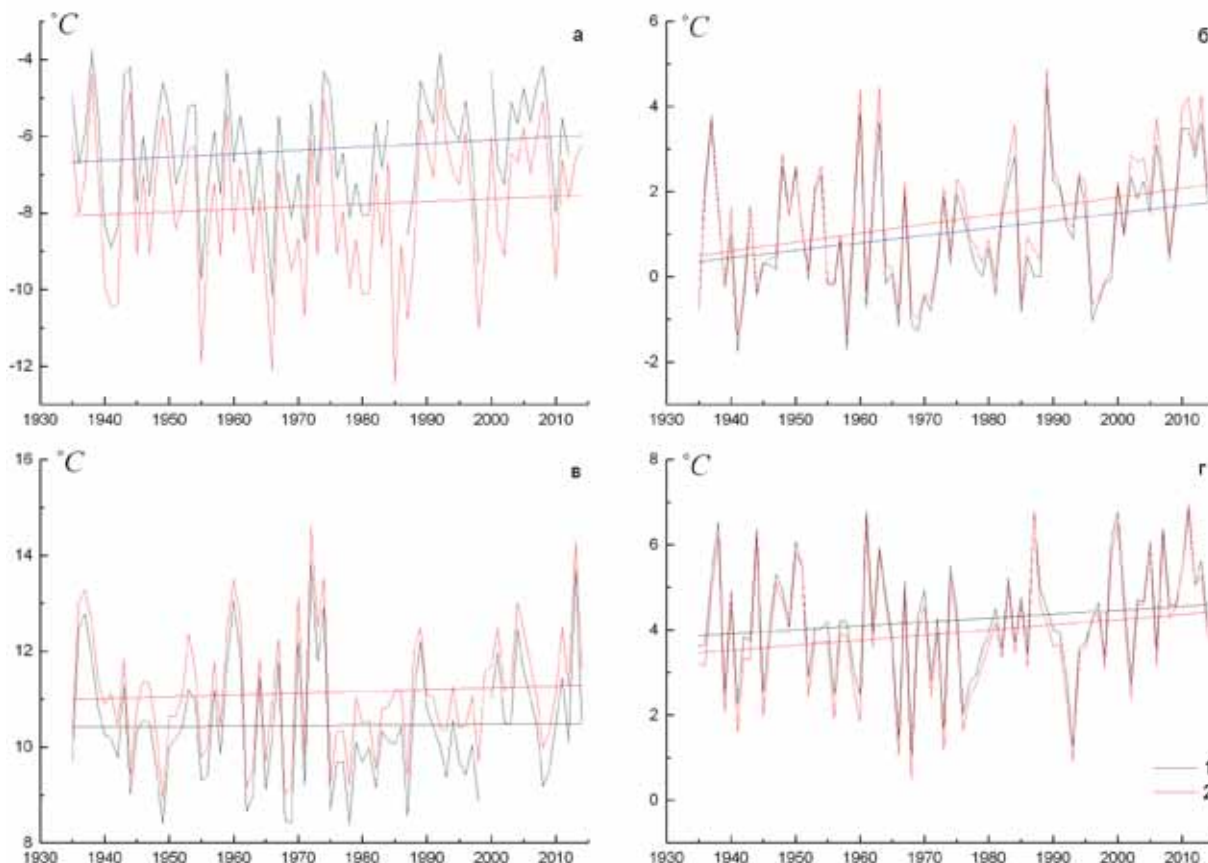


Рис. 3. Динамика среднесезонных температур (а – зима, б – весна, в – лето, г – осень) на ГМС «Полярное» (1) и «Мурманск» (2).

Таблица. Угловые коэффициенты линейных регрессий в рядах средних сезонных температур (b_1 , b_2), их разность ($b_1 - b_2$), стандартная ошибка разности коэффициентов b_1 , b_2 (s_{b1-b2}), расчетное значение t-критерия (t), значение степеней свободы (f) и критическое значение t-критерия ($t_{f,\alpha}$).

Сезон	b_1/b_2	$b_1 - b_2$	s_{b1-b2}	t	f	$t_{f,\alpha}$
Мурманск – Полярное. 1935-2014 гг.						
зима	0.00847/ 0.00887	-0.0004	0.0117	-0.0346	148	1.976
весна	0.0211/ 0.0178	0.0033	0.0098	0.3335	156	1.975
лето	0.0035 / 0.0008	0.0027	0.0088	0.3060	154	1.975
осень	0.0120 / 0.0092	0.0028	0.0095	0.2955	156	1.975

Как видно из рис. 3 и таблицы, в период 1935-2014 гг. скорости изменения среднесезонных температур на ГМС «Мурманск» отличаются от значений на ГМС «Полярное». В частности, весной, летом и осенью изменение температуры на ГМС «Мурманск» на 0.02-0.03°C/10 лет выше. Так как в дисперсиях сезонных температур на ГМС «Мурманск» и «Полярное» ($s_{y_1x_1}^2 = s_{y_2x_2}^2$) нет различия, воспользуемся t -критерием для сравнения углов наклона линейных трендов b_1 и b_2 :

$$\bar{t} = \frac{|b_1 - b_2|}{\sqrt{\frac{s_{y_1x_1}^2(n_1 - 2) + s_{y_2x_2}^2(n_2 - 2)}{n_1 + n_2 - 4} \left[\frac{1}{Q_{x_1}} + \frac{1}{Q_{x_2}} \right]}} = \frac{|b_1 - b_2|}{s_{b_1 - b_2}}$$

где n_1 и n_2 – объемы выборок, $Q_x = \sum (x - \bar{x})^2$ [12].

Нулевая гипотеза (коэффициенты регрессии b_1 и b_2 равны) на уровне α отвергается, если полученное значение по модулю превышает $t_{f,\alpha}$. При $t \leq t_{f,\alpha}$ принимается гипотеза о равенстве коэффициентов регрессии. Результаты сравнения сезонных температур на ГМС «Мурманск» и «Полярное» даны в таблице. Как видно, ни в одном из сезонов статистически значимого различия в углах наклона линейных регрессий нет. Но строгость заключения является неполной, поскольку для зимы, лета и осени коэффициенты угла наклона на рассматриваемых ГМС сами являются статистически незначимыми. Нет статистически значимых трендов сезонных температур и на расположенной в 8 км южнее ГМС «Кола». В связи с закрытием станции, сравнение этой пары возможно только для 1935-1983 гг. Но именно на этот период пришелся наибольший рост г. Мурманска. Тем не менее, теплее на ГМС «Мурманск» относительно ГМС «Кола» в этот период не стало.

Таким образом, «остров тепла» в рядах сезонных температур на ГМС «Мурманск» не обнаруживается. Этот результат не может рассматриваться как отрицание его существования. Так, мы не можем исключить выраженного «острова тепла» в других районах города, которые не охвачены метеорологическими наблюдениями. Но можно уверенно говорить о его незначительном воздействии на термический режим территории, прилегающей к ГМС «Мурманск». Это может быть вызвано общей слабой интенсивностью явления в городе вследствие неблагоприятных метеорологических условий (облачность, низкая повторяемость штилей, сильный ветровой режим, уменьшающий разность между районами города и пригородами) или локальными особенностями положения ГМС «Мурманск». Если допустить, что антропогенное воздействие на температурный режим в окрестностях ГМС «Мурманск» невелико, то для его надежного выявления необходимо использовать выборки максимальной длины (среднемесячных значений оказывается недостаточно).

Согласно существующим представлениям, формирование «острова тепла» происходит несколькими путями [1]: увеличения приходящей радиации из-за большого поглощения уходящей длинноволновой радиации и большего противоизлучения загрязненной городской атмосферы; уменьшения эффективного излучения за счет большей закрытости горизонта зданиями (меньше площадь открытого неба); увеличения поглощения коротковолновой радиации в дневные часы из-за геометрии города; больших запасов тепла приобретаемого городом в дневные часы за счет большей поверхности и его расход в ночное время; уменьшения затрат тепла на испарение за счет меньшей площади растительного покрова и оттока вод; уменьшения потерь тепла за счет ослабления турбулентного обмена по вертикали за счет меньшей скорости ветра; выделение антропогенного тепла (за счет сжигания топлива, отопления и т.д.). Из приведенных факторов видно, что именно эффективное поглощение и сохранение городом солнечного тепла является одной из основных причин возникновения «острова тепла». В этой связи можно выделить два принципиально отличных периода: с отрицательным радиационным балансом (октябрь – март); с положительным радиационным балансом (апрель – сентябрь) [5, 10].

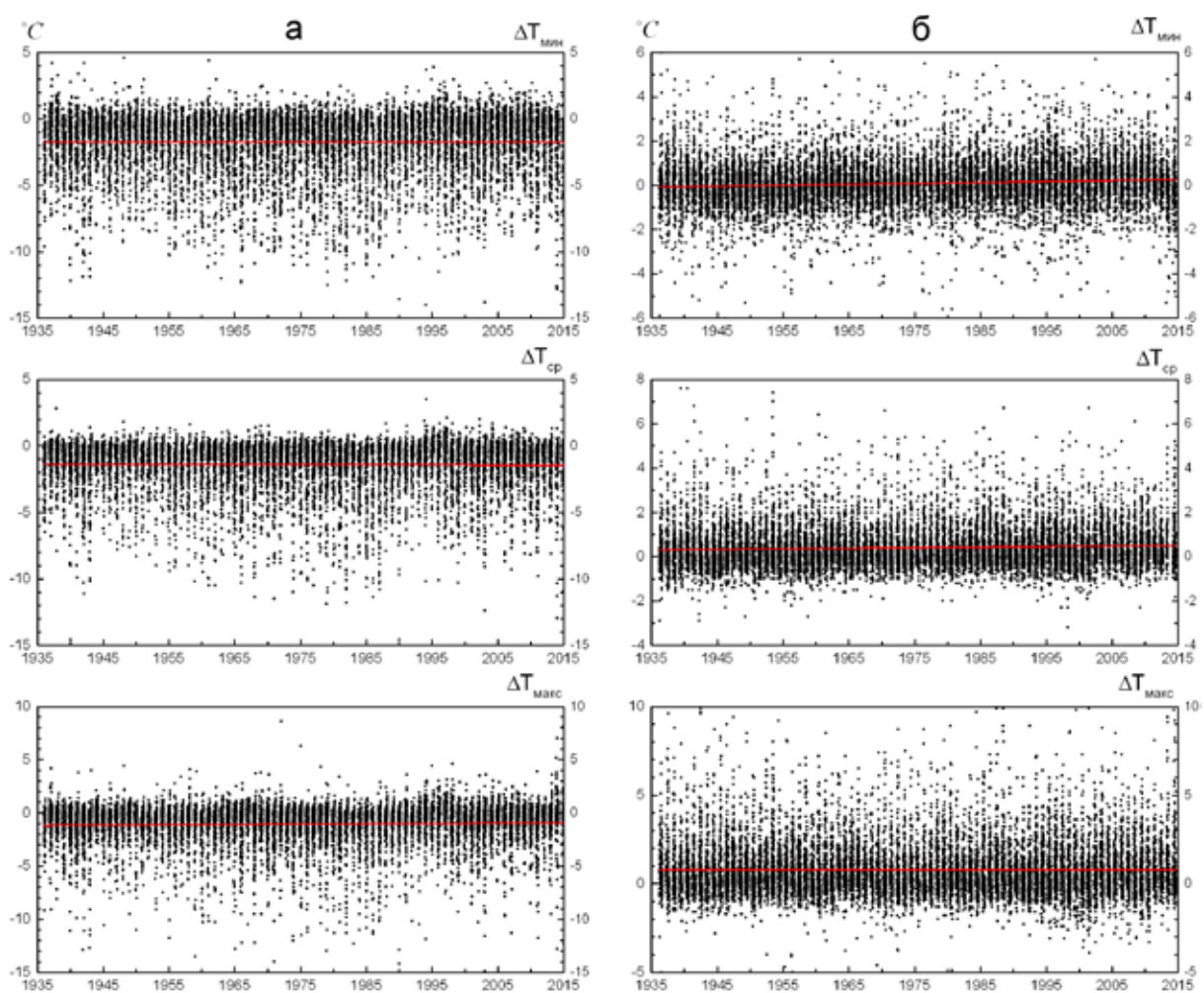


Рис. 4. Разность минимальных, среднесуточных и максимальных суточных температур на ГМС «Мурманск» и «Полярное» зимой (а) и в период с положительным радиационным балансом (б).

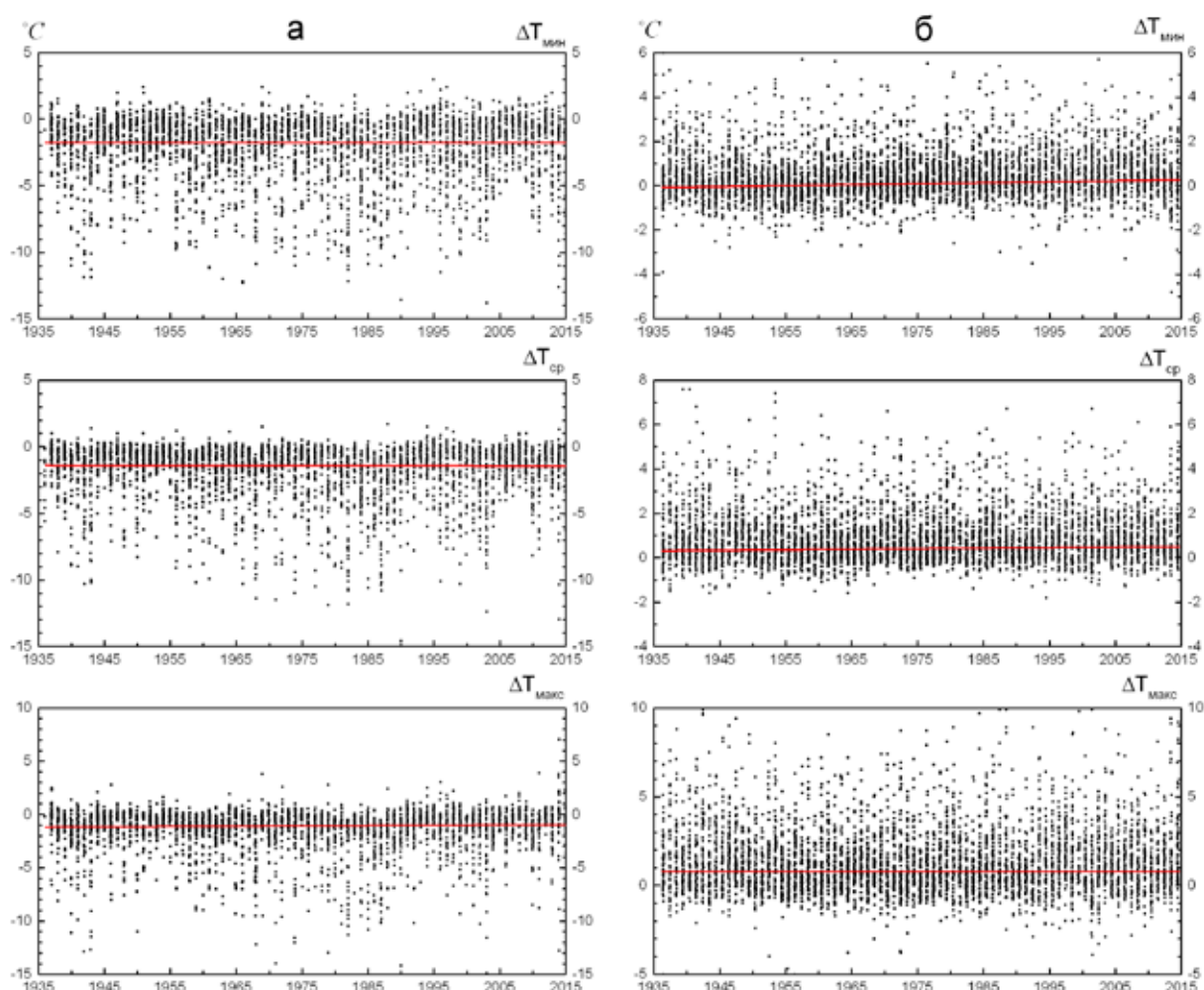


Рис. 5. Разность минимальных, среднесуточных и максимальных суточных температур на ГМС «Мурманск» и «Полярное зимой (ноябрь – март) и в период полярной ночи (а) и полярного дня (б).

На рисунке 4 дана разность среднесуточных, минимальных и максимальных суточных температур на ГМС «Мурманск» и «Полярное» с 1936 по 2014 гг. На рис. 5 дана разность среднесуточных, минимальных и максимальных суточных значений температуры на ГМС «Мурманск» и «Полярное» в период полярной ночи в г. Мурманске (2 декабря – 12 января) и в период полярного дня (22 мая – 22 июля). Обращает внимание отсутствие потепления на ГМС «Мурманск» по сравнению с ГМС «Полярное» в зимний период, когда в условиях отрицательного радиационного баланса в наибольшей степени должны были проявить себя антропогенные источники тепла. Впрочем, этот результат не является чем-то исключительным. Даже в мегаполисе Санкт-Петербурге средний годовой вклад антропогенного тепла в городской «остров тепла» оценивается всего в $0.07-0.15^{\circ}\text{C}$ [13, 14]. В период с положительным радиационным балансом подстилающей поверхности наблюдается статистически значимое повышение минимальных температур на ГМС «Мурманск» по сравнению с ГМС «Полярное» со средней скоростью $0.04^{\circ}\text{C} / 10$ лет. Повышение минимальных температур привело к увеличению их среднесуточных значений. В целом с 1936 по 2014 гг. на ГМС

«Мурманск» потеплело относительно ГМС «Полярное» примерно на 0.14°C (апрель – сентябрь). Статистически значимого увеличения разницы между максимальными суточными температурами нет.

Обнаруженные изменения качественно совпадают с общей картиной долговременных тенденций температуры в условиях растущего города, где наблюдается повышение минимальных температур по сравнению с окружающей сельской местностью и слабые изменения или даже их отсутствие в разности максимальных температур. «Остров тепла» более выражен в летнее время, когда в условиях более интенсивной солнечной инсоляции городские постройки накапливают большее количество тепла, которое расходуется на обогрев воздуха ночью. Тем не менее, нет полной уверенности, что обнаруженные изменения температуры на ГМС «Мурманск» являются следствием интенсификации городского «острова тепла». И вызваны эти сомнения отсутствием других близкорасположенных ГМС.

Традиционная техника выявления «острова тепла» предусматривает сравнение измерений в городе и ближайшей сельской (фоновой) местности. Предполагается, что на долговременный тренд разницы температур между ними макроциркуляционные процессы оказывают слабое влияние по сравнению с вкладом, обусловленным изменениями, происходящими на территории, окружающей городскую ГМС. Знак разности температур между ГМС «Мурманск» и «Полярное» носит сезонный характер: зимой в Полярном те-

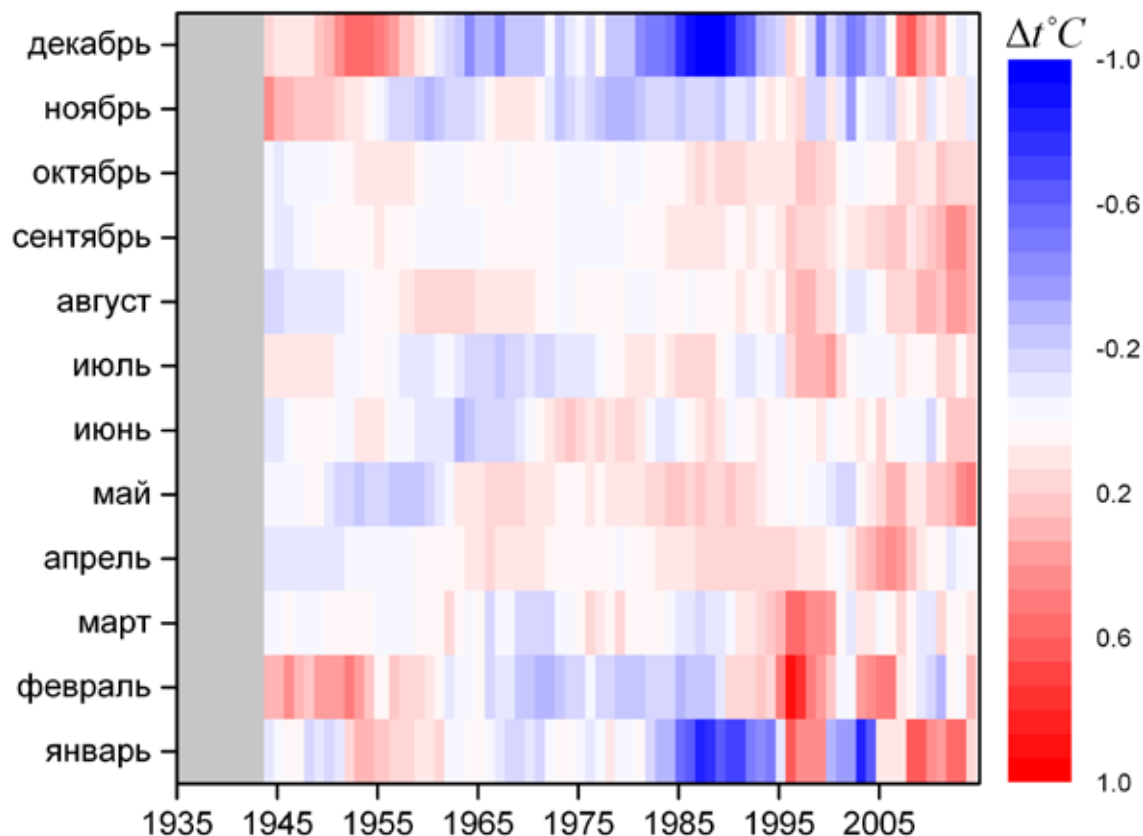


Рис. 6. Отклонения разности среднемесячных температур на ГМС «Мурманск» и «Полярное» от средней за 1935-1980 гг.; 5-летнее сглаживание.

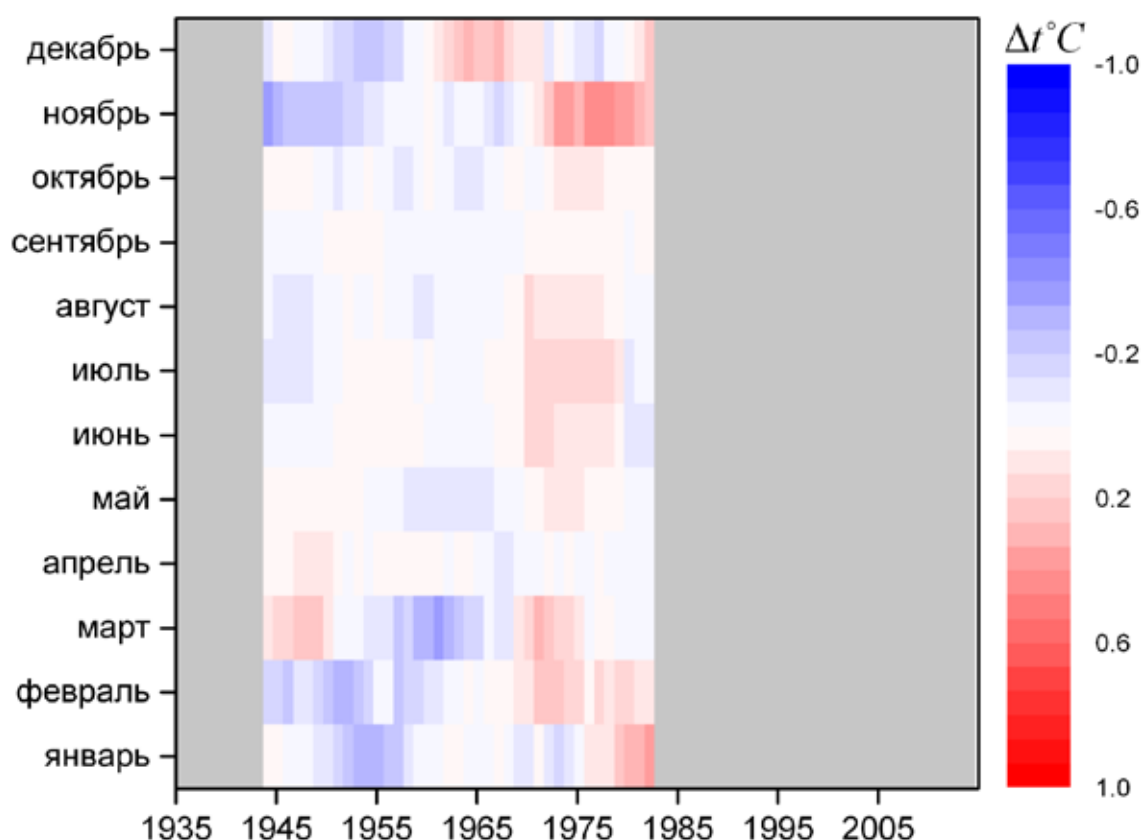


Рис. 7. Отклонения разности среднемесячных температур на ГМС «Мурманск» и «Кола» от средней за 1935-1980 гг.; 5-летнее сглаживание. В 1983 г. наблюдения на ГМС «Кола» прекращены.

плее, чем в Мурманске, летом – наоборот. По этой причине, чтобы представить все изменения на рисунке с помощью одной цветовой шкалы, лучше оперировать не абсолютной разностью температур, а её отклонением от некоторого среднего значения, например, за 1935-1980 гг. Из рис. 6 видно, что разность среднемесячных температур между ГМС «Мурманск» и «Полярное» не меняется монотонно: есть периоды, когда ГМС «Мурманск» теплее относительно ГМС «Полярное», но есть и периоды с противоположными изменениями. Тенденции могут быть разного знака даже внутри соседних месяцев одного и того же сезона.

Такие же закономерности (волны потепления и похолодания, несовпадения знаков в соседних месяцах) обнаруживаются при сравнении температур на ГМС «Мурманск» и «Кола» (рис. 7). Более того, наблюдаются многолетние периоды, когда Мурманск теплее относительно Полярного, но одновременно холодает относительно Колы, и наоборот. Так, зимой к середине 1980-ых в г. Мурманске потеплело относительно Колы, но похолодало относительно Полярного. Между тем, если бы в Мурманске становилось теплее только из-за «острова тепла», то изменения температуры в парах «Мурманск» – «Полярный» и «Мурманск» – «Кола» должны были происходить синхронно.

Представленные (рис. 5, 6) изменения разности температур не очень согласуются и с динамикой г. Мурманск. Даже в период интенсивного роста города (1945-1990 гг.) наблюдаются периоды с понижением температуры воздуха на ГМС «Мурманск» по сравнению с ГМС «Полярное». Например, зимой к середине 1980-ых гг. стало даже холоднее, чем в 1930-50-ые гг. при всем том, что город к тому времени достиг наибольшего развития. Периоды уменьшения разницы между ГМС «Мурманск» и «Полярное» отмечалось и в теплое время года. В то же время наибольшие изменения в сторону потепления в теплое полугодие произошли после 1990 г., когда, как уже было сказано выше, масштаб антропогенного воздействия на окружающую среду даже снизился по сравнению с предшествующими десятилетиями. Это позволяет предположить, что на разность температур между ГМС «Мурманск» и «Полярное» (а также ГМС «Мурманск» и «Кола»), несмотря на их близкое расположение, оказывают сильное влияние не только антропогенные изменения окружающей среды в окрестностях ГМС, но и другие процессы.

Принято считать, что все крупные и продолжительные погодные аномалии имеют одинаковую (макроциркуляционную) природу и охватывают значительное пространство, а их влияние на разницу температур между близко расположенными станциями незначительно. Это справедливо для длительных (в климатическом плане) промежутков времени: по мере увеличения сравниваемого периода разность показаний на соседних ГМС становится стабильной. Но на коротких интервалах утверждение о постоянстве разностей, строго говоря, не является правильным. В циркуляции атмосферы существуют периоды, когда повторяемость одного из макропроцессов или их группы заметно превышает многолетние значения – т.н. циркуляционные эпохи. Их продолжительность составляет 10-30 или 25-30 лет [15]. Каждой эпохе соответствует свой фон циркуляции и режим погоды в различных районах [16], в т.ч. положение зон температурных аномалий. Положение сравниваемых станций относительно зон аномалий создает различия в климатических условиях на соседних станциях. Можно предположить, что при одних группах макропроцессов сильнее теплеет севернее Мурманска, при других – южнее. Как следствие, разность Мурманск – Кола и Мурманск – Полярный будут меняться по-разному. На коротких расстояниях между станциями различия невелики. Но когда мы пытаемся объяснить эффекты порядка 0.1°C , этот фактор не может быть игнорирован. Анализ распределения аномалий среднемесячных температур при различных типах макропроцессов показывает реальность эффекта [16]. Кроме того, городской «остров тепла» проявляется в определенных метеорологических условиях, повторяемость которых в разные циркуляционные эпохи может быть различной. По этой причине нет уверенности, что небольшое потепление на ГМС «Мурманск» является следствием только дополнительного воздействия антропогенного «острова тепла». С уверенностью можно признать, что ГМС «Мурманск», несмотря на ее положение внутри города, по-прежнему является репрезен-

тативной ГМС для задач климатологии (по крайней мере, для изучения термического режима).

Заключение

Проведен анализ долговременных изменений разности температур между ГМС «Мурманск» и ближайшей фоновой станцией «Полярное». В зимние месяцы, когда радиационный баланс отрицателен, но наиболее велик вклад антропогенного тепла, изменения разности температур между ГМС «Мурманск» и «Полярное» не обнаружено. В период с положительным радиационным балансом (апрель – сентябрь) наблюдался небольшой рост минимальных температур на ГМС «Мурманск» относительно ГМС «Полярное» со скоростью $0.02\text{ }^{\circ}\text{C} / 10\text{ лет}$. Это привело и к некоторому увеличению разности среднесуточных температур. В целом, с 1936 по 2014 гг. на ГМС «Мурманск» потеплело относительно ГМС «Полярное» на $0.14\text{ }^{\circ}\text{C}$ (апрель – сентябрь). Статистически значимого увеличения разницы между максимальными суточными температурами нет.

Обнаруженная картина качественно совпадает с изменениями, которые должны наблюдаться в условиях растущего города. Но скорость дополнительного потепления на ГМС «Мурманск» небольшая и на коротких временных интервалах (до нескольких десятков лет), ее вклад в общее потепление климата незначительный. По этой причине статистически значимой разницы в углах наклона линейных трендов сезонных температур за 1935-2014 гг. на ГМС «Мурманск» и ближайших ГМС нет. Измерения на ГМС «Мурманск», несмотря на ее положение внутри города с более чем 300-тысячным населением, можно считать репрезентативными для региональной и глобальной климатологии.

Список литературы

1. Оке Т.Р. Климаты пограничного слоя. Л.: Гидрометеиздат, 1982. 360 с.
2. Мягков М.С., Губернский Б.Д., Конова Л.И. и др. Город, архитектура, человек и климат. М.: Архитектура-С, 2006. 344 с.
3. Климатология. Под ред. О.А. Дроздова, Н.В. Кобышевой. Л.: Гидрометеиздат, 1989. 568 с.
4. Справочник по климату СССР. Вып. 2. Ч. 2. Температура воздуха и почвы. Л.: Гидрометеиздат, 1965. 144 с.
5. Яковлев Б.А. Климат Мурманска. Л.: Гидрометеиздат, 1972. 108 с.
6. Научно-прикладной справочник по климату СССР. Сер. 3. Многолетние данные. Ч. 1-6. Вып. 2. Мурманская обл. Л.: Гидрометеиздат, 1988. 317 с.
7. Гольцберг И.А. Микроклимат СССР. Л.: Гидрометеиздат, 1967. 282 с.
8. Мищенко З.А. Биоклимат дня и ночи. Л.: Гидрометеиздат, 1984. 280 с.
9. Романова Е.Н., Мосолова Г.И., Берсенева И.А. Микроклиматическая изменчивость основных элементов климата. Л.: Гидрометеиздат, 1977. 288 с.
10. Яковлев Б.А. Климат Мурманской обл. Мурманск: Кн. изд-во, 1961. 180 с.

11. Оценочный доклад об изменениях климата и их последствиях на территории РФ. Т. 1. Изменение климата. М.: Росгидромет, 2008. 230 с.
12. Закс Л. Статистическое оценивание. М.: Статистика, 1976. 598 с.
13. Кондратьев К.Я., Матвеев Л.Т. Основные факторы формирования острова // Докл. АН. 1998. Т. 367, № 2. С. 253-256.
14. Матвеев Л.Т., Матвеев ЮЛ. Формирование и особенности острова тепла в большом городе // Докл. АН. 2000. Т. 370, № 2. С. 249-252.
15. Хромов С.П., Мамонтова Л.И. Метеорологический словарь. Л.: Гидрометеиздат, 1974. 568 с.
16. Гирс А.А. Макроциркуляционный метод долгосрочных метеорологических прогнозов. Л.: Гидрометеиздат, 1974. 488 с.
17. Landsberg H.E. The urban climate. Int. Geophys. Ser. N 28. New York: Academic Press, 1981. 550 p.

ИССЛЕДОВАНИЕ СОСТАВА МАГНЕТИТОВ С РАЗЛИЧНЫХ МЕСТОРОЖДЕНИЙ

Дьячкова А.В.

Национальный исследовательский Томский госуниверситет, Томск
 lady_geology@sibmail.com

В работе использованы методы математической статистики для исследования магнетитов с различных месторождений. Выполнена группировка составов, сделана попытка объяснить ее причину.

Основой геологических построений являются эмпирические данные, которые в силу природной изменчивости свойств объектов и выборочного метода их опробования носят статистический характер. Это обстоятельство обуславливает применение статистических методов для обработки, анализа и представления многомерной геологической информации [3]. Многомерные статистические методы включают многомерный корреляционный анализ, множественный линейный и нелинейный регрессионный анализ, кластерный анализ, различные модификации факторного анализа, дискриминантный анализ [3]. В данной работе методы математической статистики использованы для изучения магнетитов железных руд.

Магнетит – главный минерал железных руд, попутно из него извлекаются Ti и V. Выделяют 3 группы месторождений железных руд: магматогенные, экзогенные и метаморфогенные [1]. Цель работы – с помощью методов математической статистики проанализировать особенности химического состава магнетитов железных руд с различных месторождений. Реализация процедур, построение графических, табличных и текстовых материалов базировались на использовании средств Microsoft Office, STATISTICA, Paint.net. Химические составы магнетитов взяты из [4] и представлены матрицей 43×10 (табл. 1).

Таблица 1. Рабочее окно программы Statistica. Исходные данные.

Месторождение	Фация	FeO	Fe ₂ O ₃	MgO	CaO	MnO	Al ₂ O ₃	TiO ₂	SiO ₂	ZnO	V ₂ O ₅
Кривой Рог	ФЗС	30.05	69.1	0.05	0	0	0.13	0	0.73	0	0
Кривой Рог	ФЗС	29.7	69	0.1	0	0.017	0	0.001	1.44	0	0
Кривой Рог	ФЗС	29.5	68.7	0.36	0	0.01	0	0.001	1.3	0	0
Кривой Рог	ФЗС	29.85	69	0.2	0	0.013	0	0.001	1.28	0	0
Кривой Рог	ФЗС	30.03	69.5	0.05	0	0	0	0	0.62	0	0
Кривой Рог	ФЗС	31.12	67.78	0.01	0.16	0.08	0	0.04	0.74	0	0
Кривой Рог	ФЗС	30.03	69.5	0.05	0	0	0	0	0.68	0	0
Кривой Рог	ФЗС	30.03	70	0.05	0	0	0	0	0	0	0
Кривой Рог	ФЗС	30.34	65.97	0.07	0.2	0.09	0.2	0.03	2.16	0	0
Кривой Рог	ФЗС	28.57	69.32	0	0	0	0.04	0.08	1.74	0	0
Кривой Рог	ФЗС	29.2	69.08	0.16	0.38	0	0.1	0	1.51	0	0
Кривой Рог	ФЗС	30.06	69	0.05	0.02	0	0	0	0.4	0	0
Кривой Рог	ФЗС	30.03	69.05	0	0.07	0	0	0	1	0	0
Кривой Рог	АФ	30.1	68.6	0.05	0.2	0.096	0.1	0	0.6	0	0
Кривой Рог	АФ	30.7	68.4	0.05	0.05	0.15	0.067	0	0.4	0	0
Кривой Рог	АФ	30.8	68.2	0.05	0.05	0.027	0.07	0	0.3	0	0
Кривой Рог	АФ	29.6	68.21	0.55	0.1	0.07	0.59	1	1.15	0	0
Кривой Рог	АФ	29.67	69.07	0.19	0.1-2	0.08	0.02	0.02	0.82	0	0
Кривой Рог	АФ	30.03	70	0.15	0.02	0	0	0	0.16	0	0
Кривой Рог	ГФ	30.06	68.5	0.1	0.02	0	0.3	0	0.38	0	0
Кривой Рог	ГФ	30.3	65.5	0.1	0.2	0.095	0.5	1.2	1.48	0	0
Кривой Рог	ГФ	30.3	67.6	0.1	0.1	0.064	0.3	0.3	1.1	0	0
Дашкесан	скарны	25.4	70.6	0.64	0.29	1.55	0.5	0	0.57	0	0
Дашкесан	скарны	26.9	66.3	0.42	1.08	1.12	0.5	0.08	1	0	0
Дашкесан	скарны	26.4	67.9	0.76	0.6	2.15	0.55	0.09	1.1	0	0
Дашкесан	скарны	25.4	68.9	0.69	1.26	1.33	0.35	0.07	0.9	0	0
Дашкесан	скарны	28.5	65.5	0.64	1.06	0.35	0.85	0.04	2.3	0	0
Дашкесан	скарны	28.1	65.7	0.4	1	0.18	0.45	0	2.7	0	0
Дашкесан	скарны	28.4	66.2	0.35	1.23	0.28	0.8	0.17	2	0	0
Дашкесан	скарны	29	64.8	0.47	1.75	0.28	0.1	0	2.5	0	0
Соколовско-Сарбайский	скарны	28.45	63.88	0.21	1.19	0.62	1.47	2.53	1.44	0	0.18
Сибирь	гидр.	26.94	68.46	1.29	0	0.06	2	0	0.67	0	0.04
Сибирь	гидр.	19.75	62.73	5.88	1.36	0.24	6.13	0.74	2.81	0	0.02
Сибирь	гидр.	18.86	66.86	6.26	0.4	0.18	4.33	0	2.72	0	0.02
Сибирь	гидр.	15.97	70.24	0.12	0	0.12	2.6	0.49	0.03	0	0.63
Сибирь	гидр.	11.83	70.25	13.32	0	0	4.76	0.42	0.09	0	0
Ковдор	у.о.	24.48	66.6	4.69	0	0.81	2.02	1.24	0	0.11	0.05
Ковдор	у.о.	21.95	67.03	6.28	0	0.54	3.27	0.77	0	0.06	0.1
Ковдор	у.о.	19.2	66.92	7.92	0	0.76	4.42	0.58	0	0.1	0.1

Ковдор	у.о.	28.43	63.76	3	0	0.45	1.25	2.97	0	0	0.14
Ковдор	у.о.	26.17	67.05	3.72	0	0.42	1.75	0.79	0	0.03	0.07
Качканар	осн.	30.9	66.92	0.38	0	0.11	0.4	0.93	0	0.1	0.4
Качканар	осн.	30.89	56.5	2.26	0	0.4	4.58	4.92	0.34	0	0.44

Примечание: ФЗС – железистые кварциты зеленосланцевой фации; АФ – амфиболитовой фации; ГФ – гранулитовой фации; скарны – магнетитовые руды в скарнах; гидр. – магнетитовые руды гидротермально-метасоматического типа; у.о. – магнетитовые руды в ультраосновных породах; осн. – титаномагнетитовые руды в основных породах.

Исследование основано на использовании кластерного анализа. Он подразумевает разбиение совокупности на определенное количество групп. Разделение на группы происходит путём анализа связи в распределении случайных величин [2]. Данные необходимо стандартизировать. В итоге получена матрица, где все переменные приведены к нулевому среднему и стандарту, равному единице (табл. 2).

Таблица 2 (сокр.). Программа STATISTICA. Стандартизированные данные.

№	Месторождение	Фация	FeO	Fe ₂ O ₃	MgO	CaO	MnO	Al ₂ O ₃	TiO ₂	SiO ₂	ZnO	V ₂ O ₅
1	Кривой Рог	ФЗС	0.584	0.632	-0.507	-0.172	-0.632	-0.580	-0.476	-0.271	-0.332	-0.388
2	Кривой Рог	ФЗС	0.504	0.593	-0.488	-0.172	-0.596	-0.662	-0.475	0.577	-0.332	-0.388
3	Кривой Рог	ФЗС	0.458	0.475	-0.394	-0.172	-0.610	-0.662	-0.475	0.410	-0.332	-0.388
4	Кривой Рог	ФЗС	0.538	0.593	-0.452	-0.172	-0.604	-0.662	-0.475	0.386	-0.332	-0.388
5	Кривой Рог	ФЗС	0.579	0.790	-0.507	-0.172	-0.632	-0.662	-0.476	-0.403	-0.332	-0.388
6	Кривой Рог	ФЗС	0.828	0.113	-0.521	-0.161	-0.461	-0.662	-0.434	-0.259	-0.332	-0.388
7	Кривой Рог	ФЗС	0.579	0.790	-0.507	-0.172	-0.632	-0.662	-0.476	-0.331	-0.332	-0.388
8	Кривой Рог	ФЗС	0.579	0.987	-0.507	-0.172	-0.632	-0.662	-0.476	-1.144	-0.332	-0.388
9	Кривой Рог	ФЗС	0.650	-0.599	-0.499	-0.159	-0.440	-0.537	-0.444	1.438	-0.332	-0.388
10	Кривой Рог	ФЗС	0.246	0.719	-0.525	-0.172	-0.632	-0.637	-0.392	0.936	-0.332	-0.388

Исследуем данные с целью проверки наличия магматогенных, экзогенных и метаморфогенных магнетитов. Найдены средние значения содержания элементов по кластерам (рис. 1).

На графике можно видеть спектры состава всех групп, то есть провести их визуальное сравнение. Результаты показывают три группы магнетитов: высокоглиноземистый, высокожелезистый и высокомарганцевый. Подтвердим результат кластерного анализа дискриминантным анализом. Предварительно используем дисперсионный анализ. В его основе лежит предположение о том, что одни переменные могут рассматриваться как причины (факторы, независимые переменные), другие – как следствия (зависимые переменные). Суть анализа заключается в расчленении общей дисперсии признака на компоненты, обусловленные влиянием факторов, и проверке гипотез о значимости их влияния на исследуемый признак. Сравнивая компоненты дисперсии, можно определить, какая доля общей вариативности признака обусловлена действием факторов [5].

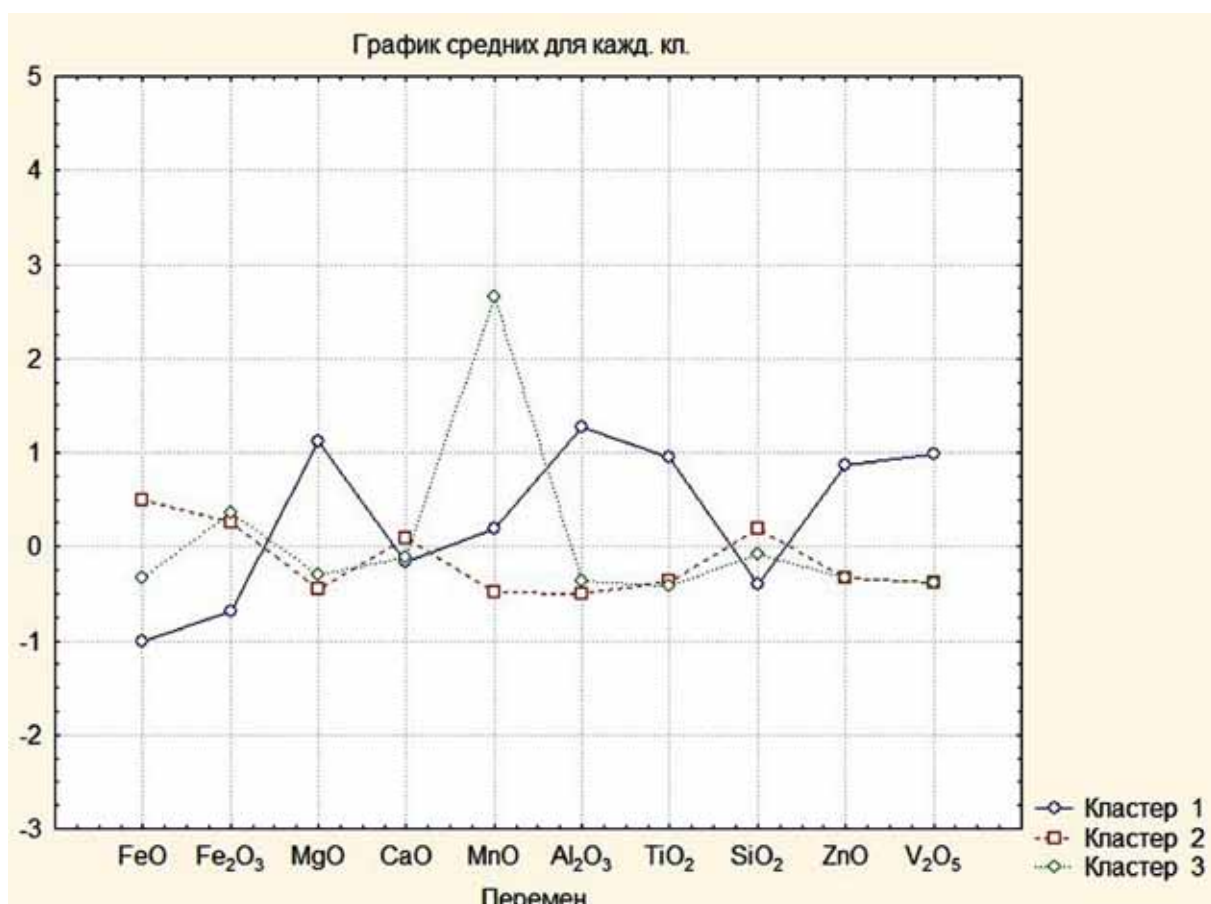


Рис. 1. Гистограмма средних составов.

Таблица 3. Дисперсионный анализ.

	Между	сс	Внутри	сс	F	Значим.
FeO	28.16883	5	13.83117	37	15.07	0.000000
Fe ₂ O ₃	16.22772	5	25.77228	37	4.66	0.002129
MgO	30.29366	5	11.70634	37	19.15	0.000000
CaO	41.98482	5	0.01518	37	20463.54	0.000000
MnO	35.98762	5	6.01238	37	44.29	0.000000
Al ₂ O ₃	33.24342	5	8.75658	37	28.09	0.000000
TiO ₂	15.54661	5	26.45339	37	4.35	0.003262
SiO ₂	26.46161	5	15.53839	37	12.60	0.000000
ZnO	20.79502	5	21.20498	37	7.26	0.000080
V ₂ O ₅	20.93799	5	21.06201	37	7.36	0.000071

Из табл. 3 видно, что кластеры различаются по всем основным оксидам с незначительной или нулевой ошибкой, лишь Ti и Fe³⁺ разных кластеров значимо не различаются. При деление на кластеры программа STATISTICA распределила данные таким образом: №№ 1-22 и 27-30 относятся к кластеру 2; №№ 23-26 – к кластеру 3, №№ 31 и 33-43 – к кластеру 1. Анализ результатов показал, что разделение магнетитов на кластеры по составу не совпадает с разделением на генетические типы. Далее детально рассмотрен каждый кластер, изучены распределения случайных величин в выборках.

Таблица 4. Описательные статистики кластера 1.

	N	Среднее	Мин.	Макс.	Станд. откл.
FeO	12	23.07333	11.83000	30.90000	6.130836
Fe ₂ O ₃	12	65.72833	56.50000	70.25000	3.699695
MgO	12	4.50333	0.12000	13.32000	3.815448
CaO	3	0.98333	0.40000	1.36000	0.512282
MnO	11	0.42273	0.11000	0.81000	0.244830
Al ₂ O ₃	12	3.08167	0.40000	6.13000	1.758495
TiO ₂	11	1.48909	0.42000	4.92000	1.412689
SiO ₂	6	1.23833	0.03000	2.81000	1.287780
ZnO	5	0.08000	0.03000	0.11000	0.033912
V ₂ O ₅	11	0.19545	0.02000	0.63000	0.202601

По табл. 4 наблюдается преобладание Mg и Al. К первому кластеру относятся магнетитовые руды гидротермально-метасоматического типа, магнетитовые руды в ультраосновных и основных породах.

Таблица 5. Описательные статистики кластера 2.

	N	Среднее	Мин.	Макс.	Станд. откл.
FeO	27	29.66704	26.94000	31.1200	0.91590
Fe ₂ O ₃	27	68.13852	64.80000	70.0000	1.50004
MgO	25	0.22560	0.01000	1.2900	0.28329
CaO	18	6.03389	0.02000	102.0000	23.95545
MnO	17	0.11424	0.01000	0.3500	0.10167
Al ₂ O ₃	17	0.38924	0.02000	2.0000	0.49154
TiO ₂	13	8.06792	0.00100	102.0000	28.22585
SiO ₂	26	1.16000	0.16000	2.7000	0.71920
ZnO	0	0	0	0	0
V ₂ O ₅	1	0.04000	0.04000	0.0400	0

В кластере 2 (табл. 5) наблюдаются высокие значения Ca и Ti, что может быть объяснено низкотемпературным метаморфизмом. Ко второму кластеру относятся железистые кварциты зеленосланцевой, амфиболитовой и гранулитовой фаций метаморфизма, а также магнетитовые руды в скарнах. Магнетиты железистых кварцитов амфиболитовой и гранулитовой фаций нередко характеризуются повышенными содержаниями Ti и Mg за счет развития структур распада твердого раствора ильменита и шпинели в магнетите [4]. Магнетиты других генетических типов, как правило, образуются при более высоких температурах, чем магнетиты железистых кварцитов, и характеризуются повышенным изоморфизмом Ti, Mg, Zn, V, Al. Это видно в табл. 4 (кластер 1). Наиболее существенными являются изоморфные Mg и Al, причем благодаря замещению Fe²⁺ на Mg образуются магнетиты с высоким содержанием молекулы Mg²⁺Fe²⁺O₄ [4]. В кластере 3 (табл. 6) наблюда-

ется высокое содержание Mn. Он содержится почти во всех железных рудах в виде самостоятельных минералов или изоморфной примеси. К кластеру 3 относятся магнетиты в скарнах

Таблица 6. Описательные статистики кластера 3.

	N	Среднее	Мин.	Макс.	Станд. откл.
FeO	4	26.02500	25.40000	26.90000	0.750000
Fe ₂ O ₃	4	68.42500	66.30000	70.60000	1.802544
MgO	4	0.62750	0.42000	0.76000	0.146828
CaO	4	0.80750	0.29000	1.26000	0.443424
MnO	4	1.53750	1.12000	2.15000	0.444475
Al ₂ O ₃	4	0.47500	0.35000	0.55000	0.086603
TiO ₂	3	0.08000	0.07000	0.09000	0.010000
SiO ₂	4	0.89250	0.57000	1.10000	0.229982
ZnO	0	0	0	0	0
V ₂ O ₅	0	0	0	0	0

В результате сравнения кластеров сделан вывод: кластер 1 – высокоглиноземистый, 2 – высокотитанистый, 3 – высокомарганцевый. Далее использован дискриминантный анализ. Определим лямбду Уилкса – отношение внутригрупповой суммы квадратов к общей, характеризующее дисперсию оценок дискриминантной функции, не обусловленную различиями между группами. Единичное значение она принимает, если средние значения равны. Значения, близкие к нулю, означают, что внутригрупповая дисперсия мала по сравнению с общей. Чем меньше лямбда, тем лучше разделение на группы [5]. Получены следующие значения: лямбда = 0.0132744; приближенное значение F-статистики (с числом степеней свободы 20 и 62) = 23.80636; p (уровень значимости F-критерия) < 0.00001. Построена матрица классификаций (табл. 7). Разделение на кластеры выполнено без ошибок перекрытия, т.е. с 100 % правильностью.

Таблица 7. Матрица классификации.

Строки – наблюдаемые, столбцы – предсказанные классы.

	%	G_1:1	G_2:2	G_3:3
G_1:1	100.0000	12	0	0
G_2:2	100.0000	0	27	0
G_3:3	100.0000	0	0	4
Всего	100.0000	12	27	4

Наиболее универсальная классификация может быть получена методом главных компонент. С помощью специальной вкладки собственные значения можно увидеть доли изменчивости многомерной случайной величины, описываемой той или иной главной координатой (табл. 8).

Таблица 8. Собственные значения матрицы корреляции
(основные переменные).

№	Собств. знач.	% общей	Кумулят.	Кумулят.
1	3.325556	33.25556	3.32556	33.2556
2	1.842840	18.42840	5.16840	51.6840
3	1.470215	14.70215	6.63861	66.3861
4	1.025160	10.25160	7.66377	76.6377
5	0.952213	9.52213	8.61598	86.1598
6	0.689294	6.89294	9.30528	93.0528
7	0.530021	5.30021	9.83530	98.3530
8	0.096238	0.96238	9.93154	99.3154
9	0.048697	0.48697	9.98024	99.8024
10	0.019765	0.19765	10.00000	100.0000

Главная компонента 1 принимает на себя 33.26 % дисперсии, две – более 51 %, три – более 66 %. Далее исследована система в двух первых координатах, т.е. ситуация сведена к двумерной с небольшой потерей информации (рис. 2).

1-я главная компонента интерпретирована как фактор накопления в магнетитах Ca, Si и Fe^{2+} . Этот процесс определяет более 33 % изменчивости объектов. 2-я главная координата имеет нагрузку более 18 % и влия-

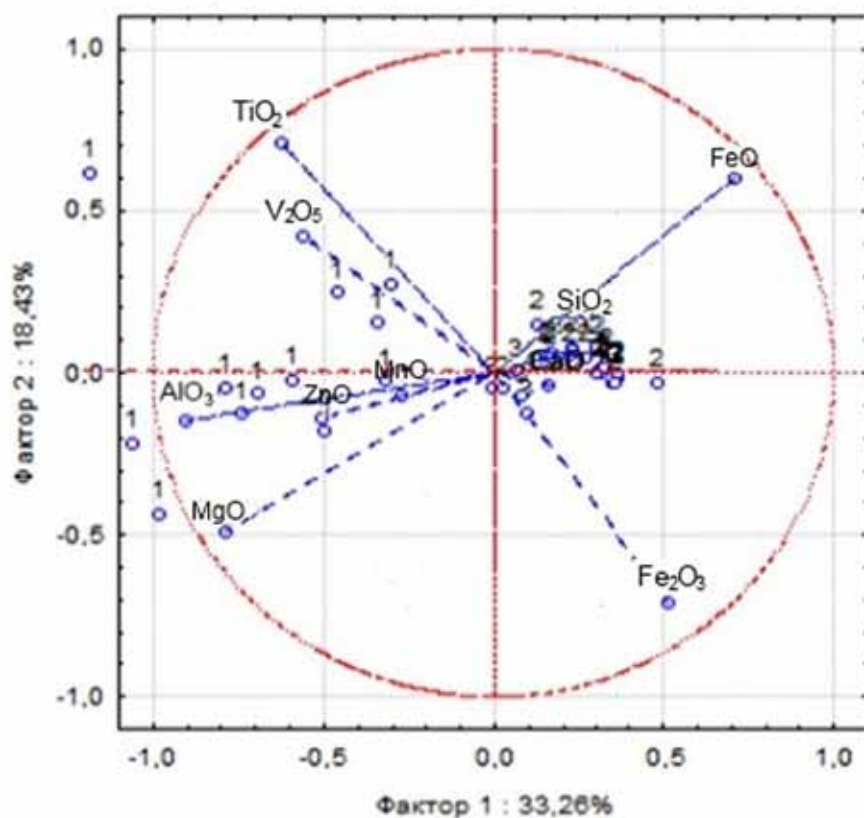


Рис. 2. Совмещенный график проекций наблюдений и переменных на факторную плоскость.

ет на обогащение магнетитов V и Ti. Данные 3 кластера сосредоточены в центральной части графика (рис. 2) и, возможно, характеризует скарновый процесс, следующий за становлением интрузий и проявляющийся во всех разновидностях пород, в т.ч. с повышенной основностью. Результаты показывают, что разделение магнетитов на кластеры по химическому составу не совпадает с их разделением по генезису. По результатам исследования выделяются магнетиты: высокоглиноземистые – в ультраосновных и основных породах, руды гидротермально-метасоматического типа; высокотитанистые – железистые кварциты, магнетитовые руды в скарнах; высокомарганцевые – магнетитовые руды в скарнах.

Список литературы

1. Железные руды // Энциклопедический словарь Брокгауза и Ефрона. СПб., 1890-1907.
2. Мандель И.Д. Кластерный анализ. М.: Финансы и статистика, 1988. 176 с.
3. Мясников Ф.В. Применение многомерных статистических методов для выполнения палеогеологических реконструкций при алмазопроисловых работах на закрытых территориях // Разведка и охрана недр. 2008. № 2. С. 1-25.
4. Пирогов Б.И., Пирогова В.В. Минералогическое исследование железных и марганцевых руд. М.: Недра, 1973. 115 с.
5. Чини Р.Ф. Статистические методы в геологии. М.: Мир, 1986. 189 с.

ПОРЯДОК И ХАОС В ГЕОТЕКТОНИКЕ

Ильченко В.Л.

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

Описан процесс тектонического расслоения корово-мантийной оболочки Земли как колебательной системы с попыткой отыскать среди геотектонических эффектов признаки перехода от порядка к хаосу (в универсальности Фейгенбаума – число δ). Анализом описанного процесса были выявлены лишь переходы от хаоса к порядку во времени с выводом, что в качестве управляющего параметра в геотектонике следует рассматривать время. Признак универсальности Фейгенбаума, применимой в прогнозах поведения термодинамических систем при переходе от порядка к хаосу, не обнаружен.

The process of tectonic layering of the crust-mantle shell of the Earth as an oscillatory system was described with an attempt to find the signs of transition from order to chaos among the geotectonic effects (in Feigenbaum's universality – the number of δ). The analysis of the described process revealed only a transition from chaos to order with time and the conclusion that the time must be considered as a control parameter in geotectonics. The feature of universality of Feigenbaum applicable to the prediction of thermodynamic systems behavior at the transition from order to chaos was not detected.

Введение

Рассматривая поведение детерминированной по времени физической системы, чьё будущее состояние определяют начальные условия, а последовательные состояния непрерывно развиваются одно из другого, естественно предположить, что детерминированное движение достаточно регулярно и далеко от хаотичности. Но ещё на грани XIX-XX вв. А. Пуанкаре открыл, что хаотическое движение может возникать в механических системах, чью эволюцию во времени определяют уравнения Гамильтона. Сейчас под детерминированным хаосом подразумевают нерегулярное движение в нелинейных системах, динамические законы которых однозначно определяют их эволюцию состояния во времени при известной предыстории [19]. Она имеет в геологии важнейшее значение, «белых пятен» в ней почти не осталось и, видимо, эпоха «тотального» детерминированного хаоса на Земле завершилась в «доисторический» период. Современная геодинамика далека от хаотичности, хотя на Земле ещё много сейсмоактивных районов и землетрясения всё ещё не предсказуемы.

Универсальность поведения нелинейных систем Фейгенбаума даёт теоретическую возможность предсказывать статистические свойства систем, чья динамика состоит в регулярном (по мере роста управляющего параметра) разрушении прежде устойчивых циклов с их заменой циклами с удвоенным периодом; удвоение продолжается до бесконечности, вызывая хаотическое поведение. Хаотизацию множества нелинейных систем количественно описывают универсальными числами: $\delta = 4.669201\dots$, $\alpha = 2.502907\dots$ [17]. Универсальность Фейгенбаума пригодна для рассмотрения многих естественнонаучных проблем «детерминированного хаоса» [19]: изменения в популяциях от поколения к поколению, шумы в механических, электрических и химических осцилляторах. Видимо, эта универсальность позволяет исследовать различные гамильтоновы системы, которые описываются классической механикой, например, Солнечную систему [17]. Земля – динамическая система в составе Солнечной системы и, значит, универсальность Фейгенбаума может быть проявлена в геотектонике: динамические эффекты в эволюции земной коры и т.п.

На Земле большинство динамических процессов протекает нелинейно [8]. Видимо, к ним относится и тектоническое расслоение земной оболочки как колебательной системы, регулярно возбуждаемой лунным приливом и затухающей в динамических условиях стоячей волны – с удвоением циклов и появлением множества неподвижных узлов, по которым развиваются тектонические границы. Они во многом предопределяют развитие сейсмического процесса и весь дальнейший порядок разрушения корово-мантийной оболочки [10].

Тектоническое расслоение

Тектоническое расслоение земной оболочки происходит из-за регулярного воздействия лунных приливов. Сила этих приливов зависит от массы Луны и расстояния от неё до Земли. Циклические изменения расстояния между Землёй и Луной контролирует масса Солнца. Вариации радиуса орбиты Луны компенсируются её орбитальной скоростью, делая постоянным момент инерции: $M = mvr = \text{const}$ (m – масса Луны, v – скорость, r – радиус орбиты). Солнечная масса контролирует силу лунного прилива, чья глубина воздействия в каждой точке Земли зависит от средней плотности её корово-мантийной оболочки [10]. Если управляющий параметр колебательной системы влияет на накопление и пространственное распределение приливно-волновой энергии во времени, его можно попытаться найти детальным исследованием развития процесса тектонического расслоения и, видимо, управляющим параметром в геодинамической эволюции является Время (4-е измерение), необратимость течения которого хотя и подвергается сомнению [15], но пока ещё не опровергнута.

Массу планеты (силу притяжения) определяют её радиус – r и плотность – ρ . Механизм тектонического расслоения построен на проведении аналогии между земной оболочкой как затухающей колебательной системой стоячих волн и затуханием колебания в натянутой струне; взаимодействие (обмен энергией) масс Земли и Луны осуществляется через силовую линию («струну»), «натянутую» между их центрами. Приходящий лунный прилив создаёт во фрагменте «струны» вдоль земного радиуса (вертикальная компонента поля напряжений в земной коре: $\sigma_z = \sum \rho_i h_i$, где ρ_i – плотность породы, h_i – мощность породного слоя) растяжение с разуплотнением вещества, приподнимающее земную поверхность на ≈ 0.5 м; тот же эффект – колебание – возникает в струне от удара.

Глубину воздействия лунного прилива R_n (R_n – длина «струны») в оболочке Земли определяет принцип эквивалентности гравитирующих масс (ЭГМ): при гравитационном взаимодействии тел, в каждом теле возникает область возмущений, масса которой эквивалентна массе источника возмущений [10] (не путать с принципом эквивалентности гравитационной и инертной масс Эйнштейна [4]). Это отношение произведения лунного радиуса на среднюю плотность лунных пород ($r_L \cdot \rho_L = \text{const}$, т.к. Луна всегда «смотрит» на Землю одной стороной) к средней плотности вещества в составе земного радиуса: $R_n = r_L \cdot \rho_L / \rho_3$ [10]; причём средняя плотность ρ_3 двух «соседних» радиусов может сильно различаться. Реакция горных пород на приливное воздействие – всплеск электромагнитной и акустической эмиссии – длится около 4 часов; это время одинаково в любой точке наблюдения на поверхности Земли, независимо от широты и долготы [1]. Высшие субгармоники приливной эмиссии подавляются автоколебаниями Земли с близкими частотами (фликкер-шум), поэтому истинный размер наблюдаемого (4 ч) периода затухания должен быть более продолжительным.

Главную моду приливно-волнового всплеска M_0 ($R_n = M_0$) ограничивают отражающие поверхности – кровля и подошва земной оболочки (Главная колебательная система – слой ГКС), между которыми, с затуханием колебаний, возникают всё новые узлы и моды (субгармоники) с последовательным их делением пополам: $M_n = M_0/2^n$, M_n – мощность n-й моды расслоения [10]. Каждая мода образует свою «номинальную» границу в середине «старшей» моды: для $M_1 = (M_0/2) - 1$ граница, у M_2 их уже 2 (на каждой половинке мод M_1), $M_3 - 4$, $M_4 - 8$ и т. д.; число границ моды M_n образует степенную последовательность: $n = 2^{n-1}$ ($n = 1, 2, 3, \dots$); интересно, для $M_0: n = 2^{0-1} = 1/2$. Последовательность всех длин мод образует геометрическую прогрессию.

Колебания в пучностях стоячей волны (пучности скорости [12]) «отжимают» часть упругой энергии к узловым точкам (пучности деформации [12]), превращая их в концентраторы напряжений. Порядок затухания стоячей волны формирует иерархию узлов по времени их появления, т.е. по «возрасту» узла можно оценить количество накопленной в нём упругой энергии; отсюда также следует, что главные породные концентраторы напряжений обретаются у поверхности Земли и в подошве слоя ГКС (средняя мощность $M_0 = 1600$ км). Иерархия узлов рождает иерархию элементов расслоения по мощности: например, глубину границы Мохо (мощность земной коры) определяет 1-я сверху тектоническая граница M_5 [10]. Пространственное распределение узловых точек предопределяет развитие «структуры» поля напряжений в земной оболочке. Слой ГКС (и элементы расслоения) имеет фрактальное слоистое строение, а его мощность отличается латеральной изменчивостью – из-за разных структурных дефектов и пространственных вариаций плотности вещества корово-мантийной оболочки [10]. Эти же вариации объясняют прерывистое строение всех сейсмологических границ (кроме Мохо и раздела рыхлых осадков с консолидированными породами фундамента [18]).

Механизм тектонического расслоения был обнаружен при создании модели строения земной коры Печенгского блока (ЗКПБ) по результатам петрофизических исследований, а его справедливость доказана путём наложения модели на «динамический» разрез Кольской сверхглубокой скважины (СГ-3), когда было установлено вполне удовлетворительное совпадение ($> 74\%$) модельных границ с динамически активными породными интервалами – концентраторами избыточно высоких напряжений в разрезе СГ-3 (глубины границ и мощности элементов расслоения найдены по формуле: $M_n = M_0/2^n$, M_n – мощность n-й моды расслоения, $M_0 = 42 \pm 2$ км – мощность ЗКПБ, по сейсмологическим данным, табл.1) [10].

Динамически активные породные интервалы в стволе скважины выявляет скважинная геофизика; идеальна для этого кавернометрия (профилеметрия), которая непрерывно фиксирует все вариации диаметра вдоль ствола скважины. Эти вариации – следствие избирательного вывала пород из стенок скважины – разновидность тектоно-кессонного эффекта [6]; главная

причина этой избирательности – заметно повышенный уровень напряжённого состояния пород в некоторых точках разреза. Эти породные концентраторы напряжений образуются в узловых точках стоячей волны. Крупные породные вывалы могут также возникать на контактах пород с разной прочностью: например, каверны (№№ 12, 13) в интервале глубин 1.7-1.9 км СГ-3 в зоне контакта алевролитов с метабазами [5].

Таблица 1. Граничные параметры модели расслоения ЗКПБ (первые 10 мод).

№ моды	M_0	M_1	M_2	M_3	M_4	M_5	M_6	M_7	M_8	M_9	M_{10}
Мощность, км	42±2	21±1	10.5±0.5	5.25±0.25	2.625±0.125	1.312±0.062	0.656±0.031	0.328±0.015	0.164±0.0075	0.082±0.0037	0.041±0.0018

Подтверждение верности механизма тектонического расслоения ($M_n = M_0/2^n$) привело к идее его применения «в обратном порядке», например, определения мощности колебательной системы M_0 по размеру «конечной» моды ($M_n = M_k$): $M_0 = M_n \cdot 2^n$; M_k получают из графика кавернометрии измерением расстояния между соседними узловыми точками (которые маркируют породные вывалы) в однородной по структуре и минеральному составу толще, номер моды (n) находят в таблице [10]. На практике всё оказалось сложнее: главная проблема – поиск подходящего для измерений интервала (ещё одно следствие хаотических пространственных вариаций плотности пород земной оболочки). Однородные по структуре и минеральному составу породные толщи встречаются нечасто, условие достаточной мощности (для измерения M_k) также усложняет поиск. Кроме того, скважины обычно проходят с отбором керна лишь из некоторых интервалов, а качество каротажных работ, которое удовлетворяет заказчика, очень часто оказывается недостаточным для наших целей.

Затруднения, связанные с поиском соседних одноименных (по n) узловых точек, которые (теоретически) в одних и тех же горных породах примерно на одной глубине должны отличаться породными вывалами примерно одного размера, удалось решить следующим образом. В иерархии тектонического расслоения каждая 2-я граница M_n совпадает по глубине со «старшей» границей M_{n-1} ($2M_n = M_{n-1}$) и, так или иначе, основы тектонических границ в породной толще формируются при участии всех субгармоник затухания стоячей волны. Это обстоятельство всё упрощает: если из-за низкого качества кавернограммы невозможно точно измерить длину конечной моды (M_k), достаточно посчитать количество вывалов в петрографически однородном интервале и разделить мощность интервала на это количество. Возьмём на пробу два километровых отрезка кавернограммы СГ-3 из монографии [13] для интервалов, довольно однородных по петрографическому составу (рис.1).



Рис. 1. Определение средней длины M_k подсчётом на кавернограмме количества вывалов на 1 километр разреза СГ-3 в глубинных интервалах 3-4 и 8-9 км из [13].

По результатам подсчёта, верхний глубинный интервал (3-4 км, актинолитизированные диабазы) содержит 12, а нижний (8-9 км, биотит-плагиоклазовые гнейсы) – 24 вывала. В результате деления: $1000\text{ м}/12 = 83.333(3)\text{ м}$ и $1000\text{ м}/24 = 41.666(6)\text{ м}$ получены «средние» значения M_k , соответствующие модам M_9 и M_{10} (табл.1: $M_0 = 42 \pm 2\text{ км}$ – эквивалент моды M_5 в иерархии расслоения ГКС). Подставив наши M_k в формулу $M_0 = M_n \cdot 2^n$, имеем: $M_0 = 42.666(6)\text{ км}$; итог более чем удовлетворительный. Аналогичные исследования были успешно проведены на каротажных данных по Уральской сверхглубокой скважине (СГ-4) и ряде неглубоких скважин в «молодых» (PZ-MZ) осадочных породах нефтегазоносных структур Калининградской области с вычислением средней длины M_k по кавернограммам со значительно более коротких (100-200 м) породных интервалов (полученные глубины границы Мохо повсеместно подтверждены результатами глубинного сейсмического зондирования).

Проникновение человека в недра Земли технологически ограничено глубиной 10-12 км (1-я сверху граница M_7 в иерархии расслоения ГКС или 1-я сверху граница M_2 в расслоении земной коры) и напряжённое состояние вблизи «длинных» мод ($\geq M_{7(2)}$) нас пока не сильно волнует. Особый интерес (необходимость изучения) вызывают границы «коротких» мод, определяющие «структуру» поля напряжений именно в верхах земной коры (источник минерального сырья); некоторые из этих границ особенно интересны своей способностью к накоплению избыточно высоких (опасных) напряжений в породах, что повышает риск во время проведения горных работ. Подавляющее большинство таких границ остаётся незаметным для современных поверхностных геофизических методов (сейсмология и т.п.).

Показанный выше способ позволяет довольно точно находить глубину залегания границы Мохо (для земной коры – M_0) по размеру M_k , взятой с кавернограммы даже неглубокой (1-3 км) скважины. Зная M_0 , нетрудно посчитать мощность слоя ГКС в устье скважины и вероятную глубину всех тектонических границ – концентраторов избыточных напряжений (в т.ч. зоны аномально высоких пластовых давлений – АВПД). Но этим способом нельзя предсказать *точно*, на какой именно границе концентрация напря-

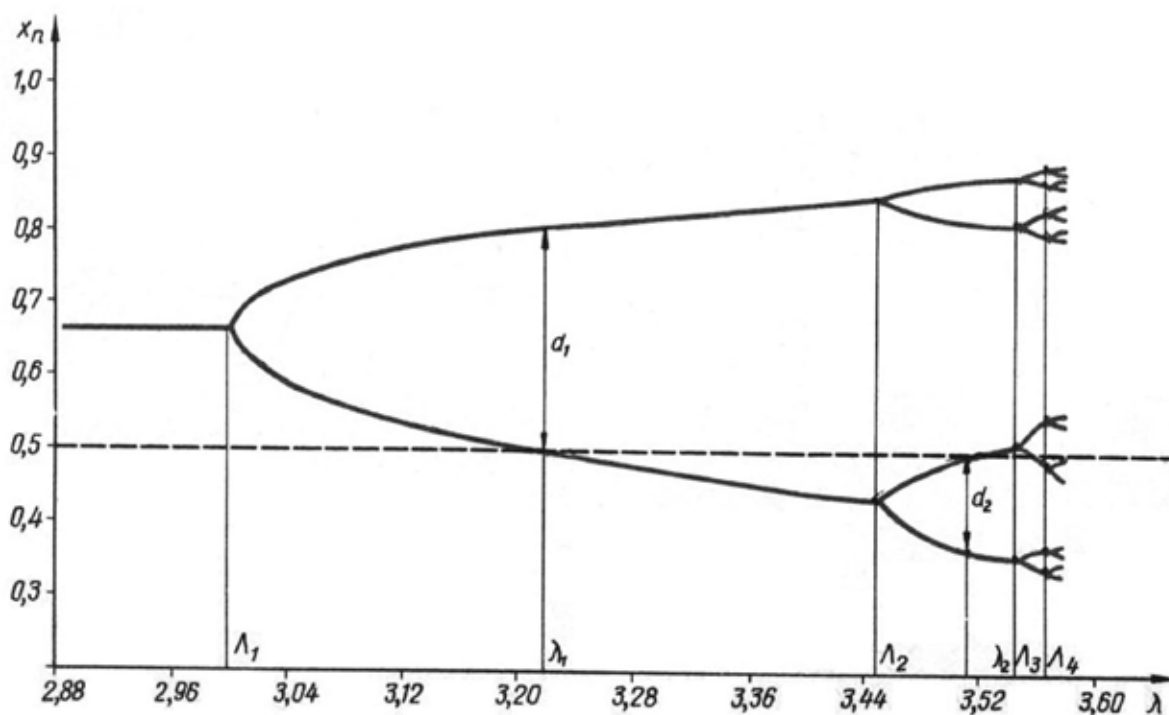


Рис. 3. Усложнение устойчивых циклов в отображении $x_{n+1} = \lambda x_n (1 - x_n)$, происходящее в результате бифуркаций удвоения периода из [2].

по мере затухания колебательной системы происходит то же удвоение количества узлов при сокращении длин мод (табл. 1).

Универсальное число Фейгенбаума: $\delta = 4.6692016\dots$ означает «скорость перехода к хаотическому движению» (а также – знаменатель геометрической прогрессии) и вычисляется по формуле $\delta_n = (\Lambda_{n+1} - \Lambda_n) / (\Lambda_{n+2} - \Lambda_{n+1})$; как правило, δ_n совпадает с δ – с точностью до нескольких значащих цифр – уже после небольшого числа удвоений периода [17]. Поскольку универсальность применима к любым колебательным системам с удвоением периода при переходе от порядка к хаосу (разрушению), было решено попытаться найти что-то подобное в тектоническом расслоении земной оболочки, где самым похожим на амплитудное распределение (рис. 2) является распределение породных вывалов по разрезу с весьма заметными вариациями их размеров (рис. 1). Цель эксперимента: получить число δ_n , подставляя в формулу вместо параметров Λ_n, Λ_{n+1} и Λ_{n+2} (точки удвоения) размеры вывалов на границах соседних мод расслоения M_n, M_{n+1} и M_{n+2} (граничная иерархия: чем «старше» узел, тем больше упругой энергии он накопил, что должно прямо влиять на размер вывала) и оценить его близость к числу $\delta = 4.6692016\dots$

Проанализирован обширный геофизический материал: СГ-3, СГ-4, 3 скважины в Калининградской обл. и 6 – на шельфе Баренцева моря, но близкого к $\delta = 4.6692016\dots$ результата получить не удалось (в среднем: $\delta_n \approx 2$, чего следовало ожидать при образовании геометрической прогрессии по мере деления на 2 в расчётах границ), хотя для анализа специально выбирались однородные породные интервалы. Неудача вычисления δ по размеру соседних вывалов может иметь другие причины (вариации прочности пород, низкое

качество кавернограмм и т.п.). Но доказательство механизма тектонического расслоения земной оболочки (построение модели ЗКПБ) и прочие признаки динамических систем СК (фрактальность строения, иерархичность и т.п.) предполагают, что способ вычисления универсальных чисел $\delta = 4.669201\dots$ и $\alpha = 2.502907\dots$ должен существовать.

Рассмотрим график универсальности Фейгенбаума (рис. 3) [2], содержащий прямые указания для получения числа δ (из параметров Λ_n , Λ_{n+1} , и Λ_{n+2} , формула выше) и числа α – из параметров d_n и d_{n+1} , по формуле: $d_n/d_{n+1} \rightarrow \alpha$. Графические «аналоги» параметров Λ_n и d_n можно попытаться отыскать в модели ЗКПБ, если как-то отделить «устойчивые» циклы от «неустойчивых». Признаком «неустойчивости» можно считать «усталость» горных пород на границах длинных мод, тогда «устойчивые» циклы можно связать с границами коротких мод расслоения, совпадающих с максимальными породными вывалами из стенок скважины.

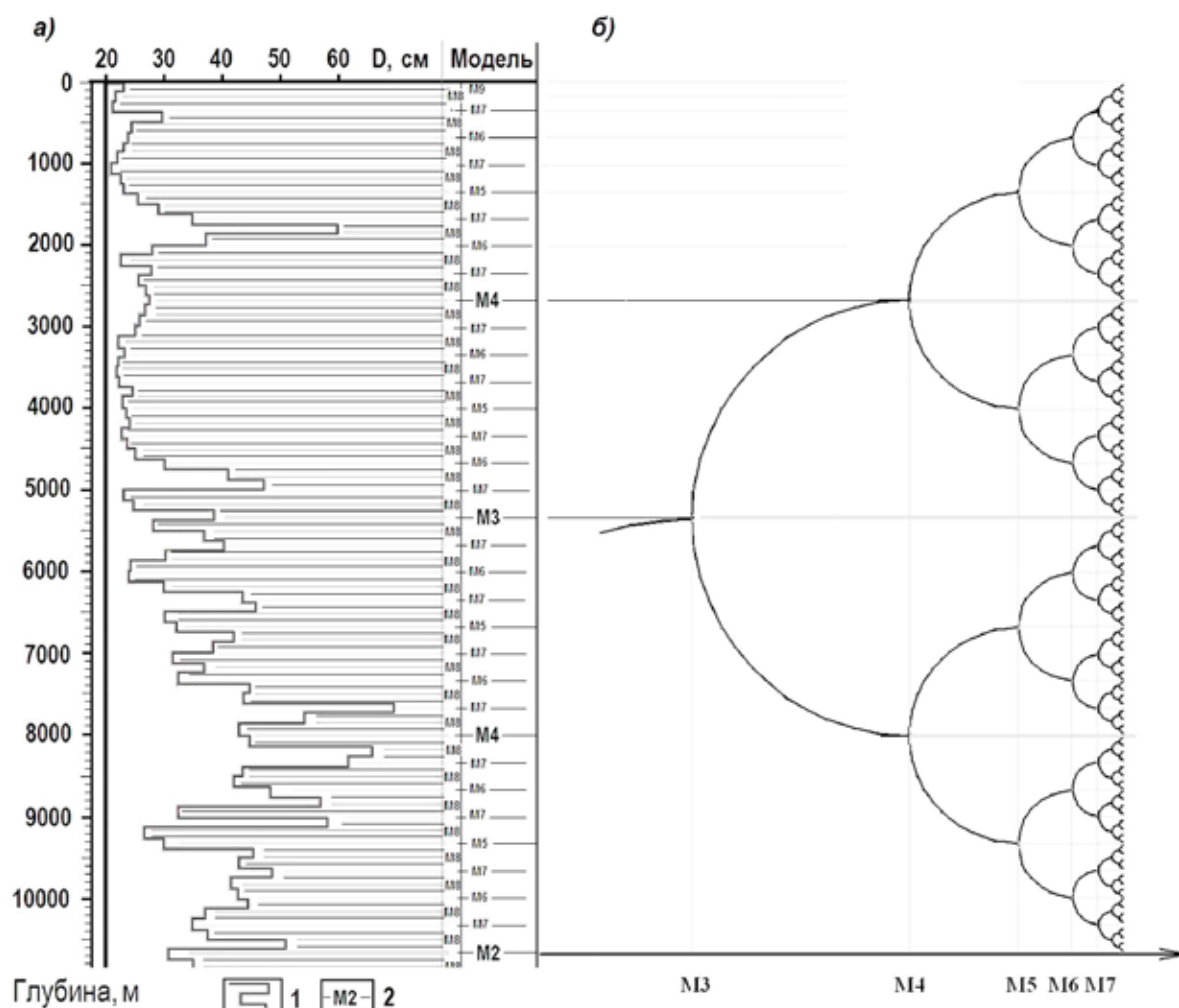


Рис. 4. Модель тектонического расслоения ЗКПБ: а) наложение кавернограммы СГ-3 на верхний фрагмент (0-11 км) модели, 1 – кавернограмма, 2 – модельные границы; б) усложнение устойчивых циклов в результате бифуркаций (удвоение периода), «устойчивые» циклы показаны чёрным цветом, «неустойчивые» – серым.

Попытка построить график, отражающий динамику развития процесса расслоения (рис. 4) по аналогии с построением последовательности Фейгенбаума (рис. 3), не принесла никаких положительных результатов, чего и следовало ожидать, полагая время управляющим параметром и при отсутствии данных о периодичности бифуркаций. Возможно, формулы для нахождения констант можно использовать (и константы обнаружатся), если на горизонтальную шкалу (рис. 4 б) нанести время, чтобы каждая метка (M_n) означала точку бифуркации. Возможно, информацию такого рода содержат результаты наблюдения электромагнитной и акустической эмиссии в откликах земной коры на приливно-волновое воздействие, если их подвергнуть спектральному анализу. .

Обсуждение

Эксперименты с кавернограммами отняли много времени, поэтому для их «оправдания» проведён критический анализ. Волновой процесс в представленном натянутой струной фрагменте земного радиуса R_n , в классической механике, определяют: плотность (ρ) и упругие модули (Юнга – E и сдвига – G); от этих же параметров зависит скорость распространения продольных ($c_l^2 = E/\rho$) и поперечных ($c_t^2 = G/\rho$) волн в тонком стержне и натянутой струне [12]; средняя плотность пород определяет глубину влияния лунного прилива в земной оболочке. Плотность – не термодинамический параметр, но она связана с температурой через эффект теплового расширения: при нагревании ($+dT$) объём тела растёт, а плотность, соответственно, снижается ($-d\rho$). Значит, разуплотнение пород во всплеске приливной волны можно рассматривать как термодинамический эффект – внезапное быстрое нагревание с остыванием в ритме затухающей стоячей волны (за время $T \geq 4$ ч). Но и тогда затухание всплеска колебательной системы во времени – скорее наоборот – олицетворяет переход от хаоса к порядку, к которому универсальность Фейгенбаума (числа δ , α), возможно, не имеет никакого отношения.

Земная оболочка и все её составляющие – это совокупность динамических систем самоорганизованной критичности (СК) [3] с внешним источником энергии и внезапным завершением «жизненного цикла» и все приливно-волновые всплески (переходы от хаоса к порядку) можно считать лишь подготовкой к *подлинному* переходу от порядка к хаосу, а области хаоса в тектоносфере создают тектонические землетрясения.

Земная оболочка и все её составляющие – это совокупность динамических систем самоорганизованной критичности (СК) [3] с внешним источником энергии и внезапным завершением «жизненного цикла» и все приливно-волновые всплески (переходы от хаоса к порядку) можно считать лишь подготовкой к подлинному переходу от порядка к хаосу, области хаоса в тектоносфере создают тектонические землетрясения. Во многих сейсмоопасных районах землетрясения повторяются во времени, а их разделяют спокойные (ламинарные [19]) периоды и, возможно, тектонические события

в какой-то мере аналогичны перемежаемостям [19] (рис. 5). Длительность ламинарных периодов между сильными событиями статистически связана с числом лунных приливов путём разложения в степенной ряд по основанию 2: длина ряда (продолжительность ламинарного периода) прямо пропорциональна силе ожидаемого события, что показано в ретропрогнозе Японского землетрясения [11]. Скорость движения Земли (орбитальная, угловая) испытывает определённые вариации во времени (ускорение с разным знаком), вызывая эффект «пульсации времени» (1 сут. $\approx$ 24 часа, 1 год $\approx$ 365 сут. – единицы условные), что влияет на момент инерции и динамику сейсмического процесса. Поскольку временные пульсации сложно фиксировать (время – не термодинамический параметр), опять возникает «тупик».

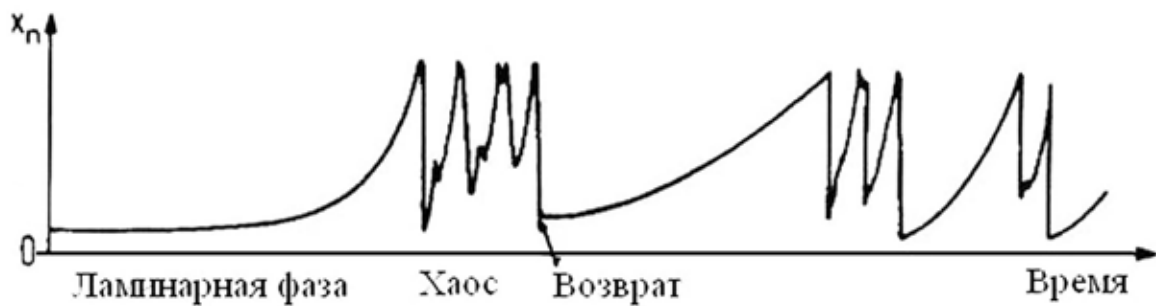


Рис. 5. Последовательность итераций $x_n = f^n(x_0)$, показывающая ламинарный и хаотический (перемежаемость) режимы [19].

Перемежаемость обладает универсальными свойствами и служит одним из редких примеров точного решения линеаризованных ренормгрупповых уравнений, она же универсально объясняет природу фликкер-шума в нелинейных системах [19]. Когда система переходит от порядка к хаосу через ряд перемежаемостей, частота их появления растёт (ламинарные периоды сокращаются) [19]. Если серию форшоков, предшествующих главному толчку землетрясения, воспринимать как ряд перемежаемостей, то эти условия напоминают динамику периода подготовки сейсмического события. Тогда регистрация первого форшока даёт шанс для выдачи краткосрочного прогноза, но только в случае длительного мониторинга и с гарантией, что зарегистрирован именно форшок. Хотя с эволюцией сейсмичности всё обстоит иначе. По многочисленным наблюдениям, изотопный возраст горных пород в составе объекта земной коры обратно пропорционален уровню сейсмоактивности этого объекта. На Земле наименьшей сейсмоактивностью отличаются древнейшие кристаллические щиты. Таким образом, здесь мы снова видим переход от хаоса к порядку во времени.

И ещё один важный момент: средняя мощность слоя ГКС $M_0 = 1600$ км (т. к. средняя мощность земной коры $M_5 = 50$ км, $M_0 = M_5 \cdot 2^5$), а превышение земной поверхности в волне твёрдого прилива $\Delta h \approx 0.5$ м. Тогда деформация растяжения корово-мантийного вещества в составе приливного радиуса $\Delta R_n = \Delta h / M_0$ будет: $0.5 / 1600000 = 3.125 \cdot 10^{-10}$, что примерно в 6 раз превышает

радиус 1-й борховской орбиты атома водорода в невозмущённом состоянии: $0.529 \cdot 10^{-10}$ м [20] (объект «квантовой» размерности).). Это обстоятельство относит гравитационное (приливо-волновое) возмущение в область «квантовых» эффектов и, возможно, в исследованиях тектонического расслоения земной оболочки как колебательной системы целесообразнее применять законы квантовой механики (уравнение Шрёдингера и т.п.).

Заключение

Предпринятая попытка отыскать среди геодинамических эффектов признаки перехода от порядка к хаосу завершилась неудачей: повсюду обнаруживается лишь обратное направление – переход от хаоса к порядку. По-видимому, «управляющим параметром» в геотектонике служит время, «стреловидность» течения которого хотя и подвергается сомнениям, но не опровергнута. Поскольку время не имеет к термодинамическим законам прямого отношения, то универсальность Фейгенбаума, применимая к прогнозированию поведения термодинамических систем в переходе от порядка к хаосу, для геодинамических исследований (по крайней мере, в её нынешнем виде) едва ли пригодна.

Список литературы

1. Адушкин В.В., Спивак А.А. Приливная сила как триггер геофизических процессов в окружающей среде. / В сб.: Триггерные эффекты в геосистемах (Москва, 22-24 июня 2010 г.: матер. Всерос.о семинар-совещания / Ин-т динамики геосфер РАН; под ред. В.В. Адушкина, Г.Г. Кочаряна. М.: ГЕОС. 2010. С. 8-18.
2. Ахромеева Т.С., Курдюмов С.П., Малинецкий Г.Г. Парадоксы мира нестационарных структур. М.: Знание, 1985. 48 с.
3. Бак П. Как работает природа: Теория самоорганизованной критичности. Пер. с англ. / Вступ. сл. Г. Г. Малинецкого. М.: УРСС: Книжный дом «ЛИБРОКОМ». 2013. 276 с.; цв. вкл. (Синергетика: от прошлого к будущему. № 66).
4. Владимиров Ю.С. Классическая теория гравитации: Учебное пособие. М.: Книжный дом «ЛИБРОКОМ», 2009. 264 с.
5. Горбачевич Ф.Ф., Ильченко В.Л., Смирнов Ю.П. Геодинамическая обстановка в интервале 1.7-1.9 км Кольской сверхглубокой скважины. //Геоэкология. Инженерная геология. Гидрогеология. Геокриология. № 1. 2000. С. 70-77.
6. Горяинов П.М., Давиденко И.В. Тектоно-кессонный эффект в массивах горных пород и рудных месторождений – важное явление геодинамики. // ДАН СССР. 1979. Т. 247. № 5. С. 1212-1215.
7. Дюнин В.И. Гидрогеодинамика глубоких горизонтов нефтегазоносных бассейнов. М.: Научный мир. 2000. 472 с.
8. Иванюк Г.Ю., Горяинов П.М., Егоров Д.Г. Введение в нелинейную геологию (опыт адаптации теории структур к геологической практике. Апатиты, 1996. 185 с.

9. Ильченко В.Л., Горбачев Ф.Ф., Смирнов Ю.П. Упругая анизотропия образцов керна Кольской сверхглубокой скважины из интервала 8.7-11.4 км. // Геоэкология. Инженерная геология. Гидрогеология. Геокриология. № 3. 1999. С. 151-159.
10. Ильченко В. Приливные волны и динамическая эволюция Земли. Саар-брюккен. LAMBERT Academic Publishing. 2013. 292 с.
11. Ильченко В.Л., Кобринович Ю.О. Приливные волны и прогноз землетрясений // Российский геофизический журнал. 2014. № 53-54. С. 99-105.
12. Кабисов Т.С., Камалов Т.Ф., Лурье В.А. Колебания и волновые процессы: Теория. Задачи с решениями. М.: КомКнига, 2005. 360 с.
13. Кольская сверхглубокая. Научные результаты и опыт исследования. / Гл. ред.: В.П. Орлов, Н.П. Лавёров. М.: МФ «Технонефтегаз». 1998. 260 с.
14. Мохначёв М.П. Усталость горных пород. М.: Наука, 1979. 152 с.
15. Пригожин И., Стенгерс И. Время. Хаос. Квант: К решению парадокса времени. Пер. с англ. / Под ред. В.И. Аршинова. Изд. 8-е. – М.: Едиториал УРСС, 2014. 240 с.
16. Тарасова Ю.В. Особенности распределения пластовых и поровых давлений в мио-плиоценовых отложениях залежей северного борта Западно-Кубанского прогиба. // Российский геофизический журнал. 2006. № 43-44. С. 65-70.
17. Фейгенбаум М. Универсальность в поведении нелинейных систем. // УФН. 1983. Т. 441, вып. 2. С. 343-374.
18. Шаров Н.В. Литосфера Балтийского щита по сейсмическим данным. / Автореферат диссертации д.г.м.н. Киев. 1991. 32 с.
19. Шустер Г. Детерминированный хаос. М.: Мир, 1987. 455 с.
20. Яворский Б.М., Детлаф А.А. Справочник по физике. М.: 1974. 944 с.

НЕПРЕРЫВНЫЙ СПЕКТР РЕГИОНАЛЬНО-МЕТАМОРФИЧЕСКИХ ПОРОД И ГРАНИЦЫ ТИПОВ

Левин Б.С.

Израиль, ber-levin@rambler.ru

Минеральный состав горных пород различается качественно и количественно. Первый используется в петрологии, например, для определения фаций метаморфизма. Количественные соотношения минералов в горных породах играют роль при выборе названия, например, для различения гнейсов от плагиогнейсов, чем его использование и ограничивается. Но если количественное соотношение минералов в горных породах не является игрой случая, то оно должно играть роль в их систематике. В статье этот вопрос разбирается на примере регионально-метаморфических пород, широко представленных на земной поверхности. Выявляется взаимосвязь горных пород, имеющих разный количественно-минеральный состав, и выстраивается их ряд, который служит базой для их классификации.

Исходный материал для исследования взят из отчета, находящегося в фондах СВНИЦ ДВО РАН. Отчет посвящен строению Ауланджинского выступа Омолонского массива, до того времени детально не изучавшегося. В нем описание пород сопровождается таблицами с глазомерной оценкой количественного минерального состава шлифов. Здесь материал представлен в таблице с упрощением, соответствующим целям данной работы. Данные представлены в виде гистограмм распространенности пород в зависимости от содержания в них каждого из 4 главных минералов: кварца, плагиоклаза, калишпата и суммы темноцветных. Именно по их соотношению происходит разделение горных пород. Использование для тех же целей различий в темноцветных минералах также находит свое место в петрографии. Но оно определяет иную линию классификации и потому для данной статьи отставлено в сторону.

Таблица. Состав регионально-метаморфических пород Ауланджинского выступа Омолонского массива. Структура исходных данных (сокр.).

	№ образца	№ таблицы в отчете	№ шлифа в таблице	Минералы, %			
				Кварц	Калишпат	Плагиоклаз	Σ темноцветных
	1	2	3	4	5	6	7
1	27/8	2	1	0	0	30	70
2	27/21	2	2	0	0	45	55
3	27/24	2	3	0	5	50	45
4	29/10	2	4	0	15	45	40
5	29/12	2	5	+	++	60	40
6	36/5-А	2	6	3	++	55	45
7	37/11	2	7	0	0	60	40
8	37/12	2	8	0	+	70	30
9	37/23-I	2	9	0	+	65	35
10	37/25-II	2	10	0	2	85	13
11	38/3-Б	2	11	0	++	50	50
12	38/9	2	12	0	+	50	50
13	26/21-Б	4	1	40	10	40	10
14	28/16	4	2	30	5	60	5
15	28/17	4	3	35	25	35	5
16	28/22	4	4	36	30	30	4
17	28/24	4	5	25	35	25	15
18	29/4	4	6	35	35	22	8
19	29/5-Б	4	7	31	31	31	7
20	29/7	4	8	30	10	50	10

Примечания. Таблица из отчета: Левин Б.С. Дорифейские метаморфические комплексы Омолонского массива, Ауланджинская полоса. Магадан, СВКНИИ ДВНЦ АН СССР, 1975. Ст. 1 и 3. Одинаковые № образцов (полевые) и шлифов – оценка породного состава в разных частях одного шлифа при тонком переслаивании разностей. Ст. 2. Названия таблиц. Табл. 2. Двупироксеновые сланцы. Табл. 4. Гиперстеновые гнейсы. Табл. 8. Амфиболитовые породы. Табл. 10. Гранатсодержащие породы. Табл. 12. Амфиболиты.

Табл. 14. Амфибол-биотитовые и диопсид-амфибол-биотитовые плагиогнейсы. Табл. 16. Биотитовые гнейсы и плагиогнейсы. Табл. 18. Гранат-биотитовые гнейсы. Табл. 20. Плагиоклазиты и более редкие породы. Табл. 22. Кварциты. Табл. 31. Эклогитоподобные породы. Определения пород в названиях таблиц не должны однозначно соответствовать настоящей статье. В отчете они носят обобщенный характер – по большинству шлифов. Таблица гнейсов содержит какую-то часть плагиогнейсов и наоборот, и т.д. Ст. 4-7. + и ++ компонент присутствует в долях %. При точности визуального определения в 10 %, в таблице есть некруглые содержания. Если было трудно решить, к какому диапазону отнести содержание, ставилось промежуточное число. При содержании минерала < 10 % оно оценивалось в единицах %. Такие цифры являются ориентировочными и не говорят об увеличении точности. При суммировании темноцветных в ст. 7 появляются двузначные некруглые %. При наличии некруглой цифры у одного из компонентов необходимо корректировать доли других компонентов для приведения суммы к 100 %. Так появляются некруглые двузначные % у лейкократовых минералов.

Во всех последующих гистограммах горизонтальная ось – содержание определенного минерала от 0 до 100 % с градацией в 10 %, что определено точностью глазомерной оценки. По оси ординат – число шлифов, по составу попадающих в данный интервал. При разборе гистограмм употребляются названия пород, не всегда привычные в контексте. Это требует небольшого обоснования. Как привычные здесь употребляются термины: кварциты, гнейсы (с калишпатом), плагиогнейсы, метаморфические сланцы (далее – просто сланцы). Гнейсы и плагиогнейсы могут объединяться под названием гнейсовые породы. Породы, называемые амфиболитами, здесь входят в группу сланцев в силу того, что темноцветные не разделяются. Биотит, гранат, высокоглиноземистые минералы входят в темноцветные. Кроме перечисленных пород далее фигурируют плагиоклазиты и меланократовые сланцы (сокр. меланосланцы). Первые – породы с содержанием плагиоклаза 70-100 %, вторые – породы ультраосновного состава. В силу неразделения темноцветных в этой работе в ту же группу входят редкие породы ультраглиноземистого состава, состоящие из граната ± биотит, силлиманит, кордиерит, шпинель. Плагиоклазиты и породы ультраосновного состава обычно воспринимаются в сознании геологов как анортозиты и гипербазиты, т.е. магматические, а не метаморфические производные. Это представление не подлежит оспариванию в целом. Здесь речь идет только о расслоенном метаморфическом цоколе платформ и срединных массивов. В этой области полевые и микроскопические исследования убедили автора в том, что указанные породы тесно связаны с вмещающими образованиями, аналогичны им по структурным характеристикам и образуют с ними единые комплексы. Поэтому здесь они введены в регионально-метаморфическую ассоциацию.

У всех гистограмм (кроме калишпатовой, частично отличной, что обсуждено далее) обнаруживаются два характерных свойства: они заполняют весь интервал горизонтальной оси без пропуска какой-то его части; они волнообразны, т.е. представляют собой чередование пиков (максимумов) и провалов (минимумов), хотя ни один провал не достигает нулевого значения. На гистограмме плагиоклаза (рис. 1) выделяются 3 пика, их характеристика



Рис. 1. Распространенность пород в зависимости от содержаний плагиноклаза.

понятна: 1-й пик с минимальным содержанием плагиноклаза – это кварциты с меланосланцами; 2-й (20-60 %) – совмещенные гнейсы, плагиногнейсы и сланцы; 3-й (70-100 %) – плагиноклазиты. Понижения, разделяющие пики – промежуточные породы, однозначно не идентифицируемые в силу слияния (в двух пиках из трех) разных групп пород.

Структура гистограммы кварца (рис. 2 а) аналогична плагиноклазовой – волнообразная функция с тремя пиками и двумя понижениями. Наборы пород в пиках здесь другие в силу различного распространения этих двух минералов в разных породах. На гистограмме темноцветных (рис. 2 б) также видны три пика для главных типов пород с двумя понижениями на месте промежуточных пород. Но здесь понижение между первым и вторым пиками не очень впечатляющее. Может показаться, что оно может заполниться при пополнении базы данных. На самом деле, это не так. Во-первых, потому, что этот минимум приходится на интервал содержания темноцветных минералов в 30-40 %, в котором проходит граница между лейко- и меланократовыми породами. То есть, минимум находится на своем месте. Во-вторых, смазанность минимума может происходить оттого, что в максимуме слева на участке в 3-4 интервала собраны 4 типа пород. Такая концентрация шлифов на небольшом промежутке, частично выпадающих в соседний минимум, может его отчасти нивелировать. Этот эффект еще более явно просматривается в гистограмме калишпата.

Гистограмма калишпата (рис. 3 а) отличается от предыдущих прежде всего тем, что покрывает не всю горизонтальную ось, а лишь ее половину. Это предопределено отсутствием регионально-метаморфических пород с

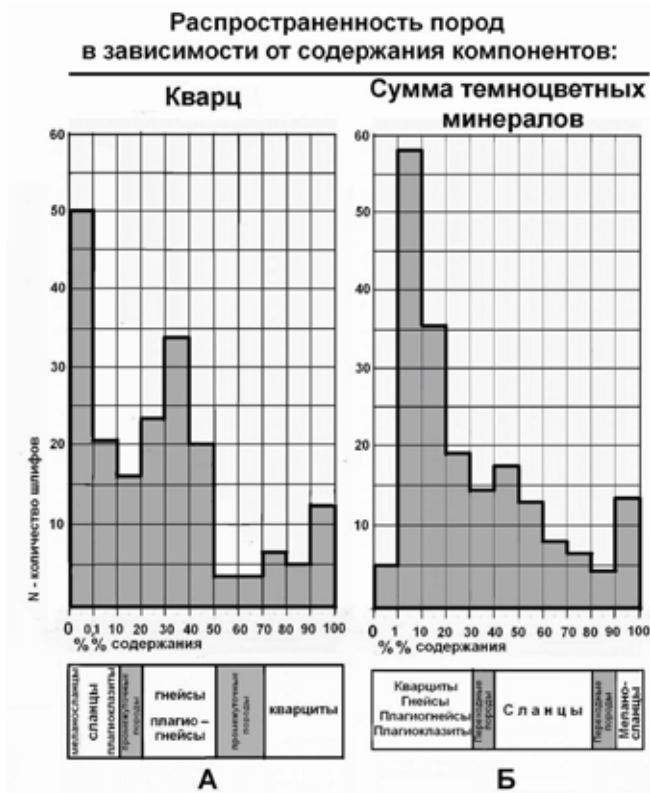


Рис. 2. Распространенность пород в зависимости от содержания: А – кварца, Б – суммы темноцветных.

10-20 % обозначится явный минимум, отделяющий плагинейсы от гнейсов (рис. 3 б), что подтверждает правомерность классификационного разделения этих двух групп.

Итак, представленные графики ясно демонстрируют (доказывают, хотя желательно усиление доказательства более обширными и точными данными) два фундаментальных положения, которые на языке петрографии звучат так: регионально-метаморфические горные породы образуют сплошной спектр, без пустот и разрывов; этот спектр пород не монотонен, а волнообразен: распространенность горных пород сильно варьирует – ши-

содержанием калишпата более 40-50 %. Вторая особенность состоит в том, что гистограмма монотонно убывает без разделения на максимумы и минимумы. Скорее всего, отсутствие резкой волнообразности можно объяснить спрессованностью массы шлифов в узком интервале. Имеющийся на диаграмме небольшой минимум, кажется случайным. Но внимание к нему привлекается тем, что он совпадает с границей гнейсов и плагинейсов. Если облегчить гистограмму, убрав кварциты, плагноклазиты, сланцы и меланосланцы (т.е. удалив породы с содержанием кварца 0-25 и 70-100 %), то именно на интервале с содержанием калишпата

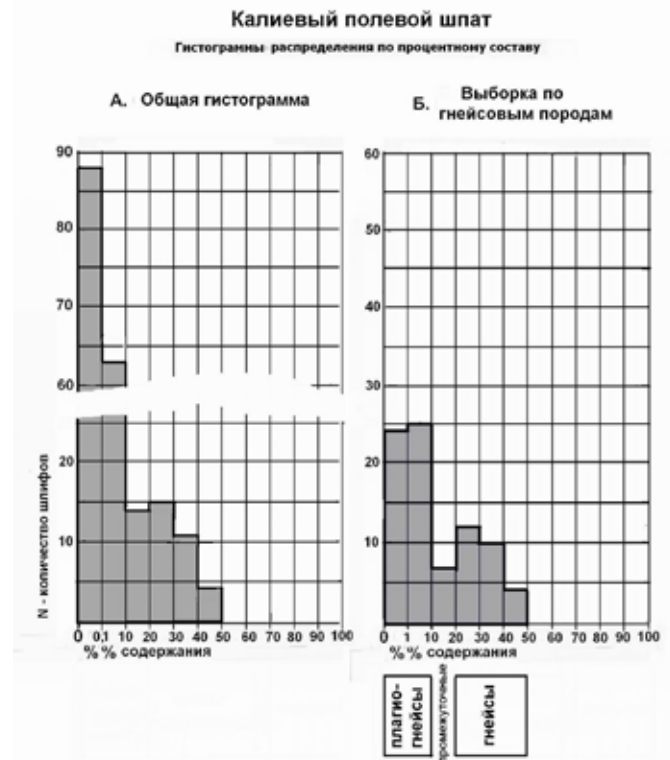


Рис. 3. Распространенность пород в зависимости от содержания калиевого полевого шпата: А – общая гистограмма, Б – гистограмма по выборке гнейсовых пород.



Рис. 4. Развертка гистограммы плагиноклаза с разделением на лейко- и меланократовую части.

роко распространенные сочетаются с редкими породами промежуточного состава. Отдельно отметим, что первое положение дает дополнительное основание для введения плагиоклазитов и меланосланцев в единый комплекс регионально-метаморфических пород.

Рассмотренные диаграммы еще ничего не говорят о том, как сочетаются друг с другом их подразделения, в частности, как соотносятся главные типы пород (из максимумов) и породы, количественно им подчиненные (из минимумов). Да и само соотношение различных пород, сгруженных в общий максимум, тоже не ясно. Гистограммы пока не дают прямого выхода на классификацию. Чтобы выйти на нее, разделим гистограммы надвое – для лейко- и меланократовых пород. Более всего для этого подходит гистограмма плагиноклаза, т.к. он представлен в обеих частях спектра, тогда как остальные минералы отдают предпочтение той или другой. По этой же причине плагиноклаз не подходит для разделения на две части. Остальные компоненты подходят на роль критериев разделения в силу указанного тяготения к той или другой части спектра пород. Наиболее продуктивным представляется учет всех трех компонентов. Критерий разделения можно сформулировать так: если в породе кварц и калишпат в сумме преобладают над темноцветными, то порода относится к лейкократовой, если наоборот – к меланократовой. Развернутая указанным образом гистограмма плагиноклаза дана на рисунке 4. В ней по горизонтальной оси интервалы содержания плагиноклаза сначала возрас-

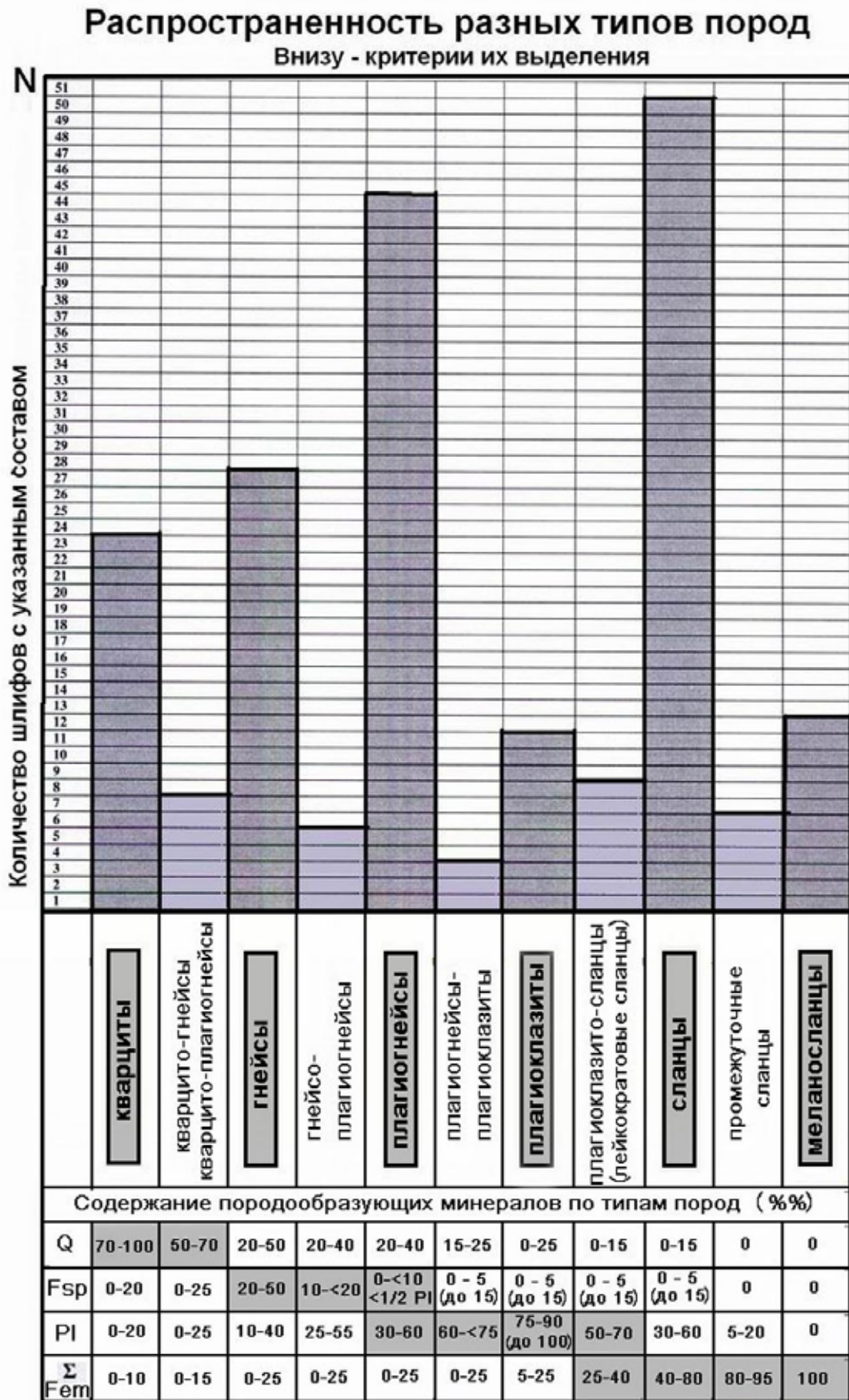


Рис. 5. График сравнительной распространенности разных регионально-метаморфических пород – главных типов и промежуточных разновидностей.

тают от 0 до 100 %, затем уменьшаются до 0. В левой половине построена гистограмма по лейко-, в правой – по меланопородам. На этой гистограмме все максимумы оказываются разнесенными в разные части спектра, все (за исключением гнейсовых) разделяются минимумами, которые показывают содержания плагиоклаза в переходных породах.

Разделение гнейсов и плагиогнейсов не просматривается на гистограмме из-за существенного перекрытия содержаний плагиоклаза в них. Зато правомерность разделения этих пород подчеркивается частичной гистограммой калишпата – на ней виден четкий минимум с содержанием компонента в 10-20 %, который и определяет границу. Это граничное определение соответствует точности оценки содержания калишпата в 10 %. Повышение точности определения минерального состава пород должно привести и к более точной маркировке границ между породными типами. Такой подход правомерен и для других пород. Граница кварцитов проводится по содержанию кварца. Поэтому ее надо определять по минимуму на кварцевой гистограмме, а для сланцев и меланосланцев привлекать для этой цели гистограмму темноцветных. На развернутой плагиоклазовой диаграмме минимумы четко идентифицируют границы пород, выделяемых по содержанию плагиоклаза, т.е. плагиоклазитов. Остальные минимумы не подходят для определения границ породных типов, т.к. определяют содержание плагиоклаза в редких породах. Зато вкупе с максимумами они существенны в общем классификационном плане – перемежаемость тех и других указывает на место каждой породы в общем спектре, и тем самым дает основу для их классификации. В этом смысле развернутая плагиоклазовая гистограмма уникальна – прочие компоненты плохо поддаются такой развертке в силу их избирательной концентрации в лейкократовой или меланократовой частях шкалы.

Итак, в результате построений ясно отрисовался последовательный ряд пород: кварциты → гнейсы → плагиогнейсы → плагиоклазиты → сланцы → меланосланцы, который показан под горизонтальной шкалой на рисунке 4. Каждую пару пород из этого ряда разделяют более редкие промежуточные породы. Для первой из них в петрографии известно конкретное имя – кварцито-гнейсы. Остальные собственных названий не имеют, но существуют. Количественные соотношения главных и промежуточных пород отображены на рисунке 5. По горизонтальной оси здесь выделены чередующиеся интервалы одних и других. Главные породы, соответствующие максимумам на гистограммах, выделены тоном и шрифтом. Ниже для каждого интервала показаны параметры четырех компонентов. Определяющие минералы для конкретной породы выделены тоном.

ПРОБЛЕМА РЕКОНСТРУКЦИИ ГЕОДИНАМИЧЕСКИХ ОБСТАНОВОК ДОКЕМБРИЯ ПО ГЕОХИМИЧЕСКИМ ДАННЫМ

Мартынов Е.В.

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

Используемые в геологических исследованиях методы диагностики обстановок формирования протолитов докембрийских метаморфических комплексов обычно базируются на прямом сопоставлении параметров химического состава объектов докембрия и фанерозоя. Так, для Печенга-Имандра-Варзугского пояса предполагается проторифтогенная природа (Смолькин, 1992 и др.). Гранулитовые пояса, согласно выводам ряда авторов (Козлов, 1995 и др.), сформировались в обстановках, близких к островодужным (юные дуги). При таком подходе (рис. 1) некоторые структуры Печенга-Имандра-Варзугского пояса явно тяготеют к юным дугам. Этот факт противоречит выводам об их проторифтогенной природе и свидетельствует о некорректности использования при реконструкции обстановок для объектов докембрия метода прямых аналогий по параметрам химического состава с образованиями фанерозоя.

В ходе проведенных исследований (Мартынов, 1997) установлено, что, по крайней мере, для магматитов основного состава смещения петрохимических характеристик докембрийских комплексов относительно образований фанерозоя носят нелинейный характер. Он проявляется в уменьшении объема признакового пространства, занимаемого объектами докембрия, относительно объема области фанерозойских образований (рис. 2). А отличия

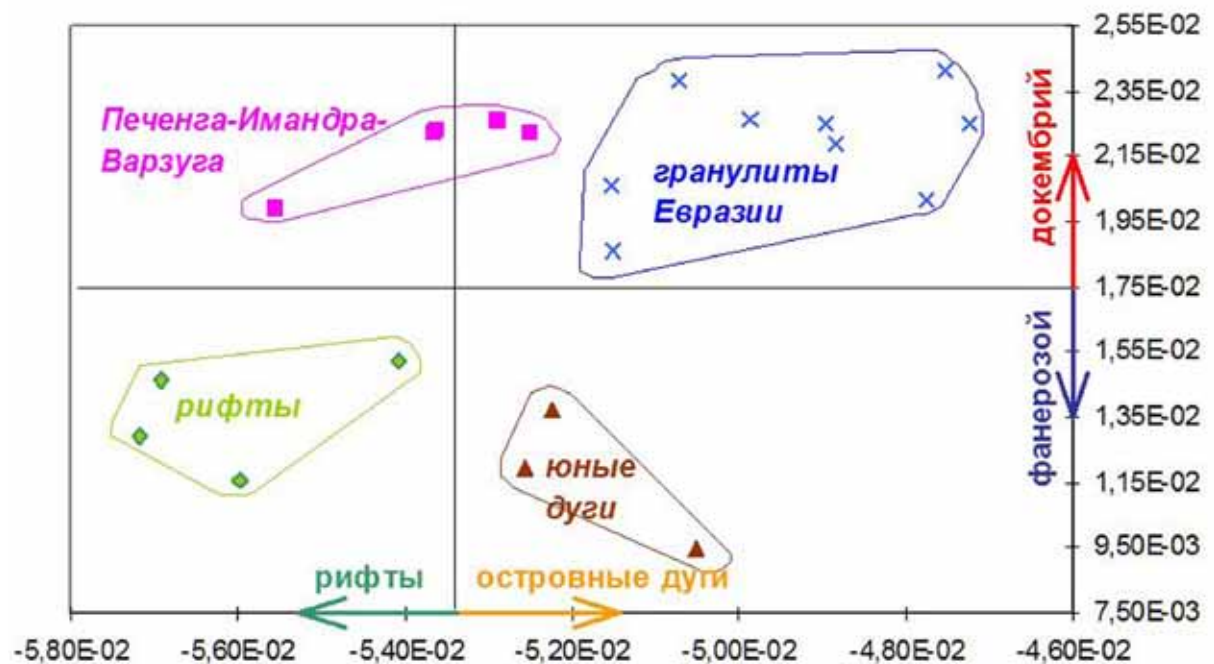


Рис. 1. Результаты реконструкции при прямом сопоставлении параметров химического состава.

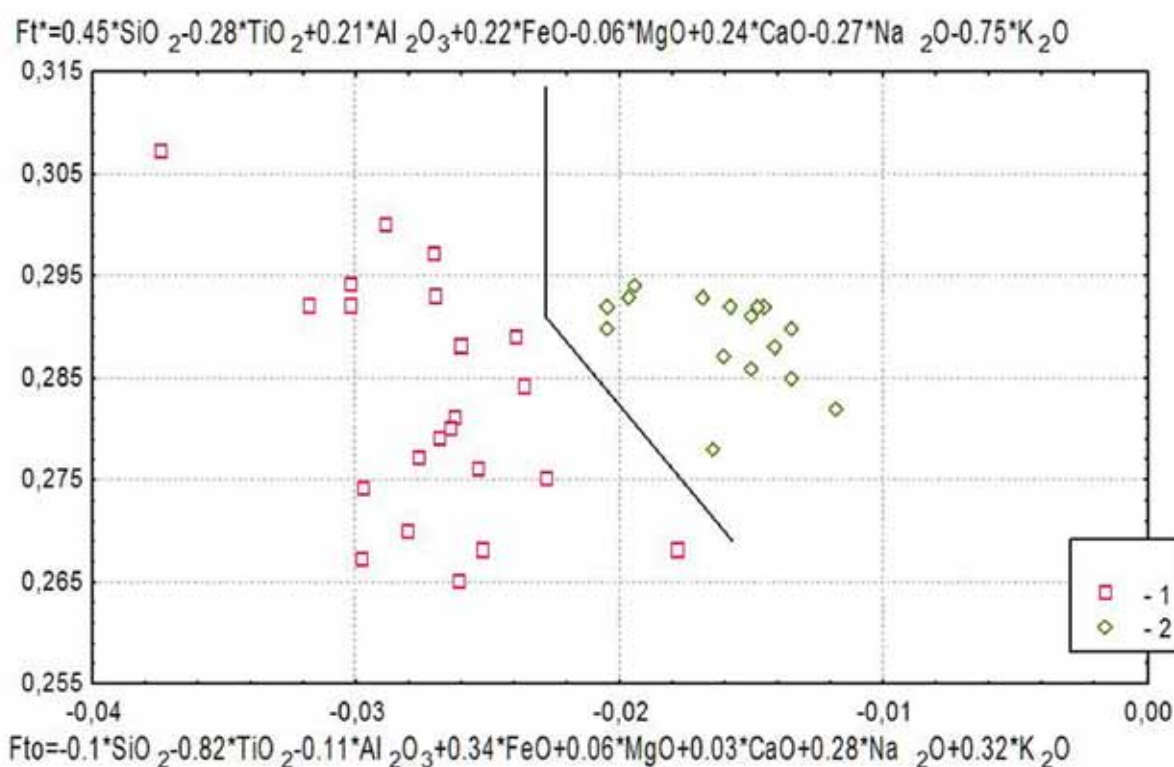


Рис. 2. Положение средних петрохимических параметров для магматитов основного состава комплексов фанерозоя (1) и докембрия (2). Ft^* – составляющая Ftk , ортогональная Fto .

химических составов объектов докембрия и фанерозоя можно описать двумя линейными дискриминантными функциями: объекты коры океанического типа – объекты докембрия (Fto) и объекты коры континентального типа – объекты докембрия (Ftk).

Метод многовариантной реконструкции геодинамических обстановок

На рисунке 3 проиллюстрирован метод многовариантной реконструкции: каждому объекту ставится в соответствие два возможных результата диагностики обстановок формирования. При соответствии этих результатов друг другу реконструкция на основе геохимических параметров допустима, в противном случае – невозможна.

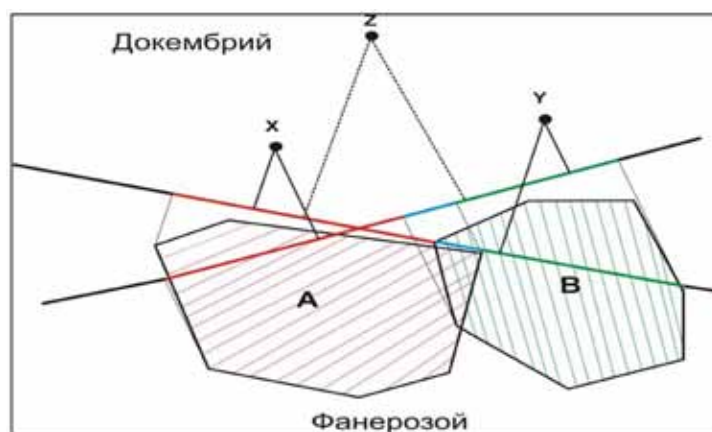


Рис. 3. Метод многовариантной реконструкции геодинамических обстановок.

Использование критерия позволяет определять возможность диагностики обстановок формирования протолитов докембрийских комплексов на основе геохимических параметров. Это проиллюстрировано на рис. 4 и 5, на которых представлены результаты реконструкции гранулитовых поясов Евразии и структур

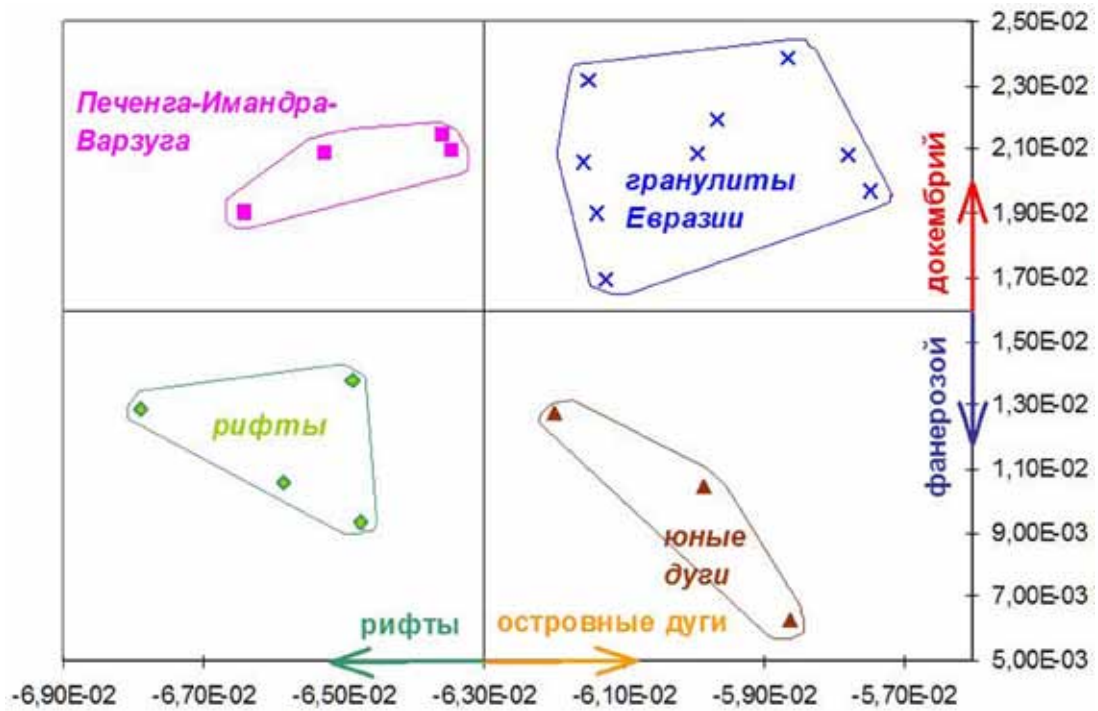


Рис. 4. Результаты реконструкции по 1-му варианту F_{to} с учетом смещения параметров химического состава.

Печенга-Имандра-Варзугского пояса по каждому из двух вариантов, соответствующих построенным дискриминантным функциям отличий параметров химического состава комплексов докембрия и фанерозоя.

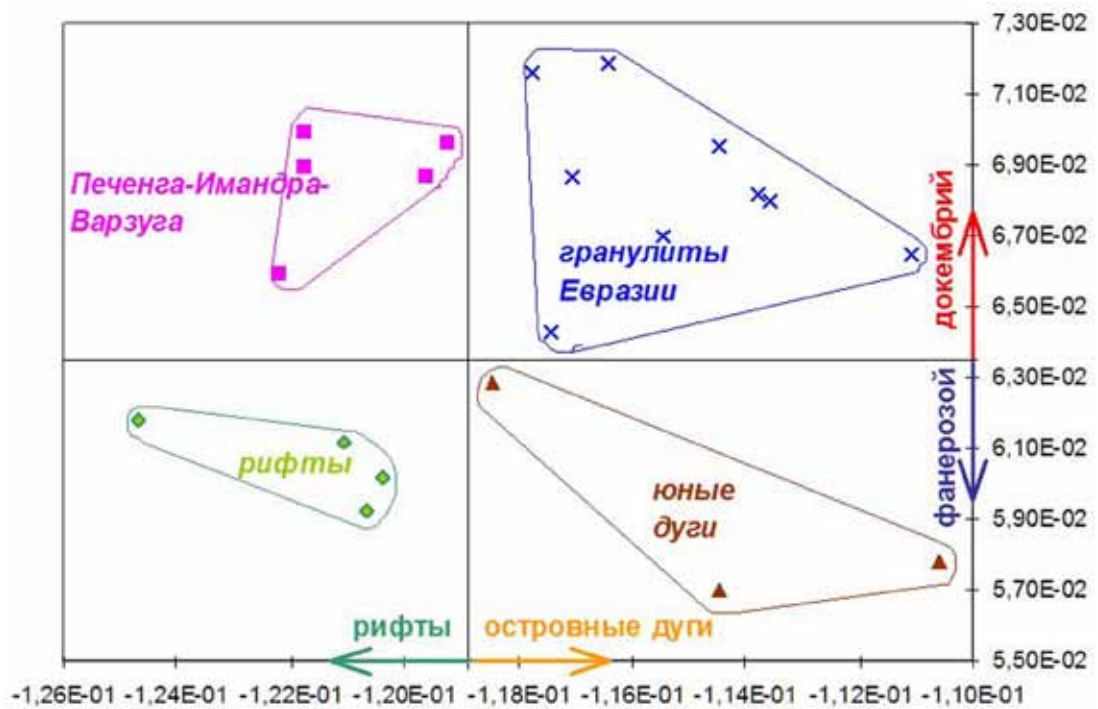


Рис. 5. Результаты реконструкции по 2-му варианту F_{tk} с учетом смещения параметров химического состава.

Распознавание геодинамических обстановок с учетом эволюции химического состава мантии

В данной работе предлагается еще один способ реконструкции геодинамических обстановок формирования комплексов докембрия по геохимическим данным, а именно, распознавание геодинамических обстановок с учетом эволюции химического состава мантии. Для этого предлагается использовать эволюционный параметр (относительную массу ядра), введенный В.П. Кеонджаном и А.С. Мониным для описания эволюции химического состава мантии Земли: $x = M_c / C_0 M$, где $M = 5.977 \times 10^{27}$ г – масса Земли, $C_0 = 0.376$ – суммарная концентрация «ядерного» вещества в Земле (Fe+FeO+FeS+Ni), M_c – масса ядра. Определить значение эволюционного параметра для фанерозоя и протерозоя можно из уравнения:

$$\dot{x} = \frac{1}{\tau} \left(C_0 * \frac{1-x}{1-C_0 * x} - C^* \right) * x.$$

Его решение можно аппроксимировать квадратичной функцией (рис. 6).

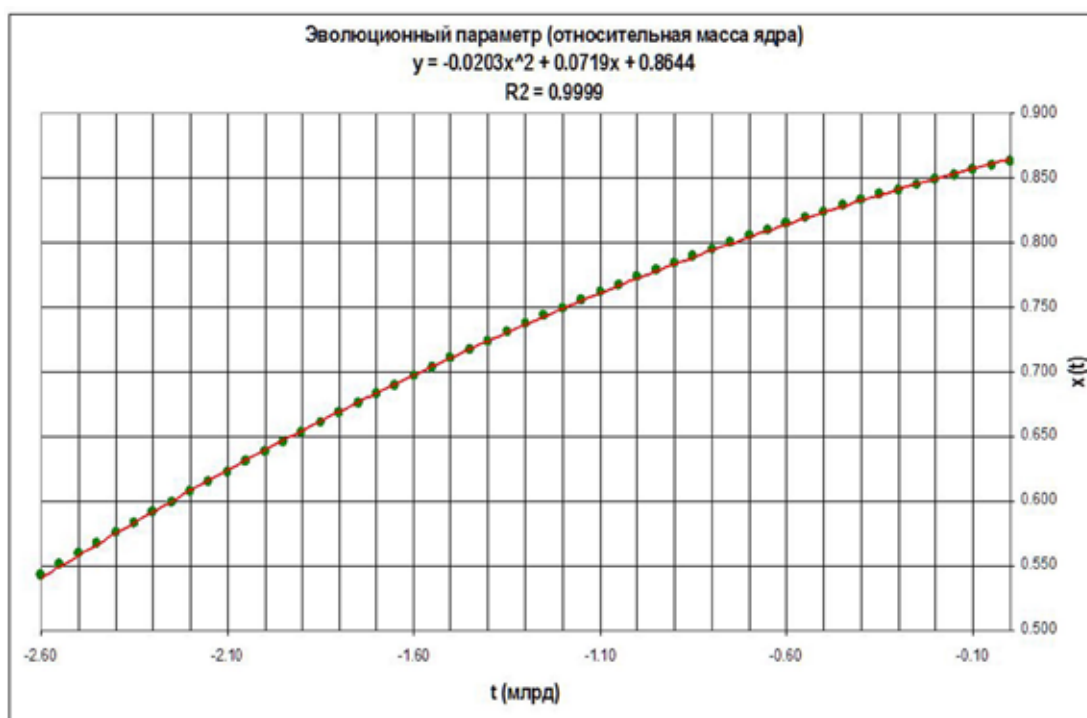


Рис. 6. Аппроксимация эволюционного параметра квадратичной функцией.

Результаты распознавания обстановок с учетом эволюции химического состава мантии

В качестве иллюстрации приведем результаты реконструкции геодинамической обстановки формирования структуры Сев. Печенги X^* относительно двух эталонов (рифты и юные дуги). Исследуемый объект:

$$X^* = \{x_i + \beta * v\}_{i=1}^n,$$

где ν – вектор «смещения» химического состава мантии во времени, β – коэффициент, который характеризует отличия по химизму состава мантии от пород основного состава в выбранный момент времени. Так как β зависит от времени, его значение предлагается выявлять в интерактивном режиме. Принцип определения β : постепенное увеличение (уменьшение) значения, пока не произойдет «скачок» при выборе решения.

$\alpha=0.01$	рифты	2.16	
	юные дуги	6.88	2.71
$\alpha=0.05$	рифты	2.18	
	юные дуги	6.32	2.71
$\alpha=0.1$	рифты	2.21	
	юные дуги	8.46	2.78

Примечания: α – уровень значимости, на диагонали – расстояние от исследуемого объекта до эталонов, красные числа – статистики Пури-Сена-Тамуры, критическое значение статистики при уровне значимости 0.05 равно 3.86.

Таким образом, геодинамический режим формирования структуры Сев. Печенги ближе к проторифтогенному и отличается от островодужного (юные дуги). При этом различие расстояний от Сев. Печенги до юных дуг и до рифтов статистически значимо.

Список литературы

1. Козлов Н.Е., Мартынов Е.В. Гранулитовые пояса докембрия и некоторые аспекты петрогеохимической эволюции протосубдукционных зон в ходе развития Земли // Геол. и геофиз. 1995. Т. 36. № 12. С. 105-112.
2. Мартынов Е.В. Реконструкция обстановок формирования протолитов метаморфических комплексов докембрия на основе статистического моделирования их характеристик. Автореф. канд. дисс. СПб.: ИГГД РАН, 1997. 23 с.
3. Смолькин В.Ф. Коматиитовый и пикритовый магматизм раннего докембрия Балтийского щита. СПб.: Наука, 1992. 272 с.

ДВА ТОЧНЫХ РЕШЕНИЯ УРАВНЕНИЙ МАКСВЕЛЛА В ОДНОРОДНОМ ИЗОТРОПНОМ ПРОВОДНИКЕ ДЛЯ ТОЧЕЧНОГО ДИПОЛЬНОГО ИСТОЧНИКА

Мельник М.Н., Ахметов О.И., Мингалев О.В., Мингалев И.В.

Полярный геофизический институт, Апатиты

Решена задачи Коши для телеграфного уравнения в 3-мерном пространстве, аналогичная (и переходящая в нее при нулевой проводимости) формуле Кирхгофа для волнового уравнения. На этой основе строится решение задачи о поле электрического диполя Герца с произвольной зависимостью тока от времени в бес-

конечном однородном изотропном проводнике. Для гармонически зависящих от времени полей в общем случае получено точное решение задачи о поле горизонтального электрического диполя Герца на плоской границе двух однородных изотропных сред, из которых одна является проводником.

Введение

Точные решения уравнений Максвелла для полей от искусственных источников в однородном изотропном проводнике имеют большое прикладное значение, в том числе для разработки и тестирования методов численного решения уравнений Максвелла. Особенно важны решения с распространяющимся в пространстве фронтом. Решение таких задач сводится к задаче Коши для 3-мерного телеграфного уравнения для векторного потенциала с нулевыми начальными условиями. Для телеграфного оператора известно фундаментальное решение – функция Грина [1], но до настоящего времени не выведена формула, которая описывает решение задачи Коши, аналогично формуле Кирхгофа для волнового уравнения. В этой работе мы выводим эту формулу, и с её помощью получаем решение задачи о поле электрического диполя Герца, который включается на конечное время и имеет произвольную зависимость от времени тока в диполе.

Для тестирования численных моделей распространения сигнала в волноводе Земля-ионосфера важны точные решения (во всем пространстве) для случая поля от источника, расположенного на плоской границе между двумя различными однородными бесконечными средами. Наилучшим примером является задача о поле гармонического по времени горизонтального электрического диполя Герца, расположенного на плоской границе раздела двух однородных изотропных сред, из которых одна является проводником, а вторая может быть проводником или диэлектриком [1-5]. У этой задачи известно только приближенное решение в низкочастотном пределе (без учета тока смещения) для сред с одинаковой магнитной проницаемостью. В этой работе мы приводим точное решение задачи для общего случая с различной магнитной проницаемостью.

Постановка задачи нахождения электромагнитного поля от заданного нестационарного сингулярного источника внешнего тока и вывод уравнения баланса заряда

Пусть однородный изотропный проводник с проводимостью σ , относительными проницаемостями диэлектрической ε и магнитной μ занимает область $\Omega \subset \mathbb{R}^3$ в пространстве $\mathbb{R}^3$, в которой задан сингулярный источник тока $j^{(s)}(x, t)$ — сингулярная обобщенная функция, у которой носитель по x $\text{supp } j^{(s)} \subset \Omega$ является либо конечным множеством точек, либо ограниченной кривой, либо ограниченной поверхностью. Обозначим через $\mathcal{D}'(\Omega \times [t^0; T])$ пространство обычных обобщенных функций в случае ограниченной области Ω и пространство обобщенных функций медленного роста по x в слу-

чае неограниченной области Ω (см. [6]). Обозначим через $\rho^{(s)}(\mathbf{x}, t)$ плотность заряда в источнике, которая является сингулярной обобщенной функцией с тем же носителем $\text{supp } \mathbf{j}^{(s)} \subset \Omega$ по $\mathbf{x}$. Подчеркнем, что эта функция заранее не известна и должна быть выражена через заданную плотность тока $\mathbf{j}^{(s)}(\mathbf{x}, t)$ — входной параметр задачи. Через $\rho_\sigma(\mathbf{x}, t)$ и $\mathbf{j}_\sigma(\mathbf{x}, t)$ обозначим, соответственно, пространственные плотности заряда и тока вне источника, которые должны быть непрерывны по $\mathbf{x}$ в области $\Omega \setminus \text{supp } \mathbf{j}^{(s)}$.

Уравнения Максвелла в системе СИ (ε_0 и μ_0 — электрическая и магнитная постоянные) будем рассматривать как в смысле обобщенных функций из пространства $\mathcal{D}'(\Omega \times [t^0; T])$, так и в классическом смысле вне источника, то есть электромагнитное поле вне источника будем считать достаточно гладким, из класса функций $C^1((\Omega \setminus \text{supp } \mathbf{j}^{(s)}) \times [t^0; T])$. Закон Ома в однородном изотропном проводнике имеет вид

$$\mathbf{j}_\sigma(\mathbf{x}, t) = \sigma \mathbf{E}(\mathbf{x}, t), \quad 1.1$$

материальные уравнения имеют вид

$$\mathbf{D}(\mathbf{x}, t) = \varepsilon \varepsilon_0 \mathbf{E}(\mathbf{x}, t), \quad \mathbf{B}(\mathbf{x}, t) = \mu \mu_0 \mathbf{H}(\mathbf{x}, t), \quad 1.2$$

а уравнение Гаусса и уравнение Фарадея имеют, соответственно, вид

$$\text{div } \mathbf{B}(\mathbf{x}, t) = 0, \quad 1.3$$

$$\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} = -\text{rot } \mathbf{E}(\mathbf{x}, t). \quad 1.4$$

Уравнение Пуассона имеет вид:

$$\text{div } \mathbf{D}(\mathbf{x}, t) = \rho_\sigma(\mathbf{x}, t) + \rho^{(s)}(\mathbf{x}, t), \quad 1.5$$

Уравнение Максвелла можно записать в форме:

$$\text{rot } \mathbf{H}(\mathbf{x}, t) - \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t} = \mathbf{j}_\sigma(\mathbf{x}, t) + \mathbf{j}^{(s)}(\mathbf{x}, t). \quad 1.6$$

Получим уравнение баланса заряда, которое позволяет выразить плотность заряда в источнике $\rho^{(s)}(\mathbf{x}, t)$ и в пространстве $\rho_\sigma(\mathbf{x}, t)$ через входные параметры задачи — начальные условия и плотность тока в источнике. Обозначим через $\omega_\sigma = \sigma/(\varepsilon \varepsilon_0)$ частоту проводимости в системе СИ. Взяв div от уравнения (1.1) с учетом 1-го уравнения в (1.2) и уравнения (1.5) дает цепочку равенств

$$\operatorname{div} \mathbf{j}_\sigma(\mathbf{x}, t) = \sigma \operatorname{div} \mathbf{E}(\mathbf{x}, t) = \omega_\sigma (\rho_\sigma(\mathbf{x}, t) + \rho^{(s)}(\mathbf{x}, t)). \quad 1.7$$

Взяв div от уравнения (1.6) с учетом уравнений (1.3) и (1.7) дает уравнение баланса заряда

$$\frac{\partial \rho^{(s)}(\mathbf{x}, t)}{\partial t} + \frac{\partial \rho_\sigma(\mathbf{x}, t)}{\partial t} + \omega_\sigma \rho^{(s)}(\mathbf{x}, t) + \omega_\sigma \rho_\sigma(\mathbf{x}, t) + \operatorname{div} \mathbf{j}^{(s)}(\mathbf{x}, t) = 0. \quad 1.8$$

Поскольку пространственная плотность заряда вне источника ρ_σ непрерывна по $\mathbf{x}$ в области $\Omega \setminus \operatorname{supp} \mathbf{j}^{(s)}$, а $\rho^{(s)}$ и $\mathbf{j}^{(s)}$ являются сингулярными обобщенными функциями с носителем $\operatorname{supp} \mathbf{j}^{(s)}$ по $\mathbf{x}$, последнее уравнение равносильно следующим отдельным уравнениям баланса заряда в пространстве и в источнике:

$$\frac{\partial \rho_\sigma(\mathbf{x}, t)}{\partial t} + \omega_\sigma \rho_\sigma(\mathbf{x}, t) = 0, \quad 1.9$$

$$\frac{\partial \rho^{(s)}(\mathbf{x}, t)}{\partial t} + \omega_\sigma \rho^{(s)}(\mathbf{x}, t) + \operatorname{div} \mathbf{j}^{(s)}(\mathbf{x}, t) = 0. \quad 1.10$$

Эти уравнения относительно плотности заряда являются по переменной t обыкновенными линейными дифференциальными уравнениями 1-го порядка с постоянным коэффициентом. Решение этих уравнений описывается формулой Коши, применение которой дает следующие формулы

$$\rho_\sigma(\mathbf{x}, t) = e^{-\omega_\sigma(t-t^0)} \rho_\sigma(\mathbf{x}, t^0), \quad \rho^{(s)}(\mathbf{x}, t) = e^{-\omega_\sigma(t-t^0)} \rho^{(s)}(\mathbf{x}, t^0) - e^{-\omega_\sigma t} \int_{t^0}^t e^{\omega_\sigma \theta} \operatorname{div} \mathbf{j}^{(s)}(\mathbf{x}, \theta) d\theta \quad 1.11$$

Первая формула хорошо известна и описывает экспоненциальное по времени затухание пространственной плотности заряда в проводнике. Вторая формула показывает, что проводимость среды существенно влияет на баланс заряда в источнике. Отметим, что искать как аналитические, так и численные решения напрямую для системы уравнений (1.1)–(1.6), (1.11) невозможно, поскольку она состоит из взаимно зацепляющихся уравнений. Поэтому для получения решений необходимо использовать потенциалы, и свести систему (1.1)–(1.6), (1.11) к отдельному уравнению для векторного потенциала.

Оптимальная калибровка и телеграфные уравнения для потенциалов в случае проводника

Обозначим через $c_0 = 1/\sqrt{\varepsilon_0 \mu_0}$ и $c = c_0/\sqrt{\varepsilon \mu}$ соответственно скорость света в вакууме и в среде. Рассмотрим уравнения для потенциалов, которые в системе СИ вводятся соотношениями

$$\mathbf{B}(\mathbf{x}, t) = \text{rot} \mathbf{A}(\mathbf{x}, t), \quad \mathbf{E}(\mathbf{x}, t) = -\nabla \varphi(\mathbf{x}, t) - \frac{\partial \mathbf{A}(\mathbf{x}, t)}{\partial t}. \quad 2.1$$

Для дальнейшего изложения введем линейные волновой $\bar{E}_w$ и телеграфный $\bar{E}_T$ операторы, которые действуют по формулам

$$\bar{E}_w u(\mathbf{x}, t) = \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} - c^2 \Delta u, \quad \bar{E}_T u(\mathbf{x}, t) = \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} + \omega_\sigma \frac{\partial u}{\partial t} - c^2 \Delta u, \quad \omega_\sigma = \frac{\sigma}{\varepsilon \varepsilon_0}, \quad 2.2$$

где $\Delta = \text{div} \nabla$ — оператор Лапласа. Подстановка уравнений (2.1) в уравнение Пуассона (1.5) с учетом уравнений (1.2) дает уравнение для потенциалов, которое можно представить в следующем виде:

$$\left. \begin{aligned} \bar{E}_T \varphi(\mathbf{x}, t) &= \frac{c^2}{\varepsilon \varepsilon_0} (\rho_\sigma(\mathbf{x}, t) + \rho^{(s)}(\mathbf{x}, t)) + \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\partial \varphi(\mathbf{x}, t)}{\partial t} + \omega_\sigma \varphi(\mathbf{x}, t) + c^2 \text{div} \mathbf{A}(\mathbf{x}, t) \right) \in \mathcal{D}'(\Omega \times [t^0; T]); \\ \bar{E}_T \varphi(\mathbf{x}, t) &= \frac{c^2 \rho_\sigma(\mathbf{x}, t)}{\varepsilon \varepsilon_0} + \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\partial \varphi(\mathbf{x}, t)}{\partial t} + \omega_\sigma \varphi(\mathbf{x}, t) + c^2 \text{div} \mathbf{A}(\mathbf{x}, t) \right) \text{ при } \mathbf{x} \in \Omega \setminus \text{supp } j^{(s)}, \quad t \in [t^0; T], \end{aligned} \right\} \quad 2.3$$

Аналогично подстановка уравнений (2.1) в уравнение Максвелла (1.6) с учетом уравнений (1.1) и (1.2) дает уравнение для потенциалов, которое можно представить в следующем виде:

$$\left. \begin{aligned} \bar{E}_T \mathbf{A}(\mathbf{x}, t) &= \frac{1}{\varepsilon \varepsilon_0} j^{(s)}(\mathbf{x}, t) - \nabla \left(\frac{\partial \varphi(\mathbf{x}, t)}{\partial t} + \omega_\sigma \varphi(\mathbf{x}, t) + c^2 \text{div} \mathbf{A}(\mathbf{x}, t) \right) \in \mathcal{D}'(\Omega \times [t^0; T]); \\ \bar{E}_T \mathbf{A}(\mathbf{x}, t) &= -\nabla \left(\frac{\partial \varphi(\mathbf{x}, t)}{\partial t} + \omega_\sigma \varphi(\mathbf{x}, t) + c^2 \text{div} \mathbf{A}(\mathbf{x}, t) \right) \text{ при } \mathbf{x} \in \Omega \setminus \text{supp } j^{(s)}, \quad t \in [t^0; T]. \end{aligned} \right\} \quad 2.4$$

Из уравнений (2.3), (2.4) следует, что уравнение калибровки

$$\frac{\partial \varphi(\mathbf{x}, t)}{\partial t} + \omega_\sigma \varphi(\mathbf{x}, t) + c^2 \text{div} \mathbf{A}(\mathbf{x}, t) = 0 \quad 2.5$$

равносильно тому, что каждый из потенциалов удовлетворяет своему отдельному телеграфному уравнению, не содержащему другой потенциал, которые имеют вид

$$\left. \begin{aligned} \bar{E}_T \varphi(\mathbf{x}, t) &= \frac{c^2}{\varepsilon \varepsilon_0} (\rho_\sigma(\mathbf{x}, t) + \rho^{(s)}(\mathbf{x}, t)) \in \mathcal{D}'(\Omega \times [t^0; T]); \\ \bar{E}_T \varphi(\mathbf{x}, t) &= \frac{c^2 \rho_\sigma(\mathbf{x}, t)}{\varepsilon \varepsilon_0} \text{ при } \mathbf{x} \in \Omega \setminus \text{supp } j^{(s)}, \quad t \in [t^0; T], \end{aligned} \right\} \quad 2.6$$

$$\bar{E}_T \mathbf{A}(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{\varepsilon \varepsilon_0} j^{(s)}(\mathbf{x}, t) \in \mathcal{D}'(\Omega \times [t^0; T]) \text{ и } \bar{E}_T \mathbf{A}(\mathbf{x}, t) = 0 \text{ при } \mathbf{x} \in \Omega \setminus \text{supp } j^{(s)}, \quad t \in [t^0; T]. \quad 2.7$$

Аналогично уравнению (1.10), уравнение калибровки (2.5) относительно $\varphi(\mathbf{x}, t)$ по переменной t является обыкновенным линейным дифференци-

альным уравнением 1-го порядка с постоянным коэффициентом, то есть его решение описывается формулой Коши, применение которой дает формулу

$$\varphi(\mathbf{x}, t) = e^{-\omega_{\sigma}(t-t^0)} \varphi(\mathbf{x}, t^0) - c^2 e^{-\omega_{\sigma} t} \int_{t^0}^t e^{\omega_{\sigma} \theta} \operatorname{div} \mathbf{A}(\mathbf{x}, \theta) d\theta. \quad 2.8$$

Можно показать, что из уравнения для векторного потенциала (2.7), уравнения калибровки (2.5), уравнений баланса заряда (1.9), (1.10), а также уравнений (1.1), (1.2) и (2.1) вытекают уравнения Максвелла (1.3)-(1.6). Отметим, что уравнение калибровки (2.5) приведено в [3] и является обобщением на случай однородного изотропного проводника калибровки Лоренца

$$\frac{\partial \varphi_L(\mathbf{x}, t)}{\partial t} + c^2 \operatorname{div} \mathbf{A}_L(\mathbf{x}, t) = 0, \quad 2.9$$

в которую оно переходит в случае нулевой проводимости $\sigma = 0$. В калибровке (2.5) для нахождения полей нужно найти решение только одного телеграфного уравнения (2.7) для векторного потенциала с заданным током источника в правой части, а затем найти скалярный потенциал по формуле (2.8). Таким образом, новая калибровка дает алгоритм нахождения полей, аналогичный тому, который дает калибровка Лоренца в случае диэлектрика, то есть без нахождения плотности заряда в источнике.

Формулы, описывающие решение задачи Коши для телеграфного уравнения в 3-мерном случае

Рассмотрим задачу Коши для пространственно 3-мерного линейного телеграфного уравнения, постановка которой полностью аналогична таковой для волнового уравнения:

$$\square_T u(\mathbf{x}, t) = \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} + \omega_{\sigma} \frac{\partial u}{\partial t} - c^2 \Delta u = f(\mathbf{x}, t), \quad \mathbf{x} \in \square^3, \quad t > 0, \quad 3.1$$

$$u(\mathbf{x}, t)|_{t=0} = u^0(\mathbf{x}), \quad \left. \frac{\partial u(\mathbf{x}, t)}{\partial t} \right|_{t=0} = u_t^0(\mathbf{x}), \quad \mathbf{x} \in \square^3. \quad 3.2$$

Здесь $\omega_{\sigma} > 0$ и $c > 0$ — заданные постоянные, $f(\mathbf{x}, t)$, $u^0(\mathbf{x})$ и $u_t^0(\mathbf{x})$ — заданные функции. Полностью аналогично тому, как это сделано для линейного волнового уравнения в [6], можно показать, что решение задачи (3.1)-(3.2) представимо в виде суммы объемного телеграфного потенциала

$V_T^{(0)}[f](\mathbf{x}, t)$ с плотностью $f(\mathbf{x}, t)$, поверхностного телеграфного потенциала простого слоя $V_T^{(1)}[u_t^0](\mathbf{x}, t)$ с плотностью $u_t^0(\mathbf{x})$ и поверхностного теле-

графного потенциала двойного слоя $V_T^{(2)}[u^0](\mathbf{x}, t)$ с плотностью $u^0(\mathbf{x})$:

$$u(\mathbf{x}, t) = V_T^{(0)}[f](\mathbf{x}, t) + V_T^{(1)}[u_t^0](\mathbf{x}, t) + V_T^{(2)}[u^0](\mathbf{x}, t). \quad 3.3$$

При этом потенциалы определяются как свертки

$$\left. \begin{aligned} V_T^{(0)}[f](\mathbf{x}, t) &= E_T(\mathbf{x}, t) * f(\mathbf{x}, t) = \int_{\square^4} E_T(\mathbf{x} - \mathbf{y}, t - \tau) f(\mathbf{y}, \tau) d^3 \mathbf{y} d\tau, \\ V_T^{(1)}[u^0](\mathbf{x}, t) &= E_T(\mathbf{x}, t) * u^0(\mathbf{x}) = \int_{\square^3} E_T(\mathbf{x} - \mathbf{y}, t) u^0(\mathbf{y}) d^3 \mathbf{y}, \quad V_T^{(2)}[u^0](\mathbf{x}, t) = \frac{\partial}{\partial t} V_T^{(1)}[u^0](\mathbf{x}, t) \end{aligned} \right\} \quad 3.4$$

с фундаментальным решением $E_T(\mathbf{x}, t)$ 3-мерного телеграфного оператора $\square_T$, которое определяется как решение уравнения $\square_T E_T(\mathbf{x}, t) = \delta(\mathbf{x}, t)$. Отметим, что непосредственно найти $E_T(\mathbf{x}, t)$, используя преобразование Фурье, не получается. Для получения $E_T(\mathbf{x}, t)$ задачу Коши (3.1)-(3.2) необходимо преобразовать заменой коэффициента и неизвестной функции

$$\omega_\sigma = -2i\omega, \quad u(\mathbf{x}, t) = e^{-\frac{1}{2}\omega_\sigma t} w(\mathbf{x}, t) = e^{i\omega t} w(\mathbf{x}, t) \quad 3.5$$

к следующей задаче Коши для уравнения Клейна-Гордона-Фока [6]:

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 w}{\partial t^2} - c^2 \Delta w + \omega^2 w &= F(\mathbf{x}, t), \quad \mathbf{x} \in \square^3, \quad t > 0, \quad \text{где} \quad F(\mathbf{x}, t) = e^{\frac{1}{2}\omega_\sigma t} f(\mathbf{x}, t) = e^{-i\omega t} f(\mathbf{x}, t), \\ w(\mathbf{x}, t)|_{t=0} &= u^0(\mathbf{x}), \quad \left. \frac{\partial w(\mathbf{x}, t)}{\partial t} \right|_{t=0} = w_t^0(\mathbf{x}) = u_t^0(\mathbf{x}) + \frac{\omega_\sigma}{2} u^0(\mathbf{x}) = u_t^0(\mathbf{x}) - i\omega u^0(\mathbf{x}), \quad \mathbf{x} \in \square^3. \end{aligned}$$

Фундаментальное решение 3-мерного оператора Клейна-Гордона-Фока, которое обозначим как $E_{KGF}(\mathbf{x}, t)$, находится с помощью преобразования Фурье и имеет следующий вид (см., например, [6]):

$$E_{KGF}(\mathbf{x}, t) = E_w(\mathbf{x}, t) + E_{KGF}^{(1)}(\mathbf{x}, t) = \frac{\theta(t)}{4\pi c^2 t} \delta_{S_{ct}}(\mathbf{x}) - \frac{\omega \theta(t) \theta(ct - |\mathbf{x}|)}{4\pi c^2 \sqrt{(ct)^2 - |\mathbf{x}|^2}} J_1\left(\frac{\omega}{c} \sqrt{(ct)^2 - |\mathbf{x}|^2}\right), \quad 3.6$$

где $E_w(\mathbf{x}, t) = \frac{\theta(t)}{4\pi c^2 t} \delta_{S_{ct}}(\mathbf{x})$ — фундаментальное решение 3-мерного волнового оператора, $\theta(t)$ — тета-функция Хевисайда, $\delta_{S_{ct}}(\mathbf{x})$ — простой слой на сфере $S_{ct} = \{\mathbf{x} : |\mathbf{x}| = ct\}$ с плотностью 1, $J_1(s)$ — функции Бесселя, а

$E_{KGF}^{(1)}(\mathbf{x}, t) = -\frac{\omega \theta(t) \theta(ct - |\mathbf{x}|)}{4\pi c^2 \sqrt{(ct)^2 - |\mathbf{x}|^2}} J_1\left(\frac{\omega}{c} \sqrt{(ct)^2 - |\mathbf{x}|^2}\right)$ — дополнительное к волновой части слагаемое. Применяя к (3.6) обратное преобразование (3.5) и учитывая ра-

венство $I_1(s) = -iJ_1(is)$ для модифицированной функции Бесселя (функции Инфельда), получим для $E_T(x, t)$:

$$E_T(x, t) = E_W(x, t)e^{-\frac{1}{2}\omega_\sigma t} + E_T^{(1)}(x, t) = e^{-\frac{1}{2}\omega_\sigma t} \left(\frac{\theta(t)}{4\pi c^2 t} \delta_{S_{ct}}(x) + \frac{\omega_\sigma \theta(t) \theta(ct - |x|)}{8\pi c^2 \sqrt{(ct)^2 - |x|^2}} I_1\left(\frac{\omega_\sigma}{2c} \sqrt{(ct)^2 - |x|^2}\right) \right), \quad 3.7$$

которое приведено в [1] и содержит дополнительное к волновой части «шлейфовое» слагаемое

$$E_T^{(1)}(x, t) = e^{-\frac{1}{2}\omega_\sigma t} \frac{\omega_\sigma \theta(t) \theta(ct - |x|)}{8\pi c^2 \sqrt{(ct)^2 - |x|^2}} I_1\left(\frac{\omega_\sigma}{2c} \sqrt{(ct)^2 - |x|^2}\right).$$

Подставляя формулы (3.7) в (3.4), получим для телеграфных потенциалов:

$$V_T^{(0)}[f](x, t) = \frac{1}{4\pi c^2} \int_{|y| \leq ct} \frac{f(x - y, t - |y|/c)}{|y|} e^{-\frac{\omega_\sigma |y|}{2c}} d^3 y + \frac{\omega_\sigma}{8\pi c^2} \int_0^t e^{-\frac{\omega_\sigma \tau}{2}} \left(\int_{|y| \leq c\tau} I_1\left(\frac{\omega_\sigma}{2c} \sqrt{(c\tau)^2 - |y|^2}\right) \frac{f(x - y, t - \tau)}{\sqrt{(c\tau)^2 - |y|^2}} d^3 y \right) d\tau, \quad 3.8$$

$$V_T^{(1)}[u_t^0](x, t) = \frac{e^{-\frac{1}{2}\omega_\sigma t}}{4\pi c^2} \left(\frac{1}{t} \int_{|y|=ct} u_t^0(x - y) dS_y + \frac{\omega_\sigma}{2} \int_{|y| \leq ct} I_1\left(\frac{\omega_\sigma}{2c} \sqrt{(ct)^2 - |y|^2}\right) \frac{u_t^0(x - y)}{\sqrt{(ct)^2 - |y|^2}} d^3 y \right), \quad 3.9$$

$$V_T^{(2)}[u^0](x, t) = \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{e^{-\frac{1}{2}\omega_\sigma t}}{4\pi c^2} \left(\frac{1}{t} \int_{|y|=ct} u^0(x - y) dS_y + \frac{\omega_\sigma}{2} \int_{|y| \leq ct} I_1\left(\frac{\omega_\sigma}{2c} \sqrt{(ct)^2 - |y|^2}\right) \frac{u^0(x - y)}{\sqrt{(ct)^2 - |y|^2}} d^3 y \right) \right). \quad 3.10$$

Таким образом, формулы (3.3), (3.8)-(3.10) описывают решение задачи Коши (3.1), (3.2) для телеграфного уравнения в 3-мерном случае аналогично формуле Кирхгофа для линейного волнового уравнения.

Поле электрического диполя Герца в бесконечной однородной изотропной среде

Рассмотрим случай, когда электрический диполь Герца с произвольной зависимостью тока от времени расположен в начале координат в бесконечной однородной изотропной среде и включается в момент времени $t = 0$. Ток в источнике удобно обозначить так

$$j^{(s)}(x, t) = \delta(x) P'(t), \quad P(t) \equiv 0 \quad \text{при} \quad t \leq 0, \quad 4.1$$

где через $\mathbf{P}(t)$ и $\mathbf{P}'(t) = \frac{d\mathbf{P}(t)}{dt}$ обозначены момент диполя как функция времени и ее производная. Например, в случае диэлектрика $\mathbf{P}(t) = lQ(t)\mathbf{i}(t)$, где $\mathbf{i}(t)$ — единичный вектор направления, $Q(t)$ — заряд диполя, а в случае стационарного диполя в проводнике $\mathbf{P}'(t) \equiv \mathbf{P}'_0 = I_0 l \mathbf{i} = \text{Const}$. Тогда векторный потенциал $A(\mathbf{x}, t)$ согласно (2.7) является решением задачи Коши (3.1), (3.2) с правой частью $f(\mathbf{x}, t) = \delta(\mathbf{x}) \mathbf{P}'(t) / (\varepsilon \varepsilon_0)$ и нулевыми начальными условиями. Из (3.3), (3.8)-(3.10) следует

$$A(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{\varepsilon \varepsilon_0} V_T^{(0)} [\delta(\mathbf{x}) \mathbf{P}'(t)](\mathbf{x}, t) = A_1(\mathbf{x}, t) + A_2(\mathbf{x}, t), \quad 4.2$$

где волновое слагаемое $A_1(\mathbf{x}, t)$ определяется формулой

$$A_1(\mathbf{x}, t) = \frac{\mu_0 \mu}{4\pi |\mathbf{x}|} \mathbf{P}' \left(t - \frac{1}{c} |\mathbf{x}| \right) e^{-\frac{\omega_\sigma |\mathbf{x}|}{2c}}, \quad 4.3$$

а второе слагаемое $A_2(\mathbf{x}, t)$, названное в [1] «шлейфовым», определяется формулой

$$A_2(\mathbf{x}, t) = \omega_\sigma \frac{\mu_0 \mu}{8\pi} \theta(ct - |\mathbf{x}|) \int_{|\mathbf{x}|/c}^t \frac{\mathbf{P}'(t - \tau)}{\sqrt{(c\tau)^2 - |\mathbf{x}|^2}} I_1 \left(\frac{\omega_\sigma}{2c} \sqrt{(c\tau)^2 - |\mathbf{x}|^2} \right) e^{-\frac{\omega_\sigma \tau}{2}} d\tau. \quad 4.4$$

В случае диэлектрика $\omega_\sigma = 0$, из (4.2)-(4.4) получаем:

$$A_L(\mathbf{x}, t) = \frac{\mu_0 \mu}{4\pi |\mathbf{x}|} \mathbf{P}'(t - |\mathbf{x}|/c), \quad 4.5$$

которое с учетом калибровки Лоренца (2.9) дает уравнение для скалярного потенциала

$$\frac{\partial \varphi_L(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = -c^2 \text{div} A_L(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{4\pi \varepsilon \varepsilon_0 |\mathbf{x}|^3} \left((\mathbf{x}; \mathbf{P}'(t - |\mathbf{x}|/c)) + \frac{|\mathbf{x}|}{c} (\mathbf{x}; \mathbf{P}''(t - |\mathbf{x}|/c)) \right)$$

где через $(\mathbf{a}; \mathbf{b})$ обозначено скалярное произведение векторов в пространстве $\square^3$. Интегрирование этого уравнения по времени с учетом нулевых начальных условий дает решение

$$\varphi_L(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{4\pi \varepsilon \varepsilon_0 |\mathbf{x}|^3} \left((\mathbf{x}; \mathbf{P}(t - |\mathbf{x}|/c)) + \frac{|\mathbf{x}|}{c} (\mathbf{x}; \mathbf{P}'(t - |\mathbf{x}|/c)) \right). \quad 4.6$$

Подставляя (4.5), (4.6) в (2.1), получим выражения для полей, которые выведены в [7] при помощи более длинных выкладок.

Случай гармонических по времени полей

Рассмотрим важный случай, когда ток в источнике, а значит и поля, гармонически зависят от времени:

$$\mathbf{j}^{(s)}(\mathbf{x}, t) = \mathbf{j}_m^{(s)}(\mathbf{x}) \cdot e^{i\omega_0 t}, \quad F(\mathbf{x}, t) = F_m(\mathbf{x}) \cdot e^{i\omega_0 t}, \quad F = \varphi, \mathbf{A}, \mathbf{E}, \mathbf{D}, \mathbf{H}, \mathbf{B}, \quad 5.1$$

где ω_0 — частота источника, и, следуя [8], через $F_m(\mathbf{x})$ обозначена комплексная амплитуда. В этом случае телеграфное уравнение переходит в уравнение Гельмгольца для комплексных амплитуд:

$$\bar{E}_T u(\mathbf{x}, t) = f(\mathbf{x}, t) \mapsto \Delta u_m(\mathbf{x}) + k^2 u_m(\mathbf{x}) = -\frac{f_m(\mathbf{x})}{c^2}, \quad \text{где} \quad k^2 = \frac{\omega_0(\omega_0 - i\omega_\sigma)}{c^2} = \mu\mu_0\omega_0(\varepsilon\varepsilon_0\omega_0 - i\sigma), \quad 5.2$$

$$\text{то есть} \quad k = \sqrt{\frac{\mu\mu_0\omega_0\sigma}{2}} \left(\left(\sqrt{1 + \left(\frac{\omega_0}{\omega_\sigma}\right)^2} - \left(\frac{\omega_0}{\omega_\sigma}\right) \right)^{-1/2} - i \left(\sqrt{1 + \left(\frac{\omega_0}{\omega_\sigma}\right)^2} - \left(\frac{\omega_0}{\omega_\sigma}\right) \right)^{1/2} \right), \quad \omega_\sigma = \frac{\sigma}{\varepsilon\varepsilon_0}. \quad 5.3$$

Из калибровки (2.5) и подстановки (5.1) вытекает соотношение

$$\varphi_m(\mathbf{x}) = \frac{-c^2}{i\omega_0 + \omega_\sigma} \operatorname{div} \mathbf{A}_m(\mathbf{x}) = \frac{i\omega_0}{k^2} \operatorname{div} \mathbf{A}_m(\mathbf{x}). \quad 5.4$$

Подставляя это соотношение в (2.1), получаем выражение для амплитуд полей через амплитуду только одного векторного потенциала:

$$\mathbf{B}_m(\mathbf{x}) = \operatorname{rot} \mathbf{A}_m(\mathbf{x}), \quad \mathbf{E}_m(\mathbf{x}) = -\nabla \varphi_m(\mathbf{x}) - i\omega_0 \mathbf{A}_m(\mathbf{x}) = -i\omega_0 \left(\mathbf{A}_m(\mathbf{x}) + \frac{1}{k^2} \nabla \operatorname{div} \mathbf{A}_m(\mathbf{x}) \right). \quad 5.5$$

Таким образом, для определения полей нужно решить уравнение Гельмгольца для комплексной амплитуды векторного потенциала:

$$\Delta \mathbf{A}_m(\mathbf{x}) + k^2 \mathbf{A}_m(\mathbf{x}) = -\mu\mu_0 \mathbf{j}_m^{(s)}(\mathbf{x}), \quad 5.6$$

а затем найти амплитуды полей по формулам (5.5). Отметим, что формулы (5.4)-(5.6) по форме полностью совпадают с записанными через волновое число формулами для диэлектрика (см., например, [1-5] и [7,8]), когда волновое число является чисто вещественным:

$$k \mapsto k_0 = \omega_0/c = \omega_0 \sqrt{\varepsilon\mu} / c_0. \quad 5.7$$

Гармонические по времени поля в однородном изотропном проводнике для многих типов источников рассматривались в низкочастотном пределе (см. [1-5]), то есть без учета тока смещения, когда $\omega_0 \ll \omega_\sigma = \sigma/(\varepsilon\varepsilon_0)$. В этом

приближении в определяемом в (5.2) квадрате волнового числа k^2 отбрасывается вещественная часть, то есть k^2 считается чисто мнимым:

$$k^2 = -i\omega_0\omega_\sigma/c^2 = -i\mu\mu_0\omega_0\sigma. \quad 5.8$$

Известен широкий набор задач [1-5], в каждой из которых получено приближенное «низкочастотное» решение для векторного потенциала, то есть получено решение уравнения (5.6) с соответствующими граничными условиями и условиями на бесконечности и с волновым числом, определяемым формулой (5.8). Калибровка (2.5) позволяет получить точное решение полных уравнений Максвелла для каждой задачи из этого набора в результате следующей формальной процедуры. Нужно выразить граничные условия и решение уравнения (5.6) в каждой из рассматриваемых в данной задаче сред через определяемые по формуле (5.8) волновые числа сред. Далее нужно в решении уравнения (5.6) для каждой среды и в граничных условиях волновые числа сред определять по формуле из (5.2), а амплитуды полей в каждой среде определять через амплитуду векторного потенциала по формулам (5.5). В качестве примера рассмотрим две задачи: поле точечного электрического диполя (диполь Герца) в бесконечном проводнике, а также поле такого же горизонтального диполя на плоской границе раздела двух однородных изотропных сред [1-5, 7, 8]), одна из которых является проводником.

Поле точечного электрического диполя в бесконечном проводнике

Рассмотрим электрический диполь Герца в бесконечном проводнике с амплитудой тока I_m , расстоянием между заземлениями l , расположенный в начале координат и направленный вдоль единичного вектора $\mathbf{v}$. В этом случае

$$\mathbf{j}_m^{(s)}(\mathbf{x}) = I_m l \delta(\mathbf{x}) \mathbf{i}. \quad 5.9$$

Из (5.3) следует, что $\text{Re}(ik) = -\text{Im}(k) > 0$, поэтому стремящееся к нулю при $r = |\mathbf{x}| \rightarrow \infty$ решение уравнения (5.6) во всем пространстве $\square^3$ имеет вид [6, 8]:

$$A_m(\mathbf{x}) = \mathbf{i} \cdot \mu\mu_0 I_m l e^{-ik|\mathbf{x}|} / (4\pi|\mathbf{x}|). \quad 5.10$$

Отсюда по формулам (5.5) получаем следующие выражения для амплитуд полей:

$$\mathbf{B}_m(\mathbf{x}) = \frac{\mu\mu_0 I_m l e^{-ikr}}{4\pi r^3} (1 + ikr) \cdot [\mathbf{v} \times \mathbf{x}], \quad \mathbf{E}_m(\mathbf{x}) = i\omega_0 \frac{\mu\mu_0 I_m l e^{-ikr}}{4\pi r} \left(\left(\frac{1 + ikr}{k^2 r^2} - 1 \right) \mathbf{v} + \left(k^2 r^2 - 3 - 3ikr \right) \frac{(\mathbf{x}; \mathbf{v}) \mathbf{x}}{r^2} \right).$$

Поле горизонтального электрического диполя на плоской границе раздела двух сред

Пусть среда ($\alpha=1$) с параметрами $\mu_1, \varepsilon_1, \sigma_1$ занимает верхнее полупространство $\{z > 0\}$, а среда ($\alpha=2$) с параметрами $\mu_2, \varepsilon_2, \sigma_2$ занимает нижнее по-

лупространство $\{z < 0\}$. Будем считать, что описанный выше электрический диполь расположен в начале координат и направлен вдоль оси OX , то есть $\mathbf{v} = \mathbf{e}_x$ – вектор декартова базиса. Тогда в каждой из двух сред уравнение (5.6) примет вид

$$\Delta A_m^{(\alpha)}(\mathbf{x}) + k_\alpha^2 A_m^{(\alpha)}(\mathbf{x}) = -2\gamma_\alpha \mu_\alpha \mu_0 I_m l \delta(\mathbf{x}) \mathbf{e}_x, \quad \text{где } k_\alpha^2 = \mu_\alpha \mu_0 \omega_0 (\varepsilon_\alpha \varepsilon_0 \omega_0 - i\sigma_\alpha), \quad \alpha = 1, 2, \quad 5.11$$

и где неизвестные заранее коэффициенты γ_1 и $\gamma_2 = 1 - \gamma_1$ определяются в ходе решения задачи из стандартных условий непрерывности нормальной компоненты магнитной индукции и касательной составляющей напряженности электрического поля при переходе через границу раздела сред – плоскость $\{z = 0\}$, которые имеют вид

$$B_{mz}^{(1)}(\mathbf{x})|_{z=+0} = B_{mz}^{(2)}(\mathbf{x})|_{z=-0}, \quad E_{mx}^{(1)}(\mathbf{x})|_{z=+0} = E_{mx}^{(2)}(\mathbf{x})|_{z=-0}, \quad E_{my}^{(1)}(\mathbf{x})|_{z=+0} = E_{my}^{(2)}(\mathbf{x})|_{z=-0}, \quad 5.12$$

а также из условия отсутствия поверхностного тока на границе раздела, которое означает непрерывность касательной составляющей напряженности магнитного поля при переходе через эту границу и в рассматриваемом случае может быть представлено в виде:

$$\frac{1}{\mu_1} B_{mx}^{(1)}(\mathbf{x})|_{z=+0} = \frac{1}{\mu_2} B_{mx}^{(2)}(\mathbf{x})|_{z=-0}, \quad \frac{1}{\mu_1} B_{my}^{(1)}(\mathbf{x})|_{z=+0} = \frac{1}{\mu_2} B_{my}^{(2)}(\mathbf{x})|_{z=-0}. \quad 5.13$$

Из соображений симметрии [1-4] вытекает, что векторный потенциал имеет только 2 компоненты:

$$A_m^{(\alpha)}(\mathbf{x}) = A_{mx}^{(\alpha)}(\mathbf{x}) \mathbf{e}_x + A_{mz}^{(\alpha)}(\mathbf{x}) \mathbf{e}_z, \quad \text{то есть } \mathbf{B}_m^{(\alpha)}(\mathbf{x}) = \frac{\partial A_{mz}^{(\alpha)}}{\partial y} \mathbf{e}_x + \left(\frac{\partial A_{mx}^{(\alpha)}}{\partial z} - \frac{\partial A_{mz}^{(\alpha)}}{\partial x} \right) \mathbf{e}_y - \frac{\partial A_{mx}^{(\alpha)}}{\partial y} \mathbf{e}_z. \quad 5.14$$

В этом случае из 1-го условия в (5.12) вытекает

$$A_{mx}^{(1)}(\mathbf{x})|_{z=+0} = A_{mx}^{(2)}(\mathbf{x})|_{z=-0}, \quad 5.15$$

из 2-го и 3-го условий в (5.12) с учетом (5.15) вытекает

$$\frac{1}{k_1^2} \left(\frac{\partial A_{mx}^{(1)}(\mathbf{x})}{\partial x} + \frac{\partial A_{mz}^{(1)}(\mathbf{x})}{\partial z} \right) \Big|_{z=+0} = \frac{1}{k_2^2} \left(\frac{\partial A_{mx}^{(2)}(\mathbf{x})}{\partial x} + \frac{\partial A_{mz}^{(2)}(\mathbf{x})}{\partial z} \right) \Big|_{z=-0}, \quad 5.16$$

из 1-го условия в (5.13) вытекает

$$\frac{1}{\mu_1} A_{mz}^{(1)}(\mathbf{x})|_{z=+0} = \frac{1}{\mu_2} A_{mz}^{(2)}(\mathbf{x})|_{z=-0}, \quad 5.17$$

а из 2-го условия в (5.13) с учетом (5.15) вытекает

$$\left. \frac{1}{\mu_1} \frac{\partial A_{mx}^{(1)}(\mathbf{x})}{\partial z} \right|_{z=+0} = \left. \frac{1}{\mu_2} \frac{\partial A_{mx}^{(2)}(\mathbf{x})}{\partial z} \right|_{z=-0}. \quad 5.18$$

В [2] получены граничные условия (5.15)-(5.18), предложен метод нахождения решений уравнений (5.11), которые удовлетворяют этим условиям, а также получено такое решение для случая $\mu_1 = \mu_2 = 1$. Этим же методом для общего случая нами получено решение, которое в системе СИ можно представить в виде

$$A_{mx}^{(\alpha)}(\mathbf{x}) = \mu_0 \mu_1 \mu_2 \frac{I_m l}{2\pi} \int_0^{+\infty} \frac{\lambda e^{-|z|\sqrt{\lambda^2 - k_\alpha^2}} J_0\left(\lambda \sqrt{x^2 + y^2}\right) d\lambda}{\left(\mu_1 \sqrt{\lambda^2 - k_2^2} + \mu_2 \sqrt{\lambda^2 - k_1^2}\right)}, \quad 5.19$$

$$A_{mz}^{(\alpha)}(\mathbf{x}) = \frac{\mu_0 \mu_1 \mu_2 I_m l x}{2\pi \mu_\alpha \sqrt{x^2 + y^2}} \int_0^{+\infty} \frac{\left(k_1^2 - k_2^2\right) \lambda^2 e^{-|z|\sqrt{\lambda^2 - k_\alpha^2}} J_1\left(\lambda \sqrt{x^2 + y^2}\right) d\lambda}{\left(\mu_1 \sqrt{\lambda^2 - k_2^2} + \mu_2 \sqrt{\lambda^2 - k_1^2}\right) \left(k_1^2 \mu_2 \sqrt{\lambda^2 - k_2^2} + k_2^2 \mu_1 \sqrt{\lambda^2 - k_1^2}\right)}, \quad 5.20$$

где $J_0(s)$ и $J_1(s)$ — функции Бесселя. Из этих формул вытекает равенство

$$\operatorname{div} A_m^{(\alpha)}(\mathbf{x}) = -k_\alpha^2 \frac{\mu_0 \mu_1 \mu_2 I_m l x}{2\pi \sqrt{x^2 + y^2}} \int_0^{+\infty} \frac{\left(\mu_1 \sqrt{\lambda^2 - k_1^2} + \mu_2 \sqrt{\lambda^2 - k_2^2}\right) \lambda^2 e^{-|z|\sqrt{\lambda^2 - k_\alpha^2}} J_1\left(\lambda \sqrt{x^2 + y^2}\right) d\lambda}{\left(\mu_1 \sqrt{\lambda^2 - k_2^2} + \mu_2 \sqrt{\lambda^2 - k_1^2}\right) \left(k_1^2 \mu_2 \sqrt{\lambda^2 - k_2^2} + k_2^2 \mu_1 \sqrt{\lambda^2 - k_1^2}\right)}. \quad 5.21$$

Полученное точное решение позволяет по формулам (5.5) с учетом формулы (5.21) найти амплитуды полей в любой точке пространства. Нетрудно проверить, что в случае одинаковых сред оно совпадает с решением (5.10) для всего пространства. Отметим, что в пределе $\omega_0 \mapsto +0$ полученное решение переходит в решение стационарной задачи $A_m^{(\alpha)}(\mathbf{x}) \mapsto A^{(\alpha)}(\mathbf{x})$, для которой уравнения (5.11) примут вид уравнений Пуассона

$$\Delta A^{(\alpha)}(\mathbf{x}) = -2\gamma_\alpha \mu_\alpha \mu_0 I_m l \delta(\mathbf{x}) \mathbf{e}_x, \quad \alpha = 1, 2:$$

$$A_{mx}^{(\alpha)}(\mathbf{x}) \mapsto A_x(\mathbf{x}) = \frac{\mu_0 \mu_1 \mu_2}{(\mu_1 + \mu_2)} \frac{I_m l}{2\pi |\mathbf{x}|}, \quad A_{mz}^{(\alpha)}(\mathbf{x}) \mapsto A_z^{(\alpha)}(\mathbf{x}) = \frac{\mu_0 \mu_\alpha (\mu_2 \sigma_2 - \mu_1 \sigma_1)}{(\mu_1 + \mu_2)(\sigma_1 + \sigma_2)} \frac{I_m l x}{2\pi (x^2 + y^2)} \left(\frac{|z|}{|\mathbf{x}|} - 1 \right),$$

$$\operatorname{div} A^{(\alpha)}(\mathbf{x}) = -\frac{\mu_0 \mu_\alpha \sigma_\alpha}{(\sigma_1 + \sigma_2)} \frac{I_m l x}{2\pi |\mathbf{x}|^3} \quad \text{и} \quad \varphi_m^{(\alpha)}(\mathbf{x}) = \frac{i\omega_0}{k_\alpha^2} \operatorname{div} A_m^{(\alpha)} \mapsto \varphi(\mathbf{x}) = -\frac{\operatorname{div} A^{(\alpha)}(\mathbf{x})}{\mu_0 \mu_\alpha \sigma_\alpha} = \frac{I_m l x}{2\pi (\sigma_1 + \sigma_2) |\mathbf{x}|^3},$$

Поскольку $\lim_{\omega_0 \mapsto +0} \frac{i\omega_0}{k_\alpha^2} = \frac{-1}{\mu_0 \mu_\alpha \sigma_\alpha}$. То есть в стационарном случае электриче-

ское поле и компонента $A_x(x)$ векторного потенциала описываются одинаковыми формулами в обеих средах, и получаются следующие значения коэффициентов в уравнениях (5.11): $\gamma_1 = \mu_2 / (\mu_1 + \mu_2)$ и $\gamma_2 = \mu_1 / (\mu_1 + \mu_2)$.

Заключение

В работе получена формула, описывающая решение задачи Коши для телеграфного уравнения в 3-мерном пространстве, аналогичная (и переходящая в нее при нулевой проводимости) формуле Кирхгофа для волнового уравнения. На основе формулы найдено решение задачи о поле электрического диполя Герца с произвольной зависимостью тока от времени в бесконечном однородном изотропном проводнике. Также получено точное решение во всем пространстве для важной задачи о поле горизонтального гармонического по времени электрического диполя Герца на границе раздела двух сред. Ранее для этой задачи были известны только приближенные выражения для полей в плоскости раздела. Эти результаты имеют значение для разработки и тестирования физически адекватных численных методов решения уравнений Максвелла в проводнике, а также для разработки численных моделей распространения низкочастотных сигналов в волноводе Земля-ионосфера.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проект № 13-01-00063.

Список литературы

1. Светов Б.С. Основы геоэлектрики. М.: Изд-во ЛКИ, 2008.
2. Заборовский А.И. Электроразведка. М.: ГНТИ Нефтяной и горно-топливной литературы, 1963.
3. Матвеев Б.К. Электроразведка. М.: Недра, 1990.
4. Крылов С.С. Геоэлектрика. Поля искусственных источников. СПб.: Изд-во СПбГУ, 2004.
5. Wait J.R. Geo-Electromagnetism. New York: Academic Press, 1982.
6. Владимиров В.С. Уравнения математической физики. М.: Наука, 1988.
7. Сивухин Д.В. Общий курс физики. Т. 3. Электричество. М.: Физматлит, 2004.
8. Никольский Н.Н., Никольская Т.И. Электродинамика и распространение радиоволн. М.: Наука, 1989.

ПРОТЕКАНИЕ ГЕТЕРОФАЗНЫХ ХИМИЧЕСКИХ РЕАКЦИЙ В ДИФфуЗИОННОЙ ЗОНЕ

Пушкин А.А., Римкевич В.С.

Институт геологии и природопользования ДВО РАН, Владивосток

Приведены результаты исследования гетерофазных химических реакций в диффузионной зоне. К ранее применявшемуся топохимическому уравнению Авраами добавлены два новых: Праута – Томпкинса и экспоненциальное. Механизм реакции определен по минимуму погрешности вычисления констант скоростей.

The study of heterophase chemical reaction in diffusion zone is carried out in this work. Prout – Tompkins and exponential equations are considered for study processes in diffusion zone in addition to considered earlier Avraami equation. The determination of reaction mechanism is realized by minimum of calculation mistakes of rate constants.

Известно, что гетерофазные химические реакции определяются двумя основными физико-химическими процессами: химическим взаимодействием сталкивающихся или контактирующих молекул и диффузией молекул из одной фазы в другую. При этом определяет механизм реакции тот процесс, который идет наиболее медленно. Если взаимодействие протекает быстро, а диффузия медленно, то говорят, что реакция протекает в диффузионной области. Если диффузия протекает быстро, то скорость данной гетерофазной реакции определяется скоростью химической реакции. Существует критерий протекания реакции в той или иной стадии. Критерий протекания в переходной области, например реакции $A+B=AB$, выглядит следующим образом [1]:

$$\beta_0 \cdot f \sim k_0 C_B \cdot \exp\left(-\frac{E_A - E_D}{RT}\right), \quad (1)$$

где β_0 – фактор диффузии, f – удельная поверхность контакта фаз, k_0 – константа скорости реакции, C_B – концентрация молекул вещества B , E_A – энергия активации реакции, E_D – энергия активации диффузии.

В ситуации когда $E_A > E_D$, выражение под экспонентой отрицательно и с ростом T убывает, следовательно, экспоненциальный множитель в правой части возрастает, и, таким образом, выражение в правой части начинает превосходить левую часть, а значит с ростом температуры скорость реакции начинает превосходить скорость диффузии. Поэтому диффузионная стадия становится более медленной, чем кинетическая, и поэтому она становится лимитирующей. Таким образом, реакция с повышением температуры переходит в диффузионную зону. В противоположном случае, $E_A < E_D$, с ростом температуры равновесие смещается в противоположную сторону (экспоненциальный множитель убывает, скорость диффузии превосходит скорость химической реакции) и более медленной становится стадия химической реакции, т.е. реакция смещается в кинетическую зону. В кинетической зоне

гетерофазная реакция протекает аналогично гомофазным реакциям, т.е. концентрация изменяется по степенному закону. Реакции, протекающие в диффузионной зоне, мы ранее описывали топохимическим уравнением Авраами [2, 3], которое имеет вид:

$$c_i = c_0 (1 - \exp(-kt^m)), \quad (2)$$

где c_i и c_0 – текущая и начальная концентрация исследуемого реагента или исследуемого продукта, m – порядок реакции, k – константа скорости, t – текущее время опыта. В случаях, когда либо все реагенты, кроме исследуемого, берутся в избытке, либо все продукты, кроме исследуемого, полностью вытесняются, эту реакцию можно считать формально простой и принимать её порядок равным 1. Уравнение Авраами в этом случае упрощается и принимает вид экспоненциального закона:

$$c_i = c_0 (1 - \exp(-kt_i)), \quad (3)$$

В случае малых kt уравнение Авраами переходит в уравнение Праута-Томпкинса:

$$c_i = \frac{c_0}{1 + \exp(-kt_i)}. \quad (4)$$

В обоих уравнениях константы скорости вычисляются аналогично. После логарифмирования и проведения преобразований в обоих случаях получаем уравнения линейной регрессии, которые отличаются выражениями под логарифмами. Константы скорости являются угловыми коэффициентами в уравнениях данных прямых и определяются по формулам метода наименьших квадратов для этих коэффициентов:

$$k = \frac{n \cdot \sum_{i=1}^n (t_i \cdot \ln(1 - \frac{c_i}{c_0})) - (\sum_{i=1}^n \ln(1 - \frac{c_i}{c_0})) (\sum_{i=1}^n (t_i))}{n \cdot \sum_{i=1}^n (t_i)^2 - (\sum_{i=1}^n (t_i))^2} \quad (5)$$

для экспоненциального закона и

$$k = \frac{n \cdot \sum_{i=1}^n (t_i \cdot \ln(\frac{c_i}{c_0 - c_i})) - (\sum_{i=1}^n \ln(\frac{c_i}{c_0 - c_i})) (\sum_{i=1}^n (t_i))}{n \cdot \sum_{i=1}^n (t_i)^2 - (\sum_{i=1}^n (t_i))^2} \quad (6)$$

для уравнения Праута-Томпкинса. После расчета констант скоростей определяем погрешности их вычисления по формулам для погрешностей вычисления коэффициентов линейной регрессии методом наименьших квадратов. Формулы для погрешностей одинаковы, а значения величин в формулах аналогичны. Формула относительной погрешности угловых коэффициентов имеет вид [4]:

$$\frac{dk}{k} = k_p \cdot \frac{\sigma_y}{\sigma_x}, \quad (7)$$

где k_p – коэффициент Стьюдента с $n-2$ степенями свободы на уровне значимости p , σ_y и σ_x – средние квадратические отклонения логарифмов соответ-

ствующих каждому закону выражений для концентраций:

$$\sigma_y = \sqrt{\frac{1}{(n-2)} \cdot (\sum_{i=1}^n (\ln(1 - \frac{c_i}{c_0}) - \overline{\ln(1 - \frac{c_i}{c_0})})^2)} \quad (8)$$

для экспоненциального закона и

$$\sigma_y = \sqrt{\frac{1}{(n-2)} \cdot (\sum_{i=1}^n (\ln(\frac{c_i}{c_0 - c_i}) - \overline{\ln(\frac{c_i}{c_0 - c_i})})^2)} \quad (9)$$

для уравнения Праута-Томпкинса, а среднее квадратическое отклонение отсчетов времени выглядит одинаково для обоих законов:

$$\sigma_x = \sqrt{\sum_{i=1}^n ((t_i) - \overline{(t_i)})^2}. \quad (10)$$

Если относительные погрешности вычисления констант скоростей невелики (в пределах 5-10 %), то можно считать, что данный закон адекватно описывает опытные данные и, следовательно, он и реализуется на практике. На рис. 1 изображены графики обоих законов. Видно, что при больших значениях kt они практически совпадают, а при малых значительно отличаются. Физически экспоненциальный закон реализуется в том случае, когда диффузия проходит медленно и химическая реакция проходит на поверхности, пока весь слой атомов не прореагирует, затем реакция переходит к следующему слою атомов. Экспоненциальным законом, в частности, описывается процесс сублимации.

Закон Праута-Томпкинса соответствует случаю, когда диффузия идет быстрее, в этом случае реакция происходит не только на поверхности зерен, но образуются центры развития процесса и в объеме зерен. Сравнивая по-

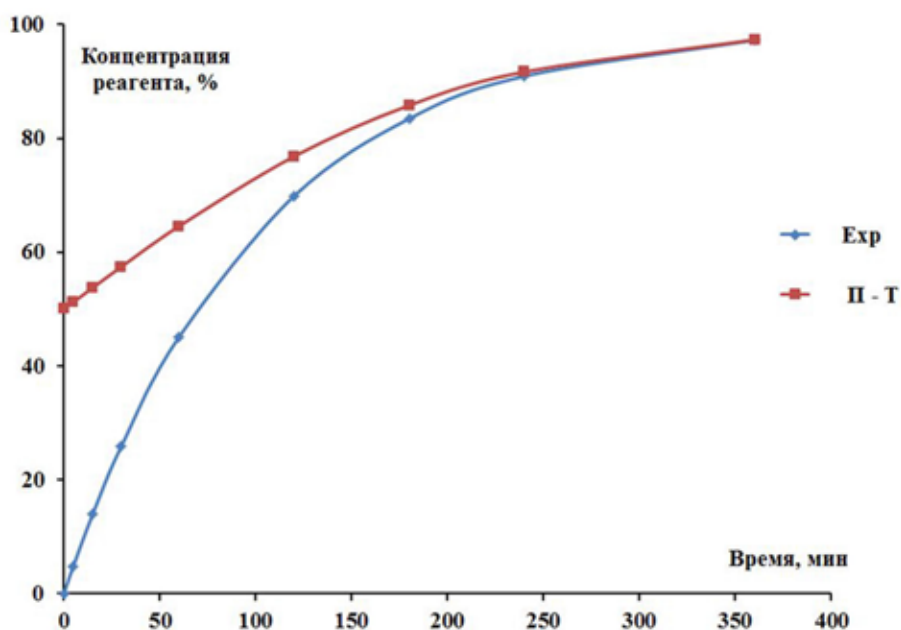


Рис. 1. Графики законов экспоненциального и Праута-Томпкинса.

ведение графиков на рис. 1, приходим к выводу, что в целом закон Праута-Томпкинса описывает более быстро протекающие процессы. В частности, анализируя семейство кинетических кривых для различных температур для химической реакции фторирования каких-либо силикатов или алюмосиликатов (каолина, кварцевого песка, кианита и т.д.), то можно заметить, что кривые, соответствующие более высоким температурам, идут более круто (реакции протекают быстрее) и напоминают закон Праута-Томпкинса, а при низких температурах (реакции протекают медленнее) напоминают экспоненциальный закон.

Если реакция не может быть сведена к реакциям 1-го порядка, то вычисления, по-видимому, следует проводить по уравнению Авраами. Критериям отнесения к тому ли иному закону и механизму являются погрешности вычисления. Форма для расчета констант скоростей, а также и энергий активаций, с их погрешностями, показана на рис. 2. При расчете мы полагаем, что при прохождении процесса в кинетической зоне, реакция протекает по степенному закону. В случае протекания реакции в диффузионной зоне реакция протекает по одному из трех законов: по Авраами, экспоненциальному или Праута-Томпкинса. В форме на рис. 2 представлены результаты расчетов реакции гидрофторирования золы из отвалов Благовещенской ТЭЦ для трех температур.

Результаты вычисления констант скоростей для степенного закона и уравнения Авраами дают погрешности, превышающие 100 %. Следовательно, ни один из этих двух законов не может описывать ход реакции. Результаты расчетов погрешностей констант скоростей для двух других законов,

t	G	X
30	2.67	30
60	5.34	60
120	8.89	120
240	15.28	240
360	18.87	360
450	23.37	450

Температура, град. С: 25, 75, 100, 0

Доверительная вероятность: 0,05

Степенной закон

Константа скорости, 1/мин: 0,001611, 0,002100, 0,002212

Погрешность КС, %: 158, 6415, 410

Энергия активации, Дж/моль: 4037

Погрешность ЭА, %: 13

Экспоненциальный закон

Константа скорости, 1/мин: 0,000447, 0,003607, 0,009737

Погрешность КС, %: 0, 1, 1

Энергия активации, Дж/моль: 34896

Погрешность ЭА, %: 127

Уравнение Авраами

Константа скорости, 1/мин: 0,001783, 0,004354, 0,002928

Погрешность КС, %: 111, 131, 159

Энергия активации, Дж/моль: 7899

Погрешность ЭА, %: 17

Уравнение Праута - Томпкинса

Константа скорости, 1/мин: 0,002690, 0,004126, 0,007185

Погрешность КС, %: 1, 1, 2

Энергия активации, Дж/моль: 11188

Погрешность ЭА, %: 862

Кинетическая зона

Диффузионная зона

Вычисления Графики Вывод

Рис. 2. Форма «Зона реакции» для определения механизма реакции.

принятых нами к рассмотрению в этой работе, погрешности вычисления констант скоростей не превышают одного – двух процентов. Значит, и тот, и другой закон описывают механизм реакции удовлетворительным образом. Погрешности для экспоненциального закона немного меньше, поэтому предположим, что закон протекания этой топохимической гетерофазной реакции экспоненциальный.

Реакция гидрофторирования золы фторидом аммония протекает в диффузионной зоне. Химическое взаимодействие молекул зольных фракций с фторидом аммония происходит быстро, а продвижение фронта реакции за счет диффузии – медленно. Поэтому диффузионная стадия определяет ход реакции. Механизм протекания реакции экспоненциальный. Таким образом, добавление в рассмотрение вычислений по двум дополнительным законам, позволяет более детально рассмотреть процессы, проходящие в диффузионной зоне гетерофазной реакции.

Список литературы

1. Пушкин А.А., Леонтьев М.А., Римкевич В.С. Зона протекания гетерофазных физико-химических реакций // Тр. XI Всерос. (с межд. уч.) научн. школы «Математические исследования в естественных науках». Апатиты, 11-12 нояб. 2014 г. Апатиты: Изд-во К & М, 2014. С. 238-242.
2. Стромберг А.Г., Семченко Д.П. Физическая химия. М.: Высшая школа, 2001. 528 с.
3. Пушкин А.А., Белов Р.В., Римкевич В.С. Тр. VIII Всерос. научн. школы «Математические исследования в естественных науках». Апатиты, 15-16 окт. 2012г. С. 26-30.
4. Колемаев В.А., Староверов С.В., Турундаевский В.Б. Теория вероятностей и математическая статистика. М.: Высшая школа, 1991. 400 с.

НОВЫЕ ТЕОРЕМЫ О ФУЛЛЕРЕНАХ

Степенщиков Д.Г., Войтеховский Ю.Л.

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

Для полного многообразия фуллеренов $C_{62} - C_{150}$ получена статистика по порядкам групп автоморфизмов и точечным группам симметрии. Определены значения n , для которых существуют фуллерены C_n с симметриями 1, 2, m , $\bar{1}$, 222 и $2/m$.

Введение

В статьях (Voytekhschikov, Stepenshchikov, 2001, 2002, 2003) сообщены результаты по многообразию фуллеренов $C_{20} - C_{100}$ с указанием их точечных групп симметрии (т.г.с.) и порядков групп автоморфизмов (п.г.а.). При

этом многообразии $C_{62} - C_{70}$ ограничивалось изомерами с парами смежных пентагонов, а $C_{72} - C_{100}$ – IPR-изомерами. Эти ограничения соответствуют принципам стабильности фуллеренов (Kroto, 1987). В данной работе приводятся результаты по т.г.с. и п.г.а. полного многообразия $C_{62} - C_{150}$, а также ряд теорем о существовании фуллеренов с заданной симметрией.

Генерирование и характеристика фуллеренов

Для генерирования фуллеренов использованы свободно распространяемые программы (Brinkmann *et al.*, 2012), для получения их т.г.с. и п.г.а. – собственные. Результаты приведены в таблице. Большинство фуллеренов асимметричны (от 89.5 % для C_{62} до 99.8 % для C_{150} ; это заостряет вопрос о конструктивном определении асимметрии как таковой). Далее по многочисленности идут фуллерены с т.г.с. 2 и m . На фуллеренах $C_{62} - C_{150}$ проявлены все 28 т.г.с., среди которых 6 некристаллографических: 52 , $m\bar{2}0\bar{5}m$, $\bar{1}2\bar{2}m$, 235 , $\bar{3}\bar{5}m$ (Yoshida, Fowler, 1997). Самая редкая т.г.с. икосаэдра 235 впервые появляется на изомере C_{140} , т.е., на этом классе точечные группы симметрии фуллеренов исчерпываются.

Таблица. Порядки групп автоморфизмов и точечные группы симметрии фуллеренов $C_{62} - C_{150}$.

а.г.о.	1	2	3	4	6	8	10	12	20	24	24	24	24	60	120	Total
с.р.г.	1	2	3	4	6	8	10	12	20	24	24	24	24	60	120	
и	1	2	3	4	6	8	10	12	20	24	24	24	24	60	120	
62	2155	142	80	4	16	4	1	1								2385
64	2990	316	118	2	8	4										3465
66	4134	211	112		18	2	1									4478
68	5714	411	122	5	21	7	28	2	10	1	1	2	2			6332
70	7634	300	186	8	14				5							8149
72	10304	619	190	3	1	26	7	24	3	1		5	4			11190
74	13557	414	237	9	18				6	1	1					14246
76	18005	800	246	2	14	14	11	45	4	5			3			19151
78	23197	557	312	2	35				3			3				24109
80	30280	1146	371	5	15	28	16	39	1	12	2					31924
82	38548	742	380		15	28			5			2	2		1	39718
84	49590	1436	434	9	1	29	4	59	3	6	1					51592
86	62212	976	505	15	36				9	5		3				63761
88	79033	1945	596	10	24	43	16	52	1	8						81738
90	97936	1266	655	3	50				4							99918
92	123141	2412	646	12	20	38	13	80	5	19	2	2				126409
94	150939	1603	879	26	42				4	4		5	3			153493
96	187505	3200	972	20	4	28	16	70	9	2		3	3			191839
98	227934	2029	952	27	58				13	1	1					231017
100	280730	3801	1093	14	40	66	28	114	9	5		2	5	2		285914
102	337808	2542	1228	3	67				6	4						341658
104	412339	4954	1413	29	37	82	23	89	1	24	2	7	7			419013
106	492768	3126	1541	38	48				8							497529
108	596532	5872	1501	26	5	65	29	145	9	10	1	3	10			604217
110	707441	3846	1874	42	90				14	5		1				713319
112	850295	7403	2147	41	59	54	28	116	1	8		6	2			860161
114	1001569	4684	2079	7	88				9	5						1008444
116	1195728	8713	2238	44	49	76	22	169	7	34	2	4	1			1207119
118	1400184	5610	2609	54	84				12							1408553
120	1660007	10787	2921	52	10	139	51	157	3	11	5	8	8	2		1674171
122	1932981	6765	3008	59	90				21	1	1					1942929
124	2279671	12436	3119	59	80	63	30	221	11	10		6	12			2295721
126	2638922	8067	3729	10	125				11	1						2650866
128	3094318	15346	4065	83	78	69	42	178	1	38	2	1	1	3	3	3114236
130	3566798	9491	4131	79	124				11			1				3580637
132	4159762	17505	4164	74	13	148	54	279	15	20	4	7	13			4182071
134	4771426	11219	4818	77	134				25	10	1					4787715
136	5539717	21034	5515	106	108	154	49	226	4	16		11	7			5566949
138	6325855	13174	5482	16	157				12	2						6344698
140	7310743	24046	5545	98	100	163	74	336	22	46	7	2	2			7341204
142	8316868	15241	6668	106	142				8							8339033
144	9567654	28779	7318	144	20	122	54	269	1	18	2	12	8			9604411
146	10842497	17769	7050	108	168				31	2	2					10867631
148	12428537	32165	7470	137	146	138	53	387	15	8		12	21			12469092
150	14029812	20597	8493	24	216				16	7						14059174

Для определённых значений n , согласно таблице, можно предположить существование (или отсутствие) хотя бы одного фуллерена с заданной т.г.с.. Так, для любого чётного $n \geq 62$ можно найти хотя бы один фуллерен C_n с т.г.с. 1, 2, m и $mm2$. То же верно для т.г.с. 3, за исключением $n = 66$. Для $n = 64 + 4k$, где $k = 0, 1, 2, \dots$ можно найти хотя бы один фуллерен C_n с т.г.с. 222 и $2/m$. То же верно для т.г.с. $\bar{1}$, за исключением $n = 68$. Наконец, для всех $n = 64 + 6k$, где $k = 0, 1, 2, \dots$ нет фуллеренов C_n с т.г.с. 32. Рассмотренные закономерности нуждаются в доказательствах, так как любая таблица конечна и не гарантирует, что для какого-нибудь достаточно большого n правило не будет нарушено. Ниже приведен ряд таких доказательств.

Фуллерены с заданной симметрией

Рассмотрим фрагмент поверхности фуллерена (рис. 1а) со следующими свойствами: 1. Внутри фрагмента содержится 6 пентагонов, что следует из леммы в (Voytekhovsky, Stepenshchikov, 2004); 2. Если окружить фрагмент поясом из 6 гексагонов так, чтобы каждый гексагон располагался между зубцами (рис. 1б), то результирующий фрагмент будет иметь тот же контур, что и исходный; к фрагменту можно добавлять любое количество поясов; 3. Два фрагмента могут быть соединены друг с другом, образуя фуллерен (рис. 1с).

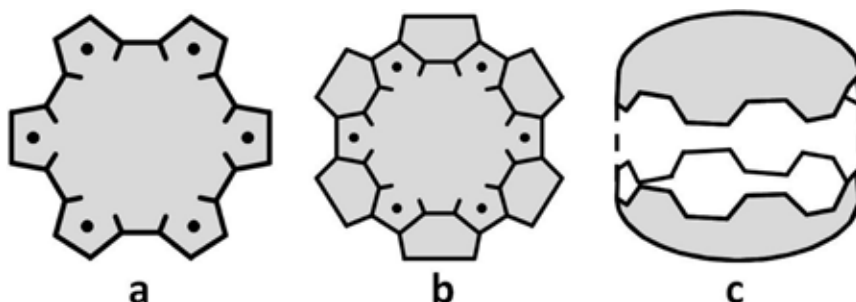


Рис. 1. а – фрагмент (зубцы отмечены точками), б – тот же фрагмент с добавленным поясом гексагонов, с – схема соединения фрагментов в фуллерен.

Фрагменты, у которых хотя бы один зубец образован пентагоном, назовём крышками. Авторами перечислены все крышки (342 без учёта энантиоморфных). Число граней на них варьирует от 13 до 48. Симметрия крышек определяется 7 плоскими т.г.с., причём m представлена двумя различными плоскостями m_1 и m_2 (рис. 2). Самая высокая т.г.с. $6mm$ совпадает с симметрией контура крышки. Ось, проходящую через центры образующих фуллерен крышек, назовём главной.

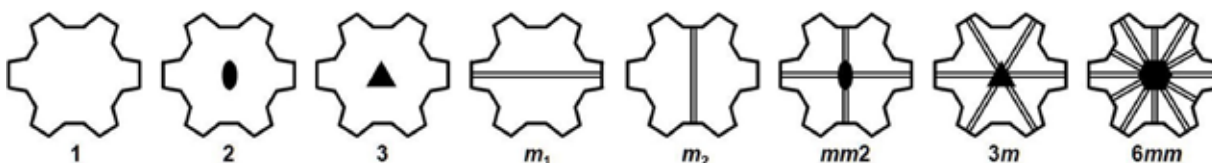


Рис. 2. Все возможные т.г.с. крышек.

Предположим, что две крышки, образующие фуллерен, при симметричных преобразованиях переходят только сами в себя или друг в друга (в последнем случае они одинаковы или энантиоморфны). Таким преобразованиям отвечают элементы симметрии группы $6/mmm$, где ось 6 совпадает с главной. Выбрав определённые пары крышек, на основании их сходства, взаимного расположения и общих элементов симметрии можно определить т.г.с. образуемого фуллерена. Вставляя между крышками пояса, получим бесконечную серию фуллеренов с данной т.г.с. и числом граней, кратным 6. Выбрав несколько серий, покрывающих требуемое множество натуральных чисел, начиная с f_0 , докажем существование фуллерена с определённой т.г.с. для любого числа граней, больше или равного f_0 . Следующие теоремы основаны на данном предположении.

1. Для любого натурального $f \geq f_0 = 28$ существует хотя бы один фуллерен C_{2f-4} с т.г.с. 1

Доказательство. Возьмём 6 «верхних» асимметричных крышек и любую отличную от них «нижнюю» (рис. 3). «Верхние» крышки не имеют элементов симметрии и не совпадают с «нижней» крышкой, поэтому в паре с ней дают асимметричный фуллерен. Вставляя между крышками пояса, получим 6 бесконечных серий фуллеренов с т.г.с. 1: $15 + 13 + 6n = 28 + 6n$, $16 + 13 + 6n = 29 + 6n$, $17 + 13 + 6n = 30 + 6n$, $18 + 13 + 6n = 31 + 6n$, $19 + 13 + 6n = 32 + 6n$, $20 + 13 + 6n = 33 + 6n$, где $n = 0, 1, 2, \dots$. Они покрывают множество натуральных чисел, начиная с $f_0 = 28$. По формуле Эйлера числа вершин v и граней f связаны соотношением $v = 2f - 4$. □

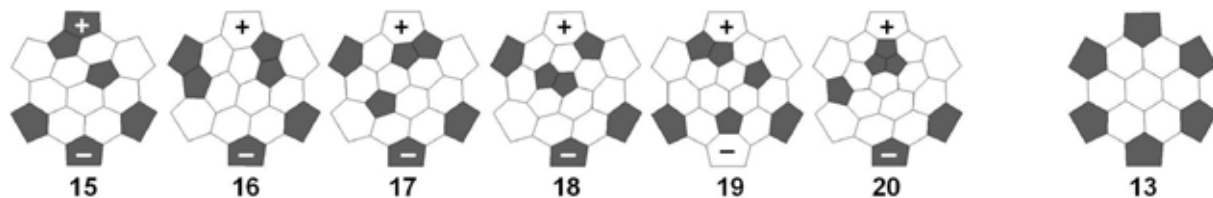


Рис. 3. К доказательству теорем 1 и 4. Внизу – числа граней на крышке.

2. Для любого натурального $f \geq f_0 = 29$ существует хотя бы один фуллерен C_{2f-4} с т.г.с. 2

Доказательство. Возьмём 6 «верхних» крышек с т.г.с. 2 и две отличные от них «нижние» крышки с т.г.с., содержащей ось 2 (рис. 4). Парой «верхней» крышке с 14 гранями является «нижняя» крышка с 18 гранями, для остальных «верхних» крышек – «нижняя» крышка с 13 гранями. Во всех парах крышки различны и при любом способе соединения имеют единственную общую ось 2, совпадающую с главной. Вставляя между крышками пояса, получим 6 бесконечных серий фуллеренов с т.г.с. 2: $16 + 13 + 6n = 29 + 6n$, $17 + 13 + 6n = 30 + 6n$, $18 + 13 + 6n = 31 + 6n$, $14 + 18 + 6n = 32 + 6n$, $20 + 13 + 6n = 33 + 6n$, $21 + 13 + 6n = 34 + 6n$, где $n = 0, 1, 2, \dots$. Они покрывают множество натуральных чисел, начиная с $f_0 = 29$. □

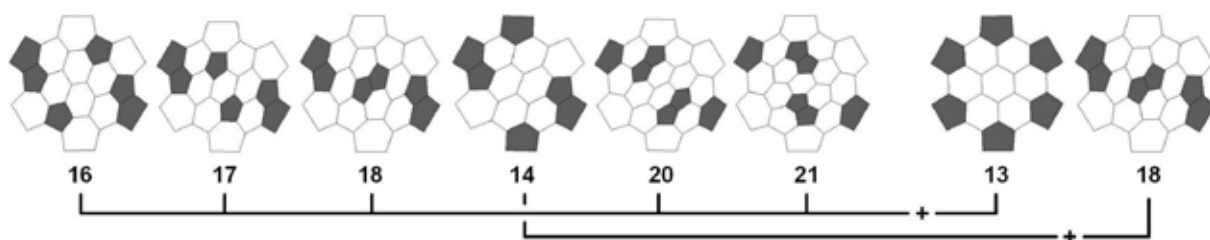


Рис. 4. К доказательству теорем 2 и 5. Внизу – числа граней на крышке.

3. Для любого натурального $f \geq f_0 = 29$ существует хотя бы один фуллерен C_{2f-4} с т.г.с. m

Доказательство. Возьмём 6 «верхних» крышек с т.г.с. m и «нижнюю» крышку с т.г.с. $6m$ (рис. 5). В каждой паре «верхней» крышки с отличной от неё «нижней» крышкой есть единственная общая плоскость симметрии, в которой лежит главная ось. Вставляя между крышками пояса, получим 6 бесконечных серий фуллеренов с т.г.с. m : $16 + 13 + 6n = 29 + 6n$, $17 + 13 + 6n = 30 + 6n$, $18 + 13 + 6n = 31 + 6n$, $19 + 13 + 6n = 32 + 6n$, $20 + 13 + 6n = 33 + 6n$, $21 + 13 + 6n = 34 + 6n$, где $n = 0, 1, 2, \dots$. Они покрывают множество натуральных чисел, начиная с $f_0 = 29$. □ Заметим, что есть «верхние» крышки с т.г.с. m_1 и m_2 . При вставке чётного или нечётного числа поясов плоскость симметрии «верхней» крышки совпадает с различными плоскостями «нижней».

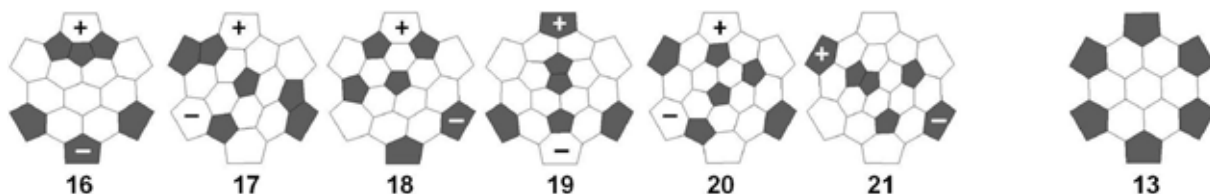


Рис. 5. К доказательству теорем 3 и 6. Внизу – числа граней на крышке.

4. Для любого чётного $f \geq f_0 = 36$ существует хотя бы один фуллерен C_{2f-4} с т.г.с. $\bar{1}$

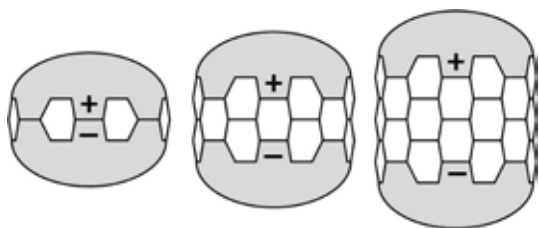


Рис. 6. Образование серии фуллеренов через два пояса, теоремы 4 и 6.

Доказательство. Возьмём 6 «верхних» асимметричных крышек (рис. 3, слева) в паре с их энантиоморфными аналогами – «нижними» крышками. Соединим каждую пару крышек через один пояс так, чтобы зубец «+» «верхней» крышки располагался над зубцом «-» «нижней». Крышки отображаются друг в друга центром инверсии. При образовании серий нужно добавлять по два пояса за шаг, сохраняя ориентировку крышек (рис. 6). Получим 6 бесконечных серий фуллеренов с т.г.с. $\bar{1}$: $15 + 15 + 6 + 12n = 36 + 12n$, $16 + 16 + 6 + 12n = 38 + 12n$, $17 + 17 + 6 + 12n = 40 + 12n$, $18 + 18 + 6 + 12n = 42 + 12n$, $19 + 19 + 6 + 12n = 44 + 12n$, $20 + 20 + 6 + 12n = 46 + 12n$, где $n = 0, 1, 2, \dots$. Они покрывают множество чётных чисел, начиная с $f_0 = 36$. □

5. Для любого чётного $f \geq f_0 = 32$ существует хотя бы один фуллерен C_{2f-4} с т.г.с. 222

Доказательство. Возьмём 3 крышки с т.г.с. 2 в паре с аналогами (рис. 4, крышки с 16, 17 и 18 гранями). В каждой паре крышки отображаются сами в себя общей осью 2, совпадающей с главной, а также друг в друга – осью 2, перпендикулярной главной. Наличие двух осей 2 приводит к появлению у результирующего фуллерена третьей оси 2. Вставляя между крышками пояса, получим 3 бесконечные серии фуллеренов с т.г.с. 222: $16 + 16 + 6n = 32 + 6n$, $17 + 17 + 6n = 34 + 6n$, $18 + 18 + 6n = 36 + 6n$, где $n = 0, 1, 2, \dots$. Они покрывают множество чётных чисел, начиная с $f_0 = 32$. □

6. Для любого чётного $f \geq f_0 = 38$ существует хотя бы один фуллерен C_{2f-4} с т.г.с. $2/m$

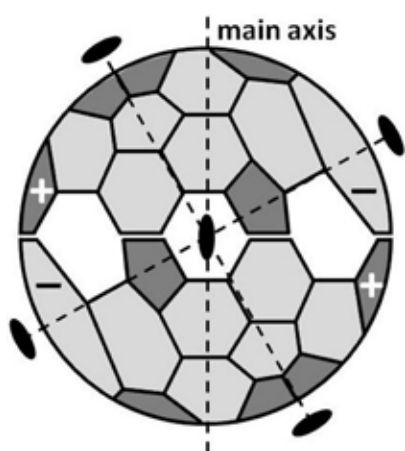


Рис. 7. Фуллерен с т.г.с. mtm , образованный соединением двух одинаковых крышек с т.г.с. m .

Доказательство. Возьмём 6 «верхних» крышек с т.г.с. m в паре с аналогами – «нижними» крышками (рис. 5, слева). Соединим каждую пару крышек через один пояс так, чтобы их плоскости симметрии совпадали, а зубец «+» «верхней» крышки располагался над зубцом «-» «нижней». Крышки отображаются сами в себя общей плоскостью симметрии, а также друг в друга осью 2, перпендикулярной главной оси. При образовании серий нужно добавлять по два пояса за шаг, сохраняя ориентировку крышек (рис. 6). Получим 6 бесконечных серий фуллеренов с т.г.с. $2/m$: $16 + 16 + 6 + 12n = 38 + 12n$, $17 + 17 + 6 + 12n = 40 + 12n$, $18 + 18 + 6 + 12n = 42 + 12n$, $19 + 19 + 6 + 12n = 44 + 12n$, $20 + 20 + 6 + 12n = 46 + 12n$, $21 + 21 + 6 + 12n = 48 + 12n$, где $n = 0, 1, 2, \dots$. Они покрывают множество чётных чисел, начиная с $f_0 = 38$. □

Указанное выше предположение не всегда выполняется. Рассмотрим фуллерен, образованный, по теореме 6, парой крышек с 19 гранями, разделённых одним поясом (рис. 7). В его т.г.с. mtm (вместо $2/m$) две оси 2 (и две плоскости симметрии) не являются элементами группы $6/mtm$, ориентированной осью 6 вдоль главной. В общем случае теоремы 1-6 постулируют минимально возможную симметрию фуллерена, которая может быть повышена за счёт неучтённых топологических особенностей соединяемых крышек, порождающих дополнительные элементы симметрии. Отсутствие таких элементов гарантирует следующая теорема.

7. Т.г.с. фуллерена, образованного крышками, разделёнными ≥ 12 поясами, является подгруппой т.г.с. $6/mtm$, ось 6 которой совпадает с главной

Доказательство. Выделим на боковой поверхности фуллерена, образованной 12 или более поясами, пояс А, примыкающий к одной из крышек

(рис. 8). При симметричных преобразованиях фуллера этот пояс может отобразиться в себя или в пояс В, примыкающий к противоположной крышке, или в косо расположенные пояса С, D или E (для них показана половина части, идущей по боковой поверхности). В случаях А и В такие преобразования осуществляются с помощью группы $6/mmm$. В случаях С, D и E пояса имеют не менее 8 гексагонов и потому заведомо не могут быть отображением А. □ Чтобы теоремы 1-6 были верными, надо добавить в левую часть формул для серий фуллеренов число $6 \times 12 = 72$. При этом f_0 будет равно 100, 101, 101, 108, 104 и 110, соответственно.

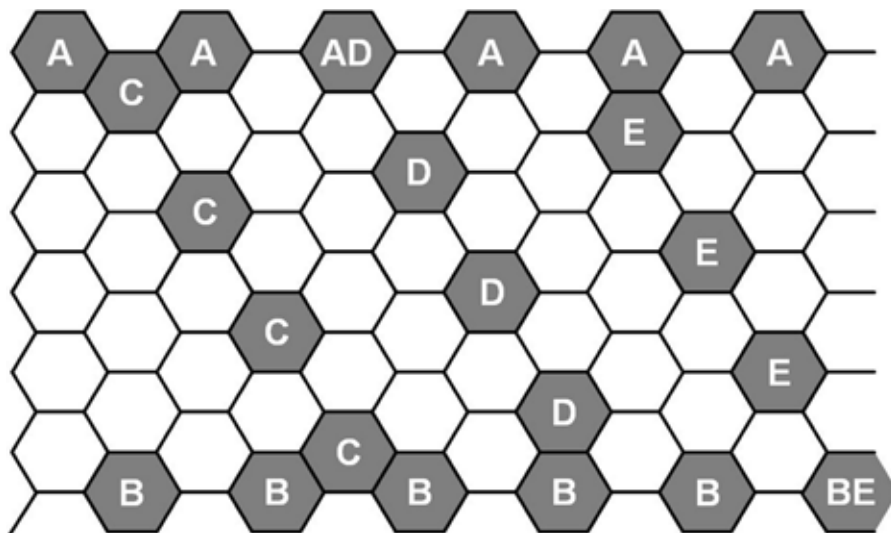


Рис. 8. Боковая поверхность фуллера с поясами А, В, С, D и E. Пояса С, D и E показаны частично.

Выводы

Анализ результатов компьютерного генерирования фуллеренов выявил закономерности в распределениях групп симметрии по классам C_n . Доказано, что для любого $f \geq 100$ всегда можно найти асимметричный фуллерен C_{2f-4} . Для $f \geq 101$ всегда можно найти фуллерен C_{2f-4} с т.г.с. 2 и m . Для любого чётного $f \geq 108$, 104 и 110 всегда можно найти фуллерен C_{2f-4} с т.г.с. $\bar{1}$, 222 и $2/m$, соответственно.

Анализ встречаемости фуллеренов с той или иной точечной группой симметрии остаётся одной из центральных проблем в этой области знания. При этом речь идёт не только о фуллеренах как таковых, т.е. атомных колебательных системах, устойчивость которых сильно зависит от симметрии. С той же фундаментальностью обсуждаются гигантские безопорные строительные конструкции, использующие ту же идею (Парфёнов, Коновалов, 2015). Здесь проблема состоит в оптимальном распределении напряжений путём подбора оптимальной топологии мегафуллера.

Наконец, с ещё большей настойчивостью, чем при рассмотрении полного многообразия выпуклых полиэдров, из анализа многообразия фуллеренов следует проблема конструктивного (позитивного, без отрицающей пристав-

ки «а») определения асимметрии. Довлеющее преобладание примитивной (1) точечной группы симметрии даже в многообразии фуллеренов впечатляет. Скорее всего, это не случайно, но имеет отношение к фундаментальным инвариантам пространства E^3 подобно тому, как в каждом выпуклом полиэдре проявляется его эйлерова характеристика (2).

Список литературы

1. Парфёнов Е., Коновалов Е. Сетчатые оболочки – конструкции XXI века // Инженерная защита. 2015. № 4(9). С. 98-105.
2. Brinkmann G., Goedgebeur J., McKay B.D. J. Chem. Inf. Model. 2012. V. 52(11). P. 2910-2918.
3. Kroto H.W. Nature (London). 1987. V. 329. P. 529-531.
4. Voytekhovskiy Y.L., Stepenshchikov D.G. Acta Cryst. 2001. A57. P. 736-738.
5. Voytekhovskiy Y.L., Stepenshchikov D.G. Acta Cryst. 2002. A58. P. 295-298.
6. Voytekhovskiy Y.L., Stepenshchikov D.G. Acta Cryst. 2003. A59. P. 283-285.
7. Voytekhovskiy Y.L., Stepenshchikov D.G. Acta Cryst. 2004. A60. P. 278-280.
8. Yoshida M., Fowler P.W. J. Chem. Soc. Faraday Trans. 1997. V. 93(18). P. 3289-3294.

ОТ ОСОБОЙ СЕРИИ КОМБИНАТОРНЫХ КОНСТРУКЦИЙ К ТЕТРАБЛОКУ – СТРОИТЕЛЬНОЙ ЕДИНИЦЕ ЦЕПЕЙ ИЗ ПРАВИЛЬНЫХ ТЕТРАЭДРОВ, АППРОКСИМИРУЮЩИХ ЛИНЕЙНЫЕ ПОДСТРУКТУРЫ БИОПОЛИМЕРОВ

Талис А.Л.

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

Тетраэдр и минимальная конечная проективная плоскость PG(2,2) соответствуют 2 из 3 членов последовательности особых структур комбинаторного дизайна. Уникальность вложения 7-точечной PG(2,2) в регулярные разбиения тора и сферы с 3 ручками определяет особое 7-вершинное разбиение сферы на 10 треугольников, задающее тетраблок – объединение по граням 4 правильных тетраэдров. Неевклидова и n-мерная симметрия исходных для тетраблока конструкций определяет его как фундаментальную область для особого класса некристаллографических спиралей из правильных тетраэдров. Спирали этого класса аппроксимируют линейные подструктуры биополимеров.

A tetrahedron and minimum finite projective plane PG (2, 2) correspond for 2 of 3 members in the sequence of special structures in the combinatorial design. The 7-point PG (2, 2) can be imbedded both into the regular tiling of a torus and of a sphere having 3 handles (genus = 3), and that uniqueness is determining a special 7-vertex sphere tiling onto 10 triangles which in turn defines a tetra-block: the joining of 4 regular tetrahedra in the face-to-face mode. The non-euclidian and n-dimensional symmetry of constructions are origins for the tetra-block, so the tetra-block itself could be considered as a fundamental domain for the special class of non-crystallographic spiral packings of regular tetrahedra.

Введение

Изучение строения и свойств биополимеров различного уровня организации требует определения их симметрии, которая в общем случае не отображается федоровскими группами, описывающими симметрию кристаллов. Поэтому систематизация структур основных элементов белковых конструкций (включая спиральные) актуальна и только начинает формализовываться. В частности, существующая структурная классификация белков основана на биоинформатике, использующей возможности компьютерного перебора и позволяющей непосредственно сопоставлять белки [5], а не указывать классифицирующие их симметричные конструкции, которыми в случае кристаллов являются федоровские группы.

Вторичная структура белка во многом определяется жесткими ковалентными связями в полипептидной цепи и водородными связями между ее боковыми звеньями. Важную роль также играют стерические взаимодействия молекул, которые связаны с их размерами и формами, накладывающими жесткие структурные ограничения на способы размещения молекул в пространстве. Подобные взаимодействия во многом определяют и упаковки молекул в спирали, широко распространенные в биологическом мире. В то время как определение точной геометрии биологических спиралей может быть весьма затруднено, их топология определяется непосредственно из стерического рассмотрения. Белки рассматриваются как плотная упаковка более или менее близких по размерам сферических единиц – аминокислот, аппроксимируемая упаковкой тетраэдров. Различные уровни структуры белка: первичная, вторичная или третичная соотносятся с плотно упакованными структурами в 1, 2 или 3 измерениях. Плотнейшая упаковка 600 правильных тетраэдров достигается в 4-мерном политопах $\{3, 3, 5\}$, связь подструктур которого с α -спиралью показана в [15]. В общем случае критерий плотной упаковки не определяет вторичную структуру белка [20].

Развиваемый аппарат [3, 16, 18] позволяет определять симметрии спиральных биополимеров структурными приложениями конструкций комбинаторики и алгебраической геометрии. Эта работа посвящена строгому (а не субъективно-интуитивному) определению строительной единицы спиралей из правильных тетраэдров, которые могут аппроксимировать линейные подструктуры биополимеров.

Комбинаторные конструкции, конечная проективная плоскость $PG(2, 2)$ и 7-вершинное объединение правильных тетраэдров

Решение задачи требует, прежде всего, трактовки тетраэдра как комбинаторной структуры, в которой множество четырех чисел (номеров вершин тетраэдра) 1234 разбивается на 4 тройки чисел (грани): 123, 134, 124, 234 (рис. 1а). Любая пара чисел (ребро) принадлежит только двум тройкам (граням). При таком рассмотрении тетраэдр определяется $t(v, k, \lambda)$ -схемой блокового дизайна – множества v элементов, разделенного на подмножества

(блоки) из k элементов так, что любой набор из t элементов содержится точно в λ блоках [2, 4]. Тетраэдр соответствует частному случаю t -(v, k, λ)-схемы при $t = \lambda = 2$ и $k = 3$. Вариант t -(v, k, λ)-схемы при $t = \lambda = 2$ называются биплоскостью. Для биплоскости существует соотношение между v и k : $v = 1 + k(k-1)/2$ [4]. Таким образом, в рамках комбинаторики тетраэдр определяется как биплоскость 2-(4, 3, 2), а его симметрия отображается таблицей инцидентности (принадлежности данного числа данному блоку) биплоскости 2-(4, 3, 2), где номер столбца – это номер вершины, а номер строки – номер грани. Любые две строки пересекаются по двум столбцам и наоборот (рис. 1б.). Таблица инцидентности допускает перестановку любых двух столбцов или строк, эти перестановки и являются элементами группы симметрии тетраэдра.

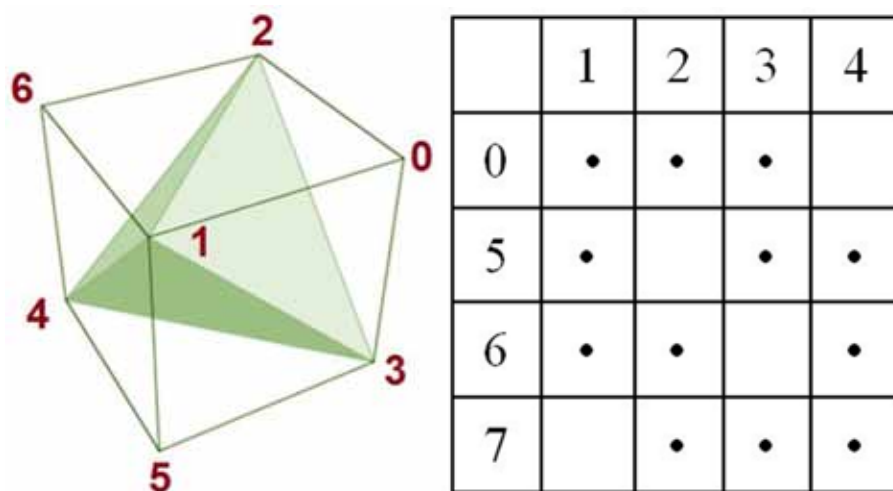


Рис. 1 а) Тетраэдр как геометрическая реализация биплоскости 2-(4, 3, 2): множество 4 чисел (номеров вершин тетраэдра) 1234 разбивается на 4 тройки чисел: 123, 134, 124, 234. Любая пара чисел (ребро) принадлежит только 2 тройкам (граням). б) Таблица инцидентности (принадлежности) числа и определенной тройки чисел биплоскости 2-(4, 3, 2). Номер строки = номеру грани тетраэдра, номер столбца = номеру вершины тетраэдра. Любые две строки пересекаются по двум столбцам и наоборот.

Биплоскости из $v = 1 + k(k-1)/2$ элементов при $k = 3, 4, 5$ (соответственно, $v = 4, 7, 11$) составляют особую короткую серию: 2-(4, 3, 2), 2-(7, 4, 2), 2-(11, 5, 2). Соответствие тетраэдра первому члену 2-(4, 3, 2) серии биплоскостей позволило предположить существование особых тетраэдрических интерпретаций и для двух следующих биплоскостей: 2-(7, 4, 2) и 2-(11, 5, 2).

Совокупность пустых клеток таблицы 2-(7, 4, 2) образует таблицу инцидентности комплементарной (дополняющей) к 2-(7, 4, 2) блок-схемы 2-(7, 3, 1). Она представляет собой множество 7 чисел 1234567, разбитое на 7 троек 124, 235, 346, 457, 561, 672, 713 так, что любая пара чисел принадлежит только одной тройке. Геометрическая интерпретация схемы 2-(7, 3, 1) – конструкция конечной проективной плоскости (геометрии)

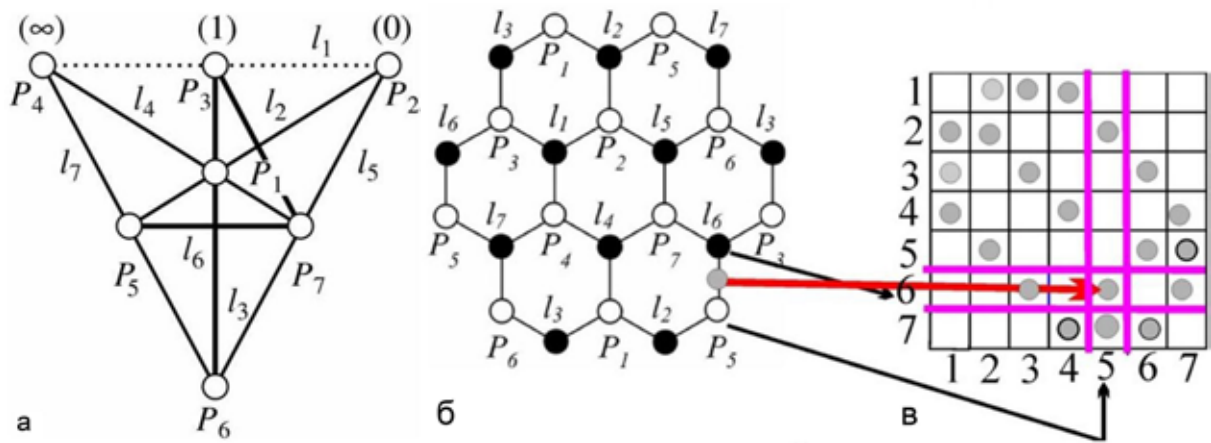


Рис. 2 а) Геометрической интерпретацией 2-(7, 3, 1) является конечная проективная плоскость $PG(2, 2)$: 7 точек, 7 прямых, через каждую точку проходят 3 прямые, на каждой прямой – 3 точки[1]. б) Замена в а) прямой на чёрную точку приводит к графу инцидентности $PG(2, 2)$ – регулярному, бихроматическому 14-вершинному разбиению тора 21 ребром на 7 гексациклов. в) В таблице инцидентности любые 2 строки пересекаются ровно по одному столбцу и наоборот. Взаимно-однозначное соответствие графа и таблицы инцидентности показано на примере ребра $l_6 P_5$. Номер строки – чёрная точка, номер столбца – белая точка, знак инцидентности – серая точка середины ребра между белой и чёрной вершинами.

$PG(2, 2)$. Плоскость становится проективной при добавлении к обычной Евклидовой плоскости бесконечно удаленной прямой, состоящей из точек, в каждой из которых пересекаются пучки параллельных прямых. В общем случае $PG(2, p)$ – конечная проективная плоскость порядка p , где простое p – порядок поля Галуа. Плоскость $PG(2, p)$ состоит из $v = p^2 + p + 1$ точек и «прямых», в которой через каждую точку проходит $p + 1$ «прямая», состоящая из $p + 1$ точки. Минимальное поле Галуа содержит $p = 2$ числа, поэтому, $PG(2, 2)$ – минимальная конечная проективная плоскость, содержащая $v = 7$ точек $P_1, \dots, P_7$ и прямых $l_1, \dots, l_7$, в которой через каждую точку проходят 3 «прямых», а каждая прямая состоит из 3 точек (рис. 2 а). «Прямая» поставлена в кавычки, чтобы подчеркнуть, что это набор точек, а не привычная геометрическая прямая [1].

В таблице инцидентности $PG(2, 2)$ (в дальнейшем ТИ $PG(2, 2)$) столбцы соответствуют «точкам» $P_1, P_2, \dots, P_7$, а строки «прямым» $l_1, l_2, \dots, l_7$. Инцидентность (принадлежность) точки P_j прямой l_i определяется заполнением в этой таблице 7×7 клетки ij кружком $i, j = 1, 2 \dots 7$, пустая клетка означает отсутствие инцидентности (рис. 2 в). Если точки и прямые $PG(2, 2)$ считать белыми и черными вершинами, а ребрами соединять только те пары из белой и черной вершин, для которых в пересечении соответствующей строки l_i и столбца P_j содержится знак инцидентности, то возникает граф инцидентности $PG(2, 2)$. Он состоит из $2(2^2 + 2 + 1) = 2 \times 7$ вершин и $(2 + 1)(2^2 + 2 + 1) = 3 \times 7$ ребер. Граф называется бихроматическим, если множество вершин графа можно разбить на два непересекающихся подмножества (черных и белых то-

чек), таким образом, что любое ребро соединяет точки разных подмножеств (черную и белую). Таким образом, знак инцидентности в ТИ $PG(2, 2)$ соответствует ребру бихроматического графа инцидентности $PG(2, 2)$. Если в каждой вершине графа сходится d ребер, то граф – регулярный, степени d ; длина кратчайшего цикла графа называется его обхватом. Граф инцидентности $PG(2, 2)$ является регулярным бихроматическим гамильтоновым графом степени $2 + 1 = 3$ и обхвата 6, имеющим наименьший возможный по-

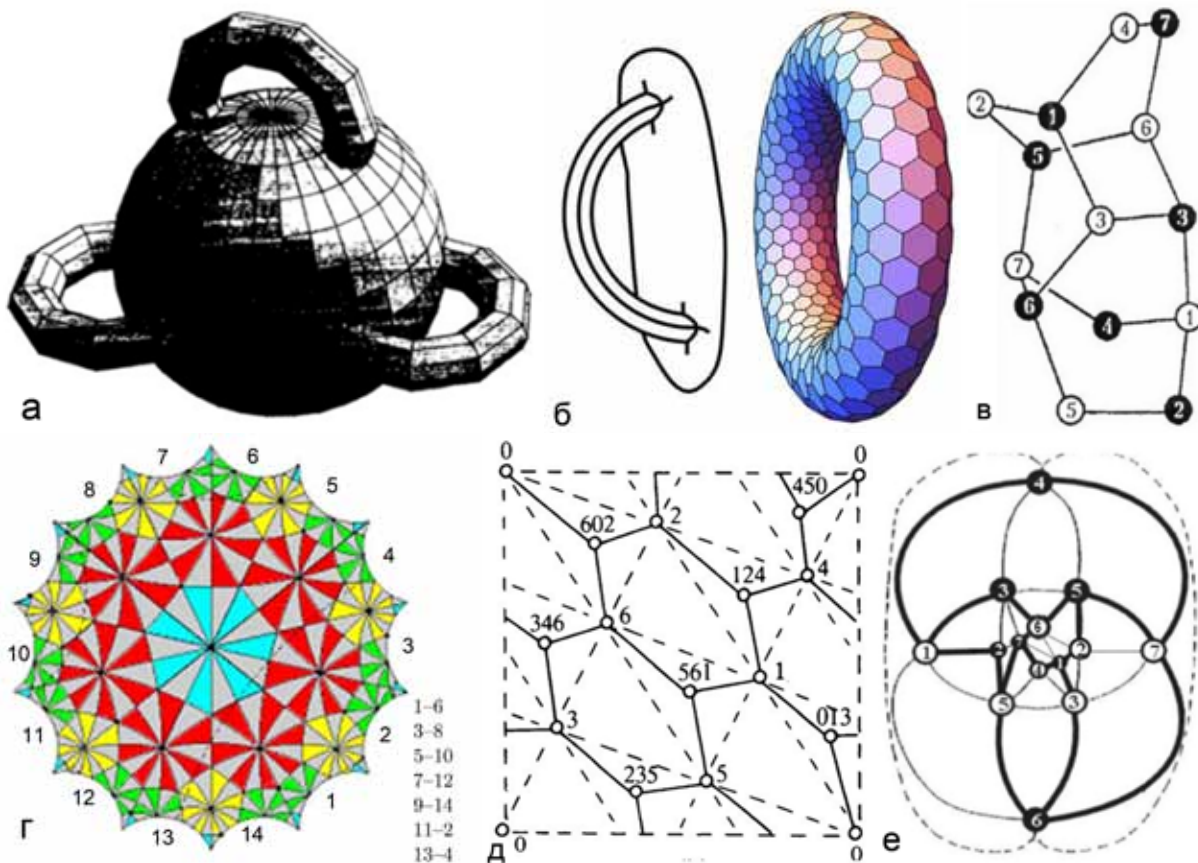


Рис. 3. а) Сфера с 3 ручками. б) Тор – сфера с ручкой в форме изогнутой треугольной призмы. Регулярное разбиение тора на гексагоны – в каждой вершине сходятся 3 гексагона. в) Составной тетраблок Δ_I^1 – объединение белого Δ_I и черного Δ^1 тетраблоков двойной осью, проходящей через середину ребра $3-3'$. Тетраблок Δ_I^1 – нерегулярное разбиение сферы на гексагоны: в вершинах с 2 ребрами сходятся по 2 гексагона, в вершинах с 3 ребрами – по 3. г) Карта $\{7, 3\}_8$ на сфере с 3 ручками – регулярное 56-вершинное разбиение 84 ребрами на 24 гептацикла. Каждый гептацикл разбит на 14 гиперболических треугольников Шварца с углами $\pi/2, \pi/3, \pi/7$. Ребра 1-6, 3-8, 5-10, 7-12, 9-14, 11-2, 13-4 отождествляются (рис. 1 из [12]). д) Карта $\{6, 3\}_{2,1}$ на торе – регулярное 14-вершинное бихроматическое разбиение 21 ребром на 7 гексациклов. Пунктиром показано 7-вершинное разбиение на 14 треугольников – карта $\{3, 6\}_{2,1}$. Тройки чисел соответствуют черным точкам – вершинам разбиения $\varphi\{3, 6\}_{2,1}$, $\varphi^2 = 1$. Противоположные стороны квадрата отождествляются (рис. 2 б из [19]). е) Замена ребра 5-7' ребром 3-3' приводит к стереографической проекции составного тетраблока Δ_I^1 , белые (черные) вершины которого образуют тетраблок Δ_I .

рядок (рис. 2 б) [1]. Он может быть представлен в форме правильной карты $\{6, 3\}_{2,1}$, представляющей собой 14-вершинное бихроматическое разбиение тора (сферы с ручкой) 21 ребром на 7 шестиугольников, в каждой вершине карты сходятся 3 шестиугольника (рис. 3 б). Число шестиугольников определяется нижними индексами символа карты: $7 = 2^2 + 2 \times 1 + 1^2$, при $p = 2$ оно совпадает с числом $p^2 + p + 1$ точек $PG(2, p)$. Данная карта обладает свойственной тору эйлеровой характеристикой:

$$\chi(\{6, 3\}_{2,1}) = 14 - 21 + 7 = 0. \quad (1)$$

Дуальной к карте $\{6, 3\}_{2,1}$ является карта $\{3, 6\}_{2,1}$ – регулярное 7-вершинное разбиение тора на 14 треугольников (рис. 3 д).

В регулярных картах $\{6, 3\}_{2,1}$ и $\{3, 6\}_{2,1}$ на торе может быть выделена ручка, представляемая в виде изогнутой тригональной призмы, дополняющей сферу до тора [3, 9]. Удаление этой ручки из 3 ребер (рис. 3 б) приводит к исчезновению на оставшейся сфере одного гексагона и образованию нерегулярной карты $\{6, 3\}_{2,1}^3$, обладающей свойственной сфере эйлеровой характеристикой

$$\chi(\{6, 3\}_{2,1}^3) = 14 - (21 - 3) + (7 - 1) = 14 - 18 + 6 = 2 \quad (2)$$

где число ребер, удаляемых из регулярной карты (здесь и далее), обозначается добавочным верхним индексом в символе карты. Каждому ребру соответствует знак инцидентности в ТИ $PG(2, 2)$, поэтому бихроматической карте $\{6, 3\}_{2,1}^3$ (рис. 3 в, е.) будет соответствовать ТИ $PG(2, 2)$ (рис. 2 в) без 3 знаков инцидентности: 22, 44 и 75. Для карты $\{3, 6\}_{2,1}$ разбиение боковых граней тригональной призмы-ручки на треугольники приводит при ее удалении к уменьшению числа ребер на 6, треугольников на 4, что обеспечивает свойственную сфере эйлерову характеристику

$$\chi(\{3, 6\}_{2,1}^6) = 7 - (21 - 6) + (14 - 4) = 7 - 15 + 10 = 2 \quad (3)$$

Регулярный составной полиэдр – это объединение полиэдров с общим центром, вершины которого образуют полиэдр [9]. Так, объединение двух тетраэдров, вершины которых составляют куб (рис. 1 а), обозначается $\{4, 3\}[2\{3, 3\}]\{3, 4\}$. В первой скобке символа обозначение куба, во второй – двух тетраэдров, в третьей – октаэдра, которому принадлежат грани пересечения тетраэдров.

Вершины мозаики $\{6, 3\}$, разбивающей плоскость на 6-угольники, принадлежат составной мозаике, обозначаемой символом $\{6, 3\}[2\{3, 6\}]$. В этом символе $[2\{3, 6\}]$ означает, что берутся две мозаики $\{3, 6\}$ (каждая разбивает плоскость на треугольники) с общим центром, их вершины образуют мозаику $\{6, 3\}$. Наряду с такой символикой можно использовать символ объединения двух полиэдров относительно общего центра:

$$\{6, 3\}[2\{3, 6\}] = \{3, 6\} \cup \varphi\{3, 6\}, \varphi^2 = 1 \quad (4)$$

где φ – элемент 2-го порядка, отображающий исходную белую мозаику $\{3, 6\}$ в

конгруэнтную ей черную $\phi\{3, 6\}$ (рис. 3 д). Аналогично (4), составная карта

$$\{6, 3\}_{2,1}^{3(i)} [2\{3, 6\}_{2,1}^{6(i)}] = \{3, 6\}_{2,1}^{6(i)} \cup \phi_i \{3, 6\}_{2,1}^{6(i)} \quad i = 1, 2, \dots, I. \quad \phi_i^2 = 1 \quad (5)$$

представляет собой объединение белой и черной 7-вершинных карт $\{3, 6\}_{2,1}^{6(i)}$, каждая из которых определяет нерегулярную триангуляцию сферы 15 ребрами на 10 треугольников. При соединении ближайших вершин карты $\{3, 6\}_{2,1}^{6(i)}$ равными ребрами она определяет (в зависимости от варианта i выбора отбрасываемой ручки) 7-вершинные триангулированные полиэдры. Ограничимся объединениями правильных тетраэдров, в котором каждый последующий тетраэдр присоединен к грани предыдущего. Каждое такое 7-вершинное объединение 4 правильных тетраэдров будем называть тетраблоком и обозначать Δ_i . Различные возможности объединения тетраэдров появляются лишь при присоединении 4-го тетраэдра к объединению 3 тетраэдров [6, 14]. Они приводят к образованию двух энантиоморфных (правого и левого) линейных тетраблоков Δ_i , $i = 1, 2$ и плоского тетраблока Δ_3 (рис. 4).

Таким образом, бихроматическая карта $\{6, 3\}_{2,1}^{3(i)}$, однозначно задаваемая ТИ $PG(2, 2)$ без i -го набора 3 знаков инцидентности ($PG(2, 2)_{3(i)}$), определяет объединение

$$\Delta_i^j = \Delta_i \cup \Delta^j, \quad i, j = 1, 2, 3 \quad (6)$$

«белого» и «черного» тетраблоков, которое назовем составным тетраблоком.

Тетраблок Δ_1 представляет собой 7-вершинную часть спирали Кокстера – Бьердийка (рис. 5) с координатами, $V'_n = (\cos(n\Theta), \sin(n\Theta), n/\sqrt{2.7})$, $n = 0 \dots 7$, где $\Theta \approx 131.81^\circ$ стремится к углу $132^\circ = 360^\circ \times 11/30^\circ$, определяющему ось вращения в 4-мерном аналоге икосаэдра – политопа $\{3, 3, 5\}$ [9]. Каждая из 120 вершин $\{3, 3, 5\}$ определяется 4-мерным вектором, которому соответствует кватернион. Как объединение по граням 4 правильных тетраэдров тетраблок Δ_1 представляет собой и часть политопа $\{3, 3, 5\}$ с координатами (x, y, z, u) вершин [13]: $V_n = [a \exp(2\pi i n / 30)]$,

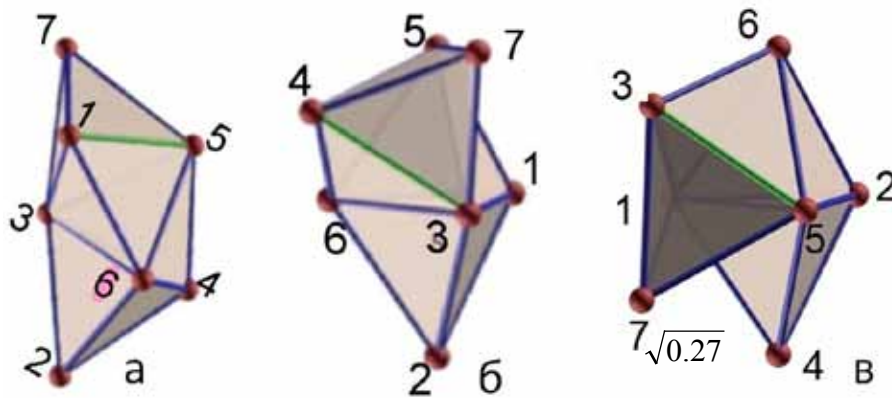


Рис. 4. Правый Δ_1 (а), левый Δ_2 (б) и «плоский» Δ_3 (в) тетраблоки. 7-вершинные объединения правильных тетраэдров, в котором каждый последующий тетраэдр присоединяется к грани предыдущего.

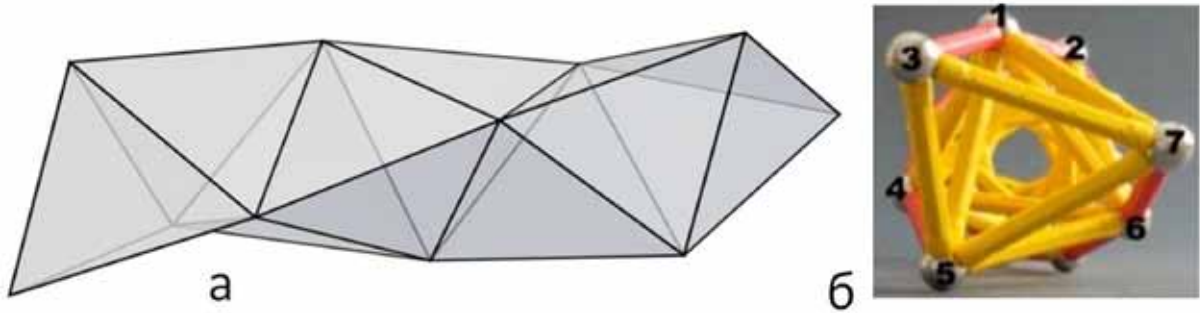


Рис. 5. Спираль Коксетера – Бьердийка из правильных тетраэдров – «выпрямленная» в трехмерное евклидово пространство E^3 подструктура политопа $\{3, 3, 5\}$ с осью спирального вращения $30/11$. б) Тетраблок Δ_7 как часть спирали Коксетера – Бьердийка.

$\exp(2\pi i n 11/30)$, $a = [(1/2)(1+3^{-1/2}5^{-1/4} \tau^{3/2})]^{1/2}$, $d = [(1/2)(1-3^{-1/2}5^{-1/4} \tau^{3/2})]^{1/2}$. Таким образом, 7 вершинам тетраблока должен однозначно соответствовать особый набор из 4-мерных векторов (кватернионов), но в 120-вершинном политопе с группой симметрии порядка 120×120 нельзя обосновать выделение его 7-вершинной части.

Группа $PSL(2, 7)$, квартик Клейна и набор 4-мерных векторов, определяющий тетраблок

Согласно [17, 19], всякая проективная плоскость $PG(2, p)$ обладает бихроматическим графом инцидентности $\{6, 3\}_{p,1}$, т.е. погружается в тор, но лишь $PG(2, 2)$ (и $PG(2, 8)$, которую мы здесь не рассматриваем) погружается и в квартик Клейна – риманову поверхность проективной кривой, определяемой уравнением $x^3y + y^3z + z^3x = 0$. Эта поверхность соотносится с регулярным 56-вершинным разбиением 84 ребрами сферы с 3 ручками на 24 гептацикла (рис. 3 а, г), т.е с картой $\{7, 3\}_8$, обладающей Эйлеровой характеристикой

$$\chi(\{7, 3\}_8) = 56 - 84 + 24 = 2 - 2 \times 3 = -4 \quad (7)$$

В каждой вершине карты сходятся по 3 гептагона, нижний индекс означает, что точки, соединяемые ломаной из 8 ребер, отождествляются.

Группой симметрии $\{7, 3\}_8$ является треугольная группа $(2, 3, 7)$, которая определяется минимальным гиперболическим треугольником Шварца с углами $\pi/2, \pi/3, \pi/7$, осуществляющим разбиение гиперболической плоскости при отражениях в его сторонах (рис. 3 г). Эта группа является неевклидовой кристаллографической группой (дискретной подгруппой группы гиперболических преобразований плоскости) с треугольником в качестве фундаментальной области. Группа $(2, 3, 7)$ ассоциирована с римановой поверхностью рода g с максимальным порядком $84(g-1)$ ее группы автоморфизмов – группы Гурвица. Квартик Клейна – поверхность Гурвица рода 3, обладающая минимальной группой Гурвица порядка 168, которая изоморфна группе $PSL(2, 7)$ - группе автоморфизмов $PG(2, 2)$. Порядок 168 группы $PSL(2, 7)$ определяется произведением $7 \times 3 \times 8$ чисел, составляющих символ карты $\{7, 3\}_8$ [10, 12, 17].

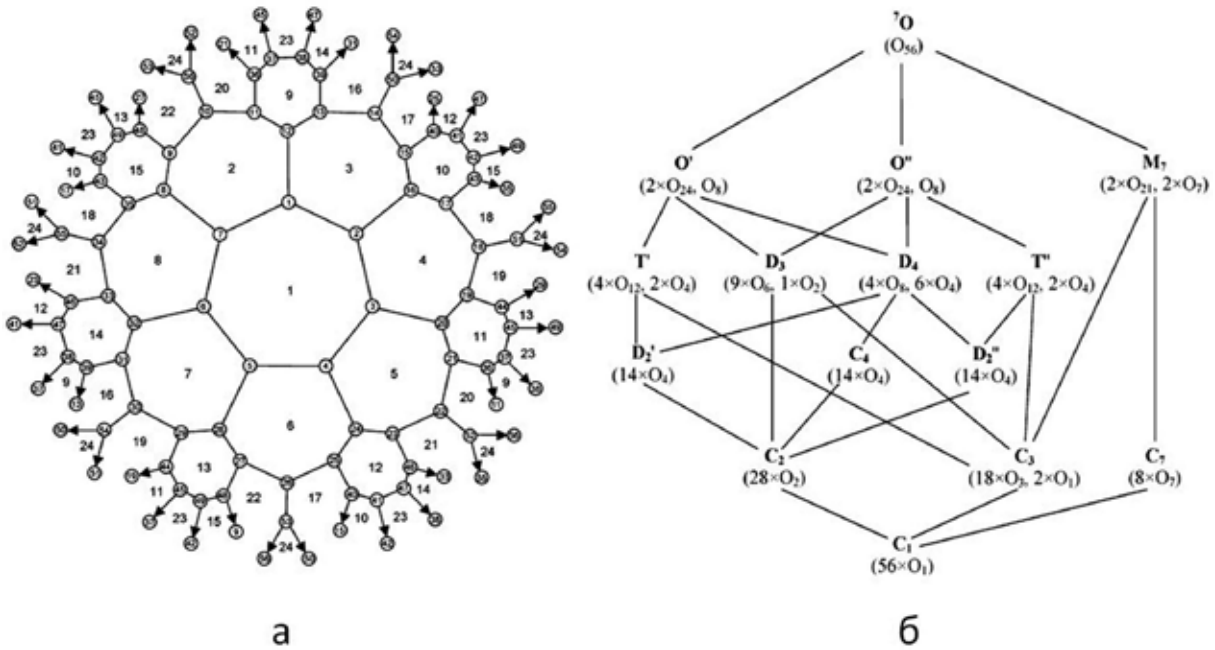


Рис. 6. Диаграмма Шлегеля 56-вершинного графа Клейна при проектировании на центральный гептагон (рис. 1 из [7]). Групп-подгрупповые соотношения в $PSL(2, 7)$ или 7O . В скобках указаны разбиения 56-вершинной орбиты группы 7O на объединения орбит ее подгрупп (рис. 2 из [7]).

Сверхотображение $PG(2, 2)$ в квартик Клейна [12] позволяет из 24 центров гептагонов выделить 21, которым однозначно сопоставляется 21 знак инцидентности в ТИ $PG(2, 2)$. Из 56 вершин $\{7, 3\}_8$ выделяются 7 «белых» и 7 «черных», при этом каждая белая вершина соединяется с 3 черными и наоборот, середина соединяющего их ребра – центр одного из 21 гептагонов (рис. 6 а, 7 а). Оставшиеся 42 вершины распадаются на 21 «белую» и 21 «черную» вершины. В целом это определяется разбиением 56 вершин $\{7, 3\}_8$ на орбиты подгруппы M_7 группы $PSL(2, 7)$: 2 орбиты по 21 элементу в каждой и 2 орбиты по 7 элементов в каждой, что символически записывается в виде $M_7 (2 \times O_{21}, 2 \times O_7)$ (рис. 6 б). Группа M_7 (порядка 21) является произведением групп C_3 и C_7 [7, 8], поэтому разбиению вершин на орбиты, определяемому сверхотображением $PG(2, 2)$ в квартик Клейна, соответствует разбиение $PSL(2, 7)$ на двойные смежные классы:

$$PSL(2, 7) = \bigcup_{i=1}^2 M_7 g_i C_3 \bigcup_{j=1}^2 M_7 g_j C_3 = \bigcup_{i=1}^2 M_7 g_i C_3 \bigcup_{j=1}^2 C_7 C_3 g_j \quad (8)$$

где $M_7 \supset C_3$, $g_i C_3 \neq C_3 g_i$, $g_j C_3 = C_3 g_j$. Помимо определяемого (8) разбиения вершин $\{7, 3\}_8$ возможны разбиения на орбиты групп $D_3 (9 \times O_6, 1 \times O_2)$; $D_2 (14 \times O_4)$, $C_2 (28 \times O_2)$.

Группа $(2, 3, 7)$ является подгруппой группы единичных кватернионов в кватернионной алгебре с элементами вида $\xi = 1/2 (a + bi + cj + dij)$, где a, b, c, d – целые числа, $i^2 = j^2 = \eta = 2\cos(2\pi/7)$, $(7 - \eta)^2 = (2 - \eta)^3$, $ij = -ji$. Она генерируется как ассоциативная алгебра соотношениями:

$$g_2 = ij \, 1/\eta, \quad g_3 = \frac{1}{2} (1 + (\eta^2 - 2)j (3 - \eta^2)ij), \quad g_2^2 = g_3^3 = (g_2 g_3)^7 = -1 \quad (9)$$

которые совпадают с соответствующими соотношениями для группы $(2, 3, 7)$ после факторизации по центру [10]. Каждому из 21 знака инцидентности ТИ $PG(2, 2)$ разбиение (8) позволяет (по [10]) поставить в однозначное соответствие 4-мерные векторы вида $\xi = (\exp m(2\pi i/7), \exp n(2\pi i/7))$ с компонентами из степеней $\exp(2\pi i/7)$. Таким образом, в ТИ $PG(2, 2)$ вектор ξ представлен дробью m/n , которая находится на месте однозначно соответствующего ей знака инцидентности (рис. 7 б).

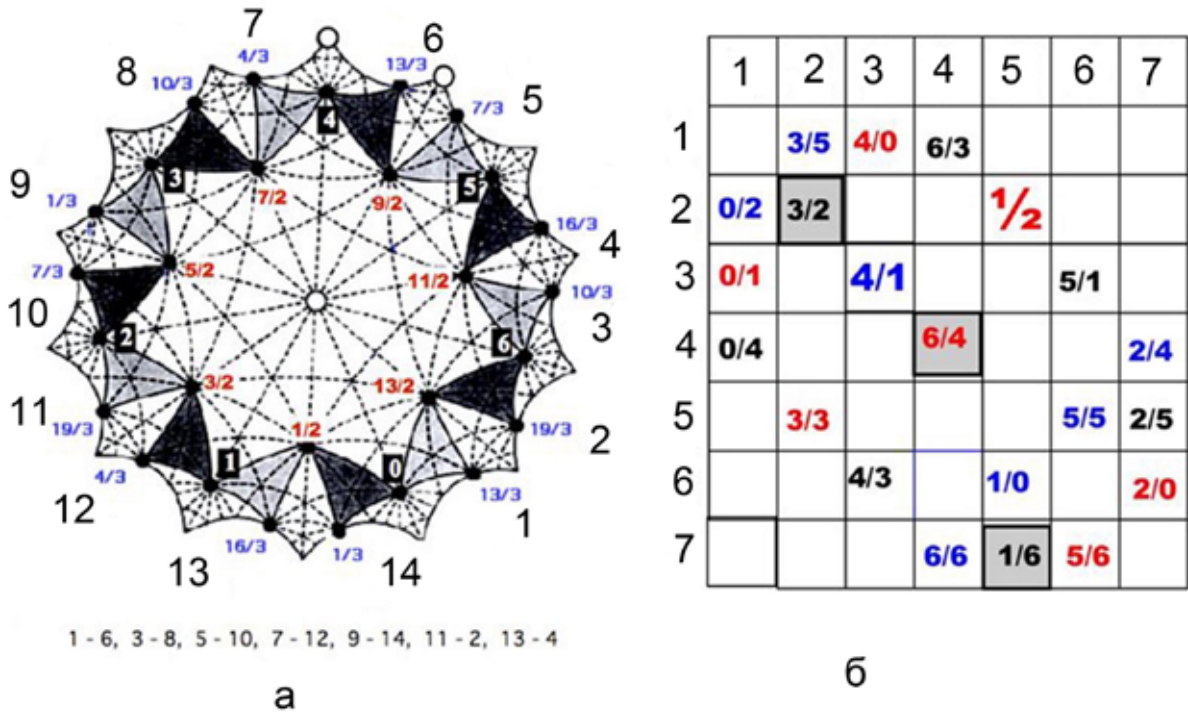


Рис. 7. а) Сверхотображение $PG(2, 2)$ в квартик Клейна (рис. 2 из [12]). б) Сверхотображение разбивает 21 знак инцидентности из таблицы инцидентности $PG(2, 2)$ на 3 семерки, показанные разным цветом. Знаку инцидентности сопоставлен 4-мерный вектор $\xi = (\exp m(2\pi i/7), \exp n(2\pi i/7))$, представленный в виде дроби m/n . Зануляемые для определения тетраблока Δ_i векторы отмечены серыми квадратами.

Тетраблоку Δ_i , $i = 1, 2, 3$ соответствует ТИ $PG(2, 2)$ без 3 знаков инцидентности, следовательно, тетраблок Δ_i определяется i -ым набором из 21 вектора $\xi_{vw(i)}$, $v, w = 1, 2 \dots 7$, на 3 из которых наложено требование равенства 0. В частности, для тетраблока Δ_1 $\xi_{22} = \xi_{44} = \xi_{75} = 0$ (рис. 7 б), а для энантиоморфного ему тетраблока Δ_2 - $\xi_{22} = \xi_{44} = \xi_{57} = 0$. Координаты вершины тетраблока Δ_i определяются векторами $\xi_{vw(i)}$, соответствующими серединам сходящихся в этой вершине ребер составного тетраблока (б). Можно показать, что переходам

$$\{7, 3\}_8 \rightarrow \{6, 3\}_{2,1} \rightarrow \{6, 3\}_{2,1}^{3(i)} \quad (10)$$

определяющим $\Delta_{i=1,2}$ и Δ_3 , соответствуют разбиения вершин $\{7,3\}_8$, на объединения орбит, задаваемые переходами между группами $M_7 \rightarrow C_2$ и $M_7 \rightarrow D_2$. При этом 28 орбит O_2 группы C_2 распадаются на $21 + 7$, а 14 орбит группы D_2 – на $10 + 3$ орбиты O_4 и $1 + 1$ орбиты O_2 :

$$C_2(28O_2) \rightarrow C_2[21O_2; (7O_2)] \leftarrow M_7(2O_{21}; 2O_7) \rightarrow D_2[10O_4, 1O_2; (3O_4, 1O_2)] \leftarrow D_2(14O_4) \quad (11)$$

где жирным шрифтом выделены разбиения орбит $\{7, 3\}_8$, позволяющие определить составные тетраблоки посредством набора орбит в круглых скобках.

Заключение

Всякий полиэдр можно разбить на тетраэдры – симплексы 3-мерного евклидова пространства E^3 . В E^3 объединяемые по граням правильные тетраэдры можно уложить только в линейные цепочки. В [6] разные комбинаторные варианты тетраэдрических цепей собираются из тетраблоков, пересекающихся по 3 тетраэдрам, что определяет присоединение по грани одного тетраэдра к предыдущей цепочке. В этом случае тетраэдр является фундаментальной областью цепи регулярных тетраэдров, что приводит к стремительно возрастающему числу цепей, аналогично росту числа спиралей по мере уменьшения симметрии генерирующей спираль полиэдра. Так, возможны только 8 высокосимметричных спиралей из платоновых тел (по одной из тетраэдров и кубов, и по две из октаэдров, додекаэдров и икосаэдров) [21], которые вкладываются в 4-мерные платоновы тела – политопы. Спиралей из неплатоновых тел, например, архимедовых – намного больше.

Для платонова икосаэдра максимальное число треугольников, сходящихся в каждой вершине, равно 5. На сфере схождение 6 (7) треугольников в каждой вершине разбиения невозможно, но это возможно для 7-вершинного разбиения на торе (24-вершинного на сфере с 3 ручками). В рамках такой классификации тетраблук – это сохраняющее число вершин отображение на сферу «торического платонова тела», которое вкладывается и в «гиперболическое платоново тело». Такое высокосимметричное «квазиплатоново тело» должно генерировать лишь ограниченное число высокосимметричных спиралей. Действительно, если икосаэдр генерирует 2 спирали, то (как показано в другой статье) тетраблок Δ_1 генерирует 3 спирали, вкладывающиеся в политоп $\{3, 3, 5\}$ и гиперболические соты [9]. Одна из них с точностью до 2 % определяет структурные параметры α -спирали. Реализованный вывод тетраблока может быть представлен в форме последовательности основных симметричных конструкций: $2-(7, 4, 2) \leftrightarrow 2-(7, 3, 1) \rightarrow \text{PSL}(2, 7) \rightarrow \text{квартик Клейна} \rightarrow \text{PG}(2, 2) \rightarrow \text{тетраблок}$.

Автор выражает глубокую признательность М.И. Самойловичу и В.С. Крапошину за многолетний постоянный интерес к работе и стимулирующие обсуждения.

Список литературы

1. Картеси Ф. Введение в конечные геометрии. М.: Наука, 1980. 320 с.

2. Конвей Дж., Слоэн Н. Упаковки шаров, решетки и группы. М.: Мир, 1990. 415 с.
3. Талис А.Л. Обобщенная кристаллография алмазоподобных структур. I. Конечные проективные плоскости и определяемые ими особые кластеры алмазоподобных структур II. Алмазная упаковка в пространстве 3-мерной сферы, подконфигурации конечных проективных плоскостей и порождающие кластеры алмазоподобных структур // Кристаллография. 2002. Т. 47. С. 583-593. С. 775-784.
4. Холл М. Комбинаторика. М.: Мир, 1970. 421 с.
5. Финкельштейн А.В., Птицын О.Б. Физика белка. М.: Кн. дом «Университет», 2005. 376 с.
6. Babiker H., Janeczko S. Combinatorial cycles of tetrahedral chains // IM PAN Prepr. 741. 2012.
7. Bellarosa L., Fowler P.W., Lijnen E. *et al.* Addition patterns in carbon allotropes: independence numbers and d-codes in the Klein and related graphs // J. Chem. Inf. Comput. Sci. 2004. V. 44. P. 1314-1323.
8. Ceulemans A., King R.B., Bovin S.A. *et al.* The heptakisoctahedral group and its relevance to carbon allotropes with negative curvature // J. Math. Chem. 1999. V. 26. P. 101-123.
9. Coxeter H.S.M. Regular polytopes. New York: Dover, 1983.
10. Elkies N. The Klein quartic in number theory. MSRI Publ. 1998. V. 35. P. 51-100.
11. Konstant B. The graph of the truncated icosahedrons and the last letter of Galois // Notices Amer. Math. Soc. 1995, V. 42, N 9. P. 959-968.
12. Martín P., Singerman D. The geometry behind Galois' final theorem // Eur. J. Comb. 2012. V. 33, N 7. P. 1619-1630.
13. Mosseri R., Di Vincenzo D.P., Sadoc J.-F. *et al.* Polytope model and the electronic and structural properties of amorphous semiconductors // Phys. Rev. 1985. B32. P. 3947-4000.
14. Nelson D. Order, frustration and defects in liquids and glasses // Phys. Rev. 1983. B28. P. 5515-5535.
15. Sadoc F.J., Rivier N. Boerdijk-Coxeter helix and biological helices // Eur. Phys. J. 1999. B12. P. 309-318.
16. Samoylovich M.I., Talis A.L. Symmetry of helicoidal biopolymers in the frameworks of algebraic geometry: α -helix and DNA structures // Acta Cryst. 2014. A70. P. 186-198.
17. Singerman D. Klein's Riemann surface of genus 3 and regular embeddings of finite projective planes // Bull. London Math. Soc. 1986. V. 18. P. 364-370.
18. Talis A., Kraposhin V. Finite noncrystallographic groups, 11-vertex equi-edged triangulated clusters and polymorphic transformations in metals // Acta Cryst. 2014. A70. P. 616-625.
19. White A. Efficient imbeddings of finite projective planes // Proc. London Math. Soc. 1995. V. 70, N 3. P. 33-55.
20. Yee D.P., Chan H.S, Havel T.F. *et al.* Does compactness induce secondary structure in proteins? // J. Mol. Biol. 1994. V. 241. P. 557-573.
21. Lidin S., Andersson S. Regular polyhedra helices // Z. Anorg. Allg. Chem. 1996. V. 622. P. 164-166.

ЗАКОНОМЕРНОСТИ СБОРКИ ТЕТРАБЛОКОВ И СПИРАЛЬНЫЕ ПОДСТРУКТУРЫ, АППРОКСИМИРУЮЩИЕ СПИРАЛИ БИОПОЛИМЕРОВ

Талис А.Л.

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

Объединения по грани двух одинаковых тетраблоков генерируют спиральные упаковки, определяемые симметриями решетки E_8 . Две соседних грани тетраблока образуют «ромб» с короткой диагональю, замена которой на длинную диагональ трансформирует тетраблоки друг в друга. Система таких перебросок диагоналей обеспечивает взаимные трансформации спиралей из тетраблоков. Спирали из тетраблоков обладают геометрическими параметрами спиралей биополимеров.

Face-to-face associations of the two tetra-blocks generating spiral packing, determined by the symmetry of the lattice E_8 . The two neighboring faces of tetra-block form a “romb” with a short diagonal, which is replacing the long diagonal transforms tetra-block each other. The system of flipping of such diagonals provide mutual transformation of the spiral of tetra-block. A priori defined spiral of tetra-block possess geometric parameters spirals biopolymers.

Введение

Симметричные закономерности строения дискретной структуры могут быть определены из требования соответствия определенным топологическим свойствам 3-мерного Евклидова пространства E^3 . К таким свойствам, например, относится возможность вложения в E^3 малых локально-евклидовых фрагментов неевклидовых пространств. В частности, в E^3 могут быть вложены кластеры, соответствующие подструктурам плоскости Лобачевского или 4-мерных полиэдров (политопов), определяемых разбиением 3-мерной сферы. Структуры таких особых кластеров могут определяться некристаллографическими (или неевклидовыми кристаллографическими) симметриями исходных неевклидовых пространств, например, проективными (дробно-линейными) преобразованиями, допускающими наряду с поворотом вектора изменение его длины. Подобные симметрии могут определять и законы объединения вложенных в E^3 кластеров в упорядоченную некристаллическую структуру.

В [2] рассмотрена последовательность симметричных конструкций: $2-(7, 4, 2) \leftrightarrow 2-(7, 3, 1) \rightarrow \text{PSL}(2, 7) \rightarrow \text{квартет Клейна} \rightarrow \text{PG}(2, 2) \rightarrow \text{тетраблок } \Delta_i, i = 1, 2, 3$, позволившая определить тетраблок – 7-вершинное объединение по граням 4 правильных тетраэдров, возникающее при отображении на сферу «неевклидовых платоновых тел». В качестве высокосимметричного «квазиплатонова тело» тетраблок может генерировать лишь ограниченное число высокосимметричных некристаллографических спиралей, вкладывающихся в политоп $\{3, 3, 5\}$ и / или гиперболические соты. Подструктуры биополимеров могут быть аппроксимированы упаковками тетраэдров [14], поэтому симметрии выделяемого тетраблоком особого класса спиральных

упаковок тетраэдров могут служить для биополимеров классификационной основой (подобной федоровским группам для кристаллов).

Статья посвящена закономерностям сборки тетраблоков в спиральные упаковки правильных тетраэдров. Она продолжает [2] и опирается на результаты [3, 4, 13, 14].

Спирали, генерируемые объединением по грани двух тетраблоков

В [2] рассмотрено соответствие тетраэдра и тетраблока биплоскостям 2-(4, 3, 2) и 2-(7, 4, 2) из особой короткой серии биплоскостей с числом элементов $v = 4, 7, 11$. При $v = 11$ за биплоскостью 2-(7, 4, 2) следует завершающая серия биплоскость 2-(11, 5, 2). Галуа доказал, что существует особая серия из 4 конечных проективных специальных линейных групп $PSL(2, p)$, $p = 3, 7, 11 \equiv 3 \pmod{4}$ и $p = 5$, где $PSL(2, 3)$, $PSL(2, 7)$, $PSL(2, 11)$ и $PSL(2, 5)$ – группы автоморфизмов рассмотренной серии биплоскостей и группа вращений икосаэдра [1, 5]. Группа $PSL(2, 3)$ изоморфна группе вращений тетраэдра, $PSL(2, 7)$ рассмотрена в [9, 10].

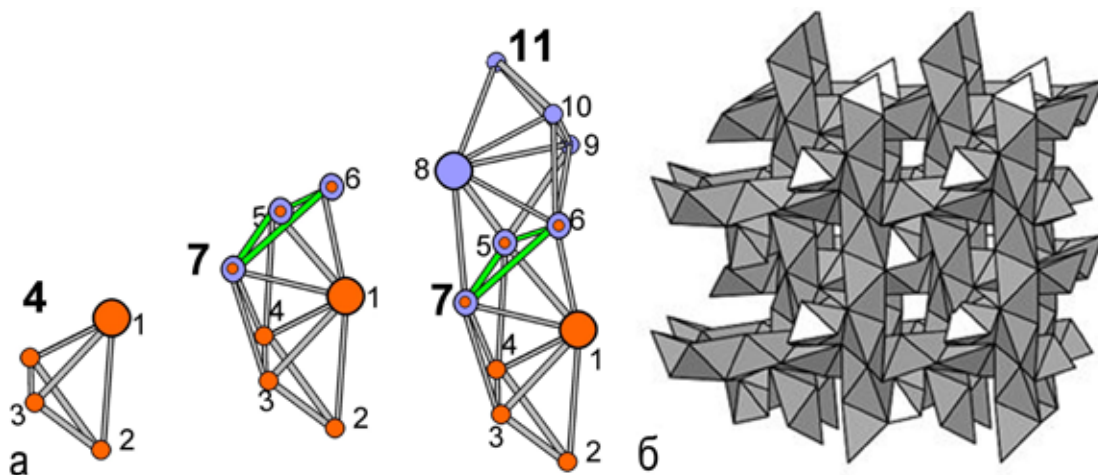


Рис. 1. Объединения правильных тетраэдров по граням: тетраэдр (4 вершины), тетраблок (7 вершин), объединение 2 тетраблоков (11 вершин), генерирующее спираль Коксетера – Бердийка из правильных тетраэдров. Общая грань двух тетраблоков выделена зелеными ребрами. б) Спирали Коксетера – Бердийка при малых искажениях ребер правильного тетраэдра (2-3 %) образуют кубический кристалл β -марганца.

В силу того, что тетраблок определяется отбрасыванием ручки у тора, из его 10 треугольных граней 8 боковые. Это означает, что присоединение тетраблоков друг к другу возможно только по нижней (2-3-4) и верхней (5-6-7) граням оснований (рис. 1 а). В политопе $\{3, 3, 5\}$ объединение $\Delta_i \cup \Delta_j$ двух тетраблоков по общей грани приводит к образованию 11-вершинного объединения 8 тетраэдров. Если объединяются тетраблоки одного типа $\Delta_i \cup \Delta_i$, то тетраблок Δ_i может генерировать в политопе спиральную упаковку тетраблоков, аппроксимируемую орбитой винтовой оси m_0/p_0 :

$$(m_0/p_0)^f (\Delta_i)_1 = \{(\Delta_i)_f | f=1, 2 \dots m_0, (m_0/p_0)^{m_0} = 2\pi\} \quad (1)$$

где m_0/p_0 – вращение на $360^\circ \times m_0/p_0$. В этом случае задание 11-вершинного объединения двух тетраблоков в политопах $\{3, 3, 5\}$:

$$\Delta_i \cup m_0/p_0(\Delta_i) = \Delta_i(m_0/p_0) \quad (2)$$

достаточно для генерирования спиральной упаковки тетраблоков. Действительно, при заданном 11-вершиннике $\Delta_i(m_0/p_0)$ 3 тетраблок должен присоединиться ко 2-му так, чтобы они образовали 11-вершинник, конгруэнтный исходному. Тем самым $\Delta_i(m_0/p_0)$ задает генерирование спирали из тетраблоков, которая в политопах $\{3, 3, 5\}$ замкнута в тор [3, 8]. В E^3 соответствующее (2) бесконечное объединение тетраблоков будет определяться близкой к m_0/p_0 осью m'/p' :

$$(m'/p')^f (\Delta_i)_1 = \{(\Delta_i)_f | f=1, 2, \dots m', m'+1, m'+2, \dots m's, (m'/p')^{m'} = 2\pi, s=1, 2, \dots\} \quad (3)$$

где $m'/p' = (m_0/p_0)'$. Задаваемая $\Delta_i(m'/p')$ ось m'/p' спирали должна определяться политопом $\{3, 3, 5\}$ и группами $PSL(2, 7)$, $PSL(2, 11)$, определяющими симметрию тетраблока и объединения двух тетраблоков.

По [13], соответствующая раскраска определяемого группой $PSL(2, 7)$ 24-вершинного разбиения сферы с 3-ручками на 56 треугольников (по 7 в каждой вершине) позволяет получить малый кубикокубооктаэдр (рис. 1). Он обладает 24 вершинами, 48 ребрами и 20 гранями (6 квадратов, 8 треугольников и 6 октагонов), что обеспечивает ему свойственную сфере с 3 ручками Эйлерову характеристику: $24 - 48 + 20 = 2 - 3 \times 2 = -4$. Перестановки его вершин генерируют группу Матье M_{24} , которая в качестве подгрупп содержит группу $PSL(2, 7)$, группу $PSL(2, 11)$ и ее минимальную надгруппу – группу Матье M_{11} . По [1], от группы M_{24} можно перейти к группе автоморфизмов решетки E_8 , в порядке которой $2^{14} \times 3^5 \times 5^2 \times 7$ есть сомножитель 7. Таким образом, от группы $PSL(2, 7)$ можно подняться до решетки E_8 , которая через M_{24} связана с $PSL(2, 11)$. Соотношения групп $PSL(2, 7)$ и $PSL(2, 11)$ рассмотрены в [10].

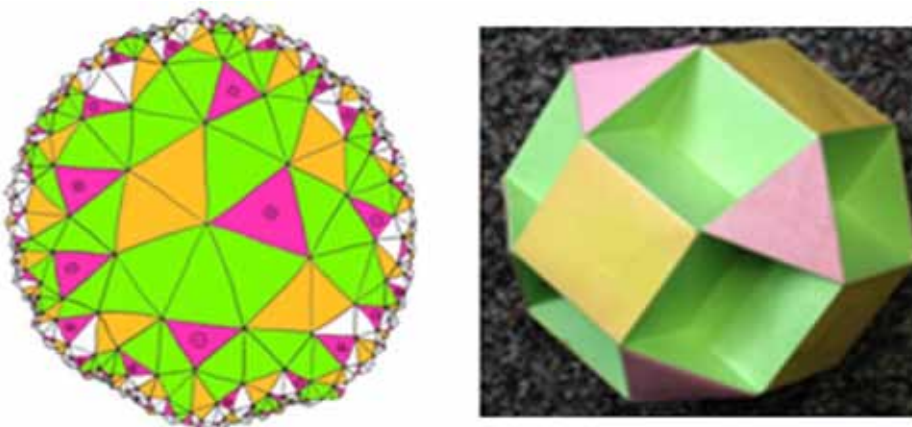


Рис. 2. Раскраска карты $\{3, 7\}_8$, позволяющая получить малый кубикокубооктаэдр (рис. 4 [13]).

Решетка E_8 определяет особый класс винтовых осей m/p :

$$m/p = 2^\gamma 8I_n / 4k_{js} m_{js} = 2^{\gamma+1} I_n / k_{js} m_{js} \quad (4)$$

где $2^\gamma 8I_n$ и $8I_n$ – число вершин из 2-ой и 1-ой координационной сфер решетки E_8 ; $\gamma = 0, 1, 2$; $I_n, I_s = k_{js}(m_{js} + 1)$ – инварианты E_8 , k_{js} – целое, m_{js} – один из показателей, вкладываемых в E_8 подрешеток [1, 15]. В частности, при $\gamma = 0, I_n = 30$, для $k_{js} m_{js} = 2 \times 11$ и $k_{js} m_{js} = 2 \times 9$ получаем $m/p = 30/11$ (рис. 1 а) и $m/p = 10/3$; при $k_{js} m_{js} = 2 \times 14$ получаем $m/p = 15/7$; при $k_{js} m_{js} = 4 \times 4$ получаем $m/p = 15/4$. При $\gamma = 1, I_n = 20, k_{js} m_{js} = 2 \times 11$ и $k_{js} m_{js} = 4 \times 5$ получаем $m/p = 40/11$ и $m/p = 40/10 = 4$. При $\gamma = 0, I_n = 24, k_{js} m_{js} = 6 \times 4$ получаем $m/p = 2$. Векторы 1-ой координационной сферы E_8 при проекции в E_4 определяют политоп $\{3, 3, 5\}$. В силу (1), тетраблоки генерируют спирали из правильных тетраэдров, которые должны вкладываться в политоп $\{3, 3, 5\}$ – объединение по граням 600 правильных тетраэдров. Так как решетка E_8 определяет и политоп $\{3, 3, 5\}$, задаваемые (1) и (3) оси m_0/p_0 и m'/p' должны удовлетворять (4).

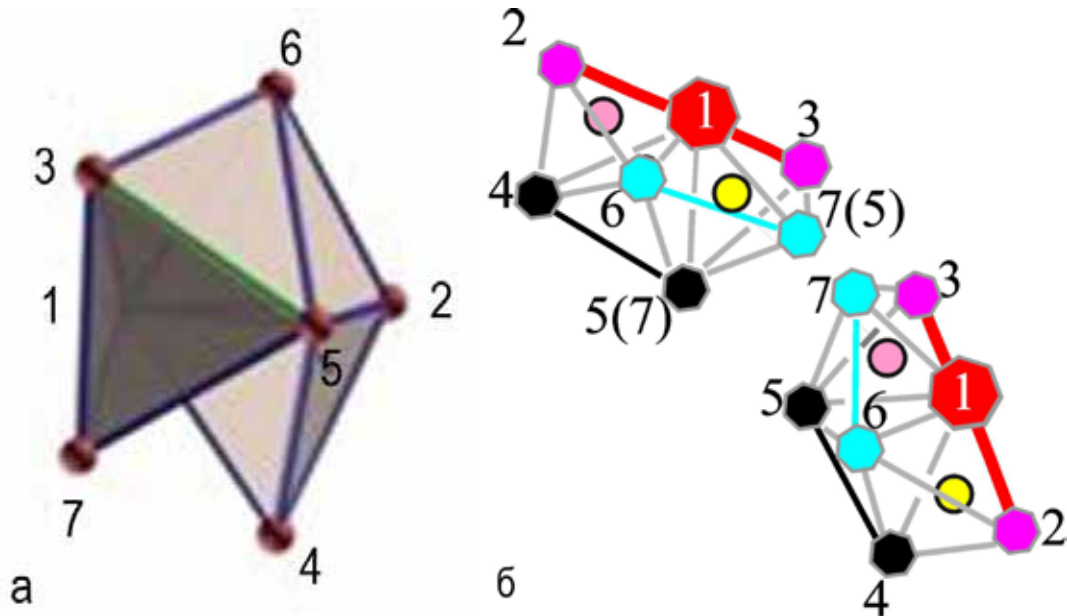


Рис. 3. а) Два тетраблока Δ_3 объединяются по общей грани (1-2-4 у верхнего и 3-5-7 у нижнего) в 11-вершинник $\Delta_3(40/11)$. б) Два тетраблока Δ_1 объединяются по общей грани: 3-7-5 в 11-вершинник $\Delta_1(40/11)$.

Рассмотрим изложенное выше на примере спирали Коксетера – Бердийка из правильных тетраэдров, которая в политопе $\{3, 3, 5\}$ определяется как орбита тетраэдров оси $30/11$, переводящая друг в друга 4 тетраэдра тетраблока Δ_1 . Четвертой степенью оси $30/11$ является ось $15/7$, поэтому в политопе спираль из тетраблоков Δ_1 генерируется 11-вершинником $\Delta_1(15/7)$. В E^3 в соответствующей спирали, генерируемой $\Delta_1((15/7)')$, трансляции вдоль оси нет. Расчетами показано [12], что при малых искажениях ребер тетраэдра (2-3 %) трансляция в спирали Коксетера – Бердийка возникает именно на 8 тетраэдрах (1-ый и 9-ый тетраэдры становятся трансляционно

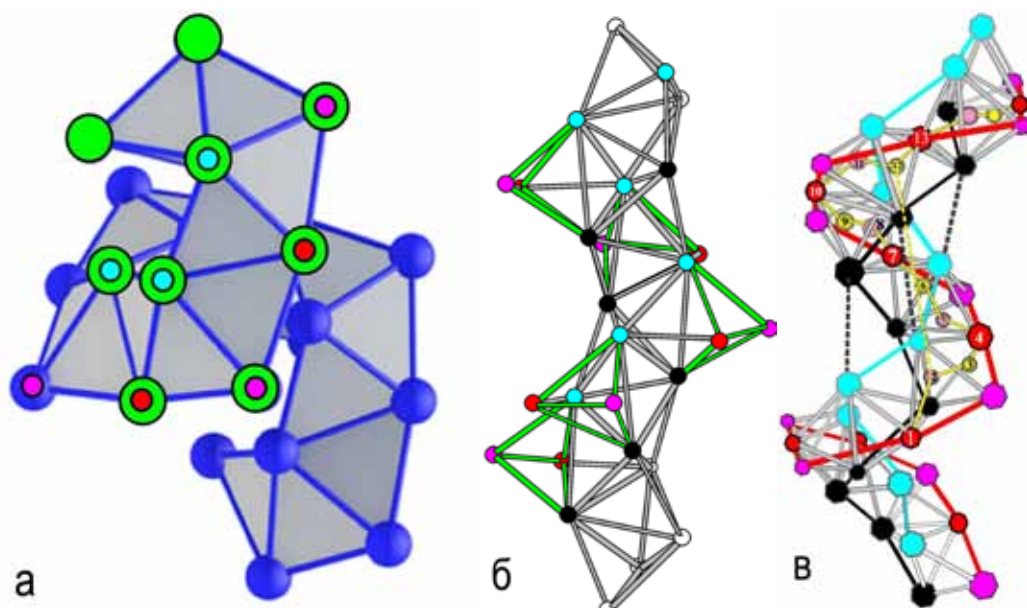


Рис. 4. а) Спираль $\Delta_3(40/11)$ как объединение тетраблоков Δ_3 . Вершины объединения 2 тетраблоков Δ_3 выделены зелеными кружками. б) Спираль из изолированных тетраэдров, возникающая из спирали а) при отбрасывании в каждом тетраблоке Δ_3 всех тетраэдров, кроме тетраэдра с вершинами красного, розового, голубого и (невидимого на рис. а) черного цвета. Спираль обвивает показанную серым цветом спираль $\Delta_1(30/11)$ из слегка деформированных тетраэдров. в) Изображенная на рис. а) спираль $\Delta_3(40/11)$ как спираль $\Delta_1(40/11)$ – объединение тетраблоков Δ_1 , центры которых (вершины типа 1 на рис. 3 б) показаны красным. Одни и те же вершины на всех рис. показаны одним цветом.

эквивалентными), т.е. спираль разбивается на трансляционно эквивалентные 11-вершинные объединения двух (слегка искаженных) тетраблоков. Искращения ребер тетраэдров приводят к возникновению вместо винтовой оси $15/7$ (поворот на 168°) винтовой оси 2_1 (поворот на 180°), квадратом которой является трансляция. Таким образом, (4) определяет ось $m_0/p_0 = 15/7$ в политопе $\{3, 3, 5\}$ и соответствующую ей ось $m'/p' = 2_1$ в E^3 . Аналогично, оси $m_0/p_0 = 15/4$ (поворот на 96°) из политопы $\{3, 3, 5\}$ ставится в соответствие ось $m'/p' = 40/11$ (поворот на 99°) в E^3 .

В общем случае возможно генерирование одной и той же спирали двумя различными 11-вершинниками, например, $\Delta_1(40/11)$ и $\Delta_3(40/11)$ (рис. 3). В рассматриваемом случае это определяется тем, что в политопе $\{3, 3, 5\}$ есть 60-вершинная орбита оси $15/4$ из 15 изолированных тетраэдров [3]. При выпрямлении в E^3 возникает спираль $40/11$ из изолированных правильных тетраэдров, обвивающая спираль Коксетера – Бердийка из слегка деформированных тетраэдров (рис. 4 б). Каждый изолированный тетраэдр может быть достроен до Δ_1 либо Δ_3 . Генерируемая таким образом спираль, в силу дополнительной симметрии $\Delta_1(40/11) = \Delta_3(40/11)$, должна быть более устойчивой. Так, при сохранении спирали в целом малые воздействия могут приводить к переходу от разбиения спирали на тетраблоки Δ_3 (рис. 4 а) к ее разбиению на тетраблоки Δ_1 (рис. 4 в).

Взаимные трансформации между спиралями из равнореберных триангулированных полиэдров

Тетраблок Δ_i – равнореберный триангулированный полиэдр, в котором 2 соседних треугольника образуют «ромб» с короткой диагональю – их общим ребром, являющимся и общим ребром 3 тетраэдров (рис. 5 г). Переброска этой диагонали (сохраняющая число вершин, ребер и треугольных граней) означает такое изменение вершин ромба, при котором его короткая диагональ растягивается до длинной диагонали, а длинная сжимается до короткой. Соответственно изменяются координаты вершин тетраблока Δ_i , трансформирующегося в Δ_j . Это преобразование f_{ij} тетраблока Δ_i в тетраблок Δ_j не является жестким движением, сохраняющим расстояния между точками, а представляет собой Мёбиусову трансформацию – дробно-линейное преобразование из группы $PSL(2, 7)$. Если использовать модель Клейна, то проективные трансформации из $PSL(2, 7)$ действуют как гиперболические движения в гиперболической плоскости. В нашем случае реализация таких преобразований обусловлена тем, что карта $\{3, 7\}_8$ (рис. 2) вкладывается в гиперболическую плоскость [9, 10]. В общем случае, Мёбиусова трансформация $f(z)$ эквивалентна произведению трансляции на d/c , инверсии, вращению с дилатацией (растяжением – сжатием), трансляции на a/c :

$$f(z) = (az+b)/(cz+d) = (z+d/c) (1/z) ((bc-ad)/c^2) (z+a/c) \quad (5)$$

где z – комплексная переменная, $ad - bc \neq 0$. Если до переброски f_{ij} вершины ромба соответствовали точкам z_1, z_2, z_3, z_4 , то после переброски они соответствуют точкам w_1, w_2, w_3, w_4 таким, что:

$$(z_1 - z_3)(z_2 - z_4) / (z_2 - z_3)(z_1 - z_4) = (w_1 - w_3)(w_2 - w_4) / (w_2 - w_3)(w_1 - w_4) \quad (6)$$

Преобразование f_{ij} удовлетворяет двойному соотношению (6), так как оно является Мёбиусовым, относительно которого (6) должно быть инвариантно. В группе $Y' \times Y'$ политопа $\{3, 3, 5\}$ ему соответствует -1, квадрат которой равен 1. В [12] оно определено как 2π -дисклинация. Таким образом, f_{ij} определяется $PSL(2, 7)$ и политопом $\{3, 3, 5\}$, что соответствует развиваемому нами подходу, в котором вершинам тетраблока сопоставляются кватернионы двух видов, соответствующие $PSL(2, 7)$ и политопу $\{3, 3, 5\}$ [2, 8, 9].

В E^3 удовлетворяющие (2) спирали из одинаковых тетраблоков определяются разворотом 2-го тетраблока относительно 1-го по общей треугольной грани на 0, 120 и 240°. В частности, при нулевом развороте 2-го тетраблока Δ_1 генерируется спираль Коксетера – Бердийка с осью (почти) 30/11 (рис. 1 а). При разворотах на 120 и 240° возникают спирали с осями 10/3 и 40/11 (рис. 5 в, а). По [4], ГЦК-решетка разбивается на непересекающиеся спирали 4_1 из одношапочных октаэдров (рис. 5 б). Одношапочный октаэдр – 7-вершинное объединение октаэдра и тетраэдра по грани – будем обозначать символом Δ_4 . Генерируемая Δ_4 спираль трансформируется в спирали 10/3 и

40/11 системой определяемых (5) - (6) перебросок диагоналей: $\Delta_1(40/11) \leftrightarrow \Delta_4(4_1) \leftrightarrow \Delta_1(10/3)$ [4]. В более однородной форме соотношения примут вид:

$$\Delta_1(40/11) = \Delta_3(40/11) \leftrightarrow \Delta_4(40/10) \leftrightarrow \Delta_1(40/12) \quad (7)$$

Спирали из тетраблоков генерируются 11-вершинником $\Delta_1(m/p)$, поэтому соотношения (7) должны определяться группой $PSL(2, 11)$ (или связанными с ней более общими конструкциями) – группой автоморфизмов би-плоскости $2-(11, 5, 2)$. Би-плоскость $2-(11, 5, 2)$ порождает схему блокового дизайна $4-(11, 5, 1)$, называемую системой Штайнера $S(4, 5, 11)$. Как видно из ее обозначения, 11 чисел разбиты на блоки из пяти чисел так, что любая четверка чисел встречается только в одном блоке (всего 66). Поскольку 4 числа можно отождествить с номерами 4 вершин тетраэдра, в [16] показано, что автоморфизмы системы Штайнера, отображающие ее блоки друг в друга, определяют 11-вершинники $\Delta_1(m/p)$ и их комбинаторно допустимые трансформации. Группой автоморфизмов системы Штайнера $4-(11, 5, 1)$ является группа Матье M_{11} – минимальная надгруппа для $PSL(2, 11)$. Таким образом, взаимные трансформации спиралей (7) определяются группой M_{11} – подгруппой группы M_{24} , которая обеспечивает возможность перехода к группе автоморфизмов решетки E_8 .

Тетраблоки могут быть собраны в более крупные объединения, чем спиральные упаковки. Действительно, центры тетраэдров в регулярном икосаэдре образуют додекаэдр, через вершины которого проходит замкнутый граф Гамильтона (рис. 6 а). Если в этом графе 2 ребра отбросить, а одно

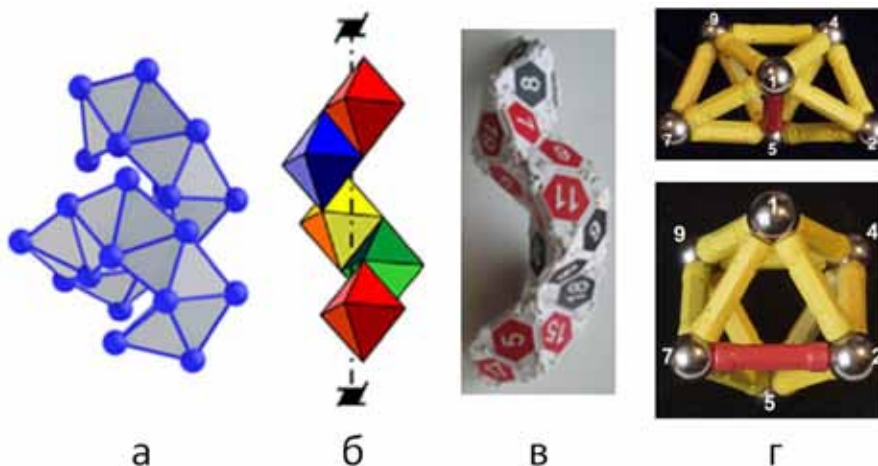


Рис. 5. а) Спираль $\Delta_1(40/11) = \Delta_3(40/11)$, также изображенная на рис. 4. б) Спираль $\Delta_4(4_1)$ из граничащих по грани 1-шапочных октаэдров. Граничащие по ребрам октаэдры образуют спираль с винтовой осью 4_1 , тетраэдры между октаэдрами не показаны. в) Спираль $\Delta_1(10/3)$ как объединение чередующихся красных и черных тетраблоков. г) «Ромб» 1-2-5-7 из двух соседних треугольных граней с общим (красным) ребром 1-5 в общем для всех тетраблоков объединении 3 тетраэдров. Замена общего ребра 1-5 на ребро 2-7 трансформирует объединение 3 тетраэдров в октаэдр при сохранении координат вершин 4 и 9.

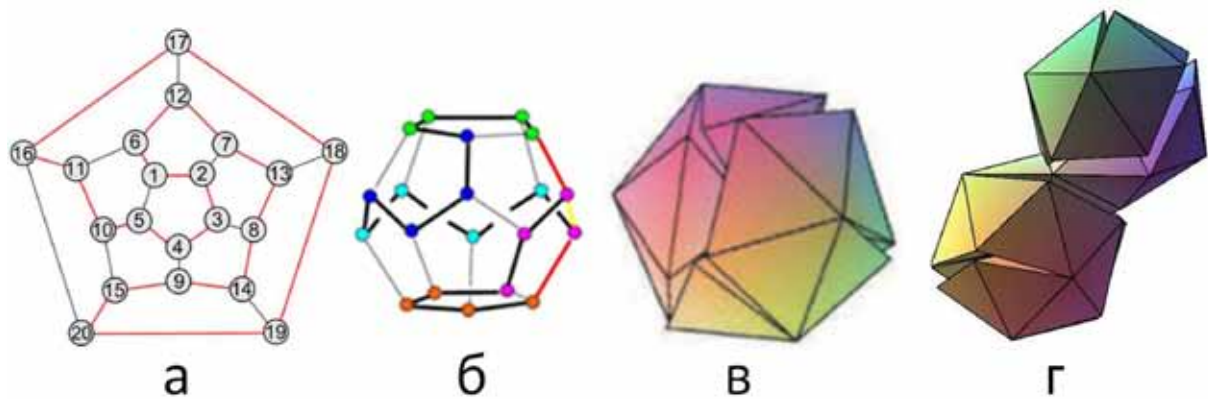


Рис. 6. а) Замкнутый граф Гамильтона додекаэдра (красная линия) проходит через все вершины без повторений. б) Отбрасывание двух красных ребер и добавление желтого приводит к незамкнутой цепи из 5 четверок вершин: зеленой, синей, голубой, фиолетовой, оранжевой. в) Сопоставление каждой четверке вершин в б) центров входящих в тетраблок тетраэдров определяет цепь из 5 тетраблоков $\Delta_3 + \Delta_3 + \Delta_1 + \Delta_3 + \Delta_3$, свернутую в икосаэдр со щелями, изображенный на рис. 7 [7]. г) Сворачивание цепи тетраблоков в объединение двух икосаэдров со щелями, приведенное на рис. 8 [7].

добавить, то получим незамкнутую цепь из 5 четверок вершин (рис. 6 б). Сопоставив каждой вершине центр тетраэдра, получим объединение 5 тетраблоков $\Delta_3 + \Delta_3 + \Delta_1 + \Delta_3 + \Delta_3$, образующих икосаэдр со щелями (рис. 6 в). Щели образуются в силу того, что правильный икосаэдр собирается не из правильных тетраэдров, а из тетраэдров с двумя длинами ребер. Группой вращений икосаэдра является $PSL(2, 5)$. Таким образом, вся выделенная Галуа особая серия из 4 проективных специальных линейных групп $PSL(2, p)$, $p = 3, 7, 11$ и 5, определяет симметрию объединений тетраблоков. Из икосаэдров со щелями может быть собрана спиральная упаковка (рис. 6 г).

Заключение

В [1] и этой статье показано, что тетраэдр, 7-вершинный тетраблок и 11-вершинное объединение по грани 2 тетраблоков представляют собой геометрические реализации комбинаторных конструкций, определяемых биплоскостями $2-(4, 3, 2)$, $2-(7, 4, 2)$ и $2-(11, 5, 2)$, составляющими особую серию биплоскостей. Группами автоморфизмов рассмотренной серии биплоскостей являются проективные специальные линейные группы $PSL(2, p)$, $p = 3, 7, 11 \equiv 3 \pmod{4}$ из выделенной Галуа особой серии групп $PSL(2, p)$, $p = 3, 5, 7, 11$. Определяющая тетраблок последовательность симметричных конструкций: $2-(7, 4, 2) \leftrightarrow 2-(7, 3, 1) \rightarrow PSL(2, 7) \rightarrow$ кватернионы двух видов, соответствующие $PSL(2, 7)$ и политопу $\{3, 3, 5\}$ [8, 9]. Это же позволило установить связь тетраблока с решеткой E_8 , определяющей особый класс винтовых осей m/p с вращением на угол $360^\circ \times p/m$. В работе показано, что 11-вершинные объединения 2 тетраблоков генерируют спи-

ральные упаковки тетраблоков, оси m/p которых определяются решеткой E_8 .

Тетраблок – равнореберный триангулированный полиэдр, в котором 2 соседних треугольника образуют «ромб» с короткой диагональю – их общим ребром. Переброска этой диагонали (сохраняющая число вершин, ребер и треугольных граней) трансформирует тетраблоки друг в друга и является мебиусным (дробно-линейным) преобразованием. Системы таких перебросок обеспечивают взаимные трансформации спиралей из тетраблоков. В итоговой таблице показаны особые объединения правильных тетраэдров по граням как геометрические реализации рассмотренного особого подмножества комбинаторных конструкций.

Объединение правильных тетраэдров по граням	Тетраэдр	Тетраблок	Объединение 2 тетраблоков во фрагмент спирали	Сворачивание цепи 5 тетраблоков в икосаэдр со щелями
Число тетраэдров	1	4	8	20
Число вершин	4	7	11	23
Варианты объединения		правый Δ_1 , левый Δ_2 , плоский Δ_3	с винтовой осью m/p (4)	6 вариантов размыкания графа Гамильтона додекаэдра
Комбинаторная структура, определяющая объединение тетраэдров и его трансформации	биплоскость 2-(4, 3, 2)	биплоскость 2-(7, 4, 2), свертывание конечной проективной плоскости 2-(7, 3, 1) в квартик Клейна	биплоскость 2-(11, 5, 2) система Штайнера $S(4, 5, 11)$	рубик-икосаэдрическая конструкция группы Матье M_{12}
Группа автоморфизмов комбинаторной структуры, порядок группы	$PSL(2, 3)$, 12	$PSL(2, 7)$, 168	$PSL(2, 11)$, 660 Группа Матье M_{11} ; 7920	$PSL(2, 5)$, 60 $PSL(2, 11)$, 660 M_{12} , 95040

Белки могут рассматриваться как плотная упаковка более или менее близких по размерам сферических единиц – аминокислот, аппроксимируемая упаковкой тетраэдров [14]. В рамках развиваемого подхода показано, что априори определяемые спирали из тетраблоков обладают (с точностью до нескольких процентов) геометрическими параметрами спиралей биополимеров, в частности, α -спирали и ДНК [15]. Это позволяет провести аналогию с априори выведенными федоровскими группами и кристаллическими структурами. Действительно, расположение атомов кристалла определяется достижением минимума энергии Гиббса системой взаимодействующих между собой атомов. В то же время, кристалл обладает симметрией одной из 230 пространственных групп – замкнутого набора матриц, который получен

из чисто математических соображений, не предполагающих существование атомов и их взаимодействий.

Автор выражает глубокую признательность М.И. Самойловичу и В.С. Крапошину за многолетний постоянный интерес к работе и стимулирующие обсуждения.

Список литературы

1. Конвей Дж., Слоэн Н. Упаковки шаров, решетки и группы Т. 1. М.: Мир, 1990. 415 с.
2. Талис А.Л. От особой серии комбинаторных конструкций к тетраблоку – строительной единице цепей из правильных тетраэдров, аппроксимирующих линейные подструктуры биополимеров // Наст. сб.
3. Талис А.Л. Конструкции алгебраической геометрии, спиральные подструктуры политопов и структура α -спирали // Тр. IX Всерос. научн. школы «Математические исследования в естественных науках». Апатиты: Геол. ин-т КНЦ РАН, 2013. С. 84-92.
4. Талис А.Л. Спираль с двумя углами вращения и другие некристаллографические симметрии (био)полимеров // Тр. IX Всерос. научн. школы «Математические исследования в естественных науках». Апатиты, Геол. ин-т КНЦ РАН, 2013. С. 93-100.
5. Холл М. Комбинаторика. М.: Мир, 1970. 421 с.
6. Финкельштейн А.В., Птицын О.Б. Физика белка. М.: Кн. дом «Университет», 2005. 376 с.
7. Babiker H., Janeczko S. Combinatorial cycles of tetrahedral chains. IM PAN Prep. 741. 2012.
8. Coxeter H.S.M. Regular polytopes. New York: Dover, 1983. 319 p.
9. Elkies N. The Klein quartic in number theory. MSRI Publ. 1998. V. 35. P. 51-100.
10. Martín P., Singerman D. The geometry behind Galois' final theorem // Eur. J. Comb. 2012. V. 33, N 7. P. 1619-1630.
11. Nyman H., Carroll C.E., Hyde B.G. Rectilinear rods of face-sharing tetrahedra and the structure of β -Mn // Z. für Krist. 1991. V. 196. P. 39-46.
12. Nelson D. Order, frustration and defects in liquids and glasses // Phys. Rev. 1983. B28. P. 5515-5535.
13. Richter D. How to make the Mathieu group M_{24} .
14. Sadoc F.J., Rivier N. Boerdijk-Coxeter helix and biological helices // Eur. Phys. J. 1999. B12. P. 309-318.
15. Samoylovich M.I., Talis A.L. Symmetry of helicoidal biopolymers in the frameworks of algebraic geometry: α -helix and DNA structures // Acta Cryst. 2014. A70. P. 186-198.
16. Talis A., Kraposhin V. Finite noncrystallographic groups, 11-vertex equi-edged triangulated clusters and polymorphic transformations in metals // Acta Cryst. 2014. A70. P. 616-625.

СПИРАЛИ ИЗ ТЕТРАБЛОКОВ И ЗАКОНОМЕРНОСТИ СТРОЕНИЯ α -СПИРАЛИ И ДНК

Талис А.Л.

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

Сборка спиралей из тетраблоков позволяет определять их геометрические параметры, которые хорошо соответствуют некоторым параметрам α -спирали и А-, В-, Z-ДНК.

Designing of the spirals of tetra-blocks allows to determine the geometrical parameters which correspond to some parameters α -helix and the A-, B-, Z-DNA.

Математическое описание мира основано на тонкой игре непрерывного и дискретного [1], которая отображает условия сборки атомов (молекул) в соответствии с топологическими свойствами трехмерного евклидового пространства и допустимыми вложениями в него конечных дискретных

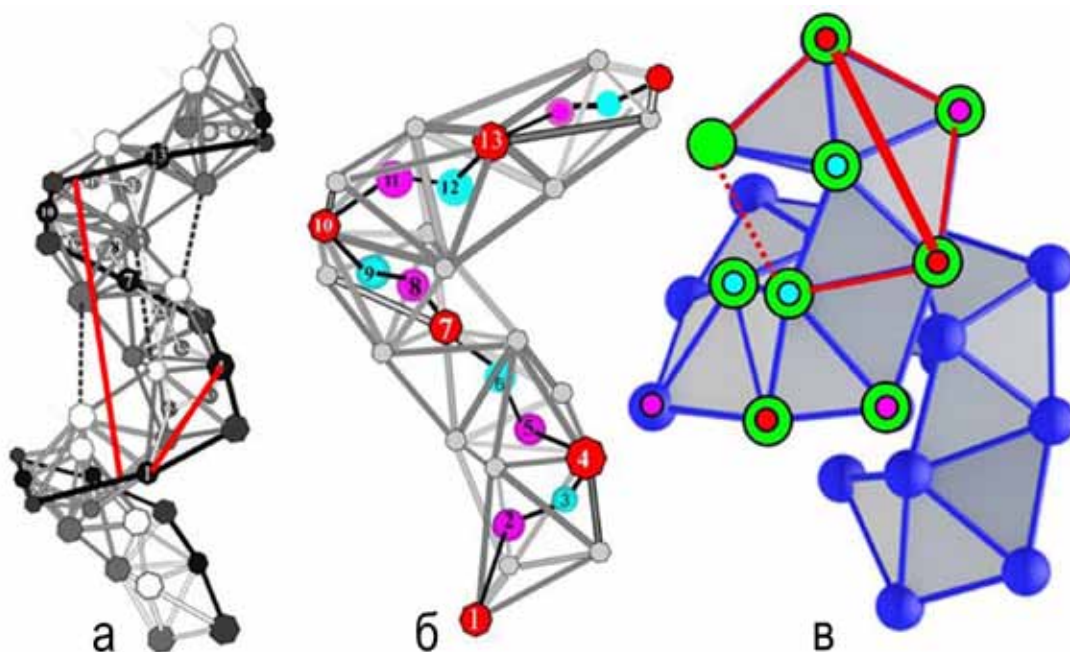


Рис. 1. а) Спиральная упаковка тетраблоков Δ_4 , объединяемых по общей грани. Черные и темно-серые вершины принадлежат двум спиральям 40/11, соединяющие их ребра образуют спираль. Белые и серые вершины принадлежат двум другим спиральям 40/11. Расстояния S_α между ближайшими атомами и h_0 между витками показаны красными линиями. б) Размещение атомов α -спирали в высокосимметричных позициях спиральной упаковки тетраблоков Δ_4 ; центрами Δ_4 являются красные кружки. Красные, фиолетовые и голубые кружки – атомы S_α , S' и N . Полипептидная цепь показана жирной черной линией. в) Спираль а) как объединение тетраблоков Δ_3 . Вершины объединения 2 тетраблоков Δ_3 выделены зелеными кружками. Почти идеальный пентагон (при добавлении не принадлежащего Δ_3 пунктирного ребра) показан красным цветом. Ближайшие красные вершины (центры Δ_4) соединяет жирная красная линия – диагональ пентагона.

упорядоченных структур. В [4, 5] рассмотрена спираль с винтовой осью 40/11, которая определяет геометрические параметры α -спирали и может быть собрана из тетраблоков Δ_1 и Δ_3 . В рамках развиваемого подхода вершинам тетраблока сопоставляются кватернионы двух видов: соответствующие $PSL(2, 7)$ и политопу $\{3, 3, 5\}$. Это позволяет предположить, что в характеризующих α -спираль геометрических характеристиках должны проявиться закономерности, определяемые конструкциями гиперболической геометрии и политопа.

Наряду со спиральным вращением, важнейшими характеристиками локально цилиндрической аппроксимации α -спирали [2, 3, 8] являются межвитковое расстояние $h = 5,4 \text{ \AA}$ и радиус $r = 2,3 \text{ \AA}$ (рис. 1 а). Для α -спирали соотношение $h/r \approx 2.349$ определяет шаговый угол $\theta_{\text{эксп.}} \approx 20.5^\circ$, при относительном коэффициенте упаковки спирали 0.996 по [7]. Для максимально плотноупакованной спирали [7] шаговый угол $\theta(F_v)$ равен 18.1° , тогда как для идеальной модели α_0 -спирали определенный [2, 3, 8] шаговый угол $\theta_{\text{крит.}}$ равен 20.9° , что на 10 % ближе к $\theta_{\text{эксп.}}$, чем в [7].

Спиральная упаковка тетраблоков $\Delta_1(40/11) = \Delta_3(40/11)$, определяющая модель α -спирали [4, 5], должна отображать локальную – цилиндричность [2, 3, 8]. Выполнение этого условия достигается при трактовке минимального расстояния $L'_{\min}$ между атомами C_α (1 и 4 на рис. 1 б) как 11/40 условной окружности длины πD , где D – диаметр. Данная условная окружность расположена в плоскости, наклонной по отношению к основанию цилиндра, на поверхности которого расположена спираль полипептидной цепи [2, 3]. В единицах ребра тетраэдра расстояние $L'_{\min}$ (удвоенная высота тетраэдра) равно 1.633. В тетраблоке Δ_3 это расстояние является диагональю почти правильного экваториального пентагона. В политопе $\{3, 3, 5\}$ тетраблок Δ_3 представляет собой пентагональную бипирамиду без одного тетраэдра, поэтому там экваториальный пентагон правильный и его диагональ $L_{\min}$ (в единицах ребра тетраэдра) равна золотому сечению $\tau = (1 + \sqrt{5})/2 = 1.618033\dots$. Примем расстояние $L_{\min}$ в политопе за 11/40 часть условной окружности, тогда:

$$\pi D \times 11/40 = \tau, \quad \text{откуда} \quad D = \tau/\pi \times 40/11 \quad (1)$$

Соотношение (1) получено в результате «политопной» трактовки тетраблока.

Согласно [2, 3], различия в радиусах окружностей в гиперболической геометрии и соответствующей ей евклидовой определяются коэффициентом $k = 1.2$. Условная окружность рассматривается в рамках гиперболической геометрии, поэтому при переходе в евклидову диаметр D необходимо увеличить в k раз. Это позволяет (в единицах ребра тетраэдра) определить расстояние h_0 между витками идеальной (математической) модели α_0 -спирали:

$$h_0 = k D = k \tau/\pi \times 40/11 \quad (2)$$

В (2) используются «политопная» и «гиперболическая» трактовки тетраблока. Так как с большой точностью $\pi/k = \tau^2$, то

$$h_0 = 40/11 \tau \approx 2.247 \quad (3)$$

что составляет 0.957 от экспериментального соотношения $h/r \approx 2.349$ для α -спирали.

Сопоставление основных структурных параметров α -спирали и построенной нами из тетраблоков α_0 -спирали подтверждает структурную адекватность такой идеальной (математической) модели [2, 3]: 1) спиральное вращение α_0 -спирали 40/11, у α -спирали 18/5 как результат усреднения фрагментов α_0 -спирали; 2) шаговый угол α_0 -спирали 20.9° , у α -спирали 20.5° ; 3) соотношение $i \rightarrow i+4$ для водородной связи α -спирали определяется соотношением $\langle 40/11 \rangle^4 = 10_1$; 4) средняя длина α -спирали из 11 вершин определяется соотношением $\langle 40/11 \rangle^{10} = 4_1$. Построенная спиральная упаковка тетраблоков определяет триангулированную поверхность, которая соответствует точке бифуркации для задаваемой глобальным представлением Вейерштрасса минимальной поверхности, обладающей нулевым индексом неустойчивости [2, 3]. В таблице приведены данные, подтверждающие справедливость развиваемого подхода и для других спиралей полипептидных цепей.

Таблица.1. Экспериментальные [6] и теоретические (наши – жирный шрифт, [7] – подчеркнуто) параметры спиралей полипептидных цепей.

Тип спирали	Остатков на виток	Локальная ось	Шаг спирали h (Å)	Радиус спирали r (Å)	Угол θ ($^\circ$)	Угол $\theta_{\text{экс.}}$ ($^\circ$)	Угол θ по [7] ($^\circ$)	Коэфф. упаковки спирали
3_{10} -спираль	3	30/10=3,(0)	6	1.9		26.6		<u>0.690</u>
Спираль коллагена	3.3	40/12=10/3=3,(3)	9.67	1.6				
α -спираль	3.6	40/11=3,(63)	5.4	2.3	20.9	20.5	<u>18.1</u>	<u>0.781</u>
4_1 -спираль ГЦК	4	40/10=4,(0)						
π -спираль	4.3	30/7= 4,(285714)	4.73	2.8		15.0		0.777

В [5] показано, что генерируемая тетраблоком Δ_1 спираль может быть трансформирована в спирали из 7-вершинных триангулированных полиэдров с винтовыми осями 4/1 и 10/3. По сравнению со спиралью $\Delta_1(40/11)$ внутренняя пустота для спирали $\Delta_4(4/1)$ уменьшается, а для спирали $\Delta_1(10/3)$ исчезает (внутренний пустой цилиндр вырождается в прямую) (рис. 2). Реализации осей 40/10, 40/11, 40/12 приведены в таблице.

При утроении количества центров тетраблоков Δ_1 на исходной α_0 -спирали возникает спираль с винтовой осью $3 \times 40/11 \approx 11$, которая обвивает пустой внутренний цилиндр (радиуса $\rho \approx r/2$) и обладает равным ≈ 2.4 соотношением h/r . Спиралью, обладающей данными параметрами, является спираль А-ДНК, в которой пары оснований сдвинуты на 4-5 Å от оси к периферии. Эта спираль характеризуется винтовой осью 11 порядка, соотношением ≈ 2.487 шага $h = 28.6$ Å к радиусу $r = 11.5$ Å, а ее пары оснований не проходят через внутренний цилиндр (радиуса $\rho = 4-5$ Å) [2]. Аналогичное рассмотренному для α_0 -спирали увеличению в 3 раза порядков осей [2, 3, 8], позволяет

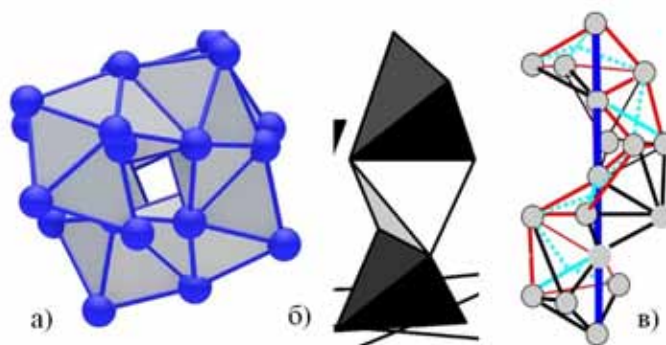


Рис. 2. а) Пустота внутри спирали $\Delta_1(40/11) = \Delta_3(40/11)$ (рис. 1 в) образует спираль $\Delta_1(15/7)$, изображенную на рис. 4 б [5]. б) Пустота внутри спирали $\Delta_4(40/10)$, изображенной на рис. 5 б [5], образует цепочку, граничащих по ребрам тетраэдров. в) Отсутствие пустоты (вырождение в синюю прямую) внутри спирали $\Delta_1(40/12)$ изображенной на рис. 5 в [5].

из спиралей $4/1$ и $10/3$ получить спирали с винтовыми осями $12 = 3 \times 4/1$, $10 = 3 \times 10/3$ и геометрическими параметрами, характерными для Z- и В- ДНК. Этот пример показывает, что хотя в основном рассматривалась α -спираль, но развиваемый подход оказался плодотворен и для других спиральных биосистем. Более подробно изложение этих вопросов представлено в [9, 10].

Автор выражает глубокую признательность М.И. Самойловичу за многолетний интерес к работе и стимулирующие обсуждения.

Список литературы

1. Арнольд. В.И. Теория катастроф. М.: УРСС, 2004. 128 с.
2. Самойлович М.И., Талис А.Л. Симметричные основы структурной организации спиральных биосистем: α -спираль и ДНК-структуры // Матер. XIX Межд. конф. «Высокие технологии в промышленности России». М.: Техномаш, 2014. С. 135-154.
3. Самойлович М.И., Талис А.Л. Спиральные структуры биополимеров, определяемые особыми упаковками 7-вершинных объединений тетраэдров: пример α -спирали // Матер. XX Межд. конф. «Высокие технологии в промышленности России». М.: МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2015. С. 296-303.
4. Талис А.Л. От особой серии комбинаторных конструкций к тетраблоку – строительной единице цепей из правильных тетраэдров, аппроксимирующих линейные подструктуры биополимеров // Наст. сб.
5. Талис А.Л. Закономерности сборки тетраблоков и спиральные подструктуры, аппроксимирующие спирали биополимеров // Наст. сб.
6. Щульц Г., Ширмер Р. Принципы структурной организации белков. М.: Мир, 1982. 242 с.
7. Olsen K., Bohr J. The generic geometry of helices and their close-packed structures // Theor. Chem. Acc. 2010. V. 125. P. 207.
8. Samoylovich M.I., Talis A.L. Symmetry of helicoidal biopolymers in the framework of algebraic geometry: α - helix and DNA structures // Acta Cryst. 2014. A70. P. 186-198.

9. Samoylovich M.I., Talis A.L. A special class of spirals of regular tetrahedra approximating linear substructure of biopolymers // Acta Cryst. 2015. A71. In press.
10. Samoylovich M.I., Talis A.L. 2013. ArXiv 1303.4228; ArXiv 1312.7107.

МОДЕЛЬНЫЕ МНОЖЕСТВА И ГРАФЫ С НЕКРИСТАЛЛОГРАФИЧЕСКОЙ СИММЕТРИЕЙ

Шутов А.В., Кузнецова Т.В., Малеев А.В.

Владимирский государственный университет, Владимир, a1981@mail.ru

В работе рассмотрен подход к построению и исследованию квазипериодических структур. В основе лежит известная конструкция модельных множеств. Нами предложен переход от точечных модельных множеств к графам. Частными случаями являются разбиения Пенроуза и Амманна-Бенкера. Также исследованы модельные множества и графы с симметрией порядка n , в том числе некристаллографической. Отдельно рассмотрены фазовые переходы в модельных графах, происходящие при изменении линейных размеров окна. Многие свойства модельных графов, например, координационные окружения вершин, описаны в терминах параметров.

We consider an approach to the construction and study of quasi-periodic structures. Our approach is based on well-known idea of model set. We propose a transition from point model sets to so called model graphs. Partial cases of our construction are Penrose and Ammann-Beenker tilings. Also we study a class of model sets and graphs with the symmetry of order n including non-crystallographic symmetry. Besides we study phase transitions in model graphs occurring under changing of linear size of window. Moreover we show that many properties of model graphs such as its coordination environments can be described in the terms of the parameters of vertices.

Квазикристаллы, открытые Шехтманом [14], представляют собой особый вид твердых тел, обладающих дальним порядком, но не обладающих традиционной для кристаллов трансляционной симметрией. В числе особенностей квазикристаллов можно отметить точечный дифракционный спектр, а также наличие не совместимых с периодичностью поворотных симметрий (обычно речь идет о поворотной симметрии 5-го или 10-го порядков). Открытие Шехтмана поставило целый ряд задач, связанных не только с изучением физических свойств квазикристаллов, но и с построением адекватных математических моделей [7, 13]. При этом их интересно рассматривать не только в размерности 3, но и в других. Наиболее известной математической моделью квазикристалла являются т.н. модельные множества [11, 12]. В основе их построения лежит метод «среза и проекции».

Рассмотрим решетку L в пространстве размерности $n + m$ и две проекции $\pi_1 : \mathbf{R}^{n+m} \rightarrow \mathbf{R}^n$ и $\pi_2 : \mathbf{R}^{n+m} \rightarrow \mathbf{R}^m$. Пространство $\mathbf{R}^n$ будем называть физическим, $\mathbf{R}^m$ – фазовым. Предположим, что проекции решетки всюду плотны в каждом из пространств. Рассмотрим в фазовом пространстве множество W , которое

будем называть окном. Тогда точечное множество $\Lambda_W = \{\pi_1(\mathbf{x}) : \mathbf{x} \in L, \pi_2(\mathbf{x}) \in W\}$ представляет собой непериодическую систему Делоне, обладающую дальним порядком и точечным дифракционным спектром. Коротко она представлена на следующей схеме.

$$\mathbf{R}^n \xleftarrow{\pi_1} \mathbf{R}^{n+m} = \mathbf{R}^n \times \mathbf{R}^m \xrightarrow{\pi_2} \mathbf{R}^m$$

$$\cup$$

$$L$$

Простейший примером подобного множества – одномерный квазикристалл Фибоначчи. Для его построения [3, 13] в качестве решетки L возьмем квадратную решетку на плоскости (рис. 1). Через один из узлов проведем прямую p (физическое пространство), образующую с направлением $(1,0)$ угол $\alpha = \arctg \tau$, и прямую q (пространство параметров), вдоль диагонали элементарной ячейки решетки L . Тогда π_1 есть ортогональная проекция узлов решетки на прямую p , а π_2 – проекция на прямую q вдоль прямой p . В качестве окна W выберем диагональ элементарной ячейки. Тогда проекции на p узлов решетки, попадающих в полосу, определяемую окном W , дает одномерный квазикристалл Фибоначчи.

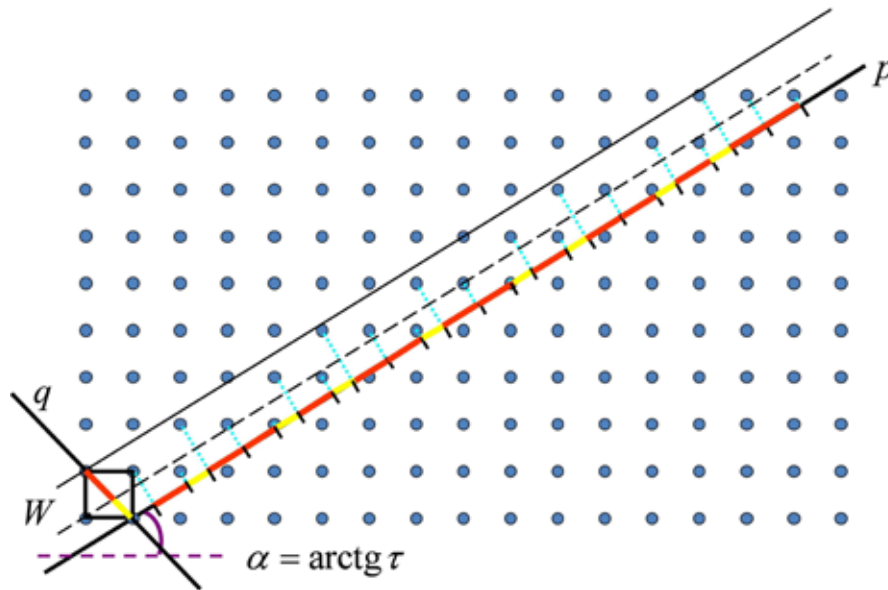


Рис. 1. Одномерный кристалл Фибоначчи.

В общем случае фазовое пространство $\mathbf{R}^m$ заменяется более сложным математическим объектом – локально компактной абелевой (коммутативной) группой G . При этом в качестве L рассматривается подгруппа $\mathbf{R}^m \times G$, для которой факторгруппа $\mathbf{R}^m \times G / L$ компактна [12].

Примером ситуации, для описания которой удобно отойти от евклидовых пространств, является множество вершин разбиения Пенроуза. Конструкция предложена Бааки с соавторами [9, 10]. В варианте Бааки в качестве фазового пространства G рассматривается прямое произведение

множества комплексных чисел C на циклическую группу пятого порядка C_5 . Можно считать, что точки из данного пространства имеют две координаты. Первая является обычным комплексным числом, вторая – целым числом из множества $\{0, 1, 2, 3, 4\}$. Точки из группы G можно складывать. Сложение определяется по координатам: обычное сложение комплексных чисел для первой координаты и остаток от деления суммы на 5 для второй. Физическое пространство R^2 также рассматривается как комплексная плоскость C . В качестве решетки L берется целочисленная 4-мерная решетка, точки которой имеют координаты (h, j, k, l) , где h, j, k, l пробегает все возможные целые числа. Пусть теперь $\zeta = e^{2\pi i/5}$ – комплексный корень 5-ой степени из 1. Определим проекции π_1 и π_2 :

$$\pi_1((h, j, k, l)) = h + j\zeta + k\zeta^2 + l\zeta^3, \pi_2((h, j, k, l)) = (h + j\zeta^2 + k\zeta^4 + l\zeta, h + j + k + l \bmod 5).$$

Для завершения определения модельного множества нам необходимо определить окно W . Пусть теперь P – правильный 5-угольник на комплекс-

ной плоскости с вершинами $\{1, \zeta, \zeta^2, \zeta^3, \zeta^4\}$ и $\tau = (\sqrt{5} - 1)/2$. Тогда $W = \bigcup_{i=0}^4 (\Omega_i, i)$, где $\Omega_0 = \{0\}$, $\Omega_1 = P$, $\Omega_2 = -P/\tau$, $\Omega_3 = P/\tau$, $\Omega_4 = -P$. Можно показать, что конструкция Бааки содержит ряд неточностей. Ее использование приводит к ряду «лишних вершин». Подробное обсуждение и исправленный вариант конструкции Бааки можно найти в [4, 5].

Модельные множества могут не обладать важным с точки зрения кристаллографии свойством: наличием нетривиальной поворотной симметрии высокого порядка. Чтобы модельное множество могло обладать поворотной симметрией порядка n , необходимо выполнение условий:

Наличие в группе автоморфизмов проектируемого множества L циклической подгруппы C_n . Примерами таких объектов являются:

- n -мерная целочисленная решетка Z^n
- $(n-1)$ -мерная решетка корней A_{n-1} , определяемая как пересечение решет-

ки Z^n с гиперплоскостью, задаваемой уравнением $\sum_{k=1}^n x_k = 0$,

- прямое произведение произвольной решетки с циклической группой C_n ,
- алгебраическое круговое кольцо $Z[\zeta_n]$, где $\zeta_n = e^{\frac{2\pi i}{n}}$ – корень n -ой степени из 1.

2) Окно W должно обладать поворотной симметрией порядка n . Примерами таких окон являются правильные k -угольники с k , делящимся на n , а также окружность.

3) Проекции π_1 и π_2 также должны быть согласованы с симметрией порядка n .

На наш взгляд, наиболее интересным является случай, когда в качестве проектируемого множества L берется круговое кольцо $Z[\zeta_n]$ [7, 8]. Это объ-

ясняется возможностью применять к изучению модельного множества результаты из алгебраической теории чисел [1, 2], а также существованием дополнительных структур, порождаемых наличием умножения в кольце. Такие множества называют циклотомическими модельными. Опишем кон-

струкцию более подробно. Числа из кольца $\mathbf{Z}[\zeta_n]$ представимы в виде $\sum_{k=1}^{\varphi(n)} a_k \zeta_n^k$, где все a_k – целые и $\varphi(n)$ – функция Эйлера, то есть количество чисел, не превосходящих и взаимно простых с n . Ясно, что данные числа находятся во взаимно однозначном соответствии с точками решетки $\mathbf{Z}^{\varphi(n)}$. Это соответствие порождает проекцию $\pi_1 : \mathbf{Z}^{\varphi(n)} \rightarrow \mathbf{C}$, задаваемую формулой

$$\pi_1(a_1, \dots, a_{\varphi(n)}) = \sum_{k=1}^{\varphi(n)} a_k \zeta_n^k.$$

Кольцо $\mathbf{Z}[\zeta_n]$ обладает группой автоморфизмов порядка $\varphi(n)$, называемой также группой Галуа. Для любого e , $1 \leq e \leq n$ взаимно простого с n соответствующий автоморфизм задается формулой

$$\sigma_e \left(\sum_{k=1}^{\varphi(n)} a_k \zeta_n^k \right) = \sum_{k=1}^{\varphi(n)} a_k \zeta_n^{ek}.$$

Данные автоморфизмы позволяют определить проекцию $\pi_2 : \mathbf{Z}^{\varphi(n)} \rightarrow \mathbf{C}^{\frac{\varphi(n)}{2}}$ при помощи равенства

$$\pi_2(a_1, \dots, a_{\varphi(n)}) = \left(\sum_{k=1}^{\varphi(n)} a_k \zeta_n^{e_1 k}, \dots, \sum_{k=1}^{\varphi(n)} a_k \zeta_n^{e_{\varphi(n)/2} k} \right),$$

где $(e_1, \dots, e_{\varphi(n)/2})$ – числа из диапазона $2 \leq e \leq n/2$, взаимно простые с n . В данной конструкции при построении проекции π_2 мы отбрасываем тождественный автоморфизм, а из каждой пары комплексно сопряженных автоморфизмов берем только один. В качестве окна берется правильный k -угольник с $k = 2n$ при нечетном n и $k = n$ при четном n . Подобный выбор k объясняется равенством $\mathbf{Z}[\zeta_{2n}] = \mathbf{Z}[\zeta_n]$ при нечетном n [1, 2]. Данные многоугольники задаются двумя параметрами: длиной ребра и углом поворота относительно многоугольника с вершиной в точке $(1; 0)$. На рис. 2 даны примеры циклотомических модельных множеств, обладающих симметрией порядка 8, 10 и 12, полученных с помощью данной конструкции.

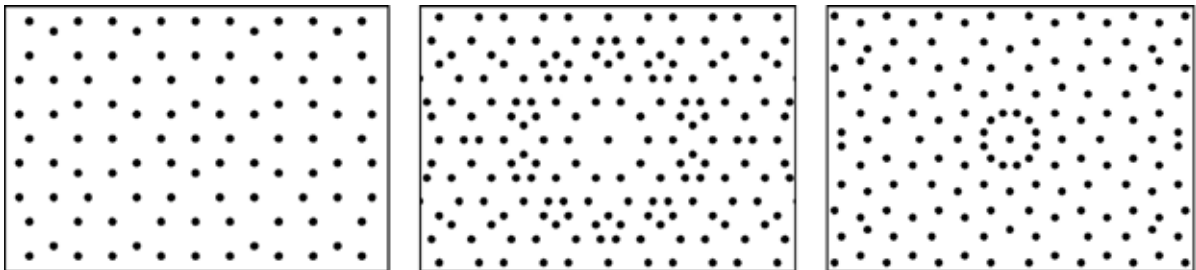


Рис. 2. Циклотомические модельные множества, обладающие симметрией 8, 10, 12.

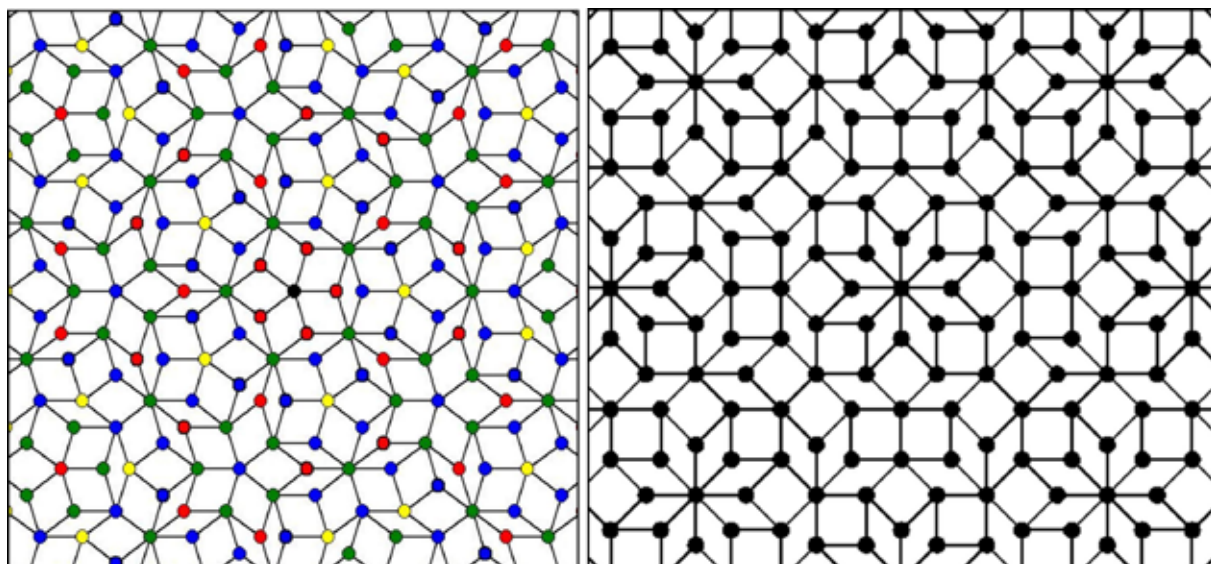


Рис. 3. Графы разбиения Пенроуза и Амманна-Бенкера.

Наиболее интересен случай $n = 8$, в котором мы получаем множество вершин хорошо известного квазипериодического разбиения Амманна-Бенкера [6]. При $n = 4$ конструкция порождает двумерную квадратную, при $n = 3, 6$ – гексагональную решетку. Таким образом, циклотомические поля позволяют рассматривать периодические кристаллические структуры и квазикристаллы в рамках единого подхода.

Несмотря на преимущества, использование модельных множеств для изучения квазикристаллов связано с рядом трудностей. В частности, модельные множества могут описать расположение атомов, но не связи между ними. Один из способов решения проблемы – переход от модельных множеств к графам, удовлетворяющим условиям: множество вершин графа – модельное множество; группа симметрий графа совпадает с группой симметрий модельного множества; степени всех вершин графа конечны и не превосходят некоторой абсолютной константы; граф имеет конечное число различных первых координационных окружений. Сегодня не ясно, насколько эти условия независимы. Вероятно, последнее можно вывести из остальных. Примеры модельных графов – графы разбиений Пенроуза и Амманна-Бенкера (рис. 3).

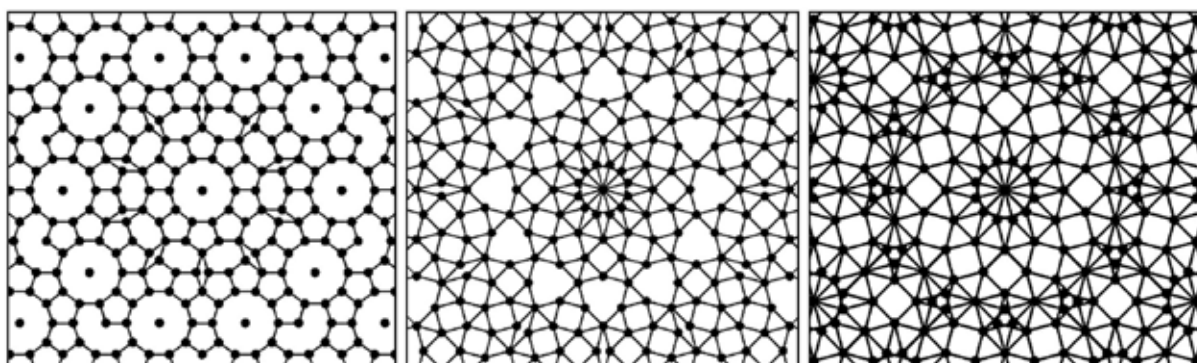


Рис. 4. Примеры модельных графов, обладающих симметрией порядка 10 и 12.

На рис. 4 приведены еще несколько модельных графов, обладающих симметрией порядка 10 и 12, построенных при помощи круговых колец $\mathbf{Z}[\zeta_n]$ (циклотомических модельных графов). Рассмотрим вопрос о способе соединения вершин в модельном графе. Пусть D – множество различных расстояний между точками модельного множества. Тогда простейший подход состоит в том, чтобы рассмотреть некоторое конечное подмножество $R \subset D$ и соединять вершины модельного множества тогда и только тогда, когда расстояние между ними принадлежит множеству R . При неудачном выборе R полученный граф может не быть связным и не является модельным.

Из теории модельных множеств можно получить ряд свойств множества попарных расстояний D .

Теорема 1. Множество D счетно. Из этого вытекает, что элементы D можно упорядочить по возрастанию: $D = \{d_1 < d_2 < \dots < d_k < \dots\}$.

Теорема 2. Существуют числа d', d'' , $0 < d' < d'' < \infty$ такие, что для любого k справедливы неравенства $d' \leq d_{k+1} - d_k \leq d''$. Т.е. множество попарных расстояний D – система Делоне.

Для многих интересных примеров, в частности для графов разбиений Пенроуза и Амманна-Бенкера множество допустимых расстояний R содержит единственный элемент – расстояние d_2 .

С точки зрения приложений важно, чтобы получаемый граф имел как можно меньше точек пересечения ребер, в идеале был бы графом некоторого разбиения. Проблема описания подобных графов еще не решена. Есть промежуточные результаты, основанные на компьютерных экспериментах на циклотомических модельных графах. Пусть мы рассматриваем семейство окон hW , получаемых в результате применения гомотетии с действительным коэффициентом h к некоторому фиксированному окну W . Тогда расстояния из D можно рассматривать как функции $d_k(h)$.

Гипотеза 2. Функции $d_k(h)$ кусочно-постоянны. Эта гипотеза наводит на предположение, что наиболее интересными являются окна hW , для которых h – точка разрыва одной из функций $d_k(h)$ (особенно при малых k). Можно показать, что разбиению Амманна-Бенкера соответствует точка разрыва функции $d_1(h)$. Изменение соответствующего графа при переходе через точку разрыва показано на рис. 5. В первых трех картинках $R = \{d_2\} = \{1\}$, в двух оставшихся $R = \{d_3\} = \{1\}$.

В случае циклотомических модельных множеств исследование графов можно облегчить на основе следующего утверждения.

Теорема 3. Пусть Λ_W – циклотомическое модельное множество, построенное на основе кольца $\mathbf{Z}[\zeta_n]$ и окна W . Тогда существуют такие комплексные числа z, z^* (зависящие от n), что $z\Lambda_W = \Lambda_{z^*W}$. Любое из чисел z, z^* может быть выбрано действительным. Эта теорема показывает, что при исследовании функций $d_k(h)$ для циклотомических модельных графов достаточно

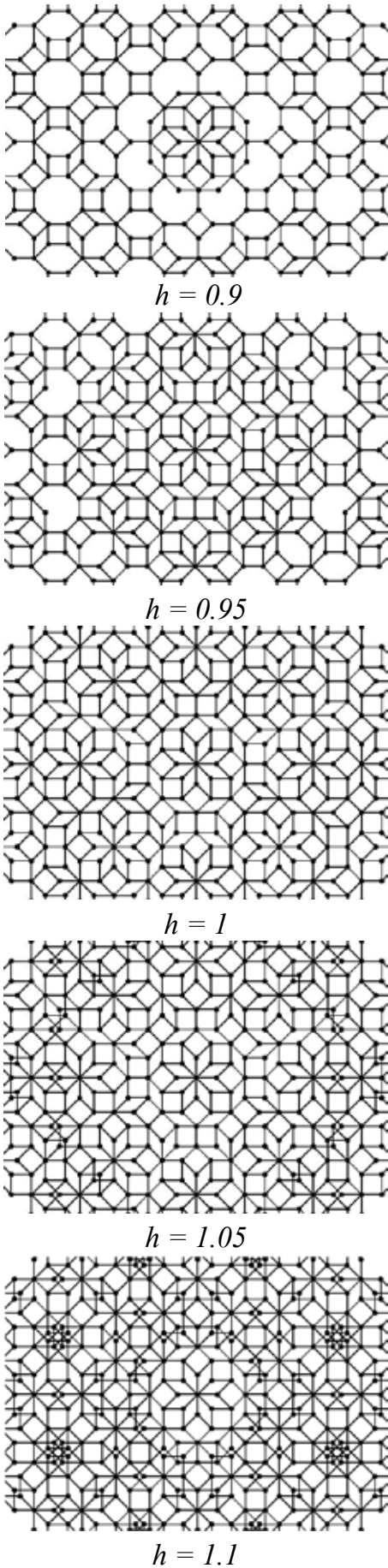


Рис. 5. Изменение модельного графа при переходе через точку разрыва.

ограничится значениями h , принадлежащими некоторому конечному интервалу, зависящему от n .

Пусть G_W – модельный граф, соответствующий окну W . На множестве его вершин можно определить расстояние $d(x, y)$, равное длине кратчайшей цепи графа G_W , соединяющей вершины x и y . При этом длиной цепи считается число ребер, входящих в цепь. Для произвольной вершины $x \in G_W$ и целого n определим координационное окружение порядка n :

$$eq_n(x) = \{y \in G_W : d(x, y) = n\}$$

и полное координационное окружение порядка n :

$$Eq_n(x) = \{y \in G_W : d(x, y) \leq n\}.$$

Локальной звездой порядка n вершины x назовем множество векторов, ведущих из x во все точки из полного координационного окружения $Eq_n(x)$. Звезда однозначно описывает полное координационное окружение точки. Пусть $G_W(i)$ – множество вершин модельного графа, имеющих n -ю локальную звезду типа V_i , W_i – соответствующие им точки в фазовом пространстве, т.е. $W_i = \{x^* : x \in G_W(i)\}$.

Теорема 4. Справедливо равенство

$$W_i = \left(\bigcap_{v \in V_i} (W - v^*) \right) \cap \left(\bigcap_{v \in V \setminus V_i} ((G \setminus W) - v^*) \right)$$

где $x^* = \pi_2(\pi_1^{-1}(x))$. Таким образом, разбиение вершин модельного графа по типам n -ых координационных окружений порождает эффективно вычисляемое разбиение Til_n соответствующего окна. Если множество W состоит из конечного числа компонентов связности, то этим свойством обладают и все множества W_i . Более того, если W состоит из конечного числа многоугольников, то все W_i также состоят из конечного числа многоугольников.

Разбиения Til_n для различных n согласованы: разбиение Til_{n+1} является под-разбиением разбиения Til_n .

Теорема 4 допускает ряд обобщений, связанных с переходом от координационных окружений к произвольным конечным кластерам, содержащимся в модельном графе. В этом случае параметры кластеров порождают не разбиение окна, а его покрытие. В случае графа разбиения Пенроуза разбиение Til_n допускает изящное описание. Пусть $\bar{W}$ – замыкание окна, используемого при построении графа разбиения Пенроуза, – соответствующий граф. В графе $G_{\bar{W}}$ естественным образом выделяется особое подмножество вершин S , называемое вершинами червей [4].

Теорема 5. Для графа разбиения Пенроуза множество границ разбиения Til_n совпадает с замыканием множества параметров точек из полного координационного окружения $Eq_n(S)$, определенного в $G_{\bar{W}}$.

На рис. 6 представлены разбиения Til_n для $n = 1, 2, 3, 4$ для параметров координационных окружений модельного графа вершин разбиения Пенроуза. Данные разбиения приведены для двух из четырех 5-угольников, определяющих окно W . Разбиения двух оставшихся 5-угольников центросимметричны изображенным относительно начала координат.

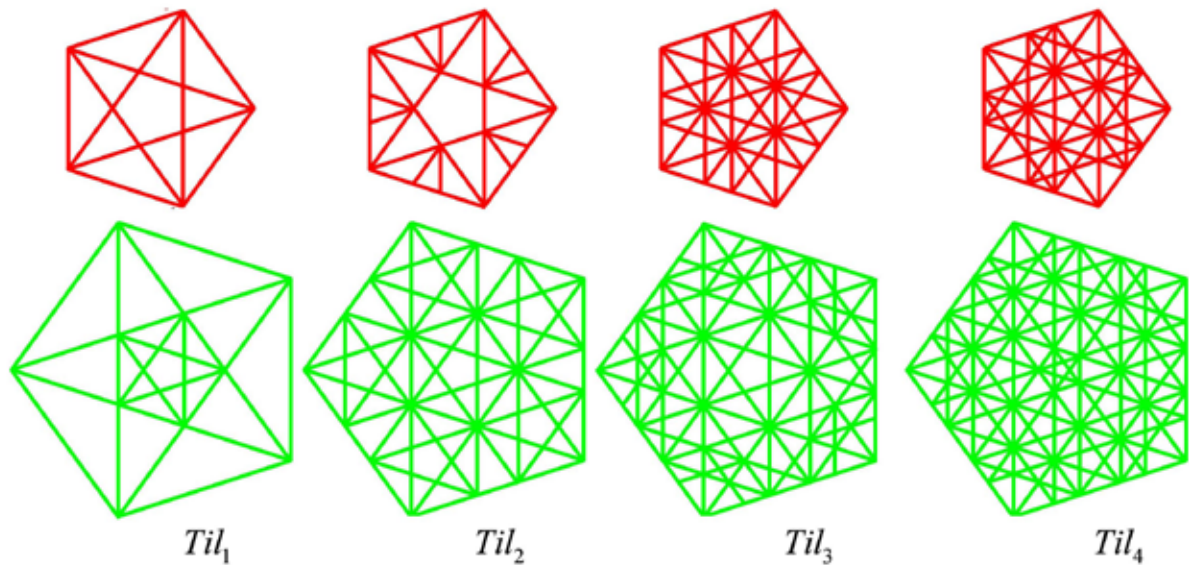


Рис. 6. Разбиения Til_n для параметров координационных окружений модельного графа вершин разбиения Пенроуза.

Представляет интерес вопрос о геометрии множеств $eq_n(x)$. На основании компьютерных экспериментов можно выдвинуть следующую гипотезу.

Гипотеза 3. Существует независимый от выбора начальной вершины предел

$$pol = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{eq_n(x) - x}{n}$$

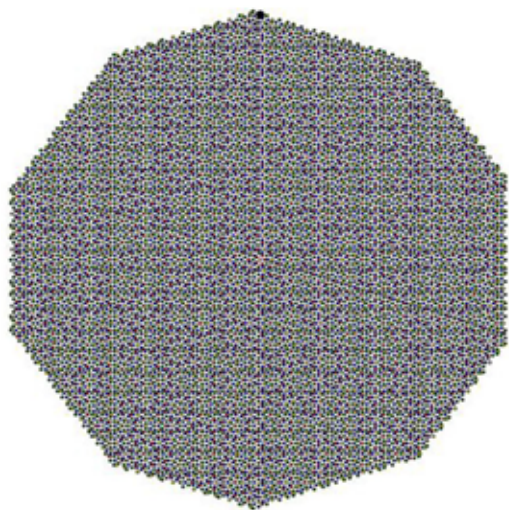


Рис. 7. Форма послойного роста графа вершин разбиения Пенроуза.

Этот предел является многоугольником. В случае циклотомических модельных графов *pol* – правильный k -угольник с $k = 2n$ при нечетном n и $k = n$ при четном n . Этот многоугольник называется формой послойного роста циклотомического графа. В случае графа разбиения Пенроуза формой роста является правильный 10-угольник, вершины которого – комплексные числа вида $Re^{\frac{2\pi ik}{10}}$,

где $k = 0, 1 \dots 9$ и $R = (\tau \sin \frac{2\pi}{5} + \tau^2 \sin \frac{\pi}{5})$

$$\tau = \frac{1+\sqrt{5}}{2} \text{ (рис. 7) [5].}$$

Работа выполнена при поддержке РФФИ, грант № 14-01-00360-а.

Список литературы

1. Айерлэнд, К., Роузен М. Классическое введение в современную теорию чисел. М.: Мир, 1987. 416 с.
2. Борович З.И., Шафаревич И.Р. Теория чисел. М.: Наука, 1985. 504 с.
3. Малеев А.В., Шутов А.В. Квазипериодические разбиения – математические модели квазикристаллов // III школа молодых ученых по физике наноструктурированных и кристаллических материалов. Конспекты лекций и тезисы докладов. Н. Новгород: ННГУ, 2014. С. 50-56.
4. Шутов А.В., Малеев А.В. Мозаики Пенроуза как модельные множества // Кристаллография. 2015. № 6.
5. Шутов А.В., Малеев А.В. Разбиение Пенроуза – модель квазикристаллов // Математические исследования в естественных науках. Тр. XI Всерос. научн. школы. Апатиты, 2014. С. 152-161.
6. Bédaride N., Fernique Th., The Ammann-Beenker tilings revisited. Aperiodic crystals. Eds. S. Schmid, R.L. Withers, R. Lifshitz. Springer, 2013.
7. Baake M., Grimm U. Aperiodic order. V. 1. A mathematical introduction. CUP, 2013.
8. Baake M., Gritzmam P., Huck C. *et al.* Discrete tomography of planar model sets // Acta Cryst. 2006. A62. P. 419-433.
9. Baake M., Huck C. Discrete tomography of Penrose model sets // Phil. Mag. 2007. V. 87. P. 2839-2846.
10. Baake M., Kramer P., Schlottman M. *et al.* Planar patterns with 5-fold symmetry as sections of periodic structures in 4-space // Int. J. Mod. Phys. 1990. B04. P. 2217-2268.
11. Baake M., Moody R.V. Multi-component model sets and invariant densities // Aperiodic 1997. Singapore: World Scientific, 1998. P. 9-20.

12. Moody R.V. Model sets: a survey from quasicrystals to more complex systems. Centre de physique Les Houches: Springer, 2000. 375 p.
13. Senechal M. Quasicrystals and geometry. Cambridge: University Press, 1995.
14. Shechtman D., Blech I., Gratias D. *et al.* // Phys. Rev. Lett. 1984. V. 53. P. 1951.

РАСЧЕТ ТЕРМИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРОВ КРИСТАЛЛИЗАЦИИ УЛЬТРАМАФИТОВ

Юричев А.Н.

Томский государственный университет, Томск, juratur@sibmail.com

Проведен обзор по широко известным в литературе к настоящему времени оливин-хромшпинелиевым геотермометрам, которые используются для оценки температурных интервалов кристаллизации ультрамафитов. Представлены примеры их практической адаптации на разноформационных ультрамафитовых и мафит-ультрамафитовых объектах. Показаны положительные и отрицательные стороны используемых версий геотермометров.

A review of well-known in the literature to date olivine-chromshpinelide geothermometers, that are used to estimate the crystallization temperatures of ultramafites, are shown. Examples of their practical adaptation on example of different formation of ultramafic and mafic-ultramafic objects are submitted. Showing positive and negative sides of described versions of geothermometers.

Методы математического моделирования параметров кристаллизации (перекристаллизации) горных пород получили широкое применение в экспериментальной петрологии [2, 3]. Для оценки температурных интервалов кристаллизации ультрамафитов разработаны и адаптированы алгоритмы расчета температур через оливин-хромшпинелиевые парагенезисы. Доказано, что хромшпинелиды являются одной из первых минеральных фаз кристаллизации ультраосновных расплавов, из которых они выделяются до или с магнезиальным оливином, реже с другими силикатными минералами. При этом магматогенная природа первых в магматических ультрамафитовых телах подтверждается морфологией зерен, характером их распределения, взаимоотношением с другими минеральными фазами, наличием в них первичных расплавных включений. В связи с этим для большинства ультрамафитов характерным является оливин-хромшпинелевый парагенезис. Он может быть использован в качестве индикатора условий образования ультраосновных пород [5-6, 8-9].

Температуры кристаллизации хромшпинелидов в ультраосновных расплавах могут быть оценены только при экспериментальных исследованиях или расчетным путем. Так, экспериментально установлено [7], что из расплава оливинового базальта с широкими вариациями содержаний хрома шпинель (шпинель-магнетитовый твердый раствор) в качестве ликвидусной

фазы появляется при $T = 1275-1058$ °С. При этом в более окислительных условиях первой кристаллизуется шпинель, при восстановительном режиме с нею появляются оливин, клинопироксен и плагиоклаз. Совместная кристаллизация фаз хромшпинелид-оливинового парагенезиса может происходить в широком температурном интервале (от ликвидуса системы до 40-50 % раскристаллизации).

Для косвенного определения температур кристаллизации ультраосновных расплавов широко используются четыре оливин-хромшпинелиевых геотермометра: Джексона-Ирвайна-Родера [9], Оно [8], Фабри [6] и О'Нейла-Уолла-Бэллхауза-Берри-Грина (O'NWBBG) [4]. Как выявлено ранее [1], расчетные температуры оливин-хромшпинелевого равновесия отвечают не образованию дунитов и хромититов, а становлению сложенных ими тел. Поэтому все основания предполагать постоянство значений «замороженной» температуры в пределах каждого тела независимо от вариаций состава оливина и хромшпинелида (прежде всего, его железистости). Этот вывод служит надежным индикатором корректности любого, основанного на обменных реакциях, геотермометра.

Но исследования по адаптации геотермометров на различных ультрамафитовых и мафит-ультрамафитовых объектах (фрагменты офиолитовых поясов – дунит-гарцбургитовые Калнинский массив Красноярского края и Агардагский массив Респ. Тыва; массивы Канской глыбы Вост. Саяна: реститовый Идарский дунит-гарцбургитовый массив, расслоенный Талажинский плагиодунит-троктолит-анортозит-габбровый массив, дифференцированный Кулибинский перидотит-пироксенит-габбровый массив) показали, что оценки температур оливин-хромшпинелевого равновесия с помощью существующих геотермометров (табл.) неоднозначны и не отвечают сформулированному выше требованию.

Результаты позволяют сформулировать следующие предположения:

1. Значения полученных температур для различных версий оливин-хромшпинелиевого геотермометра, за отдельными исключениями, различны и для конкретного объекта варьируют от 120 до 200 °С.

2. Для ультрамафитовых массивов офиолитовых поясов применимы все 4 геотермометра. Это обусловлено тем, что все исследователи этих геотермометров производили их апробацию на ультрамафитах из офиолитовых комплексов. Геотермометры Оно и Фабри дают несколько более высокие температуры, нежели геотермометры Джексона-Ирвайна-Родера и O'NWBBG.

3. Для ультрамафитовых и мафит-ультрамафитовых массивов складчатых областей на примере реститового, расслоенного и дифференцированного массивов наиболее объективным для расчета температур представляется геотермометр Фабри. Он дает температуру наложенного метаморфизма, в ходе которого оливин-хромшпинелиевая ассоциация испытала переуравновешивание. Наименее применим для этих массивов геотермометр Джексона-Ирвайна-Родера, который сильно занижает температуру.

Таблица. Температуры оливин-хромшпинелевого равновесия, полученные различными геотермометрами в ультрамафитах разного генезиса.

Объект		Образец	Порода	Геотермометры, °С					
				1	2	3	4		
Калнинский массив (Красноярский кр.)		7073	Гарцбургит	630	790	758	671		
		7084	Гарцбургит	687	952	779	696		
		7036-1	Дунит	644	758	790	703		
		7052	Дунит	623	789	764	673		
		7081	Дунит	675	907	785	706		
		7045-1	Дунит	716	826	841	775		
		7074	Дунит	716	877	827	752		
		7007	Дунит	654	1163	741	639		
		7017	Дунит	699	1294	760	651		
Агардагский массив (Респ. Тыва)		15010	Гарцбургит	753	945	870	788		
		15020/1	Гарцбургит	682	880	784	699		
		15025	Гарцбургит	649	773	780	693		
		15011/4	Дунит	740	929	854	785		
		15011/3	Дунит	699	895	816	735		
		15018	Дунит	646	781	791	705		
		15025/2	Дунит	602	720	755	668		
		15027	Дунит	586	779	725	645		
		15027	Дунит	668	861	790	717		
Идарский		Вост. Саяны	18488	Гарцбургит	287	411	610	511	
			18488-3	Гарцбургит	108	321	513	466	
			5173-3	Дунит	456	775	593	502	
			5173-3	Дунит	434	734	576	485	
			5173-3	Дунит	346	510	635	547	
			5173-3	Дунит	278	462	604	527	
			5197-1	Дунит	514	890	620	510	
			5197-1	Дунит	265	461	629	538	
			5197	Дунит	152	377	626	555	
Талажин- ский		Вост. Саяны	1093	Плагидунит	892	2014	885	630	
			1093	Плагидунит	817	1728	854	613	
			1093	Плагидунит	243	538	856	635	
			1093	Плагидунит	262	554	894	652	
Кулибин- ский			Вост. Саяны	43	Лерцолит	191	435	680	527
				905	Верлит	312	605	763	591
				905	Верлит	189	467	762	583

Примечание. 1-4 – авторские версии геотермометров: 1 – Джексона-Ирвайна-Родера [9], $T, K = (3480 \times 2\alpha + 1018\beta + 2400 - 1720\gamma) / (2,23\alpha + 2,56\beta + \ln K_D \times 1,987 - 3,08\gamma - 1,47)$; 2 – Оно [8], $T, K = (0,057 + 0,34 \times 10^4) / (\ln K_D + 0,934Cr'' - 0,102)$; 3 – Фабри [6], $T, K = (4250\alpha + 1343) / (\ln K_D + 1,825\alpha + 0,571)$; 4 – О'Нейла-Уолла-Бэллхауза-Берри-Грина (O'NWBBG) [4],

$T, K = [(6530 + 280P + 7000 + 108P) \times (1 - 2Fa) - 1960(1 - 2f) + 16150\alpha + 25150(\gamma + X_{Cr})] / (R \ln K_D + 4,705)$; P – давление в GPa, для расчетов принято равным 1 GPa; α, β, γ – атомные доли Cr, Al, Fe^{3+} по отношению к их сумме в хромшпинелиде, соответственно; $Cr'' = Cr / (Cr + Al)$ в хромшпинелиде; $Fa = Fe / (Fe + Mg)$ в оливине; $f = Fe^{2+} / (Fe^{2+} + Mg)$ в хромшпинелиде; $K_D = (X_{Mg}^{Ol} * f) / (X_{Mg}^{Sp} * Fa)$, где $X_{Mg} = Mg / (Mg + Fe)$ в оливине и хромшпинелиде, соответственно; $K_D^0 = \ln K_D - 4\gamma$; $R = 8,31$ Дж/(моль×K) – универсальная газовая постоянная.

4. При использовании геотермометра Оно в отдельных расчетах отмечается неоправданное завышение температур по отношению к другим версиям (обр. 7007, 7017, 1093, таблица). На это влияет параметр хромистости, который в ряде случаев не работает.

Из наблюдений видно, что наиболее универсальной и практически адаптированной версией для расчета температур является оливин-хромшпинелиевый геотермометр Фабри. Доказано, что необходимым требованием для корректного применения оливин-хромшпинелиевых геотермометров является определение степени окисления железа в хромшпинелиде, основанное на данных ЯГР-спектроскопии [1].

Все перечисленное обуславливает интерес петрологов к изучению акцессорных и рудных шпинелидов, физические и химические свойства которых заключают в себе важную информацию о физико-химических условиях и геодинамической природе кристаллизации. Но к возможности применения оливин-хромшпинелиевых парагенезисов для выяснения условий кристаллизации и эволюции ультраосновных расплавов надо относиться аккуратно в связи с их ограниченностью из-за трудности учета всех параметров системы.

Список литературы

1. Чашухин И.С., Вотяков С.Л., Уймин С.Г. и др. ЯГР-спектроскопия хромшпинелидов и проблемы окситермобарометрии хромитонесущих ультрамафитов Урала. Екб.: ИГГ УрО РАН, 1996. 136 с.
2. Юричев А.Н. Акцессорные шпинелиды из ультрамафитов: индикаторы условий формирования // Руды и металлы. 2013. № 6. С. 30-34.
3. Юричев А.Н. Акцессорные шпинелиды как инструмент реконструкции термодинамических параметров кристаллизации // Руды и металлы. 2014. № 5. С. 32-36.
4. Ballhaus C., Berry R., Green D. High pressure experimental calibration of the olivine-orthopyroxene-spinel oxygen geobarometer: implication for the oxidation state of the upper mantle // Contrib. Mineral. Petrol. 1991. V. 107. N 1. P. 27-40.
5. Barnes S.J., Roeder P.L. The range of spinel compositions in terrestrial mafic and ultramafic rocks // J. Petrol. 2001. V. 42, N 12. P. 2279-2302.
6. Fabries J. Spinel-olivine geothermometry in peridotites from ultramafic complexes // Contrib. Miner. Petrol. 1979. V. 69. N 4. P. 329-336.
7. Hill R., Roeder P. The crystallization of spinel from liquid as a function of oxygen fugacity // J. Geol. 1974. V. 92. N 6. P. 709-731.
8. Ono A. Fe-Mg partitioning between spinel and olivine // J. Japan. Assoc. Miner. Petrol. 1983. V. 78. P. 115-122.
9. Roeder P., Campbell I., Jamieson H. A re-evaluation of the olivine-spinel geothermometer // Contrib. Mineral. Petrol. 1979. V. 68. P. 325-334.

МАТЕМАТИЧЕСКИЕ ИССЛЕДОВАНИЯ В МЕДИЦИНЕ, БИОЛОГИИ, ЭКОЛОГИИ



ИССЛЕДОВАНИЕ СТАТИСТИЧЕСКИХ ОСОБЕННОСТЕЙ ЗАБОЛЕВАЕМОСТИ РАКОМ ЛЕГКОГО В ОМСКОЙ ОБЛАСТИ В ЦЕЛЯХ ОПТИМИЗАЦИИ РАННЕЙ ДИАГНОСТИКИ

Бельская Л.В.¹, Сарф Е.А.¹, Косенок В.К.²

¹ Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского, Омск, LudaB2005@mail.ru

² Омский государственный медицинский университет, Омск

Изучены статистические закономерности заболеваемости РЛ на примере Омской области. Показано, что выявление рака легкого (РЛ) на более поздних стадиях происходит значительно чаще у наиболее трудоспособной категории населения (возраст 30-49 лет). Для этой же возрастной группы основным гистологическим видом РЛ является аденокарцинома, что при своевременном обнаружении дает более благоприятный прогноз лечения. Интенсивная динамика роста онкологических заболеваний начинается с возраста в 45-47 лет как для мужчин, так и для женщин, поэтому для улучшения ранней диагностики оптимальный возраст для скрининга РЛ должен находиться в диапазоне 40-50 лет.

Statistical patterns of lung cancer incidence were studied on the example of the Omsk region. It is shown that the detection of lung cancer in the later stages occur much more frequently in the most working-age population groups (age 30-49 years). For the same age group the main type of lung cancer is adenocarcinoma, that the timely detection gives a more favorable prognosis of treatment. Intensive growth dynamics of cancer begins in the age of 45-47 years for both men and women, so to improve the early diagnosis of the optimal age for screening for lung cancer should be in the range of 40-50 years.

В настоящее время во всех странах мира самым распространенным из злокачественных новообразований является РЛ и частота его возникновения растет с каждым годом. По данным экспертов МАИР ежегодно в мире регистрируется около миллиона новых случаев рака лёгкого, что позволяет ему удерживать первое место среди всех онкологических заболеваний. Эта опухоль выявлена у более миллиона населения планеты, что составило 13.2% от всех злокачественных новообразований. На индустриально развитые страны мира приходится 54% новых случаев РЛ, который является основной причиной смертности от злокачественных опухолей [1, 3, 5].

В России рак лёгкого также занимает 1 место среди онкологических заболеваний и его доля составляет 12%. В 15% всех случаев у умерших онкологических больных был выставлен диагноз РЛ [3]. Каждая четвертая злокачественная опухоль, выявляемая у мужчин, и каждая двадцатая у женщин являются новообразованиями трахеи, бронхов, легкого [2, 3].

В 2012 г. зарегистрировано 14,1 млн. новых случаев выявления рака во всем мире, из которых 7.4 млн. у мужчин и 6.7 млн. у женщин. К 2035 г. ожидается увеличение заболеваемости раком в 1.5 раза до 24 млн. случаев в год. Рак легкого является самым распространенным злокачественным новооб-

разованием и составляет 13 % всех новых случаев выявления заболевания. Статистика заболеваемости для обоих полов различается. У мужчин рак легкого является самым распространенным онкологическим заболеванием и составляет 16.7% всех случаев. У женщин этот показатель значительно ниже и составляет 8.8 % [4, 6].

Показатели годичной и пятилетней выживаемости пациентов после лечения составляют 44 и 17.4% соответственно. Это фактически означает, что почти половина пациентов после лечения умирает в течение одного года. По данным статистики показатели выживаемости после лечения для стадии 1 составляют 85 %, для стадии 2-50 %, для стадии 3-25 % и 5 % для стадии 4. При этом на первой стадии рак обнаруживают только в 15 % всех случаев, а 70% всех случаев диагностируют на запущенных 3-й и 4-й стадиях. Такие статистические показатели объясняются как характером протекания самого заболевания, так и сложностью его диагностирования.

Цель работы – изучить статистические закономерности заболевания РЛ для оптимизации ранней диагностики и повышения эффективности лечения.

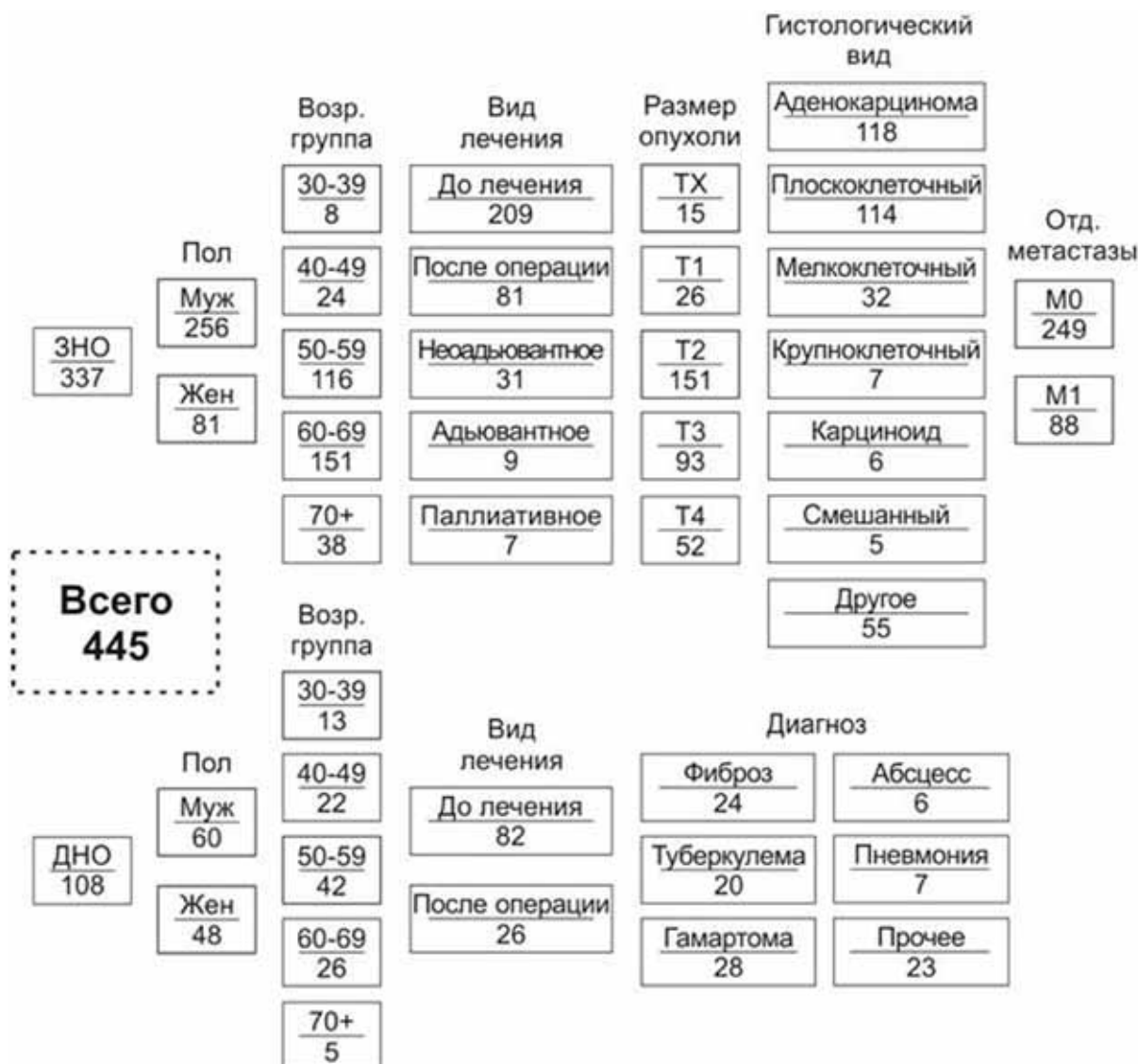


Рис. 1. Классификация пациентов торакального отделения.

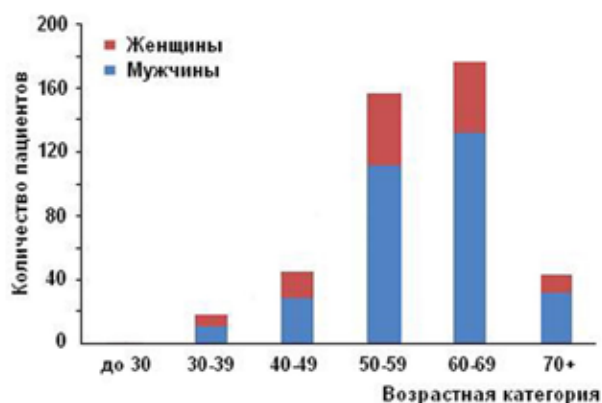


Рис. 2. Гистограмма распределения обследуемых по возрастным группам.

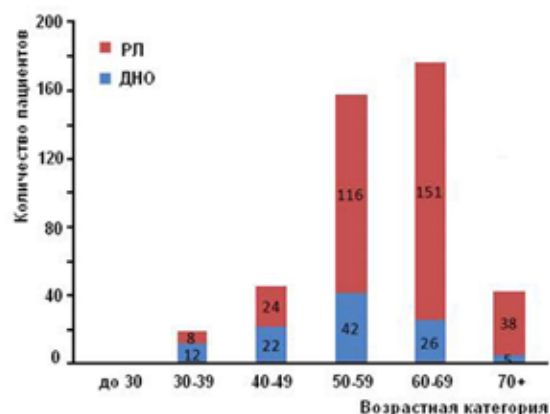


Рис. 3. Гистограмма ДНО/РЛ для возрастных групп.

Материалы и методы

Материалом исследования являлись данные анкетирования пациентов Клинического онкологического диспансера (БУЗО КОД), впервые обратившихся с предварительным диагнозом РЛ. Анкетирование проводилось в период с 10 января 2014 г. по 30 июня 2015 г. Данные анкетирования включали в себя: Ф.И.О.; год рождения; возраст (полных лет); пол; диагноз; данные о классификации опухоли по St, T, N, M; локализация метастаз в случае их наличия; данные гистологического исследования; данные из истории болезни, включающие виды проведенного лечения, а также данные о сопутствующих заболеваниях.

Статистическая обработка результатов проведена с использованием пакета программ Statistica 6.0 (StatSoft).

Результаты и их обсуждение

За выбранный период времени было обследовано 445 человек с предварительным диагнозом РЛ. Результаты распределения больных по классификационным группам показаны на рис. 1.

Для большей наглядности представления исследуемая группа была разделена на 6 возрастных групп с шагом в 10 лет (рис. 2).

Согласно статистическим данным, заболеваемость раком легкого у мужчин в среднем для всех возрастов составляет 71 %, у женщин – 29 %. При этом в возрасте до 50 лет доля мужчин составляет порядка 60 % и она резко падает в возрастной группе пациентов старше 70 лет. Такие отклонения могут быть объяснены тем, что доля курящих женщин в возрастной группе 30-49 лет за последние годы резко возросла, что спровоцировало увеличение случаев возникновения РЛ.

После проведения необходимых диагностических процедур 108 обследуемым был выставлен диагноз доброкачественное новообразование (ДНО), 337 получили диагноз РЛ. Доля неверных первично выставленных диагнозов составляет 24 %. Соотношения ДНО/РЛ для каждой возрастной группы показано на рисунке 3.

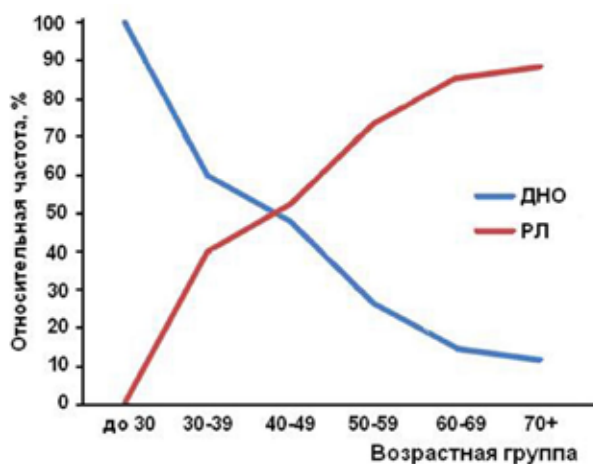


Рис. 4. Относительная частота возникновения ДНО/РЛ.

но. Относительная частота возникновения ДНО и РЛ для различных возрастных групп показана на рис. 4.

Анализируя относительные и абсолютные значения видно, что по мере увеличения возраста пациентов доля доброкачественных образований неуклонно падает. Относительная частота возникновения доброкачественных новообразований уменьшается в среднем на 45 % при каждом увеличении возраста пациентов на 10 лет. Доля заболеваний РЛ при этом увеличивается пропорционально. Полученные данные позволяют выделить наиболее оптимальную точку проведения скрининговых исследований. Оптимальный возраст для скрининга РЛ находится в диапазоне 40-50 лет, однако для конкретизации возрастного диапазона следует рассмотреть аналогичную динамику для обоих полов отдельно (рис. 5, рис. 6).

Анализируя линию тренда роста числа случаев для ДНО и РЛ можно отметить, что в диапазоне 45-55 лет количество ДНО увеличилось с 12 до 25 случаев, т. е. примерно в 2 раза (рис. 5 б). При этом за аналогичный период количество диагностированных случаев РЛ увеличилось с 17 до 87 случаев, т.е. в 5 раз. Точка равновесного состояния, при котором доля доброкачественных и злокачественных новообразований совпадают, попадает на

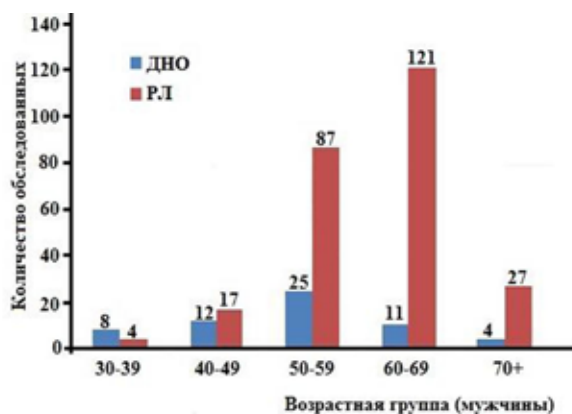


Рис. 5а. Динамика соотношений ДНО/РЛ для мужчин.

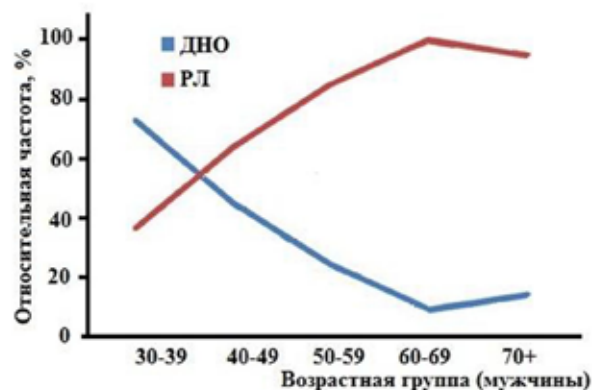


Рис. 5б. Динамика соотношений ДНО/РЛ для мужчин.

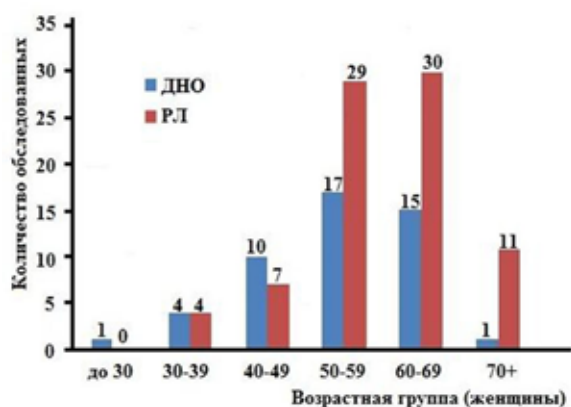


Рис. 6 а. Динамика соотношений ДНО/РЛ для женщин.

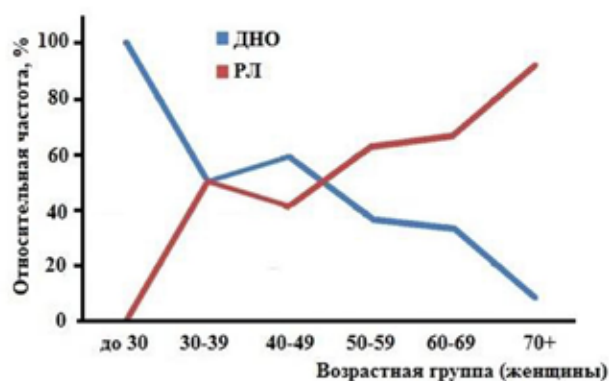


Рис. 6 б. Динамика соотношений ДНО/РЛ для женщин.

возраст 42 года. Однако по абсолютным значениям интенсивная динамика роста онкологических заболеваний начинается с возраста в 45-47 лет.

По полученным данным заболеваемость РЛ у женщин гораздо ниже (рис. 6 а, б). При этом резкое увеличение заболеваемости происходит в аналогичный с мужским полом период времени, т.е. 45-55 лет. За этот период число диагностированных случаев ДНО увеличилось с 10 до 17 т.е. на 59% (для мужчин этот показатель составлял 200%). Для случаев выявления РЛ прирост осуществился с 7 до 29 случаев, т.е. в 4 раза. Показатели роста числа диагностированных ЗНО в целом аналогичны для обоих полов (рис. 5, 6).

Таблица 1. Классификация этапов лечения РЛ.

№ п/п	Наименование	Сокращение	Описание
1	До операции	Нет	РЛ выявлен, лечение не осуществлялось
2	Неoadьювантная химиотерапия	НАПХТ	Проведение химиотерапии перед оперативным лечением. Опухоль хирургически не удалена
3	Неoadьювантная лучевая терапия	НАДЛТ	Проведение лучевого лечения перед оперативным. Опухоль хирургически не удалена
4	После операции	Нет	Состояние после хирургического удаления РЛ. Дополнительное лечение не осуществлялось
5	Адьювантная химиотерапия	АПХТ	Химиотерапия после хирургического удаления опухоли
6	Адьювантная лучевая терапия	АДЛТ	Лучевое лечение после хирургического удаления опухоли
7	Паллиативная химиотерапия	ППХТ	Химиолечение с анальгезирующей целью. Независимо от оперативного вмешательства
8	Паллиативная лучевая терапия	ПДЛТ	Лучевое лечение с анальгезирующей целью. Независимо от оперативного вмешательства

Равновесное значение ДНО/РЛ для женщин приходится на возраст 45 лет (рис. 6 б). Также стоит отметить что высокие показатели заболевае-

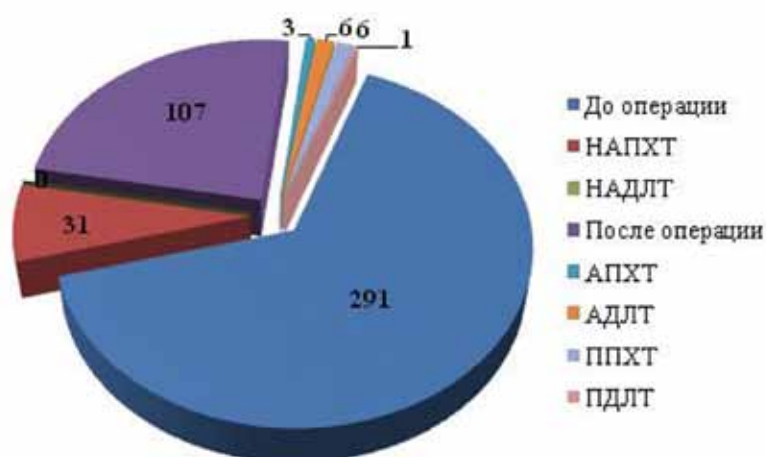


Рис. 7. Распределение пациентов по типу лечения.

мости РЛ держатся на стабильно высоком уровне в течение двух периодов по 10 лет.

Для оптимизации ранней диагностики немаловажным является на каком этапе протекания заболевания пациенты обращаются в стационар. Для детального анализа можно выделить 8 групп, обозначение, описание и сокращения которых показаны в таблице 1.

Распределение пациентов по этапам лечения показано на рис. 7.

Учитывая распространенные тактики лечения различных видов РЛ, наиболее распространенным является радикальная резекция доли легкого с лимфодесекцией близлежащих лимфатических узлов, а также удаление пораженного легкого. По этой причине в группе обследованных доля пациентов, находящихся на лучевом или химиотерапевтическом лечении составляет всего 9%. Отдельную группу составляют пациенты, находящиеся на паллиативном лечении, их доля составляет 2% от общего числа обследованных. Самую большую группу составляют пациенты, которым лечение на момент поступления в стационар не осуществлялось или перенесших хирургическую операцию. Доля таких пациентов составляет 65 и 24% соответственно (рис. 7). Особый интерес представляют данные о стадиях протекания заболевания (табл. 2).

Таблица 2. Классификация случаев РЛ по St, T, N, M.

Возраст, лет	Стадия заболевания (St)				Первичная опухоль (T)					Региональные лимфатические узлы (N)					Метастазы (M)	
	4	3	2	1	4	3	2	1	x	4	3	2	1	x	1	0
30-39	3	3	1	1	1	1	2	3	1	1	3	1	3	0	3	5
40-49	9	9	1	5	6	3	12	2	1	1	10	6	6	1	9	15
50-59	23	47	19	27	17	33	52	6	8	12	34	23	42	5	25	91
60-69	35	52	25	39	23	46	65	12	5	8	45	37	56	5	42	109
70+	7	15	6	10	5	10	20	3	0	2	9	9	16	2	52	99

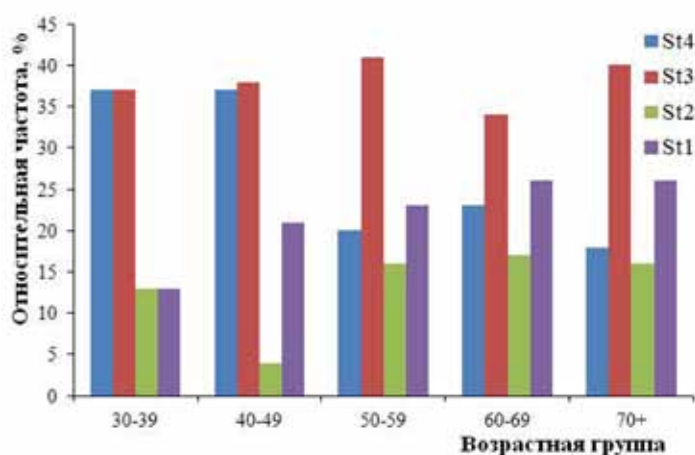


Рис. 8. Динамика распределения РЛ по стадиям.

примерно одинакова и в среднем составляет 38 %. Аналогична стабильная динамика наблюдается для St2 для которой средняя частота обнаружения для всех возрастных групп составляет 13 %. Для других стадий протекания заболевания динамика различная. При увеличении возраста пациентов наблюдается устойчивое снижение частоты обнаружения РЛ на St4. Сравнение результатов данными по частоте случаев обнаружения РЛ с отдаленными метастазами (M1, табл. 2) можно сделать вывод, что уменьшение частоты обнаружения St4 во многом связано с уменьшением количества запущенных случаев заболевания. Суммарная доля St1+St2 в общем количестве случаев для возрастных групп 30-49 лет составляет 25 %. Для возрастной группы 50 лет и старше этот показатель выше и составляет 41 %. Такие данные говорят о том, что у наиболее трудоспособной категории населения случаи выявления РЛ на более поздних стадиях происходят значительно чаще.

На рисунке 9 показано относительное распределение случаев РЛ, выявленных на различных стадиях протекания, а также с различной степенью распространения заболевания на регионарные лимфоузлы для всех выбранных возрастных групп. Сопоставляя результаты с данными (рис. 8), основной акцент необходимо сделать на возрастной группе 50-69 лет, так как именно на этот период приходится подавляющее большинство случаев. Оценивая

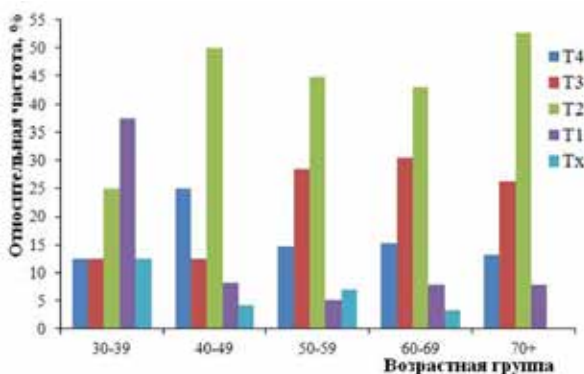


Рис. 9а. Распределение РЛ по типу первичной опухоли (Т).

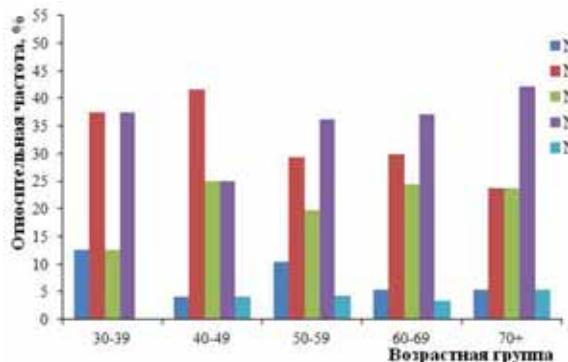


Рис. 9б. Распределение РЛ по поражению региональных лимфатических узлов (N).

Применительно к онкологическим заболеваниям, целью диагностических процедур является выявление заболевания на максимально ранней стадии протекания. Показана динамика распределения РЛ по стадиям (St) (рис. 8).

Полученные данные свидетельствуют о том, что для всех возрастных групп доля обнаружения РЛ на St3

общую динамику, можно сделать заключение, что случаи выявления заболевания на стадии T1 для возрастной группы старше 70 лет в течение всего периода остаются на стабильно-низком уровне в 7%. В тоже время средняя частота выявления заболевания на стадии T4 составляет порядка 15%. К положительным моментам можно отнести высокий уровень выявления на стадии T2, который составляет порядка 45 %. Показатель распространенности опухоли нельзя рассматривать отдельно от степени поражения регионарных лимфатических узлов. Для РЛ характерно довольно раннее метастазирование на близлежащую лимфатическую систему. Эти данные подтверждаются графиком распределения частоты случаев в зависимости от показателя N. Достоверно известно, что метастазирования практически не происходит при значении T = 1. Таким образом значение N0 для всех возрастных групп не может быть меньше 7 %. Среднее значение показателя N = 0 для возрастной группы старше 40 лет составляет порядка 30 %. Из этих данных можно сделать вывод, что метастазирование в близлежащие регионарные лимфоузлы характерно для половины случаев выявления РЛ на стадии T2. Показатель N = 3 для каждой возрастной группы аналогичен значению T = x, что характерно для случаев медиастинального РЛ без очагового опухолевого процесса. Частота случаев выявления РЛ с поражением лимфатической системы составляет в среднем 55 % для возрастной группы старше 40 лет.

В таблице 3 показано распределение количества случаев выявления РЛ различных гистологических типов для выбранных возрастных групп. На рисунке 10 показана относительная частота встречаемости различных гистологических типов для каждой возрастной группы.

Таблица 3. Классификация случаев РЛ по гистологическому виду.

Гистологический вид РЛ	Возрастная группа, лет				
	30-39	40-49	50-59	60-69	70+
Аденокарцинома	6	23	83	4	2
Плоскоклеточный рак	0	0	2	88	24
Мелкоклеточный рак	1	3	12	16	0
Крупноклеточный рак	0	0	7	0	0
Смешанный рак	0	0	2	3	1
Карциноид	0	0	5	0	0
Неуточненный вид	2	4	8	16	4
Прочие	2	3	4	7	5

Подавляющее количество случаев составляют аденокарцинома и плоскоклеточный РЛ. Их общая доля в числе всех случаев составляет порядка 85%. Стоит отметить, что для возрастной группы до 59 лет основным видом опухоли является аденокарцинома. При этом для возрастной группы старше 60 лет основным видом является плоскоклеточный РЛ (рис. 10).

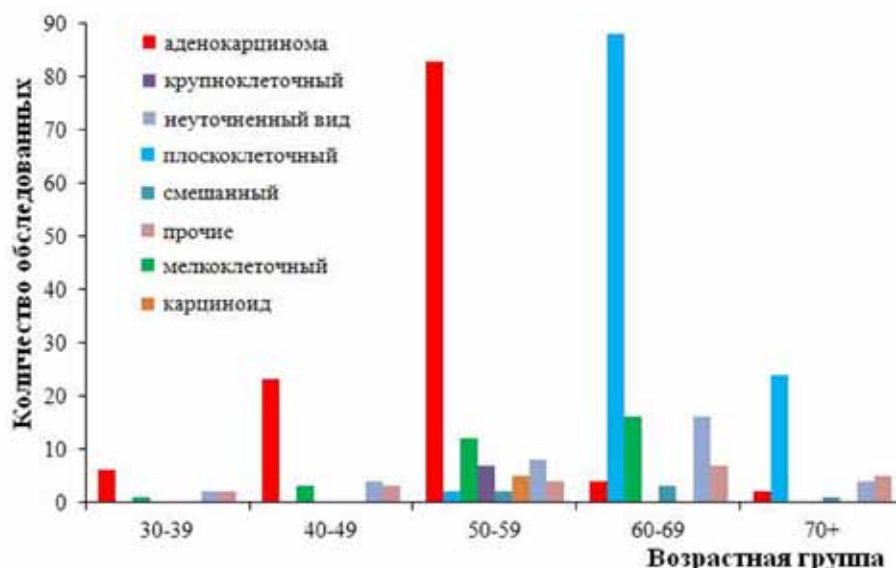


Рис. 10. Классификация случаев РЛ по гистологическому виду.

Заключение

Проведенное статистическое исследование позволяет выявить некоторые закономерности в существующей системе диагностики РЛ:

У наиболее трудоспособной категории населения (возраст 30-49 лет) случаи выявления РЛ на более поздних стадиях происходят значительно чаще.

Согласно гистологической верификации, для возрастной группы до 59 лет основным видом РЛ является аденокарцинома, что при своевременном обнаружении дает более благоприятный прогноз лечения, тогда как после 60 лет основным видом является плоскоклеточный РЛ.

Интенсивная динамика роста онкологических заболеваний начинается с возраста в 45-47 лет как для мужчин, так и для женщин, поэтому для улучшения ранней диагностики оптимальный возраст для скрининга РЛ должен находиться в диапазоне 40-50 лет.

Список литературы

1. Заридзе Д. Г. Эпидемиология и профилактика рака // Вопр. онкологии. 2001. № 9. С. 6-14.
2. Злокачественные новообразования в России в 2010 г. (заболеваемость и смертность). М.: ФГБУ МНИОИ им. П.А. Герцена, 2012. 260 с.
3. Нидюлин В.А., Эрдниева Б.В. Об эпидемиологии рака легких // Мед. вестник Башкортостана. 2009. Т. 4. № 1. С. 66-71.
4. Писарева Л.Ф., Одинцова И.Н., Воробьев В.А. и др. Заболеваемость раком лёгкого населения Томской обл. // Сиб. онкологич. ж-л. 2012. № 4 (52). С. 43-47.
5. Шериева Т.М., Кабилдина Н.А., Раззаков К.К. и др. Частотный, корреляционный и регрессионный анализ заболеваемости рака легкого в Карагандинской обл. // Межд. ж-л эксперимент. Образование. 2014. № 5. С. 40-44.
6. Cancer incidence, mortality and prevalence worldwide in 2008. Int. Agency for Research on Cancer (IARC). <http://globocan.iarc.fr>.

ИКОСАЭДРИЧЕСКИЕ ВИРУСЫ И ФУЛЛЕРЕНЫ: ФУНДАМЕНТАЛЬНАЯ ГОМОЛОГИЯ

Войтеховский Ю.Л.

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

В статье показано, что икосаэдрические (с точечными группами симметрии $-3-5m$ и 235 , называемые также сферическими) фуллерены и вирусы образуют гомологические ряды. Математически строгая систематика икосаэдрических фуллеренов по сути является исчерпывающей морфологической систематикой икосаэдрических вирусов. Она позволяет прогнозировать их неизвестные формы, устанавливает между ними структурные и, возможно, генетические связи.

Введение

В работе (Войтеховский, 2004) указано на гомологию в структурах фуллеренов – полиэдрических молекул, на которых разрешены лишь пента- и гексагоны (Kroto et al., 1985) – и таксономически весьма различных биологических объектов: скелетов Radiolaria, колоний Volvocaceae, капсидов икосаэдрических Viruses. При этом ещё Э. Геккелем замечен дуализм полиэдрических скелетов *Circogonia dodecahedra* Hkl. и *Circogonia icosahedra* Hkl., зафиксированный в их названиях. Додекаэдр – простейший фуллерен (все грани – пентагоны), икосаэдр дуален ему. Дуальным называется полиэдр, вершины которого лежат на гранях исходного и соединены рёбрами тогда и только тогда, когда лежат на его смежных гранях: куб дуален октаэдру, тетраэдр автодуален (рис. 1). Последнее доказывает не оппозицию, а глубокое родство дуальных форм, что подчёркивается их общей точечной группой симметрии, для икосаэдра и додекаэдра – икосаэдрической (с теми же основаниями она может называться додекаэдрической).

Геометрия фуллеренов – активно изучаемая область стереохимии и математики, особенно для икосаэдрических – с точечными группами симметрии $-3-5m$ и 235 – фуллеренов. Для них доказан ряд теорем, связывающих комбинаторную геометрию (распределение 12 пентагонов среди любого – кроме 1 – числа гексагонов) и симметрию, построена полная систематика. Но вирусы используют ту же – с некоторыми оговорками – архитектуру

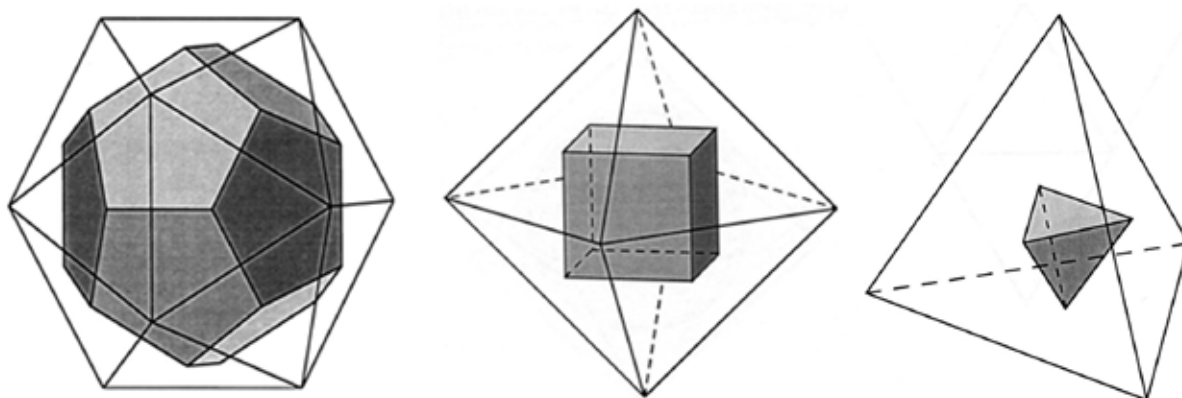


Рис. 1. К определению дуальных полиэдров.

ную идею, строя капсиды из белковых глобул. Таким образом, математически строгая систематика икосаэдрических фуллеренов по сути является морфологической систематикой икосаэдрических вирусов. Важность этого очевидна. «Номенклатура и классификация вирусов – трудная область вирусологии... Группировка может быть основана на морфологических и физиологических критериях. Идеал, к которому мы стремимся – это создать такую классификацию, которая отражала бы эволюционные и филогенетические взаимоотношения организмов, а также обеспечивала бы удобную и рациональную систему номенклатуры» (Лурия и др., 1981, с. 18-23).

Икосаэдрические фуллерены

Для икосаэдрических фуллеренов C_n доказано (Klein et al., 1986; Schmalz et al., 1988), что число вершин может принимать значения $N = 20(h^2 + hk + k^2)$, где $0 \leq k \leq h > 0$ – целые неотрицательные числа. Доказательство сводится к следующему. Так как каждый фуллерен построен из пента- и гексагонов, сходящихся по 3 в каждой вершине, то дуальный полиэдр содержит лишь треугольные грани (дельтаэдр), сходящиеся по 5 или 6 в каждой вершине. Простейший пример – додекаэдр и икосаэдр. Для более сложных фуллеренов с икосаэдрической симметрией дуальными будут икосаэдрониды (икосадельтаэдры), напоминающие икосаэдр, так как их мега-грани сходятся по 5 в каждой вершине. Но каждая мега-грань разбита на более мелкие треугольники, сходящиеся по 6 внутри и на рёбрах мега-граней, и представляет собой фрагмент разбиения плоскости на правильные треугольники.

Зададим для такого разбиения декартову систему координат с углом между осями 60° (рис. 2). Далее идея состоит в том, чтобы предусмотреть и те случаи, когда цепочки вершин фуллерена располагаются не параллельно сторонам мега-грани. Для этого поместим её так, чтобы одно из рёбер соединяло начало координат и точку (h, k) . Из соображений симметрии ясно, что и третья вершина мега-грани совпадёт с одной из точек сетки. Из подобия равносторонних треугольников ясно, что отношение площадей мега-грани и элементарного треугольника равно квадрату ребра мега-грани, который находим (по теореме косинусов) из треугольника со сторонами h , k и углом 120° между ними. Оно равно $T = h^2 + hk + k^2$ (триангуляционное число) – столько элементарных треугольников помещается в мега-грани, и каждой отвечает вершина исходного фуллерена. Так как у икосаэдроида 20 мега-граней, то число вершин исходного фуллерена $N = 20 T$.

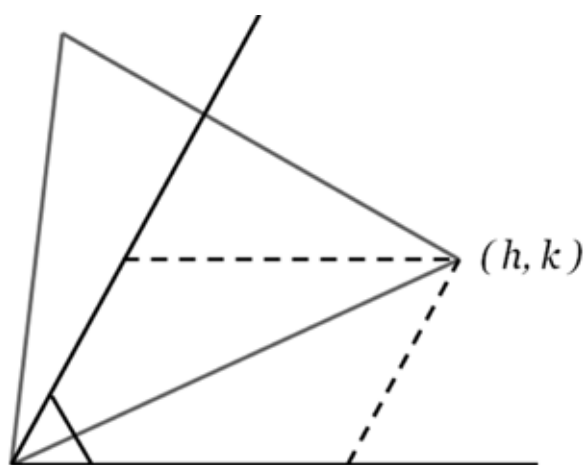


Рис. 2. К доказательству теоремы о числе вершин икосаэдрического фуллерена.

Таблица 1. Значения T для $0 \leq k \leq h \leq 10$.

$k \setminus h$	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
0	1	4	9	16	25	36	49	64	81	100
1	3	7	13	21	31	43	57	73	91	111
2		12	19	28	39	52	67	84	103	124
3			27	37	49	63	79	97	117	139
4				48	61	76	93	112	133	156
5					75	91	109	129	151	175
6						108	127	148	171	196
7							147	169	193	219
8								192	217	244
9									243	271
10										300

Анализ табл. 1 обнаруживает ряд закономерностей. При $k = 0$ значения $h^2 + hk + k^2$ образуют последовательность квадратов, при $h = k$ – ту же, но утроенную последовательность. Из доказательства теоремы ясно, что при $k = 0$ и $h = k$ фуллерены имеют симметрию $-3-5m$, в других случаях – пониженную 235 с осями вращения, но без плоскостей. Каждый такой фуллерен обладает энантиоморфным двойником. Это может оказаться важным применительно к биологическим формам. Наконец, обращают внимание пары изомеров (49 и 91 в выделенных клетках). Компьютерными расчётами на сегодня найдены простейшие тройки, четвёрки ... десятки изомеров. Число вершин у них огромно. Но легко видеть, что в группе изомеров лишь один может иметь симметрию $-3-5m$. Это видно из того, что числовые ряды вида t^2 (верхняя строка табл. 1) и $3t^2$ (диагональ табл. 1) не могут иметь общих членов.

Обобщая, отметим, что даже в многообразии икосаэдрических фуллеренов число вершин и точечная группа симметрии не фиксируют форму однозначно. Удобную и рациональную систему номенклатуры обеспечивает символ (h, k) . Для энантиоморфов с точечной группой симметрии 235 следует добавлять символ D (правый) или L (левый).

Гомологические ряды

Икосаэдрические фуллерены образуют гомологические ряды. Первая идея следует из доказательства теоремы. Если h и k увеличить в t раз ($t = 1, 2, 3 \dots$), то мега-грань икосаэдроиды останутся в той же ориентации, но увеличатся по площади в t^2 раз. Во столько же раз вырастет число вершин исходного фуллерена. На этом основании, если h и k имеют общий делитель t , то форма (h, k) последовательно сводима к более простой $(h/t, k/t)$, пока h и k не станут взаимно простыми. Число вершин икосаэдрического фуллерена

можно выразить иначе: $N = 20 t^2 (h^2 + hk + k^2)$, где $0 \leq k \leq h > 0$ – взаимно простые целые числа, $t = 1, 2, 3 \dots$

Вторая идея возникает из наблюдения, что «нобелевский» фуллерен C_{60} – это усечённый икосаэдр, дуальный к додекаэдру – простейшему фуллерену. Аналогично, для любого фуллерена следующий член ряда получается дуальным переходом и обрезанием всех вершин. Но если у исходной формы f граней (и $v = 2f - 4$ вершин, что легко доказывается), то у дуальной, наоборот, $f_1 = 2f - 4$ граней (все треугольные) и $v_1 = f$ вершин (12 валентности 5 и $f - 12$ валентности 6). После её усечения у полученного фуллерена будет $f_2 = (2f - 4) + f = v + f$ граней и $v_2 = 12 \times 5 + (f - 12) \times 6 = 6f - 12 = 3v$ вершин. Теперь ясно, что главная диагональ табл. 1 содержит фуллерены, полученные этой процедурой из фуллеренов, обозначенных в верхней строке. Можно показать, что форме (h, k) отвечает более сложная $(h + 2k, h - k)$ и, если существует, более простая $[(h + 2k)/3, (h - k)/3]$. Последнее возможно тогда и только тогда, когда $h - k$ делится на 3 (иначе, h и k сравнимы по модулю 3). Двукратное повторение второй процедуры равносильно первой с $t = 3$, то есть гомологические ряды 1-го и 2-го типов пересекаются.

Таблица 2. Значения T для генераторов.

$k \setminus h$	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
0	1									
1		7	13		31	43		73	91	
2			19				67		103	
3				37	49		79	97		139
4					61				133	
5						91	109		151	
6							127			
7								169	193	
8									217	
9										271
10										

Обобщая, назовём генераторами икосаэдрические фуллерены, не сводимые к более простым ни одним из двух преобразований (табл. 2). Кроме $(h, k) = (1, 0)$ – додекаэдра C_{20} – все генераторы имеют симметрию 235 , то есть обладают энантиоморфными двойниками. Использование генераторов упрощает описание многообразия икосаэдрических фуллеренов (табл. 2). Но даже среди них разнообразие форм огромно. В частности, среди них сохраняются изомеры.

Икосаэдрические вирусы

В первую очередь заметим, что формула $N = 20 (h^2 + hk + k^2)$ впервые, но без доказательства приведена в статье (Caspar, Klug, 1962) о морфологии ви-

русов (до открытия фуллеренов было ещё 23 года). Вероятно, её вывод был аналогичен данному выше, ибо он очень нагляден. Но для отыскания числа строящих капсид белковых субъединиц (в простейшем случае – глобул), она должна быть трансформирована. Подсказку дают простейшие вирусы, образующие плотнейшие упаковки глобул вдоль рёбер икосаэдроиды (рис. 3). Именно этот кристаллографический мотив позволил применить для изучения вирусов рентгеноструктурные методы.

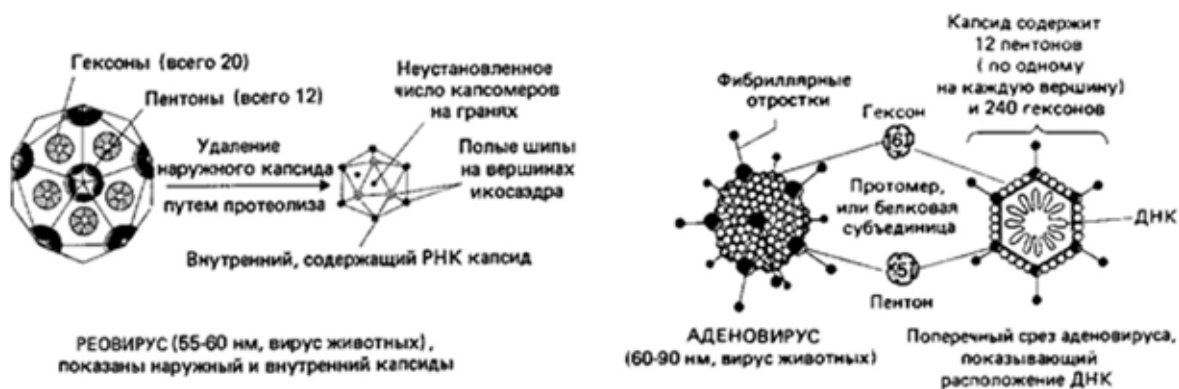


Рис. 3. Строение икосаэдрических вирусов (Рис, Стернберг, 1988).

Пусть m – число глобул на ребре мега-граны (рис. 4). Тогда внутри каждой (их 20) находится по $1 + 2 + \dots + (m-3) = (m-3)(m-2)/2$ глобул. На каждом ребре (их 30), не считая вершин, по $m-2$ глобул. В каждой вершине (их 12) – ещё по одной. Итого, капсид вируса образован $M = 20(m-3)(m-2)/2 + 30(m-2) + 12 = 10(m-1)^2 + 2$ глобулами. Но легко заметить, что $(m-1)^2$ есть триангуляционное число для фуллерена $(h, k) = (m-1, 0)$, что и выявляет фундаментальную связь между геометрией икосаэдрических вирусов и фуллеренов. Серия примеров дана в (Пиневич и др., 2012): у бактериофага $\phi X174$ $m = 2$, $M = 12$, $(h, k) = (1, 0)$ – додекаэдр; у вируса полиомы $m = 3$, $M = 42$; у реовируса $m = 4$, $M = 92$; у вируса герпеса $m = 5$, $M = 162$; у аденовируса $m = 6$, $M = 252$; у радужного вируса $m = 10$, $M = 812$.

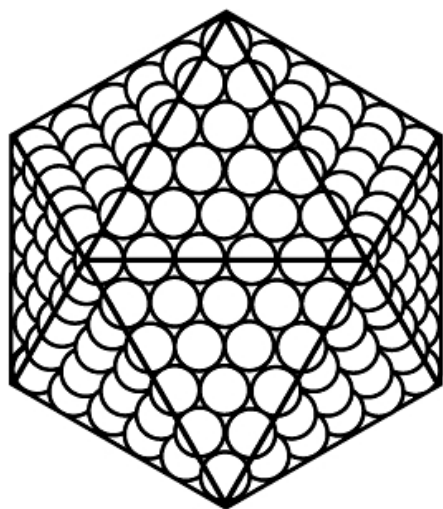


Рис. 4. Схема строения капсида аденовируса.

Формула обобщается на случай, когда ряды глобул капсида не параллельны рёбрам икосаэдроиды (рис. 2). Так, капсид вируса жёлтой мозаики турнепса образован 32 глобулами. Это значит, что триангуляционное число равно 3 и соответствует фуллерену $(h, k) = (1, 1)$, то есть C_{60} (табл. 1). Иначе говоря, капсиды вируса жёлтой мозаики турнепса и бактериофага $\phi X174$ соотносятся так же, как фуллерены C_{60} (усечённый икосаэдр) и C_{20} (додекаэдр).

Заключение

Приведенными расчётами обоснована фундаментальная гомология в строении икосаэдрических (с точечными группами симметрии $-5-3m$ и 235) фуллеренов и капсидов вирусов. Строго говоря, фуллерены реализуют додекаэдрический мотив (атомы располагаются в вершинах полиэдра, простейший фуллерен C_{20} – додекаэдр), вирусы – икосаэдрический (по принципу плотнейшей упаковки белковые субъединицы заполняют грани икосаэдра и лишь как следствие – его рёбра и вершины). Но дуальность этих полиэдров позволяет связать две систематики – фуллеренов по числу образующих атомов и вирусов по числу строящих капсид субъединиц. Те и другие образуют изоморфные гомологические ряды.

В переходе от одной систематики к другой фундаментальную роль играет не триангуляционное число $T = h^2 + hk + k^2$, популярное в работах по морфологии икосаэдрических вирусов, а символ (h, k) , однозначно определяющий: число атомов в фуллерене $N = 20 T$; число глобул в капсиде $M = 10 T + 2$; их точечную группу симметрии $-3-5m$ при $k = 0$ или $h = k$, 235 в других случаях. Лишь энантиоморфные разновидности аксиальных форм 235 требуют добавления символов D или L .

Установлены две математические процедуры, производящие гомологические ряды икосаэдрических фуллеренов и вирусов: рост граней полиэдра с точностью до подобия и дуальный переход с обрезанием вершин. Ряды обоих типов пересекаются, так как двукратное выполнение 2-ой процедуры равносильно 1-ой с коэффициентом подобия 3. Это позволяет свести описание всего многообразия форм к простейшим представителям рядов – генераторам. Их разнообразие велико, но перечисляемо с исчерпывающей полнотой.

Особый интерес представляют энантиоморфные пары с симметрией 235. Они могут быть неравноправны в приложениях к вирусам. Среди изомеров (фуллеренов с равным числом атомов, капсидов с равным числом белковых субъединиц) лишь один может иметь симметрию $-3-5m$, остальные – 235. Исходя из физических принципов, для фуллеренов (колебательных атомных систем) можно прогнозировать более высокую стабильность формы $-3-5m$. Для вирусов сегодня ничего не известно о том, зависит ли стабильность капсида от его симметрии.

«Капсиды совершенно различных вирусов, например, фагов, вирусов животных или вирусов растений, могут быть построены точно по одному плану и быть практически неразличимыми морфологически» (Лурия и др., 1981, с. 56). И всё же остаётся вопрос о том, есть ли генетическая подоплёка у столь совершенных гомологических рядов, установленных по структурному (морфологическому) признаку.

Икосаэдрические фуллерены и вирусы – пример того, как природа строит структуры согласно общим принципам. Их иерархический диапазон охватывает много порядков, ведь те же структуры встречены среди скелетов *Radiolaria* и колоний *Volvocacea*. Природа этой универсалии – предмет от-

дельной статьи. Здесь отметим лишь, что её методологической платформой может быть теория R-систем Ю.А. Урманцева (1988). Многие примеры изоморфизма биологических и небιологических полиморфических множеств даны в работах С.В. Мейена (2007). Наконец, интересна идея А. Лима-де-Фариа (1991) об использовании биологическими объектами заведомо оптимальных структур, испытанных ещё на предбиологической стадии эволюции материи.

Список литературы

1. Войтеховский Ю.Л. Примеры биоминеральной гомологии. I. Фуллерены и радиолярии. II. Вольвоксы и вирусы // Биниология, симметрология и синергетика в естественных науках. Тюмень: Изд-во ТюмГНГУ, 2004. С. 59-65.
2. Игнатъев И.А. (отв. ред.) In memoriam. С.В. Мейен: палеоботаник, эволюционист, мыслитель. М.: ГЕОС, 2007. 348 с.
3. Лима-де-Фариа А. Эволюция без отбора. Автоэволюция формы и функции. М.: Мир, 1991. 455 с.
4. Лурия С., Дарнелл Дж., Балтимор Д. и др. Общая вирусология. М.: Мир, 1981. 680 с.
5. Пиневич А.В., Сироткин А.К., Гаврилова А.В. и др. Вирусология. СПб.: Изд-во СПбГУ, 2012. 432 с.
6. Рис Э., Стернберг М. От клеток к атомам. Иллюстрированное введение в молекулярную биологию. М.: Мир, 1988. 144 с.
7. Урманцев Ю.А. Эволюционика или общая теория развития систем природы, общества и мышления. Пушкино: ОНТИ НЦБИ АН СССР, 1988. 79 с.
8. Caspar D.L.D., Klug A. Physical principles in the construction of regular viruses // Cold Spring Harbor Symp. Quant. Biol. 1962. V. 27. P. 1-24.
9. Klein D.J., Seitz W.A., Schmalz T.G. Icosahedral symmetry carbon cage molecules // Nature. 1986. V. 323. P. 703-706.
10. Kroto H.W., Heath J.R., O'Brien S.C. et al. C₆₀: Buckminsterfullerene // Nature. 1985. V. 318. P. 162-163.
11. Schmalz T.G., Seitz W.A., Klein D.J. et al. Elemental carbon cages // J. Am. Chem. Soc. 1988. V. 110. P. 1113-1127.

ТРАНСФОРМАЦИИ ФУЛЛЕРЕНОВ КАК МОДЕЛИ МИКРОЭВОЛЮЦИЙ СКЕЛЕТОВ РАДИОЛЯРИЙ

Войтеховский Ю.Л., Степенщиков Д.Г.

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

В статье обращено внимание на гомологию в структурах фуллеренов – полиэдрических молекул, на которых разрешены лишь 5- и 6-угольные грани – и скелетов радиолярий: *Heliosphaera inermis*, *H. tenuissima*, *H. actinota*, *H. echinoides*, *H. elegans*; *Circogonia dodecahedra*; *Haliomma capillaceum*, *Ethmosphaera siphonophora* Hkl. и др. Современные химические технологии позволяют изменять фуллерены к нужным (например, наиболее симметричным и стабильным) формам. Соответствующие компьютерные алгоритмы (например, SW-трансформации) разбивают

многообразие фуллеренов-изомеров на классы эквивалентности. Высказана гипотеза о том, что трансформации фуллеренов моделируют микроэволюции скелетов радиолярий, а классы эквивалентности имеют таксономическое значение.

Введение

В предыдущих работах (Войтеховский, 2001, 2002, 2004; Войтеховский и др., 2006) авторами указано на гомологию в структурах фуллеренов и весьма различных биологических объектов: скелетов *Radiolaria*, колоний *Volvocasea*, капсидов икосаэдрических *Viruses*. Она обусловлена не их вещественной реализацией, а геометрической (лучше сказать – топологической) ввиду широко распространённых неразрывающих деформаций) оптимальностью структур в отношении минимума материальных, энергетических и, может быть, временных затрат на воспроизводство.

Первые изображения скелетов *Radiolaria*, которые сегодня относят к классу фуллеренов (выпуклые полиэдры, на которых разрешены лишь 5- и 6-угольные грани), опубликованы в работах (Haeckel, 1884, 1887; рис. 1) как свидетельство «красоты форм в морских глубинах», за которой кроется некоторая целесообразность. В работе (Мордухай-Болтовской, 1936, 2012) выведены первые уравнения, характеризующие топологию этой структуры (например, ровно 12 пентагонов при любом – кроме 1 – числе гексагонов). В монографии (Thompson, 1945; рис. 1) эти соотношения открыты заново.

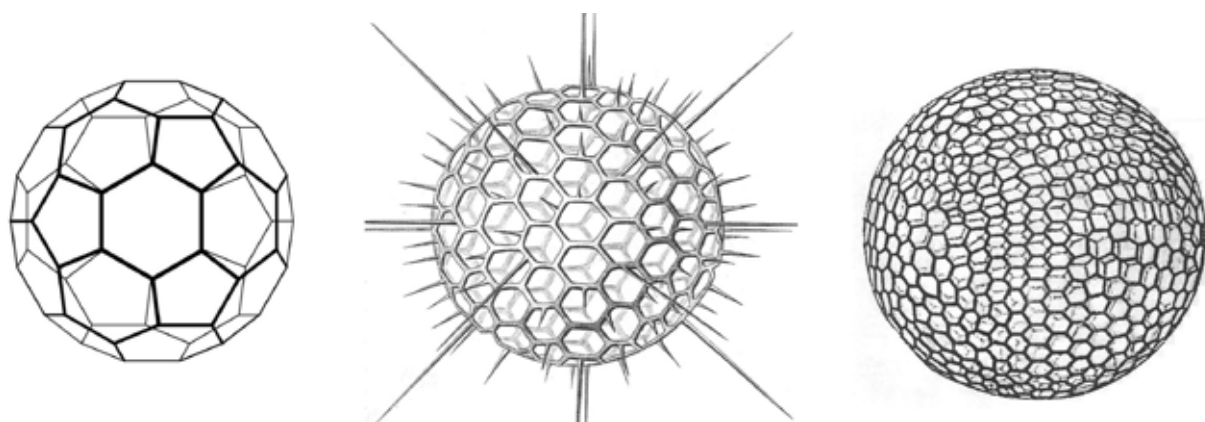


Рис. 1. Фуллерен C_{60} (слева), скелеты *Heliosphaera echinoides* Hkl. (в центре, Haeckel, 1884, 1887, 2005; Геккель, 2009) и *Aulonia hexagona* Hkl. (справа, Thompson, 1945).

Гомологию фуллеренов и скелетов *Radiolaria* поддерживают и современные специалисты. «Небезынтересно отметить, что потенциально стабильными являются фуллерены ... максимально симметричные, ... этим условиям отвечают икосаэдрическая и додекаэдрическая группы полиэдров, часто воплощающиеся в скелетах сферических радиолярий» (Афанасьева, Амон, 2004). Здесь уместно вспомнить *Circogonia icosahedra* Hkl. и *Circogonia dodecahedra* Hkl, принципы организации которых заложены в названиях. Правда, после Э. Геккеля, кажется, никто не находил представителей этих видов. «Важно подчеркнуть, что сфероиды и полиэдры неоднократно появлялись в большом количестве на разных этапах эволюционного

развития радиоларий и не были отринуты как «пройденный примитивный» этап, а наоборот, выбирались как наиболее оптимальные по расходованию строительного материала и идеальные для жизни в планктоне» (Афанасьева, Амон, 2013).

Последняя цитата подсказывает новый аспект темы – распространить гомологию фуллеренов и скелетов Radiolaria с морфологии на их эволюции. Оговоримся, что весьма разные трансформации фуллеренов сегодня выполняются в лабораторном и компьютерном вариантах. В то же время детальное изучение скелетов Radiolaria (подсчёт граней-дырок скелета, определение положений 5-угольных граней в нём и его точечной группы симметрии, и т.д.) и тем более прослеживание их эволюций никогда не выполнялись, возможно, из-за технической сложности процедуры. Перенесение результатов с фуллеренов на скелеты Radiolaria пока следует рассматривать как гипотетическое.

Методы и результаты

Открытие фуллеренов как нового класса (суперароматических) соединений (Kroto et al., 1985) породило целое направление химических технологий и компьютерного моделирования. Первые проблемы – исчерпывающее перечисление многообразия фуллеренов C_n с ростом числа атомов n и прогноз стабильности молекул в различных (углеродных, металлоуглеродных

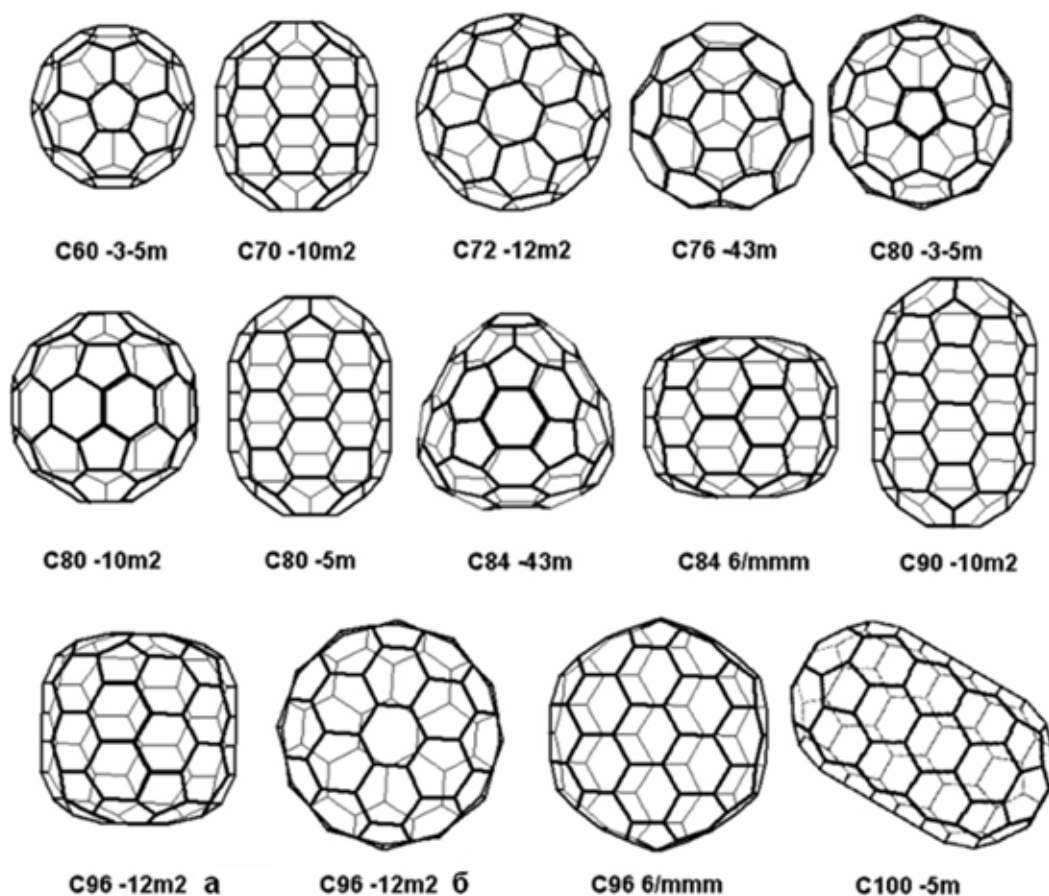


Рис. 2. Потенциально стабильные фуллерены диапазона $C_{60} - C_{100}$.

и др.) реализациях. В первом направлении укажем на систематическую работу (Fowler, Manolopoulos, 1995). Авторы перечислили фуллерены диапазона $C_{20} - C_{100}$ (Войтеховский, Степенщиков, 2002, 2003), охарактеризовав их точечными группами симметрии, что сделало результаты максимально пригодными для приложений, учитывающих стабильность структур. Эффективный критерий стабильности, применимый к структурам любого рода – химическим, минеральным, биологическим – предложен первооткрывателем фуллеренов: потенциально стабильны самые симметричные структуры без контактирующих пентагонов (Kroto, 1987). Согласно этому критерию, в диапазоне $C_{60} - C_{100}$ авторами выделены 14 форм (рис. 2).

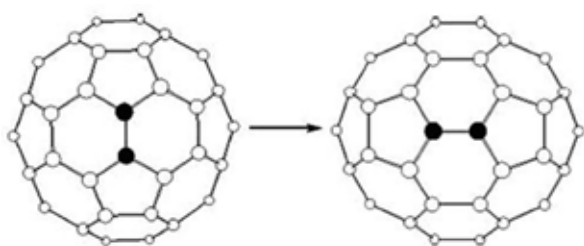


Рис. 3. SW-трансформация на фуллере-не C_{60} .

Химические технологии поставили вопрос об исправлении топологии фуллерена к нужному – например, наиболее симметричному и стабильному – виду. Желательно, чтобы предельно простой алгоритм решал как можно более широкий круг задач. Для целей химического дизайна эти условия очевидны. В ра-

боте (Stone, Wales, 1986) предложена SW-трансформация (по первым буквам фамилий). Она состоит в изменении ориентации химических связей в небольшом замкнутом контуре (рис. 3) с сохранением остальной части фуллерена. Очевидное условие применимости – наличие нужного фрагмента со сближенными пентагонами. Результат – его поворот на 90° . Дважды выполненная, SW-трансформация возвращает форму к исходной. Поэтому она может применяться многократно, только если задействует всё новые подходы фрагменты.

Насколько эффективен этот алгоритм? Вопрос изучался рядом авторов (Babić, Trinajstić, 1993; Austin et al., 1995; Babić et al., 1995; Balaban et al., 1996; Степенщиков, Войтеховский, 2013). Так, для многообразия из 1812 изомеров C_{60} установлено, что к 31 форме SW-трансформация не применима – в них нет нужного фрагмента со сближенными пентагонами. Зато остальные разбиваются на 13 классов с весьма различным числом изомеров: 1, 1, 2, 2, 2, 2, 3, 3, 4, 6, 18, 27, 1710. Обращают внимание три обстоятельства. (1) Процедура применима более чем к 98 % форм. (2) Она даёт немалое число классов, в каждом из которых возможен поиск оптимальной (например, самой симметричной) формы. (3) В самом обширном классе оказалось более чем 94 (96) % форм от их общего (доступного для трансформации) числа.

Иная трансформация предложена в работе (Endo, Kroto, 1992). Как и предыдущая, она требует двух сближенных пентагонов (рис. 4) и потому применима не ко всем фуллеренам. При этом недостатке она более радикальна. (1) При сохранении контура она соединяет (разделяет) два пентагона. Согласно критерию Крото, контакт двух (тем более трёх) пентагонов по-

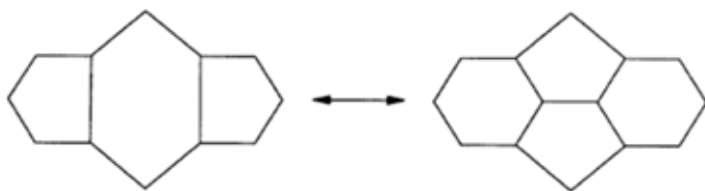


Рис. 4. Трансформация Эндо-Крото.

вышает кривизну и понижает стабильность фуллерена. На этом фоне может повышаться его симметрия и стабильность. Таким образом, преобразование слева направо (рис. 4) не является заведомо

невыгодным, а обратное – выгодным. (2) Ещё более радикально то, что этот алгоритм создаёт (уничтожает) в фуллерене 1 гексагон и 2 вершины, переводя его в соседний класс изомеров C_n .

Возможен ли алгоритм, лишённый отмеченного недостатка, то есть применимый ко всем фуллеренам? Скорее всего, нет. Так, из всего многообразия выделяется простейший фуллерен C_{20} – платонов додекаэдр, на котором вообще нет гексагонов. Авторы предложили SV-трансформацию, для которой нужен лишь 1 пентагон, контактирующий с 2 смежными гексагонами (рис. 5). Доказано, что она заведомо применима там, где применима SW-трансформация (Степенчиков, Войтеховский, 2013). Она создаёт дефект структуры в виде октагона с открытой связью, перемещаемый по поверхности фуллерена и исчезающий после взаимодействия с встреченным пентагоном. Вопрос о том, как SV-трансформация разбивает многообразия изомеров на классы, изучается компьютерными методами.

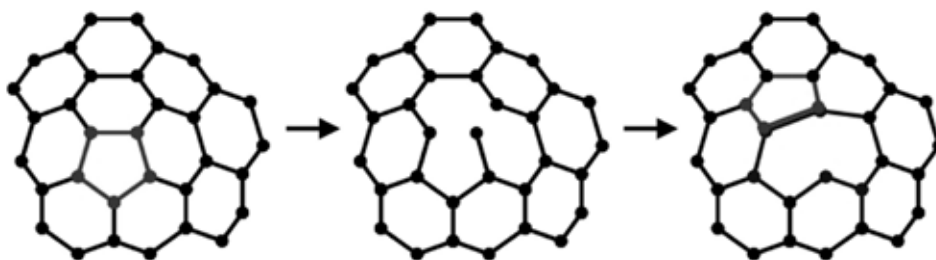


Рис. 5. SV-трансформация на фрагменте фуллерена.

Наконец, есть подход, радикально обобщающий идею SW-трансформации. Это замещение крупных фрагментов фуллерена заплатками с тем же контуром, но другой внутренней организацией. Для различных контуров изданы атласы заплаток (Brinkmann, Fowler, 2003; Brinkmann et al., 2003). Этот подход далёк от простого алгоритма и скорее напоминает индивидуальное творчество. Вопросы универсальности, эффективности, разбиений на классы здесь отпадают сами собой.

Заключение

Находка полиэдрических структур типа фуллеренов на разных уровнях иерархии природы в минеральных и биологических системах доказывает, что здесь имеет место фундаментальная гомология, причина которой – минимизация материальных, энергетических и, возможно, временных затрат для достижения всякий раз иных целей.

Признавая и наблюдая макроэволюцию биологических видов, мы чаще всего не понимаем логики микроэволюции. Использует ли природа случай-

ные элементарные изменения или какие-то конструктивные алгоритмы? Математическое моделирование допускает оба варианта. Но первый обращает нас к подчас невыполнимым перечислительным задачам, второй требует угадать нужный алгоритм. Говоря об элементарных изменениях, мы по сути не знаем, как они выглядят, например, для *Radiolaria* со скелетами типа фуллеренов. Тогда в чём результат? В очевидной программе дальнейших исследований.

Нужно установить, к каким формам C_n относятся скелеты радиолярий: *Heliosphaera inermis*, *H. tenuissima*, *H. actinota*, *H. echinoides*, *H. elegans*; *Circogonia dodecahedra*; *Haliomma capillaceum*, *Ethmosphaera siphonophora* Hkl. и др. Этот вопрос *de facto* поставлен Э. Геккелем, но никем не решался – никого не интересовало число гексагонов и расположение среди них 12 пентагонов. Но в этом и состоит суть их топологии. Для каждого вида надо установить топологическое разнообразие скелетов-изомеров. Анализ преобладающих форм, точечных групп симметрии, классов эквивалентности относительно простых алгоритмических (например, SW-) трансформаций и т.д. в совокупности может подсказать решение целого ряда взаимосвязанных вопросов, касающихся их таксономии и микроэволюции.

Список литературы

1. Афанасьева М.С., Амон Э.О. Синергетика пространственно-структурных взаимосвязей в биоминерализации скелетов радиолярий // Биниология, симметрология и синергетика в естественных науках. Тюмень: Изд-во ТюмГНГУ, 2004. С. 167-172.
2. Афанасьева М.С., Амон Э.О. Симметрия в скелетах радиолярий: правила и исключения // Морфогенез в индивидуальном и историческом развитии: симметрия и асимметрия. Сер. Гео-биологические системы в прошлом. М.: Изд-во ПИН РАН, 2013. С. 89-104.
3. Войтеховский Ю.Л. О морфологическом разнообразии колоний *Pandorina morum* (Müll.) Bory (Volvocaceae) // Журнал общей биологии. 2001. Т. 62. № 5. С. 425-429.
4. Войтеховский Ю.Л. Биоминеральные гомологии: фуллерены, радиолярии, вольвоксы // Биниология, связь с другими парадигмами естествознания. Тюмень: Изд-во ТюмГНГУ, 2002. С. 112-118.
5. Войтеховский Ю.Л. Примеры биоминеральной гомологии. I. Фуллерены и радиолярии. II. Вольвоксы и вирусы // Биниология, симметрология и синергетика в естественных науках. Тюмень: Изд-во ТюмГНГУ, 2004. С. 59-65.
6. 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.
7. Войтеховский Ю.Л., Степенщиков Д.Г. Фуллерены C_{62} – C_{100} : каталог комбинаторных типов и точечных групп симметрии. Апатиты: Изд-во К & М, 2003. 50 с.
8. Войтеховский Ю.Л., Тимофеева М.Г., Степенщиков Д.Г. Принцип Кюри и морфологическое разнообразие колоний *Pandorina morum* (Müll.) Bory (Volvocaceae) // Журнал общей биологии. 2006. Т. 67. № 3. С. 206-211.

9. Геккель Э. Красота форм в морских глубинах. СПб.: Изд-во В. Регена, 2009. 116 с.
10. Мордухай-Болтовской Д.Д. Геометрия радиолярий // Уч. Зап. Ростов.-на-Дону ун-та. 1936. Вып. 8. С. 1-91.
11. Мордухай-Болтовской Д.Д. Геометрия радиолярий. М.: Кн. дом «ЛИБРОКОМ», 2012. 104 с.
12. Степенщиков Д.Г., Войтеховский Ю.Л. Трансформация гигантских фуллеренов // Геология и полезные ископаемые Кольского региона. Тр. X Всерос. научн. сессии. Апатиты, 7-10 апр. 2013 г. Апатиты: Изд-во К & М, 2013. С. 220-222.
13. Степенщиков Д.Г., Войтеховский Ю.Л. SW-трансформация фуллеренов // Математические исследования в естественных науках. Тр. IX Всерос. научн. школы. Апатиты, 10-11 окт. 2013 г. Апатиты: Изд-во К & М, 2013. С. 81-83.
14. Austin S.J., Fowler P.W., Manolopoulos D.E. et al. The Stone-Wales map for C_{60} // Chem. Phys. Let. 1995. V. 235. P. 146-151.
15. Babić D., Bassoli S., Casartelli M. et al. Generalized Stone-Wales transformations // Molecular Simulation. 1995. V. 14. P. 395-401.
16. Babić D., Trinajstić N. Pyracylene rearrangement classes of fullerene isomers // Comp. Chem. 1993. V. 17. N 3. P. 271-275.
17. Balaban A.T., Schmalz T.G., Zhu H. et al. Generalizations of the Stone-Wales rearrangement for cage compounds, including fullerenes // J. Mol. Structure. 1996. V. 363. P. 291-301.
18. Brinkmann G., Fowler P.W. A catalogue of growth transformations of fullerene polyhedra // J. Chem. Inf. Comp. Sci. 2003. V. 43. P. 1837-1843.
19. Brinkmann G., Fowler P.W., Justus C. A catalogue of isomerization transformations of fullerene polyhedra // J. Chem. Inf. Comp. Sci. 2003. V. 43. P. 917-927.
20. Endo M., Kroto H.W. Formation of carbon nanofibers // J. Phys. Chem. 1992. V. 96. P. 6941-6944.
21. Fowler P.W., Manolopoulos D.E. An atlas of fullerenes. Oxford: Clarendon Press, 1995. 392 p.
22. Haeckel E. Die Geometrie der Radiolarien // Sitzungsber. Med.-Nat. Gesellsch. Jena. 1884. Bd 17. S. 104-108.
23. Haeckel E. Report on the Radiolaria collected by H.M.S. «Challenger» during the years 1873-1876 // Rep. sci. res. Voy. H.M.S. «Challenger». Zoology. Edinburgh. 1887. V. 18. 1803 p.
24. Haeckel E. Kunstformen aus dem Meer. München – Berlin – London – New-York: Prestel Verlag, 2005.
25. Kroto H.W. The stability of the fullerenes C_n , with $n = 24, 28, 32, 36, 50, 60$ and 70 // Nature. 1987. V. 329. P. 529-531.
26. Kroto H.W., Heath J.R., O'Brien S.C. et al. C_{60} : Buckminsterfullerene // Nature. 1985. V. 318. P. 162-163.
27. Stone A.J., Wales D.J. Theoretical studies of icosahedral C_{60} and some related species // Chem. Phys. Let. 1986. V. 128. P. 501-503.
28. Thompson D'A.W. On growth and form. Cambridge: University Press, 1945. 1136 p.

МАССОПЕРЕНОС ЗАГРЯЗНЯЮЩИХ ВЕЩЕСТВ В ПОЧВЕННОМ СЛОЕ

Запорожец Ю.А.

Национальный технический университет Украины «КПИ», Киев,
z.juli@bigmir.net

В статье представляется математическая модель процесса фильтрации загрязненной воды в почвенном слое с учетом особенностей физико-химических свойств почвы. Применение данной модели дает возможность оценить степень загрязнения, и динамику миграции поллютантов в процессе фильтрации с учетом сложных процессов физико-химического взаимодействия сточных вод с грунтовыми массами.

In the article it is presented a study of influence of contaminants that enter the soil taking into account their specific physical and chemical properties on soil taking into account its internal properties and processes (the process of sorption, chemical interaction, etc.). The factors that affect the process of mass transfer of pollutants in the soil are determined. Accounting of these factors in the mathematical model of mass transfer of solutes in the soil will give an opportunity to assess the dynamics of migration of contaminants in the soil during the filtering process. It is proposed a two-dimensional profile mathematical model of waste water filtration process into the depths of soil based on its properties. The implementation of this model will allow to calculate the concentration profile of contaminated substances in the liquid and solid phases at different times, that is obtained an objective understanding of the process of changing the concentration of impurities in the waste water in the process of mass transfer in the soil layer.

Введение

Почвенный слой, одна из составляющих частей экологической системы, в промышленных районах наиболее подвержен негативному влиянию загрязненных веществ, как жидких так и твердых отходов промышленного происхождения. Исследование влияния загрязняющих веществ, которые поступают в почву, с учетом их физико-химических свойств и особенностей почвенного слоя (сорбция, химическое взаимодействие, проницаемость и т.д.) является актуальной задачей. Учитывая сложность и комплексность проблемы устойчивого развития регионов в экологической составляющей следует разрабатывать алгоритм массопереноса загрязняющих веществ в почвенном слое, который позволит проанализировать нагрузку на него и оценить экологический риск уже на этапе проектирования в соответствии с концепцией оценки воздействия на окружающую природную среду.

Начиная с работ А. Дарси [5], проблеме изучения особенностей движения жидкостей в пористых средах посвящено значительное число работ. Свой вклад в развитие нового раздела гидродинамики внесли Ж. Дюпюи, Ж. Буссинеско и др. Увеличилось количество научных работ, посвященных исследованию и изучению пористой среды, его структур. Над этой темой работали Баренблад Г.И., Осокин А.Е., Рыжаков В.Н. и др. Обобщил их работы по геологическим и гидрогеологическим условиям, разделив территорию

Украины на 4 области и внутри них, т.е. всего 9 районов, Абрамов И.Б. [1].

В настоящее время для моделирования загрязнения и распространения загрязняющих веществ в окружающей среде существует большое количество математических моделей, но большинство из них описывают процесс загрязнения воздушных масс. В области математического моделирования фильтрационных процессов затронуты проблемы, связанные с нефте- и газодобычей. Вне исследований остался учет особенностей пористых сред других районов, в которой происходит фильтрация [4]. Таким образом, проблема миграции загрязняющих веществ с поверхности в глубину почв является сегодня весьма актуальной.

Математическое моделирование миграции загрязняющих веществ в почвах

Для описания миграции загрязненных сточных вод в почвенном слое используется математическая модель массопереноса, т.е. взаимодействие между почвой и загрязненными сточными водами в ходе фильтрации [2]. В общем виде массоперенос растворимых веществ при фильтрации сточных вод можно описать уравнениями материального баланса [3]. Как правило, математические модели массопереноса – это системы дифференциальных уравнений, включающие в качестве независимых переменных три пространственные координаты и время. Для упрощения системы уравнений усреднением искомых величин (концентрации, скорости фильтрации и др.) уменьшают размерность по одной или нескольким пространственным координатам. Вертикальное усреднение по z приводит уравнение к двумерной профильной модели. Она дает возможность оценить распространение сточных вод вглубь почвенного слоя [2].

При построении модели учитывались допущения: загрязняющие примеси растворены в воде, концентрация соответствует суммарному содержанию; распространение примесей осуществляется с потоком фильтрующейся жидкости; накопление в почвенном слое лимитируется массопереносом в изотермических условиях; коэффициент конвективной диффузии и физико-химические характеристики жидкой и твердой фаз постоянны. Математическая модель массопереноса загрязняющих веществ представлена уравнениями материального баланса, движения жидкой фазы и кинетики:

$$D \left(\frac{\partial^2 c}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 c}{\partial y^2} \right) - v_x \frac{\partial c}{\partial x} - v_y \frac{\partial c}{\partial y} - \frac{\partial N}{\partial t} = \sigma \frac{\partial c}{\partial t} \quad (1)$$

$$\frac{\partial v_x}{\partial x} + \frac{\partial v_y}{\partial y} = 0, \quad (2)$$

$$v_x = \frac{\partial \varphi}{\partial x}, v_y = \frac{\partial \varphi}{\partial y}, \quad (3)$$

$$\frac{\partial N}{\partial t} = a \sigma c, \quad (4)$$

Начальные и граничные условия имеют вид:

$$c(x, y, t) = c_0(x, y, 0), \quad v(x, y, 0) = 0, \quad N_0(x, y, 0) = 0 \quad (5)$$

$$c(x, y, t)|_{x=x_1} = c_0(x_1, y, t), \quad N(x, y, t)|_{x=x_1} = 0, \quad \frac{\partial c}{\partial y}|_{y=L} = 0, \quad (6)$$

где $c(x, y, t)$ и $N(x, y, t)$ – концентрации вещества в жидкой и твердой фазах; $v(v_x, v_y)$ – вектор скорости фильтрации; D – коэффициент конвективной диффузии; $\phi(x, y, t)$ – потенциал скорости фильтрации, т.е. $\phi = -\chi h$; χ – коэффициент фильтрации; h – напор, $h = \frac{p}{\rho g} - a$; p – давление; ρ – плотность; g – ускорение силы тяжести; a – константа скорости массообмена; σ – активная пористость среды, $\sigma = 1 - \frac{p_b}{p_s}$, p_b – плотность насыпного слоя; p_s – плотность спрессованной пробы почвы. При решении геофильтрационных задач уравнение кинетики в виде (4) практически не используется, особенно с учетом динамически изменяющихся напора и концентрации. Решение представленной математической модели позволит получить профиль концентрации загрязняющих веществ в жидкой и твердой фазах, что важно для прогнозирования состояния почвенного слоя.

Результаты

Математическая модель массопереноса растворимых веществ в почвенном слое в ходе фильтрации сточных вод (1) - (4), с начальными и граничными условиями (5) - (6) решалась методом сеток. Выполнено компьютерное моделирование фильтрации нитратов (с начальной концентрацией $c_0(0, 0, 0) = 0,8$ з/л) в почвенном слое суглинистой структуры. Результаты даны на рис. 1. Начало координат совпадает с точкой поступления сточных вод в почвенный слой. Распространение по высоте принимается равномерным.

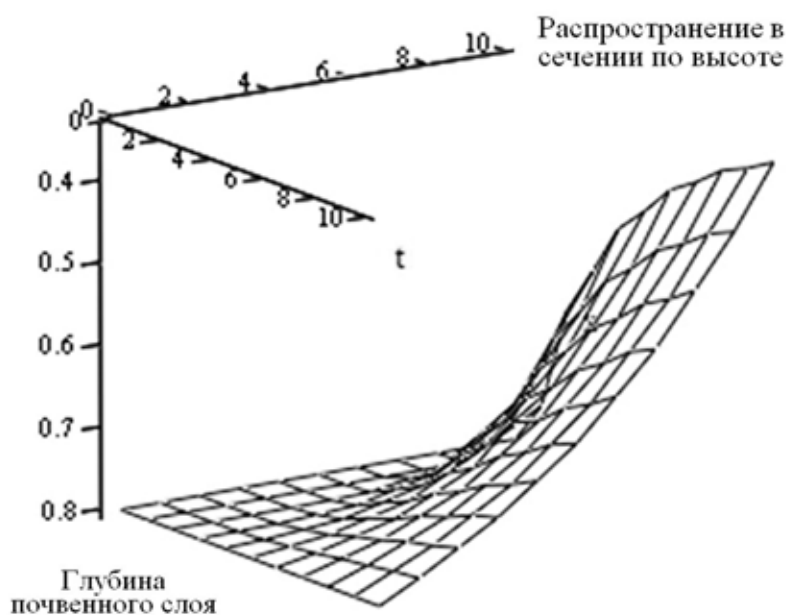


Рис. 1. Геометрическая интерпретация изменения концентрации нитратов в жидкой фазе, фильтрующейся в почвенном слое.

Использование предложенной модели позволяет проанализировать изменение концентрации нитрата в ходе фильтрации в разные моменты времени, т.е. получить представление об изменении концентрации примесей в сточных водах в ходе массообмена в почвенном слое.

Выводы

Математическая модель массопереноса загрязняющих веществ задана уравнениями материального баланса, движения жидкой фазы и кинетики, а также начальными и граничными условиями. Особенность модели – учет специфики почвенного слоя, а именно, изменяющихся напора и концентрации. Допущения позволили решить систему уравнений методом сеток. Компьютерное моделирование фильтрации нитратов позволило сделать вывод о возможности использования модели для расчета фильтрации в почвенном слое и необходимости исследования влияния свойств почвенного слоя на миграцию загрязнителей.

Список литературы

1. Абрамов И.Б. Оценка воздействия на подземные воды промышленно-городских агломераций. Харьков, 2007. 285 с.
2. Бойко Т.В. Абрамовам А.О., Запорожець Ю.А. Математичне моделювання міграції забруднюючих величин у ґрунтах // Східно-Європ. ж-л передових технологій. Харків. 2013. № 6/4 (66). С. 14-16.
3. Лаврик В.И. Решение задачи массопереноса водорастворимых веществ в случае зависимости коэффициентов конвективной диффузии от скорости фильтрации. К.: Ин-т математики АН УССР, 1981. С. 3-24.
4. Молокова Н.В. Математическое моделирование процессов нефтезагрязнения пористой среды // Вестник Сиб. гос. аэрокосмич. ун-та. 2010. № 5(31). С. 142-148.
5. Шестаков В. М. Гидрогеодинамика. М.: МГУ, 1995. 368 с.

СРАВНИТЕЛЬНАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА МОРФОЛОГИЧЕСКИХ МЕТОДОВ ОЦЕНКИ ГОНАДОТОКСИЧНОГО ЭФФЕКТА ФАКТОРОВ ОКРУЖАЮЩЕЙ СРЕДЫ

Запривода Л.П.¹, Остапенко О.В.¹, Яценко В.П.²

¹ Национальный медицинский университет, Киев, ostapenko.o.v.@yandex.ru;

² Национальный технический университет «КПИ», Киев

С помощью общепринятых методов и разработанного методического подхода, позволяющего осуществить морфометрическую оценку завершающего этапа сперматогенеза – стадии формирования, проведено изучение морфологических особенностей сперматогенеза белых крыс при интоксикации свинцом и коррекции люпином. На модели повреждения гонад при свинцовой интоксикации и при коррекции его люпином отмечена возможность разработанного подхода реагировать

на изменения состояния сперматогенеза значительной амплитудой колебания показателя степени дифференцировки сперматид. Предложенный метод может способствовать усовершенствованию оценки состояния сперматогенеза у белых крыс при действии повреждающих факторов окружающей среды.

Using conventional methods and methodical approach developed by us that allows implementing the morphometrical estimation of final stage spermatogenesis – development stage the morphological characteristics of white rats during spermatogenesis lead intoxication and correction of lupine was studied. On the model of damage in the gonads of lead intoxication and correction of his lupine, we could mention the possibility of a methodological approach developed by us to respond to various changes in the state of spermatogenesis large amplitude fluctuations of the degree of differentiation of spermatids. Our method can further improve the assessment of the process of spermatogenesis in white rats under the influence of damaging environmental factors.

Введение

В гигиенических исследованиях оценка влияния химических факторов на мужскую половую систему предусматривает определение морфофункциональных показателей сперматогенеза, рекомендованных методическими документами [4, 5, 12]. Исследование морфологии клеток сперматогенного ряда включает подсчет ряда морфометрических показателей: индекса сперматогенеза по 4-бальной системе Fogg и Cowing [17], числа нормальных сперматогоний [10], относительного числа канальцев со слущенными клетками сперматогенного ряда и 12-й стадией мейоза [7]. Эти способы морфологической оценки сперматогенного ряда клеток трудоемки и субъективны, не учитывают стадийности развития сперматогенного ряда клеток или недостаточно чувствительны и малоинформативны.

С целью повышения чувствительности, информативности, а также объективности оценки влияния неблагоприятных факторов окружающей среды на гонады разработан метод морфометрического исследования, позволяющий изучать закономерности сперматогенеза с учетом его различных стадий [11]. Для апробации подхода применена модель повреждения гонад при свинцовой интоксикации у белых крыс [3], а также коррекция его люпином, который содержит значительное количество цинка. Ему присуща высокая биологическая активность, присутствие во всех органах и тканях, в т.ч. репродуктивной системы. При недостаточности цинка наблюдается задержка полового развития и бесплодия [6, 16]. Концентрируясь в половых железах мужчин и сперме, цинк усиливает действие гормонов, регулирующих процессы размножения, благоприятно влияет на продукцию сперматозоидов и качество спермы [2, 18, 19, 21, 22].

Коррекция бесплодия поврежденных при хронической свинцовой интоксикации гонад препаратами цинка дала выраженный положительный эффект в виде улучшения качества спермы у людей и восстановление гистологического строения семенников у собак и белых крыс [1, 9, 14]. Свойство цинка, вступая в конкуренцию со свинцом, восстанавливать нарушенный сперматогенез [13] использовано для проверки возможности разработан-

ного подхода реагировать на изменения состояния сперматогенеза у белых крыс в сторону его ухудшения и улучшения.

Материалы и методы

Сущность подхода состоит в следующем. На поперечных срезах извитых семенных канальцев семенников белых крыс для изучения отбираются те, в которых сперматогенез находится на стадиях VI^a и IX^a по классификации Leblond *et al.* [20] с дополнениями [23]. Для стадии VI^a сперматогенеза характерно митотическое деление сперматогоний типа В, сперматоциты I порядка находятся в стадии пахинеммы, в сперматиде намечается формирование акросомальной шапочки, на четверть или треть покрывающей ядро; в сперматозоидах ядро серповидной формы, цитоплазма смещена вдоль формирующейся хвостовой части (18 стадия формирования) (рис. 1 А).

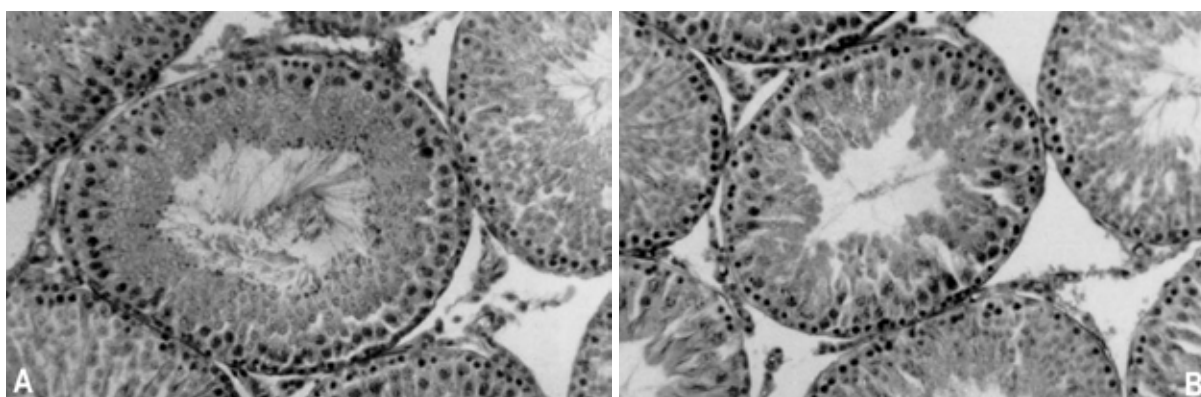


Рис. 1. Поперечные срезы сегментов извитых семенных канальцев самцов белых крыс контрольной группы. А – VI^a и В – IX^a – стадии сперматогенеза. Окраска: толудиновый голубой.

Для стадии IX^a характерно митотическое деление сперматогоний типа А; сперматоциты I порядка находятся в стадии пахинеммы, в сперматиде ядро со сформировавшейся акросомальной шапочкой располагается ассиметрично (9 стадия) (рис. 1 В); адлюминальная область канальца свободна от сперматозоидов и остаточных телец. Таким образом, на протяжении VI^a – IX^a стадии преемственно происходят важнейшие этапы цитодифференцировки, включающие существенную и необратимую трансформацию таких оргanelл клетки как клеточный центр и комплекс Гольджи, производные которых (хвостовой отдел, акросома) обеспечивают в дальнейшем две важнейшие функции – подвижность сперматозоидов и процесс оплодотворения. Кроме того, на стадии IX^a существенно изменяются межклеточные взаимодействия между клетками Сертоли и сперматогенными клетками – предшествующая генерация зрелых сперматозоидов утрачивает связь с клетками Сертоли и перемещается в просвет семенного канальца. При этом устанавливаются более тесные морфо-функциональные взаимоотношения между поддерживающими клетками и новой генерацией дифференцирующихся сперматид. Следовательно, оценивая состояние клеток сперматогенного ряда на стадиях VI – IX при воздействии неблагоприятных факторов, можно судить о кле-

точных и межклеточных механизмах нарушения процессов сперматогенеза. Учитывая сказанное, предложен алгоритм вычисления показателя степени дифференцировки сперматид (ПСДС):

$$ПСДС = \frac{\bar{P}_{st}^{IX}}{\bar{P}_{st}^{VI}} \pm \frac{\bar{P}_{st}^{IX}}{\bar{P}_{st}^{VI}} \cdot \sqrt{\left(\frac{m^{VI}}{\bar{P}_{st}^{VI}}\right)^2 + \left(\frac{m^{IX}}{\bar{P}_{st}^{IX}}\right)^2}$$

где:

$$\bar{P}_{st}^{IX} = \frac{1}{5} \sum_{j=1}^5 \bar{P}_{stj}^{IX} ; \quad m^{IX} = \sqrt{\frac{\sum_{j=1}^5 \left(\bar{P}_{stj}^{IX}\right)^2 - 5 \left(\bar{P}_{st}^{IX}\right)^2}{2}}$$

$$\bar{P}_{stj}^{IX} = \frac{\bar{P}_j^{IX} \cdot K_3}{S_j^{IX}} ; \quad \bar{P}_j^{IX} = \frac{1}{4} \sum_{j=1}^4 \bar{P}_j^{IX}$$

$$\bar{P}_{st}^{VI} = \frac{1}{5} \sum_{j=1}^5 \bar{P}_{stj}^{VI} ; \quad m^{VI} = \sqrt{\frac{\sum_{j=1}^5 \left(\bar{P}_{stj}^{VI}\right)^2 - 5 \left(\bar{P}_{st}^{VI}\right)^2}{2}}$$

$$\bar{P}_{stj}^{VI} = \frac{\bar{P}_j^{VI} \cdot K_3}{S_j^{VI}} ; \quad \bar{P}_j^{VI} = \frac{1}{4} \sum_{j=1}^4 \bar{P}_j^{VI}$$

$$S_j^{VI} = h_j^{VI} \cdot l_j^{VI} ; \quad S_j^{IX} = h_j^{IX} \cdot l_j^{IX} ; \quad l_j^{VI-IX} = K_2$$

$$h_j^{VI} = \frac{(D_j^{VI} + d_j^{VI}) \cdot K_1}{2} ; \quad h_j^{IX} = \frac{(D_j^{IX} + d_j^{IX}) \cdot K_1}{2}$$

$\bar{P}_{st}^{IV} , \bar{P}_{st}^{IX}$	Среднее значение из среднего количества сперматид в стандартной площади среза извитых семенных канальцев соответственно на стадиях VI ^a и IX ^a сперматогенеза в данном наблюдении
$\bar{P}_{stj}^{IV} , \bar{P}_{stj}^{IX}$	Среднее значение количества сперматид в стандартной площади среза извитых семенных канальцев соответственно на стадиях VI ^a и IX ^a для изученных полей зрения данного наблюдения
m^{IV} , m^{IX}	Соответствующие ошибки $\bar{P}_{stj}^{IV}$ и $\bar{P}_{stj}^{IX}$
P_j^{IV} , P_j^{IX}	Количество сперматид в единичном поле зрения
S_j^{IV} , S_j^{IX}	Площадь, в которой подсчитывалось количество сперматид соответственно для извитых семенных канальцев на стадии VI ^a и IX ^a сперматогенеза для изученных полей зрения данного наблюдения
$l_j^{IV-IX} , h_j^{IV-IX}$	Основа и высота прямоугольника площади стенки исследуемого извитого семенного канальца в изучаемом поле зрения
$D_j^{IV-IX} , d_j^{IV-IX}$	Наружный диаметр и диаметр просвета исследуемых канальцев
K_1, K_2, K_3	Константы

В каждом препарате семенника белой крысы исследуется по 5 канальцев на стадиях VI^a и IX^a сперматогенеза. Производится измерение наружного диаметра канальца (D) и просвета (d). Затем в стандартной площади поля зрения (выбирается произвольно), включающего всю толщину сперматогенных клеток, подсчитывается число сперматид (P). Для каждого канальца подсчет осуществляют в 4 полях зрения. Итого, в каждом препарате производится подсчет сперматид в 20 полях зрения. Результаты заносятся в таблицы (дан пример исследования семенника белой крысы с моделью коррекция люпином поврежденных при свинцовой интоксикации гонад).

VI ^a стадия сперматогенеза ^x					
	1	2	3	4	5
D	14.0	10.0	9.5	11.8	10.8
d	8.2	3.8	3.5	4.5	4.0
P ₁	20	21	18	21	16
P ₂	13	20	17	16	24
P ₃	20	21	19	19	25
P ₄	21	18	18	25	16

IX ^a стадия сперматогенеза					
	1	2	3	4	5
D	9.5	10.8	12.5	8.7	8.3
d	0.9	2.2	4.2	2.0	1.5
P ₁	28	17	23	18	23
P ₂	28	22	15	16	16
P ₃	29	25	22	26	18
P ₄	24	28	17	17	15

Значения D и d приводятся в количестве делений окулярного микрометра с перерасчетом в программе для реального увеличения. Вычисление показателя степени дифференцировки сперматид производится по разработанной программе «Сперматогенез» для компьютерной обработки результатов. Используя данные таблиц, получаем ПСДС = 0.90 ± 0.06 . Для большей убедительности в полноте оценки состояния клеток сперматогенного ряда на основе количественного анализа преимущества стадий сперматогенеза в качестве позитивного контроля использована стандартная модель хронической свинцовой интоксикации, характеризующаяся ярко выраженным гонадотоксическим эффектом, а также коррекция ее люпином.

Моделирование хронической свинцовой интоксикации проводили в эксперименте на 20 половозрелых крысах – самцах, которым в течение всего цикла сперматогенеза (56 дней) 5 раз в неделю внутривенно вводили ацетат свинца в токсической (0.05 мг/кг) дозе [3]. Десять крыс составляли контроль вивария. Далее 10 белым крысам с моделью повреждения гонад ежедневно на протяжении месяца давали по 5 г люпиновой муки, которая содержала 0.21 мг цинка ($\frac{1}{4}$ суточного потребления цинка белой крысой в виварии Национального медицинского университета в соответствии с [8]). Известно, что относительно большое количество цинка содержат зернобобовые культуры [16]. Украинской ассоциацией «Люпин и боб» предоставлена мука люпина – травянистого растения семейства бобовых, в частности, белого люпина (*Lupinus albus*) сорта «Олешко», которая содержит 38.9 мг цинка / на 1 кг муки.

Результаты

Удалось осуществить модель повреждения гонад [3], установив изменения ряда морфо-функциональных показателей при воздействии ацетата свинца в дозе 0.05 мг/кг. Количественная оценка морфологических изменений в семенниках с помощью общепринятых методов выявила достоверное снижение за счет отсутствия во многих канальцах поздних сперматид индекса сперматогенеза на 5.99 % (табл. 1), который составил 3.45 ± 0.05 в опытной и 3.67 ± 0.02 – в контрольной группе ($p < 0.002$). В 4.46 раза увеличилось число канальцев со слущенными клетками сперматогенного ряда (контроль 2.29 ± 0.61 ; опыт 10.22 ± 1.49 ; $p < 0.001$). Число нормальных сперматогоний уменьшилось на 40.44 % (контроль 45.13 ± 1.42 ; опыт 26.88 ± 1.04 ; $p < 0.001$). Морфометрическая оценка состояния сперматогенеза у крыс при внутрижелудочном введении ацетата свинца в дозе 0.05 мг/кг, по разработанной методике, указывала на значительное (29.67 %) снижение ПСДС с 0.91 ± 0.02 – в контрольной группе до 0.64 ± 0.02 – в опытной группе ($p < 0.001$) с той же достоверностью, что и при использовании общепринятых методов, что подтверждало наличие гонадотоксического эффекта.

Таблица 1. Морфометрические показатели клеток сперматогенного ряда белых крыс после коррекции люпином поврежденных при свинцовой интоксикации гонад.

Показатели	Группы животных		
	Свинцовая интоксикация (0.05 мг/кг) n = 10	Люпиновая коррекция n = 10	Контроль вивария n = 10
Индекс сперматогенеза	3.45 ± 0.05	$3.66 \pm 0.01^*$	3.67 ± 0.02
Число нормальных сперматогоний	26.88 ± 1.04	$41.25 \pm 2.31^*$	45.13 ± 1.42
Число канальцев с 12-й стадией мейоза	3.56 ± 0.99	2.5 ± 0.45	2.43 ± 0.61
Число канальцев со слущенными сперматогенными клетками	10.22 ± 1.49	$3.4 \pm 0.72^*$	2.29 ± 0.61
ПСДС	0.64 ± 0.02	$0.9 \pm 0.02^*$	0.91 ± 0.02

Примечание.: * различия с опытом (ацетат свинца в дозе 0.05 мг/кг) статистически значимы ($p < 0.05$).

Коррекция люпином нарушения морфо-функционального состояния сперматогенеза у белых крыс, вызванного введением ацетата свинца в токсической дозе 0.05 мг/кг массы тела, привела к ряду положительных изменений. На 6.09% увеличился индекс сперматогенеза (табл. 1) и составил у животных со свинцовой интоксикацией 3.45 ± 0.05 ; у животных с люпиновой коррекцией 3.66 ± 0.01 ; ($p < 0.001$). В 1,53 раза возросло в изучаемой группе животных количество нормальных сперматогоний ($p < 0.001$). Доля

канальцев со слущенными сперматогенными клетками снизилась в 3.01 раза и составила у животных с люпиновой коррекцией $3.4 \pm 0.72 \%$ по сравнению с $10.22 \pm 1.49 \%$ при свинцовой интоксикации; $p < 0.001$. Степень дифференцировки сперматид у крыс после люпиновой коррекции поврежденных при хронической свинцовой интоксикации гонад заметно увеличилась (на 40.63 %), достигнув 0.90 ± 0.02 в сравнении с 0.64 ± 0.02 у животных со свинцовой интоксикацией ($p < 0.001$). Не изменилось у крыс с люпиновой коррекцией только число канальцев с 12-й стадией мейоза, составляя $2.5 \pm 0.45 \%$; у животных со свинцовой интоксикацией $3.56 \pm 0.99 \%$. Все описанные морфологические показатели у животных с люпиновой коррекцией были на одном уровне с контрольными величинами (табл. 1) [15].

Выводы

Коррекция люпином (0.21 мг цинка на 200 г массы тела крысы) поврежденных при свинцовой интоксикации гонад приводила к восстановлению гистологического строения семенников, а также в разной степени улучшала морфометрические показатели клеток сперматогенного ряда. Хотя увеличение индекса сперматогенеза – полуколичественного общепринятого метода было незначительным (на 6.09 %), отмечено увеличение числа генеративных клеток в извитых семенных канальцах, в частности, числа нормальных сперматогоний. Появление полноценных семенных канальцев с 4 и 3 слоями сперматогенных клеток, где в достаточной степени были представлены сперматиды, коррелировало с повышением степени дифференцировки сперматид (на 40.63 %). Высокая степень восстановления цитодифференциации сперматогенных клеток при люпиновой коррекции поврежденных гонад, которая оценивается с помощью ПСДС, и уменьшение числа канальцев со слущенными сперматогенными клетками предшествовали нормализации функционального состояния сперматозоидов. Таким образом, на модели повреждения гонад при свинцовой интоксикации и при коррекции его люпином отмечена способность разработанного подхода реагировать на разные изменения состояния сперматогенеза колебанием степени дифференцировки сперматид (ПСДС). Предложенный метод может способствовать дальнейшему усовершенствованию оценки состояния сперматогенеза у белых крыс при действии повреждающих факторов окружающей среды.

Список литературы

1. Акимов А.В., Горюнов В.Г., Евсеев Л.П. и др. Определение содержания цинка в эякуляте – прогностический тест при мужском бесплодии // Тез. докл. респ. научн. конф. «Профилактика сексуальной патологии и супружеских дисгармоний». Киев – Ворошиловград, 1988. С. 115.
2. Евсеев Л.П., Севрюков Е.А., Акимов А.В. Цинк в эякуляте человека // Матер. IV Всес. съезда урологов. Москва, 10-12 окт. 1990 г. М., 1990. С. 506-507.
3. Красовский Г.Н., Чарыев О.Г. Новые данные к обоснованию безвредных уровней свинца в воде // Гигиена и санитария. 1984. № 10. С. 14-17.

4. Методические указания по гигиенической оценке новых пестицидов. К., 1988. 210 с.
5. Методы экспериментального исследования по установлению порогов действия промышленных ядов на генеративную функцию с целью гигиенического нормирования. Метод. рекомендации МЗ СССР. М., 1978. 35 с.
6. Радбиль О.С. Цинк в норме и при патологических состояниях // Вопросы питания. 1981. № 6. С. 10-15.
7. Саноцкий И.В., Авхименко М.М., Фоменко В.Н. Методы количественного изучения изменений репродуктивной функции самцов и самок лабораторных животных в результате воздействия химических соединений // Методы определения токсичности и опасности химических веществ. М.: Медицина, 1970. С. 245-264.
8. Химический состав пищевых продуктов. Справочник. Кн. 2. Справочные таблицы по содержанию аминокислот, жирных кислот, витаминов, макро- и микроэлементов, органических кислот и углеводов. М.: Агропромиздат, 1987. 360 с.
9. Цветкова П., Цачев К., Цветков Д. Влияние цинка на сперматопоэтическую функцию тестиса // Бесплодие. Вспомогательные репродуктивные технологии. Тр. симп. с межд. участием. Киев, 15-16 мая 1997 г. К., 1997. С. 158-161.
10. Щербаков Г.Г. Функционально-морфологические обоснования стабилизации количественных показателей состояния гонад экспериментальных животных при изучении гонадотоксического действия химических веществ // Гигиена труда, состояние здоровья работающих и вопросы токсикологии сложных неорганических композиций. Ставрополь. 1974. С. 98-109.
11. Яценко В.П., Анисимова И.Г., Запривода Л.П. Новый метод морфометрического исследования закономерностей сперматогенеза // Вісник морфології. 1999. Т. 5. № 2. С. 224-226.
12. Вивчення гонадотоксичної дії нових лікарських засобів та їх впливу на репродуктивну функцію тварин. Метод. рекомендації. К., 2000. 24 с.
13. Луговський С.П. Вплив мікроелементів заліза та цинку на всмоктування свинцю слизовою оболонкою різних відділів тонкої кишки шурів // Фізіологічний ж-л. 2001. Т. 47. № 2. С. 41-45.
14. Al-Ayed M.J., Abbasi A.R. Physiological effects of zinc-lead interaction in mammals // Pakistan. J. Zool. 2001. V. 33. N 3. P. 231-235.
15. Aumüller G., Schenck B., Neumann F. Fine structure of monkey (*Macaca mulatta*) Sertoli cells after treatment with cyproteron // Andrologia. 1975. V. 7. P. 317-328.
16. Barceloux D.G. Zinc // Toxicol. Clin. Toxicol. 1999. V. 37. N 2. P. 279-292.
17. Fogg J.C., Cowing R.F. The changes in cell morphology and histochemistry of the testis following irradiation and their relation to other induced testicular changes. I. Quantitative random sampling of germinal cells at intervals following direct irradiation // Cancer res. 1951. N 11. P. 23-30.

18. Karacagil M., Sade M., Turkyilmaz R. The effect of zinc, arginin, fructose and seminal supernatant of normal semen on the triple adenosine triphosphatase activities of the spermatozoa from males with oligoastenozoospermia // *Andrologia*. 1985. V. 17. N 4. P. 383-388.
19. Kruczunski D. Die Schwermetallverteilung im menschlichen Ejakulat eine histochemische Studie // *Acta histochem.* 1986. V. 79, N 2. S. 187-192.
20. Leblond C.P., Clermont J. Definition of the stages of the cycle of the seminiferous epithelium in the rat // *Ann. N. Y. Acad. Sci.* 1952. V. 55, N 4. P. 548-573.
21. Skanhan P. Zinc in normal human seminal plasma // *Andrologia*. 1981. V. 3, N 4. P. 346-351.
22. Tomocazu U. A comparative study of seminal trace elements in fertile and infertile man // *Fertil. and Steril.* 1986. V. 46. N 3-4. P. 494-499.
23. Perey B., Clermont J., Leblond C. P. The Wave of the seminiferous epithelium in the rat // *Amer. J. Anat.* 1961. V. 108. N 1. P. 47-75.

БАЗА ДАННЫХ ПО ЦИТОГЕНЕТИЧЕСКИМ ИССЛЕДОВАНИЯМ ДЛЯ СИСТЕМАТИЗАЦИИ ФАКТОВ И ОПТИМИЗАЦИИ ОБРАБОТКИ

Петрашова Д.А.¹, Бурцев А.В.²

¹ ФГБУН Кольский НЦ РАН, Апатиты, petrashova@admks.apatity.ru

² Центр физико-технических проблем энергетики Севера ФГБУН КНЦ РАН, Апатиты, tonyburt@rambler.ru

Представлен опыт разработки многопользовательской базы данных, ориентированной на решение конкретных задач цитогенетических исследований. Продемонстрированы возможности и перспективы созданной информационной модели.

The development experience of the cytogenetic research-oriented multi-user database have been presented. The potentials and perspectives of this information system are demonstrated.

Введение

В Научном отделе медико-биологических проблем адаптации человека в Арктике КНЦ РАН при цитогенетических исследованиях применяется микроядерный тест на лимфоцитах периферической крови и букальных эпителиоцитах человека [3-5]. Этот метод характеризуется надёжностью получаемых результатов, универсальностью объектов исследования, простотой определения повреждений ДНК и не уступает по чувствительности другим методам, таким как, например, метафазный анализ [1]. Но на результаты могут серьезно влиять такие факторы как пол, возраст, физиологический, иммунологический и психологический статус обследуемых людей, а также диета и вредные привычки. Их следует учитывать как при формировании групп для обследования, так и при статистической обработке данных

и трактовке результатов [2]. Комплексное обследование людей включает в себя интервьюирование по специально разработанному опроснику на наличие вредных привычек и медикаментозного лечения, определение лейкоцитарной формулы крови, в некоторых исследованиях – иммунный статус обследуемого, оценивается кардиогемодинамика, проводится ряд психологических тестов на адаптивность, тревожность, депрессивное состояние и стресс и определяется социально-экономический статус.

При небольших выборках систематизация и обработка данных по такому количеству факторов не представляет труда. Согласно [6], выборки из менее чем 50 человек составляют 68 % от 27 проанализированных статей, 50-100 человек – 22 % и более 100 человек – 10 %. В наших цитогенетических исследованиях выборки, как правило, превышают 50 и в некоторых случаях достигают 250 человек. В связи с довольно большими объемами выборок в проводимых исследованиях мы столкнулись с проблемой структуризации и обработки получаемых данных. К тому же, при обмене данными по своему блоку исследования между сотрудниками, возрастает вероятность накопления ошибок в процессе копирования. Таким образом, возникла необходимость в разработке базы данных по цитогенетическим показателям для оперативного и удобного обмена информацией между специалистами, для которой были сформулированы следующие требования: многопользовательский и сетевой режимы; разделение привилегий и прав пользователей; контроль действий пользователей; удобный интерфейс ввода и вывода данных для пользователя; гибкая и универсальная форма запроса, удовлетворяющая требованиям каждого конкретного пользователя; возможность начальной математической обработки (нормирования) при формировании результатов запроса; экспорт сформированных запрошенных данных в таблицу Excel; минимум стороннего программного обеспечения; минимальные финансовые затраты на разработку и поддержку; совместимость с операционной системой семейства Window.

Основными компонентами прикладного программного обеспечения, удовлетворяющими техническим требованиям, выбраны следующие: веб-сервер Apache для реализации виртуального локального сервера базы данных; интерпретатор языка программирования PHP для формирования web-интерфейса и обработки запросов пользователя; система управления базами данных MySQL для создания и управления разрабатываемой реляционной базы данных. Это программное обеспечение полностью соответствует всем требованиям и является бесплатным.

Структура базы данных

При проведении цитогенетического исследования обследование человека начинается с интервьюирования по специально разработанному опроснику на наличие вредных привычек и медикаментозного лечения. Далее у испытуемого берутся мазки буккального эпителия и венозная и капиллярная кровь для приготовления цитологических и цитогенетических препаратов.



Рис. 1. Начальная иерархическая модель отношений.

Препаратам присваивается порядковый номер. Поскольку для буккального эпителия на протяжении нескольких лет ведется сквозная нумерация и этот анализ проводится чаще всего, то номер, присвоенный образцу буккального эпителия, вносится в опросник и присваивается образцам крови и другим анализам. Таким образом, за каждым испытуемым закреплено конкретное исследование. В это исследование входят опросный лист, результаты микроядерного теста в буккальном эпителии и лимфоцитах периферической крови, лейкоформулы и анализа по иммунологии. Поэтому за основу БД взяты следующие таблицы: объекты; исследование; опросник; буккальный эпителий; лейкоформула; лимфоциты; иммунология. По представленным таблицам выведена иерархическая модель отношений в разрабатываемой базе данных (рис. 1).

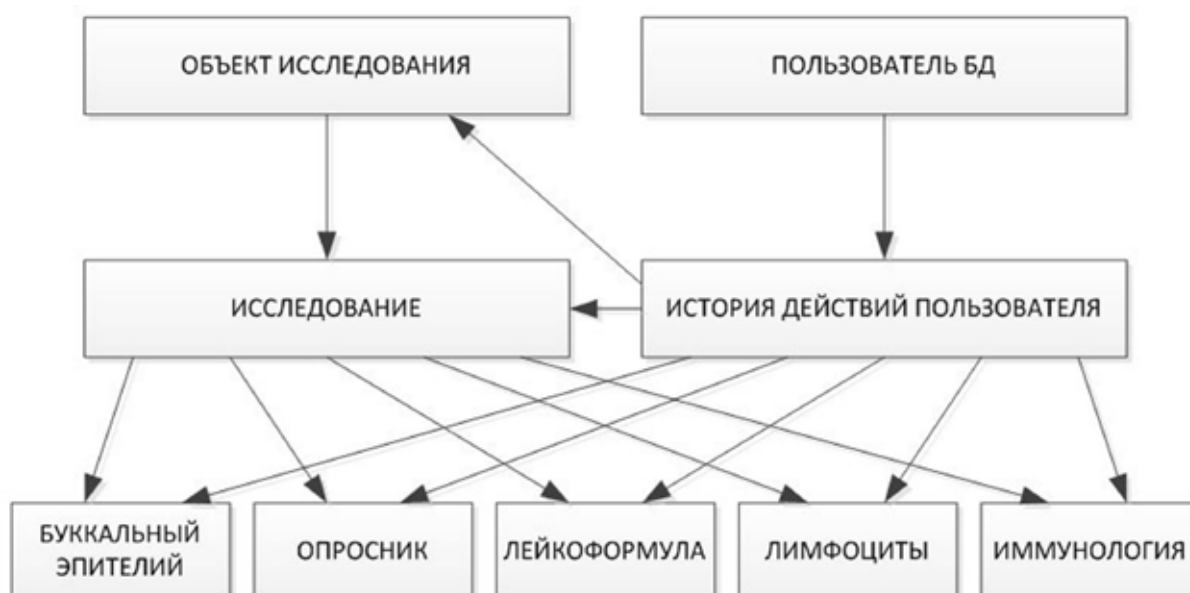


Рис. 2. Окончательная иерархическая модель отношений.

Для создания многопользовательской системы с контролем действий и правами доступа в базу данных добавлены следующие таблицы: пользователь базы данных (accounts); история действий пользователя (history). Вспомогательные таблицы добавляют новые связи и позволяют построить окончательную иерархическую модель отношений (рис. 2).

Ввод данных в базу данных

Объектом исследования служит испытуемый. Поиск испытуемого в базе данных (рис. 3) осуществляется тремя способами: по фамилии или ее части, дате рождения (полной или не полной) и по номеру образца буккального эпителия, присвоенного испытуемому при проведении исследования. Если поле с фамилией оставить пустым и произвести поиск по фамилии, то результатом поиска будет список всех испытуемых, проходивших обследование и занесенных в базу данных (рис. 4). При поиске по дате рождения пользователь может запросить точную дату или ее часть, например год или месяц рождения. Результатом поиска будет список испытуемых с указанной датой. Поиск по номеру буккального эпителия выдаст результат с конкретным испытуемым, имеющим указанный номер буккального эпителия.

В случае отсутствия испытуемого в результате поиска его можно добавить в базу данных. В таблицу «Объекты» заносится ФИО обследуемого, дата рождения и пол (рис. 5). При добавлении объекта в базу данных ему ав-

Рис. 3. Поиск испытуемого – Интерфейс пользователя.

ID	Фамилия	Имя	Отчество	Дата рождения	Действия
1	Иванов	Иван	Иванович	1.1.1970	Изменить
2	Александрова	Александра	Александровна	2.2.1980	Изменить
3	Сергеев	Сергей	Сергеевич	3.3.1960	Изменить

Рис. 4. Результат поиска испытуемого – Интерфейс пользователя.

Добавление нового испытуемого

Заполните известные вам поля

Фамилия

Имя

Отчество

Дата рождения: день Выберите месяц год

Пол: Выберите пол

Назад Добавить

Алматы 2015. Разработка: Антон Бурцев

Рис. 5. Добавление нового испытуемого – Интерфейс пользователя.

томатически присваивается идентификационный номер «*Obj_ID*», который используется для закрепления за объектом последующих исследований.

После добавления испытуемого в базу данных необходимо добавить испытуемому проведенное исследование. Таблица «*Исследование*» содержит информацию о дате проведения исследования, о принадлежности определенного объекта к этому исследованию («*Obj_ID*» из таблицы «*Объекты*»), а также идентификационные номера результатов анализов из табл. 3-7, которые принадлежат данному исследованию. Пользователю предлагается ввести лишь дату проведения исследования (рис. 6). Все остальные значения

Добавление нового исследования для испытуемого

И.И. 2:
Александрова Александра Александровна
Дата рождения: 2.2.1980
Пол: женский

Дата исследования: день Выберите месяц год

Добавить

Алматы 2015. Разработка: Антон Бурцев

Рис. 6. Добавление нового исследования – Интерфейс пользователя.

Исследования испытуемого

И.И. 1:
Иванов Иван Иванович
Дата рождения: 1.1.1979
Пол: мужской

ID	Дата исследования	Осмотрщик	Лейкоформула	Бук. эпителий	Лимфоциты	Иммунология
1	1.3.2015	Изменить (BS Met)	Изменить	Изменить	Изменить	Изменить
2	2.7.2015	Добавить	Добавить	Добавить	Добавить	Добавить

Назад Добавить новое исследование

Алматы 2015. Разработка: Антон Бурцев

Рис. 7. Список исследований испытуемого – Интерфейс пользователя.

добавятся через систему отношений по мере заполнения таблиц с результатами анализов. При добавлении исследования в базу данных ему автоматически присваивается идентификационный номер «*Research_ID*», который используется при формировании результатов запроса данных.

После добавления исследования испытуемому появляется возможность добавлять информацию по результатам анализов и опросного листа (рис. 7). Ранее введенную информацию можно изменить, если обнаружена ошибка или какое-либо несоответствие в данных.

Таблица «*Опросник*» содержит следующую информацию об обследуемом: город проживания, место работы, занимаемую должность, стаж работы, вредные привычки (курение, алкоголь), информацию о перенесенных за последние две недели простудных заболеваниях, о приеме антибиотиков или витаминов за тот же период времени, а также о прохождении рентгенографического и флюорографического исследований в течение последних полугода. Помимо этого в Таблицу «*Опросник*» вносятся результаты тестов на стресс и тревожность. Все эти данные необходимо внести пользователю самостоятельно (рис. 8) и особое внимание уделить номеру образца буккального эпителия, который является основным идентификатором исследования для сотрудника, проводящего анализы. При добавлении опросника в базу данных ему автоматически присваивается идентификационный номер «*Oprosnik_ID*», который закрепляется за конкретным исследованием.

Таблица «*Буккальный эпителий*» содержит результаты анализа препаратов буккального эпителия, где определяются клетки с нормальным ядром,

Добавление нового опросника

ID: 1
Имя: Иван Иванович
Дата рождения: 1.1.1970
Пол: Мужской
Дата исследования: 1.3.2015
№ исследования: 1

№ бук. эпителия	1
Город	Городок
Место работы	Работа
Должность	Рабочий
Стаж работы	15
Курение	Курит
Алкоголь	Не употребляет
Простуда (2 нед.)	Нет
Антибиотики (2 нед.)	Нет
Витамины (2 нед.)	Да
Рентген (6 мес.)	Нет
Стресс год	
Стресс текущий	
Тест 1	
Тест 2	
Тест 3	

Назад Добавить

Апрель 2015. Разработка: Антон Бурцев

Рис. 8. Добавление нового опросника – Интерфейс пользователя.

кариолизисом, кариопикнозом, кариорексисом, конденсацией хроматина, вакуолизацией ядра, фрагментацией ядра, гиперхроматозом, краевым гиперхроматозом, атипичным ядром, микроядром, двумя ядрами, тремя ядрами, множеством ядер, ядерной почкой, насечка на ядре, перетяжкой ядра, протрузией ядра, круговой насечкой ядра, проторзией ядра по типу разбитое яйцо, клетки с перинуклеарной вакуолью и вакуолизацией цитоплазмы, а также количество инфицированных клеток. Все данные вводятся пользователем вручную. При добавлении результатов анализа буккального эпителия в базу данных ему автоматически присваивается идентификационный номер «*BukEpit_ID*», который закрепляется за конкретным исследованием.

В таблицу «*Лимфоциты*» заносится информация, получаемая при анализе препаратов лимфоцитов периферической крови человека. Определяются следующие виды клеток и их патологий: 2-ядерный лимфоцит, 2-ядерный лимфоцит с микроядром, одноядерный лимфоцит с микроядром, трех ядерный лимфоцит с микроядром, четырех ядерный лимфоцит с микроядром, трех ядерный лимфоцит, четырех ядерный лимфоцит, 2-ядерный лимфоцит с протрузией на одном из ядер, 2-ядерный лимфоцит с почкой на одном из ядер, 2-ядерный лимфоцит с насечкой на одном из ядер, 1-ядерный лимфоцит, неравномерное деление в 2-ядерном лимфоците по времени, неравномерное деление в 2-ядерном лимфоците по объему и иммунобласт. Также все данные вводятся пользователем вручную. При добавлении результатов анализа в базу данных запись автоматически получает идентификационный номер «*Limfo_ID*», который закрепляется за конкретным исследованием.

При подсчете лейкоцитарной формулы крови учитываются палочкоядерные, сегментоядерные, эозинофилы, моноциты, базофилы и лимфоциты. Полученные данные заносятся в таблицу «*Лейкоформула*». При добавлении результатов анализа в базу данных запись автоматически получает иденти-

The screenshot shows a web application interface for adding a new leukocyte formula. The interface is in Russian. At the top, there are tabs for 'Запрос' (Query), 'Исследования' (Studies), and 'Пользователи' (Users). The current user is 'Антон Бурцев' (Anton Burcev). The main form is titled 'Добавление новой лейкоформулы' (Adding a new leukocyte formula). It contains the following fields:

- Исследуемый: 1 (Patient)
- Имя: Иван Иванович (Name: Ivan Ivanovich)
- Дата рождения: 1.1.1970 (Date of birth: 1.1.1970)
- Пол: мужской (Sex: male)
- Дата исследования: 1.3.2015 (Date of study: 1.3.2015)
- ID исследования: 1 (Study ID: 1)
- № бук. эпителия: 1 (Buccal epithelium number: 1)

Below these fields is a table for entering leukocyte counts:

Палочки	1
Сегменты	58
Эозинофилы	2
Моноциты	8
Базофилы	0
Лимфоциты	31

At the bottom, there is a 'Сумма' (Sum) field with the value 100. There are 'Назад' (Back) and 'Добавить' (Add) buttons. The footer of the application says 'Анализ 2015. Разработчик: Антон Бурцев' (Analysis 2015. Developer: Anton Burcev).

Рис. 9. Добавление новой лейкоформулы – Интерфейс пользователя.

фикационный номер «*LFormula_ID*», который закрепляется за конкретным исследованием. Для контроля корректности ввода данных и исключения ошибки ввода в таблицах «*Буккальный эпителий*», «*Лимфоциты*» и «*Лейкоформула*» автоматически подсчитывает сумму введенных клеток (рис. 9).

В таблицу «*Иммунология*» заносится информация по результатам иммунологического анализа крови. При добавлении результатов в базу данных запись также автоматически получает идентификационный номер «*Immuno_ID*», который закрепляется за конкретным исследованием. При проведении анализа определяются следующие иммунологические показатели: лейкоциты (%), нейтрофильные гранулоциты (%), нейтрофильные гранулоциты (10⁹ клеток/л), сегментоядерные нейтрофилы (%), Сегментоядерные нейтрофилы (10⁹ клеток/л), палочкоядерные нейтрофилы (%), палочкоядерные нейтрофилы (10⁹ клеток/л), эозинофильные гранулоциты (%), эозинофильные гранулоциты (10⁹ клеток/л), базофильные гранулоциты (%), базофильные гранулоциты (10⁹ клеток/л), моноциты (%), моноциты (10⁹ клеток/л), лимфоциты (%), лимфоциты (10⁹ клеток/л), зрелые Т-лимфоциты CD3+ (%), зрелые Т-лимфоциты CD3- (10⁹ клеток/л), активированные лимфоциты CD3+CD25+ (%), активированные лимфоциты CD3+CD25+ (10⁹ клеток/л), активированные лимфоциты CD3+HLADRII (%), активированные лимфоциты CD3+HLADRII (10⁹ клеток/л), Т-хелперы 1 CD3+ CD4+Th1 (%), Т-хелперы 1 CD3+CD4+Th1 (10⁹ клеток/л), цитотоксические лимфоциты CD3+CD8+ (%), цитотоксические лимфоциты CD3+CD8+ (10⁹ клеток/л), интерлейкин-2 (пг/мл), интерлейкин-6 (пг/мл), интерлейкин-10 (пг/мл), интерферон–гамма (пг/мл), иммуноглобулины М (IgM) (г/л), иммуноглобулины G (IgG) (г/л), иммуноглобулины A (IgA) (г/л), иммуноглобулины E (IgE) (Ед/мл), раково-эмбриональный антиген (нг/мл), циркулирующие иммунные комплексы IgA (г/л), циркулирующие иммунные комплексы IgG (г/л), процент активных фагоцитов (%) и фагоцитарное число (шт.).

Формирование запроса в базе данных и вывод данных

Для формирования запроса по ранее введенной информации существует специальная форма, вызываемая нажатием кнопки «Запрос» (рис. 10). Для удобства использования запрос разделен на пять разделов, каждый из которых соответствует основным таблицам базы данных. В запросе представлены 97 различных параметров и в развернутом виде форма запроса занимает очень большое пространство. Поэтому для экономии места на экране разделы представлены в свернутом виде. Если у пользователя есть необходимость выбрать какой-либо параметр из этого раздела, то достаточно нажать на название раздела, и он раскроется. Выборка осуществляется даже при отсутствии выбранных параметров. В таком случае результатом запроса будет таблица с указанием порядкового номера, номера буккального эпителия и фамилии испытуемого.

Рис. 10. Частичная форма запроса – Интерфейс пользователя.

№	Бук.Эпит.	Фамилия	Пол	Стаж	Курение	Алкоголь	Простуда	Место работы	Палочки	Сегменты	Эозинофилы	Моноциты	Базофилы	Лимфоциты
1	1	Иванов	Мужской	15	Курит	Не пьет	Нет	Работа	0	0	0	0	0	0
2	2	Александрова	Женский	15	Не курит	Редко	Нет	ООО Работник	1	50	7	38	0	1
3	3	Сергеев	Мужской	20	Не курит	Не пьет	Да	ООО Работник	1	60	6	18	0	15

Рис. 11. Результат запроса – Интерфейс пользователя.

Массив данных, полученный в ходе формирования запроса можно экспортировать в файл формата Microsoft Excel (рис. 11). На сегодня в базу данных внесены данные 480 обследуемых людей, более 500 опросных листов, 236 результатов анализа буккального эпителия, 126 результатов анализа лейкоцитов человека, 385 результатов анализа лейкоформулы, 39 результатов иммунологических анализов.

Заключение

Разработана и апробирована реляционная база данных по цитогенетическим показателям для оперативного и удобного обмена информацией между специалистами НОМБП КНЦ РАН. Она поддерживает многопользовательский и сетевой режимы, в ней осуществлено разделение привилегий

и прав пользователей, осуществляется контроль действий пользователей, она обладает удобным интерфейсом ввода и вывода данных для пользователя, форма запроса является гибкой и универсальной, при этом удовлетворяет требованиям каждого конкретного пользователя, имеет возможность начальной математической обработки (нормирования) при формировании результатов запроса, совместима с операционной системой Windows, имеет возможность экспорта сформированных запрошенных данных в таблицу Excel. База данных разработана с привлечением минимума стороннего программного обеспечения и полностью удовлетворяет всем предъявленным к ней требованиям.

Список литературы

1. Горовая А.И., Климкина И.И. Использование цитогенетического тестирования для оценки экологической ситуации и эффективности оздоровления детей и взрослых природными адаптогенами // Цитология и генетика. 2002. № 5. С. 21-25.
2. Ингель Ф.И. Перспективы использования микроядерного теста на лимфоцитах человека, культивируемых в условиях цитокинетического блока. Ч. 2. Факторы среды и индивидуальные особенности в системе оценки нестабильности генома человека. Дополнительные возможности теста. Методика проведения экспериментов и цитогенетического анализа // Экологическая генетика. 2006. № 4. С. 38-53.
3. Петрашова Д.А., Белишева Н.К., Пелевина И.И. и др. Генотоксические эффекты в буккальном эпителии горняков, работающих в условиях облучения природными источниками ионизирующего излучения // Изв. Самарского НЦ РАН. 2011. Т. 13. № 1(7). С. 1792-1796.
4. Петрашова Д.А., Пожарская В.В., Завадская Т.С. и др. Цитогенетические эффекты воздействия природных источников ионизирующего излучения на работников горно-рудного производства Мурманской обл. // Вестник Уральской мед. акад. науки. 2014. № 1. С. 40-42.
5. Пожарская В.В., Петрашова Д.А., Белишева Н.К. и др. Микроядра в лимфоцитах периферической крови у работающих в горнорудном производстве Мурманской обл. // Physics of auroral phenomena. 38th Ann. seminar. 2-6 March 2015. Apatity, 2015. P. 67-68.
6. Nersesyan A.K., Ilyin A.I. The micronucleus assay in exfoliated human cells: a mini-review of papers from the CIS // Cytology and genetics. 2007. V. 41. N 2. P. 56-66.

О ПРОБЛЕМЕ АНАЛИЗА МНОГОФАКТОРНОГО ВОЗДЕЙСТВИЯ В ЦИТОГЕНЕТИЧЕСКИХ ИССЛЕДОВАНИЯХ НА ПРИМЕРЕ МИКРОЯДЕРНОГО ТЕСТА В КЛЕТКАХ БУККАЛЬНОГО ЭПИТЕЛИЯ ЧЕЛОВЕКА

Петрашова Д.А., Пожарская В.В.

Кольский научный центр РАН, Апатиты, petrashova@admksk.apatity.ru

Проведено исследование основных цитогенетических нарушений в буккальном эпителии человека в неоднородной выборке, полученной в ходе потокового обследования работников горно-обогатительного комплекса. Показано, что наиболее репрезентативной группой для анализа воздействия условий труда среди обследованных работников горно-рудного производства являются курящие мужчины в возрасте от 20 до 30 лет. Наибольшая частота встречаемости клеток с микроядрами в данной группе наблюдается при стаже работы от 1 до 3 лет, что соответствует периоду адаптивной перестройки организма человека в новой экологической зоне с субэкстремальными условиями среды.

Микроядерный тест на клетках человека характеризуется надежностью получаемых результатов, универсальностью объектов исследования, простотой по сравнению с другими методами определения повреждения ДНК, например, метафазным анализом, и в то же время не уступает им по чувствительности [4]. Однако, на получаемые результаты могут серьезно влиять такие факторы как пол, возраст, физиологический, иммунологический и психологический статус обследуемых людей, а также диета и вредные привычки. Эти факторы следует учитывать как при формировании групп для обследования, так и при статистической обработке данных и трактовке результатов [6]. Для учета максимального числа возможных воздействующих факторов при цитогенетических исследованиях на буккальном эпителии и лимфоцитах периферической крови человека в Научном отделе медико-биологических проблем адаптации человека в Арктике КНЦ РАН проводится комплексное обследование людей, которое включает в себя: интервьюирование по специально разработанному опроснику (на наличие вредных привычек и медикаментозного лечения), оценку иммунного статуса (лейкоцитарная формула крови или развернутая иммунограмма), ряд психологических тестов на адаптивность, тревожность, депрессивное состояние, стресс и определяется социально-экономический статус.

В данной работе предпринята попытка выделения факторов воздействия на частоту встречаемости основных цитогенетических нарушений в буккальном эпителии человека в неоднородной выборке, полученной в ходе потокового обследования работников горно-обогатительного комплекса, проводимого в рамках ежегодного медицинского осмотра.

Методы исследования

Материалом исследования служили образцы буккального эпителия работников горно-обогатительного комплекса (ГОК), работающих на произ-

водстве, связанном с добычей и обогащением лопаритовых руд (Ловозерский р-н, Мурманская обл.), которые, наряду с ценными металлами (Ti, Ta, Nb и др.), содержат примеси природных радионуклидов (^{238}U , ^{232}Th , ^{226}Ra), являющиеся источником смешанных видов ионизирующего излучения. Заряженные частицы оседают на пыли и взвешях, содержащихся в шахтном пространстве. Помимо этого в шахтах содержится радон в повышенных концентрациях. Первым барьером, возникающим на пути у канцерогенов, поступающих в организм при дыхании, с водой и с пищей являются клетки буккального эпителия [17]. Группа испытуемых состояла из 236 мужчин, работающих как на самом руднике, так и на обогатительной фабрике ГОКа. Возраст на момент обследования составлял от 21 до 68 лет, стаж работы – от 1 до 50 лет.

Взятие образцов буккального эпителия и процедуры приготовления препаратов проводили в соответствии с методикой, описанной в работе [9]. Анализ препаратов осуществлялся с помощью микроскопа AXIOSTAR PLUS (Karl Zeiss, Германия) (увеличение 15×40 ; 15×100) и Микмед-6 (ЛОМО, Россия) (увеличение 10×40 ; 10×100), оба микроскопа оснащены цифровыми камерами. Анализ частоты встречаемости клеток с генетическими нарушениями и цитотоксическими эффектами проводился на отдельно лежащих и распластанных клетках с подсчетом не менее 1000 клеток на каждом препарате. Микроядра идентифицировали как хроматиновые округлые тела с гладким непрерывным краем, размером не более $1/3$ ядра, лежащие отдельно от основного ядра, не преломляющие свет, с интенсивностью окрашивания и рисунком хроматина, как у основного ядра, и находящиеся в одной плоскости с ядром [20]. Кроме того, учитывались двуйдерные клетки, ядра с насечкой, кариопикноз, кариорексис, кариолизис, фрагментацию и вакуолизацию ядра, нарушения типа ядерных почек и апоптозные тельца. Помимо взятия образцов буккального эпителия обследуемые интервьюировались по специально разработанному опроснику на наличие вредных привычек и медикаментозного лечения. Все полученные данные вносились в специально разработанную реляционную многопользовательскую базу данных [10].

Статистическая обработка материала проводилась согласно рекомендациям, подготовленным на основе руководящих принципов для проведения исследований с использованием микроядерного теста, разработанных на втором заседании «Международной рабочей группы по оценке генотоксичности» (Вашингтон, США, 25-26.03.1999). Согласно данным рекомендациям, выбор статистических методов анализа должен определяться характером распределения. Особо отмечается, что статистическая значимость не должна быть единственным фактором для определения положительных результатов, руководствоваться необходимо биологическим смыслом обнаруженного явления [18]. Так, например, выбор коэффициента корреляции напрямую зависит от типа шкалы, в которой измерены переменные, числа варьирующих признаков в сравниваемых переменных и распределения переменных (табл.) [12].

Таблица. Критерии для проведения корреляционного анализа [12].

Типы шкал		Критерий
Переменная X	Переменная Y	
Интервальная или шкала отношений	Интервальная или шкала отношений	Коэффициент Пирсона (нормальное распределение)
Порядковая, интервальная или шкала отношений	Порядковая, интервальная или шкала отношений	Коэффициент Спирмена (отличное от нормального распределение)
Порядковая	Порядковая	(тау) τ -Кендалла, Гамма-критерий
Дихотомическая	Дихотомическая	Коэффициент ϕ , χ^2 с поправкой Йетса, точный критерий Фишера
Дихотомическая	Порядковая	Рангово-бисериальный коэффициент r_{rb}
Дихотомическая	Интервальная или шкала отношений	Бисериальный коэффициент r_{bis}
Интервальная или шкала отношений	Дихотомическая	Точный бисериальный коэффициент r_{pb}

Порядковая шкала описывает свойства, для которых имеют смысл не только отношение эквивалентности, но и отношение порядка по возрастанию или убыванию количественного проявления свойства. В такого рода шкалах, в принципе, нет возможности введения единицы измерений, также не имеют смысла суждения, во сколько раз больше или меньше проявления конкретных свойств. В порядковой шкале может иметь смысл нуль или его может не быть [7]. В нашем исследовании к такой шкале относится шкала употребления алкоголя обследуемых людей, где 0 – не употребляет алкоголь вообще; 1 – редко; 2 – раз в неделю; 3 – часто.

Интервальная шкала отличается от шкалы порядка тем, что для описываемого ею свойства имеют смысл не только отношения эквивалентности и порядка, но и пропорциональности или суммирования интервалов между различными количественными проявлениями свойства [7]. В качестве примера из нашей практики можно привести такие шкалы как уровень тревожности и стресса.

Шкала отношений описывает свойства ко множеству количественных проявлений к которым применимы отношения эквивалентности, порядка, пропорциональности или суммирования (а следовательно, и вычитания, и умножения). В шкале отношений существует естественный критерий нулевого количественного проявления свойства, то есть нуль имеет не условное значение, а вполне определенный физический смысл [7]. Это наиболее распространенная шкала, используемая в нашей работе. Примеры – возраст, стаж работы обследуемых, количество клеток без идентифицированных нарушений и с различными патологиями, показатели иммунограммы и т.д.

Номинальная шкала характеризуется только отношением эквивалентности какого-либо качественного проявления свойства [7]. Простейшим примером номинальной шкалы является – дихотомическая шкала. В наших исследованиях к такой шкале относится пол – мужской и женский.

Характеристика группы горных рабочих, исследованных в 2013 г.

Группа испытуемых (236 человек) представлена работниками рудника и фабрики (65 % и 35 %, соответственно). Возрастное распределение на руднике более равномерное, чем на фабрике (рис. 1). На фабрике преобладают работники в возрасте старше 40 лет (60 %).

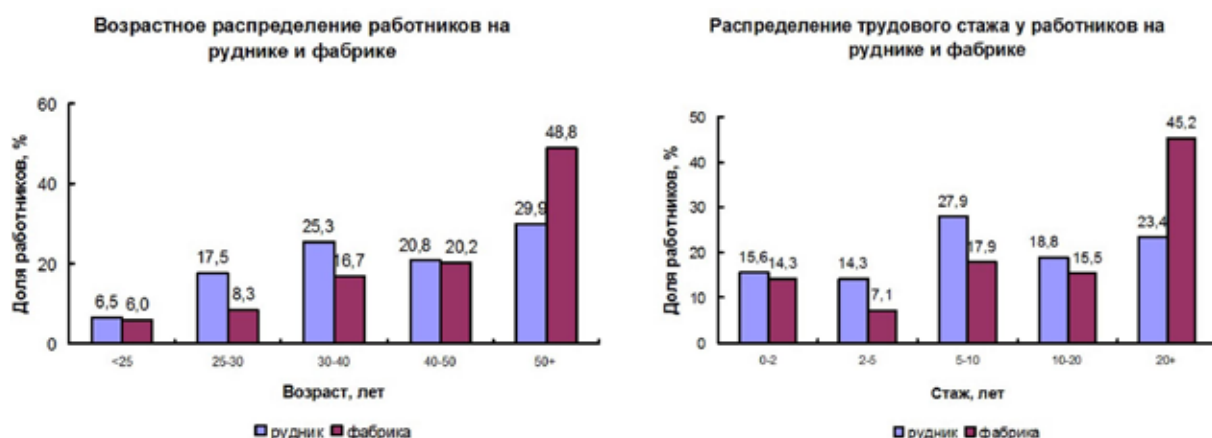


Рис. 1. Возрастное распределение работников-доноров на руднике и фабрике.

По результатам анкетирования 33 % обследованных работников рудника не курят, из них 18 % раньше курили, но избавились от вредной привычки. На фабрике доля некурящих на 10 % выше и составляет 43 %, из них 16 % раньше курили. Доля курящих и не курящих работников на руднике и фабрике составляет 67 % и 57 %, соответственно.

Относительно употребления алкоголя получены довольно благополучные данные. Так, 16 % опрошенных работников рудника и 32 % работников фабрики не употребляет алкоголь, употребляют редко – 60 % и 52 %, соответственно.

В целом, в исследуемой группе 24 % испытуемых в течение двух недель до взятия биологического материала переболели простудными заболеваниями, 7 % употребляли антибиотики. Рентгенографическому обследованию в течение полугода подверглись 6 % работников. Витаминные препараты принимало 32 % респондентов.

Таким образом, сформирована представительная выборка по работникам горно-рудного производства, в которой без ущерба для репрезентативности можно выделить группы по месту работы (фабрика и рудник), вредным привычкам (курит/не курит, по мерам употребления алкоголя), а также исключить из выборки лиц, употреблявших антибиотики в течение 2 недель до обследования и подвергшихся рентгенографическому обследованию в течение полугода.

Формирование выборки для анализа

Поскольку обследование работников ГОК проводилось в рамках ежегодного медицинского осмотра, сформированная выборка является неоднородной. Поэтому выборку разделили на группы согласно возможным действующим факторам. В данной статье будут рассмотрены такие цитогенетические маркеры как количество клеток с микроядрами (промилле) и количество клеток с нарушением пролиферации (промилле). Микроядра (рис. 2.1, 2.2, 2.3) являются обособленной частью генетического материала за пределами основного ядра, которая либо представлена фрагментом хромосомы, образовавшимся в результате повреждения ДНК, либо представлена одной или

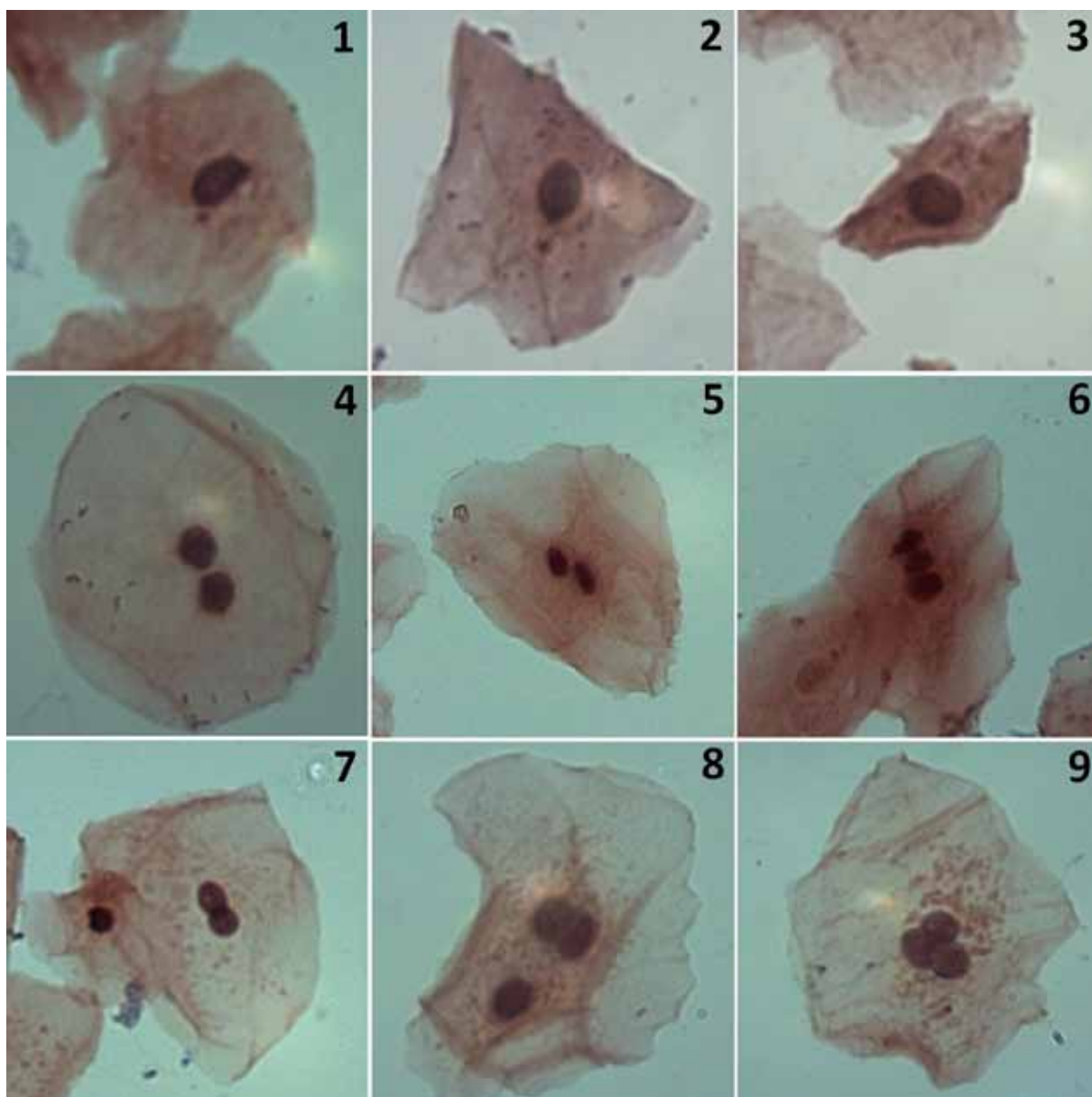


Рис. 2. Микрофотографии клеток буккального эпителия человека с микроядрами и нарушением пролиферации. Микмед-6 (ЛОМО, Россия).

1-3 – клетки с микроядром, 4, 5 – двуядерные клетки, 6 – трехъядерная клетка, 7 – клетка с круговой насечкой ядра, 8 – двуядерная клетка с круговой насечкой одного ядра, 9 – клетка с тремя круговыми насечками ядра.

несколькими целыми хромосомами, отставшими в анафазе и не вошедшими в основное ядро [11]. Повышение частоты клеток с микроядрами в ротовой полости является самым ранним проявлением риска рака ротовой полости [16]. Клетки с нарушением пролиферации представлены многоядерными клетками (рис. 2.4, 2.5, 2.6) и клетками с круговой насечкой ядра (рис. 2.7, 2.9), иногда эти нарушения комбинируются (рис. 2.8). Многоядерные клетки образуются преимущественно в результате полиплоидирующего ацитокINETического митоза [2]. Частота встречаемости двуядерных клеток может повышаться в ответ на облучение организма [19].

На первом этапе проверена гипотеза о влиянии места работы (рудник и фабрика) на количество клеток с микроядрами и количество клеток с нарушением пролиферации на 1000 клеток. Имеющиеся выборки по руднику и фабрике проверили на соответствие нормальному распределению с помощью критерия χ^2 , чтобы определиться с использованием параметрических или непараметрических статистических методов. Установлено, что исследуемые выборки по количеству клеток с микроядрами и клеток с нарушением пролиферации не соответствуют нормальному распределению ($p < 0.00001$), поэтому для сравнения выборок использовались непараметрические критерии. Распределения данных выборок соответствует распределению Пуассона, которое характерно для распределения редких явлений в выборке [5]. В качестве критерия сравнения был выбран критерий U Манна-Уитни. Данный метод сравнения двух выборок признается наиболее чувствительным, мощным и в то же время достаточно простым для расчетов [5]. Итак, нулевая гипотеза заключается в том, что частоты встречаемости описанных выше патологий на фабрике и руднике не отличаются. Критерий Манна-Уитни показал, что как для количества клеток с микроядрами ($U=168$, $p=0.534$), так и для количества клеток с нарушением пролиферации ($U=240$, $p=0.687$), между фабрикой и рудником нет достоверных отличий, то есть нулевая гипотеза подтверждается. Поэтому было решено объединить выборки по фабрике и руднику. Несмотря на различные условия труда на руднике и фабрике, а также на различных должностях, отсутствие отличий вполне можно объяснить. Так как, работники, проработавшие некоторое время на руднике и, по результатам медосмотра, не могут больше там работать, переводятся на фабрику на должности, соответствующие их группе здоровья, в тоже время, большая часть руководителей, которые на данный момент занимаются административной работой, в прошлом работали на рабочих должностях и, соответственно, за этот период времени подверглись воздействию вредных факторов.

Согласно литературным данным, на количество микроядер в буккальном эпителии оказывает влияние возраст обследуемых [3, 8, 15, 14] и курение [1]. Следовательно, чтобы минимизировать влияние этих факторов на цитогенетические показатели, для дальнейшего анализа необходимо было взять определенную возрастную группу, среди которой выбрать либо куря-

щих, либо не курящих мужчин. Наиболее подходящей группой оказались курящие мужчины в возрасте от 20 до 30 лет. В данной возрастной категории (более 20 % от всей выборки) меньше вероятность того, что обследуемый менял место работы по состоянию здоровья или благодаря карьерному росту, а также меньше груз патологий, накопленных вследствие пережитых за жизнь стрессовых воздействий. Таким образом, анализу подверглась группа курящих поскольку на их долю приходится около 80 % от мужчин в возрасте 20-30 лет.

На диаграмме рассеивания частоты встречаемости клеток с микроядрами и с нарушением пролиферации в зависимости от стажа работы обследуемых видно, что наибольшее количество клеток с данными патологиями встречается при стаже работы от 1 до 3 лет (рис. 3), что согласуется с литературными данными о том, что у людей цикл адаптивной перестройки в новой экологической и климатической зоне с субэкстремальными условиями длится 2-3 года [13]. Начало работы в условиях горнорудного производства можно отнести к новому стрессовому воздействию на организм, в том числе и на клеточном уровне.

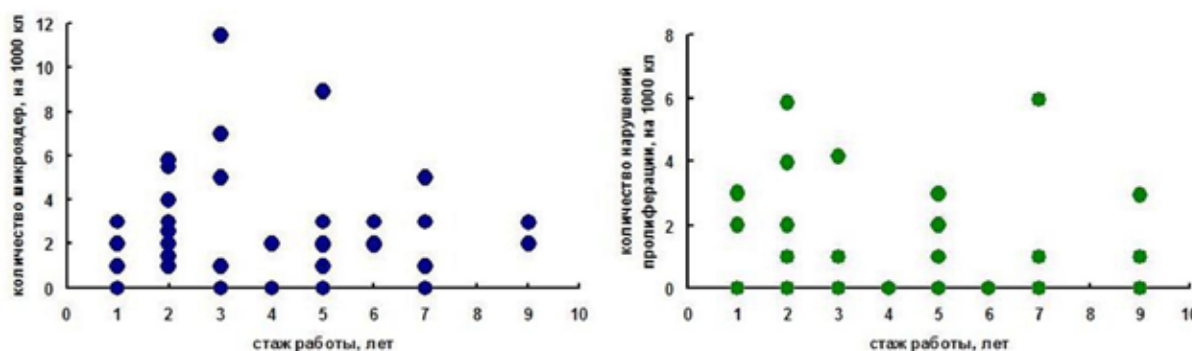


Рис. 3. Зависимость количества клеток с микроядрами и нарушением пролиферации у обследуемых от стажа их работы на горно-рудном производстве.

Показано, что при стаже работы от четырех и более лет, количество клеток с микроядрами со стажем работы увеличивается менее резко. Это, вероятно, связано с завершением адаптивных перестроек и стабилизацией внутренних регуляторных механизмов. Естественно, что реакция организма на стрессовые факторы определяется индивидуальными особенностями каждого конкретного человека. Следовательно, при подобных исследованиях одновременно могут быть обнаружены люди как с отсутствием или малым количеством цитогенетических нарушений при большом стаже воздействия вредных факторов, так и люди с достаточно большим количеством цитогенетических нарушений при малом стаже воздействия. Последние находятся в так называемой зоне риска, когда возрастает вероятность возникновения онкологических заболеваний. Поэтому важно не просто выявлять стрессовые факторы, приводящие к нарушениям, а при выявлении людей с высокой частотой патологий, рекомендовать пройти им дополнительные

обследования у врача-онколога, а также провести контрольное взятие буккального эпителия через некоторое время для подтверждения патологии и исключения действия временных факторов.

Список литературы

1. Агбалян Е.В., Шинкарук Е.В. Характеристика генотоксических и цитотоксических эффектов малых доз кадмия // Межд. ж-л прикладных и фундаментальных исследований. 2015. № 6. С. 427-451.
2. Бродский В.Я., Урываева И.В. Клеточная полиплоидия. Пролиферация и дифференцировка. М.: Наука, 1981. 237 с.
3. Буторина А.К., Калаев В.Н., Карпова С.С. Влияние пола и возраста детей на частоту встречаемости микроядер в буккальном эпителии ротовой полости // Вестник ВГУ. Сер. Химия. Биология. 2000. № 2. С. 143-145.
4. Горовая А.И., Климкина И.И. Использование цитогенетического тестирования для оценки экологической ситуации и эффективности оздоровления детей и взрослых природными адаптогенами // Цитология и генетика. 2002. № 5. С. 21-25.
5. Ивантер Э.В., Коросов А.В. Введение в количественную биологию. Учеб. пособие. Петрозаводск: ПетрГУ, 2003. 304 с.
6. Ингель Ф.И. Перспективы использования микроядерного теста на лимфоцитах человека, культивируемых в условиях цитокинетического блока. Ч. 2. Факторы среды и индивидуальные особенности в системе оценки нестабильности генома человека. Дополнительные возможности теста. Методика проведения экспериментов и цитогенетического анализа // Экол. генетика. 2006. № 4. С. 38-53.
7. Кноринг В.Г. Теоретические основы информационно-измерительной техники. Основные понятия теории шкал. Конспект лекций. Л.: Изд-во ЛПИ, 1983. 150 с.
8. Маймулов В.Г., Китаева Л.В., Верещагина Т.В. и др. Цитогенетические нарушения в соматических клетках у детей, проживающих в районах с различной интенсивностью загрязнения окружающей среды // Цитология. 1998. № 7. С. 686-689.
9. Мейер А.В., Дружинин В.Г., Ларионов А.В. и др. Генотоксические и цитотоксические эффекты в буккальных эпителиоцитах детей, проживающих в экологически различающихся районах Кузбасса // Цитология. 2010. Т. 52, № 4. С. 305-310.
10. Петрашова Д.А., Бурцев А.В. Разработка многопользовательской базы данных по цитогенетическим исследованиям для систематизации полученного фактического материала и оптимизации его обработки // Математические исследования в естественных науках. Тр. XII Всерос. научн. школы. Апатиты: Геол. ин-т КНЦ РАН, Кольское отд. РМО, 2015. В печати.
11. Сычева Л.П. Биологическое значение, критерии определения и пределы варьирования полного спектра кариологических показателей при оценке цитогенетического статуса человека // Мед. генетика. 2007. № 6(11). С. 3-11.

12. Трухачева Н.В. Математическая статистика в медико-биологических исследованиях с применением пакета Statistica. М.: ГЭОТАР-Медиа, 2013. 384 с.
13. Физиология человека / Ред. В.М.Покровский, Г.Ф.Коротько. М., 2003. 656 с.
14. Юрченко В.В., Подольная М.А., Ингель Ф.И. и др. Микроядерный тест на буккальных эпителиоцитах человека // Полиорганный микроядерный тест в эколого-гигиенических исследованиях. М.: Гениус, 2007. 312 с.
15. Bukvic N., Gentile M., Susca F. *et al.* Sex chromosome loss, micronuclei, sister chromatid exchange and aging; a study including 16 centenarians // *Mutat. Res.* 2001. V. 498, N 12. P. 159-167.
16. Cardozo R.S, Takahashi-Hyodo S., Peitl P. Jr. *et al.* Evaluation of chromosomal aberrations, micronuclei and sister chromatid exchanges in hospital workers chronically exposed to ionizing radiation // *Teratog. Carcinog. Mutagen.* 2001. N 21. P. 431-439.
17. Holland N., Bolognesi C., Kirsch-Volders M. *et al.* The micronucleus assay in human buccal cells as a tool for biomonitoring DNA damage. The HUMN project perspective on current status and knowledge gaps // *Mutat. Res.* 2008. V. 659, N 1-2. P. 93-108.
18. Kirsch-Volders M., Sofuni T., Aardema M. *et al.* Report from the in vitro Micronucleus assay working group // *Envir. Molec. Mutagen.* 2000. V. 35. P. 167-172.
19. Koss L.G. Diagnostic cytology and its histopathologic bases. Toronto: J.B. Lippincott Co, 2000. 1266 p.
20. Tolbert P.E., Shy C.M., Allen J.W. Micronuclei and other nuclear anomalies in buccal smears: methods development // *Mut. Res.* 1992. V. 271. P. 69-77.

РОЛЬ ОСОБЕННОСТЕЙ УЧЕТА ЦИТОГЕНЕТИЧЕСКИХ АНОМАЛИЙ ПРИ ОЦЕНКЕ ВОЗДЕЙСТВИЯ ГЕНОТОКСИЧЕСКИХ ФАКТОРОВ ОКРУЖАЮЩЕЙ СРЕДЫ НА ПРИМЕРЕ ЛИМФОЦИТОВ КРОВИ ЧЕЛОВЕКА

Пожарская В.В., Петрашова Д.А.

Кольский научный центр РАН, Апатиты, vika_pozharskaja@mail.ru

Рассмотрены дополнительные возможности выявления цитогенетических аномалий при использовании микроядерного теста на лимфоцитах периферической крови для оценки воздействия генотоксических факторов окружающей среды на организм человека.

На организм человека постоянно воздействует множество факторов, в результате их мутагенного действия может нарушаться целостность генетических структур клеток. Такие повреждения генома как ацентрические фрагменты хромосом или целые хромосомы, отставшие в ана-телофазе митоза от

веретена деления и не вошедшие в дочерние ядра способствуют образованию микроядер (МЯ) в лимфоцитах человека. Микроядра (МЯ) представляют собой внеядерные тельца, которые формируются в делящихся клетках из ацентрических хромосомных фрагментов или целых хромосом, которые не были включены в дочерние ядра. Они покрыты ядерной мембраной, имеют морфологию интерфазного ядра, при этом МЯ значительно меньше основного ядра, существуют в клетке отдельно от основного ядра или связаны с ним хроматиновым мостом [23]. Таким образом, микроядро свидетельствует о количественных изменениях содержания в ядре живой клетки.

В конце прошлого века был разработан микроядерный тест (МЯТ) с цитокинетическим блоком в присутствии цитохалазина В, блокирующего деление цитоплазмы и приводящего к образованию двуядерных, а в дальнейшем и полиядерных клеток [22, 25, 32, 37, 49]. Тест позволяет накапливать клетки, содержащие генетические повреждения. Анализируется наличие микроядер в двуядерных клетках, прошедших один цикл деления. МЯТ широко применяется для оценки генотоксичности химических и физических факторов окружающей среды. В ходе его применения в цитогенетических исследованиях было накоплено достаточно сведений о релевантности его использования при оценке генетических эффектов радиации [9, 17, 20, 29, 31, 33, 41, 43, 44], лекарственной и радиотерапии [15, 21], космической радиации [30], пестицидов [27, 38], тяжелых металлов и их солей [48, 51], органических генотоксических соединений [18, 28] и других воздействий. Доказана связь спонтанного уровня микроядер с полом и возрастом [3, 4, 19], наличием опухолей [10, 11, 49] и воспалительных процессов в организме [8], а также с экспозицией генотоксическими факторами окружающей среды и производства [34, 45, 47], изменения условий качества жизни [6, 16, 36, 40], наличие высокого эмоционального напряжения [7].

В настоящей работе мы рассматриваем возможности использования микроядерного теста при оценке воздействия генотоксических факторов окружающей среды на организм горняков, подвергающихся хроническому действию смешанного ионизирующего излучения.

Материал и методы

Материалом исследования служили лимфоциты периферической крови горняков, работающих под землей в условиях повышенного содержания радона (Мурманская область). Взятие биологического материала проводилось в рамках ежегодного медицинского осмотра работников горнорудного производства. Все испытуемые были ознакомлены с целью и условиями исследования и дали на участие свое согласие. Данные получены в результате анализа образцов биологического материала 68 испытуемых (возраст от 19 до 66 лет, стаж работы в условиях хронического облучения от 1 года до 45 лет). Для определения генотоксических эффектов производственной среды было оценено содержание микроядер в лимфоцитах периферической крови горнорабочих, а также число клеток содержащих 1, 2, 3, 4 ядра. Одновозрастная когорта сравнения

была сформирована из группы условно здоровых людей, не занятых в горно-рудном производстве и проживающих в близких социально-экономических условиях, имеющих одинаковый уровень медицинского обслуживания (15 человек). Возраст добровольцев сравниваемых когорт на момент исследования составлял от 19 лет до 31 года.

МЯТ проводили на ФГА-стимулированных лимфоцитах крови человека в соответствии с методикой [24, 25, 50]. Долю двуядерных клеток с микроядрами оценивали относительно 1000 двуядерных клеток, цитокинез которых был остановлен цитохалазином В (ЦХВ), т.е. в клетках, проходивших первый митоз между 48 и 72 ч после стимуляции ФГА [12]. Оценка частоты встречаемости клеток с генетическими и цитологическими нарушениями [46] проводили на основе анализа не менее 1000 клеток на каждом препарате [13]. Анализ препаратов проводили с помощью микроскопа AXIOSTAR PLUS (Karl Zeiss, Германия) (об. 15 × ок. 40, 100), оснащенного видеокамерой.

Результаты и обсуждение

Классическая методика получения результатов МЯТ предполагает получение двух видов данных: число двуядерных лимфоцитов и число двуядерных лимфоцитов с микроядром (рис. 1).



Рис. 1. Лимфоцит с двумя ядрами и микроядром.

Анализ препаратов лимфоцитов периферической крови группы лиц, подверженных хроническому воздействию повышенной концентрации радона показал, что среднее число двуядерных клеток без идентифицированных нарушений, составляло 983.9 ± 0.9 на 1000 двуядерных клеток (96.3-99.5 % от общего числа двуядерных лимфоцитов). Среднее число лимфоцитов с микроядрами (МЯ) достигало 16.1 ± 0.9 клеток (0.5-3.6 %), что соответствует значениям характерным для жителей российских городов – от 8.6 до 17.7 [14; 1]. В проанализированных пре-

паратах отмечается стабильно высокое число клеток с МЯ у мужчин со стажем работы 20-30 лет (в некоторых случаях до 30 двуядерных клеток с МЯ на 1000) (табл. 1).

Сравнение когорты обследованных горняков в возрасте от 19 до 31 г. (стаж 1-7 лет) с одновозрастной группой жителей г. Апатиты не занятых в горнорудном производстве показало, что у подверженных хроническому облучению лиц наблюдается большее число клеток с микроядром (13.6 ± 2.5 против 8.9 ± 1.3 в контрольной группе) (табл. 2). В когорте сравнения отме-

чается статистическая значимость изменения числа бинуклеарных лимфоцитов с МЯ с увеличением возраста ($R = -0.57$, $p = 0.02$).

Таблица 1. Распределение клеток с микроядром у работников, подверженных хроническому облучению природными источниками смешанного ионизирующего излучения в зависимости от стажа работы.

Стаж	Число двуядерных лимфоцитов без МЯ на 1000 клеток	Число двуядерных лимфоцитов с МЯ на 1000 клеток
1-5	984.5 ± 2.2	15.5 ± 2.2
1-10	983.5 ± 1.4	16.5 ± 1.4
10-20	984.7 ± 1.8	15.3 ± 1.8
20-30	983.1 ± 2.5	16.9 ± 2.5
30-40	986.0 ± 1.5	14.0 ± 1.5

Таблица 2. Сравнение числа лимфоцитов с МЯ на 1000 клеток у подверженных хроническому облучению и контрольной группы.

		Число бинуклеарных лимфоцитов без МЯ на 1000 клеток	Число бинуклеарных лимфоцитов с МЯ на 1000 клеток
Подверженные хроническому облучению (n=12)	$M \pm m$	986.4 ± 2.5	13.6 ± 2.5
	min – max	965 - 995	5 - 35
Контроль (n=15)	$M \pm m$	991.1 ± 1.3	8.9 ± 1.3
	min – max	983 - 994	6 - 17

Таким образом, у мужчин подверженных хроническому облучению природными источниками смешанного ионизирующего излучения выявлено более высокое число лимфоцитов периферической крови с микроядрами по сравнению с одновозрастной группой лиц, не имеющих в анамнезе факторов радиационных воздействий. Присутствие микроядер в лимфоцитах свидетельствует о повреждении хромосом [35], поскольку известно, что микроядра являются небольшими структурами, образующимися в результате отставания хромосом и их фрагментов в процессе митотического деления.

Помимо получения данных, свидетельствующих о количественных изменениях ДНК в клетках лимфоцитов, МЯТ также может применяться для оценки состояния организма человека с позиций системного подхода. В зависимости от продолжительности клеточного цикла, зависящего от возраста донора, а также от воздействий, которым он подвергался, в каждой культуре всегда присутствуют клеточные фракции с различным числом ядер. Число ядер в клетке отражает скорость их пролиферации в культуре [39]. Международный протокол МЯТ рекомендует определять частоту одноядерных клеток с МЯ как один из признаков нестабильности генома. В исследованиях ряда авторов [2, 5, 6] установлено, что спонтанная частота двуядерных клеток отражает физиологическое состояние организма, а частоты двуядерных клеток

с повреждениями связаны с концентрацией ферментов антиоксидантной защиты и иммунным статусом донора.

Продолжительность культивирования клеток для использования ЦХВ рассчитана таким образом, чтобы на момент фиксации максимальное количество клеток способных к делению прошло 1 митоз и содержало 2 ядра. Наличие в пуле культивированных лимфоцитов клеток с разным количеством ядер может быть использовано для оценки нестабильности генома человека посредством определения их численности и уровня повреждения. Присутствие на момент фиксации в культуре лимфоцитов человека клеток содержащих более 2 ядер свидетельствует о прохождении ими больше, чем одного митоза за время культивирования в присутствии ЦХВ, т.е. у таких клеток продолжительность клеточного цикла меньше, чем у клеток содержащих 2 ядра. Клетки содержащие 1 ядро свидетельствуют либо о том, что клетка не чувствительна к митогенному сигналу, либо о том, что митоз ею был пройден до добавления ЦХВ. Повышенная частота полиядерных клеток может являться серьезным прогностическим признаком опухолевой трансформации, особенно если в этих клетках обнаруживается высокое содержание микроядер [42]. Ускорение пролиферации лимфоцитов может рассматриваться как свидетельство нестабильности генома [26]. В работе было оценено содержание на момент фиксации в пуле культивированных лимфоцитов клеток с разным количеством ядер (табл. 3).

Таблица 3. Представленность лимфоцитов с разным числом ядер в культурах цельной крови.

	1-яд. кл.	2-яд. кл.	3-яд. кл.	4-яд. кл.
Подверженные хроническому облучению (n = 12)	359.3 ± 39.7	948.0 ± 18.6	9.8 ± 2.0	1.8 ± 0.6
Контроль (n = 15)	361.4 ± 37.4	416.9 ± 65.0	3.4 ± 0.7	0.1 ± 0.1

Меньшее число полиядерных клеток в контрольной группе свидетельствует о большей продолжительности клеточного цикла относительно группы добровольцев подверженных хроническому облучению. Это подтверждает рассчитанный индекс пролиферации (0.91 ± 0.32 для контрольной группы против 1.98 ± 0.02 для группы горняков). Индекс пролиферации рассчитывали по формуле: индекс пролиферации = (число 1-яд. кл. + $2 \times$ число 2-яд. кл. + $3 \times$ число полияд. кл.) / число проанализированных клеток.

Заключение

Исследования показали, что дополнительный подсчет на препаратах 1, 3, 4-ядерных клеток, помимо 2-ядерных, позволяет выявлять больший спектр цитогенетических аномалий при использовании микроядерного теста на лимфоцитах периферической крови для оценки воздействия генотоксических факторов окружающей среды на организм человека. Цитогенетический анализ

нетические особенности в лимфоцитах периферической крови, вызванные облучением смешанных источников ионизирующего излучения природного происхождения, у лиц подверженных данному воздействию в период работы, проявляются в более высоком числе двоядерных лимфоцитов с микроядрами относительно одновозрастной группы лиц, не имеющих в анамнезе факторов радиационных воздействий. Возрастание числа полиядерных клеток в группе, по сравнению с контрольной, может свидетельствовать о воздействии радиации на процесс цитокинеза, нарушение которого может приводить к появлению многоядерных клеток. Учет всех типов лимфоцитов в культурах цельной крови показал, что в крови контрольной группы число полиядерных клеток меньше, чем у добровольцев, подверженных хроническому облучению. Это свидетельствует об уменьшении продолжительности клеточного цикла у группы горняков. Изменение продолжительности клеточного цикла, образование большого числа полиядерных клеток в культуре с цитохалазином В является одним из признаков нестабильности генома. Другими исследователями [5] показано, что ускоренно делящиеся клетки являются наиболее радиочувствительными относительно двоядерных. Все это подтверждает необходимость оценки в ходе исследований всех типов клеток лимфоцитов в культуре для более полной оценки признаков нестабильности генома обследуемого человека.

Список литературы

1. Ахмадуллина Ю.Р., Аклеев А.В. Оценка уровня лимфоцитов периферической крови с микроядрами у потомков первого поколения хронически облученных отцов // Вестник Челябинского гос. ун-та. 2013. №. 2. С. 97-98.
2. Гомес Л.А., Ярцев М.Н., Хахалин Л.Н. и др. Клинико-иммунологическая характеристика некоторых иммунодефицитных синдромов с ведущей Т-клеточной недостаточностью // Вопр. охр. мат. и дет. 1989. № 2. С. 13-16.
3. Гребенюк А.Н., Беженарь В.Ф., Колюбаева С.Н. Показатели цитогенетической нестабильности у женщин участниц ликвидации последствий аварии на Чернобыльской АЭС и их детей // Межд. конгр. «Эколого-социальные вопросы защиты и охраны здоровья молодого поколения на пути в XXI в.». СПб., 1998. С. 148-150.
4. Гребенюк А.Н., Колюбаева С.Н., Беженарь В.Ф. и др. Цитогенетическая оценка воздействия факторов Чернобыльской аварии на женщин и детей // Межд. конф. «Пробл. радиац. генетики на рубеже веков». М., 2000. С. 231-232.
5. Ингель Ф.И. Перспективы использования микроядерного теста на лимфоцитах человека, культивируемых в условиях цитокинетического блока. Ч. 1. Пролиферация клеток / Экол. генетика. 2006. Т. 4, № 3. С. 38-54.
6. Ингель Ф.И. Перспективы использования микроядерного теста на лимфоцитах человека, культивируемых в условиях цитокинетического блока. Ч. 2. Факторы среды и индивидуальные особенности в системе нестабильности генома человека. Дополнительные возможности теста / Экол. генетика. 2006. Т. 4, № 4. С. 38-54.
7. Ингель Ф.И., Кривцова Е.К., Юрцева Н.А. и др. Учёт эмоционального напряжения взрослых и детей при оценке влияния факторов окружающей

среды на нестабильность и чувствительность генома. Итоги и перспективы // Гигиена и санитария. 2011. № 5. С. 44-48.

8. Калаев В.Н., Буторина А.К., Кудрявцева О.Л. Частота встречаемости клеток с микроядрами в плоском эпителии, полученном из соскобов с шейки матки женщин детородного возраста при различных физиологических состояниях, в норме и при воспалении // Естествознание и гуманизм. 2006. Т. 3, № 2. С. 22 -23.

9. Колюбаева С.Н., Ракецкая В.В., Мясникова Л.В. и др. Использование микроядерного теста для индикации пострадационных эффектов у человека. Метод. рекомендации. М.: Минздрав РФ, 1991. 12 с.

10. Колюбаева С.Н., Мясников Л.В., Абиссова Н.А. и др. Характеристика некоторых цитогенетических показателей в диагностике злокачественных лимфом // Рос. симп. «Морфологические, иммунологические и молекулярно-биологические аспекты идентификации гемобластозов и родственных заболеваний». Сочи, 1999. С. 29.

11. Новик А.А., Мельниченко В.Я., Колюбаева С.Н. и др. Значимость цитогенетических исследований при диагностике неходжкинских лимфом. Метод. рекомендации. СПб.: ВМедА, 2000. 16 с.

12. Пелевина И.И., Афанасьев Г.Г., Алещенко А.В. и др. Молекулярно-клеточные последствия аварии на ЧАЭС // Радиационная биология. Радиоэкология. 2011. Т. 51, № 1. С. 154-161.

13. Петрашова Д.А., Белишева Н.К., Пелевина И.И., Мельник Н.А., Зользер Ф. Генотоксические эффекты в буккальном эпителии горняков, работающих в условиях облучения природными источниками ионизирующего излучения // Известия Самарского научного центра Российской академии наук. 2011, Т. 13, №1(7). С. 1792-1796.

14. Серебряный А.М., Аклеев А.В., Алещенко А.В. и др. Распределение индивидуумов по спонтанной частоте лимфоцитов с микроядрами. Особенности и следствия // Цитология. 2011. Т. 53, № 1. С. 5-9.

15. Andreassi M. G., Picano E., Del Ry S. *et al.* Chronic long-term nitrate therapy: possible cytogenetic effect in humans? // Mutagenesis. 2001. V. 16. N 6. P. 517-521.

16. Benites C.I., Amado L.L., Vianna R.A. *et al.* Micronucleus test on gas station attendants // Genet. Mol. Res. 2006. V. 5. N 1. P. 45-54.

17. Boreham D.R., Dolling J.A., Maves S.R. *et al.* Dose-rate effects for apoptosis and micronucleus formation in gamma-irradiated human lymphocytes // Radiat Res. 2000. V. 153, N 5. Pt. 1. P. 579-586.

18. Bozsakyova E., Chalupa I., Sebova L. *et al.* Chromosomal aberrations, sister chromatid exchanges and micronuclei induced by pentoxifylline in in vitro cultivated Chinese hamster cells (V79) and human blood lymphocytes // Mutat. Res. 2001. V. 18. N 1-2. P. 63-70.

19. Bukvic N., Gentile M., Susca F. *et al.* Sex chromosome loss, micronuclei, sister chromatid exchange and aging: a study including 16 centenarians // Mutat. Res. 2001. V. 498. N 12. P. 159-167.

20. Chang W.P., Tsai M.S., Hwang J.S. *et al.* Follow-up in the micronucleus frequencies and its subsets in human population with chronic low-dose gamma-irradiation exposure // Mutat. Res. 1999. V. 428. N 1-2. P. 99-105.

21. Elsendoorn T.J., Weijl N.I., Mithoe S. *et al.* Chemotherapy-induced chromosomal damage in peripheral blood lymphocytes of cancer patients supplemented with antioxidants or placebo // *Mutat. Res.* 2001. V. 498. N 1-2. P. 145-158.
22. Fenech M. A mathematical model of the in vitro micronucleus assay predicts false negative results if micronuclei are not specifically scored in binucleated cells or in cells that have completed one nuclear division // *Mutagenesis.* 2000. N 4. P. 329-336.
23. Fenech M. Paper // *Mutat. Research.* 2000. V. 455. P. 81-95.
24. Fenech M., Bonassi S., Turner J. *et al.* Human Micro Nucleus project. Intra- and inter-laboratory variation in the scoring of micronuclei and nucleoplasmic bridges in binucleated human lymphocytes. Results of an international slide-scoring exercise by the HUMN project // *Mutat. Res.* 2003. V. 534. N 1-2. P. 45-64.
25. Fenech M., Morley A. Solutions to the kinetic problem in the micronucleus assay // *Cytobios.* 1985. V. 43. N 172-173. P. 233-246.
26. Feuerstein N., Sahai A., Anderson W.B. *et al.* Differential phosphorylation events associated with phorbol ester effects on acceleration versus inhibition of cell growth // *Cancer Res.* 1984. V. 44. N 11. P. 5227-33.
27. Garaj-Vrhovac V., Zeljezic D. Cytogenetic monitoring of croatian population occupationally exposed to a complex mixture of pesticides // *Toxicology.* 2001. V. 165. N 2-3. P. 153-162.
28. Gonzalez Borroto J.I., Creus A., Marcos R. Genotoxic evaluation of the furylethylene derivative 2-furyl-1-nitroethene in cultured human lymphocytes // *Mutat. Res.* 2001. V. 497. N 1-2. P. 177-184.
29. He J.L., Jin H.Y., Jin L.F. *et al.* Monitoring of human exposure to radiation with the binucleated lymphocyte micronucleus assay // *Biomed. Environ. Sci.* 2000. V. 13. N 11. P. 32-66.
30. Heimers A. Cytogenetic analysis in human lymphocytes after exposure to simulated cosmic radiation which reflects the inflight radiation environment // *Int. J. Radiat. Biol.* 1999. V. 75. N 6. P. 691-698.
31. Joksic G., Petrovic S. Lack of adaptive response of human lymphocytes exposed in vivo to low doses of ionizing radiation // *J. Environ. Pathol. Toxicol. Oncol.* 2004. V. 23. N 3. P. 195-206.
32. Kocisova J., Sram R. J. The micronucleus test in human peripheral lymphocytes // *Cesk. Farm.* 1990. V. 39. N 3. P. 131-133.
33. Kryscio A., Ulrich Muller W.U., Wojcik A. *et al.* A cytogenetic analysis of the long-term effect of uranium mining on peripheral lymphocytes using the micronucleus-centromere assay // *Int. J. Radiat. Biol.* 2001. V. 77. N 11. P. 1087-1093.
34. Lee T.K., O'Brien K., Eaves G.S. *et al.* Effect of blood storage on radiation-induced micronuclei in human lymphocytes // *Mutat. Res.* 1999. V. 444. N 1. P. 201-206.
35. Lindberg H.K., Wang X., Jarventaus H. *et al.* Origin of nuclear buds and micronuclei in normal and folate-deprived human lymphocytes // *Mutat. Res.* 2007. V. 617. N 1-2. P. 33-45.
36. Murphy F.J., Hayes I., Cotter T.G. Targeting inflammatory diseases via apoptotic mechanisms // *Curr. Opin. Pharmacol.* 2003. V. 3. N 4. P. 412-419.

37. Pascoe S.A, Stemp G. A modified method and staining technique for the in vitro micronucleus test in human lymphocytes using cytochalasin B // *Mutat. Res.* 1990. V. 234. N 3-4. P. 253-255.
38. Pastor S., Gutierrez S., Creus A. et al. Cytogenetic analysis of Greek farmers using the micronucleus assay in peripheral lymphocytes and buccal cells // *Mutagenesis*. 2001. V. 16. N 6. P. 539-545.
39. Rosefort C, Fauth E, Zankl H. Micronuclei induced by aneugens and clastogens in mononucleate and binucleate cells using the cytokinesis block assay // *Mutagenesis*. 2004. V. 19. N 4. P. 277-284.
40. Schmid W. The micronucleus test // *Mutat. Res.* 1973. V. 31. N 1. P. 9-16.
41. Slonina D., Klimek M., Szpytma T. *et al.* Comparison of the radiosensitivity of normal-tissue cells with normal-tissue reactions after radiotherapy // *Int. J. Radiat. Biol.* 2000. V. 76. N 9. P. 1255-1264.
42. Stavropoulou V., Xie J., Henriksson M. *et al.* Mitotic infidelity and centrosome duplication errors in cells overexpressing tripeptidyl-peptidase II // *Cancer Res.* 2005. V. 65. P. 1361-1368.
43. Swain D.E., Mill A.J. An 11 year follow-up of individual radiation responses as assessed by micronuclei induction in peripheral blood lymphocytes // *J. Radiol. Prot.* 2000. V. 20. N 2. P. 189-196.
44. Tanaka K., Tchajunusova N. J., Takatsuji T. *et al.* High incidence of micronuclei in lymphocytes from residents of the area near the Semipalatinsk nuclear explosion test site // *J. Radiat. Res. (Tokyo)*. 2000. V. 41. N 1. P. 45-54.
45. Thierens H., Vral A., de Ridder L. *et al.* Inter-laboratory comparison of cytogenetic endpoints for the biomonitoring of radiological workers // *Int. J. Radiat. Biol.* 1999. V. 75. N 1. P. 34.
46. Tolbert P.E., Shy C.M., Allen J.W. Micronuclei and other nuclear anomalies in buccal smears: methods development // *Mut. Res.* 1992. N 271. P. 69-77.
47. Touil N., Elhajouji A., Thierens H. *et al.* Analysis of chromosome loss and chromosome segregation in cytokinesis-blocked human lymphocytes: non-disjunction is the prevalent mistake in chromosome segregation produced by low dose exposure to ionizing radiation // *Mutagenesis*. 2000. V. 15. N 1. P. 1-7.
48. Vaglenov A., Nosko M., Georgieva R. *et al.* Genotoxicity and radioresistance in electroplating workers exposed to chromium // *Mutat. Res.* 1999. V. 446. N 1. P. 23-34.
49. Venkatachalam P., Solomon F.D., Prabhu B.K. *et al.* Estimation of dose in cancer patients treated with fractionated radiotherapy using translocation, dicentric and micronuclei frequency in peripheral blood lymphocytes // *Mutat. Res.* 1999. V. 429. N 1. P. 1-12.
50. Yager J. W., Sorsa M., Selvin S. Micronuclei in cytokinesis-blocked lymphocytes as an index of occupational exposure to alkylating cytostatic drugs // *IARC Sci. Publ.* 1988. V. 89. P. 213-216.
51. Zenzen V., Fauth E., Zankl H. *et al.* Mutagenic and cytotoxic effectiveness of zinc dimethyl and zinc diisononyldithiocarbamate in human lymphocyte cultures // *Mutat. Res.* 2001. V. 497. N 1-2. P. 89-99.

2015

ФОТОРЕПОРТАЖ

























СОДЕРЖАНИЕ

Предисловие редактора 4

Пшеничный К.А. Professor Vistelius 6

**МАТЕМАТИЧЕСКИЕ ИССЛЕДОВАНИЯ В
КРИСТАЛЛОГРАФИИ, МИНЕРАЛОГИИ, ГЕОЛОГИИ, ГЕОФИЗИКЕ**

Войтеховский Ю.Л. К математическим основаниям петрографии . . . 11

Бурцев А.В., Невретдинов Ю.М. Корректировка регистрации
молний на Кольском п-ове 26

Воробьева В.И., Чигиринец Е.Э., Скиба М.И., Трус И.Н.
Использование комплекса квантово-механических расчетов
для решения вычислительных задач компьютерной химии 29

Дёмин В.И. Оценка пространственной неоднородности климата
на Кольском п-ове 33

Демин В.И., Анциферова А.Р., Мокротоварова О.И. Антропогенное
влияние на показания метеорологических станций 39

Дьячкова А.В. Исследование состава магнетитов с различных
месторождений. 50

Ильченко В.Л. Порядок и хаос в геотектонике 57

Левин Б.С. Непрерывный спектр регионально-метаморфических
пород и границы типов. 69

Мартынов Е.В. Проблема реконструкции геодинамических
обстановок докембрия по геохимическим данным 77

Мельник М.Н., Ахметов О.И., Мингалев О.В., Мингалев И.В.
Два точных решения уравнений Максвелла в однородном
изотропном проводнике для точечного дипольного источника 81

Пушкин А.А., Римкевич В.С. Протекание гетерофазных
химических реакций в диффузионной зоне 95

Степенщиков Д.Г., Войтеховский Ю.Л. Новые теоремы
о фуллеренах 99

Талис А.Л. От особой серии комбинаторных конструкций
к тетраблоку – строительной единице цепей из правильных
тетраэдров, аппроксимирующих линейные подструктуры
биополимеров 106

Талис А.Л. Закономерности сборки тетраблоков и спиральные
подструктуры, аппроксимирующие спирали биополимеров 118

Талис А.Л. Спирали из тетраблоков и закономерности строения α -спирали и ДНК	128
Шутов А.В., Кузнецова Т.В., Малеев А.В. Модельные множества и графы с некристаллографической симметрией	132
Юричев А.Н. Расчет термических параметров кристаллизации ультрамафитов	141

МАТЕМАТИЧЕСКИЕ ИССЛЕДОВАНИЯ В МЕДИЦИНЕ, БИОЛОГИИ, ЭКОЛОГИИ

Бельская Л.В., Сарф Е.А., Косенок В.К. Исследование статистических особенностей заболеваемости раком легкого в Омской области в целях оптимизации ранней диагностики	146
Войтеховский Ю.Л. Икосаэдрические вирусы и фуллерены: фундаментальная гомология	155
Войтеховский Ю.Л., Степенчиков Д.Г. Трансформации фуллеренов как модели микроэволюций скелетов радиолярий	161
Запорожец Ю.А. Массоперенос загрязняющих веществ в почвенном слое.	168
Запривода Л.П., Остапенко О.В., Яценко В.П. Сравнительная характеристика морфологических методов оценки гонадотоксичного эффекта факторов окружающей среды	171
Петрашова Д.А., Бурцев А.В. База данных по цитогенетическим исследованиям для систематизации фактов и оптимизации обработки	179
Петрашова Д.А., Пожарская В.В. О проблеме анализа многофакторного воздействия в цитогенетических исследованиях на примере микроядерного теста в клетках буккального эпителия человека.	189
Пожарская В.В., Петрашова Д.А. Роль особенностей учета цитогенетических аномалий при оценке воздействия генотоксических факторов окружающей среды на примере лимфоцитов крови человека	197
ФОТОРЕПОРТАЖ	206

*Труды XII Всероссийской (с международным участием)
научной школы “Математические исследования
в естественных науках”,
посвящённой 100-летию со дня рождения
д.г.-м.н. А.Б. Вистелиуса
Апатиты, 26-27 октября 2015 г.*

Отпечатано в ЗАО “КЭМ”

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

Тираж 100 экз.

