

Теологический институт КНЦ РАН Российское минералогическое общество Кольское отделение

Труды XV Всероссийской научной школы "Математические исследования в естественных науках"



Апатиты, 22 оқтября 2018 г.

УДК 548.1+548.3+549.621.9+550.8+552.4 ISSN 2074-2487

Математические исследования в естественных науках. Труды XV Всероссийской научной школы. Апатиты, Геологический институт КНЦ РАН, Кольское отделение и РМО, 22 октября 2018 г. / Научн. ред. Ю.Л. Войтеховский. — Апатиты: Изд-во К & M, 2018. - 205 с.

В сборнике представлены материалы XV Всероссийской научной школы «Математические исследования в естественных науках», прошедшей в Геологическом институте КНЦ РАН, г. Апатиты, 22 октября 2018 г. при информационной поддержке Кольского отделения и Российского минералогического общества. В секциях «Кристаллография и кристаллохимия», «Геология и геофизика» и «Биология и экология» были представлены более 20 докладов, которые вошли в 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: Л.Д. Чистякова

Фото на обложке: samike. tourister.ru

- © Коллектив авторов, 2018
- © Российское минералогическое общество и Кольское отделение, 2018
- © Обособленное подразделение Федерального государственного бюджетного учреждения науки ФИЦ КНЦ РАН Геологический институт, 2018

ПРЕДИСЛОВИЕ РЕДАКТОРА

22 октября 2018 г. в Геологическом институте КНЦ РАН при информационной поддержке Кольского отделения и Комиссии по истории РМО прошла XV Всероссийская научная школа «Математические исследования в естественных науках». Очно и заочно в ней приняли участие сотрудники академических институтов и университетов из Апатитов (ГИ КНЦ РАН, ИППЭС КНЦ РАН, ИХТРЭМС КНЦ РАН, ПГИ, ЦЭС КНЦ РАН), Санкт-Петербурга (СПбГУ), Москвы (МГУ), Владимира (ВГУ), Сыктывкара (ИГ Коми НЦ УрО РАН), Казани (КФУ), Благовещенска (ИГиП ДВО РАН). Тем самым, школа подтвердила свой всероссийский статус.

По традиции, основное внимание участников было направлено на поиск универсальных математических подходов к решению широкого круга задач в естественных науках. В этом году в разных кристаллографически- математических, геолого-геофизических и биолого-экологических контекстах обсуждались проблемы описания полиэдрических форм, в том числе, молекул и кристаллов, моделирования геологических объектов и процессов, различного применения математических методов анализа и обработки данных в науке и на производстве.

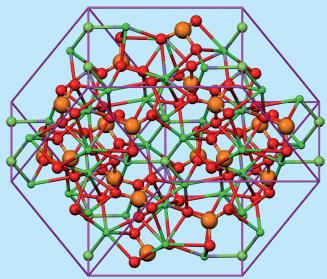
В предлагаемом сборнике представленные к печати статьи собраны в три раздела: «Кристаллография и кристаллохимия» (5), «Геология и геофизика» (13) и «Биология и экология» (4).

В некоторые годы число иногородних и зарубежных участников было больше, тематика – шире. Эти флуктуации понятны и извинительны в сложной экономической системе государства, призванного финансировать фундаментальную науку. И на Солнце бывают флуктуации, отмечаемые то пятнами, то протуберанцами. В этих условиях отдадим должное организаторам школы, неуклонно – при любой экономической погоде – проводящим её на протяжении 14 лет и неизменно издающим материалы в цветном исполнении, а также всем её постоянным участникам.

Надеемся, сборник будет полезен не только авторам статей, но и широкому кругу естествоиспытателей, особенно молодым учёным, пытающимся читать «книгу природы, написанную на языке математики». Приглашаем всех к участию в XVI Всероссийской (с международным участием) научной школе «Математические исследования в естественных науках», которая состоится в Санкт-Петербургском горном университете или Геологическом институте ФИЦ КНЦ РАН примерно в то же время в 2019 г.

Войтеховский Ю.Л., д.г.-м.н., профессор профессор Санкт-Петербургского горного университета гл.н.с. Геологического института ФИЦ КНЦ РАН вице-президент, председатель комиссии по истории, почётный член РМО





КРИСТАЛЛОГРАФИЯ КРИСТАЛЛОХИМИЯ



СТРУКТУРООБРАЗУЮЩИЕ ФРАГМЕНТЫ В МОЛЕКУЛЯРНЫХ КРИСТАЛЛАХ

Геворгян А.А., Малеев А.В., Потехин К.А.

Владимирский государственный университет, Владимир, armkir777@gmail.com

Аннотация

На основе анализа межмолекулярного взаимодействия четырёх кристаллических структур показано, что плоские многоатомные фрагменты молекул (фенилы, арилы и т.п.) и метильные группы способны предопределять взаимное расположение молекул в кристалле, т.е. являются структурообразующими фрагментами молекул.

Summary

Using the analysis of the intermolecular interaction of four crystal structures, it was shown that flat polyatomic fragments of molecules (phenyls, aryls, etc.) and methyl groups can predetermine the mutual arrangement of molecules in a crystal, i.e. these fragments are structure-formingparts of molecules.

Введение

Хорошо изученными структурообразующими фрагментами органических молекул являются доноры и акцепторы сильных водородных связей. Донорами сильных Н-связей являются группы О-Н или N-H, а акцепторами – атомы кислорода или азота. Если в молекуле имеются такие фрагменты, то в молекулярных кристаллах, как правило, формируются молекулярные агломераты. Молекулярные агломераты бывают нульмерными (островными), одномерными (молекулярные цепи и стопки), двумерными (молекулярные слои) и трёхмерными (молекулярные каркасы). В данной работе рассматривается возможность образования молекулярных агломератов не за счёт сильных Н-связей, а за счёт анизотропии ван-дер-ваальсового межмолекулярного взаимодействия в молекулярных кристаллах. Ранее [1-4] мы показали, что анизотропия ван-дер-ваальсового межмолекулярного взаимодействия может возникать при наличии энергетических ловушек (многократных потенциальных ям).

Для анализа межмолекулярного взаимодействия в кристаллах органических соединений мы использовали модель атом-атомных потенциалов. Описание потенциальных кривых атом-атомных потенциалов взаимодействия С...С, С...Н, С...О и Н...Н, с указанием особых точек этих кривых представлено нами в [1]. В этой же работе введены такие понятия как ПЯК, ЛК и ПК. ПЯК – атом-атомный контакт, энергия которого соответствует потенциальной яме. ЛК – атом-атомный контакт за пределами потенциальной ямы в левой части потенциальной кривой. Отметим, что $E(\Pi SK) < E(\Pi K) < 0$. Другими словами, ЛК «работает» на притяжение между молекулами, но в меньшей степени, чем ПЯК. ПК – атом-атомный контакт, энергия которого положительна, т.е. ПК «работает» на отталкивание между молекулами.

В [2] для описания взаимодействия многоатомного фрагмента одной молекулы мы ввели понятие многоатомной потенциальной ямы. Например, шесть атомов углерода плоского шестичленного кольца одной молекулы «генерирует» две шестикратные потенциальные ямы (над и под плоскостью кольца). Если неводородный атом другой молекулы попадает в указанную область пространства (над или под плоскостью кольца), то он оказывается в шестикратной потенциальной яме. Многократные потенциальные ямы кристаллического поля возникают и при взаимодействии достаточно большого плоского фрагмента (шесть и более неводородных атомов) одной молекулы с большим плоским фрагментом другой молекулы. Более того, плоские фрагменты одной молекулы могут «объединять свои усилия», т.е. генерировать хелатные энергетические ловушки.

Таким образом, плоские многоатомные (6 или более атомов) фрагменты молекул и метильные группы способны предопределять взаимное расположение молекул в кристалле, т.е. являются структурообразующими фрагментами молекул. С целью проверки этой гипотезы мы провели исследования особенностей межмолекулярного взаимодействия в четырех кристаллических структурах с использованием компьютерной программы энергетического и геометрического анализа межмолекулярных атом-атомных контактов в кристаллах [5].

Результаты и их обсуждение

Объекты исследования – кристаллические структуры – отобраны из Кембриджского банка структурных данных [6] по следующим критериям. Во-

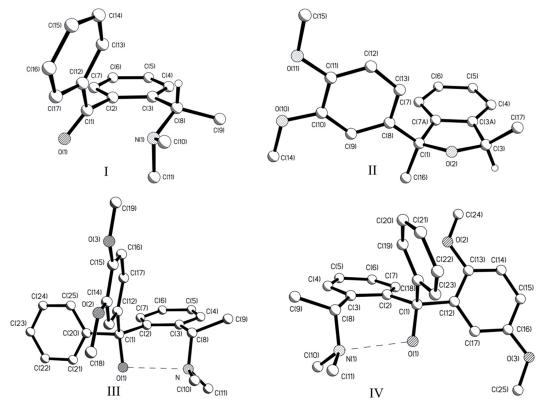


Рис. 1. Перспективный вид молекул с нумерацией неводородных атомов.

первых, молекулы содержат не менее двух шестичленных плоских фрагментов (фенилов, арилов и т.п.) и не менее трёх метильных групп. Во-вторых, в кристаллических структурах нет сильных межмолекулярных H-связей. По этим критериям мы отобрали четыре соединения с рефкодами NELQOL(I), COTLAA(II), EVIVAG(III), REGMEW(IV). Брутто-формулы: $I - C_{17}H_{19}N_1O_1$, $II - C_{18}H_{20}O_3$, $III - C_{25}H_{29}N_1O_3$, $IV - C_{25}H_{29}N_1O_3$. Перспективные виды молекул с нумерацией неводородных атомов представлены на рис. 1. Следует отметить, что структуры III и IV являются изомерами, т.е. их молекулы содержат совершенно одинаковые наборы атомов. Для таких кристаллических структур мы имеем одинаковое количество атом-атомных потенциалов в суммарной энергии межмолекулярного взаимодействия в любом димере соседних молекул – геометрическом димере (ГМД).

В каждой из этих кристаллических структур мы обнаружили взаимодействие плоского фрагмента с метилом, которые содержат 6-кратные ПЯК. На рис. 2 штриховыми линиями показаны ПЯК. Геометрические и энергетические параметры этих ПЯК указаны в табл. 1.

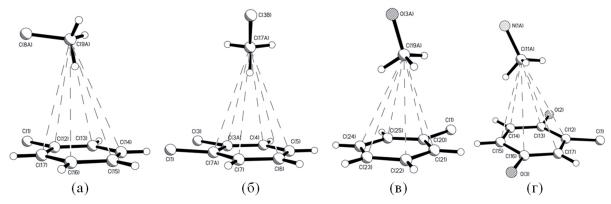


Рис. 2. Межмолекулярное взаимодействие плоского фрагмента с метильной группой в кристаллических структурах I(a), II(b), III(b) и IV(c).

Таблица 1. Геометрические и энергетические параметры взаимодействия плоского фрагмента с метилом в кристаллических структурах I, II, III и IV.

I			II			III			IV		
контакт	d, Å	<i>Е</i> , <u>кДж</u> моль	контакт	d, Å	E , $\frac{\mathbf{K} \underline{\mathcal{J}} \mathbf{ж}}{\mathbf{MOЛЬ}}$	контакт	d, Å	E , $\frac{\mathbf{K} \underline{\mathcal{I}} \mathbf{ж}}{\mathbf{MOЛЬ}}$	контакт	d, Å	E , $\frac{\mathbf{K} \underline{\mathcal{I}} \mathbf{ж}}{\mathbf{MOЛЬ}}$
129	4.02	-0.39	3A17	3.99	-0.39	2019	3.85	-0.40	1211	4.20	-0.35
139	4.14	-0.36	417	4.05	-0.38	2119	3.61	-0.26	1311	4.03	-0.38
149	4.29	-0.32	517	4.08	-0.38	2219	3.55	-0.19	1411	3.74	-0.36
159	4.30	-0.32	617	4.08	-0.38	2319	3.74	-0.36	1511	3.62	-0.27
169	4.17	-0.35	717	4.04	-0.38	2419	3.96	-0.40	1611	3.78	-0.38
179	4.02	-0.39	7A17	3.98	-0.39	2519	4.01	-0.39	1711	4.06	-0.38
среднее	4.16	-0.36	среднее	4.04	-0.38	среднее	3.79	-0.33	среднее	3.91	-0.35

Исследование особенностей взаимного расположения молекул в кристалле мы предлагаем начинать с анализа геометрических молекулярных димеров (ГМД). Каждый ГМД состоит из базисной молекулы и молекулы её 1-ой координационной сферы. В рамках модели атом-атомных потенциалов энергия ГМД равна сумме энергий всех атом-атомных контактов в нём. Как правило, общее количество атом-атомных контактов в ГМД весьма велико. Поэтому мы предполагаем, анализировать не все, а только «избранные» атом-атомные контакты ГМД. Например, в каждом ГМД кристаллической структуры III имеется 3364 атом-атомных контактов, в том числе, контактов между неводородными атомами 841 (25 %), контактов неводородных атомов с атомами водорода 1682 (50 %) и контактов между атомами водорода 841 (25 %). Таким образом, количество контактов первой группы существенно меньше, чем контактов второй группы. Тем не менее, суммарная энергия контактов первой группы (например, в ГМД1) составляет -29.2 кДж/моль, в то время как суммарная энергия контактов второй группы в том же ГМД составляет только -12.6 кДж/моль, а суммарная энергия контактов третьей группы всего лишь -2.0 кДж/моль. Следовательно, в данном случае наиболее энергоёмкими являются атом-атомные контакты между неводородными атомами.

Очевидно, что т.к. энергия атом-атомного контакта зависит от расстояния между атомами (см. потенциальную кривую в [1]), то все контакты между неводородными атомами можно разделить на две группы: более энергоёмкие и менее энергоёмкие контакты. Более энергоёмкими являются атом-атомные контакты, энергия которых соответствует потенциальной яме, т.е. ПЯК. В ГМД1 в кристаллической структуре III количество ПЯК и ЛК равно 30, т.е. менее 4 % от количества всех контактов между неводородными атомами. В то же время, их суммарная энергия равна -10.3 кДж/моль, т.е. более 35 % от суммарной энергии между всеми неводородными атомами в ГМД1. Следовательно, при исследовании особенностей взаимного расположения молекул в кристалле представляется целесообразным сосредоточить внимание на анализе именно ПЯК между неводородными атомами, как наиболее энергоёмких атом-атомных контактах в кристаллической структуре.

Рассмотрим кристаллическую структуру I (структурный класс $P2_12_12_1$, Z=4(1)). Первая координационная сфера базисной молекулы состоит из 14 молекул (КЧ=14). Таким образом, в кристаллической структуре имеется 14 ГМД, 7 из них является симметрически независимыми. Энергетические параметры этих 7 ГМД представлены в табл. 2. Общее количество атом-атомных контактов в каждом ГМД одинаково и равно 1444. Тем не менее, суммарные энергии этих ГМД существенно различаются (от -29.4 кДж/моль до -4.5 кДж/моль), т.е. базисная молекула по-разному взаимодействует с молекулами её 1-ой координационной сферы. Наиболее энергоёмким является ГМД1, молекулы которого связаны винтовой осью 2_1 , направленной вдоль кристаллографической оси b. В этом ГМД1 имеется 14 ПЯК и 2 ЛК.

6ПЯК из 14 относятся к взаимодействию шестичленного фенильного кольца базисной молекулы C(12)...C(17) с атомом углерода C(9) метильной группы молекулы её 1-ой координационной сферы (табл. 1, рис. 2 а). Этот энергоёмкий ГМД может являться элементом молекулярного агломерата. Действительно операции симметрии ГМД1 вместе со своим симметрическим аналогом образуют молекулярную цепь, которая по номенклатуре, предложенной в [7], относится к структурному классу $P_{c(Y)}2_1$, Z=2(1). ГМД2 описывает взаимодействие базисной молекулы с молекулой её 1-ой координационной сферы, трансляционно идентичной по x. В результате ГМД1, ГМД2 и ГМД4 с суммарной энергией -58.7 кДж/моль, в образовании которых участвуют 22 ПЯК и 2 ЛК, можно рассматривать как элементы «тонкого» молекулярного слоя $P_{l(XY)}2_1$, Z=2(1) параллельного кристаллографической плоскости (001). Если добавить ГМД3, то получается «толстый» молекулярный слой, состоящий из двух антипараллельных «тонких» слоёв. Однако, операции симметрии, образующие ГМД5, ГМД6, ГМД7, соизмеримые с ГМД3 по энергии и количеству ПЯК, генерируют всю кристаллическую структуру, представляющую собой антипараллельную упаковку тонких слоёв. Таким образом, согласно [7] кристаллическую структуру І следует отнести к структурному подклассу

$$1 - P_{C(Y)}2_1$$
, $Z=2(1) \uparrow \uparrow P_{I(XY)}2_1$, $Z=2(1) \uparrow \downarrow P2_12_12_1$, $Z=4(1)$.

На рис. 3 представлена проекция кристаллической структуры I вдоль кристаллографической оси a. Штриховыми линиями отмечены границы «тонкого» молекулярного слоя $P_{l(XY)}2_1$, Z=2(1).

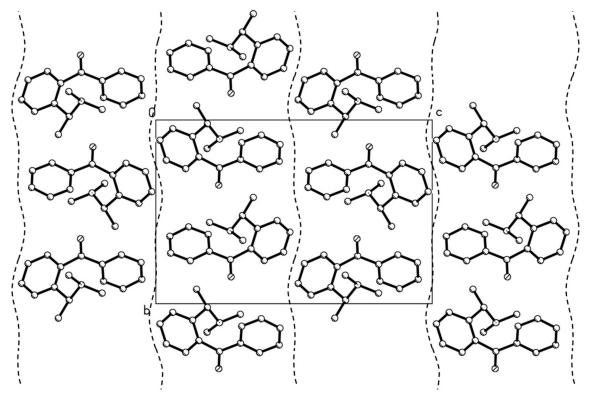


Рис. 3. Проекция кристаллической структуры І вдоль кристаллографической оси а.

Таблица 2. Энергетические параметры симметрически независимых ГМД в кристаллических структурах I, II, III и IV.

Номер ГМД	Операция симметрии	Энергия ГМД E , кДж/моль	Количество ПЯК и ЛК	Энергия ПЯК и ЛК E^* , кДж/моль						
Структура І										
1	-x, $1/2 + y$, $1/2 - z$	-29.4	14/2	-5.3						
2	x+1, y, z	-16.2	5	-1.9						
3	1/2+x, 3/2-y, 1-z	-13.5	7	-2.6						
4	1-x, $1/2+y$, $1/2-z$	-13.1	3	-1.1						
5	1/2-x, $1-y$, $1/2+z$	-10.3	3	-1.1						
6	1/2+x, 3/2-y, -z	-7.3	3	-1.1						
7	-1/2-x,1-y,1/2+z	-4.5	2	-0.6						
Структура II										
1	x+1, y, z	-33.4	17	-6.4						
2	1/2+x, $1/2-y$, $-z$	-19.8	10	-3.9						
3	-x, $1/2 + y$, $1/2 - z$	-14.6	13	-4.9						
4	1-x, $1/2+y$, $1/2-z$	-13.7	6	-1.9						
5	x, y+1, z	-11.7	7	-2.5						
6	1/2 + x, 3/2 - y, -z	-9.7	4	-1.3						
7	x+1, y-1, z	-4.0	2	-0.8						
Структура III										
1	1/2+x,-1/2-y,-z	-43.8	25/5	-10.3						
2	-x, $1/2 + y$, $1/2 - z$	-31.7	10	-3.4						
3	x+1, y , z	-27.4	8	-2.7						
4	1/2+x, $1/2-y$, $-z$	-11.6	6	-2.2						
5	-1/2-x, $-y$, $1/2+z$	-7.1	_	_						
6	-x-1,1/2+y,1/2-z	-6.8	2	-0.7						
7	1/2-x, $-y$, $1/2+z$	-5.6	1	-0.3						
8	x, y+1, z	-4.5	1	-0.3						
		Структура Г	V							
1	x, y+1, z	-29.4	17	-6.0						
2	1-x, $1/2+y$, $1-z$	-26.1	8	-3.0						
3	1-x, 1/2+y, -z	-23.6	10	-3.7						
4	x+1, y , z	-21.4	15	-5.4						
5	-x, $1/2 + y$, $z - z$	-18.1	7	-2.4						
6	-x, $1/2 + y$, $1-z$	-13.2	5	-1.7						
7	x-1, y+1, z	-6.3	_	_						

В кристаллической структуре II (структурный класс $P2_12_12_1$, Z=4(1)) первая координационная сфера базисной молекулы также состоит из 14 молекул (КЧ=14), т.е. в кристаллической структуре имеется 14 ГМД. Энергетические параметры семи симметрически независимых ГМД структуры II представлены в табл. 2. Суммарные энергии этих ГМД также как и для структуры I существенно различаются (от -33.4 кДж/моль до -4.0 кДж/моль). Наиболее энергоёмким является молекулярный контакт базисной молекулы с трансляционно идентичной по х молекулой её 1-ой координационной сферы. В этом ГМД1 имеется 17 ПЯК, из которых 6 относятся к взаимодействию шестичленного арильного кольца базисной молекулы С(3A)...С(7A) с атомом углерода С(17А) метильной группы молекулы её 1-ой координационнойсферы (табл. 1, рис. 2 б). Операции симметрии ГМД1 и его симметрического аналога генерируют молекулярную цепь $P_{c(x)}1$, Z=1(1). Второй по величине энергии и третьим по числу ПЯК является ГМД2, которому соответствует винтовая ось 2_1 параллельная оси a. Операция симметрии ГМД2 добавляет к цепи $P_{c(x)}$ 1, Z=1(1) параллельную ей цепь $P_{c(x)}$ 1, Z=1(1), которые вместе образуют молекулярную цепь $P_{c(x)}$ 2, Z=2(1).Таким образом, кристаллическую структуру II можно описать структурным подклассом

$$1 - P_{c(x)}1, Z = 1(1) \uparrow \uparrow P_{c(x)}2_1, Z = 2(1) \uparrow \downarrow P2_12_12_1, Z = 4(1).$$

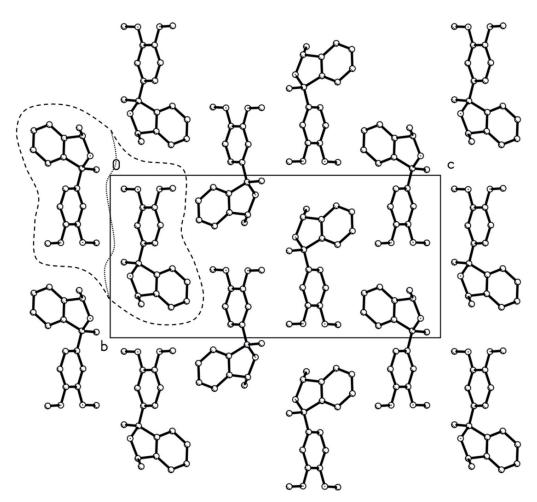


Рис. 4. Проекция кристаллической структуры ІІ вдоль кристаллографической оси а.

На рис. 4 представлена проекция кристаллической структуры II вдоль кристаллографической оси a. Штриховыми линиями отмечены границы «двойной» цепи $P_{c(x)}2_1$, Z=2(1), а пунктирной отмечена граница, разделяющая её на две одинарные цепи $P_{c(x)}1$, Z=1(1).

В кристаллической структуре III (структурный класс $P2_12_12_1$, Z=4(1)) первая координационная сфера базисной молекулы состоит из 16 молекул (КЧ=16). Энергетические параметры восьми симметрически независимых ГМД представлены в табл. 2. Суммарная энергия этих ГМД существенно различаются (от -43.8 кДж/моль до -4.5 кДж/моль). Наиболее энергоёмким является ГМД1, молекулы которого связаны винтовой осью 2_1 , направленной вдоль кристаллографической оси a. В этом ГМД имеется 25 ПЯК и 5 ЛК, из которых 6ПЯК относится к взаимодействию шестичленного фенильного кольца базисной молекулы C(20)...C(25) с атомами углерода C(19A) метильной группы молекулы её 1-ой координационной сферы (табл. 1, рис. 2 в). Операции симметрии ГМД1 и симметрически эквивалентного ему ГМД дают бесконечную молекулярную цепь $P_{c(x)}2_1$, Z=2(1). Кроме того ГМД3 входит в эту цепь как часть, т.е. соответствующий этому ГМД контакт стабили-

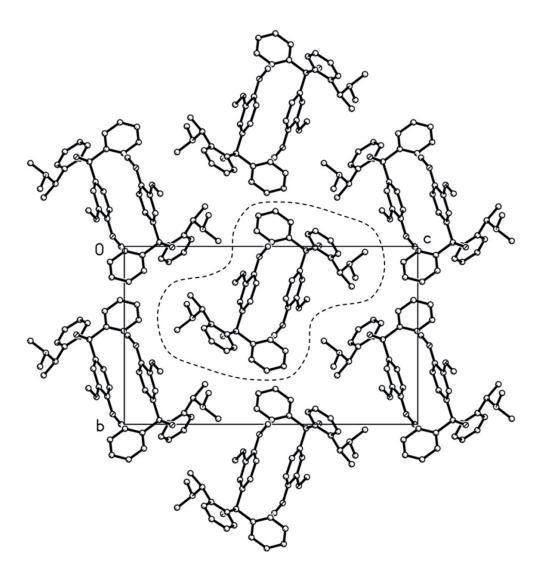


Рис. 5. Проекция кристаллической структуры III вдоль кристаллографической оси а.

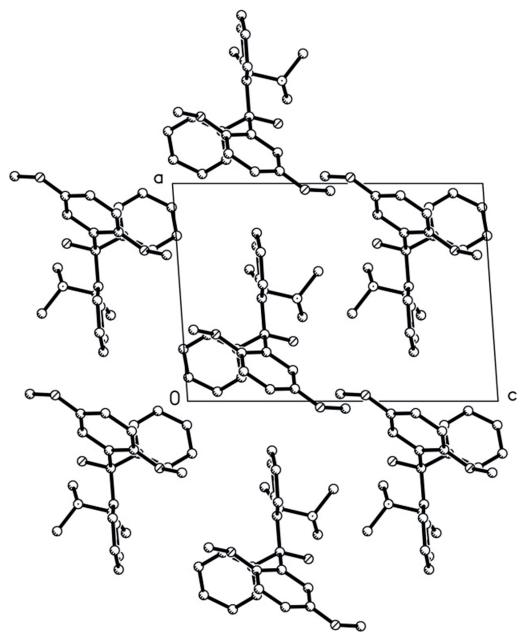


Рис. 6. Проекция кристаллической структуры IV вдоль кристаллографической оси b.

зирует ту же молекулярную цепь. В результате кристаллическую структуру III можно рассматривать как антипараллельную упаковку молекулярных цепей и отнести её к структурному подклассу

$$1 - P_{c(x)} 2_1$$
, $Z=2(1) \uparrow \downarrow P 2_1 2_1 2_1$, $Z=4(1)$.

На рис. 5 представлена проекция кристаллической структуры III вдоль кристаллографической оси a. Штриховыми линиями отмечены границы цепи $P_{c(x)}2_1$, Z=2(1).

В кристаллической структуре IV (структурный класс $P2_1$, Z=2(1)) первая координационная сфера базисной молекулы состоит из 14 молекул (КЧ=14). Энергетические параметры для семи симметрически независимых ГМД представлены в табл. 2. Так как молекулы III и IV являются изомерами (имеют одинаковые брутто-формулы), то общее количество атом-атомных контактов в ГМД этих кристаллических структур одинаково. Тем не менее,

энергия ГМД1 в структуре IV по модулю существенно меньше, чем энергия ГМД1 в структуре III. Кроме того, энергия межмолекулярного взаимодействия в кристаллической структуре IV распределяется между ГМД существенно более равномерно, чем в структуре III. Эта особенность кристаллической структуры IV свидетельствует о том, что в ней отсутствуют молекулярные агломераты, т.е. нет ни изолированных молекулярных цепей, ни молекулярных слоев. Поэтому структуру IV следует отнести к структурному подклассу $1-P2_1$, Z=2(1). На рис. 6 представлена проекция кристаллической структуры IV вдоль кристаллографической оси a.

Выводы

Структурообразующие фрагменты молекул, такие как плоские шестичленные циклы и метильные группы, могут способствовать формированию молекулярных агломератов (молекулярных цепей и молекулярных слоёв) в кристаллических структурах. Тем не менее, даже при реализации взаимодействия между шестичленным плоским циклом одной молекулы и метильной группой другой молекулы в кристаллической структуре могут отсутствовать молекулярные агломераты.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, гранты 17-02-00835-а и 17-42-330787.

Список литературы

- 1. Малеев А.В., Геворгян А.А., Потехин К.А. // Журн. структур. химии. 2018. Т. 59. № 2. С. 471.
- 2. Геворгян А.А., Малеев А.В., Потехин К.А. // Тр. XIV Всероссийской (с международным участием) научной школы «Математические исследования в естественных науках» / научн. ред. Ю.Л. Войтеховский. Апатиты. 2018. С. 55-63.
- 3. Потехин К.А., Малеев А.В., Геворгян А.А. // ІХ Национальная кристаллохимическая конференция. Суздаль. 2018. С. 181.
- 4. Геворгян А.А., Малеев А.В., Игонин В.А. // ІХ Национальная кристаллохимическая конференция. Суздаль. 2018. С. 130.
- 5. Малеев А.В., Геворгян А.А. Программа энергетического и геометрического анализа межмолекулярных атом-атомных контактов в кристаллах. М.: Федеральная служба по интеллектуальной собственности (Роспатент). 2018. (представлена для регистрации).
- 6. Cambridge Structural Database. Version 5.39. University of Cambridge, UK.
- 7. Зоркий П.М., Зоркая О.Н. // Журн. структур. химии. 1998. Т. 39. № 1. С. 126.

ПРИМЕНЕНИЕ АНАЛИЗА ФРАКТАЛЬНОЙ РАЗМЕРНОСТИ К КАРТИ-НАМ ФОТОИНДУЦИРОВАННОГО РАССЕЯНИЯ СВЕТА В КРИСТАЛЛАХ НИОБАТА ЛИТИЯ

Мануковская Д.В.

ИХТРЭМС КНЦ РАН, Апатиты, manukovskaya@chemy.kolasc.net.ru

Аннотация

Рассмотрено явление фотоиндуцированного рассеяния света (ФИРС) в кристаллах ниобата лития $(LiNbO_3)$ с низким эффектом фоторефракции. Доказано, что ФИРС это диссипативная система, возникающая при взаимодействии кристалла и лазерного излучения. Предложены алгоритмы разделения картин ФИРС на слои для последующего анализа фрактальной размерности этих слоёв. Доказано, что изменения фрактальной размерности слоя ФИРС соответствует изменению концентрации лазерно-индуцированных дефектов в этом слое.

Summary

A photoinducel light scattering (PILS) phenomena was considered in lithium niobate (LiNbO₃) crystals with a low photorefractive effect. PILS was proved to be a dissipative system occurring at interaction of a crystal with laser radiation. Algorithms were suggested for separation of PILS patterns into layers for analysis of their fractal dimension. Changes in a fractal dimension of a PILS layer was proved to correspond to changes in a laser-induced defects concentration in this layer.

Монокристалл ниобата лития (НЛ) состава $LiNbO_3$ является перспективным материалом лазерной и нелинейной оптики. Благодаря низким коэрцитивным полям, НЛ может быть использован в качестве оптических модуляторов и затворов [16].

Однако в сегнетоэлектрическом кристалле НЛ существует эффект фоторефракции (ЭФ). В освещённой лазерным излучением области возникает обратимое фотоиндуцированное изменение показателя преломления вследствие пространственного переноса электронов под действием света преимущественно вдоль полярной оси Z и их последующего захвата на ловушке. Возникающие при этом поля пространственных зарядов за счёт линейного электрооптического эффекта вызывают изменение показателя преломления. После выключения освещения фотоиндуцированное изменение показателя преломления начинает уменьшаться. В любом нецентросимметричном кристалле вследствие наличия диагональных элементов в матрице диэлектрической проницаемости существует линейный электрооптический эффект [8]. Он проявляется в том, что в оптической среде при наложении постоянного или переменного электрического поля возникает двулучепреломление. Линейный электрооптический эффект является причиной того, что при освещении кристалла НЛ фотоносители перераспределяются в пространстве, возбуждая фотовольтаические токи, которые, в свою очередь, образуют пространственное поле заряда. Это поле становится причиной изменения показателя преломления в определённой локальной области кристалла НЛ, что и составляет сущность ЭФ [11,16]. Области с изменённым показателем преломления называются лазерно-индуцированными дефектами. В кристаллах НЛ основной механизм фоторефракции — фотовольтаический [16].

Прямым следствием ЭФ в кристалле НЛ является возникновение фотоиндуцированного рассеяния света (ФИРС). При освещении кристалла НЛ перпендикулярно кристаллографической оси Z в лазерном треке и некоторой области кристалла вокруг него возникают фотоиндуцированные дефекты с изменённым показателем преломления. Фотоны упруго рассеиваются на этих дефектах, интерферируют с накачкой, в результате на выходной грани кристалла появляется сложная картина минимумов и максимумов, ФИРС (рис. 1). ФИРС является явно выраженным спеклом и трансформируется со временем. В зависимости от величины ЭФ в НЛ, картина ФИРС может принимать различные формы. Однако в кристаллах с высоким ЭФ рассеянный свет слишком ярок и не позволяет проанализировать детали спекл-картины [16]. При этом в кристаллах с низким ЭФ в спекл-картине ФИРС достаточно существенных элементов, чтобы их можно было исследовать (рис. 1). В кристаллах НЛ с низким ЭФ спекл-картина ФИРС в первые секунды облучения принимает форму круга, со временем трансформируясь в ассиметричную вытянутую «восьмёрку» (рис. 1). Больший лепесток этой восьмёрки направлен в сторону положительного направления оси Z. Также ФИРС является многослойной картиной. Слой, наиболее близкий к лазерному лучу (первый слой ФИРС) во всем объёме имеет изменённый показатель преломления. Следующий слой, второй, окружает первый и является рассеянием

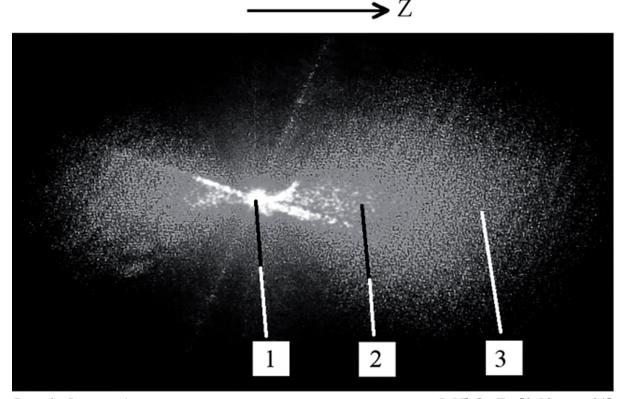


Рис. 1. Фотоиндуцированное рассеяние света в кристалле LiNbO $_3$:Zn [0.52 мас. %], 1, 2, 3 – слои ФИРС. λ_0 =532 нм, P=110 мВт, t=90 с.

на отдельных статических лазерно-индуцированных дефектах. Третий слой образуется рассеянием света на флуктуациях физических параметров кристалла, этот слой мерцает (рис. 1). Однако ФИРС – явление, мешающее для большинства применений кристалла НЛ, так как фронт проходящей через кристалл световой волны существенно искажается, часть мощности лазерного луча теряется и рассеивается [15].

Следовательно, необходимо изучать лазерно-индуцированные дефекты, на которых происходит ФИРС, чтобы глубже понять их природу и выявить те факторы, которые способны повлиять на ЭФ.

Для исследования структуры кристаллов НЛ с целью выявления таких факторов в последнее время используются методы комбинационного рассеяния света [16] и коноскопия [12, 14]. Однако эти методы исследуют изменения кристаллической решётки, и зафиксировать непосредственно лазерно-индуцированные дефекты не в силах.

ФИРС предоставляет непосредственную картину генерации, дрейфа и диффузии лазерно-индуцированных дефектов при взаимодействии кристалла НЛ и лазерного излучения. Однако ФИРС – картина интерференционная, сложная, в ней присутствует несколько видов спеклов.

В данном случае можно применить геометрию фракталов, чтобы определить изменение во времени слоёв ФИРС и понять динамику перераспределения лазерно-индуцированных дефектов.

Для начала следует доказать, что ФИРС в кристаллах $H\Pi$ – это диссипативная система.

Так как ФИРС возникает в кристалле под действием внешнего фактора, а именно лазерного излучения, и при этом кристалл свободно обменивается энергией с окружающими системами [9, 18] — например, воздухом, подставками, то кристалл НЛ под действием лазерного излучения является открытой системой [13].

Эксперименты по изучению ФИРС проводятся в объёмных образцах. При возникновении и раскрытии ФИРС занимает достаточно большую долю образца, имея протяжённость во всех трёх измерениях изучаемого кристалла [9, 17]. Таким образом, можно сказать, что возникающее ФИРС является макрообъектом, состоящим из множества микро- и нанообъектов [1, 15].

Выражение для определения изменения показателя преломления (Δn) в фоторефрактивной решётке НЛ содержит в основном нелинейные (квадратичные) члены [16]. Это означает, что возникновение ФИРС в кристалле НЛ можно без колебаний назвать нелинейным эффектом.

В кристаллах НЛ, легированных фоторефрактивными примесями, ФИРС возникает в первые секунды даже при малых мощностях облучения [16]. В кристаллах, легированных нефоторефрактивными примесями присутствует некая пороговая мощность возбуждения ФИРС [2, 22]. Вообще, фотоиндуцированное изменение показателя преломления (но не спеклструктура ФИРС) было зафиксировано при возбуждении сфокусированным

широкополосным излучением [10, 16, 22]. Однако, для любых фоторефрактивных кристаллов НЛ характерно, что спекл-структура ФИРС возбуждается в зависимости от длины волны, мощности и плотности возбуждающего светового потока. Широкополосное маломощное несфокусированное (рассеянное) излучение ФИРС не вызывает [2, 10, 16, 21, 22], несмотря на то, что фотонапряжение как в номинально чистых, так и в легированных кристаллах присутствует при облучении немонохроматическим маломощным светом [8]. Таким образом, для кристалла НЛ существует управляющий параметр, который приводит к изменению вида рассеянного излучения, то есть к изменению вида взаимодействия элементов системы.

Наличие этих четырёх свойств (открытость системы, наличие большого количества участвующих в процессе частиц, нелинейный отклик на внешнее воздействие и наличие управляющего параметра, который изменяет вид взаимодействия элементов системы) у кристаллов НЛ под воздействием лазерного излучения, являются необходимым и достаточным условием для подтверждения диссипативности системы [13].

Так как НЛ под воздействием лазерного излучения является диссипативной системой [18], то изучение структурных изменений и физических процессов, происходящих в разных слоях ФИРС, возможно лишь при помощи такой величины, которая бы характеризовала изменение системы в целом, без спецификации отдельных подсистем и подрешёток [3]. Такой величиной лучше всего мог бы стать коэффициент относительной упорядоченности (КОУ) [4]. Однако однозначное определение КОУ является отдельной нетривиальной задачей, решение которой потребовало бы сложных и длительных расчётов, если решение вообще существует для данной системы [4]. Наиболее обобщённым решением в таком случае можно назвать применение геометрии фракталов [5]. Фрактальная размерность, имея большое преимущество в высокой чувствительности к малейшим изменениям изображения, тем самым налагает и ограничения на применение этого метода. Заключается оно в том, что анализируемые изображения должны быть очень хорошего разрешения, а эксперимент должен предполагать достаточно высокую точность [19].

Кроме того, сама картина ФИРС обладает самоподобием: на разных масштабах картины ФИРС наблюдаются подобные изображения, так что вся картина ФИРС может быть идентифицирована как фрактал [18].

Согласно [19], обычная организация возникает в системе, когда воздействие внешней силы F упорядочивает опредёленный отклик системы. Однако в случае ФИРС накачка генерирует подрешётку лазерно-индуцированных дефектов, причем существуют взаимодействующие между собой области с различными характеристиками и плотностью этих дефектов (слои ФИРС). Таким образом, можно сказать, что внешние силы (освещение кристалла в каждой точке объёма) — это переменные, которые подчиняются возникающим в кристалле лазерно-индуцированным процессам, а не просто накачке.

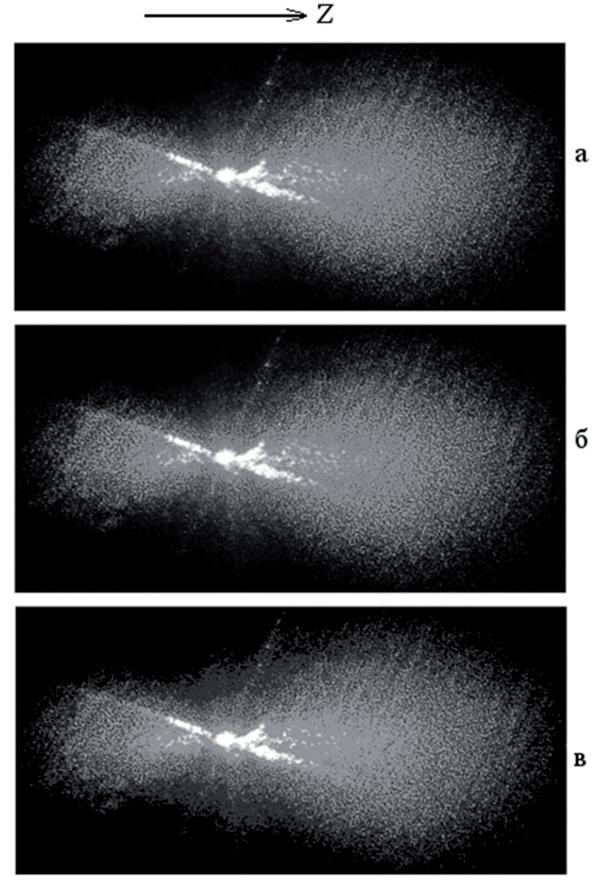


Рис. 2. Картина ФИРС конгруэнтного кристалла $LiNbO_3$:Zn~([Zn]=0.52~мас.~%) на 180~c~ облучения лазером мощностью 35~ мBm.~a)— оригинальное изображение, <math>6)— изображение в оттенках серого, 6)— разделенное на шесть уровней освещённости изображение.

Это приводит к тому, что описание конкретного освещения каждого отдельного элемента объёма кристалла сводится не к одному уравнению (даже с нелинейными членами), а к системе уравнений [19]. Из этого следует, что система кристалл-лазерный луч, которая проявляется как сумма всех лазерно-индуцированных дефектов, является самоорганизующейся.

Таким образом, система кристалл-лазерный луч может считаться организованной только в тот момент времени, когда произошла генерация лазерно-индуцированных дефектов, но ещё не произошло рассеяние накачки на них. Очевидно, что это очень короткий промежуток времени. В дальнейшем в кристалле происходит процесс самоорганизации.

Самоорганизация в диссипативных системах зачастую порождает иерархические структуры [7]. Такие структуры всегда имеют явно выраженное фрактальное строение [7], что наблюдается и для ФИРС в кристаллах НЛ с низким эффектом фоторефракции.

Изменение фрактальной размерности картины слоя показывает изменение сложности системы [7]. В нашем случае системой являются все лазерноиндуцированные дефекты, принадлежащие исследуемому слою ФИРС. Чем выше сложность системы, тем меньше производство энтропии [3, 19], из чего следует, что увеличение сложности системы приводит её к более выгодному энергетическому состоянию. Это и есть принцип самоорганизации, или ѕ-теорема Климонтовича [3]. При этом по теореме Пригожина [13], продукция (или производство) энтропии внутри термодинамической системы при неизменных внешних параметрах является минимальной в стационарном состоянии в условиях, препятствующих достижению равновесного состояния. Так как ФИРС возникает в условиях сильно неравновесных процессов, то есть при наличии притока энергии в кристалл НЛ из лазерного луча, то в данном случае система стремится достичь стационарного состояния и миниминизовать производство энтропии путём усложнения. Сильно неравновесные необратимые процессы могут быть источником когерентного поведения системы [19], в данном случае – появления ФИРС [17]. Это означает, что кристалл НЛ под воздействием лазерного излучения стремится, в том числе, и минимизировать потери – как энергии, так и её эквивалента в массе. Чтобы не допустить лазерного пробоя, который как раз и является потерей в массе, кристалл генерирует лазерно-индуцированные дефекты.

Таким образом, если изменяется состояние системы лазерноиндуцированных точек при постоянных внешних условиях (мощность лазерного излучения, температура окружающей среды), то это означает изменение внутренней энергии системы на величину dU. Так как по первому закону термодинамики

$$\delta Q = dU + pdV,$$

где — Q — количество теплоты, p — давление, V — объём, а энтропия S в общем случае определяется формулой

$$dS = \delta Q/T$$
,

где T — температура, то изменение состояния системы лазерноиндуцированных дефектов при постоянных внешних условиях означает изменение производства энтропии системы.

Усложнение системы, которое проявляется в усложнении изображения системы, может означать либо увеличение количества элементов, составляющих систему, либо изменение их взаимодействия, проявляющееся через пространственное перераспределение имеющихся элементов [7]. При этом усложнение самой системы, или уменьшение производства энтропии, при тех же внешних параметрах (например, за небольшой срок облучения кристалла порядка 20-30 с, когда кристалл ещё не успевает заметно нагреться, [6]) может означать возникновение упорядоченных подрешёток лазерно-индуцированных дефектов в слое ФИРС.

Картина слоя ФИРС представляет собой кластер точек, которые либо стоят отдельно, либо «слипаются» или большими скоплениями, или по дветри (рис. 1). Слой ФИРС ограничен в пространстве, и его геометрическая конфигурация (в частности, толщина) определяется расстоянием от лазерного луча. Третий слой ФИРС не может разрастаться до бесконечности в объём кристалла, поскольку максимальный радиус его внешней границы определяется мощностью лазерного луча и фоторефрактивными свойствами самого кристалла. При этом третий ФИРС слой ограничивает снаружи второй, а тот, в свою очередь, ограничивает снаружи первый, уже ограниченный изнутри нерассеянным лазерным лучом. Учитывая эти факты, можно сказать, что перераспределение точечных лазерно-индуцированных дефектов в слое не приведет к существенному изменению общего вида картины, или существенному изменению характеристик фрактала, и, соответственно, фрактальной размерности картины ФИРС. Более вероятным является соответствие изменения концентрации лазерно-индуцированных дефектов в слое, то есть количества элементов рассматриваемой системы, изменению фрактальной размерности слоя ФИРС.

Большинство программ, вычисляющих фрактальную размерность объектов (например, Fractalyse [20]) способны обработать и вычислить фрактальную размерность только для чёрно-белых изображений (биномизированных). Однако исходные цветные изображения картин ФИРС отличаются повышенной сложностью (рис. 2, а). Таким образом, чтобы выделить как минимум три слоя ФИРС, требуется сложная обработка оттенков цифрового изображения. Обычное цифровое переведение цветного изображения картины ФИРС в режим оттенков серого приведет к появлению изображения, которое будет иметь все стандартные 256 оттенков серого цвета. Для того чтобы решить задачу определения фрактальной размерности слоёв ФИРС, нами была разработана методика выделения слоёв ФИРС из любого цветного цифрового изображения картины ФИРС. Также метод подходит для выделения соответствующих слоёв из кругового рассеяния в кристаллах НЛ, в

которых не возбуждается ФИРС для их последующего статистического анализа. Суть метода сводится к следующему.

Формула, которая определяет уменьшение светимости в прозрачной изотропной среде по мере удаления от источника света [9]

$$\Phi = \Phi_0 e^{-r}$$

где $\Phi_{_0}$ – начальная светимость потока, Φ – светимость потока на расстоянии r от источника света.

Формула для яркости содержит угол направления на светящийся объект, однако в нашем случае двумерные картины ФИРС и кругового рассеяния рассматриваются строго перпендикулярно изображению, таким образом, формула для светимости потока будет эквивалентной формуле яркости [9].

Согласно формуле, яркость рассеянного излучения зависит от расстояния до источника света. Каждый слой ФИРС тоже определяется, прежде всего, близостью к лазерному треку – первый слой ФИРС, в объёме которого полностью изменен показатель преломления, находится ближе всего к лазерному треку. Следовательно, он должен быть самым ярким. В третьем слое, который находится дальше всего от лазерного трека, недостаточно энергии, чтобы образовывались стационарные микроструктуры с изменённым показателем преломления, в нём существуют только флуктуирующие, то есть постоянно возникающие и исчезающие микрообласти с изменённым показателем преломления. Следовательно, третий слой ФИРС должен быть и самым мало освещённым, самым тусклым.

Таким образом, на изображении картины ФИРС можно выделить слои ФИРС по разнице в их яркости. При цифровом разделении слоёв ФИРС использовалась программа Gimp 2.8.

Для получения яркости, или освещённости каждого пикселя картины, изображение переводилось в режим оттенков серого (рис. 2, б). Тем самым достигалось сглаживание возможных вариаций цвета исходно монохроматического лазерного излучения из-за особенностей цветовосприятия матрицы цифрового носителя и возможных потерь при цифровом сжатии информации.

Далее происходило разделение 256 оттенков серого путём объединения каждых 41 или 42 оттенков, следующих в цифровой палитре друг за другом, в 6 уровней освещённости (рис. 2, в), исходя из следующих принципов. Три уровня освещённости, очевидно, должны соответствовать трём слоям ФИРС (рис. 3: 1", 2, 3).

В целом, картина ФИРС является рассеянным на статических или флуктуирующих дефектах с лазерно-индуцированным измененным показателем преломления излучением. Однако, до выходной грани кристалла доходит значительная доля остаточной (не рассеявшейся в объёме кристалла) мощности лазерного луча. Это проявляется в наличии очень яркого пятна в центре слоёв ФИРС, в центре выхода на выходную грань кристалла лазерного трека. Это пятно будет формировать четвёртый уровень освещённости (рис. 3: 1'). Таким образом, до выходной грани кристалла доходит излучение

лазерного луча (уровень освещённости 1' на рис. 3). Так как первый слой непосредственно ФИРС (уровень освещённости 1" на рис. 3) состоит из объёма кристалла, в котором показатель преломления изменён полностью, но все-таки лазерное излучение рассеивается на нём, то область рассеянного излучения (первый слой ФИРС, уровень освещённости 1" на рис. 3) является менее яркой, чем сам лазерный луч.

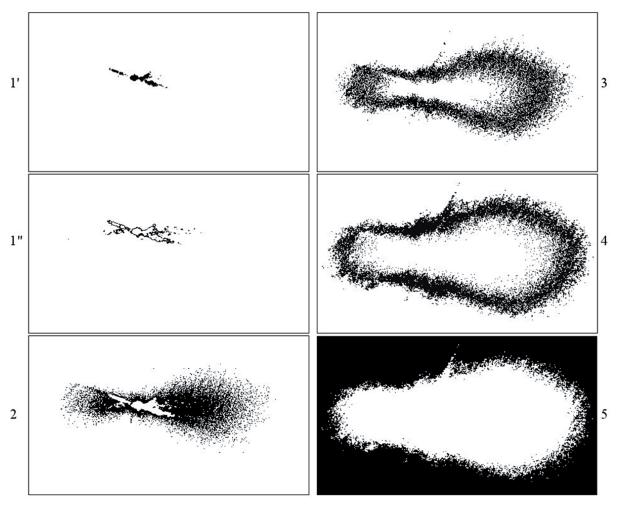


Рис. 3. Выделение слоёв ФИРС из изображения картины ФИРС конгруэнтного кристалла $LiNbO_3$: Zn ([Zn]=0.52 мас. %) на 180 с облучения лазером мощностью 35 мВт. 1'— нерассеянный лазерный луч, 1''— первый слой ФИРС, 2— второй слой ФИРС, 3— третий слой ФИРС, 4— объём кристалла, освещённый третьим слоем ФИРС, 5— неосвещённый край кристалла.

Согласно принципу Гюйгенса-Френеля, каждая точка среды, до которой дошел фронт световой волны, является источником вторичных сферических волн, огибающая которых показывает новое положение волнового фронта в следующий момент времени [9]. В среде фоторефрактивного монокристалла НЛ, при освещении лазерным лучом образуются статические или флуктуирующие лазерно-индуцированные области с изменённым показателем преломления. Исходя из принципа Гюйгенса-Френеля, они являются вторичными источниками излучения. Это ещё больше усложняет картину, так как происходит интерференция рассеянных на областях с изменен-

ным показателем преломления волн между собой и с накачкой. В третьем, самом дальнем от лазерного трека, слое ФИРС это становится менее заметным — так как дефекты с изменённым показателем преломления находятся сравнительно далеко друг от друга (значительно дальше, чем во втором слое ФИРС). К тому же, области с изменённым показателем преломления существуют в третьем слое ФИРС только определённое время, а не всё время, пока длится освещение кристалла. Таким образом, вокруг третьего слоя ФИРС должен быть слабоосвещённый объём кристалла, причем освещается он фотонами, рассеянными на флуктуирующих дефектах с изменённым показателем преломления третьего слоя ФИРС. Однако энергии в этом объёме уже не достаточно, чтобы возбудить фоторефрактивный эффект, так что этот освещённый объём не несёт информации о нём. Однако, на фотографии этот объём образует пятый уровень освещённости (рис. 3: 4). Неосвещённый край картины, соответствующий полной темноте, образует шестой уровень освещённости (рис. 3: 5).

Таким образом, для анализа картин ФИРС, возникающих в кристаллах НЛ под действием лазерного излучения видимой длины волны, возможно применение анализа фрактальной размерности слоёв ФИРС. Также был разработан алгоритм выделения слоёв из оригинальных картин ФИРС. Изменения в значении фрактальной размерности слоя ФИРС соответствуют изменению концентрации лазерно-индуцированных дефектов в этом слое.

Список литературы

- 1. Сидоров Н.В., Сюй А.В., Антонычева Е.А. и др. // Исследование фоторефрактивных свойств кристаллов $LiNbO_3$: Gd^{3+} методами фоторефрактивного и комбинационного рассеяния света. Известия вузов. Материалы электронной техники. № 3. 2010. С. 30-35.
- 2. Калинников В.Т., Палатников М.Н., Сидоров Н.В. Ниобат и танталат лития: фундаментальные аспекты технологии. Апатиты. Изд-во: КНЦ РАН. 2005. 108 с.
- 3. Климонтович Ю.Л. Введение в физику открытых систем. М.: Янус-К. 2002. 284 с.
- 4. Климонтович Ю.Л. Критерии относительной степени упорядоченности открытых систем. УФН. 1996. Т. 166. № 11. С. 1231-1243.
- 5. Климонтович, Ю.Л. Статистическая теория открытых систем: в 3 т. / Ю.Л. Климонтович. М.: Янус. 1995. Т. 1. 624 с.
- 6. Антонычева Е.А. и др. Кинетика фотоиндуцированного рассеяния света в кристаллах LiNbO₃:Cu и LiNbO₃:Zn // Прикл. физ. 2010. № 5. С. 26-31.
- 7. Кроновер Р.М. Фракталы и хаос в динамических системах. М.: Постмаркет. 2000. 352 с.
- 8. Лайнс М. Сегнетоэлектрики и родственные им материалы. М.: Мир. 1981. 736 с.
- 9. Ландсберг Г.С. Оптика. М.: Изд-во «Наука». 1976. 928 с.

- 10. Максименко В.А. Фотоиндуцированные процессы в кристаллах ниобата лития. М.: ФИЗМАТЛИТ. 2008. 96 с.
- 11. Наведенная лазерным излучением подрешётка микро- и наноструктур в фоторефрактивном монокристалле ниобата лития. ДАН. 2009. Т. 428. № 4. С. 492-495.
- 12. Пикуль О.Ю., Сидоров. Н.В. Лазерная коноскопия кристаллов. Уч. пос. под ред. М.Н. Палатникова. Апатиты: изд-во КНЦ РАН. 2014. 160 с.
- 13. Пригожин И. Время, хаос, квант. К решению парадокса времени: синергетика от прошлого к будущему. М.: Едиториал УРСС. 2003. 240 с.
- 14. Пикуль О.Ю., Алексеева Л.В., Повх И.В. и др. Особенности оптической системы для создания коноскопических фигур больших размеров. ИВУЗ. Приборостроение. 2004. № 12. С. 53-55.
- 15. Сидоров Н.В., Палатников М.Н., Калинников В.Т. Микроструктурные дефекты и проявление эффекта фоторефракции в сегнетоэлектрическом монокристалле ниобата лития. ДАН. 2011. Т. 441. № 2. С. 209-213.
- 16. Сидоров Н.В., Волк Т.Р., Маврин Б.Н., Калинников В.Т. Ниобат лития: дефекты, фоторефракция, колебательный спектр, поляритоны. М.: Наука. 2003. 256 с.
- 17. Сидоров Н.В. и др. Спектры комбинационного рассеяния света и дефекты номинально чистых монокристаллов ниобата лития // Неорг. мат. 2007. Т. 43. № 1. С. 66-73.
- 18. Сидоров Н.В., Сюй А.В., Палатников М.Н. и др.Фоторефрактивное и комбинационное рассеяние света в сегнетоэлектрическом кристалле ниобата лития // Опт. спектр. 2011. Т. 110. № 6. С. 916-922.
- 19. Хакен Г. Синергетика. М.: Мир. 1980. 408 с.
- 20. Fractalyse // [Программа для вычисления фрактальной размерности и инструкция по её применению] / Сайт распространения программы по вычислению фрактальной размерности. URL: http://www.fractalyse.org. / Дата обращения (12.03.2014).
- 21. Kinetics of photorefractive light scattering in crystals of stoichiometric lithium niobate / E.A. Antonycheva et al. // Inorg. mater.: Appl. Res. 2011. V. 2. N_2 2. P. 125-128. DOI: 10.1134/S2075113311020043.
- 22. Storage of information in lithium niobate single crystals / A. Sternberg, K. Bormanis, E.A. Antonicheva, A.V. Syuy, P.G. Chufyrev, M.N. Palatnikov, V.T. Kalinnikov//Proc. of international symposium on applications of ferroelectrics and international symposium on piezoresponse force microscopy and nanoscale phenomena in polar materials. ISAF/PFM. 2011. 24-27 July. 2011. Vancouver P. 6014152. DOI: 10.1109/ISAF.2011.6014152.

ДИФРАКЦИЯ НА ПРЕДФРАКТАЛАХ И ДВУМЕРНЫЕ КВАЗИПЕРИОДИЧЕСКИЕ РАЗБИЕНИЯ С СИММЕТРИЕЙ ПОРЯДКОВ 4, 7, 8, 9, 14 И 18

Мокрова А.А., Малеев А.В., Абелашвили И.З.

Владимирский государственный университет им. А.Г. и Н.Г. Столетовых, Владимир, albina.mokrova@yandex.ru; andr_mal@mail.ru; inga.abelashvili@yandex.ru

Аннотация

Рассмотрен способ построения квазипериодических мозаик, аналогичных мозаикам Пенроуза, основанный на геометрическом анализе Фурье-образа (полной дифракционной картины) системы точек, представляющей собой предфрактал с некристаллографической симметрией. Построены примеры квазипериодических разбиений с симметрией 4-, 7-, 8-, 9-, 14- и 18-го порядков.

Summary

We consider a new approach to construction of quasiperiodic rhombus tilings related to Penrose tilings. This approach based on geometric analysis of diffraction spectrum prefractals with non-crystallographic symmetry. The examples of quasiperiodic rhombus tilings with symmetry of the 4-, 7-, 8-, 9-, 14- and 18-fold symmetry.

В 1973 г. Роджер Пенроуз обнаружил набор из 6 фигур, из которых можно построить непериодическую мозаику, позднее число фигур было сокращено до двух. Форма двух основных фигур мозаики Пенроуза может быть различной, но наиболее широкое применение, в частности для построения двумерных моделей квазикристаллов, имеет пара простейших фигур — это ромбы: больший ромб имеет углы в 72° и 108°, меньший — в 36° и 144°. Свои знаменитые мозаики Пенроуз строил, присоединяя очередную фигуру по локальным правилам, опираясь на ближайшее окружение [4]. Существуют и другие способы построения квазипериодических разбиений.

Метод дифракции в кристаллографии имеет большое значение. Ранее в работах [1, 2] был рассмотрен новый подход к построению квазипериодических разбиений, основанный на анализе полных дифракционных картин, для построения которых в качестве рассеивающих центров используются конечные точечные множества, представляющие собой предфракталы с некристаллографической симметрией. В работе [2] было рассмотрено получение квазипериодических разбиений, аналогичных мозаикам Пенроуза, обладающих симметрией 5- и 10-го порядков. В настоящей работе приведены другие примеры построения разбиений аналогичных мозаикам Пенроуза и обладающих некристаллографической симметрией. Опишем алгоритм получение разбиения.

В качестве порождающего элемента для построения предфрактала используется правильный n-угольник Pol_n^0 , (n = 5, 7, 8, 9, ...), а в качестве порож-

дающего преобразования на k-ом шаге — замена n-угольника, являющегося выпуклой оболочкой множества Pol_n^{k-1} , на множество, состоящее из самого множества Pol_n^{k-1} и n его копий, полученных отражением относительно прямых, содержащих стороны его выпуклой оболочки. Множество Pol_n^k будем называть предфракталом k-ого порядка. На рис. 1 представлены предфракталы Pol_n^k порядков (k=0,1,2,3). В качестве рассеивающих центров для построения дифракционной картины используются центры элементарных n-угольников, из которых состоят предфракталы Pol_n^k . Дифракционная картина рассеяния на системе точек, соответствующей предфракталу, рассчитывается следующим образом. Для каждой точки S=S(X,Y) обратного пространства, определяющей направление рассеяния, рассчитывается амплитуда рассеяния по формуле

$$F(S) = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^{N} f_j \exp(2\pi i S r_j),$$
 (1)

где r_j — координаты j-го рассеивающего центра в прямом пространстве, f_j — его рассеивающая способность. В данном случае мы считаем, что рассеивающая способность всех центров одинакова и равна 1.

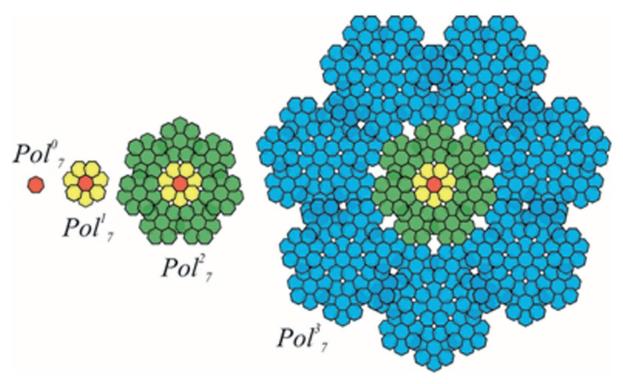


Рис. 1. Предфракталы Pol_7^k порядков (k=0, 1, 2, 3).

На дифракционных картинах, полученных от предфракталов с осями 7-, 8- и 9-го порядка, были получены квазипериодические разбиения с осями 7-го и 14-го порядка, 9-го и 18-го, 8-го, и что очень интересно, была получена мозаика с осью 4-го порядка, которая является разрешённой для кри-

сталлов, но мозаика также оказалась квазипериодической. При геометрическом анализе дифракционной картины, в качестве вершин ромбов, из которых состоит разбиение, используются точки, обладающие наибольшей интенсивностью $I(S) = |F(S)|^2$, что на дифракционной картине визуально отражено цветом. Рассмотрим каждое из полученных разбиений подробнее.

С помощью дифракционной картины, полученной от предфрактала Pol_7^4 , были получены квазипериодические разбиения с осями 7-го (рис. 2 б) и 14-го (рис. 2 в) порядков. В каждом из разбиений используется три ромба с одинаковыми сторонами и углами в 51.4° и 128.6°, 25.7° и 154.3°, 77.2° и 102.8°.

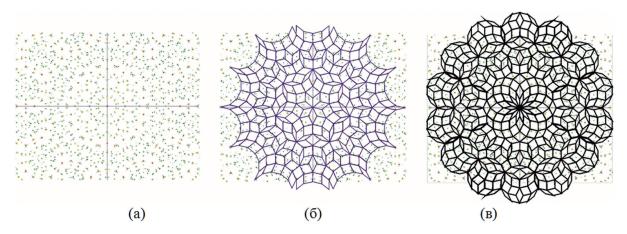


Рис. 2. Дифракционная картина, полученная для предфрактала Pol_7^4 (a) и построенные на её максимумах фрагменты квазипериодических разбиений с симметрией 7-го (б) и 14-го (в) порядков.

Для построения мозаик с осями 8-го и 4-го (рис. 3) порядков на дифракционной картине от предфрактала Pol_8^4 понадобились ромб с углами в 45° и 135° и квадрат с такими же сторонами. Мозаика с осью симметрии четвёртого порядка, как упоминалось ранее, так же получилась не периодической. Полученное разбиение, обладающее осью симметрии 8-го порядка, изобра-

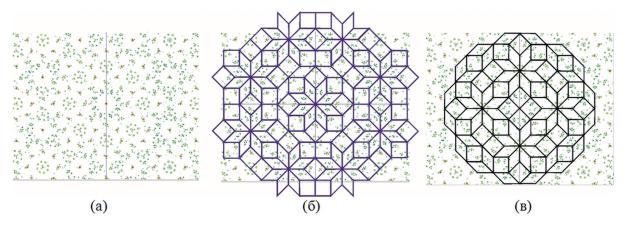


Рис. 3. Дифракционная картина, полученная для предфрактала Pol_8^4 (a) и построенные на её максимумах фрагменты квазипериодических разбиений с симметрией 8-го (б) и 4-го (в) порядков.

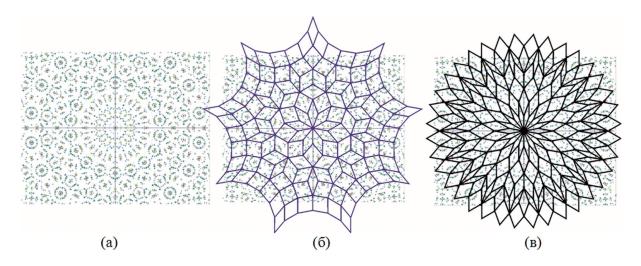


Рис. 4. Дифракционная картина, полученная для предфрактала Pol_9^4 (a) и построенные на её максимумах фрагменты квазипериодических разбиений с симметрией 9-го (б) и 18-го (в) порядков.

женное на рис. 3 (б), является достаточно широко известной конструкцией – это мозаика Амманна-Бинкера [3].

С помощью дифракционной картины полученной от предфрактала Pol_9^4 были получены непериодические мозаики с осями 9-го и 18-го порядков. Для построения мозаики 18 порядка использовалось три ромба с одинаковыми сторонами и углами в 20° и 160°, 40° и 140°, 60° и 120° (рис. 4).

Используя ромбы с теми же углами можно построить и разбиение с осью 9-го порядка, можно использовать и другой набор ромбов с углами в 40° и 140° , 80° и 100° , но наилучшее совпадение вершин ромбов с самыми яркими пиками достигается при построении мозаики с использованием всех четырех ромбов (рис. 5).

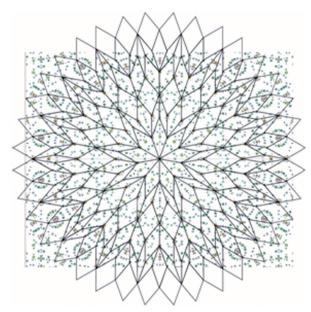


Рис. 5. Квазипериодическое разбиение с симметрией 9-го порядка, состоящее из четырёх ромбов.

В проведённом исследовании было замечено, что наиболее удобными для построения квазипериодических мозаик являются дифракционные картины, полученные от предфракталов 3-го и 4-го порядков, при увеличении или уменьшении порядка на дифракционной картине возникает много лишних пиков или их становится недостаточно для построения.

Таким образом, проведенное исследование позволяет сделать вывод о том, что квазипериодические мозаики аналоги мозаик Пенроуза с симметрией 4-го, 7-го, 8-го, 9-го, 14-го и 18-го порядков удается построить на дифракционных картинах, полученных от точечных систем, являющихся конструктивными предфракталами.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, гранты 17-02-00835-а и 17-42-330787.

Список литературы

- 1. Абросимова А.А., Малеев А.В., Журавлев В.Г. Методы построения новых двумерных квазипериодических разбиений. Школа молодых ученых по физике наноструктурированных и кристаллических материалов: Конспекты лекций и тезисы докладов. Нижний Новгород: ННГУ им. Н.И. Лобачевского. 2010. С. 71-73.
- 2. Малеев А.В., Рау В.Г., Шутов А.В. Построение квазипериодических мозаик с помощью фурье-образов предфракталов // Математические исследования в естественных науках. Тр. VIII Всероссийской научной школы. Апатиты. Геологический институт КНЦ РАН. Апатиты: Изд-во К & М. 2012. С. 21-25.
- 3. Grünbaum B., Shephard G.C. Tilings and Patterns. NY: W.H. Freemann & Co, 1986.
- 4. PenroseR. The role of aesthetics in pure and applied mathematical research. // Bull. Inst. Math. and its Appl. 1974. 10. C. 266-271.

АППРОКСИМАЦИЯ ОБЛИКА КРИСТАЛЛА: ПЕРВЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ДЛЯ ДВУМЕРНОГО СЛУЧАЯ

Степенщиков Д.Г.

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

Аннотация

В статье представлены первые наработки по количественной оценке облика искажённого кристалла. В двумерном случае кристалл моделируется как многоугольник, а его облик аппроксимируется эллипсом. Отношение длин малой и большой полуосей эллипса предлагается в качестве числовой оценки облика искажённого двумерного кристалла.

Ранее в [1-3] нами было предложено обратиться к облику кристалла как к одной из наиболее простых его морфологических характеристик. При этом было отмечено, что понятие «облик», видимо, в силу своей простоты, допускает неоднозначное толкование [3]. При переходе от качественных понятий «вытянутость», «уплощённость», «изометричность» к количественным, необходимо чётко указать метод оценки облика кристалла. Эта точность важна, например, для исследования зависимости облика кристалла от степени его искажения.

Напомним идею нашего подхода. Искажённый кристалл заменяется эллипсоидом, отношения полуосей которого задают две координаты в единичном квадрате. Таким образом, облик кристалла задаётся всего одной точкой (рис. 1). При сдвигах граней кристалла вдоль своих нормалей (рост или растворение грани), облик меняется непрерывным образом, формируя некоторое связное множество точек в пределах единичного квадрата.

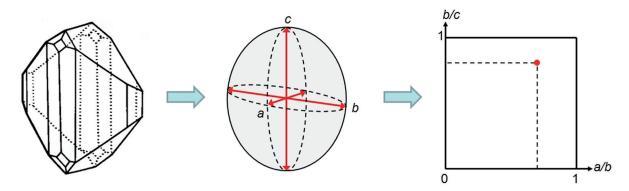


Рис. 1. Отображение облика кристалла в единичном квадрате.

Размеры и расположение эллипсоида, аппроксимирующего искажённый кристалл, подбираются так, чтобы обеспечить минимум объёма их непересекающихся частей (рис. 2). Последнее требование представляет особую сложность, так как ставит задачей подбор 9 параметров: координаты центра эллипсоида (3 числа), его ориентировку в пространстве (3) и длины его полуосей (3).

В данной работе мы рассматриваем более простой двумерный случай. Кристаллы при этом имеют вид многоугольников и аппроксимируются эллипсами. Число неизвестных величин сокращается до 5: координаты центра эллипса (2), ориентировка эллипса на плоскости (1) и длины его полуосей (2). Данное понижение размерности, помимо упрощения, имеет и практический смысл как метод для описания морфологии плоских кристаллов [4].

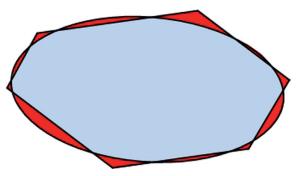


Рис. 2. Схема кристалла и аппроксимирующего его эллипсоида (непересекающиеся части выделены красным).

Для сокращения рутинного перебора возможных значений всех пяти параметров, нами было использовано несколько интуитивных допущений, которые, как показали последующие результаты, вполне корректны. Во-первых, за центр эллипса принимается барицентр (геометрический центр) многоугольника. Во-вторых, диапазон изменения обеих полуосей эллипса ограничивается сверху максимальным расстояни-

ем от барицентра до вершины многоугольника (а снизу нулем). Такое равноправие полуосей, в свою очередь, позволяет сократить диапазон ориентировки (поворота) эллипса относительно многоугольника до 90°. В-третьих, предполагается, что при выбранной ориентировке эллипса и многоугольника зависимость суммарной площади их непересекающихся частей S представляет собой непрерывную функцию S(a,b) двух переменных (длин полуосей a и b) с единственным минимумом S_{min} . Это позволяет избежать прямого перебора и находить оптимальные значения полуосей эллипса, например, методом спуска. И, в-четвёртых, зависимость минимального значения S_{min} от угла поворота α предполагается непрерывной функцией $S_{min}(\alpha)$ с единственным минимумом. Все эти эвристики представляют отдельный теорети-

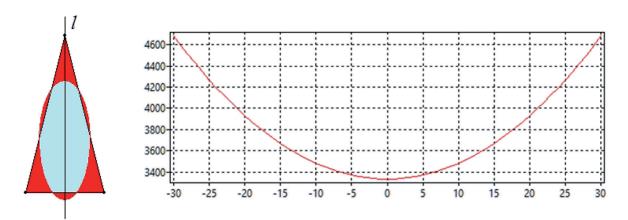


Рис. 3. Равнобедренный треугольник с наложенным аппроксимирующим эллипсом (слева, красным выделена суммарная площадь их непересекающихся частей S) и график зависимости S от смещения центра эллипса от барицентра треугольника вдоль прямой l (справа, положительное направление смещения — вверх).

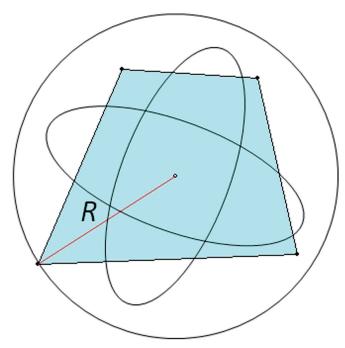


Рис. 4. Четырёхугольник внутри окружности с центром в его барицентре и радиусом R и два взаимно перпендикулярных эллипса с полуосями а и в или, что то же самое, два одинаково ориентированных эллипса с полуосями а, в и в, а соответственно.

ческий интерес с точки зрения их строгих доказательств или опровержений. Здесь же мы ограничимся рядом примеров.

Рассмотрим равнобедренный треугольник с длиной основания 100 ед. и высотой 200 (рис. 3). Из соображений симметрии и удлинения треугольника, большая полуось аппроксимирующего эллипса будет лежать на одной прямой l с высотой треугольника. Это позволяет варьировать только одну координату центра эллипса. На графике видно, что величина S минимальна при нулевом смещении центра эллипса от барицентра треугольника вдоль прямой l (симметричность графика является побочным эффектом).

На рис. 4 изображён четырёхугольник, вокруг которого проведена окружность с центром в барицентре четырёхугольника и радиусом R, равным расстоянию от барицентра до наиболее удалённой от него вершины четырёхугольника. Меньше R быть не может, так как является оптимальным для эллипса с a=b=R, аппроксимирующего правильный многоугольник с бесконечным числом вершин и дающего минимально возможную нулевую S. Большее значение R приводит только к увеличению S. Рассмотрим множество аппроксимирующих эллипсов, одинаково ориентированных относительно многоугольника, и пусть длины их полуосей независимо изменяются от 0 до R. Тогда для любого эллипса с полуосями a и b всегда найдётся эллипс с полуосями b и a, совпадающий по форме с исходным, но повёрнутый относительно него на 90° (внутренние эллипсы на рис. 4). Оба этих эллипса в силу симметрии совпадают с самими собой, повёрнутыми на 180° . В итоге, перебор всех возможных ориентировок эллипсов в пределах прямого угла оказывается исчерпывающим, так как при независимом переборе

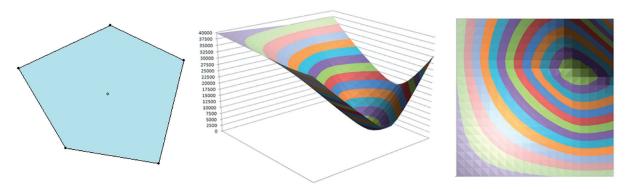


Рис. 5. Пятиугольник и график функции S(a,b) в перспективе и в плане.

длин полуосей, каждый эллипс, как бы проходит четыре позиции, отличающиеся друг от друга поворотом на прямой угол.

Для пятиугольника на рис. 5. тут же приведён график функции S(a,b) при вертикальной ориентировке аппроксимирующего эллипса. Видно, что график представляет собой непрерывную поверхность с единственным минимумом в зелёной области.

Наконец, рис. 6. иллюстрирует характер зависимости $S_{min}(\alpha)$ от ориентировки аппроксимирующего эллипса на примере шестиугольника. Единственный минимум функции достигается при повороте большой оси аппроксимирующего эллипса примерно на 25 $^{\circ}$ относительно горизонтальной оси координат.

Указанный подход был реализован автором в свободно распространяемой IDE Lazarus (версия 1.6.4) на языке Object Pascal в виде приложения, позволяющего по введённым координатам вершин многоугольника вычислять положение и форму аппроксимирующего эллипса. В качестве числовой характеристики облика многоугольника было взято отношение f длин меньшей полуоси к большей. Примем, что многогранник имеет вытянутый (или, что то же самое для плоского случая, уплощённый) облик, если f < 0.5 и изометричный облик, если f > 0.5. Само f, очевидно, изменяется в пределах от 0 до 1. На рис. 7 показаны примеры работы приложения — ряд многоугольников и аппроксимирующих их эллипсов, с указанием направления большой оси эллипсов и отношения f. Отметим, что правильные многоугольники (например, пятиугольник на рис. 7) аппроксимируются окружностями (эллип-

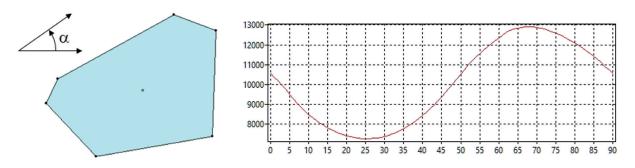


Рис. 6. Шестиугольник и график функции $S_{min}(\alpha)$.

сами с равными длинами полуосей), а прямоугольники (например, прямоугольник на рис. 7) — эллипсами, для которых f совпадает с отношением сторон прямоугольника. Среди всех указанных на рис. 7 многоугольников вытянутым можно считать только последний с f=0.19. Прямоугольник с f=0.5 в равной степени может считаться как вытянутым, так и изометричным.

Полученные пилотные результаты подтвердили эффективность предлагаемого способа оценки облика двумерного кристалла, что даёт основания для его расширения на трёхмерный случай — для оценки облика реальных искажённых кристаллов.

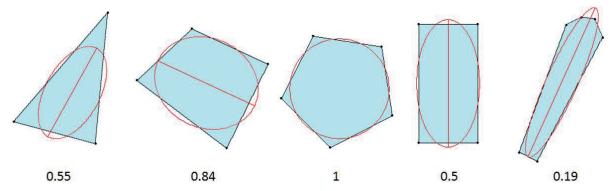


Рис. 7. Примеры многоугольников и аппроксимирующих их эллипсов. Снизу приведены отношения длин меньшей полуоси к большей.

Список литературы

- 1. Степенщиков Д.Г., Войтеховский Ю.Л. О связи облика и реальной формы кристалла // Вестник КНЦ РАН. № 1. 2012. С. 145-148.
- 2. Степенщиков Д.Г. Облик как характеристика искажённых кристаллов // Материалы юбилейного съезда Российского минералогического общества «200 лет РМО». СПб. 2017. Т.1. С. 132-133.
- 3. Степенщиков Д.Г. Аппроксимация облика кристалла трёхосным эллипсоидом // Тр. Ферсмановской науч. сессии ГИ КНЦ РАН. 2018. 15. С. 357-360.
- 4. Шафрановский И.И. О кристалломорфологическом описании микрокристаллических минералов // Минералогический сборник Львовского геологического общества. 1959. № 13. С. 73-83.

ГАРМОНИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ ФОРМЫ МОЛЕКУЛ

Шутов А.В., Малеев А.В., Вилкова А.Е.

Владимирский государственный университет, Владимир, a1981@mail.ru; andr_mal@mail.ru; vilkova-anya@mail.ru

Аннотация

Рассматриваются современные подходы к описанию внешней формы молекул на основе гармонического анализа. Приведен подход к описанию молекулярных циклов на основе дискретного преобразования Фурье, а также описание внешней формы молекул, близких к сферическим, на основе разложения по сферическим гармоникам. Проведена апробация на ряде органических молекул. Кратко обсуждаются возможные приложения в кристаллохимии.

Summary

Modern approaches to the description of the external form of molecules on the basis of harmonic analysis are considered. The approach to the description of molecular cycles based on the of the discrete Fourier transform is described, as well as the description of the external form of molecules close to spherical, on the basis of expansion in spherical harmonics. Approbation was carried out on a number of organic molecules. Possible applications in crystallochemistry are briefly discussed.

Описание молекулярных циклов. Задача математического описания внешней формы молекул является достаточно старой задачей кристалло-химии. Впервые она была рассмотрена Килпатриком и др. в [14] на примере циклопентанов — углеводородов с пятичленными циклами. Основная идея состояла в том, чтобы рассматривать различные возможные формы циклопентанов как результаты псевдовращения на некоторый угол φ . Соответствующие формулы имеют вид

$$z_j = \sqrt{\frac{2}{5}}q\cos 2\left(\frac{2\pi}{5}j + \varphi\right).$$

Здесь z_j — отклонение атомов от средней плоскости цикла, амплитуда q определяет складчатость цикла, т.е. степень отклонения атомов от плоского цикла, в направлении перпендикулярном циклу, φ — характер этих отклонений. С помощью этого псевдовращения, он обнаружил две симметричные формы циклопентана с симметрией C_s и C_2 (m и 2).

В дальнейшем эта идея была обобщена в [13] Кремером и Поплом, предложившими параметры складчатости, описывающие отклонение от средней плоскости атомов произвольного молекулярного цикла. Плоскость, заданная нормалью $n=R'\times R''$, где называется средней плоскостью молекулярного цикла (рис. 1).

$$R' = \sum_{j=1}^{N} r_{j} \sin \left(\frac{2\pi(j-1)}{N} \right) \text{ и } R'' = \sum_{j=1}^{N} r_{j} cos \left(\frac{2\pi(j-1)}{N} \right), \text{ в которой } \sum_{j=1}^{N} z_{j} = 0$$

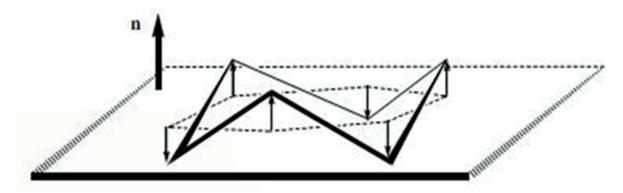


Рис. 1. Средняя плоскость молекулярного цикла.

Отклонение атомов от этой средней плоскости можно рассматривать как периодическую функцию дискретного переменного. Амплитуды q_m и фазовые углы ϕ_m – коэффициенты разложения в гармонический ряд этой функции, получили название параметров складчатости. Из-за того, что функция периодическая, с периодом, совпадающим с числом атомов в цикле, число гармоник конечно. Первая гармоника обращается в 0, т.к. она лежит в средней плоскости. Сами параметры можно найти из системы уравнений:

$$\begin{cases} q_m \cos \varphi_m = \sqrt{\frac{2}{N}} \sum_{j=1}^N z_j \cos \left(\frac{2\pi m(j-1)}{N} \right) \\ q_m \sin \varphi_m = -\sqrt{\frac{2}{N}} \sum_{j=1}^N z_j \sin \left(\frac{2\pi m(j-1)}{N} \right) \end{cases}$$

Здесь M=(N-1)/2, если N нечётно, M=N/2-1, если N – чётно. Кроме того, для чётного N добавляется ещё один параметр

$$q_{N/2} = \sqrt{\frac{1}{N}} \sum_{j=1}^{N} z_{j} cos(\pi(j-1)) = \sqrt{\frac{1}{N}} \sum_{j=1}^{N} (-1)^{j-1} z_{j}.$$

При использовании параметров складчатости для циклов, содержащих гетеро-атомы, возникли проблемы из-за того, что длины связей становились сильно неодинаковыми. Описание конформации, определяемое параметрами складчатости, не соответствовала общепринятым представлениям. Чтобы решить эту проблему в 1980 г. Зефиров и Палюлин [3-5] предложили модифицированные параметры складчатости. Вместо отклонений атомов от средней плоскости в гармонический ряд разлагают синусы половинных эндоциклических углов.

$$\begin{cases} s_m \cos \psi_m = -\sqrt{\frac{2}{N}} \sum_{j=1}^N \sin \frac{\varphi_j}{2} \sin \left(\frac{2\pi m(j-1)}{N} \right) \\ s_m \sin \psi_m = -\sqrt{\frac{2}{N}} \sum_{j=1}^N \sin \frac{\varphi_j}{2} \cos \left(\frac{2\pi m(j-1)}{N} \right) \end{cases}$$

Для чётного N добавляется еще один параметр

$$s_{N/2} = \sqrt{\frac{1}{N}} \sum_{j=1}^{N} \sin \frac{\varphi_j}{2} \cos(\pi(j-1))$$

Обобщённые гармонические параметры

Параметры складчатости Кремера-Попла и модифицированные параметры складчатости Палюлина-Зефирова активно используются для описания конформаций циклов малого размера. Для средних циклов и макроциклов форма цикла будет определяться не только отклонением атомов от средней плоскости, т.е. не только складчатостью. Форма может зависеть от характера проекции цикла на среднюю плоскость. Поэтому, в 1995 году были предложены обобщённые гармонические параметры [12], представляющие собой коэффициенты разложения в гармонический ряд трёх функций дискретного переменного (рис. 2). Первая из этих функций совпадает с функцией отклонений атомов от средней плоскости цикла, поэтому параметры складчатости Кремера-Попла входят в обобщённые гармонические параметры как часть.

Вторая функция представляет собой функцию расстояний $R_j = \sqrt{x_j^2 + y_j^2}$ от проекций атомов цикла на среднюю плоскость до некоторой точки на этой средней плоскости. Эти параметры были названы параметрами выпуклости. Наконец параметры неравномерности определяются как коэффициенты разложения в гармонический ряд функции расстояний

$$D_{j} = R_{j} \arcsin \left(\frac{1}{R_{j}} \left(x_{j} \cos \left(\frac{2\pi(j-1)}{N} \right) + y_{j} \sin \left(\frac{2\pi(j-1)}{N} \right) \right) \right)$$

от проекций атомов на среднюю плоскость до лучей в этой плоскости, построенных из центра цикла с угловым шагом $2\pi/N$, где N — число атомов в цикле.

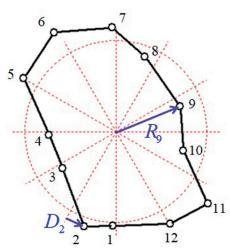


Рис. 2. Проекция 12-членного цикла на среднюю плоскость.

Параметры выпуклости отражают характер и степень «вытянутости» проекции цикла на среднюю плоскость (рис. 3). Постоянная составляющая совпадает со средним расстоянием от центра цикла до проекций атомов на среднюю плоскость. Центр цикла выбирается так, чтобы первая гармоника обратилась в нуль. Впервые эти параметры, названные параметрами выпуклости-вогнутости, были предложены ранее в 1984 году Кузминым с соавторами [6], однако в этой работе начало координат помещается в геометрический центр цикла, поэтому первая гармоника не обращалась в нуль.

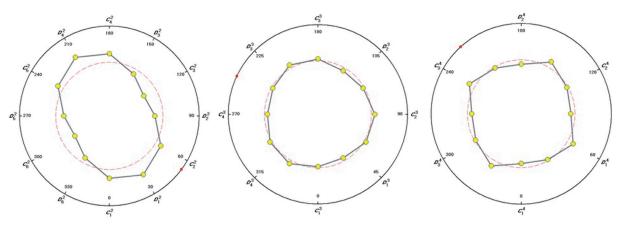


Рис. 3. Вторая, четвёртая и третья гармоники выпуклости 12-членного цикла.

Параметры неравномерности отражают характер и степень отклонения проекций на среднюю плоскость радиус-векторов атомов от лучей, идущих из центра с шагом $2\pi/N$ (рис. 4) Поворотом вокруг оси Оz в гармоническом разложении исключается постоянная составляющая.

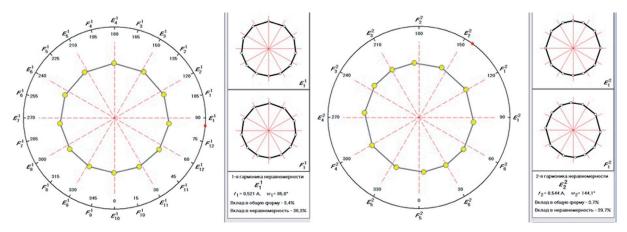


Рис. 4. Первая и вторая гармоники неравномерности 12-членного цикла.

Алгоритм расчёта обобщенных гармонических параметров включает в себя расчёт координат атомов цикла в строго определённой системе координат. Это позволяет использовать эти параметры для качественного и количественного сравнения двух молекулярных циклов с одинаковым числом атомов [9]. Кроме того, анализ обобщённых гармонических параметров позволяет количественно оценить возможную для цикла данного размера собственную приближённую некристаллографическую симметрию [11]. Применение аналогичного подхода к бесконечным периодическим молекулярным цепям позволили ввести винтовые параметры, описывающие конформацию цепей [8].

Сферический гармонический анализ внешней формы молекулы

Возникает естественная задача применения гармонического анализа для описания внешней формы произвольной молекулы. Подобное описание может использоваться для анализа собственной приближённой некри-

сталлографической симметрии молекул, выявления особенностей молекул, определяющих молекулярную упаковку, сравнения кристаллических упаковок химически совершенно различных молекул и т.д. Но здесь возникает принципиальное отличие от рассмотренных выше примеров. Если произвольную молекулу представить в виде набора точек — центров атомов, то для этой точечной системы не существует естественного способа упорядочения атомов. А без этого разложение в конечный гармонический ряд невозможно.

Основная идея состоит в переходе от дискретной модели молекулы к непрерывному описанию границы. В качестве такого описания может использоваться геометрическая модель молекулы, предложенная А.И. Китайгородским, либо более сложные конструкции, например поверхность Хиршфельда. Если полученная поверхность близка к сферической (например, выпуклая или звёздная), соответствующую функцию можно разложить в бесконечный ряд по так называемым сферическим гармоникам [15-17].

В настоящей работе, в отличие от [15-17] мы ограничиваемся использованием геометрической модели молекулы, которая представляет собой объединение шаров, центры которых совпадают с центрами атомов молекулы, а радиусы отвечают возможным кратчайшим межмолекулярным контактам этих атомов. По данной модели строится R-функция двух переменных, описывающая расстояния до границы от некоторой заданной точки внутри молекулы, условно называемой центром молекулы (рис. 5).

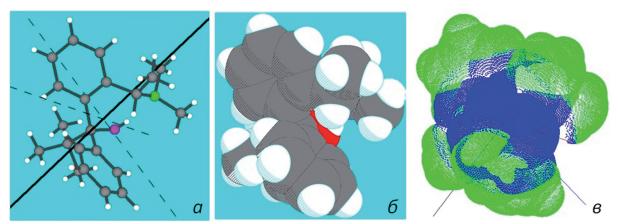


Рис. 5. а — шаростержневая, δ — геометрическая модели молекулы, ϵ — R-функция её внешней поверхности.

Для молекул, близких к сферическим, R-функция разлагается по так называемым сферическим гармоникам. Эти сферические гармоники представляют собой собственные функции оператора Лапласа и рассчитываются с использованием многочленов Лежандра и присоединённых функций Лежандра [2]. Мы используем разложение вида

$$r(\theta,\varphi) = a_0^{(0)} + \sum_{n=1}^{\infty} \left(k(n,0) a_0^{(n)} P_n(\cos\theta) + \sum_{m=1}^{n} k(n,m) \left(a_m^{(n)} \cos m\varphi + b_m^{(n)} \sin m\varphi \right) P_{n,m}(\cos\theta) \right), (*)$$

где

$$P_n(x) = \frac{1}{n!2^n} \frac{d^n}{dx^n} (x^2 - 1)^n$$
 – многочлены Лежандра, а

$$P_{n,m}(x) = (1-x^2)^{\frac{m}{2}} \frac{d^m P_n(x)}{dx^m}$$
 — присоединённые функции Лежандра.

Коэффициенты разложения $a_m^{(n)}$ и $b_m^{(n)}$, которые вычисляются по формулам

$$\begin{cases} a_m^{(n)} = k(n,m) \int_{S^2} r(\theta,\varphi) P_{n,m}(\cos\theta) \cos m\varphi d\theta \\ b_m^{(n)} = k(n,m) \int_{S^2} r(\theta,\varphi) P_{n,m}(\cos\theta) \sin m\varphi d\theta \end{cases}, \text{ ГДе}$$

$$k(n,m) = \sqrt{\frac{(2n+1)(n-m)!}{2\delta_m \pi(n+m)!}}, \ \delta_m = \begin{cases} 2, & npu & m=0\\ 1, & npu & m>0 \end{cases}, \ \text{a} \ P_{n,0}(x) = P_n(x),$$

достаточно быстро стремятся к нулю.

Отметим, что используемое нами разложение отличается от классического разложения из [2] (использовавшегося и в работах [15-17]) наличием коэффициента k(n,m). Математический смысл этого коэффициента состоит в том, что нормы всех гармоник в соответствующем функциональном пространстве равны единице. Это позволяет нам сравнивать вклады отдельных гармоник в разложение.

Отметим, что приведённое разложение по сферическим гармоникам не является инвариантным относительно выбора системы координат. Для решения этой проблемы в [17] было предложено использовать найденные в [1] функции от коэффициентов разложения, которые оказываются независимыми от выбора системы координат. Однако, число получаемых таким образом инвариантов, существенно меньше, чем число исходных коэффициентов. Поэтому при переходе к ним происходит существенная потеря информации, не позволяющая, в частности, восстановить обратно внешнюю форму молекулы. Поэтому нами использован альтернативный подход, в котором система координат выбирается из физических соображений: оси координат направляются вдоль трёх осей инерции молекулы.

Отметим также, что построение разложения по сферическим гармоникам требует умения вычислять с высокой точностью сферические интегралы. Для решения этой задачи мы используем икосаэдральный сферический дизайн на 33002 точки [18], по которому далее строится триангуляция Делоне. Для приближённого вычисления интеграла берется сумма значений функции по центрам полученных треугольников с весами, пропорциональными их площадям. Данная стратегия реализована в компьютерных программах [7, 10].

Сферические гармоники

Каждому слагаемому в разложении (*) соответствует некоторая симметричная форма, симметрия которой определяется индексами m и n, а ориентация амплитудами $a_m^{(n)}$ и $b_m^{(n)}$. Для гармоник с m=0 амплитуда $b_m^{(n)}$ обращается в нуль. На рис. 6 представлено несколько первых сферических гармоник, для которых m=0. Для каждой гармоники представлены две проекции. Зелёным цветом выделены области сферических гармоник, в которых R-функция больше своего среднего значения, синим — меньше среднего. Отметим, что все гармоники этого типа имеют осевую симметрию бесконечного порядка. Если n чётное, то добавляется ещё плоскость симметрии, перпендикулярная этой оси.

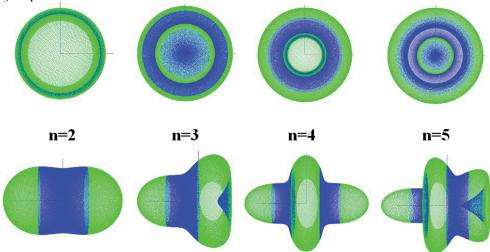


Рис. 6. Сферические гармоники с m=0.

Для гармоник с m не равным 0 обе амплитуды $a_m^{(n)}$ и $b_m^{(n)}$ могут быть отличными от нуля. Симметрия этих гармоник определяется индексами n и m. Форма (с точностью до движения) определяется интегральной амплитудой $C_m^{(n)} = \sqrt{\left(a_m^{(n)}\right)^2 + \left(b_m^{(n)}\right)^2}$, а ориентация — соотношением амплитуд $a_m^{(n)}$ и $b_m^{(n)}$.

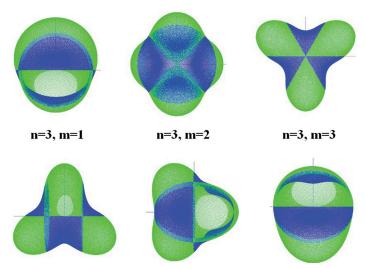


Рис. 7. Сферические гармоники с n=3, m=1,2,3.

Вне зависимости от амплитуд сферическая гармоника всегда имеет поворотную ось симметрии m-го порядка и m плоскостей симметрии вдоль этой оси. Другие преобразования симметрии сферических гармоник определяются чётностью индексов n и m. В частности, для n=3 и m=2 соответствующая сферическая гармоника имеет исключительную симметрию третьего порядка. На рис. 7 приведены сферические гармоники с n=3 и m от 1 до 3. Для всех гармоник $b_m^{(3)}$ =0.

Аппробация

При моделировании формы реальной молекулы, оставляя в разложении только гармоники, интегральные амплитуды которых превосходят некоторую наперёд заданную величину, получаем требуемое описание молекулы. Данное описание инвариантно и содержит существенно меньше параметров, чем координатное описание геометрической модели. Кроме того, в силу сходимости ряда, оно отражает все наиболее существенные черты формы молекулы.

В табл. 1 приведены сферические гармонические параметры порядка, не превосходящего 7 для молекулы трихлорметила $\mathrm{CHCl_3}$. На рис. 8 представлена внешняя форма данной молекулы, а также результаты её моделирования по двум, четырём и десяти гармоникам с наибольшим вкладом. В табл. 2-3 и на рис. 9,10 представлены результаты моделирования более сложных органических молекул $\mathrm{C_{21}H_{29}CNO}$ и $\mathrm{C_{18}H_{20}O_{3}}$ соответственнно.

Таблица 1. Сферические гармонические параметры молекулы СНСІ3.

	S(n=1)	fi(n=1)	S(n=2)	fi(n=2)	S(n=3)	fi(n=3)	S(n=4)	fi(n=4)	S(n=5)	fi(n=5)	S(n=6)	fi(n=6)	S(n=7)	fi(n=7)
1	0,7438142		1,1342104	-	0,7708425	2.0	0,1875448	-	0,2617866		0,0095459	-	0,0017037	-
	0,0000143	326,86	0,0000312	59,68	0,0000535	69,75	0,0000253	333,11	0,0000500	40,61	0,0000134	326,42	0,0000101	106,89
2			0,0000405	167,67	0,0000381	63,64	0,0000258	38,73	0,0000142	102,91	0,0001383	179,03	0,0000044	227,03
3					1,2779997	130,21	0,1705049	130,21	0,1082609	130,20	0,1961535	130,21	0,0043527	229,83
4							0,0000023	10,15	0,0000222	0,48	0,0001259	1,54	0,0000189	27,53
5									0,0000027	16,36	0,0000057	66,11	0,0000164	58,45
6	A[0,0]=	2,4675713									0,2586401	80,39	0,0615804	80,41
7													0,0000071	262,44

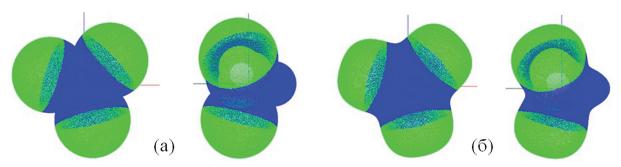


Рис. 8. R-функция молекулы трихлорметрила $CHCl_3$ (a); модель молекулы по десяти гармоникам (б).

Таблица 2. Сферические гармонические параметры молекулы $\mathbf{C}_{21}\mathbf{H}_{29}\mathbf{C}\mathbf{NO}$.

	S(n=1)	fi(n=1)	S(n=2)	fi(n=2)	S(n=3)	fi(n=3)	S(n=4)	fi(n=4)	S(n=5)	fi(n=5)	S(n=6)	fi(n=6)	S(n=7)	fi(n=7)
1	0,3285153	-	1,9215075	-	1,0502719	-	0,1634738	-	0,9794429	-	0,2124093	-	0,1932943	
	0,2589115	322,38	0,2646202	90,11	0,9271781	190,36	1,1391488	251,02	0,2108026	327,37	0,3729720	120,99	0,3147850	340,66
2			1,2056418	165,74	1,5073186	282,41	0,6083620	2,58	0,8228754	82,91	0,3443580	187,80	0,4916282	100,73
3					1,2470962	9,37	0,2469094	346,81	0,3526319	158,08	0,1693347	37,68	0,1863538	23,34
							0,6172235	276,47	0,1864151	36,44	0,4213243	348,89	0,3120944	53,44
5									0,3639554	106,41	0,1980255	80,08	0,1039705	148,48
5	A[0,0]=	3,6132396									0,2746503	29,52	0,1198675	100,81
7									1				0,0817498	297,37

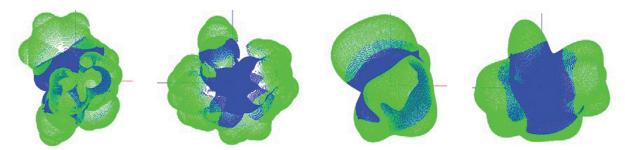


Рис. 9. R-функция молекулы $C_{21}H_{29}CNO$ (a); модель молекулы по двадцати гармоникам (б).

Таблица 3. Сферические гармонические параметры молекулы $C_{18}H_{20}O_3$

	S(n=1)	fi(n=1)	S(n=2)	fi(n=2)	S(n=3)	fi(n=3)	S(n=4)	fi(n=4)	S(n=5)	fi(n=5)	S(n=6)	fi(n=6)	S(n=7)	fi(n=7)
1	0,4786339		3,1454784		0,4690055		0,0635757	-	0,2590779	-	0,2017088		0,0937625	-
	0,8195718	317,77	0,6810658	239,25	0,4512343	63,89	0,7441825	102,56	0,3500996	57,67	0,2193500	200,02	0,2646725	19,30
2			0,9706948	351,29	2,2602624	196,06	0,2917233	290,11	1,4354964	191,85	0,4496227	142,90	0,1990231	75,37
3					0,8672228	191,20	0,8208322	9,99	0,3847814	52,31	0,5487976	61,44	0,2181341	99,21
4							0,6664619	228,68	0,1869757	249,34	0,2880574	185,43	0,4067118	145,72
5									0,2864739	287,98	0,0898079	286,53	0,1767710	186,04
6	A[0,0]=	3,1815124									0,0611050	276,88	0,1158280	9,01
7													0.1389988	167.57

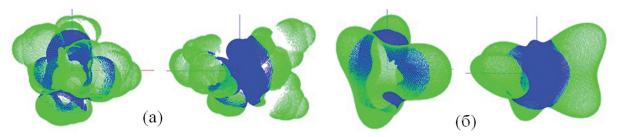


Рис. 10. R-функция молекулы $\mathbb{C}_{18}H_{20}O_3(a)$; модель молекулы по двадцати гармони-кам (б).

Нерешённые задачи

В заключение хотелось бы выделить ряд вопросов заслуживающих дальнейшего исследования.

Для вычисления коэффициентов гармонического ряда требуется с достаточно высокой точностью рассчитывать интегралы по сфере. Это трудная вычислительная задача, поскольку она требует наличие большого количества точек, достаточно равномерно распределённых по сфере.

Для получения полезной информации из гармонического разложения важно знать основные геометрические особенности базисных форм. В частности, хотелось бы по номеру гармоники находить симметрию базисной формы, а также число и характер расположения выступов и впадин, что особенно интересно с точки зрения анализа молекулярных упаковок.

В отличие от случая молекулярных циклов, разложение по сферическим гармоникам является бесконечным. В реальной модели мы можем взять только конечное число гармоник. Возникает проблема: в каком месте обрывать разложение?

Предложенный метод хорошо работает для молекул по форме близких к сферическим. Математически это можно выразить условием звёздности. Для молекул, форма которых далека от сферической: сильно вытянутых, имеющих тороидальную форму и так далее, возможно использование других разложений, например, по эллиптическим, цилиндрическим или другим гармоническим функциям.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, гранты 17-02-00835-а и 17-42-330787.

Список литературы

- 1. Вейль Г. Классические группы, инварианты и представления. М.: Гос. изд-во иностранной литературы. 1947. 404 с.
- 2. Гобсон А.В. Теория сферических и эллисоидальных функций. М.: ИЛ. 1952. 476 с.
- 3. Зефиров Н.С., Палюлин В.А. и др. // ДАН СССР. 1980. Т. 252. С. 111.
- 4. Зефиров Н.С., Палюлин В.А. и др. // ДАН СССР. 1987. Т. 292. С. 1380.
- 5. Зефиров Н.С., Палюлин В.А. и др. // J.Phys.Org.Chem. 1990. Т. 3. С. 147.
- 6. Кузьмин В.Е., Тригуб Л.П., Богатский А.В. // ДАН. 1984. Т. 278. С. 1401.
- 7. Малеев А.В. Программа расчета R-функции внешней формы геометрической модели молекулы. М.: Федеральная служба по интеллектуальной собственности (Роспатент). 2017.
- 8. Малеев А.В., Воронцов И.И., Стручков Ю.Т. Конформационный анализ периодических цепных молекул // Докл. РАН. 1994. Т. 338. С. 771-775.
- 9. Малеев А.В., Левина О.И. Сравнительный конформационный анализ двух молекулярных циклов // Кристаллография. 1996. Т. 41. С. 999-1005.
- 10. Малеев А.В., Шутов А.В. Программа расчета сферических гармонических параметров R-функции внешней формы молекул.М.: Федеральная служба по интеллектуальной собственности (Роспатент). 2017.
- 11. Малеев А.В., Потехин К.А., Стручков Ю.Т. Исследование диссимметричности молекулярных циклов // ДАН. 1995. Т. 345. С. 348-353.
- 12. Малеев А.В., Левина О.И., Потехин К.А. и др. // ДАН. 1995. Т. 340. С. 499.
- 13. Cremer D., Pople: J. A. A General Definition of Ring Puckering Coordinates. // J. Am. Chem. Soc. 1975. V. 97. P. 1354-1358.
- 14. Kilpatrick J.E., Pitzer K.S., Spitzer R. The Thermodynamics and Molecular Structure of Cyclopentane // J. Am. Chem. Soc. 1947. V. 69. P. 2483-2488.

- 15. Mak L., Grandison S., Morris R. J. An extension of spherical harmonics to region-based rotationally invariant descriptors for molecular shape description and comparison // J. Mol. Graphics. Modell. 2008. V. 26. P. 1035-1045.
- 16. Morris R. J., Najmanovich R. J., Kahraman A., Thornton J. M. Real spherical harmonic expansion coefficients as 3D shape descriptors for protein binding pocket and ligand comparisons // Bioinformatics. 2005. V. 21. P. 2347-2355.
- 17. Spackman P.R., Thomas S.P., Jayatilaka D. High Throughput Profiling of Molecular Shapes in Crystals // Scientific Reports, 6:22204. DOI: 10.1038/srep22204.
- 18. Hardin R.H., Sloane N.J.A. and Smith W.D. Tables of Spherical Codes with Icosahedral Symmetry [сайт] URL: http://neilsloane.com/icosahedral.codes/index.html



РАЗРАБОТКА ОСНОВЫ БАЗЫ ДАННЫХ ВЫСОКОВОЛЬТНЫХ ЭЛЕКТРИЧЕСКИХ СЕТЕЙ ДЛЯ СОЗДАНИЯ СИСТЕМЫ ИХ КОНТРОЛЯ

Бурцев А.В.

Центр физико-технических проблем энергетики Севера ФГБУН КНЦ РАН, Апатиты, a.burtsev@tehnonord.ru

Аннотация

Представлен опыт разработки базы данных по элементам высоковольтной сети, ориентированной на решение прикладных задач в области электроэнергетики. Показан интерфейс созданной информационной модели и перспективы внедрения аналитических алгоритмов.

Summary

The experience of developing a database on the elements of the high-voltage network, focused on solving applied problems in the field of power engineering, is presented. The interface of the created information model and perspectives for the implementation of analytical algorithms are shown.

Введение

Как правило, любое исследование физических процессов в высоковольтной сети начинается с получения исходных данных путём измерения соответствующих величин в реальных высоковольтных установках и последующего составления расчётной модели. В некоторых случаях в качестве исходных данных можно использовать паспорт объекта. Если рассматривается воздушная линия электропередачи (ВЛ), то её паспорт содержит достаточный набор данных для анализа, например, грозоупорности. Обычно расчёт грозоупорности проводится по руководству по защите электрических сетей 6-1150 кВ от грозовых и внутренних перенапряжений (РД), где оценка удельного числа грозовых отключений ВЛ производится по усреднённым показателям, т.е. принято единое значение сопротивления заземления всех опор ВЛ, среднее значение пролетов, тип опор, не учитывается высота размещения опор над уровнем моря и пр. Такая методика принята достаточно давно и рассматривается как в старых, так и в относительно новых учебных пособиях [1, 2]. Однако, более точный расчёт должен учитывать индивидуальные особенности каждого пролета всей ВЛ, что подтверждается в [3]. В то же время, паспорта ВЛ, предоставленные в ЦЭС КНЦ электроэнергетическим предприятием для изучения, лишь частично представлены в электронном виде, а самые важные для расчётов параметры находятся только на бумаге. Бумажный документооборот достаточно сильно усложняет различные физические расчёты, требуя перевод в электронный вид. Таким образом, возникла идея разработки базы данных по элементам высоковольтной сети, где будет структурирована вся информация, позволяющая быстро построить нужную модель с учётом всех параметров, занесённых в базу.

К тому же, у автора уже имеется опыт создания таких информационных моделей [4]. Для базы данных сформулированы следующие требования:

- многопользовательский режим с разделением прав пользователей;
- дружелюбный пользовательский интерфейс;
- удобный ввод и вывод требуемой информации;
- минимальные финансовые затраты на разработку и поддержку;
- минимум сторонних приложений;
- совместимость с любой из наиболее распространенных операционных систем.

Для реализации идеи выбраны программные продукты, удовлетворяющие всем предъявленным требованиям:

- 1. Веб-сервер Арасhе для реализации виртуального локального сервера базы данных;
- 2. Интерпретатор языка программирования PHP для формирования web-интерфейса и обработки запросов пользователя;
- 3. Систему управления базами данных MySQL для создания и управления разрабатываемой реляционной базой данных.

Структура базы данных

Алгоритмы расчёта, например, грозоупорности ЛЭП требует наличия данных по компонентам всей ВЛ. К ним относятся в большей степени марка провода, марка грозотроса, тип изоляторов, тип опор, координаты установки опор (для определения длины пролётов), количество изоляторов в гирляндах на каждой опоре, сопротивление заземления каждой опоры и в меньшей степени фундаменты, арматура, крепежи и т.д. Поэтому все эти данные должны быть введены в соответствующие таблицы заранее. Каждая из этих таблиц достаточно объёмная в виду широкого разнообразия элементов. Все указанные компоненты нужно систематизировать для выявления общих параметров. Большинство этих компонентов уже приведены в виде таблиц в различных электротехнических справочниках [5-7]. Следовательно, для описания ВЛ необходимо организовать ввод данных в каждую таблицу компонентов и установить взаимосвязи между этими таблицами. Для контроля ввода данных и упрощения поиска возможных ошибок добавляется таблица со списком пользователей их уровнем доступа, а также таблица истории действий пользователей.

Интерфейс базы данных

Как уже говорилось ранее, для каждого элемента требуется организовать ввод данных в таблицу. Рассмотрим модуль добавления параметров проводника (рис. 1). Провода, используемые на ВЛ, могут быть изготовлены из одного или нескольких материалов. Как правило, это проволоки конкретного диаметра. Согласно справочникам, материал сердечника (если он есть) выполняется из стали и содержит одну или несколько проволок опре-

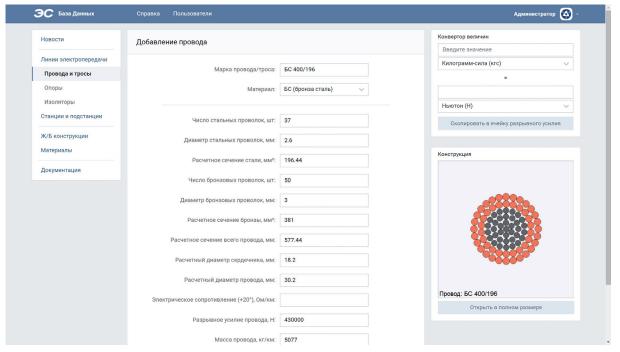


Рис. 1. Добавление проводника – Интерфейс пользователя.

делённого диаметра. Остальная часть провода выполняется уже основным материалом: алюминиевыми, медными или бронзовыми проволоками определённого диаметра. Поэтому необходим ввод количества проволок и их диаметр для каждого материала. По введённым данным автоматически генерируется изображение сечения для наглядности и визуального подтверждения корректности введённых данных. Расчётное сечение сердечника, расчётный диаметр и сечение всего провода также рассчитывается автоматически для удобства при сравнении со справочными данными. Также вводится электрическое сопротивление проводника, разрывное усилие, масса провода на 1 км длины и строительная длина. После ввода проводников в базу данных мож-

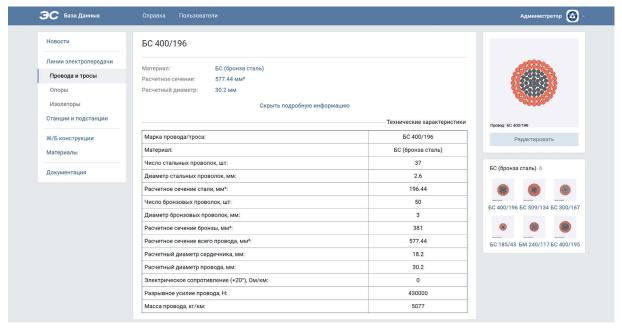


Рис. 2. Просмотр подробной информации о проводнике – Интерфейс пользователя.

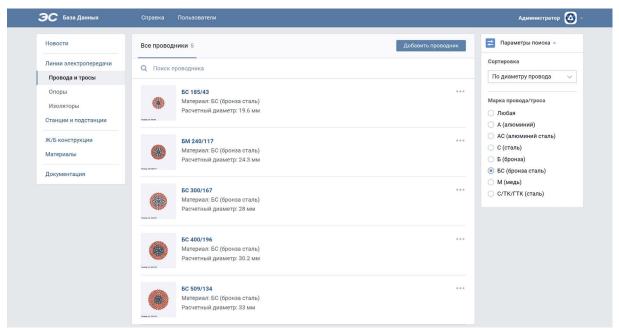


Рис. 3. Просмотр списка проводников – Интерфейс пользователя.

но посмотреть подробную информацию (рис. 2) и получить полный список с учётом различных поисковых фильтров (рис. 3).

Аналогичным образом представляется таблица с информацией по изоляторам. Здесь задаются следующие технические характеристики: минимальная механическая разрушающая нагрузка; то же, но для остатка изолятора; строительный диаметр и высота; длина пути утечки; сферическое соединение; пробивное напряжение в изоляционной среде; выдерживаемое напряжение в сухом состоянии и под дождём; выдерживаемое импульсное напряжение; испытательное напряжение на пробой импульсным напряжением в воздухе; масса изолятора. В расчётах грозоупорности ВЛ используются строительная высота изолятора и длина пути утечки. Так же, после ввода данных по изоляторам, можно посмотреть подробную информацию о кон-

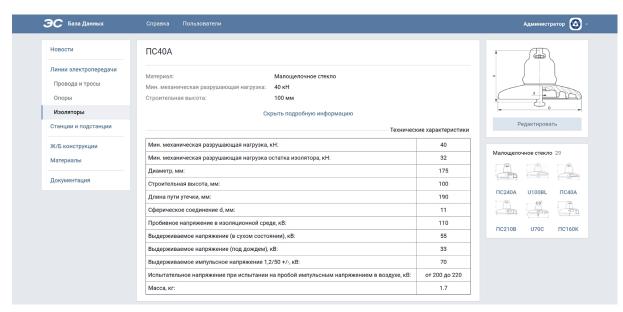


Рис. 4. Информация об изоляторе ПС40А – Интерфейс пользователя.

кретном изоляторе (рис. 4) или вывести их полный список. Каждый ранее введённый элемент можно в любое время изменить, имея на это определённые права доступа.

В базу данных также внесена информация о типовых проектах опор ВЛ. Таблица с проектами содержит данные о годе выполнения, инвентарном номере, количестве томов, проектной организации, полном списке опор, описываемых в проекте. При добавлении в базу опор предоставляется выбор проекта, к которому относится заносимая опора.

Наибольшую сложность представляет ввод данных об опорах ввиду их конструктивного разнообразия, что вызывает трудности при попытке систематизации. Тем не менее, данная систематизация выполнена пока с некоторыми ограничениями, например, не более шести траверс для одной опоры. Работа модуля моделирования металлических опор рассмотрена более подробно в [8]. Конструкция железобетонных (ЖБ) опор основана на ЖБ стойке определенной марки, к которой прикрепляются траверсы, тросостойка и оттяжки. Поэтому, прежде чем добавлять в базу данных ЖБ опоры, нужно внести в нее информацию по стойкам. За это отвечает модуль добавления стоек опор, в котором указывается следующая информация: марка опоры по ГОСТ; тип – коническая или цилиндрическая; длина; внутренний и внешний диаметры основания и верхней части; объём и марка бетона; общая масса; изгибающий момент; данные по морозостойкости и водонепроницаемости. По введённым данным автоматически генерируется чертеж стойки. Введённые ранее параметры стойки всегда можно скорректировать (рис. 5).

Работа модуля моделирования ЖБ опор схожа с аналогичным модулем по металлическим опорам. Здесь ствол и база опоры заменяются аналогичными параметрами ЖБ стойки, добавляется величина заглубления стойки в землю, незначительно меняются тросостойки. Один из примеров работы модуля изображен на рис. 6, где показана описательная часть опоры ПБ110-4.

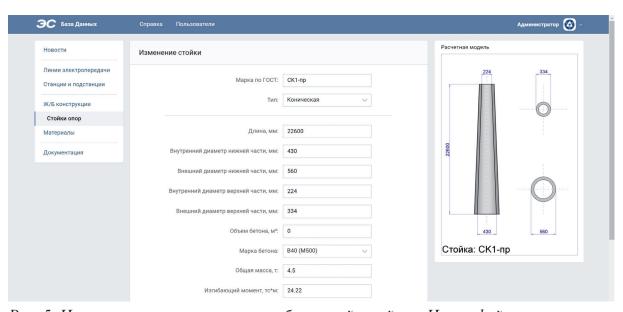


Рис. 5. Изменение параметров железобетонной стойки – Интерфейс пользователя.

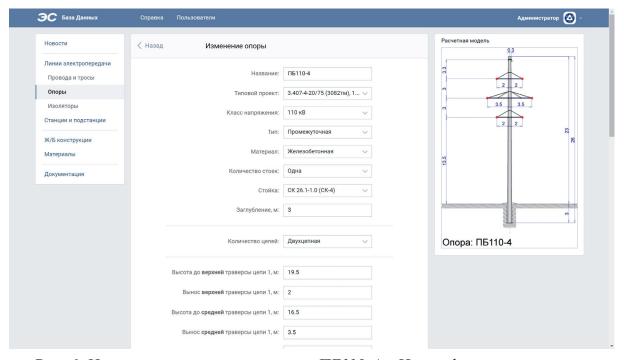


Рис. 6. Некоторые параметры опоры ПБ110-4 – Интерфейс пользователя.

Когда в базу данных внесено достаточное количество стоек, опор, изоляторов, проводников, можно приступать к добавлению ВЛ. Сначала вносится базовая информация: количество цепей и их наименование; полное диспетчерское наименование; принадлежность к энергообъединению, предприятию и участку; класс напряжения; начало и конец линии (номера соответствующих подстанций); годы постройки, модернизации и ввода в эксплуатацию; организация-проектировщик; район климатических условий по ветру, гололеду и загрязнению; протяжённость и количество опор (для контроля). После этого добавляется каждая опора для указанной ВЛ. Для этого в

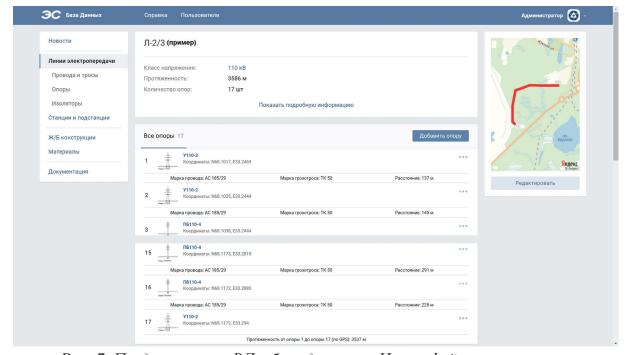


Рис. 7. Представление ВЛ в базе данных – Интерфейс пользователя.

базу данных вносится следующая информация: номер опоры по порядку согласно паспорту ВЛ (вносится автоматически); опора из списка ранее введённых в базу данных опор; принадлежность цепи 1 (заполняется автоматически) и фазы проводов; марка изолятора и количество для каждой фазы каждой цепи; марка провода; марка грозотроса, если он применяется на данной опоре; координаты опоры (широта, долгота); высота над уровнем моря (заполняется автоматически по координатам); сопротивление заземления. Таким образом формируется модель ВЛ (рис. 7). Изображение трассы ВЛ автоматически формируется при добавлении каждой новой опоры.

На данный момент в базу данных внесено 112 самых распространенных проводов и грозотросов, 16 ЖБ опор, 118 металлических опор и 41 их модификация, 29 изоляторов из малощелочного стекла, 91 ЖБ стойка для опор, 3 линии электропередачи и база продолжает пополняться.

Заключение

Таким образом, разработана и апробирована реляционная база данных по элементам высоковольтной сети. Данная база данных 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, совместима со всеми операционными системами, имеющими стандартный web-браузер с поддержкой java. База данных разработана с привлечением минимума стороннего программного обеспечения. То есть, разработанная база данных полностью удовлетворяет всем предъявленным к ней требованиям. На основе данных, введённых в базу, разрабатывается модуль расчёта грозоупорности ВЛ с учётом индивидуальных особенностей каждого пролёта ВЛ.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект № 17-47-510952).

Список литературы

- 4. Костенко М.В., Богатенков И.М., Михайлов Ю.А., Халилов Ф.Х. Физика грозового разряда и грозозащита линий электропередачи. Уч. пос. Ленинградский ордена Ленина политехнический институт им. М.И. Калинина. 1982.
- 5. Невретдинов Ю.М., Фастий Г.П. Атмосферное электричество и молние-защита в элек-троэнергетике. Уч. пос. Мурманск: Изд-во МГТУ. 2014. 174 с.
- 6. Юдицкий Д. М. Методика и алгоритмы повышения грозоупорности воздушных линий электропередач и оборудования подстанций. Дис. к.т.н. Казань. 2015. 165 с.
- 7. Петрашова Д.А., Бурцев А.В. Разработка базы данных по микроядерному тесту на клетках человека. Вестник КНЦ РАН. 2016. № 2 (25). С. 124-136.
- 8. Баумштейн И.А., Бажанов С.А., Беляков Н.Н. и др. Справочник по электрическим установкам высокого напряжения. М.: Энергоатомиздат. 1989. 768 с.

- 9. Белоруссов Н.И. и др. Электрические кабели, провода и шнуры. Справочник. М: Энергоатомиздат. 1987. 536 с.
- 10. Электротехнический справочник. Электротехнические изделия и устройства / Гл. ред. Орлов И.Н. М: Энергоатомиздат. 1986. Т. 2. 712 с.
- 11. Бурцев А.В. Подпрограмма геометрического моделирования опор ЛЭП на основе вве-денных пользователем данных. Труды КНЦ РАН. 2017. Т. 8. № 8. Вып. 15. С. 104-110.

СТРУКТУРА ГРАНИТА МАССИВА АКЖАЙЛЯУ, КАЗАХСТАН

Войтеховский Ю.Л.^{1, 2}, Захарова А.А.¹

Ранее одним из авторов [2-4 и др.] предложено при описании организации (физиографии) горных пород сместить акцент с морфометрических характеристик минеральных зёрен на их отношения пространственного контактирования. При этом выражением организации п-минеральной горной породы является алгебраическое соотношение

$$\sum_{i,j=1}^{n} p_{ij} m_{i} m_{j} = \begin{bmatrix} m_{1} & m_{2} & \dots & m_{n} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} p_{11} & p_{12} & \dots & p_{1n} \\ p_{21} & p_{22} & \dots & p_{2n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ p_{n1} & p_{n2} & \dots & p_{nn} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} m_{1} \\ m_{2} \\ \dots \\ m_{n} \end{bmatrix} = 1,$$

которое выявляет фундаментальную роль симметрической матрицы $[P_{ij}]$ вероятностей (частот) p_{ij} различных межзерновых контактов $m_i m_j$ минералов m_i и m_j . Одновременно оно задаёт в пространстве $(m_i, m_2, ..., m_n)$ невырожденную центральную квадратичную поверхность — структурную индикатрису горной породы (в общем случае эллипсоиды и гиперболоиды). Формальное выражение петрографической структуры — каноническая диагональная форма $[D_{ii}]$ матрицы $[P_{ij}]$, определяющая тип структуры знаками коэффициентов d_{ii} . Симметрическая матрица всегда приводима к диагональному виду некоторым невырожденным преобразованием $[D_{ii}] = [Q_{ij}] \times [P_{ij}] \times [Q_{ij}]^{-1}$, соответствующим вращению структурной индикатрисы в пространстве и её приведению к главным осям. Тип структуры S_n^m означает, что среди коэффициентов d_{ii} ровно т положительных. Теория использована при расчленении монотонного разреза габбро-норитов Фёдорово-Панского интрузива, Кольский п-ов [5]. Покажем ещё один пример математического описания петрографической структуры.

«Сколь бы разнообразными ни казались картируемые в различных регионах ассоциации горных пород, есть уверенность, что при системном подходе они подобно химическим элементам в таблице Д.И. Менделеева могут быть естественно классифицированы, открыв путь к унификации легенд к геологическим картам нового поколения» [6, с. 5]. Представляется, что предложенный выше статистический анализ горной породы как агрегата огромного числа минеральных зёрен, а также визуализация статистик в геометрических образах вполне естественны и сочетаются с провозглашённым системным подходом. Заметим также, что исчерпывающая классификация структур горных пород на естественных основаниях по-прежнему остаётся сложной проблемой петрографии.

¹ Санкт-Петербургский горный университет, Санкт-Петербург, voytekhovskiy yul@pers.spmi.ru

² Геологический институт КНЦ РАН, Апатиты, woyt@geoksc.apatity.ru

Дляанализабыловзятоизображениетипичногокрупно-среднезернистого гранита из массива Акжайляу (рис). В первом приближении физиография горной породы определена пространственными соотношениями кварца и полевых шпатов. Матрица $[P_{ij}]$ вероятностей межзерновых контактов (первые строка и столбец относятся к полевым шпатам, вторые — к кварцу) приводится к диагональному виду, который однозначно фиксирует тип $S_2^{\ I}$ структуры биминеральной горной породы:

$$\begin{bmatrix} 0.49 & 0.215 \\ 0.215 & 0.08 \end{bmatrix} \rightarrow \begin{bmatrix} + \\ - \end{bmatrix} \rightarrow S_2^1.$$

Аналогично могут быть охарактеризованы все физиографические типы гранитов, выделенные в [1, 6], а также любые полнокристаллические горные породы. Заметим, что в пределах типа более детальная характеристика их организации задаётся полным набором вероятностей p_{ij} различных межзерновых контактов, которые могут быть отображены в соответствующих барицентрических диаграммах.

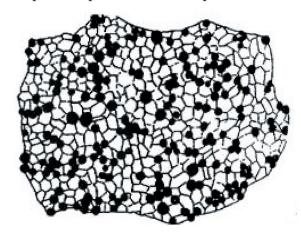


Рис. Типизированная физиография гранита В1 [1, 6]. Чёрное— кварц, белое— полевые шпаты, не даны слюды и амфиболы. Полированный штуф, 15×10 см.

Список литературы

- 1. Бескин С.М., Ларин В.Н., Марин Ю.Б. Редкометалльные гранитовые формации. Л.: Недра. 1979. 280 с.
- 2. Войтеховский Ю.Л. К проблеме организации горных пород // Известия ВУЗов. Геология и разведка. 1991. № 10. С. 34-39.
- 3. Войтеховский Ю.Л. Приложение теории квадратичных форм к проблеме классификации структур полиминеральных горных пород // Известия ВУЗов. Геология и разведка. 1995. № 1. С. 32-42.
- 4. Войтеховский Ю.Л. Количественный анализ петрографических структур: метод структурной индикатрисы и метод вычитания акцессориев // Известия вузов. Геология и разведка. 2000. № 1. С. 50-54.
- 5. Войтеховский Ю.Л., Припачкин П.В. Использование статистических методов для расчленения разреза Фёдорово-Панского интрузива // Отечественная геология. 2001. № 2. С. 48-52.
- 6. Добрецов Г.Л., Марин Ю.Б., Бескин С.М., Лесков С.А. Принципы расчленения и картирования гранитоидных интрузий и выделения петрологометаллогенических вариантов гранитидных серий. СПб.: Изд-во ВСЕГЕИ. 2007. 80 с.

СТРУКТУРЫ ГРАНИТОВ САЛМИНСКОГО ПЛУТОНА, КАРЕЛИЯ

Войтеховский Ю.Л.^{1, 2}, Петров Д.А.¹, Захарова А.А.¹

В предыдущей статье авторов [3] показано, как математический метод, изложенный в работах [4-6], позволяет однозначно идентифицировать структуру горной породы, в первую очередь для расчленения и картирования гранитоидных интрузий [7]. Рассмотренный пример – граниты массива Акжайляу [1] – может показаться слишком простым, поскольку физиография горной породы сведена к соотношению зёрен кварца и полевых шпатов. Далее рассмотрен пример, более приближённый к действительности – граниты Салминского плутона, Карелия [2], в которых различены пять минеральных фаз (рис. 1, 2): кварц (жёлтый), плагиоклаз (голубой), К-Nа полевой шпат (красный), биотит (грязно-зелёный) и акцессории (фиолетовый). Для определённости поставим вопрос, различаются ли петрографические структуры в двух данных шлифах?

В обоих случаях матрицы $[P_{ij}]$ вероятностей межзерновых контактов приводятся к диагональному виду, отвечающему структуре S_5^2 . Структурная индикатриса — трёхполостный гиперболоид в пространстве $(m_1, m_2, \dots m_5)$. Индексы соответствуют строкам и столбцам матриц и означают: 1 — кварц, 2 — плагиоклаз, 3 — K-Na полевой шпат, 4 — биотит, 5 — акцессории. Таким образом, оба образца относятся к одному структурному типу, хотя их органи-

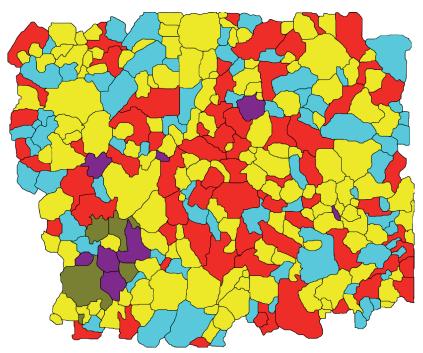


Рис. 1. Петрографический шлиф №1. Среднезернистый питерлит, основная масса без порфировых вкрапленников. Раскраска условная, пояснения в тексте. Размер по вертикали 1 см.

¹ Санкт-Петербургский Горный университет, Санкт-Петербург, voytekhovskiy yul@pers.spmi.ru

² Геологический институт ФИЦ КНЦ РАН, Апатиты, woyt@geoksc.apatity.ru

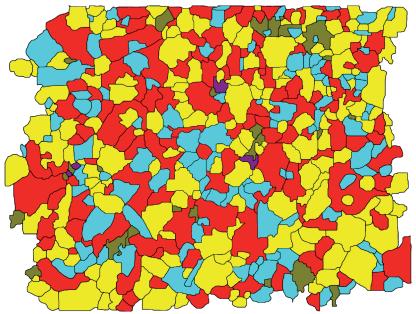


Рис. 2. Петрографический шлиф №2. Порфировидный микроклин-альбитовый гранит, основная масса без вкрапленников. Размер по вертикали 1 см.

зация, фиксируемая всей совокупностью вероятностей p_{ij} межзерновых контактов, несколько различна.

$$\begin{bmatrix} 164 & 87.5 & 106.5 & 7 & 10.5 \\ 87.5 & 35 & 49.5 & 2.5 & 3.5 \\ 106.5 & 49.5 & 46 & 1.5 & 3.5 \\ 7 & 2.5 & 1.5 & 1 & 3.5 \\ 10.5 & 3.5 & 3.5 & 3.5 & 2 \end{bmatrix} \rightarrow \begin{bmatrix} + \\ + \\ - \end{bmatrix} \rightarrow S_{5}^{2}$$

$$\begin{bmatrix} 148 & 98 & 182 & 21.5 & 4.5 \\ 98 & 53 & 102.5 & 15 & 2 \\ 182 & 102.5 & 105 & 17.5 & 2.5 \\ 21.5 & 15 & 17.5 & 5 & 2.5 \\ 4.5 & 2 & 2.5 & 2.5 & 0 \end{bmatrix} \rightarrow \begin{bmatrix} + \\ + \\ - \\ - \end{bmatrix} \rightarrow S_{5}^{2}$$

Анализ шлифов может быть продолжен, поскольку акцессории и биотит составляют в граните весьма малую долю. Применим метод вычитания акцессориев [6], поочерёдно удаляя их из рассмотрения, т.е. убирая соответствующие строки и столбцы из матриц $[P_{ij}]$. Без акцессориев в обоих случаях получаем тип структуры S_4^2 . Индикатриса — двуполостный гиперболоид в пространстве (m_1, m_4, m_3, m_4) .

$$\begin{bmatrix} 164 & 87.5 & 106.5 & 7 \\ 87.5 & 35 & 49.5 & 2.5 \\ 106.5 & 49.5 & 46 & 1.5 \\ 7 & 2.5 & 1.5 & 1 \end{bmatrix} \rightarrow \begin{bmatrix} + \\ + \\ - \\ - \end{bmatrix} \rightarrow s_4^2$$

$$\begin{bmatrix} 148 & 98 & 182 & 21.5 \\ 98 & 53 & 102.5 & 15 \\ 182 & 102.5 & 105 & 17.5 \\ 21.5 & 15 & 17.5 & 5 \end{bmatrix} \rightarrow \begin{bmatrix} + \\ + \\ - \end{bmatrix} \rightarrow S_4^2$$

Без биотита получаем структуры $S_4^{\ 1}$ и $S_4^{\ 2}$. Индикатрисы — трёхполостный и двуполостный гиперболоиды в пространстве (m_1, m_4, m_3, m_4) . Вместе с предыдущим результатом это означает, что в петрографическом шлифе $N \ge 1$ акцессории и биотит образуют статистически эквивалентные срастания, а в шлифе $N \ge 2$ — разные.

$$\begin{bmatrix} 164 & 87.5 & 106.5 & 10.5 \\ 87.5 & 35 & 49.5 & 3.5 \\ 106.5 & 49.5 & 46 & 3.5 \\ 10.5 & 3.5 & 3.5 & 2 \end{bmatrix} \rightarrow \begin{bmatrix} + \\ + \\ - \end{bmatrix} \rightarrow S_4^2$$

$$\begin{bmatrix} 148 & 98 & 182 & 4.5 \\ 98 & 53 & 102.5 & 2 \\ 182 & 102.5 & 105 & 2.5 \\ 4.5 & 2 & 2.5 & 0 \end{bmatrix} \rightarrow \begin{bmatrix} + \\ - \\ - \end{bmatrix} \rightarrow S_4^1$$

Без акцессориев и биотита основная (каркасообразующая) часть изучаемых гранитов имеет структуру S_3^{-1} . Индикатриса — двуполостный гиперболоид в пространстве (m_1, m_2, m_3) .

$$\begin{bmatrix} 164 & 87.5 & 106.5 \\ 87.5 & 35 & 49.5 \\ 106.5 & 49.5 & 46 \end{bmatrix} \rightarrow \begin{bmatrix} + \\ - \\ - \end{bmatrix} \rightarrow S_3^1$$

$$\begin{bmatrix} 148 & 98 & 182 \\ 98 & 53 & 102.5 \\ 182 & 102.5 & 105 \end{bmatrix} \rightarrow \begin{bmatrix} + \\ - \\ - \end{bmatrix} \rightarrow S_3^1$$

Таким образом, предложенный ранее математический метод типизации петрографических структур по статистикам межзерновых срастаний позволяет выявлять даже тонкие особенности организации горных пород. Это позволяет применять его для расчленения и картирования гранитоидных интрузий. Рутинные алгебраические операции с как угодно большими матрицами компьютеризованны [8].

Список литературы

- 1. Бескин С.М., Ларин В.Н., Марин Ю.Б. Редкометалльные гранитовые формации. Л.: Недра. 1979. 280 с.
- 2. Бескин С.М., Лишневский Э.Н., Диденко М.И. Строение Питкярантского гранитного массива в Северном Приладожье, Карелия / // Изв. АН СССР. Сер. геол. 1983. № 3. С. 19-26.
- 3. Войтеховский Ю.Л., Захарова А.А. Структура гранита массива Акжайляу, Казахстан // Наст. сборник.
- 4. Войтеховский Ю.Л. К проблеме организации горных пород // Изв. ВУ-Зов. Геол. и разведка. 1991. № 10. С. 34-39.
- 5. Войтеховский Ю.Л. Приложение теории квадратичных форм к проблеме классификации структур полиминеральных горных пород // Изв. ВУЗов. Геол. и разведка. 1995. № 1. С. 32-42.
- 6. Войтеховский Ю.Л. Количественный анализ петрографических структур: метод структурной индикатрисы и метод вычитания акцессориев // Изв. вузов. Геол. и разведка. 2000. № 1. С. 50-54.
- 7. Добрецов Г.Л., Марин Ю.Б., Бескин С.М., Лесков С.А. Принципы расчленения и картирования гранитоидных интрузий и выделения петрологометаллогенических вариантов гранитидных серий. СПб.: Изд-во ВСЕГЕИ. 2007. 80 с.
- 8. http://www.wolframalpha.com/examples/mathematics/linear-algebra/

МАССИВНАЯ ТЕКСТУРА ГОРНОЙ ПОРОДЫ: ГРАНИТ МАССИВА АКЖАЙЛЯУ, КАЗАХСТАН

Войтеховский Ю.Л.^{1, 2}, Захарова А.А.¹

¹ Санкт-Петербургский Горный университет, г. Санкт-Петербург, voytekhovskiy_yul@pers.spmi.ru

Массивные текстуры весьма распространены в горных породах преимущественно магматического генезиса, означают беспорядочное пространственное распределение породообразующих минералов и противопоставляются слоистым, полосчатым, пятнистым... Правомерен вопрос: отвечает ли беспорядочное пространственное распределение идеальному перемешиванию породообразующих минералов? Для проверки гипотезы авторами взят гранит массива Акжайляу, Казахстан (рис. 1). В качестве математической модели, отвечающей идеальному перемешиванию породообразующих минералов, принято равновесие Харди-Вайнберга.

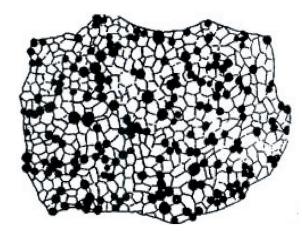


Рис. Типизированная физиография гранита В1 [1, 6]. Чёрное — кварц, белое — полевые шпаты, не даны слюды и амфиболы. Полированный штуф, 15×10 см.

Английский математик Дж. Х. Харди и немецкий врач В. Вайнберг независимо получили формулу, описывающую равновесие генотипов в потомстве [6; 7, с. 126-128]. Если p и q — частоты (вероятности) конкурирующих генов A и B (в условной записи pA + qB = 1), то равновесные частоты генотипов AA, AB (то же, что BA) и BB среди потомков могут быть рассчитаны по формуле:

$$(pA + qB)^2 = p^2AA + 2pqAB + q^2BB = 1.$$

Отклонения от равновесных частот указывают на генетический дрейф – результат естественного или искусственного отбора. Формула Харди-Вайнберга характеризует идеальное перемешивание двух сочетаемых (сталкивающихся, конкурирующих, контактирующих...) сущностей. Она обобщается по числу слагаемых:

$$(p_1A_1 + \ldots + p_nA_n)^2 = \sum p_{ij}A_iA_i = 1$$
, где $i,j = 1,2,\ldots n$,

и по степеням на тернарные:

² Геологический институт ФИЦ КНЦ РАН, Anaтиты, woyt@geoksc.apatity.ru

$$(p_1A_1+\ldots+p_nA_n)^3=\sum p_{ijk}A_iA_jA_k=1$$
, где $i,j,k=1,2,\ldots n$

и куотернарные отношения:

$$(p_1A_1 + \ldots + p_nA_n)^4 = \sum p_{ijkl}A_iA_jA_kA_l = 1$$
, где $i,j,k,l = 1,2,\ldots n$

Изучение петрографических структур и текстур следовало бы выполнять в 3D. Анализ в 2D оправдывается лишь тем, что их классификация и номенклатура сформировались тоже по наблюдениям в 2D. Подсчитать статистику куотернарных отношений минеральных зёрен в горной породе сегодня технически невозможно. Стыки четырёх зёрен в петрографический шлиф не попадают. Но статистика их тернарных отношений (тройных контактов) в *п*-минеральных горных породах может быть найдена в шлифах.

Для изучаемого гранита вероятности кварца и полевого шпата (208 и 428 от их суммы): $p_1 = 0.327$ и $p_2 = 0.673$, соответственно. Расчётные вероятности тернарных контактов, отвечающие равновесию Харди-Вайнберга: $p_{111} = 0.035$, $p_{112} = 0.216$, $p_{122} = 0.444$, $p_{222} = 0.305$. В натуральном выражении, от общего числа 1116 тернарных контактов, это составляет: 39, 241, 496 и 340. При этом реальные числа контактов: 17, 211, 490 и 398. Расчётное значение непараметрического критерия «хи-квадрат» 26.02 значительно превышает пороговое значение 11.3 для доверительной вероятности p = 0.99 и числа степеней свободы df = 3. Таким образом, для указанных параметров гипотеза о соответствии массивной текстуры изучаемого гранита равновесию Харди-Вайнберга отвергается. Причина — явно пониженные частоты p_{111} , p_{112} и завышенные p_{222} .

Пикантность ситуации состоит в том, что даже в случае соответствия подсчитанных вероятностей теоретическим, то есть реальной текстуры равновесию Харди-Вайнберга — вывод о соответствии делается с некоторой вероятностью. Подсчитанные вероятности всегда отличаются от статистически равновесных, а равновесия Харди-Вайнберга определяют классификационные границы в многообразии статистически неравновесных ситуаций (в нашем случае — структур / текстур горных пород). Для их типизации в качестве структурных индикатрис, по аналогии с [2–4], используем ньютонову классификацию кубических кривых на плоскости [9, с. 44-53]. К сожалению, для n > 2 математическая теория чересчур сложна и для наших целей не адаптирована [8]. Уравнение искомой кривой

$$\sum p_{ijk} A_i A_j A_k = 1$$
, где $i,j,k = 1,2,...$ n

для нашего случая n = 2 (биминеральная горная порода) имеет вид (коэффициенты уравнения — подсчитанные в шлифе вероятности тернарных контактов):

$$0.015m_1^3 + 0.189m_1^2m_2 + 0.439m_1m_2^2 + 0.357m_2^3 = 1$$

и соответствует кривой, состоящей из двух гиперболических и одной прямолинейной ветвей (рис. 2).

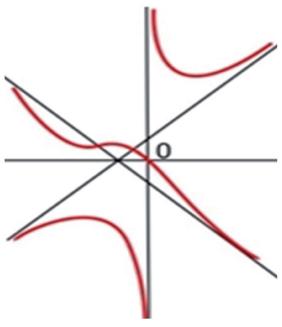


Рис. 2. Структурная индикатриса гранита массива Акжайляу (рис. 1).

Таким образом, текстуры, визуально диагностируемые как массивные, не всегда соответствуют равновесию Харди-Вайнберга, которое легко рассчитывается и может быть принято как статистически идеальное перемешивание минералов в пространстве горной породы.

Вероятности тернарных (и бинарных) межзерновых контактов, подсчитанные в петрографических шлифах, никогда не соответствуют статистически равновесным. Это ставит задачу типизации всевозможных статистически неравновесных петрографических структур. Для биминеральных горных пород (и только для них) это

можно сделать на основе ньютоновой классификации плоских кубических кривых. Для любых горных пород это возможно с помощью структурных индикатрис второго порядка.

Список литературы

- 1. Бескин С.М., Ларин В.Н., Марин Ю.Б. Редкометалльные гранитовые формации. Л.: Недра. 1979. 280 с.
- 2. Войтеховский Ю.Л. К проблеме организации горных пород // Известия ВУЗов. Геология и разведка. 1991. № 10. С. 34-39.
- 3. Войтеховский Ю.Л. Приложение теории квадратичных форм к проблеме классификации структур полиминеральных горных пород // Известия ВУЗов. Геология и разведка. 1995. № 1. С. 32-42.
- 4. Войтеховский Ю.Л. Количественный анализ петрографических структур: метод структурной индикатрисы и метод вычитания акцессориев // Известия вузов. Геология и разведка. 2000. № 1. С. 50-54.
- 5. Добрецов Г.Л., Марин Ю.Б., Бескин С.М. и др. Принципы расчленения и картирования гранитоидных интрузий и выделения петрологометаллогенических вариантов гранитидных серий. СПб.: Изд-во ВСЕГЕИ. 2007. 80 с.
- 6. Коренева Л.Г. Генетика и математика // Математика и естествознание. М.: Просвещение. 1969. С. 326-383.
- 7. Лайтхилл Дж., Хиорнс Р.У., Холлингдейл С.Х. и др. Новые области применения математики. Мн.: Высшая школа. 1981. 496 с.
- 8. Манин Ю.И. Кубические формы: алгебра, геометрия, арифметика. М.: Наука. 1972. 304 с.
- 9. Савелов А.А. Плоские кривые: систематика, свойства, применения. Москва Ижевск: НИЦ «Регулярная и хаотическая динамика». 2002. 294 с.

ВЛИЯНИЕ МИКРОКЛИМАТА НА РЕЗУЛЬТАТЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ ГОРОДСКОГО ОСТРОВА ТЕПЛА (НА ПРИМЕРЕ ГОРОДА АПАТИТЫ)

Демин В.И.¹, Козелов Б.В.¹, Собакин А.П.², Меньшов Ю.В.³, Горбань Ю.А⁴.

- ¹ Полярный геофизический институт, Апатиты, demin@pgia.ru
- ² Апатитская ТЭЦ филиала «Кольский» ПАО «ТГК-1», Апатиты
- ³ Территориально-ситуационный центр ФКУ Упрдор «Кола», Петрозаводск
- ⁴ СЗФ ФГБУ «Авиаметтелеком Росгидромета», Мурманск

Аннотация

Исследована временная динамика положительной аномалии температуры воздуха в г. Апатиты в зимний период. Время её появления и величина не совпадают с типичными суточными вариациями антропогенного потока тепла. Разность температур между верхней частью городского и фонового холма не увеличивается вместе с ростом теплопотребления в городе, что свидетельствует о небольшой интенсивности городского острова тепла.

Введение

Хозяйственная деятельность в городе сопровождается существенной модификацией радиационных, термических, влажностных и аэродинамических характеристик ландшафта. Наглядным климатическим следствием таких изменений является появление городского острова тепла (ГОТ). Как правило, под ним подразумевают более высокие температуры воздуха внутри застройки по сравнению с её значением на окружающей сельской местности, хотя в общем виде тепловая аномалия, создаваемая городом, захватывает не только приземный слой атмосферы, но также прослеживается в температуре почвы (поверхности и на глубинах) и грунтовых вод.

Как следует из самого определения ГОТ, для его обнаружения необходимо сравнить температуру воздуха в городе и его ближайших пригородах. В поле температуры ГОТ должен проявляться в виде замкнутых изотерм с горизонтальным градиентом, направленным от окрестностей к центру города или районам с наиболее плотной застройкой. Из-за редкой сети метеорологических станций (МС) провести изотермы вокруг городов довольно сложно и часто ограничиваются сравнением температур воздуха на городской МС (T_{copod}) и ближайшей сельской МС (T_{copod}). Положительный знак разности:

$$\Delta T_{\it \GammaOT} = T_{\it copoo} - T_{\it ceno}$$

принимают за необходимый признак ГОТ, а её численное значение служит его количественной характеристикой (интенсивность ГОТ).

Однако такой подход не всегда оказывается физически обоснованным. ГОТ по механизмам своего возникновения — явление антропогенное, в то время как разность температур может существовать и за счёт различия естественных микроклиматов. Например, город Апатиты занимает верхнюю часть холма, приподнятого над окружающей местностью на 30-70 м.

Зимой, а ночью во все сезоны, при установлении тихой и ясной погоды из-за стока холодного воздуха вниз здесь теплее, чем в средних и нижних частях склонов, у подножия холмов и на прилегающей равнине. Так как микроклиматические различия и ГОТ в наибольшей степени проявляются при одинаковых погодных условиях, наблюдаемая в г. Апатиты положительная тепловая аномалия $(T_{_{copoo}}-T_{_{ceno}})$ создается одновременно за счёт стока холодного воздуха и, собственно, ГОТ. Игнорирование рельефа привело к необоснованному завышению интенсивности ГОТ: от 5-8°C [12] до 10°C [16]. Для сравнения: максимальная интенсивность ГОТ в Лондоне 8.6°C [11], Париже 8.0°C [13]. Несмотря на уменьшение ГОТ в более поздних работах («средняя интенсивность антропогенного ΓOT составляет 1-1.5°C, а максимальная — примерно $5^{\circ}C$ » [1]) его новое значение по-прежнему является завышенным: МС и датчики в городе в ходе эксперимента оказались расположенными в верхней части холма, а выбранные для контроля фоновые – в средних частях склонов, у подножия холмов, и даже в понижениях рельефа, где минимальные температуры ниже из-за притока к ним холодного воздуха (схема размещения приведена в [1, 17]).

Средняя интенсивность поверхностного ГОТ (температура подстилающей поверхности) в Апатитах по инфракрасным изображениям со спутника, равна $3.2\,^{\circ}$ С [5] — на порядок выше характерного значения, рассчитанного по 56 крупнейшим городам Европы в зимний период ($0.4\pm0.4\,^{\circ}$ С [14]). Так как температура подстилающей поверхности, включая и искусственные поверхности, является очень чувствительным к микроклимату термическим параметром, а данная оценка получена без учёта положения города в холмистой местности («Апатиты (Мурманская обл.) ... его равниное положение... исключает влияние инверсий на температурный режим городской территории» [5]), она также не позволяет говорить о масштабе антропогенного воздействия городского среды на тепловой режим приземного слоя воздуха. Вопрос о реальном значении ГОТ в г. Апатиты остается открытым.

Над территориями с неоднородной подстилающей поверхностью или сложным рельефом прямая оценка ГОТ по данным метеорологических измерений или анализа инфракрасных спутниковых изображений затруднительна из-за присутствия естественных микроклиматических неоднородностей в поле температуры. В г. Апатиты разность температуры между городом и пригородами не выходит за пределы изменчивости температуры, возможной в холмистом рельефе между верхней частью холма и прилегающей равниной [4], что не позволяет надежно выделить ГОТ, который имеет небольшую интенсивность.

Среди методов изучения метеорологического режима городов численное моделирование представляется одним из наиболее перспективных. Представляется интересным вопрос, насколько мезометеорологическое моделирование ГОТ свободно от искажающего влияния микроклимата.

Использованные данные

В работе использованы измерения температуры воздуха на автоматических метеорологических станциях (АМС) Полярного геофизического института, Апатитской ТЭЦ, Территориально-ситуационного центра ФКУ «Управление Федеральной автомобильной магистрали Санкт-Петербург – Мурманск» (ФКУ Упрдор «Кола»), авиационной метеорологической станции «Апатиты» (АМСГ).

Результаты и обсуждение

Существует два принципиально различающихся подхода к моделированию метеорологического режима города. Первый — прямое математическое моделирование с помощью решения уравнений газовой динамики и теплообмена. Такие модели требуют очень высокого пространственного разрешения и их использование в масштабах целого города на текущем уровне развития вычислительных технологий технически невозможно.

Второй подход, в котором в последнее десятилетие достигнут значительный прогресс, заключается в параметризации физических процессов. Предполагается, что на территории города каждая модельная ячейка или её часть занята однородной городской средой, которую можно описать набором статистических характеристик (высота зданий, ширина улиц, отношение высоты зданий к ширине улиц, площадь зданий, доля урбанизированной территории в площади модельной ячейки, альбедо и теплофизические свойства искусственных поверхностей).

Помимо искусственных поверхностей, важным фактором, влияющим на городской микроклимат, является выделение значительного количества тепла при сжигании твёрдого и жидкого топлива в бытовых и промышленных целях, в транспортных средствах, а также тепла от работы электрических установок, тепла, возникающее в технологических или метаболических процессах – антропогенный поток тепла (АПТ). Это тепло посредством теплопроводности через стены зданий или напрямую распространяется в приземный слой воздуха, повышая температуру воздуха. Типичные значения АПТ варьируются от 20 до 70 Вт/м² [8], но в крупных городах достигают сотен Вт/м² (что уже сопоставимо с потоком солнечной радиации), а в экстремальных локализованных условиях даже превышают 1000 Вт/м² [10]. Чтобы учесть АПТ в уравнение теплового баланса городской территории добавляется соответствующее слагаемое.

В настоящее время наиболее разработано несколько региональных мезомасштабных моделей атмосферы, широко используемых для оперативного прогноза погоды и научных исследований (например, HIRLAM, COSMO, WRF). В них внедрены специализированные параметризации, необходимые для воспроизведения особенностей городского климата. Эксперименты включают контрольную прогонку со стандартными значениями характе-

ристик подстилающей поверхности и прогонку в условиях модифицированной городской поверхности и в присутствии АПТ.

В численных экспериментах по воспроизведению временного хода метеовеличин в городе теплофизические характеристики искусственных поверхностей, а также параметры, характеризующие морфологию городской застройки, остаются без изменений даже в условиях активного городского строительства. Анализ многолетних трендов интенсивности ГОТ даёт достаточно оснований для предположения о незначительном влиянии таких изменений в масштабах нескольких лет на климат города.

В то же время АПТ может существенно варьировать даже в течение суток. Согласно существующим теориям, одной из основных причин возникновения ГОТ является эффективное поглощение и сохранение городом солнечной энергии [6]. Однако зимой в арктических городах поступление солнечной радиации незначительно или даже отсутствует (на широте Апатит с 15 по 28 декабря — полярная ночь). В этот период должна наиболее отчётливо проявляться роль АПТ.

Согласно [17] именно АПТ вносит решающую роль в формировании ГОТ в Апатитах. Интенсивность UHI, рассчитанная с помощью мезометеорологической модели COSMO-CLIM со схемой параметризации TERRA_URB как разность температур в ячейках модели, включающих городскую территорию и район расположения гидрометеорологической станции (ГМС) «Апатиты» (пос. Тик-Губа, ~1.5 км от города), составляет 2-5 °С. При расчётах со схемой параметризации TERRA_URB, но без АПТ и без схемы TERRA_URB (модель не была обеспечена информацией об АПТ и модифицированных характеристиках городской подстилающей поверхности), ГОТ не воспроизводился: разность температур между этими же участками составляла — 0.25 °С и 0.06 °С соответственно [17].

Точное определение антропогенного потока тепла с достаточным пространственным и временным разрешением является сложной и пока не решённой задачей. Обычно АПТ берется из климатических моделей. Например, в упомянутой схеме TERRA-URB величина АПТ определяется для каждого момента времени на основе заданного среднегодового значения с учётом характерного сезонного и суточного и хода (рис. 1). В частности, для

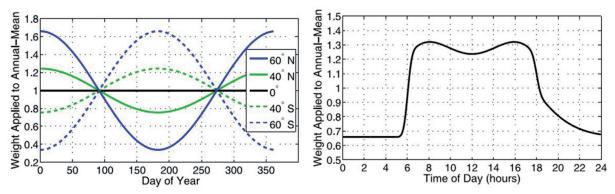


Рис. 1. Коэффициенты для расчёта сезонного (слева) и суточного (справа) хода АПТ [9].

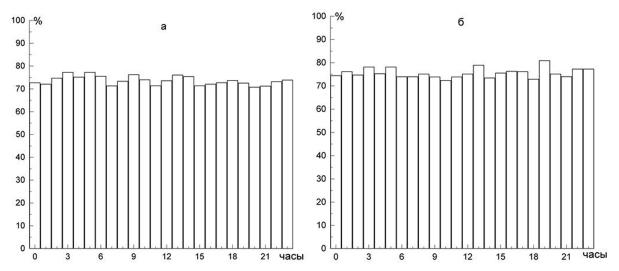


Рис. 2. Вероятность (%) появления в различные часы положительной аномалии температуры воздуха в г. Апатиты относительно АМСГ «Апатиты»: a - MC «Апатиты, Академгородок» (2014-2018 гг.), δ – «Апатиты, Центр» (2016-2018 гг.).

города Апатиты среднегодовое значение АПТ в [17] принималось равным 50 Bt/m^2 , что соответствовало примерно 90 Bt/m^2 в наиболее холодные зимние месяцы.

АПТ в городе (Q_E) можно представить в идее суммы нескольких компонент:

$$Q_F = Q_{FF} + Q_{FE} + Q_{FH} + Q_{FM}$$

где Q_{FF} — тепло от сожжённого топлива (предприятия, транспорт, бытовой газ), Q_{FE} — тепло от потребляемой электрической энергии; Q_{FH} — тепло от отопления помещений; Q_{FM} — тепло от метаболических процессов в теле человека (в большинстве работ не рассматривается ввиду его небольшого вклада в суммарную величину АПТ (от 2 до 3 % [15]).

В движении автомобильного транспорта и, как следствие, в объёмах тепла от сгорания топлива, наблюдается очень выраженный суточный ход с пиками в утренние и вечерние часы, небольшим провалом в дневные и сильным минимумом ночью. Суточное потребление электрической энергии также чаще всего имеет два пика — утренний и чуть больший вечерний и два провала — небольшой дневной и глубокий ночной. Даже количество метаболического тепла имеет характерный суточный ход с ночным минимумом, так как зависит от активности человека (например, в [15] принимают для среднего человека 75 Вт ночью (между 23:00 и 05:00) и 175 Вт днём (с 07:00 до 21:00).

Если данные составляющие АПТ вносят заметный вклад в формирование положительной тепловой аномалии в г. Апатиты, время её появления и/или её величина должны иметь суточный ход: положительная аномалия должна чаще появляться в дневные часы и реже ночью и/или быть днём интенсивнее.

На рис. 2 показана вероятность появления в разные часы положительной аномалии температуры в г. Апатиты относительно расположенной в 15 км от

города фоновой МС (АМСГ «Апатиты»). МС «Апатиты, Академгородок» находится на территории Академгородка (рис. 3), а МС «Апатиты, Центр» – в центральной и наиболее настроенной части города (ул. Бредова, 14) и в большей степени подвержена влиянию ГОТ. На обеих МС время проявления положительной аномалии температуры воздуха не зависит от времени суток, а определяется исключительно погодными условиями (ветер менее 3 м/с, отсутствие сплошной облачности [3]).

Статистика положительных разностей температур между Апатитами («Академгородок», «Центр») и АМСГ «Апатиты» в часы наибольших (6–18 час) и наименьших (22–5 час) значений АПТ (согласно суточному ходу на рис. 1) в виде бокс-диаграмм представлена на рис. 4. Несмотря на различные значения АПТ, средние значения положительных аномалий в дневные и ночные часы на МС «Апатиты, Академгородок» фактически одинаковы – 2.0 и 2.1 °С, а на МС «Апатиты, Центр» 2.0 и 2.0 °С, соответственно.

Статистический анализ показывает, если АПТ и вносит заметный вклад в возникновение положительной аномалии температуры воздуха в г. Апатиты, то, главным образом, за счет тепла, интенсивность выделения которого не зависит от времени суток. Так как на исследуемой территории города Апатиты (рис. 3) нет крупных промышленных предприятий с круглосуточным циклом работы, такой компонентой может быть тепло, затраченное на обогрев зданий.



Рис. 3. Апатиты (фото Б. Вахмистрова). Отмечены высоты в м н.у.м.; расстояние $AF \sim 1.4$ км, $BF \sim 2.8$ км; положение городских MC: 1 - MC «Апатиты, Центр», 2 - MC «Академгородок».

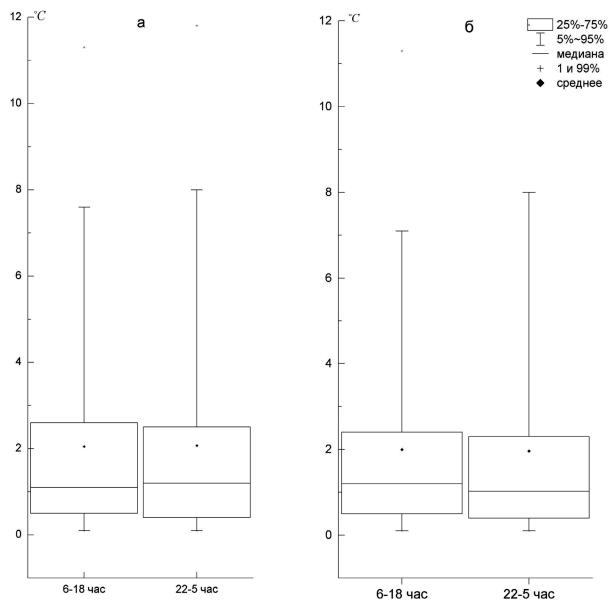


Рис. 4. Положительные аномалии температуры в г. Апатиты в ночное и дневное время по разности температур на МС «Апатиты, Академгородок», АМСГ «Апатиты» (а), МС «Апатиты, Центр» и АМСГ «Апатит» (б), декабрь-февраль.

Расход тепла в отопительной сети Q пропорционален температуре наружного воздуха t:

$$Q = Q_p^t \frac{t_r - t}{t_r - t_p}$$

где t_p – расчётная температура наружного воздуха, t_n – температура воздуха в отапливаемых помещениях, Q_p – расчётная тепловая нагрузка ТЭЦ соответствующая расчётной температуре t_p [7].

На практике отпуск тепла городу не следует за быстрыми изменениями температуры воздуха, а задаётся на ТЭЦ на много часов вперёд. Вследствие тепловой инерции, в работе будут анализироваться не мгновенные значения температуры и отпускаемого ТЭЦ тепла, а среднесуточные значения ГОТ и суточные суммы потребленной городом энергии.

Были отобраны все дни, когда среднесуточная температура воздуха в г. Апатиты была выше, чем на АМСГ «Апатиты». Как показано на рис. 5, разность среднесуточных температур между городской и фоновой увеличивается вместе с ростом потребляемой городом тепловой энергии. Значительный разброс точек вызван тем, что на разность температур оказывают сильное влияние погодные условия (облачность, скорость ветра и т.д.), которые в течения дня могут меняться. Тем не менее, коэффициент корреляции (r)между данными параметрами статистически значим и равен 0.46. Однако, если на тот же рис. 5 нанести разности температур в те же самые дни между расположенной в верхней части фонового холма автоматической дорожной станцией (АДМС-1166) и АМСГ «Апатиты», которые никак не связаны с теплопотреблением в городе (удалены от города на 15-50 км), мы обнаружим такую же зависимость (r=0.50). Результат объясняется тем, что причиной понижения температуры воздуха часто является радиационное охлаждение подстилающей поверхности и приземного слоя воздуха, возникающее при установлении тихой и малооблачной погоды. Это радиационное выхола-

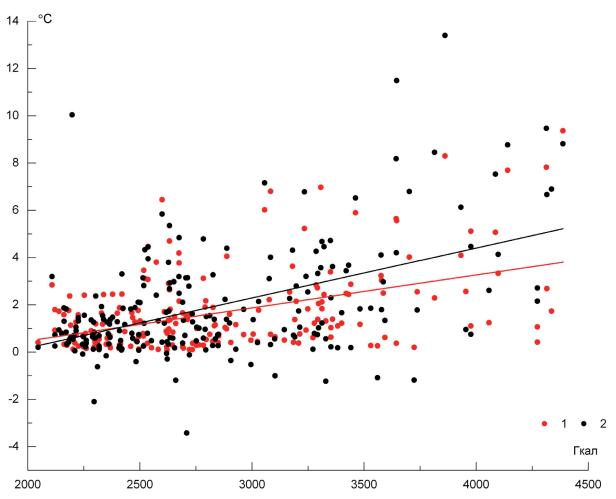


Рис. 5. Зависимость от суточного потребления г. Апатиты тепловой энергии разности среднесуточных температур зимой: г. Апатиты и АМСГ «Апатиты» (1) и АДМС—1166 и АМСГ «Апатиты» (2); прим.: выбраны дни с положительной аномалией температуры в городе.

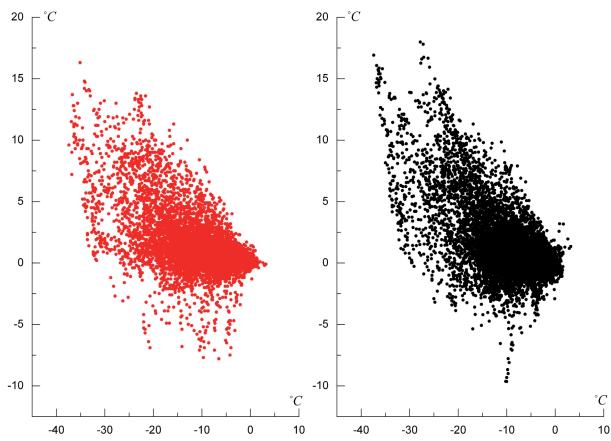


Рис. 6. Разность температуры между верхней частью холма и прилегающей равниной в зависимости от температуры воздуха на равнине: г. Апатиты и АМСГ «Апатиты» (а), АДМС–1166 и АМСГ «Апатиты» (б), 2014-2018 гг.

живание запускает механизмы, создающие микроклиматические различия по элементам рельефа, приводящие, в частности, к увеличению разности температур между верхней частью холма и прилегающей к нему равниной.

Для иллюстрации на рис. 6 показано, что при общем понижении температуры в регионе увеличение разности температур между верхней частью городского («Апатиты, Академгородок») и фонового холма (АДМС–1166) и прилегающей равниной (АМСГ «Апатиты) происходит примерно одинаково. Аналогичное фоновым условиям понижение температуры воздуха в городе будет сопровождаться усилением потребления тепловой энергии, что приведёт к появлению корреляции между величиной положительной аномалии в городе и количеством потребляемого топлива. Полученный результат говорит о том, что использование мезомасштабных климатических моделей для моделирования ГОТ, в которых одним из входных параметров является АПТ, не гарантирует исключения искажающей роли микроклимата на результаты расчёта.

Различие температур между верхней частью холма, где установлена АДМС–1166, и прилегающей к нему равниной создаётся стоком холодного воздуха. Различие температур между верхней частью городского холма и прилегающей равниной создаётся стоком холодного воздуха и ГОТ. Если ГОТ вносит заметный вклад в величину положительной аномалии темпера-

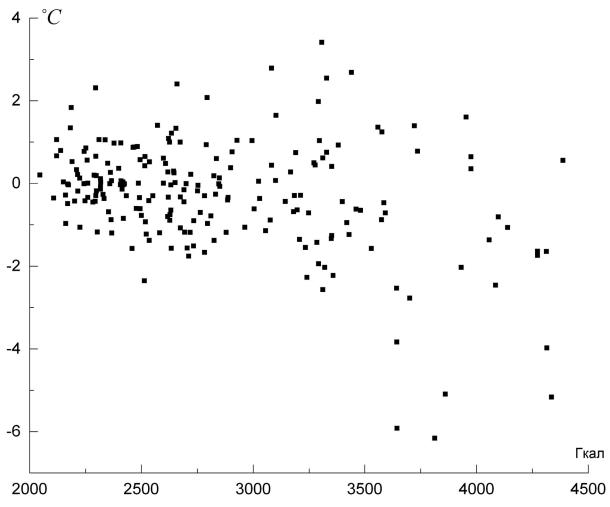


Рис. 7. Зависимость разности среднесуточных температур зимой в г. Апатиты и на АДМС–1166 от суточного потребления тепла г. Апатиты (отобраны дни с положительной температурной аномалией в городе), 2016–2018 гг.

туры воздуха, то разность температуры в городе и на АДМС–1166 должна увеличиваться вместе с ростом теплопотребления. Однако в действительности этого не наблюдается (рис. 7).

Чтобы выделить именно антропогенный эффект, необходимо сравнивать участки со схожим набором естественных процессов, формирующих микроклимат. В случае г. Апатиты зимой, когда снежный покров сглаживает неоднородности подстилающей поверхности, наиболее важным микроклиматическим фактором является положение города в верхней части холма. При оценке ГОТ городские температуры следует сопоставлять с их значениями не на прилегающей к холму равнине, а в верхних частях фоновых холмов.

Такое сравнение уже неоднократно проводилось (см., например, [3, 4]). Для иллюстрации на рис. 8 приведены значения зимних температур в г. Апатиты и на АДМС–1166. АДМС–1166 удалена от Апатит на 50 км к ЮЗ (35 км от АМСГ «Апатиты»). Однако обусловленная горизонтальным градиентом разность температур между ними не превышает 0.3°С, что, очевидно, не помешает выявлению ГОТ, если его величина достигает 5-10°С. Некоторое несовпадение высот между станциями (185 м н.у.м – «Апатиты, Центр»,

200 м н.у.м — «Апатиты, Академгородок» и 210 м н.у.м — АДМС—1166) не играет решающей роли: в холмистом рельефе с относительными превышениями до 100-150 м, эффект высоты перекрывается влиянием неоднородностей подстилающей поверхности и форм рельефа [2]. Стекающий с холма холодный воздух растекается по окружающей равнине; в пределах этого слоя наблюдается значительный вертикальный градиент температуры, а над ним её изменения слабые. Например, в окрестностях г. Апатиты наибольший градиент температуры наблюдается до отметки примерно 170 м н.у.м., а выше в городе (между 170 и 200 м. н.у.м) различия небольшие: средняя разность температур между МС «Апатиты, Центр» и на находящейся в парке на окраине города МС «Апатиты, Академгородок» (200 м н.у.м) зимой всего 0.1 °С.

По результатам измерений 2014—2018 гг. коэффициент корреляции (r) зимних температур в г. Апатиты и на АДМС—1166 равен 0.95. Появление «острова тепла» в г. Апатиты, часто совпадает по времени с появлением такой же теплой области в верхней части холма, на которой находится АДМС—1166. Это объясняется тем, что благоприятная для радиационного выхолаживая и начала стоковых явлений синоптическая ситуация (антициклонические условия с ясным небом и слабым ветром) охватывает сразу большую территорию. Полной синхронности между разностями не наблюдается из-за неоднородностей в поле ветра (по скорости и направлению) и облачности. Нет убедительных оснований говорить о выраженном ГОТ, так

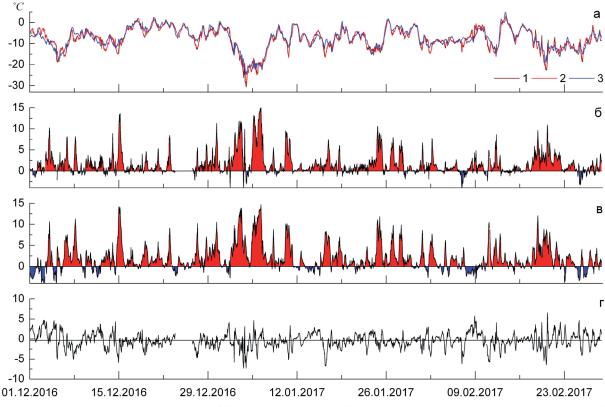


Рис. 8. Температура воздуха (а) в г. Апатиты (1 – «Академгородок», 2 – «Центр») и на АДМС–1166 (3); разность температур между МС «Апатиты, Академгородок» и АМСГ «Апатиты» (б), АДМС–1166 и АМСГ «Апатиты» (в), разности температур на МС «Апатиты, Академгородок» и АДМС–1166 (г).

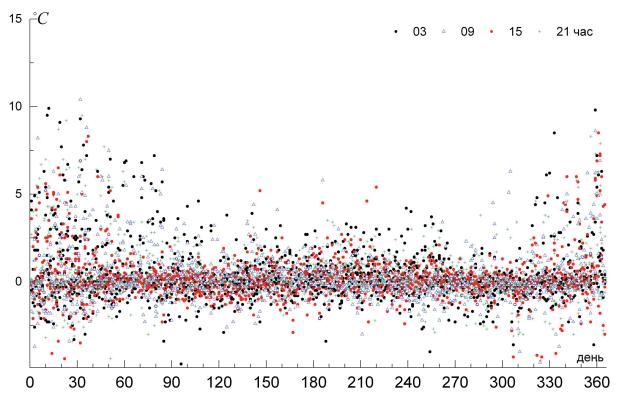


Рис. 9. Разность температур между АМСГ «Апатиты» и ГМС «Апатиты», 2014–2018 гг.

как такие же по величине разности, причем часто появляющиеся в то же самое время, возникают между верхней частью фонового холма и прилегающей равниной и без антропогенного воздействия.

Если предполагать заметный антропогенный вклад в возникновении положительной тепловой аномалии, разность температур между г. Апатиты и АДМС–1166 в периоды появления и усиления ГОТ должна увеличиваться. В частности, при антропогенном ГОТ, равном 5°С [1], температура воздуха в городе была бы почти на эти 5°С выше, чем на АДМС-1166 (точнее – за минусом горизонтального градиента температуры – на 4.7°С). В действительность разность температур между г. Апатиты и АДМС-1166 не связана с величиной положительной аномалии в г. Апатиты (корреляция отсутствует).

Провёденный анализ показывает, что АПТ никак себя не проявляет в поле температуры воздуха в г. Апатиты, что говорит о очень небольшой интенсивности ГОТ предположительно из-за небольших размеров города — воздушная масса быстро пересекает техногенную территорию, не претерпевая существенной трансформации.

Заключение не совпадает с результатами работ [1], согласно которым антропогенный ГОТ в городе составляет в среднем $1-1.5\,^{\circ}$ С с максимальным значением до $5\,^{\circ}$ С. Такая оценка, на наш взгляд, является завышенной, как и в [12, 16], из-за игнорирования микроклимата.

Также заключение не совпадает с результатами моделирования [17], согласно которым примерно 50 % наблюдаемой разности температур между центром г. Апатиты и ГМС «Апатиты» (Тик-Губа), достигающей 11 °С, объ-

ясняются антропогенным ГОТ (остальная часть разности создается орографией). На рис. 9 показаны разности температур между фоновыми АМСГ «Апатиты» (160 м н.у.м.) и ГМС «Апатиты» (135 м н.у.м.), находящихся друг от друга на расстоянии около 15 км. Разность температур между этими двумя фоновыми МС зимой достигает 10 и более ° С без всякого антропогенного ГОТ и объясняется только особенностями положения ГМС «Апатиты» — орографическая депрессия (на берегу озера Имандра с урезом воды 126.7 м н.у.м.), где накапливается холодный воздух, стекающих с окружающих холмов. Естественная разность температур между верхней частью холма, на котором находится г. Апатиты, и низменными участками (ГМС «Апатиты») может достигать даже больших величин, чем 11 °С (см., например, рис. 6).

Согласно климатическим данным, в слабохолмистой местности (с относительными превышениями ≤ 50 м) на Европейской территории России в наиболее холодное время года в верхней части холма по сравнению с ровным местом теплее примерно на 2°С, а в холмистых районах с относительными превышениями 50-150 м − на 2-3°С. [2]. В этом плане средняя разность между находящейся в городе (в верхней части холма) на высоте 180 м н. и ГМС «Апатиты», равная 1.9°С [17], не выходит за пределы естественной микроклиматической изменчивости. В зависимости от погодных условий эта разность меняется в широком диапазоне: от 0 до 4-5°С в случае возникновения склоновых ветров, а в отдельных случаях и до 8-12°С [2]. Условия для возникновения больших разностей в Арктике зимой достаточно благоприятные: при круглосуточном отрицательном радиационном балансе и установившейся антициклонической погоде (ясно, штиль) выхолаживание подстилающей поверхности и приземного слоя воздуха может продолжаться в течение многих дней.

Заключение

Зимой в 70-77 % времени в г. Апатиты зимой наблюдается положительная аномалия температуры воздуха относительно температуры на окружающей местности. Она создается стоком холодного воздуха вниз (город расположен в верхней части холма, на 30-70 м, возвышающегося над прилегающей равниной) и ГОТ. Время появления положительной аномалии и вариации её величины не согласуются с типичным для городов суточным ходом АПТ. Разность температур между верхней частью городского и фонового холма не увеличивается вместе с ростом теплопотребления в городе, что свидетельствует о небольшой интенсивности ГОТ. Предположительно это может быть вызвано небольшими размерами города (примерно 1.5 на 2.5 км): воздушная масса быстро пересекает техногенную территорию, не претерпевая существенной трансформации.

Список литературы

1. Варенцов М.И., Константинов П.И. Первичный анализ вклада антропогенного фактора в формирование «острова тепла» города Апатиты по данным дистанционного зондирования // Земля из космоса — наиболее эффективные решения. 2018. № 9 (25). С. 27-31.

- 2. Гольцберг И А. Микроклимат СССР. Л.: Гидрометеоиздат. 1967. 282 с.
- 3. Демин В.И., Козелов Б.В., Елизарова Н.И., Меньшов Ю.В. Влияние рельефа на формирование «острова тепла» в г. Апатиты // Фундаментальная и прикладная климатология. 2016. № 2. С. 95-106.
- 4. Демин В.И., Козелов Б.В., Елизарова Н.И., Меньшов Ю.В. Влияние микроклимата на точность оценки городского «острова тепла» // Труды ГГО. 2017. Вып. 584. С. 74-93.
- 5. Константинов П.И, Грищенко М.Ю., Варенцов М.И. Картографирование островов тепла городов Заполярья по совмещенным данным полевых измерений и космических снимков на примере г. Апатиты (Мурманская область) // Исследование Земли из космоса. 2015. № 3. С. 27-33.
- 6. Оке Т.Р. Климаты пограничного слоя. Л.: Гидрометеоиздат. 1982. 360 с.
- 7. Хандожко Л.А. Экономическая метеорология. СПб.: Гидрометиздат, 2005. 491с.
- 8. Crutzen PJ. New Directions: The growing urban heat and pollution «island» effect impact on chemistry and climate. Atmospheric Environment. 2004. V. 38. P. 3539-3540.
- 9. Flanner M.G. Integrating anthropogenic heat flux with global climate models // Geophys. Res. Lett. 2009. V. 36. № 2. P. L02801.
- 10. Ichinose T, Shimodozono K, Hanaki K. 1999. Impact of anthropogenic heat on urban climate in Tokyo. Atmospheric Environment. V. 33 (24). P. 3897-3909.
- 11. Kolokotroni M, I. Giannitsaris and R. Watkins. The effect of the London Urban Heat Island on building summer cooling demand and night ventilation strategies. Solar Energy. 2006. V. 80 (4). P. 383-392.
- 12. Konstantinov P.I. *et al.* Urban Heat Island's intensity research of Arctic city during winter (Apatity case-study) and its influence on inhabitants' thermal comfort // EMS Annual Meeting Abstracts V. 13. EMS2016-25. 2016.
- [https://meetingorganizer.copernicus.org/EMS2016/EMS2016-25.pdf]
- 13. Lemonsu A. and V. Masson. Simulation of a summer urban breeze over Paris. Boundary-Layer Meteorology. 2002. V. 104. P. 463-490.
- 14. Peng S.S, Piao S.L., Ciais P. *et al.* Surface urban heat island across 419 global big cities // Environ. Sci. & Technol. V. 46. 2011. № 2. P. 696-703.
- 15. Sailor DJ, Lu L. A top-down methodology for developing diurnal and seasonal anthropogenic heating profiles for urban areas. Atmospheric Environment. 2004. V. 38. P. 2737-2748.
- 16. Varentsov M. *et al.* Experimental research of urban heat island effect for the biggest Arctic cities. Arctic Frontiers conference, Tromsø, Norway, January 28, 2016. [https://istina.msu.ru/download/22094094/1fD7PQ:qWmTumG2ojM7-TmafPxUDs-ZaZA].
- 17. Varentsov V., Konstantinov P., Baklanov A. *et al.* Anthropogenic and natural drivers of a strong winter urban heat island in a typical Arctic city // Atmos. Chem. Phys. Discuss. https://doi.org/10.5194/acp-2018-569.

ТЕРМОМЕТРИЯ АПАТИТА ЯРОТСКОГО ГРАНИТНОГО МАССИВА (ПРИПОЛЯРНЫЙ УРАЛ)

Денисова Ю.В.

Институт геологии Коми НЦ УрО РАН, Сыктывкар, yulden777@yandex.ru

Аннотация

В работе представлены результаты изучения акцессорного апатита из пород Яротского гранитного массива. В гранитах выявлены фтор-апатиты [8] одного морфологического типа. С помощью термометрии насыщения Ватсона и уточнениями Беа и Пичеванта были определены температурные диапазоны формирования гранитов Яротского массива по апатиту. Проведено сравнение полученных температур между собой и с ранее полученными температурами для акцессорного циркона этого же массива.

Summary

The paper presents the results of studies of accessory apatite from the rocks of the Yarot granitic massif. Fluorine apatites of the same morphological type were found in granites. The temperature range of the Yarot massif granite formation was determined using the Watson, Bea and Pichavant saturation thermometry on the apatite. The comparison of the obtained temperatures with each other and with the previously obtained temperatures for the accessory zircon of the same massif was carried out.

Яротский массив, расположенный в северо-восточной части Приполярного Урала в долине р. Малая Ярота, протягивается в субмеридиональном направлении более чем на 6 км при ширине до 500 м (рис. 1). Массив, прорывающий верхнерифейские отложения мороинской свиты, сложен преимущественно массивными лейкократовыми (аляскитовыми) гранитами. Опробование гранитного массива проводилось точечным методом с отбором частных проб в количестве 5 единиц. Для каждой пробы отбирались куски неизмененной породы общим весом в среднем 10-15 кг, содержание апатита в которых для Яротского массива составило в среднем 22 г/т. Акцессорный апатит этого массива представлен преимущественно жёлтыми матовыми удлинёнными кристаллами гексагонального дипирамидально-призматического габитуса. Размер кристаллов 0.10-0.45 мм, коэффициент удлинения 2-4.5. Облик минерала представлен комбинацией призмы 1010 и дипирамиды 1011. Поверхность граней трещиноватая Характерными включениями являются кварц, плагиоклаз, циркон.

Для определения температуры кристаллизации апатита в работе использована термометрия насыщения Е. Ватсона [7]. Эта методика позволяет определять температуру формирования апатита и породы по распределению содержания оксида фосфора между апатитом и породой, содержащей минерал. Согласно расчётам Т. Харрисона и Е. Ватсона, уровень насыщения фосфора в метаалюминиевой породе (A/CNK < 1), необходимый для образования апатита, зависит от содержания SiO₂ в породе и температуры:

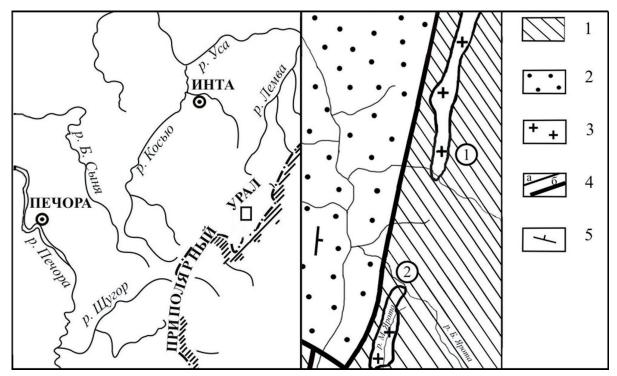


Рис. 1. Яротский гранитный массив.

1 — слюдяно-кварцевые сланцы, порфиры, порфириты, прослои мраморов и кварцитов; 2 — терригенно-карбонатные отложения; 3 — граниты; 4 — риолиты, фельзиты; 5 — геологические границы: а — стратиграфические и магматические, б — тектонические; 6 — элементы залегания плоскостных структур. Массивы (цифры в кружочках): 1 — Бадьяюский; 2 — Яротский.

 $InD_p = (8400 + 26400~(SiO_2 - 0.5))/T - 3.1 - 12.4~(SiO_2 - 0.5), P_2O_5~(HW) = 42 / D_p$ где D_p – соотношение концентрации P в апатите и расплаве, P_2O_5 ; SiO_2 – весовая доля оксида фосфора, кремнезема в расплаве, масс. вес, T – температура, Кельвин.

В случае пералюминиевых пород (A/CNK > 1), Ф. Беа [5] и М. Пичевант [9] предлагают вносить в формулу Ватсона следующие уточнения:

$$P_2O_5(Bea) = P_2O_5(HW) \times e^{\frac{6429(A/CNK-1)}{T-273,15}}$$

или

$$P_2O_5(PV) = P_2O_5(HW) + (A/CNK - 1) \times e^{\frac{-5900}{T} - 3,22SiO_2 + 9,31}$$

На основе данных по химическому составу гранитов Яротского массива (табл. 1) и с помощью программы GCDkit 2.3 [10], автором были получены температуры насыщения для апатита по Ватсону, Беа и Пичеванту (табл. 2).

По полученным температурам для каждой методики расчёта были составлены гистограммы распределения температур формирования пород Яротского гранитного массива по апатиту.

Согласно рис. 2, гистограммы распределения температур по Ватсону и Беа подобны. При использовании формулы Ватсона, получаем, что формирование пород Яротского массива происходило при температурах от 750°C

до $950\,^{\circ}$ С. В случае дополнения Беа — полученный диапазон так же относится к высокотемпературному и включает в себя два температурных режима: от $650\,^{\circ}$ С до $800\,^{\circ}$ С и от $850\,^{\circ}$ С до $900\,^{\circ}$ С. Резко противоположный результат получен в случае уточнений Пичеванта: соответствующая гистограмма показывает три температурных режима: от $350\,^{\circ}$ С до $550\,^{\circ}$ С, от $650\,^{\circ}$ С до $700\,^{\circ}$ С и от $850\,^{\circ}$ С до $900\,^{\circ}$ С, причем, большая часть данных относится к низкотемпературной области.

Таблица 1. Химический состав гранитов Яротского массива

Компонент,	понент, Номер пробы									
масс. %	Я-1	Я-2	Я-3	Я-4	Я-5	Я-6	Я-7	Я-8	Я-9	Я-10
SiO ₂	75.52	75.02	74.59	74.89	74.86	75.69	75.89	75.27	75.48	74.77
TiO ₂	0.14	0.37	0.16	0.22	0.29	0.18	0.19	0.21	0.16	0.31
Al_2O_3	12.35	11.59	13.27	12.08	11.78	12.57	12.35	12.25	12.39	12.89
FeO	1.62	1.63	1.69	1.55	1.49	1.01	1.29	1.04	1.81	1.01
Fe ₂ O ₃	0.82	0.66	0.40	0.77	1.22	0.72	0.71	0.67	1.54	0.83
MnO	0.04	0.05	0.02	0.01	0.01	0.01	0.01	0.03	0.02	0.02
MgO	0.21	0.24	0.15	0.21	0.33	0.25	0.23	0.19	0.39	0.18
CaO	0.88	0.89	0.61	0.57	0.59	0.56	0.49	0.55	0.54	0.31
Na ₂ O	3.30	3.02	3.33	3.09	3.17	3.27	3.56	3.61	3.09	3.09
K ₂ O	4.59	4.65	4.52	4.93	4.91	4.62	4.56	4.52	5.11	4.99
P_2O_5	0.07	0.06	0.01	0.01	0.01	0.00	0.02	0.01	0.02	0.02
ппп	0.16	0.32	0.09	0.06	0.05	0.06	0.07	0.36	0.42	0.31
Σ	99.7	98.5	98.84	98.39	98.71	98.94	99.37	98.71	100.97	98.73
A/CNK	1.029	0.997	1.051	1.054	1.015	1.103	1.057	1.035	1.068	1.167

Примечание. Химический состав получен с помощью силикатного метода в ЦКП «Наука» Институте геологии Коми НЦ УрО РАН (аналитик Кокшарова О.В.).

Таблица 2. Температуры насыщения для апатита Яротского массива

T	Номер пробы										
Температура	Я-1	Я-2	Я-3	Я-4	Я-5	Я-6	Я-7	8-К	Я-9	Я-10	Среднее
по Ватсону, °С	918	892	754	757	757	765	818	761	814	808	804
по Беа, °С	899	892	723	724	748	702	783	739	772	700	768
по Пичеванту, °С	693	892	417	413	531	368	472	451	454	381	507

Примечание. Проба Я-2 является метаалюминиевой породой, поэтому при расчёте температур по Беа и Пичеванту для этой пробы оставлена температура по Ватсону.

Определим толерантность полученных результатов с помощью статистических методов.

При использовании различных статистических методов применительно к изучаемым выборкам необходимо проверить согласованность распределения эмпирических данных с нормальным законом с помощью критерия согласия Пирсона с заданным уровнем значимости $\alpha = 0.05$ (табл. 3) [4].

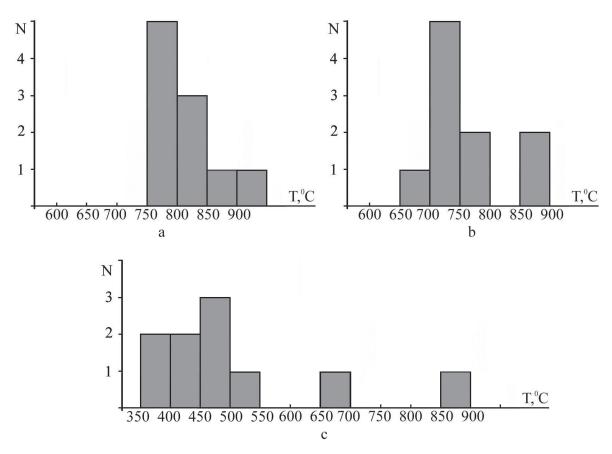


Рис. 2. Гистограммы распределения температур образования для гранитов Яротского массива по апатиту. a - no Ватсону, b - no Беа, c - no Пичеванту.

Таблица 3. Проверка гипотезы о нормальном распределении температур насыщения для апатита Яротского массива.

Гистограмма	Критерий согласия Пирсона								
	Количество интервалов	$\chi^2_{ m pac ext{-}et}$	$\chi^2_{ m \ kput}$						
I	4	2.083	3.841						
II	4	2.250	3.841						
III	6	2.667	7.815						

Примечание. Гистограммы: І — по Ватсону; ІІ — по Беа; ІІІ — по Пичеванту. $\chi^2_{_{\text{расчет}}} - \text{расчётный критерий Пирсона; } \chi^2_{_{\text{крит}}} - \text{табличное значение критерия Пирсона}$

Для всех гистограмм выполняется неравенство $\chi^2_{\text{расчет}} < \chi^2_{\text{крит}}$, что позволяет сделать вывод о нормальном распределении исходных данных.

Гистограмма температур насыщения I имеет мономодальный характер с пиком на $750-800\,^{\circ}$ С. Два других графика являются более сложно построенными. На гистограмме II чётко выражены два резких повышения температур на интервалах $700-750\,^{\circ}$ С и $850-900\,^{\circ}$ С. При рассмотрении гистограммы III, отмечаются три пика: $450-500\,^{\circ}$ С, $650-700\,^{\circ}$ С и $850-900\,^{\circ}$ С.

Проверим с помощью метода Голдина полимодальность II и III гистограмм (табл. 4) [4]. Выдвинем гипотезу об уномодальности этих распределений.

Таблица 4. Проверка гипотезы о мономодальности распределении температур насыщения для апатита Яротского массива.

			Час				
Гистограмма	Сумма всех частот		Максимум	[Mayyona	t расчет	t крит
		Первый	Второй	Третий	Минимум	расчет	
II	10	5	2	_	1	3.04	2.26
111	III 10		1	_	1	0.89	2.26
III	10	3	_	1	1	0.89	2.26

Примечание. $t_{\text{расчет}}$ – расчётный критерий; $t_{\text{крит}}$ (при q=0.05) – табличное значение критерия Стьюдента.

Так как для гистограммы II $t_{\text{расчет}}$ превысило $t_{\text{крит}}$, то нулевую гипотезу следует отклонить как неподтвердившуюся и принять альтернативу о наличии двух вершин для исследуемой совокупности данных. Для гистограммы III $(t_{\text{расчет}} < t_{\text{крит}})$ нулевая гипотеза о одновершинности распределения является подтвердившейся (табл. 4). Согласно гистограмме по Беа, при температурах от 800 до 850°C кристаллизации апатита не происходила. Это может быть связано с малым объёмом выборки. График по Пичеванту утверждает, что апатиты Яротского гранитного массива образовывались только при низких температурах (от 350 до 550°C), причем два пика в зоне высоких температур можно считать незначительными.

Необходимо отметить, что средние температуры по Ватсону и Беа значительно отличаются от средней температуры Пичеванту. Для оценки этих средних для каждой выборки определим доверительные интервалы.

Таблица 5. Доверительные интервалы для средних температур насыщения для апатита Яротского массива.

Методика расчёта	Средняя температура, ° С	$t^{ { m J}}_{ m \ kput}$	δ	Доверительный интервал
по Ватсону	804	2.02	38	766-842
по Беа	768	2.02	46	722-814
по Пичеванту	507	2.02	105	402-612

Примечание. t $_{\text{крит}}^{\Pi}$ (при $\gamma=0.05$) — табличное значение критерия Лапласа, δ — доверительная вероятность.

Полученные доверительные интервалы для средних температур насыщения (табл. 5) подтверждают резкое отличие средней температуры насыщения по Пичеванту для апатита Яротского массива от средних температур насыщения по Ватсону и Беа.

Для уточнения значимости температурных диапазонов по каждой методики расчёта используем правило «трёх сигм», согласно которому нормально распределенная случайная величина практически не принимает значений вне интервала, и модификации это правила (табл. 6).

Как мы видим, начальные диапазоны температур насыщения для апатита по Ватсону и Беа определены достаточно точно, в отличие от температур по Пичеванту. Даже при $\gamma_1 = 99.72$ % расчётный интервал не смог охватить все начальные температуры по Пичеванту.

Таким образом, можно сделать вывод, что уточнения Пичеванта формулы Ватсона для пералюминиевых пород в случае гранитов не являются корректными.

Таблица 6. Расчётные интервалы для средних температур насыщения для апатита Яротского массива при различных уровнях вероятности.

Методика расчёта	Средняя температура, ° С	Начальный интервал	$Tcp \pm 3\sigma$ ($\gamma_1 = 99.72 \%$)	$Tcp \pm 2\sigma$ $(\gamma_2 = 95.44 \%)$	$Tcp \pm \sigma$ $(\gamma_2 = 68.26 \%)$
по Ватсону	804	754-918	627-931	686-922	745-863
по Беа	768	700-899	551-917	624-913	696-840
по Пичеванту	507	368-892	15-861	179-836	343-671

Примечание. Тср – средняя температура, $^{\circ}$ С; σ – среднее квадратическое отклонение.

Согласно приведённым выше данным, формирование пород Яротского массива проходило при высоких температурах. Термометрия насыщения Ватсона по апатиту определяет этот диапазон как 754-918 °C, проведенная корректировка температур по Беа даёт более расширенный интервал — 700-899 °C. Эти данные подтверждают полученные ранее автором температуры с помощью термометрии насыщения Ватсона (806-926 °C) и классического эволюционно-морфологического анализа Пюпена (750-900 °C) для циркона этого же массива [1, 2, 3, 6]. На основании этого можно утверждать, что термометрия насыщения Ватсона и уточнённая формула Беа для апатита даёт такую же точную информацию об эволюции температурного режима в ходе образования гранитов, как термометрии насыщения Ватсона и эволюционно-кристалломорфологический анализ Пюпина и Тюрко для цирконов.

Исследования проведены в рамках НИР ИГ Коми НЦ УрО РАН ГР № AAAA-A17-117121270035-0 и при финансовой поддержке Программы фундаментальных исследований РАН № 18-5-5-19.

Список литературы

- 1. Денисова Ю.В. Термометрия циркона из гранитоидов Приполярного Урала // Вестник Института геологии Коми НЦ УрО РАН. Сыктывкар. № 11. 2016. С. 11-22.
- 2. Денисова Ю.В., Вихоть А.Н. Термометрия циркона Яротского гранитного массива (Приполярный Урал) // Минералы: строение, свойства, методы исследования. Екатеринбург. № 10. 2018. С. 57-58.
- 3. Денисова Ю.В. Апатит Николайшорского гранитного массива (Приполярный Урал) // Вестник Института геологии Коми НЦ УрО РАН. Сыктывкар. 2018. в печати.

- 4. Овчинников Л.Н., Коган Р.Н. О применении методов математической статистики в абсолютной геохронологии // Статистические методы геологических исследований. 1971. Вып. 2. 90 с.
- 5. Bea F., Fershtater G.B., Corretgé L.G. The geochemistry of phosphorus in granite rocks and the effects of aluminium // Lithos. 1992. V. 48. P. 43-56.
- 6. Denisova Y.V., Vikhot A.N. Zircon thermometry of the Yarot granite massif (the Subpolar Ural) // «Minerals: structure, properties, methods of investigation 9th Geoscience Conference for Young Scientists, Ekaterinburg, Russia, February 5-8, 2018» в рамках серии «Springer Proceedings in Earth and Environmental Sciences». в печати.
- 7. Harrison T.M., Watson E.B. The behavior of apatite during crustal anatexis: Equilibrium and kinetic considerations // Geochim. Cosmochim. Acta. 1984. V. 48. P. 1467-1477.
- 8. Pasero M., Kampf A.R., Ferraris C. et al. Nomenclature of the apatite supergroup minerals // Europ. J. Mineral. 2010. V. 22. P. 163-179.
- 9. Pichavant M., Montel J.M., Richard L.R. Apatite solubility in peraluminous liquids: experimental data and extension of the Harrison Watson model // Geochim. Cosmochim. Acta. 1992. V. 56. P. 3855-3861.
- 10. The Comprehensive R Archive Network (https://cran.r-project.org/).

«ГЕОМЕТРИЧЕСКИЙ» ВЗГЛЯД НА ПРИРОДУ СТЕПЕННЫХ ЗАВИСИМОСТЕЙ В РАЗВИТИИ ГЕОЛОГИЧЕСКИХ (И ПРОЧИХ ПРИРОДНЫХ) ПРОЦЕССОВ

Ильченко В.Л.

Геологический институт КНЦ РАН, Aпатиты, vadim@geoksc.apatity.ru

Аннотация

Проведённый геометрический анализ уже известных эмпирических нелинейных закономерностей развития внешней оболочки Земли завершился вполне успешно. Получены новые результаты, требующие дополнительного исследования. Подтверждена родственность формул $M_n = M_0 \cdot 2^{-n}$ (механизм тектонического расслоения внешней земной оболочки) и $M_0 = M_n \cdot \sqrt{2}^{-n}$ (механизм развития систем концентрических нарушений вокруг контрастных геологических объектов (в том числе породных массивов и глубоких горных выработок). Показана возможность реального существования прямой связи между «квантовыми» и «глобальными» волновыми системами.

Summary

The geometrical analysis of already known empirical nonlinear patterns of the outer Earth shell development was completed quite successfully. New results were obtained that require additional study. The affinity of the formulas was confirmed $M_n = M_{0n} \cdot 2^{-n}$ for the mechanism of tectonic layering of the outer Earth shell and $M_0 = M_n \cdot \sqrt{2}^n$ the mechanism for developing of concentric disturbances around contrast geological objects (including rock massifs and deep mine workings.) The possibility of the real direct connection between "quantum" and "global" wave systems was shown.

Введение

Как известно, все фундаментальные физические законы были выведены эмпирически и, часто, путём весьма продолжительных наблюдений за природой. При этом фундаментальная наука до сих пор «не вполне доверяет» (или даже игнорирует) некоторым эмпирическим законам, описываемым степенными функциями (в сейсмологии — закон Гутенберга-Рихтера, Омори и др., в биостратиграфии — гистограмма событий вымирания видов или «кривая смерти» Раупа, в геохронологии и геохимии — явление полураспада тяжёлых элементов и др.), на которых построена теория самоорганизованной критичности П. Бака [1]. Видимо, фундаментальная наука «не любит» теорию самоорганизованной критичности (СК) потому, что эти её законы эмерджентны, но не выводятся аналитически и, хотя теория прекрасно работает, полученные с её помощью решения обычно носят вероятностный характер.

Внешняя земная оболочка не является сплошной средой, так как имеет глыбово-блочное строение и пронизана системами трещин. Трещины (разломы) служат путями для рудных флюидов и создают проблемы недропользователям [17]. Трещиноватость характеризуется иерархичностью, фрактальным строением и описывается известными степенными законами (ряды, ге-

полезные ссылки там].

ометрические прогрессии), но сейсмотектонические события (и их следствия) пока остаются непредсказуемыми и их рассматривают как «детерминированный хаос» [5].

На самом деле механизмы разрушения пород земной коры (и землетрясения [12]) имеют изначально волновую природу; верней, такую природу имеет механизм подготовки горных пород к разрушению. Кратко покажем это на двух примерах.

- 1) Механизм тектонического расслоения породного пространства внутри колебательной системы: $M_n = M_0 \cdot 2^{-n}$, M_n мощность элемента (моды) расслоения, n номер моды (0, 1, 2..., все целые числа), M_0 мощность колебательной системы. Размер M_0 можно получить и «обратным» пересчётом из длины «конечной моды» M_n : $M_0 = M_n \cdot 2^n$. Этот механизм впервые был предложен для построения модели тектонического расслоения земной коры Печенгского блока и как колебательной системы и, затем, доказан на разрезе Кольской сверхглубокой скважины (СГ-3) [7] и на многих других скважинах (пройденных в осадочных фанерозойских толщах, в т.ч. на шельфе Баренцева моря [8, 9]).
- 2) Развитие концентрической системы тектонических нарушений вокруг геологического объекта (породного тела) с контрастными, относительно вмещающей среды, свойствами (сюда как весьма контрастные объекты относятся глубокие горные выработки) и которое регулярно превращается в источник колебаний, происходит по закону $M_n = M_0 \cdot \sqrt{2}^n$; $M_n n$ -й радиус области тектонических нарушений, n её номер (0, 1, 2..., все целые числа), M_0 мощность исходной (№0) колебательной системы. Исходный размер (длину моды) M_0 , также как и в механизме тектонического расслоения [7], легко получить посредством «обратного» пересчёта: $M_0 = M_n \cdot \sqrt{2}^{-n}$ [10 и

Сходство (и, по-видимому, близкое «родство») формул

1)
$$M_n = M_0 \cdot 2^{-n} \times 2$$
 $M_0 = M_n \cdot \sqrt{2^{-n}}$

предполагает общий физический принцип для обеих ситуаций (в их основе — одно и то же явление), разница лишь в том, что при переходе «изнутри — наружу» в точке M_0 , динамика описываемого процесса меняется. Изменения вытекают из ситуаций: в случае (1) основная часть приливной энергии остаётся «внутри» колебательной системы, а случай (2) описывает работу «остаточной» энергии, что уходит из колебательной системы во внешнюю среду. В итоге получается два числовых ряда (геометрические прогрессии), начинающихся в точке M_0 , причём развитие первого происходит с убыванием длин мод по мере роста их количества — за счёт их пошагового деления пополам, а второго — с пошаговым возрастанием длин мод.

Рабочая версия процессов подготовки пород к тектоническому расслоению состояла в следующем: колебание в породах внешней земной оболоч-

ки вызывается — на «квантовом» уровне — наподобие эффекта Мёсбауэра [18] — силой лунной гравитации (солнечно-лунный прилив). Очень скоро, после ухода источника этих возмущений (Луны) из точки «зенита» приливное колебание преобразуется в стоячую волну, которая вынуждена перейти в режим затухания, что ведёт к развитию в колеблющейся среде системы из множества узлов стоячей волны — точечных концентраторов избыточно высоких напряжений (поскольку сюда отжимается часть напряжений из зон колеблющихся пучностей стоячей волны), что и обусловливает всё последующее расслоение [7]. До настоящего времени нет более строгого физического описания этого явления, хотя сам механизм работает: он позволяет вычислять пространственное положение (вероятностную глубину) границ тектонического расслоения с достаточно высокой точностью (вероятность обусловлена пространственными вариациями физических — в том числе прочностных — свойств горных пород внешней земной оболочки).

В одной из последних работ на эту тему [11] приведены как бы вполне убедительные доводы в пользу постулата об эквивалентности гравитирующих масс (принципа ЭГМ), предполагающего, что масса источника гравитационных возмущений на Земле (Луны) равна массе области этого возмущения (в составе пары твёрдых приливных волн-антиподов). При этом остаётся без строгого доказательства механизм тектонического расслоения, основанный на физических условиях в режиме затухания стоячих волн (волновой контроль) [7].

Дальнейшие рассуждения нацелены на то, чтобы как-то приблизиться к более строгому, по понятиям фундаментальной науки, доказательству правомерности применения механизма тектонического расслоения на практике («сверхзадача» исследований: придание механизму тектонического расслоения и принципу ЭГМ статуса «Закон Природы»).

Геометрия

Идея о привлечении законов геометрии к доказательству волновой природы механизмов тектонического расслоения и развития систем концентрической зональности тектонических нарушений вокруг контрастных геологических объектов возникла несколько лет назад — во время работы над статьёй о развитии посттехногенных нарушений в породных массивах [13]. Но в той статье был рассмотрен наиболее простой случай: развитие системы тектонических нарушений вокруг выработки квадратного сечения, хотя эти сечения часто имеют (по разным причинам) довольно-таки произвольную форму, причём закономерность развития системы тектонических нару-

шений $R_n = r_0 \cdot \sqrt{2}^n$ (R_n — радиус n-й тектонической зоны, r_0 — «радиус» контура) эквивалентна известному геометрическому соотношению $R/r = \sqrt{2}$ (R — радиус окружности, описанной вокруг квадрата, r — радиус вписанной в этот квадрат окружности [3]) и выполняется для глубоких горных выработок почти повсеместно. За прошедшие 30 лет механизм формирования этого яв-

ления так и не выяснен «большой наукой» [14, 15]. Ниже приводится попытка пояснить развитие тектонической зональности «геометрическим» путём.

Развитие зон тектонических нарушений вокруг выработки начинается уже на её контуре. Стенки квадратного контура ABCD (рис. 1, слева), регулярно превращаются в колебательные системы лунным приливом, либо вследствие какого-то техногенного воздействия (взрывами, вибрацией от работы тяжёлых механизмов поблизости и т.п.). Эти стенки ограничены углами в пространстве и, если проводить аналогию с натянутой струной (как в [7]), эти углы играют ту же самую роль, что и её закреплённые концы: это узловые точки стоячей волны. Конечно же, стенки горной выработки не «играют» столь интенсивно, как на рисунке (стрелками изображён колебательный процесс), но под волновой контроль попадает всё породное вещество между хордой окружности (АВ, например) описанной вокруг контура выработки и касательной (А,В,) к этой окружности, которая параллельна хорде (АВ). То же самое происходит по всему контуру. Как и при развитии границ тектонического расслоения (по формуле (1)), касательная (А,В,) постепенно превращается в линейный концентратор избыточных упругих напряжений, что предполагает появление здесь зоны нарушений. Это первый шаг в процессе развития тектонической зональности – появление 1-й зоны

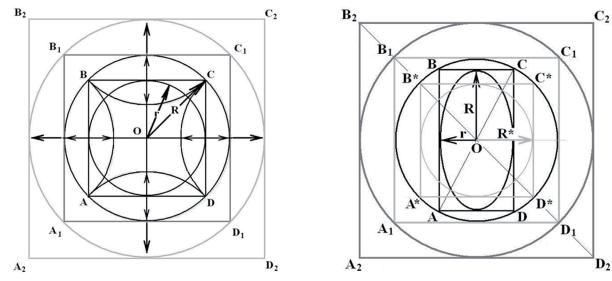


Рис. 1. Схемы развития системы зон тектонических нарушений вокруг контуров глубоких горных выработок: слева — квадратного, справа — прямоугольного (неквадратного) сечения: ABCD — исходный контур, с которого и начинается разрушение (мода №0), O — центр всех окружностей, r — радиус окружности, вписанной в контур, R — радиус окружности, описанной вокруг этого контура; $A_1B_1C_1D_1$ — первая зона нарушений, $A_2B_2C_2D_2$ — вторая зона нарушений. Пары стрелок в противоположные стороны от границ контура ABCD означают колебательный процесс, остальные указывают направление развития зон тектонических нарушений. Для схемы справа всё так, как и для левой, за исключением: r — малый радиус эллипса вписанного в неквадратный контур, R — большой радиус того же эллипса, R^* — «результирующий» радиус, контур $A^*B^*C^*D^*$ — квадрат, «результирующий» по радиусу.

нарушений, которая на рисунке обозначена контуром $A_1B_1C_1D_1$. Теперь этот контур превращается в колебательную систему и всё повторяется — с развитием новой системы тектонических нарушений (по формуле (2)).

Горные выработки с контуром идеальной квадратной формы встречаются не часто и, по-видимому, их в природе не существует. Скорей всего, наиболее распространены контуры выработок прямоугольного (но, не квадратного) сечения (контур ABCD, рис. 1, справа). При этом известно, что любой брошенный в воду предмет, невзирая на его форму, создаёт вокруг себя именно круглую (кольцевую) волну. И вот тут возникает проблема, препятствующая применению соотношения $R/r = \sqrt{2} (R - \text{радиус описанной вокруг}$ квадрата окружности, r – радиус вписанной [3]), поскольку в прямоугольный (неквадратный) контур можно вписать лишь эллипс (не круг), который имеет два радиуса: малый r и большой R. Чтобы получить квадратный контур (условие для формулы $R/r = \sqrt{2}$), «превратим» этот прямоугольник в квадрат, просто манипулируя радиусами эллипса и получим результирующий радиус $R^* = (R+r)/2$. Физическое оправдание этой операции состоит в том, что мы имеем дело с нелинейным волновым процессом, где каждая сторона контура выступает как источник одиночных волн – солитонов, превращающих далее приконтурное породное пространство в регулярную колебательную систему, периодически работающую в режиме затухания, то есть - под волновым контролем [7]. Эллипс же трансформируется в круг опять же благодаря солитонной природе отражённых от контура волн: чем больше длина стороны контура, тем больше солитон (длина волны $-\lambda$) и тем быстрей он движется [16]. Длина волны λ равна длине стороны контура; для описанных и вписанных в окружность четырёхугольников есть строгие математические правила и соотношения [3], что должно распространяться и на свойства солитонов, которые генерируются отражающими границами (сторонами контура). По-видимому, трансформация эллипса в круг обусловлена, в описы-

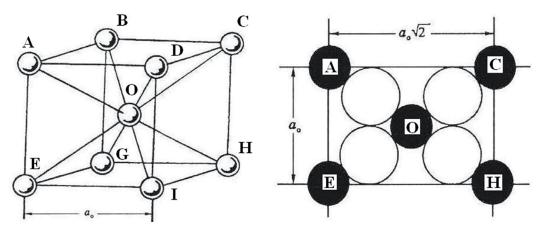


Рис. 2. Из [6] с дополнением. Слева: кристаллическая структура α -Fe (O_h^9 – 1m3m, Z=2). Справа: островно-электронная модель структуры α -Fe(VIII) в плоскости (110): чёрные круги — остовы Fe $^{8+}$ радиусом 0.45 Å; пустые круги — двухзарядные связывающие электронные облака ($2e^-$) радиусом 0.62 Å — разрез кубика α -железа по диагональной плоскости АСНЕ.

ваемой ситуации чисто солитонными условиями: внешний энергетический источник создаёт одно возмущение, которое выглядит разбитым на 4 части, но за пределами источника эти части вновь сливаются в единое кольцо. Отсюда также следует, что горная выработка с контуром даже «неправильной» (непрямоугольной) четырёхугольной формы должна будет создавать тот же самый эффект, что и выработка с квадратным контуром.

Теперь, когда ситуация с развитием тектонической зональности слегка прояснилась (но пока только в «планиметрии»), испытаем приобретённые знания на 3-мерном пространстве. В качестве примера рассмотрим кристаллическую структуру α-железа (рис. 2) из [6], чья элементарная ячейка представляется как объёмно-центрированный куб (ОЦК).

По аналогии с выработкой квадратного сечения, чей превращённый в колебательную систему контур генерировал систему стоячих волн, под и под чьим влиянием развивалась система концентрических зон тектонических нарушений в породном пространстве вокруг выработки, можно предположить, что то же самое, но в трёхмерном варианте, происходит или должно происходить вокруг колебательной системы кубической формы: вокруг кубика будет развиваться тектоническая зональность в форме системы концентрических сфер. Хотя экспериментальная проверка пока не представляется возможной, есть вполне приличный доказательный эмпирический материал: системы кольцевых нарушений вокруг Хибин [2] и тектоническая зональность вокруг глубоких горных выработок [14, 15 и др.]. Рисунок 2 (справа) позволяет сделать ещё один весьма полезный вывод, подкрепляющий гипотезу о физической сути вещества, которое выступает в качестве «наполнителя» колебательной системы, возбуждаемой извне (лунной гравитацией или неважно чем). В [11] – это электроны с внешней электронной оболочки атома, на рис. 2 – двухзарядные связывающие электронные облака (2e⁻) радиусом $0.62~{\rm Å}$. Этот радиус электронного облака, помноженный на $\sqrt{2}$, даёт предполагаемую область возмущения с радиусом $r \approx 0.877 \text{ Å}$, что на 7 порядков больше вычисленной средней гравитационной (лунно-приливной) деформации растяжения электронного облака атома в составе внешней земной оболочки (10^{-7}) [11] и на 8 порядков (10^{-8}) больше амплитуды зарегистрированной гравитационной волны [4]. По-видимому, «погрешность» в 7-8 порядков вызвана неучтённым (в расчётах [11]) влиянием силы ядерного притяжения в структуре α-Fe.

Заключение

Проведённый в этой работе «геометрический» анализ ранее выявленных эмпирических нелинейных закономерностей развития внешней оболочки Земли оказался вполне успешным и привёл к получению новых результатов, которые требуют дополнительного исследования. Подтверждена родственность формул: $M_n = M_0 \cdot 2^{-n}$ (механизм тектонического расслоения внешней земной оболочки) и $M_0 = M_n \cdot \sqrt{2}^{-n}$ (механизм развития систе-

мы концентрических нарушений вокруг контрастных геологических объектов, в том числе породных массивов и глубоких горных выработок). Показана возможность реального существования прямой связи между «квантовыми» и «глобальными» колебательными системами.

Работа выполнена в рамках Госзадания ГИ КНЦ РАН по теме НИР № 0231-2015-0006.

Список литературы

- 1. Бак П. Как работает природа: Теория самоорганизованной критичности. М.: УРСС Книжный дом «ЛИБРОКОМ». 2013. 276 с.
- 2. Беляев К.Д., Увадьев Л.И., Шульга Т.Ф. Закономерности размещения массивов центрального типа Кольского полуострова // ДАН. 1976. Т. 226. №1. С.163-165.
- 3. Бронштейн И.Н., Семендяев К.А. Справочник по математике для инженеров и учащихся вузов. М.: Наука. 1986. 544 с.
- 4. Десять крупнейших событий 2017 года // Наука и жизнь. 2018. №1. С.8.
- 5. Захаров В.С. Самоподобие структур и процессов в литосфере по результатам фрактального и данамического анализа. Автореф. дисс. д. г.-м. н. М.: Геол. ф-т МГУ. 2014. 35 с.
- 6. Зуев В.В. Конституция, свойства минералов и строение Земли (энергетические аспекты). СПб.: Наука. 2005. 402 с.
- 7. Ильченко В.Л. Моделирование тектонического расслоения земной коры как колебательной системы, возбуждаемой лунным приливом (на примере земной коры Печенгского блока, Балтийский щит) / Физико-химические и петрофизические исследования в науках о Земле. Мат. 13 международной конф. М. 2012. С.105-108.
- 8. Ильченко В.Л. Космические факторы (влияние Луны и Солнца) в геодинамике и возможность их применения в нефтегазовой отрасли (для некоторых видов прогноза) / Новые идеи в геологии нефти и газа 2015. Материалы междун. науч.-практ. конф. на CD. Электронное издание. Изд.: МГУ. 2015. С.33-36.
- 9. Ильченко В.Л. Моделирование тектонического расслоения пород земной коры по каротажным данным (на примере Кольской сверхглубокой скважины и ряда скважин на шельфе Баренцева моря // «Современный этап геологического изучения Арктики и континентального шельфа России проблемы и перспективы освоения минеральных ресурсов». Междун. науч.-практ. конф. к 45-летию ОАО «МАГЭ» 22-23 ноября 2017 года, Мурманск. На электронном носителе.
- 10. Ильченко В.Л. Волновая природа систем тектонических нарушений вокруг горных выработок и их аналогов (концентрических кольцевых разломов) на земной поверхности // Мат. Всерос. Конф. в ИГД СО РАН, «Геодинамика и напряженное состояние недр Земли», 2-6 октября 2017 г. Новосибирск. 2017. // Сб. Фундаментальные и прикладные вопросы горных наук. Т. 4. № 2. С. 47-52.

- 11. Ильченко В.Л. Квантование лунной гравитации (энергии приливной волны) в земной оболочке и «квантовая» основа силы упругости // Вестник КНЦ РАН. 2017. № 1 Вып. 9. С. 34-42.
- 12. Ильченко В.Л., Кобринович Ю.О. Приливные волны и прогноз землетрясений // Росс. геофиз. журнал. 2014. № 53-54. С. 99-105.
- 13. Ильченко В.Л., Медведева С.Г. О посттехногенных нарушениях в массиве горных пород // Геоэкология. Инженерная геология. Гидрогеология. Геокриология. 2013. № 5. С. 454-458.
- 14. Кви Ч., Ли К., Бай Д., Чанышев А.И., Лиу П. Градиентная модель зональной дезинтеграции массива пород вокруг выработок глубокого залегания // ФТПРПИ. 2017. № 1. С. 25-37.
- 15. Опарин В.Н., Тапсиев А.П., Чанышев А.И. 1-я Китайско-Российская научная конференция «Нелинейные геомеханико-геодинамические процессы при отработке полезных ископаемых на больших глубинах». ФТПРПИ. № 3. 2011. С. 111-115.
- 16. Филиппов А.Т. Многоликий солитон. М.: Наука. 1990. 288 с. (Библиотечка «Квант». Вып. 48).
- 17. Шабаров А.Н., Цирель С.В. Обеспечение геодинамической безопасности при подземной разработке месторождений // Горный журнал. 2017. № 9. С. 65-70.
- 18. Яворский Б.М., Детлаф А.А. Справочник по физике для инженеров и студентов вузов. М.: Наука. 1974. 944 с.

АЛМАЗЫ СВИТЫ КЕЙВ (КОЛЬСКИЙ ПОЛУОСТРОВ)

Каржавин В.К.

Геологический институт КНЦ РАН, Aпатиты, karzhavin@geoksc.apatity.ru

Аннотация

В статье показаны условия образования и существования обеих полиморфных модификаций углерода в широком интервале температуры и давления в природных условиях. Образование алмаза и углерода может быть реализовано при наличии углеродсодержащих пород (или определённой концентрации углерода) в близповерхностных и поверхностных восстановительных условиях при низкой величине парциального давления кислорода. Выявлены характерные изменения в составе твёрдой фазы в присутствии восстановленного флюида.

Предполагают, что алмазы образовались на глубинах в пределах 400 километров. Затем, в зависимости от геодинамических условий, быстро выносились магмой к поверхности Земли. Однако после образования алмаза в области высоких Р и Т, кристалл будет находиться в сверхсжатом состоянии (в виде плотной структуры вещества). Поэтому чтобы этот кристалл оказался на поверхности Земли он должен, как предполагают многие исследователи, перемещаться с глубин с высокой скоростью [14]. Стремительный подъём к земной поверхности по разломам даже со скоростью 30-50 метров в секунду с глубины 200-300 км составит 3.5-4 часа. В результате такой «транспортировки», сопровождаемой резким сбросом давления, кристалл алмаза разуплотняется (дилатансия) и от него ничего не остается, кристалл просто рассыпается. Это закон физики.

Присутствие алмазов в некимберлитовых породах (метаморфических) предложено рассматривать как возможность их генезиса по иному механизму [10, 13, 17]. В качестве подтверждения этому приводят случаи находок древесины, замещённой кальцитом, а также частично опалом и халцедоном в кимберлитовых трубках взрыва Якутской, Южно-Африканской и Северо-Русской провинций. Вместе с тем, иногда внутри кристаллов сибирских алмазов находили даже тонкие веточки растений [16].

Впервые теоретические результаты определения полей устойчивости полиморфных модификаций углерода термодинамическими расчётами линий фазового равновесия углерод — алмаз были осуществлены О.И. Лейпунским [11]. Предсказанный им переход углерода в алмаз может осуществляться при давлении 60 кбар и температуре 2300 К. Впоследствии появилось ряд уточняющих теоретических работ по определению равновесных условий графит — алмаз [18-20] и др. (рис. 1). Даже было рассчитано, что при космическом абсолютном нуле (0 K = -273.16 °C) это равновесие составляет около 1500 Мн/м² (15 кбар) [3]. Это означает, что для метеоритной (межзвёздной) гипотезы образования алмазов также требуются высокие давления (в условиях вакуума!).

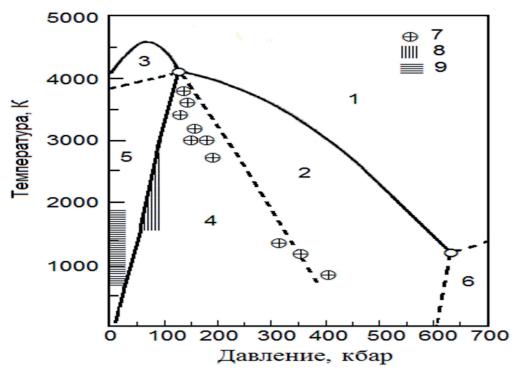
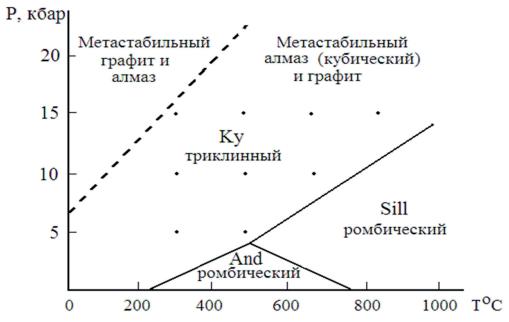


Рис. 1. Области существования углерода в различных состояниях (диаграмма состояния): 1 — жидкость; 2 — стабильный алмаз; 3 — стабильный графит; 4 — стабильный алмаз и метастабильный графит: 5 — стабильный графит и метастабильный алмаз; 6 — гипотетическая область существования иных твёрдых состояний углерода; 7 — кружки, соответствующие условиям опытов по прямому превращению графита в алмаз; 8 — область образования алмаза с использованием металлов (как катализаторы); 9 — область экспериментов по образованию алмазов при низком давлении [1, 3].

На рисунке (рис. 2) представлено совмещение P-T диаграммы Al₂SiO₅ с Р-Т диаграммой фазового равновесия алмаз-углерод. Такое совмещение качественно указывает на некоторые интересные выводы. Из данного рисунка видно, что область существования кианита в системе Ky-Sill-And и области метастабильного алмаза, графита и алмаза с метастабильным графитом фазовой диаграммы алмаз-графит имеют аналогичные термодинамические параметры. Это означает, что в Р-Т области существования кианита в системе Ky-Sill-And и области метастабильного алмаза с графитом показана возможность кристаллизации и совместного существования обеих полиморфных модификаций углерода при температуре ниже 1000°С. Поэтому возможная совместная кристаллизация алмаза и графита в алюмосиликатной системе свидетельствует об относительно низкотемпературных условиях их образования. Однако при этих термодинамических параметрах велика вероятность последующего превращения метастабильного алмаза в графит (графитизация). Данный процесс является медленным во времени и сопровождается выделением энергии 2.18 кДж/моль. Именно это явление отмечают многие исследователи алмазов различных месторождений, в которых встречаются кристаллы, покрытые так называемыми графитовыми «рубашками».



 $Puc.\ 2.\ Coвмещённая\ P-T$ диаграмма $Al_2SiO_5\ c$ фазовой P-T диаграммой состояния углерода.

Предварительно были рассмотрены некоторые реакции возможного образования граната (альмандина) в алюмосиликатной системе, которые соответствуют следующим химическим реакциям (с участием сидерита) [7]:

$$3FeCO_3 + Al_2O_3 + 3SiO_2 = Fe_3Al_2Si_3O_{12} + 3C + 3O_2$$

 $3FeCO_3 + Al_2SiO_5 + 2SiO_2 = Fe_3Al_2Si_3O_{12} + 3C + 3O_2$

А также граната с кианитом:

$$\begin{aligned} &3 \text{FeCO}_3 + 5 \text{Fe}_3 \text{Al}_2 \text{Si}_3 \text{O}_{12} = 3 \text{C} + 5 \text{Al}_2 \text{SiO}_5 + 6 \text{Fe}_3 \text{O}_4 + 10 \text{SiO}_2 \\ &3 \text{FeCO}_3 + 5 \text{Fe}_3 \text{Al}_2 \text{Si}_3 \text{O}_{12} + 10 \text{Al}_2 \text{O}_3 = 3 \text{C} + 6 \text{Fe}_3 \text{O}_4 + 15 \text{Al}_2 \text{SiO}_5 \\ &3 \text{FeCO}_3 + 3 \text{Al}_2 \text{SiO}_5 = 3 \text{C} + \text{Fe}_3 \text{Al}_2 \text{Si}_3 \text{O}_{12} + 2 \text{Al}_2 \text{O}_3 + 3 \text{O}_2 \\ &\text{FeCO}_3 + \text{Al}_2 \text{SiO}_5 + 2 \text{SiO}_2 = 3 \text{C} + \text{Fe}_3 \text{Al}_2 \text{Si}_3 \text{O}_{12} + 3 \text{O}_2 \end{aligned}$$

Этими реакциями показана возможность совместного существования графита (алмаза), граната, кианита, сидерита, оксидов железа и алюминия в природных равновесных условиях (рис. 3, 4).

Теоретическое физико-химическое моделирование природных процессов осуществляется обычно с помощью метода минимизации свободной энергии Гиббса (программа «Селектор»), совмещенная с базами термоди-



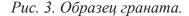




Рис. 4. Образец кианита.

намических величин, что позволяет осуществлять расчёт с высокой точностью [8, 9]. «Селектор» является интегрированной модульной системой, включающей список химических элементов и несколько баз исходных термодинамических данных элементов и химических соединений (минералов), для создания которых автор использовал справочную литературу [21] и банк термодинамических данных ИВТАНТЕРМО [6].

Для проведения исследования была создана мультисистема, основой состава которой являются независимые компоненты (элементы). Для создания векторов исследуемой системы

Al-Fe-Mg-Si-Ti-C-S-H-O

были использованы результаты химического анализа образца кианита 352/10 (Тяпшманюку) (табл. 1) [12]. В кианит-силлиманитовых сланцах больших Кейв наряду с оксидами углерода и углеводородными газами парафинового ряда методом ДТА был установлен факт одновременного присутствия двух различных модификаций углерода (аморфная и кристаллическая) до 3.42 масс.% [2, 5]. Тёмный цвет кианитовых сланцев обязан именно присутствию в них тонкодисперсного углеродистого вещества (графитоида).

Таблица 1. Химический состав и созданные для исследования вектора $b_{\rm i}$ природного образца.

прпродпого образда.										
		Вектора								
Хим. состав	Mac.%	b_1	b_2	b_3	b_4					
СОСТИВ		моль/кг								
SiO ₂	61.89	10.5050	10.3891	10.089	9.96472					
TiO ₂	1.75	0.2192	0.21562	021461	0.21197					
Al_2O_3	28.67	5.6275	5.53291	5.50797	5.44036					
Fe ₂ O ₃	0.62	_	_	_	_					
FeO	1.25	0.2518	0.24994	0.24642	0.24344					
MgO	0.49	0.1217	0.01204	0.1191	0.11761					
CaO	0.26	0.0464	0.04530	0.04542	0.04485					
Na ₂ O	1.31	0.4229	0.41805	0.4140	0.40894					
K ₂ O	1.16	0.2464	0.24168	0.24122	0.23827					
ΣH_2O	0.06	2.4658	2.44865	2.41384	2.38422					
S _{общ.}	0.07	0.0218	0.0193	0.01542	0.02112					
CO_2	0.1	0.0227	0.9032	1.78366	2.76262					
Ni	0.01	0.0017	0.0017	0.00167	0.00165					
Cu	0.01	0.0025	0.0016	0.00154	0.00152					
P_2O_5	0.13	0.0184	0.0180	0.01794	0.00830					
П.п.п.	2.16	_	_	_	_					
ΣΟ		30.6593	30.3882	30.3313	30.3174					

Физико-химическое моделирование проводилось для T = 300, 500, 700 и $900\,^{\circ}$ С и давления P = 1, 5 и 10 кбар. Для теоретических расчётов основными компонентами алюмосиликатной системы в составе твердой фазы приняты кианит, силлиманит, андалузит, а также гранат (альмандин, пироп) с углеродом и ряд газообразных соединений системы C-H-O [4].

Предпринятая для проведения исследования область Р-Т параметров (рис. 2) представляет определённые экспериментальные условия синтеза (образования) алмазов при низком давлении, отличных от высокобарических [15]. Результатами экспериментов в данной области являются, как правило, стабильный графит и метастабильное существование алмаза (рис. 1). Используемое содержание углерода в мультисистемах (векторах) находилось в пределах от 0.9032 до 2.7626 моль/кг (3.42 мас. %). Это позволит оценить роль переменной концентрации углерода (и кислорода) в исследуемых системах. Для проведения исследования были сформированы мультисистемы b_1 - b_4 (табл. 1).

Анализ результатов численного моделирования позволил установить некоторые интересные отличия, которые можно проследить на примере твёрдой фазы и состава флюида. В качестве примера в таблице приведены результаты расчёта, проведённые в области широкого интервала давления и температуры (табл. 2). Действительно, образование алмаза в данной системе возможно, причем совместно с углеродом в восстановительной обстановке. Причём, по результатам расчётов следует, что содержание углерода в исследуемой системе превышает количество образующего алмаза в два и более раза.

В результате проведённого физико-химического моделирования векторов b_2 - b_4 было установлено, что основными компонентами в твёрдой фазе исследуемых систем являются кварц, альмандин и пироп, а кианит, силлиманит, альмандин в соответствии с их полями на P-T диаграмме (рис. 2). Кроме них в составе твёрдой фазы отмечается незначительное содержание ставролита, микроклина, а также титансодержащих минералов: ильменита, сфена, рутила. Установлены практически стабильные содержания кианита, альбита, анортита, ставролита, а также титансодержащих минералов. Вместе с тем прослеживается снижение содержаний биотита, мусковита и хлорита. Из сульфидных минералов более стабильными оказались NiS_2 (в области низких температур) и FeS (в области высоких). Следует отметить характерное влияние содержания углерода на интересные условия образования апатита: при незначительном содержании углерода (вектор b_4) присутствует только гидроксилапатит, а с повышением содержания углерода в системе вместо него появляется карбонатапатит (табл. 2).

Из результатов расчёта следует, что флюидная фаза в исследуемой системе восстановительная в основном водоуглекислая с высокой концентрацией воды и содержит незначительные концентрации ${\rm CO_2}$, ${\rm CH_4}$, ${\rm H_2S}$ и др.

В качестве примера на рис. 5 представлены в графической форме результаты физико-химического моделирования изменения содержания углерода,

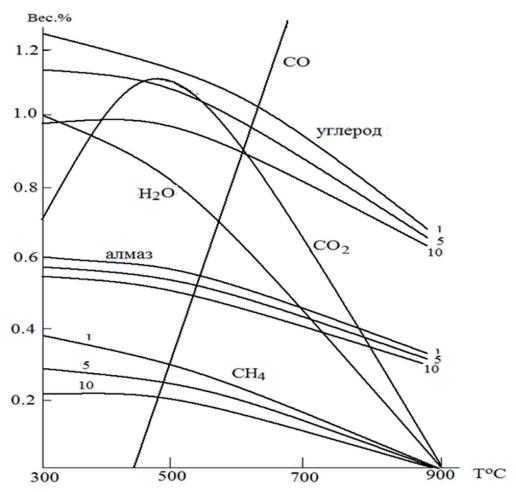


Рис. 5. Распределение концентраций углерода, алмаза и летучих компонентов флюида в зависимости от концентрации кислорода, температуры и разных величин давления.

алмаза и летучих компонентов флюида в зависимости от концентрации кислорода, температуры и разных величин давления в исследуемой системе.

Выводы

В результате проведённого исследования установлены низкотемпературные условия совместной (ассоциация) кристаллизации графита и алмаза при повышенных величинах общего давления (область метастабильного существования алмаза) и низком содержании кислорода в алюмосиликатной системе. В связи с изложенным материалом предлагается считать возможным наличие и других путей синтеза алмаза в природных условиях, отличных от высокобарического. В зависимости от P-T параметров исследуемой системы и концентрации углерода нам удалось установить некоторые характерные особенности и прийти к следующему выводу: из полученного расчётного материала следует, что основными компонентами в твёрдой фазе исследуемых систем являются кианит и гранат. На основании ранее проведённых нами исследований можно считать кристаллы граната (альмандин) наибольшим концентратором наноразмерных алмазов в сложной алюмосиликатной системе Кейв.

Таблица 2. Результаты расчёта компонентов твёрдой фазы и флюида (вектор b_4) при разных величинах давления и температуры.

(201	T					200			000
G	300	500	300	500	700	300	500	700	900
Состав	5 KG	рар		10 кбар		2.5000/	15 к	coap	
V	2.20	2.10	2.06		держание		1.05	1.00	2.00
Углерод	2.20	2.18	2.06	2.06	2.07	1.92	1.95	1.98	2.00
Алмаз	1.10	1.13	1.24	1.23	1.23	1.39	1.34	1.31	1.29
CaCO ₃	_	_	0.08	_	_	СЛ.	0.001	сл.	_
MgCO ₃	_	_	0.03	_	_	СЛ.	0.14	0.21	
CaMg(CO ₃) ₂	_	_	0.08	_	_	сл.	0.002	сл.	
Кианит	25.58	26.27	25.81	25.62	35.61	34.12	34.22	38.62	38.68
Альбит	10.74	10.89	10.73	10.75	10.76	10.73	10.73	10.73	10.75
Анортит	0.43	0.43	0.08	0.43	0.43	0.43	0.42	0.43	0.42
Микроклин	_	_	_	_	_	_	_	5.66	5.44
Кварц	35.58	36.06	35.64	36.62	34.98	35.02	35.04	33.75	33.79
Магнетит	_	_	_	_	_	0.95	0.17	-	_
Аннит	_	_	_	_	0.40	_	_	0.22	0.21
Флогопит	_	_	_	_	1.64	_		1.29	1.64
Мусковит	9.51	9.64	9.50	9.52	7.64	9.50	9.50	сл.	_
Fe –ставролит	9.95	9.70	9.93	9.94	_	_	_	_	_
Мg –ставролит	сл.	сл.	сл.	сл.	_	_	_	_	_
Хлорит	1.46	1.48	1.36	1.46	_	1.46	1.25	_	_
Рутил	1.70	1.72	1.69	1.70	0.09	0.81	сл.	сл.	сл.
Ильменит	_	_	_	_	3.06	1.68	3.22	3.22	3.22
NiS	0.003	0.004	0.004	0.006	0.004	0.004	0.006	0.005	0.004
NiS,	0.017	0.001	0.014	0.009	0.001	0.003	0.007	0.004	0.001
Ni ₃ S ₂	сл.	сл.	сл.	0.002	0.009	0.008	0.003	0.006	0.009
FeS	_	0.16	_	сл.	0.17	_	сл.	0.16	0.17
FeS,	0.10	_	0.11	0.11	_	0.11	0.11	_	_
Cu ₂ S	0.012	0.012	0.012	0.012	0.012	0.012	0.012	0.012	0.012
СО ₃ –Апатит	0.306	0.310	0.307	0.311	0.312	0.303	0.305	.306	_
ОН –Апатит	_	_	_	_	_	_	_	_	0.297
Н,О	1.22	_	1.33	1.22	1.60	1.53	1.56	2.09	2
			Парциал	ьное давл	пение (Р.), бар			
Н,	1.0e-1	4.9e-0	4.2e-3	6.7e-1	1.0e+1	3.8e-4	2.4e-2	5.7e-1	4.3e-0
H,O	1.1e-12	4.7e+3	1.7e+3	7.3e+3	7.2e+3	3 3.8e-9	6.9e+2	1.4e+3	2.1e+3
H,S	2.0e-0	8.5e-0	2.9e-2	4.3e-0	1.8e+1	2.6e-4	8.3e-2	1.8e-0	7.7e-0
O_2	4.3e-37	5.3e-25	3.5e-35	7.0e-24	2.3e-18	3.4e-35	8.8e-24	7.0e-18	5.1e-14
SO,	3.1e-8	1.3e-7	7.8e-9	6.3e-6	9.3e-5	7.4e-12	4.1e-6	4.8e-4	7.0e-3
CO	8.9e-3	3.2e-1	2.7e-3	5.1e-1	1.2e+1	9.7e-5	2.7e-1	1.1e+1	1.3e+2
SO ₂	3.1e-8	1.3e-7	7.8e-9	6.3e-6	9.3e-5	7.4e-12	4.1e-6	4.8e-4	7.0e-3
CO	8.9e-3	3.2e-1	2.7e-3	5.1e-1	1.2e+1	9.7e-5	2.7e-1	1.1e+1	1.3e+2
CO,	5.0e+3	2.4e+2	3.1e+3	2.7e+3	2.8e+3	2.3e+1	2.6e+3	6.6e+3	1.3e+4
CH ₄	4.6e-0	7.1e+1	1.2e-2	1.7e-0	1.8e+1	3.1e-4	2.7e-3	6.2e-2	4.4e-1
C_2H_6	8.7e-5	1.7e-2	1.6e-8	7.8e-5	55.6e-3	2.3e-11	5.9e-9	1.4e-6	4.1e-5
S_2	6.3e-10	1.7c-2 1.9e-7	2.1e-10	6.1e-6	2.0e-4	6.8e-12	4.5e-6	1.4c-0	-
V_{ra3} cm ³	0.72	16.6	70.2	1.62	2.00-4	92.6	93.2	105.7	0.98
Основной газ	CO,	H,O	CO,	H,O	H,O			CO,	CO,
Основной газ		1120		1120	1120	CO ₂	CO ₂		

Список литературы

- 1. Безруков Г.Н., Бутузов В.П., Горохов С.С. Генетическое значение морфологических особенностей синтетических и природных алмазов // Типоморфизм минералов и его практическое значение М.: Недра. 1972. С. 83-86.
- 2. Бельков И.В. Кианитовые сланцы свиты Кейв. М.-Л.: Изд-во АН СССР. 1963. 321 с.
- 3. Бутузов В.П. Методы получения искусственных алмазов / Исследование природного и технического минералообразования. М.: Наука. 1966.
- 4. Зубков В.С. К вопросу о составе и формах нахождения флюида системы C-H-N-O-S в РТ- условиях верхней мантии // Геохимия. 2001. № 2. С. 131-145.
- 5. Гинсбург И.В., Горшков А.И. О графите кианитовых сланцев Кейв (Кольский полуостров) / Тр. Минерал. музея им. А.Е. Ферсмана. М.: Изд-во АН СССР. 1961. Вып. 12. С. 171-176.
- 6. ИВТАНТЕРМО, 2006. http://www.chem.msu.su/cgi-bin/tkv2.pl.
- 7. Каржавин В.К. Условия образования алмазов. LAP LAMBERT, Academic Publishing RU. 2018. P. 111.
- 8. Карпов И.К., Киселёв А.И., Летников Ф.А. Моделирование природного минералообразования на ЭВМ. М.: Недра. 1976. 256 с.
- 9. Карпов И.К. Физико-химическое моделирование на ЭВМ в геохимии. Новосибирск: Наука. 1981. 248 с.
- 10. Лаврова Л.Д., Печников В.А., Плешаков А.М. и др. Новый генетический тип алмазных месторождений. М.: Научный мир. 1999. 228 с.
- 11. Лейпунский О.И. Об искусственных алмазах // Успехи химии. 1939. T. VIII. Вып. 10. С. 1519-1534.
- 12. Нерадовский Ю.Н., Войтеховский Ю.Л. Атлас структур и текстур кристаллических сланцев Больших Кейв. Апатиты: Изд-во К&М. 2013. 116 с.
- 13. Сидоренко А.В., Розен О.М., Теняков В.А., Сидоренко Св.А. Углеродсодержащие метаморфические комплексы докембрия как потенциальный источник алмаза // ДАН СССР. 1976. Т. 230. № 6. С. 1433-1436.
- 14. Соболев В.С, Шацкий Н.В. Некоторые аспекты генезиса алмазов в метаморфических породах // ДАН РАН. 1993. Т. 331. № 2. С. 217-219.
- 15. Харькив А.Д. Зинчук Н.Н., Зуев В.М. История алмаза. М.: Недра.1997. 601 с.
- 16. Шестаков О.В. Образование, свойства и добыча алмазов (http://bestreferat.ru/referat-178261).
- 17. Шумилова Т.Г. Минералогия самородного углерода. Екатеринбург: Уро РАН. 2003. 315 с.
- 18. Berman R.G., Simon F. On the graphite-diamond equilibrium // Zeitschrift für Electrochemie. 1955. V. 59. N. 5. P. 333-338.
- 19. Bundy F.P. The P,T phase and reaction diagram for elemental carbon, 1979 // J. Geophys. Res. 1980. V. 85. P. 6930-6939.
- 20. Kennedy C.S., Kennedy G.C. The equilibrium boundary between graphite and diamond // J.Geophys. Res. 1976. V. 8. N 14. P. 2467-2470.
- 21. Yokokawa H. Tables thermodynamic properties of inorganic components. Kagaku gidziutsu kenkiudze kokaku (Jour. Nat. Chem. Lab. Ind. Spec. Iss.). V. 83. 1988. 121 p.

МЕТОДИКА ОПРЕДЕЛЕНИЯ СКОРОСТНЫХ СООТНОШЕНИЙ УПРУГИХ ВОЛН В ЗАДАЧАХ ИЗУЧЕНИЯ ПЕТРОФИЗИЧЕСКИХ СВОЙСТВ МЕТАМОРФИЗОВАННЫХ ПОРОД МЕТОДОМ АКУСТОПОЛЯРИСКОПИИ

Ковалевский М.В., Горбацевич Ф.Ф.

Геологический институт КНЦ РАН, Aпатиты, koval@geoksc.apatity.ru

Аннотация

В работе приводится новая методика анализа скоростных соотношений, получаемых при помощи акустополяризационного метода. Работа направлена на увеличение точности и достоверности результатов определений физико-технических параметров твёрдых материалов, позволяет исключить влияние оператора, аппаратную и методические погрешности. Может применяться в следующих сферах промышленности: авиастроение; спортивное оборудование; машиностроение; металлургия; энергетика; разработка месторождений; сейсморазведка; строительство; бурение; космостроение; утиль радиоотходов; производство облицовочной плитки, производство ячеистых бетонов; изучение внутренней структуры кристаллов, горных пород и материалов в науках (геология, геофизика, археология, кристаллография).

В настоящее время проявляется всё возрастающий интерес исследователей к проблемам изучения сейсмической анизотропии земных недр. Анизотропия и симметрия — фундаментальные взаимосвязанные свойства геологической среды. Исследованию этой взаимосвязи при экспериментальном изучении упругих свойств горных пород уделяется пока ещё недостаточное внимание. Это объясняется, с одной стороны, методическими сложностями, связанными с необходимостью измерений свойств неоднородных и анизотропных горных пород. С другой стороны, для качественного определения таких свойств требуется специальная аппаратура, работающая в реальном режиме времени.

Наиболее перспективное направление решения этой проблемы – создание таких методик исследования упругих свойств горных пород, которые позволяли бы в процессе эксперимента полностью определять детерминированную и статистическую составляющие этих свойств. Такой подход не только обеспечивает исчерпывающее количественное описание упругих свойств горных пород и их анизотропию, но и позволит на качественно новом уровне исследовать физическую природу упругой анизотропии и явления, с ней связанные.

Ультразвуковые методы определения свойств и структуры анизотропных сред, таких как горные породы, отличает возможность получения результатов высокой точности и надёжности [1]. Особо широкие возможности для обнаружения упругой анизотропии, определения числа и пространственной направленности элементов симметрии, типа симметрии и величин констант упругости открывает акустополяризационный метод [2, 3] на

основе которого работает современный авторский комплекс Акустпол [4-6]. В соответствии с этой направленностью исследователям рекомендуется проводить измерения упругих скоростей продольных и поперечных волн. При таком подходе становится возможным наиболее точные определения физико-механических характеристик твёрдых тел. Однако определения скоростей и последующий анализ имеют погрешности измерений. Методическая погрешность связана с неоднозначностью определений исследователями. Инструментальная погрешность (см. табл.) варьируется и, в частности, зависит от времени распространения упругих волн через образец. В этой связи становится актуальной задача по разработке порядка подобных определений с учётом имеющегося опыта [7] и вышеуказанных недостатков.

Методика определения скоростей

Необходимые акустополяризационные измерения производят на образце, грани которого образованы параллельно и перпендикулярно выявленным элементам симметрии (рис.). Перед проведением измерений образец помещается между преобразователями, так чтобы его центр совпадал с центром контактных площадок. Измерения осуществляются при разной ориентации векторов преобразователей (ОВП). Наиболее подробно методика проведения измерения описывается в [3].

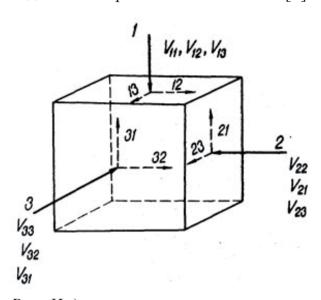


Рис. Индексация величин скорости распространения упругих колебаний в кубическом образце [2].

В процессе измерений определяются величины скоростей распространения продольных и сдвиговых колебании по всем граням кубического образца. После окончания измерения всех значений скоростей удобно использовать порядок индексации измеряемых величин, приведенный ниже:

$$\begin{array}{ccccc} V_{11} & V_{12} & V_{13} \\ V_{21} & V_{22} & V_{23} \\ V_{31} & V_{32} & V_{33} \end{array}.$$

где V_{11} , V_{22} , V_{33} — скорости распространения продольных колебаний, измеренные в направлениях 1-1',

2-2', 3-3'. V_{12} , V_{13} — скорости распространения поперечных колебаний, измеренные в направлении 1-1', при ОВП в направлении 2-2', 3-3'; V_{21} , V_{23} — скорости распространения поперечных колебаний, измеренные в направлении 2-2', при ОВП в направлении 1-1', 3-3'; V_{31} , V_{32} — скорости распространения поперечных колебаний, измеренные в направлении 3-3', при ОВП в направлении 1-1', 2-2'. Измеренные величины V_{ij} представляют в виде прямоугольной таблицы (квазиматрицы).

Далее, для определения типа симметрии исследуемых образцов геоматериалов необходимо провести анализ полученных скоростных соотношений (СС).

Методика анализа скоростных соотношений

Методика анализа СС является новой и представляет собой последовательность действий, показанную здесь на примере метаморфизованного образца кварцевого плагиоклаза (ODB-319_25) керна финской скважины Оутокумпу.

Таблица. Данные измерений для метаморфизованного образца кварцевого плагиоклаза (ODB-319_25) керна финской скважины Оутокумпу.

Матрица	Величины	Коэффициент	Погрешность
скоростей	скоростей, м/сек.	вариации, %	измерений, м/сек.
$V_{11} V_{12} V_{13}$	6261 3776 3411	1.15 0.75 0.69	72 28 24
$V_{21} V_{22} V_{23}$	3595 5954 3389	0.72 1.10 0.69	26 66 23
$V_{31} V_{32} V_{33}$	3350 3287 5230	0.66 0.65 0.95	22 21 50

1. Упорядочение величин скоростей матрицы (см. табл.) по убыванию. Из матрицы скоростей в порядке убывания выбираются величины скоростей.

Из (1) в порядке убывания записываются соотношения для величин продольных волн (главная диагональ матрицы):

$$V_{11} V_{22} V_{33}$$
 (2)

Из (1) в порядке убывания записываются соотношения для величин поперечных волн (остальные члены матрицы):

$$V_{12} V_{21} V_{13} V_{23} V_{31} V_{32}$$
 (3)

2. Определение неравенств в СС.

В (2) и (3) поочерёдно слева направо выбираются две величины скорости и сравниваются между собой. Необходимо сравнить 7 соотношений (в данном случае: V_{11} с V_{22} ; V_{22} с V_{33} ; V_{12} с V_{21} ; V_{21} с V_{13} ; V_{13} с V_{23} ; V_{23} с V_{31} ; V_{31} с V_{32}). Данным скоростям соответствуют скоростные величины и погрешность измерений из табл. Большее значение скорости и её погрешность соответственно обозначим — величины V_{ij} , $V_{\Delta ij}$, меньшее — V_{kl} , $V_{\Delta kl}$. При анализе величин скоростей возможны следующие соотношения и более точное определение знаков неравенств:

а. Если $(V_{ij} - V_{\Delta ij}) > (V_{kl} + V_{\Delta kl})$, то между двумя сравниваемыми скоростями в (2) и (3) устанавливается знак «больше» (>). В примере:

$$V_{11} > V_{22}, V_{22} > V_{33}, V_{12} > V_{21}, V_{21} > V_{13}, V_{31} > V_{32}$$

- b. Если $(V_{ij}-V_{\Delta ij})$ < $(V_{kl}+V_{\Delta kl})$, то между двумя сравниваемыми скоростями в (2) и (3) устанавливается знак «приблизительное равенство» (~). В примере: $V_{23}\sim V_{31}$.
- с. Если $(V_{ij}-V_{\Delta ij}) < V_{kl}$, то между двумя сравниваемыми скоростями в (2) и (3) устанавливается знак «равенство» (=). В примере: $V_{13}=V_{23}$.

После определения знаков неравенства соотношение (2) преобразуется в вид:

$$V_{11} > V_{22} > V_{33},\tag{4}$$

а соотношение (3) преобразуется в вид:

$$V_{12} > V_{21} > V_{13} = V_{23} \sim V_{31} > V_{32}.$$
 (5)

Отсюда матрице скоростей (1) соответствует следующее СС:

$$\begin{aligned} & V_{_{11}} > V_{_{22}} > V_{_{33}} \\ V_{_{12}} > V_{_{21}} > V_{_{13}} = V_{_{23}} \sim V_{_{31}} > V_{_{32}}. \end{aligned}$$

3. Разбиение СС для поперечных волн (6) по парам скоростей (ПС).

Парами скоростей являются следующие скорости поперечных колебаний (3 пары):

$$V_{12}, V_{21}; V_{13}, V_{31}; V_{23}, V_{32}$$
 (6)

В соотношении (5) необходимо выделить скорости соответствующие парам (6).

$$V_{12} > V_{21} > V_{13} = V_{23} \sim V_{31} > V_{32}.$$

$$\Pi C1 \qquad \Pi C2 \qquad \Pi C3 \qquad (7)$$

В ПС1 слева направо выбирается максимальное значение скорости V_{ijmax} (V_{12}). К этому значению добавляется минимальное значение ПС – V_{ijmin} (V_{21}). Аналогичные действия необходимо совершить для ПС2 и ПС3. Определённые пары скоростей выделяются скобками.

$$(V_{12}, V_{21}) \quad (V_{13}, V_{31}) \quad (V_{23}, V_{32})$$
 (8)

4. Определение неравенств между величинами в ПС.

Знаки неравенств между величинами в ПС выбирается следующим образом:

- а. Если между V_{ijmax} и V_{ijmin} в соотношении (5) присутствует, по меньшей мере, один знак (>), то в ПС необходимо поставить знак (>). В примере: $V_{12} > V_{21}, \ V_{23} > V_{32}.$
- b. Если между V_{ijmax} и V_{ijmin} в соотношении (5) не присутствует знак (>), то знак, установленный перед минимальной скоростью ПС в (5) переносится в ПС вместе с самой скоростью. В примере: $V_{13} \sim V_{31}$. Получаем соотношения между ПС:

$$(V_{12} > V_{21}) \quad (V_{13} \sim V_{31}) \quad (V_{23} > V_{32})$$
 (9)

5. Определение неравенств между ПС в СС.

Знак неравенства между ПС соответствует знаку, который установлен перед V_{ijmax} ПС в соотношении (5). Получаем следующее соотношение для величин поперечных волн:

$$(V_{12} > V_{21}) > (V_{13} \sim V_{31}) = (V_{23} > V_{32})$$
 (10)

6. Запись соотношений скоростей.

Из (4), (5), (10) следует окончательное определение СС в виде:

$$\begin{split} &V_{11} > V_{22} > V_{33} \\ &V_{12} > V_{21} > V_{13} = V_{23} \sim &V_{31} > V_{32} \\ &(V_{12} > V_{21}) > (V_{13} \sim &V_{31}) = (V_{23} > V_{32}) \end{split}$$

Изложенный выше порядок измерений позволяет определять точные соотношения для скоростей упругих колебаний с учётом погрешностей существующей при проведении акустополяризационных измерений. Методика, совместно с анализом акустополяризационных диаграмм, позволяет более точно и качественно определить тип упругой симметрии анизотропных сред, к которым относятся горные породы.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФИ № 16-05-00026-а.

Список литературы

- 1. Колесников А. М. Акустические измерения М.: Наука. 1985. 254 с.
- 2. Горбацевич Ф.Ф. Акустополярископия горных пород. Апатиты: Изд-во КНЦ РАН. 1995. 204 с.
- 3. Горбацевич Ф.Ф. Акустополярископия породообразующих минералов и кристаллических пород. Апатиты: Изд-во КНЦ РАН. 2002. 140 с.
- 4. Ковалевский М.В. К вопросу о разработке методики определения скоростных соотношений упругих волн в задачах акустополярископии // Материалы XVIII молодеж. науч. конф. Актуальные проблемы геологии докембрия, геофизики и геоэкологии. СПб.: ЛЕМА. 2007. С.183-185.
- 5. Ковалевский М.В. Автоматизированный программно-аппаратный комплекс Acoustpol. Уч. пос. Апатиты: Изд-во К&М. 2009. 54 с.
- 6. Автоматизированный программно-аппаратный комплекс Acoustpol (АПАКА) для оценки качества материалов и объектов из природного камня // Контрольно-измерительные приборы и системы. М.: Изд-во МГТУ им. Н.Э. Баумана. 2012. № 4. С.10.
- 7. Фадеев М.А. Элементарная обработка результатов эксперимента. Уч. пос. Нижний Новгород: Изд-во ННГУ. 2010. 122 с.

ТЕОРЕТИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ ДЕМПФИРОВАННЫХ ПЛАСТИНЧАТЫХ ПРЕОБРАЗОВАТЕЛЕЙ ПОВЁРНУТЫХ СРЕЗОВ ДЛЯ ВОЗБУЖДЕНИЯ ПРОДОЛЬНЫХ И ПОПЕРЕЧНЫХ УЛЬТРАЗВУКОВЫХ КОЛЕБАНИЙ

Ковалевский М.В.

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

Аннотация

В задачах геофизики и сейсмики используются датчики упругих волн. В работе представлены расчёты режимов излучения и приёма для демпфированных пластинчатых преобразователей повёрнутых срезов с целью возбуждения продольных и поперечных ультразвуковых колебаний. При этом поперечные волны не являются следствием трансформации продольных волн. Получены системы уравнений для режима излучения и режима приёма.

Общие требования к источникам и приёмникам колебаний

Для реализации метода акустополярископии [1, 2] измерительная аппаратура должна включать в себя преобразователи поперечных линейнополяризованных колебаний.

Исходя из особенностей акустических методов [3, 4] измерения скорости ультразвука, можно отметить, что с точки зрения оперативности и простоты применения метод сравнения является наилучшим. Несмотря на относительную неточность, в большинстве случаев это не является серьёзным недостатком, так как удовлетворяет требованиям к допустимым погрешностям [5]. Именно поэтому последние работы, проводимые в Геологическом институте КНЦ РАН, были нацелены на модернизацию и усовершенствование методики измерений и аппаратуры, реализующей данный метод [6-8].

Для измерения величин фазовой скорости в анизотропных средах следует применять импульсные источники [1], излучающие волны с локально плоскими фронтами и достаточно узкой диаграммой направленности, изготовленные в виде диска с диаметром d» λ , где λ –длина преобладающей волны, элементы которого колеблются синхронно.

Большое затухание в горных породах заставляет выбирать наиболее низкую частоту импульсных источников и приёмников колебаний. С другой стороны, параметры направленности излучения должны быть таковыми, чтобы боковые отражения от граней образца не оказывали влияния на форму переднего фронта и амплитуду импульса, принимаемого приёмником.

Для оценки преобладающей частоты f_0 импульса, излучаемом преобразователем диаметром d через кубический образец толщиной l, используется геометрический способ. В сохранных горных породах средняя скорость распространения квазипоперечных колебаний составляет $V_s \approx 3000$ м/с [9]. Следовательно, например при d=3 см и l=4 см величина $f_0 \ge 0.412$ МГц. Наблюдения, опыт которых изложен в [10] показали, что удовлетворительные условия измерения достигаются при $f_0 \approx 0.5$ МГц или отношении $d/\lambda \ge 5$.

Однако главным требованием к источникам и приёмникам колебаний является их высокая эффективность, необходимая, для определения величин скоростей распространения упругих колебаний в сильно поглощающих горных породах.

Так ранее было предложено использовать повёрнутые срезы пьезокристаллов для возможности одновременного возбуждения продольных и поперечных волн. Были рассчитаны и разработаны конструкции двумодовых преобразователей на основе недемпфированных полуволновых пьезопластин повёрнутых срезов (LiNbO₃) и пьезокерамики.

В процессе изготовления преобразователей для акустической системы прибора типа УЗИС-ГЭТУ были выявлены некоторые недостатки конструкции. Так, в процессе изготовления преобразователей из повёрнутых срезов пьезокерамики возникла сложность металлизации пластины. Это связано с тем, что для изготовления повёрнутых срезов, готовый образец пьезокерамики необходимо разрезать под требуемым углом. При этом рабочие грани неметаллизированны. Для возобновления металлизации, можно воспользоваться одним из следующих возможных технологических процессов:

- 1. Вжигание серебра,
- 2. Вакуумное напыление металлом пластинки,
- 3. Химическое осаждение серебра (реакция «серебряного зеркала»).

Все методы имеют недостатки. В первых двух случаях необходим нагрев металла, что может привести к частичной располяризации керамики. Для третьего метода основная проблема связана с очисткой поверхности (пористость материала, следовательно, трудно удалить загрязнения). Возможным путём преодоления данной проблемы, может служить использование проводимости сред, контактирующих с пьезопластиной. Так со стороны образца пьезопластина контактирует с буферным стержнем. Он может быть изготовлен из металла (сталь, титан), либо металлизированных диэлектрических материалов (плавленый кварц). С тыльной же стороны пластины можно использовать демпфер. Однако тыльная нагрузка изменяет характеристики работы пьезопластины. Поэтому такой метод решения проблемы (вариант конструкции) требует дополнительного анализа работы демпфированных двурезонансных преобразователей и оптимизации на основе выполненных расчётов конструкции преобразователей акустической системы.

Теоретический анализ демпфированных пластинчатых преобразователей повёрнутых срезов

Постановка задачи

Полагаем, что поперечные размеры преобразователя значительно превышают длину звуковой волны. Это даёт возможность решать задачу в одномерном приближении, используя волновой метод (т.е. рассматриваем колебания в системе, как совокупность встречно распространяющихся волн различных типов).

Рассматриваемый преобразователь представляет собой пластину, выполненную из пьезокерамики (например, ЦТС-19). Модули упругости, пьезоэлектрические постоянные и диэлектрические проницаемости пьезокерамики описываются следующими матрицами:

$$\begin{vmatrix} c_{11} & c_{12} & c_{13} & 0 & 0 & 0 \\ c_{12} & c_{11} & c_{13} & 0 & 0 & 0 \\ c_{13} & c_{13} & c_{33} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & c_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & c_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & c_{66} \end{vmatrix}, \begin{vmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & e_{15} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e_{15} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e_{15} & 0 & 0 \\ e_{31} & e_{31} & e_{33} & 0 & 0 & 0 \end{vmatrix}, \begin{vmatrix} \varepsilon_{11} & 0 & 0 \\ 0 & \varepsilon_{11} & 0 \\ 0 & 0 & \varepsilon_{33} \end{vmatrix}.$$

Пластина поляризована в направлении оси Z, которая является осью симметрии порядка ∞ . Параллельная этой оси плоскость YZ является плоскостью симметрии.

Пространственная ориентация пластины показана на рис. 1. Задачу будем решать в новой системе координат X'Y'Z', которая связана с прежней следующей таблицей направляющих косинусов:

Оси	X	Y	Z
X'	1	0	0
Y'	0	cosθ	$\sin\theta$
Z'	0	-sinθ	cosθ

При этом вид матриц упругости, пьезоэлектрических постоянных и диэлектрических проницаемостей примет вид:

$$\begin{vmatrix} c_{11} & c_{12} & c_{13} & c_{14} & 0 & 0 \\ c_{12} & c_{22} & c_{23} & c_{24} & 0 & 0 \\ c_{13} & c_{23} & c_{33} & c_{34} & 0 & 0 \\ c_{14} & c_{24} & c_{34} & c_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & c_{55} & c_{56} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & c_{56} & c_{66} \end{vmatrix}, \begin{vmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & e_{15} & 0 \\ c_{21} & c_{22} & c_{23} & e_{24} & 0 & 0 \\ e_{31} & e_{32} & e_{33} & c_{34} & 0 & 0 \end{vmatrix}, \begin{vmatrix} \varepsilon_{11} & 0 & 0 \\ 0 & \varepsilon_{22} & \varepsilon_{23} \\ 0 & \varepsilon_{23} & \varepsilon_{33} \end{vmatrix}.$$

Считая колебания пластины одномерными и учитывая геометрию задачи, приходим к следующим выражениям для деформаций и напряжённостей электрического поля:

$$\begin{split} U_1 &= \frac{\partial \xi_x}{\partial x} = 0 \;,\; U_2 = \frac{\partial \xi_y}{\partial y} = 0 \;,\; U_3 = \frac{\partial \xi_z}{\partial z} \neq 0 \;,\\ U_4 &= \frac{\partial \xi_z}{\partial y} + \frac{\partial \xi_y}{\partial z} \neq 0 \;,\; U_5 = \frac{\partial \xi_z}{\partial x} + \frac{\partial \xi_x}{\partial z} = 0 \;,\; U_6 = \frac{\partial \xi_y}{\partial x} + \frac{\partial \xi_x}{\partial y} = 0 \;, \end{split}$$

$$E_1 = -\frac{\partial \varphi}{\partial x}, \ E_2 = -\frac{\partial \varphi}{\partial y}.$$

При этом известные уравнения пьезоэффекта в матричных обозначениях:

$$\begin{split} \sigma_i &= C_{ik}^E \cdot U_k - e_{ij} \cdot E_j \,, \\ D_p &= \xi_{pq}^U \cdot E_q + e_{pr} \cdot U_r \end{split}$$

дают для компонент механических напряжений и электрической индукции следующие выражения:

$$\begin{split} \sigma_{3} &= C_{33}^{E} \cdot U_{3} + C_{34}^{E} \cdot U_{4} - e_{33} \cdot E_{3}; \\ \sigma_{4} &= C_{34}^{E} \cdot U_{3} + C_{44}^{E} \cdot U_{4} - e_{34} \cdot E_{3}; \\ \sigma_{5} &= C_{55}^{E} \cdot U_{5}; \\ D_{3} &= \xi_{33}^{U} \cdot E_{3} + e_{33} \cdot U_{3} + e_{34} \cdot U_{4}. \end{split} \tag{1}$$

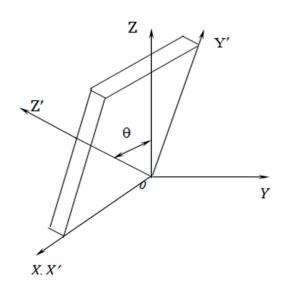


Рис. 1. Пространственная ориентация пластины.

В режиме излучения причиной колебаний пластины является компонента электрического поля E_3 , поэтому видно, что деформация U_5 , не связанная с электрическим полем, не возникает (U_5 =0). В режиме приёма причиной колебаний является падающая на пластину волна, однако и здесь всегда можно сориентировать пластину так, чтобы деформация U_5 не возникла.

<u>Работа преобразователя в режиме из-</u> <u>лучения.</u>

Система волн в режиме излучения представлена на рис. 2. Здесь A_{r} , A_{r} , B_{r} , — амплитуды колебательных скоростей

продольных и поперечных волн, распространяющихся в средах.

Колебательные скорости в волнах могут быть записаны в виде:

$$\vec{\xi}^{(n)} = \vec{\xi}_0^{(n)} \cdot \exp[j(\omega t - k^{(n)}z)];$$

$$\vec{\xi}_0^{(n)} = \xi_0^{(n)} \cdot \sum_{i=1}^{3} \vec{e}_i p_i^{(n)},$$
(2)

где $\xi_0^{(n)}$ – амплитуда, $k^{(n)}$ и $p_i^{(n)}$ – соответственно волновое число и направляющие косинусы вектора колебательной скорости для n-ой волны, \vec{e}_i – единичный вектор.

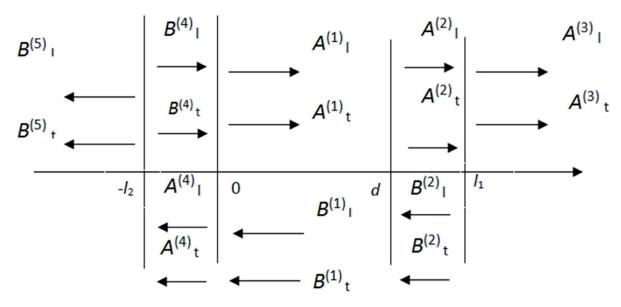


Рис. 2. Схема работы преобразователя в режиме излучения. 1 — пьезопластина; 2, 4 — акустический контакт; 3 — буферный стержень; 5 — демпфер.

Скорости и направления векторов смещения в пьезопластине рассчитаем с помощью соотношений теории Кристоффеля [11]:

$$\left(\theta_{im}^{*} - \rho c^{2} \delta_{im}\right) p_{m} = 0;$$

$$\left|\theta_{im}^{*} - \rho c^{2} \delta_{im}\right| = 0.$$

$$\left(\theta_{im}^{*} - \rho c^{2} \delta_{im}\right) p_{m} = 0;$$

$$\left(\theta_{im}^{*} - \rho c^{2} \delta_{im}\right) = 0.$$

$$\left(\theta_{im}^{*} - \rho c^{2}$$

Подставив значение $\theta_m^{'}$ в (3) и (4), имеем:

$$\begin{vmatrix} \theta_{11} - \rho c^{2} & 0 & 0 \\ 0 & \theta_{22} - \rho c^{2} & \theta_{23}^{*} \\ 0 & \theta_{23}^{*} & \theta_{33} - \rho c^{2} \end{vmatrix} = 0; (\theta_{22}^{*} - \rho c^{2}) p_{2} + \theta_{23}^{*} p_{3} = 0; \theta_{23}^{*} p_{2} + (\theta_{33}^{*} - \rho c^{2}) p_{3} = 0.$$
 (5)

Решая систему уравнений (5), находим:

$$\left(\rho c^{2}\right)_{l,\tau} = \frac{\theta_{22}^{*} + \theta_{33}^{*}}{2} \pm \frac{1}{2} \sqrt{\left(\theta_{22}^{*} - \theta_{33}^{*}\right)^{2} + 4\left(\theta_{23}^{*}\right)^{4}} ,$$

откуда:

$$c_{l,\tau} = \sqrt{\frac{\left(\theta_{22}^* + \theta_{33}^*\right) \pm \sqrt{\left(\theta_{22}^* - \theta_{33}^*\right)^2 + 4\left(\theta_{23}^*\right)^4}}{2\rho}}$$
 (6)

Дополним уравнение (5) условием нормировки векторов смещения: $p_2^2 + p_3^2 = 1$. Следовательно, можно найти величины P_{l_2} , P_{l_3} , P_{τ_2} и P_{τ_3} :

$$\frac{P_{l_{2}}}{P_{l_{3}}} = -\frac{\theta_{23}^{*}}{\theta_{22}^{*} - \rho c_{l}^{2}}\;;\; \frac{P_{\tau_{2}}}{P_{\tau_{3}}} = -\frac{\theta_{23}^{*}}{\theta_{22}^{*} - \rho c_{\tau}^{2}}\;;\;\; p_{l_{2}}^{\;\;2} + p_{l_{3}}^{\;\;2} = 1\;;\;\; p_{\tau_{2}}^{\;\;2} + p_{\tau_{3}}^{\;\;2} = 1\;.$$

Таким образом, в результате мы получили систему уравнений, которая определяет работу преобразователя в режиме излучения:

$$\begin{cases} A_{l}^{(1)}a_{0,0}+B_{l}^{(1)}a_{0,1}+A_{l}^{(1)}a_{0,2}+B_{l}^{(1)}a_{0,3}+A_{l}^{(2)}a_{0,4}+B_{l}^{(2)}a_{0,5}=0\\ A_{l}^{(1)}a_{1,0}+B_{l}^{(1)}a_{1,1}+A_{l}^{(1)}a_{1,2}+B_{l}^{(1)}a_{1,3}+A_{l}^{(2)}a_{1,6}+B_{l}^{(2)}a_{1,7}=0\\ A_{l}^{(2)}a_{2,4}+B_{l}^{(2)}a_{2,5}+A_{l}^{(3)}a_{2,8}=0\\ A_{l}^{(2)}a_{3,6}+B_{l}^{(2)}a_{3,7}+A_{l}^{(3)}a_{3,9}=0\\ A_{l}^{(1)}a_{4,0}+B_{l}^{(1)}a_{4,1}+A_{l}^{(1)}a_{4,2}+B_{l}^{(1)}a_{4,3}+A_{l}^{(4)}a_{4,10}+B_{l}^{(4)}a_{4,11}=0\\ A_{l}^{(1)}a_{5,0}+B_{l}^{(1)}a_{5,1}+A_{l}^{(1)}a_{5,2}+B_{l}^{(1)}a_{5,3}+A_{l}^{(4)}a_{5,12}+B_{l}^{(4)}a_{5,13}=0\\ A_{l}^{(4)}a_{6,10}+B_{l}^{(4)}a_{6,11}+B_{l}^{(5)}a_{6,14}=0\\ A_{l}^{(4)}a_{5,10}+B_{l}^{(4)}a_{5,11}+A_{l}^{(1)}a_{8,2}+B_{l}^{(1)}a_{8,3}+A_{l}^{(4)}a_{8,10}+B_{l}^{(4)}a_{8,11}=e_{33}\frac{V}{d}\\ A_{l}^{(1)}a_{8,0}+B_{l}^{(1)}a_{9,1}+A_{l}^{(1)}a_{9,2}+B_{l}^{(1)}a_{9,3}+A_{l}^{(4)}a_{9,12}+B_{l}^{(4)}a_{9,13}=e_{34}\frac{V}{d}\\ A_{l}^{(2)}a_{10,4}+B_{l}^{(2)}a_{10,5}+A_{l}^{(3)}a_{10,8}=0\\ A_{l}^{(2)}a_{10,4}+B_{l}^{(2)}a_{10,7}+A_{l}^{(3)}a_{10,8}=0\\ A_{l}^{(2)}a_{10,4}+B_{l}^{(2)}a_{12,1}+A_{l}^{(1)}a_{12,2}+B_{l}^{(1)}a_{12,3}+A_{l}^{(2)}a_{12,4}+B_{l}^{(2)}a_{12,5}=e_{34}\frac{V}{d}\\ A_{l}^{(1)}a_{13,0}+B_{l}^{(1)}a_{13,1}+A_{l}^{(1)}a_{13,2}+B_{l}^{(1)}a_{13,3}+A_{l}^{(2)}a_{13,6}+B_{l}^{(2)}a_{13,7}=e_{34}\frac{V}{d}\\ A_{l}^{(4)}a_{14,10}+B_{l}^{(4)}a_{15,13}+B_{l}^{(5)}a_{14,14}=0\\ A_{l}^{(4)}a_{15,12}+B_{l}^{(4)}a_{15,13}+B_{l}^{(5)}a_{14,14}=0\\ A_{l}^{(4)}a_{15,12}+B_{l}^{(4)}a_{15,13}+B_{l}^{(5)}a_{15,15}=0\\ A_{l}^{(4)}a_{15,12}+B_{l}^{(4)}a_{15,13}+B_{l}^{(5)}a_{15,15}=0\\ A_{l}^{(4)}a_{15,12}+B_{l}^{(4)}a_{15,13}+B_{l}^{(5)}a_{15,15}=0\\ A_{l}^{(4)}a_{15,12}+B_{l}^{(4)}a_{15,13}+B_{l}^{(5)}a_{15,15}=0\\ A_{l}^{(4)}a_{15,12}+B_{l}^{(4)}a_{15,13}+B_{l}^{(5)}a_{15,15}=0\\ A_{l}^{(4)}a_{15,12}+B_{l}^{(4)}a_{15,13}+B_{l}^{(5)}a_{15,15}=0\\ A_{l}^{(4)}a_{15,12}+B_{l}^{(4)}a_{15,13}+B_{l}^{(5)}a_{15,15}=0\\ A_{l}^{(4)}a_{15,12}+B_{l}^{(4)}a_{15,13}+B_{l}^{(5)}a_{15,15}=0\\ A_{l}^{(4)}a_{15,12}+B_{l}^{(4)}a_{15,13}+B_{l}^{(5)}a_{15,15}=0\\ A$$

Значения коэффициентов $a_{i,j}$ достаточно объёмны и приведены в [4].

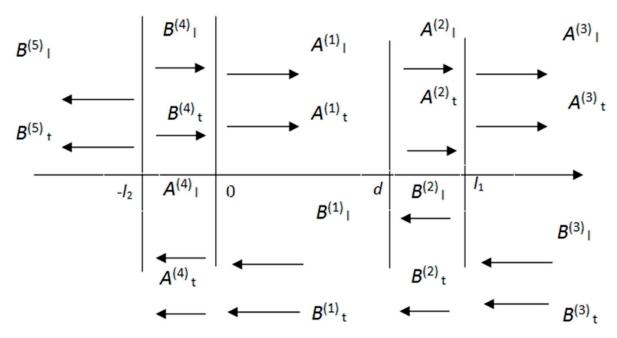


Рис. 3. Схема работы преобразователя в режиме приёма. 1 — пьезопластина; 2, 4 — акустический контакт; 3 — буферный стержень; 5 — демпфер.

Работа преобразователя в режиме приёма

Подход к решению задачи в режиме приёма аналогичен, однако в этом случае имеется ряд особенностей. Система волн в режиме приёма приведена на рис. 3. Отличие от режима излучения состоит в наличии падающей волны (продольной или поперечной).

Хотя амплитуда падающей волны известна, однако, в режиме приёма не известно электрическое напряжение, развиваемое пьезопластиной на внешней электрической нагрузке. Поэтому количество уравнений в режиме приёма на единицу больше, чем в режиме излучения. Следовательно, для решения задачи необходимо ещё одно уравнение. В качестве этого уравнения будем использовать выражение для тока, протекающего через пьезопластину:

$$I_{n} = j\omega D_{3}S = j\omega S \frac{\varepsilon_{33}^{U}V'}{d} + S \frac{e_{33}}{d} (\xi_{zd} - \xi_{z0}) + S \frac{e_{34}}{d} (\xi_{yd} - \xi_{y0}), \tag{8}$$

где V' – электрическое напряжение в режиме приёма,

$$C_n = S \frac{\mathcal{E}_{33}^U}{d} \; ; \; S = \pi \, \frac{D^2}{4} \; .$$
 Очевидно, что
$$\left| I_n \right| = \left| V' \cdot Y \right| \; , \tag{9}$$

где Y – проводимость внешней цепи.

С учётом (8), (9) и наличия продольной падающей волны для режима приёма, некоторые члены системы уравнений (7) приобретут следующий вид:

$$\begin{cases} A_{l}^{(2)}a_{2,4} + B_{l}^{(2)}a_{2,5} + A_{l}^{(3)}a_{2,8} = B_{l}^{(3)} \\ A_{l}^{(1)}a_{8,0} + B_{l}^{(1)}a_{8,1} + A_{t}^{(1)}a_{8,2} + B_{t}^{(1)}a_{8,3} + A_{l}^{(4)}a_{8,10} + B_{l}^{(4)}a_{8,11} + Va_{8,16} = 0 \\ A_{l}^{(1)}a_{9,0} + B_{l}^{(1)}a_{9,1} + A_{t}^{(1)}a_{9,2} + B_{t}^{(1)}a_{9,3} + A_{t}^{(4)}a_{9,12} + B_{t}^{(2)}a_{9,13} + Va_{9,16} = 0 \\ A_{l}^{(2)}a_{10,4} + B_{l}^{(2)}a_{10,5} + A_{l}^{(3)}a_{10,8} = Zl \\ A_{l}^{(1)}a_{12,0} + B_{l}^{(1)}a_{12,1} + A_{t}^{(1)}a_{12,2} + B_{t}^{(1)}a_{12,3} + A_{l}^{(2)}a_{12,4} + B_{l}^{(2)}a_{12,5} + Va_{12,16} = 0 \\ A_{l}^{(1)}a_{13,0} + B_{l}^{(1)}a_{13,1} + A_{t}^{(1)}a_{13,2} + B_{t}^{(1)}a_{13,3} + A_{t}^{(2)}a_{13,6} + B_{t}^{(2)}a_{13,7} + Va_{13,16} = 0 \end{cases}$$

и добавится дополнительное уравнение

$$A_{l}^{(1)}a_{16,0} + A_{t}^{(1)}a_{16,2} + B_{l}^{(1)}a_{16,1} + B_{t}^{(1)}a_{16,3} - V'(j\omega C_{n} + Y) = 0$$

Значения коэффициентов $a_{i,j}$, Zl достаточно объёмны и приведены в [4]. Переходя к относительным амплитудам во всех волнах системы можно переписать эту систему, положив $B_l^{(3)}=1$.

Аналогично с учётом (8), (9) и наличия поперечной падающий волны для режима приёма, некоторые члены системы уравнений (7) приобретут следующий вид:

$$\begin{cases} A_t^{(2)}a_{3,6} + B_t^{(2)}a_{3,7} + A_t^{(3)}a_{3,9} = B_t^{(3)} \\ A_l^{(1)}a_{8,0} + B_l^{(1)}a_{8,1} + A_t^{(1)}a_{8,2} + B_t^{(1)}a_{8,3} + A_l^{(4)}a_{8,10} + B_l^{(4)}a_{8,11} + Va_{8,16} = 0 \\ A_l^{(1)}a_{9,0} + B_l^{(1)}a_{9,1} + A_t^{(1)}a_{9,2} + B_t^{(1)}a_{9,3} + A_t^{(4)}a_{9,12} + B_t^{(2)}a_{9,13} + Va_{9,16} = 0 \\ A_t^{(2)}a_{11,6} + B_t^{(2)}a_{11,7} + A_t^{(3)}a_{11,9} = Zt \\ A_l^{(1)}a_{12,0} + B_l^{(1)}a_{12,1} + A_t^{(1)}a_{12,2} + B_t^{(1)}a_{12,3} + A_l^{(2)}a_{12,4} + B_l^{(2)}a_{12,5} + Va_{12,16} = 0 \\ A_l^{(1)}a_{13,0} + B_l^{(1)}a_{13,1} + A_t^{(1)}a_{13,2} + B_t^{(1)}a_{13,3} + A_t^{(2)}a_{13,6} + B_t^{(2)}a_{13,7} + Va_{13,16} = 0 \\ A_t^{(2)}a_{15,12} + B_t^{(2)}a_{15,13} + B_t^{(5)}a_{15,15} = 0 \end{cases}$$

и добавится дополнительное уравнение

$$A_l^{(1)}a_{16.0} + A_t^{(1)}a_{16.2} + B_l^{(1)}a_{16.1} + B_t^{(1)}a_{16.3} - V'(j\omega C_n + Y) = 0$$

Значения коэффициентов $a_{i,j}$, Zt достаточно объёмны и приведены в [4]. Переходя к относительным амплитудам во всех волнах системы можно переписать эту систему, положив $B_i^{(3)}=1$.

Таким образом, в результате проведенных расчётов были получены системы уравнений для режима излучения и режима приёма демпфированных пластинчатых преобразователей повёрнутых срезов для возбуждения продольных и поперечных ультразвуковых колебаний. На основе данных определений можно проводить расчёты амплитудно-частотных характеристик датчика с созданием опытно-экспериментальной модели.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФИ № 16-05-00026-а.

Список литературы

- 4. Горбацевич Ф.Ф. Акустополярископия горных пород. Апатиты: Изд-во КНЦ РАН. 1995. 204 с.
- 5. Горбацевич Ф.Ф. Акустополярископия породообразующих минералов и кристаллических пород. Апатиты: Изд-во КНЦ РАН. 2002. 140 с.
- 6. Колесников А. М. Акустические измерения М.: Наука. 1985. 254 с.
- 7. Ковалевский М.В. Повышение информативности акустополяризационного метода определения упругих характеристик горных пород: Дис. к.т.н. СПб. 2002. 202 с.
- 8. Фадеев М.А. Элементарная обработка результатов эксперимента. Уч. пос. Нижний Новгород: Изд-во ННГУ. 2010. 122 с.
- 9. Ковалевский М.В. К вопросу о разработке методики определения скоростных соотношений упругих волн в задачах акустополярископии // Материалы XVIII молодеж. науч. конф. Актуальные проблемы геологии докембрия, геофизики и геоэкологии. СПб.: ЛЕМА. 2007. С.183-185.
- 10. Ковалевский М.В. Автоматизированный программно-аппаратный комплекс Acoustpol: Уч. пос. Апатиты. Изд-во К&М. 2009. 54 с.
- 11. Автоматизированный программно-аппаратный комплекс Acoustpol (АПАКА) для оценки качества материалов и объектов из природного камня // Контрольно-измерительные приборы и системы. М.: Изд-во МГТУ им. Н.Э. Баумана. 2012. № 4. С. 10.
- 12. Справочник (кадастр) физических свойств горных пород. М.: Недра. 1975. 279 с.
- 13. Беликов Б.П., Александров К.С., Рыжова Т.В. Упругие свойства породообразующих минералов и горных пород. М.: Наука. 1970. 276 с.
- 14. Яковлев Л.А. Распространение и отражение упругих волн в звукопроводах акустоэлектронных устройств / ЛЭТИ. Л. 1980.

МАТЕМАТИЧЕСКАЯ ОБРАБОТКА ЭКСПЕРИМЕНТОВ ПО ФТОРИДНОЙ ПЕРЕРАБОТКЕ НЕФЕЛИНОВ

Пушкин А.А., Римкевич В.С. ИГиП ДВО РАН, Благовещенск, igip@ascnet.ru

Аннотация

В статье описывается программа, использующая для расчётов по химической кинетике регрессионный и корреляционный анализ. Помимо определения кинетических характеристик гетерофазной реакции производится проверка статистических гипотез об адекватности используемых моделей регрессии при помощи критерия Фишера, о значимости коэффициентов регрессий с использованием t-критерия Стьюдента и проверка практической значимости моделей регрессии с использованием показателя согласованности Стьюдента. Расчёт проведён для реакции фторирования нефелинового концентрата Кольского полуострова гидродифторидом аммония.

Summary

The program using regression and correlation analysis for chemical kinetics computation is described in paper. The test of statistical hypotheses of adequateness of using regression models with using of Snedecor-Fisher criterion, about the significance of regression coefficients by t-criterion of Student and of practical significance of using regression models with using of Student cooperation index is used besides of kinetic characteristic computation of heterophase reaction. The calculation is performed for reaction of fluorination of nepheline concentrate of Kolskiy peninsula by ammonium hydrodifluoride.

Разработка фторидной и гидрофторидной технологий переработки минерального силикатного и алюмосиликатного сырья в Институте геологии и природопользования ДВО РАН требует проведения предварительного термодинамического расчёта и математической обработки результатов экспериментов [1, 2]. С этой целью на языке Visual Basic созданы программы Потенциалы и Кинетика, соответственно.

Данная работа посвящена компьютерной обработке экспериментов по фторированию нефелиновых концентратов гидродифторидом аммония, в ходе которых после улетучивания водяного пара и аммиака образовывался твёрдый остаток, состоящий из гексафторидов и фторидов. В экспериментах измерялась убыль массы твёрдого остатка в последовательные моменты времени от 0 до 6.5 часов при четырёх температурах 100, 150, 175 и 200°С. Изменения массы пересчитывались в степени превращения вещества и служили отправной точкой для расчётов.

Результатами обработки экспериментальных данных являются константы скоростей, порядки реакций и энергии активации, а также зоны протекания и механизмы реакций.

Исследуемая реакция фторирования нефелина гетерофазная, т.к. реагенты находились в твёрдых фазах, а продукты – в твёрдых и газообразных.

Гетерофазные реакции обычно протекают в две стадии: химическое взаимодействие частиц и диффузия реагентов к фронту реакции, а также продуктов реакции от него [3]. Если определяющим является процесс химического взаимодействия между частицами, то реакция протекает в кинетической зоне, если диффузия — то в диффузионной зоне [4].

С целью определения механизма реакции в работе проводилась проверка на лучшую аппроксимацию реального физико-химического процесса четырьмя различными видами физико-химических процессов, соответствующих четырём законам изменения степени превращения вещества: степенному $w_j = k \cdot \alpha_j^m$, Авраами $\alpha_j = 1 - \exp(-k \cdot t_j^m)$, экспоненциальному

 $\alpha_j = 1 - \exp(-k \cdot t_j)$ и Праута-Томпкинса $\alpha_j = \frac{\exp(-k \cdot t_j)}{1 + \exp(-k \cdot t_j)}$, где w_j – скорость реакции, α_j – степень превращения вещества в момент времени t_j , k – константа скорости. Степенной закон отражает закон действующих масс и описывает столкновения между частицами, он же должен описывать реакцию в кинетической зоне. Уравнение Авраами является топохимическим и описывает химическую реакцию в диффузионной зоне. Экспоненциальное уравнение описывает химические реакции первого порядка [5], и, в этом смысле, является частным случаем уравнения Авраами. Уравнение Праута-Томпкинса описывает цепные реакции с ветвлением [5, 6].

Аппроксимация экспериментальных данных испытуемыми температурными зависимостями оценивается по значениям средних погрешностей аппроксимаций. В первом приближении механизм реакции при данной температуре определяется тем законом изменения концентраций, при котором средняя погрешность аппроксимации при данной температуре минимальна. Поскольку погрешности аппроксимаций вычисляются для каждой температуры, постольку механизм реакций для каждой температуры может быть своим. В программе организован автоматический отбор данных (констант скоростей, энергий активации, зон и механизмов реакций) для каждой из исследуемых температур [7].

Методами исследования в работе являются регрессионный и корреляционный анализы. Для каждого из упомянутых выше четырёх процессов строятся уравнения регрессий. Полученные уравнения регрессий нелинейны. Вводя замены переменных, указанные в табл. 1, осуществляем переход к обобщённой линейной модели регрессии:

$$y_{ij} = b_{Ii} \cdot x_j + b_{0i}, \tag{1}$$

где индекс i означает вид опытной функции (1 — степенной закон, 2 — Авраами, 3 — экспоненциальный закона и 4 — уравнение Праута-Томпкинса), индекс j нумерует моменты отсчета времени t_j и соответствующие значения степеней превращения вещества α_j .

Степенной Экспоненциальный Праута-Томпкинса Авраами $ln\alpha$ lnt \boldsymbol{x} -t $\ln(-\ln(1-\alpha))$ $ln(1-\alpha)$ lnw yk 0 0 lnk lnk

Таблица 1. Замены переменных при переходе от нелинейных моделей к обобщенной линейной модели.

Далее, по формулам метода наименьших квадратов вычисляем значения угловых коэффициентов и свободных членов. Как видно из пояснений к формуле (1) в случае степенного закона и уравнения Авраами угловые коэффициенты равны соответствующим порядкам реакций, а свободные члены — логарифмам констант скоростей. В случае экспоненциального закона и уравнения Праута-Томпкинса угловые коэффициенты представляют собой константы скоростей, свободные члены отсутствуют.

Энергия активаций $(E_{_A})_i$ для i-ого закона в программе рассчитывается по уравнению Аррениуса для констант скоростей [5]:

$$\ln k_{ik} = -\frac{(E_A)_i}{R} \cdot \left(\frac{1}{T_k}\right), \tag{2}$$

где R — универсальная газовая постоянная, T_k — абсолютная температура в K, k — порядковый номер исследуемой температуры, k_{ik} — константа скорости для i-ого закона при k-ой температуре T_k . Энергия активации служит для определения зоны реакции при данной температуре: если E_A < 20 кДж/моль, то зона реакции диффузионная, а если E_A > 50 кДж/моль, то зона реакции кинетическая.

Средние погрешности аппроксимаций рассчитываются о формуле:

$$\left(\varepsilon_{cp}\right)_{ik} = \frac{1}{n} \sqrt{\sum_{j=1}^{n} \frac{\left(\alpha_{jk}(t_j) - f_{ik}(t_j)\right)^2}{\alpha_{jk}^2(t_j)}}, \tag{3}$$

где $(\varepsilon_{cp})_{ik}$ — средняя погрешность аппроксимации i-ой функции при k-ой температуре T_k , $\alpha_{jk}(t_j)$ — экспериментальные значения степеней превращения вещества при температуре T_k в моменты времени t_j , $f_{ik}(t_j)$ — расчётные значения пробной i-ой функции для наблюдаемого закона при температуре T_k в момент времени t_i и n— количество отсчётов времени.

Расчёт погрешностей констант скоростей и порядков реакций производится в соответствии с [8]. Погрешности констант скоростей имеют интервальные оценки и рассчитываются как погрешности коэффициентов регрессии:

$$\left[b_1^* - k_{p,\alpha} \cdot \frac{\sigma_y}{\sigma_x}; b_1^* + k_{p,\alpha} \cdot \frac{\sigma_y}{\sigma_x}\right],\tag{4}$$

$$\left[b_0^* - k_{p,\alpha} \cdot \frac{\sigma_y}{\sqrt{n}}; b_0^* + k_{p,\alpha} \cdot \frac{\sigma_y}{\sqrt{n}}\right],\tag{5}$$

где b_i^* – точечные оценки первого и второго коэффициентов регрессии, соответственно, $k_{p,a}$ – критические значения распределения Стьюдента для уровня значимости α и для числа степеней свободы p, σ_v – среднее квадратиче-

ское отклонение переменной y, вычисляемое по формуле $\sigma_y = \sqrt{\frac{\sum (y_i - \overline{y})^2}{p}}$, где y_i — значение выходной переменной y в момент времени t_i , а \overline{y} — её среднее значение, $\sigma_x = \sqrt{\sum (x_i - \overline{x})^2}$.

Помимо расчётов кинетических параметров и их погрешностей в работе проводится проверка ряда статистических гипотез регрессионного и корреляционного анализов: гипотезы об адекватности регрессионной модели по критерию Фишера-Снедекора, о значимости коэффициентов регрессии по t-критерию Стьюдента и о точности предсказываемого отклика с использованием коэффициента корреляции и показателя согласованности Стьюдента [9].

Для проверки гипотезы об адекватности регрессионной модели по Снедекору-Фишеру сравнивается остаточная дисперсия, вычисляемая по

формуле $\sigma_R^2 = \frac{\sum (y_i - y_i^*)^2}{p}$, где y_i^* – значение выходной переменной, рассчитанное по уравнению регрессии; с дисперсией воспроизводимости σ_y^2 .

Для сравнения рассеивания экспериментальных точек относительно линии регрессии с рассеиванием относительно математического ожидания используется F-отношение Снедекора-Фишера, которое, если $\sigma_R^{\ 2} > \sigma_y^{\ 2}$, вычисляется по формуле:

$$f^{*}(k_{1},k_{2}) = \frac{\sigma_{R}^{2}}{\sigma_{V}^{2}}, \tag{6}$$

где $k_{_{I}}$ — число степеней свободы для остаточной дисперсии, $k_{_{2}}$ — число степеней свободы для дисперсии воспроизводимости. Гипотеза об адекватности не отклоняется, если

$$f^*(k_1, k_2) < f_a(k_1, k_2), \tag{7}$$

где $f_{\alpha}(k_{_{I}},\!k_{_{2}})$ — значение в таблице F-распределения Фишера для уровня значимости α с числами степеней свободы $k_{_{I}}$ и $k_{_{2}}$, соответственно. Если $\sigma_{_{R}}^{\ 2} < \sigma_{_{y}}^{\ 2}$, то в формуле (6) в числителе должна быть $\sigma_{_{y}}^{\ 2}$ и число степеней сво-

для σ_{p}^{2} .

 ${\bf B}$ качестве нулевой гипотезы принимаем гипотезу ${\bf H_0}$ о том, что коэффициенты регрессии равны нулю при альтернативной гипотезе Н, о том, что коэффициенты не равны нулю. Проверка осуществляется с использованием t-критерия Стьюдента. Вычисляется статистика t^* по формуле:

$$t^* = \frac{b_i^*}{\sigma^*[b_i^*]},\tag{8}$$

 $t^* = \frac{b_i^*}{\sigma^*[b_i^*]}, \tag{8}$ где b_i^* — точечная оценка i-го коэффициента линейной регрессии, $\sigma^*[b_i^*]$ — точечная оценка среднеквадратического отклонения для i-го коэффициента линейной регрессии.

Расчётное значение статистики t^* сравнивается с табличным значением t_{α} с заданным уровнем значимости α . Если

$$t^* < t_a, \tag{9}$$

то нулевая гипотеза не отклоняется.

Практическая значимость полученной регрессионной модели проверяется с использованием коэффициента корреляции

$$r_{xy} = \frac{\sum_{i=1}^{n} x_i y_i - \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} x_i \sum_{i=1}^{n} y_i}{\sqrt{\sum_{i=1}^{n} x_i^2 - \frac{1}{n} \left(\sum_{i=1}^{n} x_i\right)^2} \sqrt{\sum_{i=1}^{n} y_i^2 - \frac{1}{n} \left(\sum_{i=1}^{n} y_i\right)^2}}$$
(10)

и показателя согласованности Стьюдента

$$t_r = r_{xy} \sqrt{\frac{N-2}{1-r_{xy}^2}}, {11}$$

где x_i и y_i – координаты экспериментальных точек.

Если коэффициент корреляции больше 0,7, то это указывает на тесную связь между входными и выходными переменными. Аналогично указывает на тесную связь и математическое неравенство

$$t_r > t_a. (12)$$

На основании изложенной выше теории первоначально создавался алгоритм, реализовывавшийся на основе Microsoft Access, и, впоследствии, создавалась программа Кинетика на языке Visual Basic, которая позволяла, используя методы регрессионного и корреляционного анализа, рассчитывать кинетические характеристики исследуемых реакций: константы скоростей, порядки реакций, энергии активации, зоны и механизмы реакций.

На рис. 1 в качестве примера показана вкладка Зона реакции программы Кинетика с результатами расчётов по кинетике реакции фторирования нефелинового концентрата гидродифторидом аммония. Из рисунка видно, что

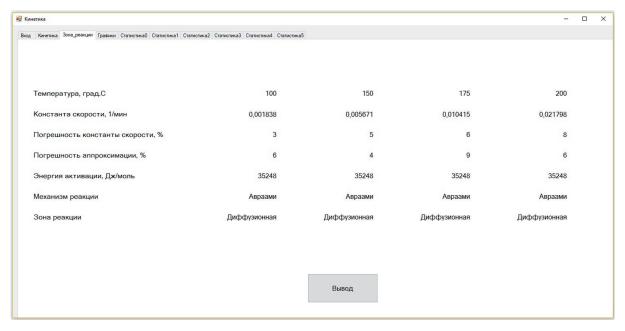


Рис. 1. Вкладка Зона реакции программы Кинетика с результатами расчёта для реакции фторирования нефелинового концентрата гидродифторидом аммония.

данная твёрдофазная реакция при всех температурах лучше всего описывается уравнением Авраами (даёт наименьшую погрешность аппроксимации). Поскольку энергия активации равна $35.2~\mathrm{кДж/моль}$, что больше $20\mathrm{кДж/моль}$, но меньше $50\mathrm{кДж/моль}$, то зона реакции переходная. Константы скорости возрастают от $0.001838~\mathrm{мин}^{-1}$ до $0.021798~\mathrm{мин}^{-1}$.

Порядки реакции для Авраами принимают значения 0.71; 0.9; 0.94; 1.1 (рис. 2). Поскольку порядки реакций дробные, приравняем их ближайшему целому числу. В данном случае это 1. Уравнение Авраами при порядке, равном 1, очевидно, переходит в экспоненциальный закон.

		400	450	475	000	0.4		
	Температура, град. С	100	150	175	200	ЭА, кДж/моль	Погрешность ЭА, %	
	Константа скорости, мин-1	0,00105	0,003549	0,00614	0,007625			
Степенной	Погрешность КС, %	1	1	1	1	30038	185	
	Порядок реакции	-0,46	-0,24	-0,14	-0,09	00000	103	
	Погрешность ПР, %	127	139	312	455			
	Погрешность аппроксимации, %	14	12	22	22			
	Константа скорости, мин-1	0,001838	0,005671	0,010415	0,021798			
Авраами	Погрешность КС, %	3	5	6	8			
17	Порядок реакции	0,71	0,9	0,94	1,1	35248	185	
	Погрешность ПР, %	116	116	118	116			
	Погрешность аппроксимации, %	6	4	9	6			
	Константа скорости, мин-1	0,001619	0,004835	0,005676	0,016173			
Экспоненциальный	Погрешность КС, %	111	108	110	102		191	
-	Свободный член	-0,07	-0,13	-0,45	-0,32	30841		
	Погрешность СЧ, %	247	376	131	490	30041		
	Погрешность аппроксимации, %	17	10	16	10			
	Константа скорости, мин-1	0,011272	0,015467	0,014825	0,025618			
Праута-Томпкинса	Погрешность КС, %	127	125	143	117			
	Свободный член	-3,02	-2,44	-1,59	-1,6			
	Погрешность СЧ, %	45	75	127	178	10126	211	
	Погрешность аппроксимации, %	714	707	705	709	10120	211	
				Вывод				

Рис. 2. Вкладка Кинетика программы Кинетика с результатами расчёта для реакции фторирования нефелинового концентрата гидродифторидом аммония.

Результаты проверки, осуществляемой в программе, отражены в табл. 2. Проверка статистических гипотез в программе осуществляется для всех законов: её результаты размещены на вкладках СтатистикаХ. Мы рассмотрим, два из них: Авраами и экспоненциальный, поскольку они дают наилучшее приближение при всех температурах (см. табл. 2).

Таблица 2. Статистическая проверка гипотез об адекватности моделей регрессии и о значимости коэффициентов регрессий по Снедекору-Фишеру и Стьюденту, соответственно.

Закон	Авраами			Экспоненциальный				
Температура, °С	100	150	175	200	100	150	175	200
Средняя погрешность аппроксимации	6	4	9	6	17	10	16	10
Коэффициент Фишера	5.05	5.05	5.05	5.05	4.28	4.28	4.28	4.28
Статистика Фишера	38.59	68.76	20.65	51.37	5.38	6.69	5.73	21.36
Коэффициент Стьюдента	2.57	2.57	2.57	2.57	2.45	2.45	2.45	2.45
Статистика для своб. члена	1.23	0.6	1.35	2.02				
Статистика для угл. коэф.	2.21	2.22	2.18	2.21	2.21	2.26	2.23	2.39
Коэффициент корреляции	0.99	0.99	0.98	0.99	0.9	0.92	0.91	0.98
Показатель согласованности Стьюдента	13.71	18.41	9.91	15.87	4.68	5.33	4.86	10.09

Статистики Фишера для обоих законов при всех температурах больше, чем коэффициенты Фишера, поэтому гипотеза об адекватности регрессионных моделей в обоих случаях отвергается, правда, статистики в случае экспоненциального закона ближе к коэффициентам Фишера.

Коэффициенты корреляции между входными и выходными данными для обоих законов больше 0.7. Показатели согласованности также превосходят критические значения распределения Стьюдента, следовательно, гипотеза об отсутствии тесной связи между входными и выходными данными отвергается, и функции отклика для обоих законов могут использоваться для предсказания результата.

Проверка гипотезы о значимости коэффициентов регрессии при помощи t-критерия Стьюдента показывает, что как статистики для свободных членов, так и для угловых коэффициентов Авраами меньше соответствующих коэффициентов Стьюдента, а, следовательно, являются статистически незначимыми. Однако, заметим, что статистики для углового коэффициента близки к коэффициентам Стьюдента, а, следовательно, мы можем допустить их значимость, т.е. считать, что они не равны нулю. Вспомнив, что угловые коэффициенты в случае Авраами равны порядкам реакции, будем считать порядки реакции равными 1. В случае с экспоненциальным законом статистики для углового коэффициента также близки к коэффициентам Стьюдента, будем считать угловые коэффициенты значимыми также и для экспоненциального закона. Поскольку угловые коэффициенты для экспоненциально-

го закона равны константам скоростей, будем иметь константы скоростей для нашей реакции.

Однако, имея ввиду, что лучшую аппроксимацию дает уравнение Авраами, возможно, следует взять средние значения констант скоростей между двумя законами с погрешностями, равными суммам погрешностей. По этим усреднённым константам скоростей рассчитаем энергии активации. Поместим эти данные в табл. 3.

Заметим, что энергия активации реакции получается равной 33.6 кДж/моль, т.е. реакция проходит в переходной зоне, как и следовало ожидать. Следовательно, химическая реакция фторирования нефелинов гидродифторидом аммония является реакцией первого порядка, следовательно, сопротивление реакции и диффузии приблизительно одинаковы и оказывают одинаковое влияние на ход реакции. Константы скоростей реакции при всех температурах приведены в табл. 3.

Реакция взаимодействия двух веществ, нефелина и гидродифторида аммония, имеет первый порядок. Такое может быть, когда реакция протекает при избытке одного из веществ. Возможно также протекание реакции в несколько стадий. В первую стадию происходит быстрая реакция взаимодействия этих двух реагентов с образованием активационного комплекса. Распад же комплекса протекает медленно, возможно, не за одну стадию. Ход реакции, по-видимому, определяется стадией, в которой происходит разложение активационного комплекса.

Таблица 3. Кинетические характеристики реакции фторирования нефелинов гидродифторидом аммония.

	Температура, ° С	100	150	175	200		
	Константы скоростей, мин ⁻¹	0.001838± 0.0001	0.005671± 0.0003	0.010415± 0.0006	0.021798± 0.002		
Авраами	Порядки реакций	0.71	0.9	0.94	1.1		
	Энергия активации, кДж/моль	35.2					
Экспоненциальный	Константы скоростей, мин-1	0.001619±	0.004835±	0.005676±	0.016173±		
		0.002	0.005	0.006	0.02		
	Порядки реакций	1					
	Энергия активации, кДж/моль	30.8					
	Константы	0.0017±	0.0053±	0.0080±	0.019±		
Фторирование нефелинов ГДФА	скоростей, мин-1	0.0021	0.0053	0.0066	0.022		
	Порядки реакций	1					
	Энергия активации, кДж/моль	33.6					

Список литературы

- 1. Пушкин А.А. Римкевич В.С. Автоматизация расчётов изменений термодинамических потенциалов в ходе химических реакций // Межд. науч.-исслед. журнал. 2015. № 6 (37). Ч. 1. С. 108-119.
- 2. Пушкин А.А., Римкевич В.С. Программа для расчёта кинетики гетерофазных реакций на языке Visual Basic Community 2015 // Фундаментальные исследования. 2017. № 10. Ч. 3. С. 518-523.
- 3. Бочкарев В.В. Теория химико-технологических процессов органического синтеза. Гетерофазные и гетерогенно-каталитические реакции. Уч. пос. Томск: Изд-во ТПУ. 2005. 118 с.
- 4. Евдокимов А.Н. Теория химико-технологических процессов органического синтеза. Ч. 1. Гетерофазные реакции. Уч. пос. С-Пб. 2011. 64 с.
- 5. Еремин Е.Н. Основы химической кинетики: Уч. пос. М.: Высш. шк. 1976. 375 с.
- 6. Стромберг А.Г., Семченко Д.П. Физическая химия. М.: Высшая школа. 1999. 528 с.
- 7. Пушкин А.А., Римкевич В.С. Установление зон гетерофазных реакций // Международный научно-исследовательский журнал. 2017. № 03 (57). Ч. 3. С. 35-38.
- 8. Колемаев В.А., Староверов С.В., Турундаевский В.Б. Теория вероятностей и математическая статистика. Уч. пос. М.: Высшая школа. 1991. 400 с.
- 9. Балдин К.В., Башлыков В.Н., Рукосуев А.В. Теория вероятностей и математическая статистика. Учебник. М.: Изд-во торг. корпорация «Дашков и К°». 2014. 473 с.

ИССЛЕДОВАНИЕ ТЕКСТУРНЫХ И МОРФОЛОГИЧЕСКИХ ОСОБЕННОСТЕЙ МУЛЬТИФРАКТАЛЬНОЙ ПОВЕРХНОСТИ МИНЕРАЛОВ С ПРИМЕНЕНИЕМ БИНАРНОГО ПРЕОБРАЗОВАНИЯ

Русанова И.А.

Казанский федеральный университет, Казань, irusanova@yandex.ru

Аннотация

Исследованы возможности применения фрактального анализа и бинарного преобразования для выявления нетипичных областей на цифровых изображениях полевого шпата (трещины, изломы, спайки и структурные изменения). Выделение текстурных неоднородностей и морфологических особенностей проводится при помощи поля фрактальной размерности D, поля коэффициента самоподобия K и поля меры SRGB (площади треугольника в координатной системе свойств). Проведённое сегментирование цифровых изображений минералов позволяет оценить области с различными диапазонами значений фрактальных мер и описать сложные мультифрактальные поверхности минералов с учётом спектра фрактальных размерностей, что может быть полезно для прогнозирования измельчения и дробления руд.

Summary

The possibilities of using fractal analysis and binary transformation for detecting atypical areas on digital images of feldspar (cracks, kinks, adhesions and structural changes) are investigated. The selection of texture heterogeneities and morphological features is carried out using the field of fractal dimension D, the self-similarity coefficient field K, and the measure field SRGB (triangle areas in the coordinate system of properties). The proposed segmentation of digital images of minerals allows one to eliminate the regions with different ranges of fractal measure values and to describe complex multifractal surfaces of minerals taking into account the spectrum of fractal dimensions. This fact which can be used to predict the results of the ores crushing.

Введение

На сегодняшний день при обработке цифровых изображений большое затруднение вызывает выделение хаотически расположенных небольших объектов и их контуров. Существует множество алгоритмов цифровой обработки изображений. Исследования в данной области по-прежнему актуальны. Разрабатываются новые более точные и эффективные методы обработки изображений, в том числе на основе фрактального анализа, позволяющего исследовать изображения, преобразованные в неоднородную поверхность, например, с показателем яркости по высоте [9, 13], либо цветового кода [8, 11]. В качестве количественного и объективного критерия описания «шероховатых» нерегулярных текстур может служить фрактальная размерность. Также возможно использование показателя Херста для определения того, является ли поверхностная структура объекта упорядоченной и имеется ли определённая закономерность распределения случайной величины, даже если ряд негауссовский (не является нормально распределённым) [5, 7].

Количественные оценки типоморфных особенностей строения минеральных агрегатов (все элементы текстуры и структуры) позволяют изучать условия их образования и дальнейшего преобразования. На вариативность структурирования поверхности минеральных агрегатов оказывает влияние длительность формирования системы каждого уровня (ионы, зёрна, кристаллы, агрегаты) и срастание границ кристаллов. Степень упорядоченности возникающей системы определяет меру связанности энергии межзёренных границ, от которой зависит прочность минералов. Упорядоченность в зернистой структуре минералов определяется несколькими параметрами, такими как: гранулометрический состав (близкие размеры зёрен), морфология преобладающих кластеров и сбалансированность связанной внутренней энергии системы. Принято считать, что кристаллическая решётка минералов почти идеально связанна и сбалансирована энергетически, несмотря на то, что в реальной решётке, в отличие от её модели, всегда присутствуют дислокации, дефекты и т.д. Наибольшей энергоёмкостью обладают шероховатые грани и извилистые границы зёрен. Степень шероховатости поверхности границы кластера определяется кинетическими параметрами роста зёрен и зависит от степени связанности структуры граничной области, её толщины, скорости релаксации решётки зерна в направлении границы, т.е. от энергии границы. Поверхностная энергия зависит в основном от периметра и шероховатости кластера [1, 4]. Фрактальная размерность неоднородной поверхности границы минерального кластера демонстрирует чувствительность к количественному описанию сложности структурно-текстурных границ, а также изломов, спайности, твердости и хрупкости поверхности твёрдых тел. Большое количество таких границ приводит к усилению неравномерности измельчения минералов [2, 6, 10].

Проводимое в данной работе исследование может быть полезно для прогнозирования измельчения и дробления руд, раскрытия в процессе дробления минеральных сростков жильных и рудных минералов.

Методы и материалы

В качестве объектов исследований были взяты цифровые изображения полевого шпата, одного из самых разнообразных, породообразующих минералов магматических, осадочных и метаморфических пород, характеризующихся совершенной спайностью и твёрдостью (рис. 1) [19, 20]. Различные параметры, описывающие форму минеральных зёрен, не всегда дают полную характеристику. Фрактальность не всегда проявляет себя отчётливо, она прячется в хаосе случайной статистики нерегулярных систем. Общей характеристикой таких объектов является пространственная неоднородность с инвариантностью основных геометрических особенностей при изменении масштаба. Количественной мерой распределения неоднородной структуры в пространстве является фрактальная размерность *D*. Исследование таких систем очень интересно, потому что позволяет изучить не только их структуру, но и связь между нею, процессами образования и их свойствами. В основу

обработки параметров положен алгоритм фрактально-множественного описания экспериментальных данных на основе подхода Мандельброта [13]. Рассмотрим частично упорядоченное конечное множество $A(N^2)$, где N^2 — число элементов a_{ij} в этом множестве (i,j=1,2,..N). Будем считать, что элементы множества обладают некоторыми свойствами $H_{\xi}(a)$ (размер, цвет, объём, форма и т.д.), присущими только элементам данного множества. Если общих свойств несколько (ξ >1), то описание множества должно быть произведено с помощью нескольких фрактальных размерностей.

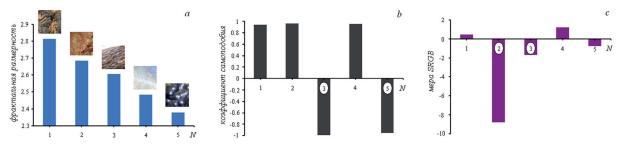


Рис. 1. Гистограммы фрактальной размерности (а), коэффициента самоподобия (b) и меры SRGB (c) для всей поверхности изображения исследуемых образцов минералов (полевого шпата): 1 — колумбит (Ильменские горы Челябинская область), 2 — распространённый вид полевого шпата, 3 — цветные камни Трансбайкальского региона, 4 — «лунный» камень, 5 — гематит (Германия, Саксония).

Определим фрактальную размерность D_{ξ} множества $A(N^2)$ по свойству $H_{\xi}(a)$ угловым коэффициентом зависимости $\log \tilde{A}_{\xi}(n^2)$ от $\log S_{\xi}(n^2)$, где $\tilde{A}_{\xi}(n^2)$ – число несоприкасающихся поверхностей кубов, покрывающих подмножество, $S_{\xi}(n^2)$ – площадь, занимаемая элементами подмножества.

$$D_{\xi} = \sum_{\gamma} \frac{\log \Gamma_{\xi}(n_{\gamma+1}^2) - \log \Gamma_{\xi}(n_{\gamma}^2)}{\left|\log S_{\xi}(n_{\gamma+1}^2) - \left|\log S_{\xi}(n_{\gamma}^2)\right|} \left(\frac{\alpha_{\gamma+1} - \alpha_{\gamma}}{N-1}\right)$$

Коэффициент самоподобия, позволяющий выявлять минимальные отличия самоподобной структуры от идеального фрактала, определим как $K_{\epsilon} = D_{\epsilon}^{\ 0}/D_{\epsilon}$, где $D_{\epsilon}^{\ 0}$ –фрактальная размерность самоподобного множества

$$D_{\xi}^{0} = \frac{\log \widetilde{A}_{\xi}(N^{2}) - \log \widetilde{A}_{\xi}(1)}{\left|\log S_{\xi}(N^{2}) - \left|\log S_{\xi}(1)\right|}$$

При исследовании фрактальных свойств изображения в качестве свойств $H_{\xi}(a)$ можно выбрать три цвета: красный (ξ =R), зелёный (ξ =G) и синий (ξ =B). Таким образом, описание структуры изображения в данном случае осуществляется тремя фрактальными размерностями $D_{\rm R}$, $D_{\rm G}$ и $D_{\rm B}$, с помощью которых можно построить некоторую величину SRGB (площадь треугольника в координатной системе свойств), обладающую высокой чувствительностью к изменению структуры изображения [16, 17]:

$$SRGB=0.5M\cdot[-2(D_{R}+D_{B})+(D_{B}+D_{G})+(D_{G}+D_{R})],$$

где M — масштабный коэффициент. Сложные фракталы, наиболее часто встречающиеся в природе, характеризуются более чем одним показателем скейлинга. Мультифрактальный анализ неоднородного объекта позволяет описать форму минерального кластера таким образом, чтобы каждая из его частей обладала свойствами самоподобия. Для описания мультифракталов необходимо учитывать спектр фрактальных размерностей, так как такие фракталы наряду с геометрическими особенностями обладают определёнными статистическими свойствами [5, 8, 11].

Результаты

Фрагменты цифровых изображений исследуемых образцов полевого шпата не подвергались предварительной операции улучшения и имеют размеры a=b=273 пикселя. В соответствии с цветовым кодом рабочего пикселя поверхности объекта, в программе производился перевод цветового кода пикселя в высоту точки, с образованием трёхмерного объекта, обладающего неоднородной шероховатой поверхностью. Полученные объекты были исследованы на фрактальность, согласно идеям фрактальной геометрии Мандельброта. Результаты обработки всей поверхности изображения для фрактальной размерности (a), коэффициента самоподобия (b) и меры SRGB(c) представлены на рис. 1. Показано, что наибольшей величиной фрактальной размерности обладает изрезанная, шероховатая поверхность колумбита (рис. $1 \ a.1$), а наименьшим значением – гладкая поверхность гематита (рис. 1 а.5). Нетипичные (аномальные) изменения в структуре поверхности минералов, характеризуемые коэффициентом самоподобия (K < 1)), присутствуют в образцах цветного камня и гематита (рис. 1 b.3,5). При анализе меры SRGB к последней группе по текстурным признакам добавляется образец 2 (рис. 1 с.2,3,5).

Дальнейшая обработка изображений минералов проводилось сканированием «окном» размером $a \times b$ пикселей с шагом смещения s (при s=1 «окно») является «скользящим», при при s>1 «скачущим»). На каждом шаге определялись численные значения фрактальной размерности в «окне» (сегменте), с формированием матрицы и поля фрактальных размерностей (ПФР) (рис. 2) [3,15]. Аналогично были получены поля коэффициента самоподобия K и меры SRGB. Выявлено, что в центре области, окружённой сегментами с D<2.5, находится сегмент с большей по величине фрактальной размерностью, что возможно связано с изменением степени упорядоченности системы вследствие различной степени связанности структуры граничных областей, ввиду сбалансированности энергии в направлении той или иной границы минерального агрегата (рис. 2 *D.I,II*). Применим к полученным полям фрактальных мер бинарное преобразование, приводящее к значительному уменьшению большого количества информации, с которой приходится работать, при помощи перевода цветного (или в градиентах серого) изображения S(x,y) в чёрно-белое относительно величины некоторого «порога»

 S_{m} , с присвоением текущему сегменту изображения значения «1» («чёрный» цвет) либо «0» («белый» цвет или прозрачное «окно» при наложении бинарной маски на изображение), если исходное значение больше (меньше) порогового [12,18]. Примем за «пороговое» значение фрактальной размерности величину показателя Херста Н, для коэффициента самоподобия и меры SRGB численное значение «0». Параметры самоподобия показателя Херста Н как и фрактальной размерности представляют собой меры устойчивости статистического явления или меры длительности долгосрочной зависимости стохастического процесса. Бинарное преобразование мультифрактальных поверхностей минералов позволяет выделить ранее визуально скрытые особенности структурно-текстурных границ минеральных кластеров, присущих каждому виду полевого шпата (рис. 2). Показано, что рядом с сегментом, характеризуемым величиной $D \approx 3$, с высокой вероятностью присутствуют сегменты с 2.5 < D < 2.6, близкие к значению D = 2.5 (H = 0.5), что является признаком близости к случайной, не фрактальной зависимости. Чем ближе значение показателя H к 1, тем выше степень устойчивости долгосрочной зависимости стохастического процесса. При $0 \le H \le 0.5$ зависимость является

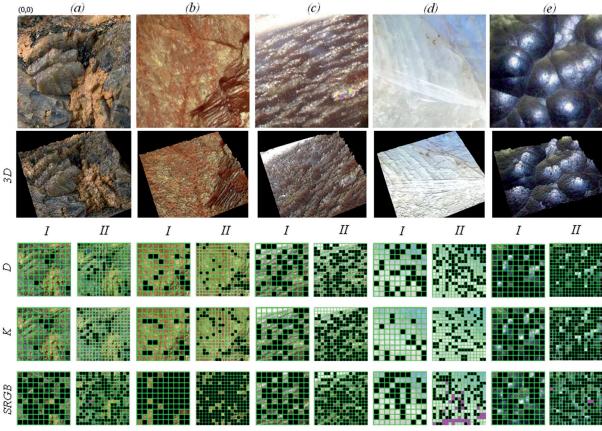


Рис. 2. Фрагменты исследуемых цифровых изображений полевого шпата (a-e), соответствующие им 3D отображения и бинарное преобразование полей фрактальных мер (сканирование «окном» 20×20 пикселей с s=7 (I) и «окном» 16×16 пикселей с s=1 (II)), где «пороговые» значения бинарного преобразования: для поля фрактальной размерности $D 0 \le H \le 0.5 - (0)$, $0.5 < H \le 1 - (1)$ (D > 3 - (0)) и черы SRGB > 0 - (0), SRGB < 0 - (1), SRGB = 0 - (0), SRGB < 0 - (1), SRGB = 0 - (0), SRGB < 0 - (1), SRGB = 0 - (0)

устойчивой, более изменчивой, чем случайный ряд [5, 7]. Бинарное преобразование поля коэффициента самоподобия увеличивает информативность фрактального анализа, визуально выделяя малейшие нетипичные (аномальные) изменения в структуре поверхности минералов, что возможно связано со степенью связанности структуры граничных областей минеральных кластеров и степенью шероховатости (рис. 2 K).

Бинарное преобразование поля меры SRGB выявляет высокую чувствительность даже к небольшим изменениям в цветовой гамме изображения (рис. 2 SRGB). Уменьшение линейного размера сканирующего «окна» приводит к большей детализации в процессе бинарного преобразования и к более сглаженному частотному распределению гистограмм фрактальной размерности. Дальнейшее уменьшение линейного размера «окна» увеличивает количество сегментов с D>3 и областей с SRGB=0 (D(R)=D(G)=D(B)), что говорит об исчезновении свойств самоподобия в малых геометрических областях.

При исследовании морфологических новообразований не всегда возможно непосредственное выявление природы скрытых механизмов, оказывающих влияние на их развитие. Качественной характеристикой текстурных неоднородностей и морфологических особенностей мультифрактальной поверхности минералов является её структурная взаимосвязанность. Изменение взаимосвязей зачастую позволяет выявить скрытые особенности группировки параметров, в том числе и их взаимные корреляты. Анализ изменения корреляционных связей параметров, их силы и количества, а также выявления присутствия скрытых в их структуре самоподобных свойств рассмотрены в качестве критерия оценки типоморфных особенностей строения минеральных агрегатов. Оценка взаимозависимости исследуемых па-

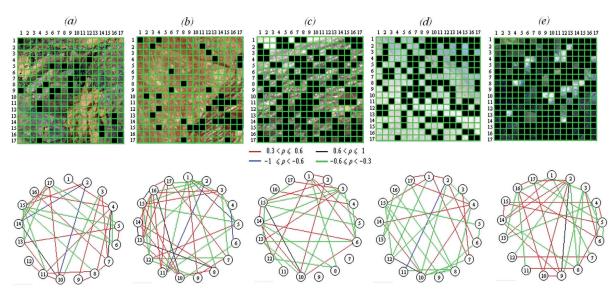


Рис. 3. Бинарное преобразование полей фрактальных размерностей (ПФР) исследуемых цифровых изображений полевого шпата (a-e) (сканирование изображений минералов «окном» 16×16 пикселей, с s=1) и соответствующие им корреляционные плеяды исследуемых параметров (вертикальных «слоёв» в структуре поверхности ПФР, где ρ – коэффициент корреляции).

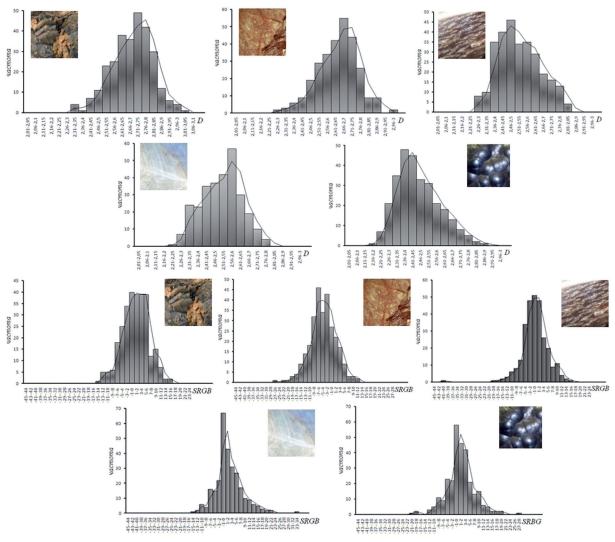


Рис. 4. Гистограммы частотного распределения фрактальной размерности D и меры SRGB (сканирование изображений полевого шпата «окном» 16×16 пикселей, с шагом смещения s=1).

раметров ПФР проводилась с помощью корреляционного анализа. Сильная корреляционная связь параметров р соответствует значению в пределах от 1 до 0.6, средняя – от 0.6 до 0.3 и слабая – от 0.3 до 0. В качестве параметров рассматриваются образуемые сканирующим «окном» вертикальные «слои» (1-17) в структуре ПФР поверхности минералов (рис. 3). Присутствие отрицательной корреляции между двумя параметрами указывает на некоторую обратно-пропорциональную связь, позволяющую предположить существование определённого антагонизма между ними [14].

Для различных видов полевого шпата наблюдается выраженное смещение максимумов распределения частоты фрактальной размерности D и различный диапазон интервалов величин меры SRGB, с присутствием характерного набора распределения принимаемых значений для разных видов минералов, что может являться паттерном в сравнительной характеристике морфологических и текстурных изменений (трещины, извилистость, поры) (рис. 4). При увеличении размера сканирующего «окна» и выборе «скачущего» режима (s>1) наблюдается потеря детализации визуально выделяемых

особенностей неоднородной поверхности минералов, с сохранением характерного спектра распределения фрактальной размерности, с потерей сглаженности частотного распределения.

Заключение

Показано, что поверхностная структура полевого шпата с неоднородными включениями (микротрещины, изломы и т.п.) имеет выраженные фрактальные свойства. Выявлена чувствительность бинарного преобразования полей фрактальных мер к количественному описанию типоморфных особенностей структурно-текстурных границ мультифрактальных минеральных агрегатов, позволяя проводить количественное описание, идентифицирование и прогнозирование усиления неравномерности в процессе измельчения и дробления минералов.

Список литературы

- 1. Бродская Р.Л., Марин Ю.Б. Факторы агрегации и структурирования минерального вещества и генетическая интерпретация строения минеральных агрегатов. 2011. Вестник. 5. С. 2-6.
- 2. Горяинов П.М., Иванюк Г.Ю. Фрактальные свойства месторождений железистых кварцитов ресурс новых знаний о серед их зарождения. Синергетические прицнипы геоогического анализа. Воронеж: Вестник ВГУ. 2012. № 2. С. 23-31.
- 3. Грушенко М.В., Пащенко Р.Э., Петрушенко Н.Н., Шаповалов А.В. Обработка аэрокосмических изображений с использованием поля фрактальных размерностей. Системы обработки информации. 1. 2006. С. 35-42.
- 4. Дымков Ю.М. Минеральные индивиды и минеральные агрегаты / Генезис минеральных индивидов и агрегатов. М: Наука. 1966.
- 5. Завгородний А.Б. Современные методы исследования структурноинформационных свойств естественных систем // Электроника и связь. № 1. 2010. С. 60-65.
- 6. Изоитко В.М., Бродская Р.Л., Баданина И.С., Петров С.В. Исследование типоморфных и технологических свойств шеелита месторождения Катлар с помощью стереометрического анализа // Обогащение руд. № 3 (1). 1995. С. 27-32.
- 7. Кириченко Л.О. Сравнительный анализ статистических свойств оценок показателя Херства // Вестник Нац. техн. ун-та ХПИ. № 21. 2010. С. 88-95.
- 8. Кульков С.Н., Томаш Ян, Буяков С.П. Фрактальная размерность поверхностей пористых керамических материалов // Письма в ЖТФ. 2006. Т. 32. Вып. 2. С. 51-55.
- 9. Павлов А.Н., Анищенко В.С. Мультифрактальный анализ сложных систем. Успехи физических наук. 2007. № 177 (8). С. 859-876.
- 10. Петров Д. Записки Горного института. 2003. № 1. С. 28.
- 11. Потапов А.А., Булавкин В.В., Герман В.А., Вячеславова О.Ф. Исследование микрорельефа обработанных поверхностей с помощью методов фрактальных сигнатур // Журнал технической физики. 2005. Т. 75. № 5. С. 28-45.

- 12. Сальников И.И. Информационная оценка изображений в системах технического зрения // Искусственный интеллект. 2011. № 3. С. 261-270.
- 13. Федер Е. Фракталы. М: Мир. 1991. 254 с.
- 14. Харман Г. Современный факторный анализ. М.: Статистика. 1972. 484 с.
- 15. Яцевич С.Е., Иванов В.К., Пащенко Р.Э. Обработка радиолокационных изображений сельскохозяйственных полей с помощью фрактального анализа // Современные проблемы дистанционного зондирования Земли из космоса. 2008. Вып. 5. № 1. С. 194-200.
- 16. Rusanova I.A. Study of Fractal Structure of Images of Nail Bed and Periungual Epithelium // Biomedical Engineering. 2013. V. 47. N 2. P. 83-85.
- 17. Tayurskii D.A., Rusanova I.A. The Fractal Analysis of the Images and Signals in Medical Diagnostics / Fractal Analysis, Applications in Health Sciences and Social Sciences. 2017. Ch. 3. P. 57-86.
- 18. Xianyu Jin, Bei Li, Ye Tian, *et.al*. Study on Fractal Characteristics of Cracks and Pore Structure of Concrete based on Digital Image Technology // Research Journal of Applied Sciences, Engineering and Technology. 2013. V. 5. N. 11. P. 3165-3171.
- 19. Полевой шпат и другие минералы: [сайт] URL: http://fb.ru/article/67606/polevoy-shpat-i-drugie-mineralyi
- 20. Фотогаллерея минералов [сайт] URL: http://klopotow.narod.ru/mineral/gallery/index.htm

СХЕМЫ ИЗОБАЗ ПОДНЯТИЯ ЗЕМНОЙ ПОВЕРХНОСТИ СЕВЕРО-ВОСТОКА ФЕННОСКАНДИИ ЗА ПОСЛЕДНИЕ 10000 ЛЕТ

Толстобров Д.С., Колька В.В.

Геологический институт КНЦ РАН, Aпатиты, tolstobrov@geoksc.apatity.ru

Аннотация

На основании данных об амплитуде поднятия, полученных при изучении донных осадков изолированных котловин Кольского региона и соседних территорий, были построены новые схемы изобаз. Оценивалось поднятие за последние 10000 календарных лет. Для построения схем изобаз поднятия были использованы интерполяционные («триангуляция с линейной интерполяцией», «метод естественной окрестности», «метод локальных полиномов») и геостатистические («Кригинг») методы. Сопоставление новых схем с ранее известной показало, что при данном количестве данных наиболее приемлемым методом моделирования схем изобаз поднятия является «Кригинг».

Summary

Based on data of the uplift, obtained from the study of bottom sediments of isolated basins in Kola region and adjacent territories, new schemes of uplift isobases were constructed. Estimated uplift over the last 10,000 calendar years. Interpolation («Triangulation with Linear Interpolation», «Natural Neighbor», «Local Polinomial») and geostatistical («Kriging») methods were used to construct the scheme of uplift isobases. A comparison of the constructed schemes with the known one showed that «Kriging» is the most appropriate method for modeling with a given amount of data.

Введение

После деградации последнего оледенения в конце плейстоцена территория северо-востока Фенноскандии испытывает поднятие, затухающее во времени. Ранее для определения поднятия изучались древние береговые образования (береговые валы, террасы и др.). При этом численный возраст береговых форм рельефа получить было сложно, а порой и невозможно. Поэтому корреляция одновозрастных береговых форм в разных частях побережья была затруднительной, что привело к различным интерпретациям амплитуды и характера поднятия, а следовательно, и к появлению различающихся между собой схем изобаз позднеледникового и голоценового поднятия северо-востока Фенноскандии. С конца XX века на территории Кольского региона для определения поднятия земной поверхности стал применяться метод изолированных бассейнов [1, 2, 9, 12 и др.]. Данный метод позволяет для каждого небольшого района исследования наиболее точно определить амплитуду и характер поднятия земной поверхности и, соответственно, перемещение береговой линии моря. На основании этих данных была построена схема изобаз поднятия земной поверхности северо-восточной части Фенноскандии (рис. 1 а), свидетельствующая о куполообразном поднятии территории. В данной работе на основании уже известных и новых данных, полученных методом изолированных бассейнов, выполнено компьютерное

моделирование различными методами схем изобаз поднятия земной поверхности северо-восточной части Фенноскандии за последние 10000 лет и проведено их сопоставление со схемой, представленной на рис. 1 *а*.

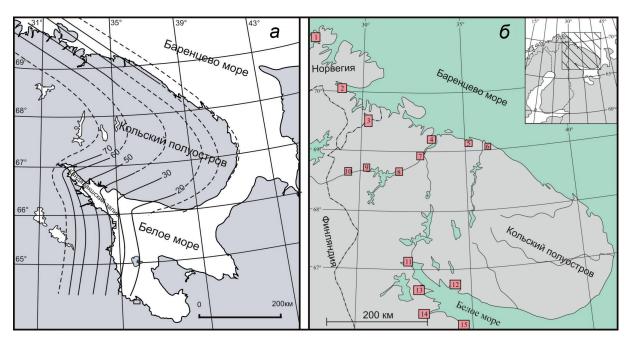


Рис. 1. Схема изобаз раннеголоценового поднятия земной поверхности на северовостоке Фенноскандии (а) [7]. Район исследования, для которого выполнено компьютерное моделирование схем изобаз поднятия за последние 10000 лет (б). Цифрами в красных прямоугольниках показаны приведенные в таблице районы, для которых установлен характер и амплитуда поднятия земной поверхности.

Материалы и методы моделирования

Для построения изобаз поднятия земной поверхности были использованы данные, полученные методом изолированных бассейнов на территории Кольского региона, Карелии, а также Северной Норвегии. На рис. 1 б показаны районы, для которых выполнены работы по изучению перемещения береговой линии моря, и где установлены амплитуда и характер поднятия земной поверхности в голоцене. Данные об амплитуде поднятия земной поверхности за 10000 лет для каждого района приведены в таблице. Моделирование схем изобаз поднятия выполнялось в программе «Surfer».

Было выполнено построение схем изобаз различными интерполяционными и геостатистическими методами для дальнейшего сопоставления их с уже известной схемой изобаз и выявления наиболее приемлемых результатов моделирования. При построении схем анизотропия данных не учитывалась. Для построения схем изобаз поднятия было использовано несколько методов, описанных в работе Мальцева и Мухарамова [6]:

1) Метод «триангуляция с линейной интерполяцией» – «Triangulation with Linear Interpolation». Метод использует алгоритм построения триангуляции Делоне – разбиения области исследования на совокупность треугольников. Вершинами треугольников являются соседние точки выборки; точки

соединяются таким образом, что рёбра треугольников не пересекаются. Триангуляция является точным интерполяционным методом;

- 2) Метод «естественной окрестности» «Natural Neighbor». Метод позволяет получать хорошие изолинейные карты по наборам данных, содержащим скопления выборочных точек в одних подобластях исследуемой территории и разреженные выборочные точки в других подобластях. Получаемая в произвольной точке оценка Z всегда будет заключаться в пределах диапазона значений в ближайших точках. В построенной модели не будет «пиков», «ям», «хребтов», «долин», которые не были бы представлены исходными данными. Метод является точным интерполятором;
- 3) метод «локальных полиномов» «Local Polinomial». Этот метод оценивает зависимость пространственной переменной Z от координат X, Y, при этом использует кусочно-полиномиальное интерполирование. Он строит полиномиальную регрессию Z на X, Y по данным, попавшим в поисковый эллипс с центром в заданной точке области исследования, получая, таким образом, полиномиальное приближение в локальной окрестности этой точки;

Таблица. Данные для моделирования схем изобаз поднятия земной поверхности северо-востока Фенноскандии за последние 10000 калиброванных лет.

№	Район	Коорди	инаты	Амплитуда	Источник	
31-	i unon	Е	N	поднятия, м		
1	Нордкин	27.25	70.92	13.2	[13]	
2	Варангерфьорд	28.94	70.08	42	[12]	
3	Никель	30.19	69.64	60	[10]	
4	Полярный	33.40	69.19	36	[11]	
5	Териберка	35.13	69.17	15	неопубликованные	
	Терноерка			10	данные	
6	Дальние Зеленцы	36.02	69.11	14	[14]	
7	Кола	33.01	68.88	46.5	[8, 9]	
8	Верхнетуломск	31.83	68.70	65	[8, 9]	
9	Лотта (устье)	30.39	68.73	101.3	[8]	
10	Лотта (среднее)	29.61	68.62	115	[8]	
11	Кандалакша	32.43	67.17	98.6	[2]	
12	Умба	34.20	66.69	41.2	[1]	
13	Лесозаводский	32.75	66.72	58.3	[2]	
14	Чупа	32.81	66.27	61.7	[5]	
15	Энгозеро	34.42	65.81	30.5	[4]	
16	Кузема	34.24	65.36	46.5	[3]	

4) «Кригинг» — «Kriging» является геостатистическим методом, основывается на вероятностной модели, рассматривающей изучаемую пространственную переменную Z(X,Y) как реализацию случайной функции Z(X,Y). Такой подход позволяет учитывать пространственную корреляцию данных и даёт возможность не только создавать модели поверхностей, но также получать оценку точности этих моделей. Необходимо отметить, что при по-

строении схем изобаз поднятия данным методом использовалась линейная вариограмма.

Схемы изобаз поднятия

Разными методами было построено пять схем изобаз поднятия земной поверхности северо-востока Фенноскандии (рис. 2 *а-д*). На полученных схемах наблюдается схожий характер поднятия земной поверхности. Видно, что поднятие земной поверхности имеет куполообразный характер, максимальная амплитуда более 120 метров отмечается на юго-западе Кольского региона. На схеме, полученной методом «локальных полиномов» (рис. 2 *в*), максимальная амплитуда поднятия превышает 140 м. С запада на восток происходит постепенное уменьшение величины поднятия. На всех схемах видно, что на баренцевоморском побережье в районе Кольского залива происходит изменение направления изобаз. Если западнее Кольского залива изобазы идут вдоль береговой линии, то восточнее изобазы начинают пересекать берег. По мнению авторов это связано с характером деградации последнего ледникового покрова на данной территории.

Изобазы на схемах, полученных методом «триангуляции с линейной интерполяцией» (рис. 2 a) и методом «естественной окрестности» (рис. 2 б) в прибрежных частях располагаются схожим образом, как и на ранее построенной схеме на рис. 1 a. Это связано с тем, что основная часть районов, по которым строились изобазы, расположена на побережье. В западной части

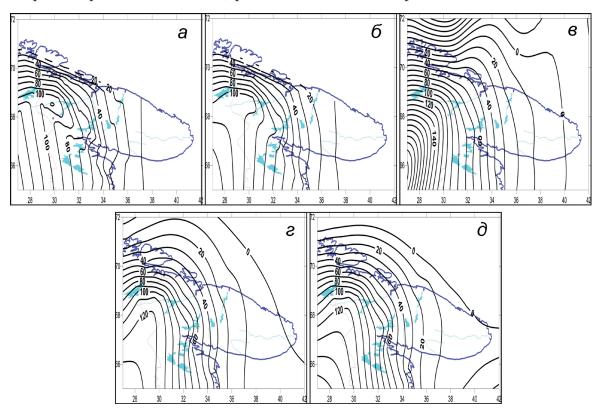


Рис. 2. Схемы изобаз поднятия земной поверхности северо-востока Фенноскандии за последние 10000 лет, построенные разными методами: а — «триангуляция с линейной интерполяцией», б — метод «естественной окрестности», в — метод «локальных полиномов», г — «Кригинг», д — «Кригинг» с линейным дрифтом.

(во внутренней части Кольского региона), наоборот, отмечаются значительные различия в направлениях изобаз, на построенных схемах изобазы изгибаются, резко меняют своё направление. Причиной этого является небольшое количество фактических данных о поднятии земной поверхности в этом районе. Применение этих методов для построения интерполяционной поверхности по такому небольшому числу неравномерно распределённых точек, видимо, привело к появлению явных треугольных граней на графике поверхности и больших прямолинейных сегментов на карте изолиний.

Методом «локальных полиномов» была получена сглаженная схема изобаз поднятия (рис. 2 в). Схема хорошо сопоставляется с ранее построенной схемой (рис. 1 а) и отражает общий характер поднятия земной поверхности, но при этом теряются локальные искривления линий, вызванные тектоническими особенностями определенных районов. В пределах Баренцева моря такое волнистое положение линий вызвано отсутствием данных в этом районе.

Методом «Кригинг» были построены две схемы изобаз — без дрифта (рис. $2\ 2$) и с линейным дрифтом (рис. $2\ 2$). Опция «линейный дрифт» предполагает, что в данных присутствует линейный тренд, и тогда оценка выполняется методом универсального «Кригинга». Без линейного дрифта оценка выполняется методом ординального «Кригинга». Но как видно из построенных схем изобаз поднятия, разница в полученных результатах минимальная. На схемах изобаз отмечается плавный ход линий. Полученные схемы наилучшим образом сопоставляются с ранее построенной схемой (рис. $1\ a$). На данных схемах, аналогично схеме на рис. $1\ a$, в пределах Кандалакшского залива Белого моря отмечается небольшое искривление изобаз поднятия, что связано с тектонической активностью в этом районе. Отсутствие данных на востоке Кольского региона не позволяет достоверно определить положение линий изобаз поднятия.

Выводы

На основании данных об амплитуде поднятия, полученных при изучении донных осадков изолированных котловин, были построены новые схемы изобаз и выполнено их сопоставление с ранее построенной схемой. При данном количестве данных наиболее приемлемые результаты моделирования схем изобаз поднятия отмечаются методом «Кригинг». Установлено, что поднятие земной поверхности имеет куполообразный характер, максимальная амплитуда более 120 метров отмечается на юго-западе Кольского региона. В пределах Кандалакшского залива происходит искривление изобаз поднятия, что связано с тектонической активностью в этом районе.

Работа выполнена в Геологическом институте КНЦ РАН (тема 0231-2015-0010) при частичной поддержке гранта РФФИ № 16-05-00311-А и №18-35-00054-мол а.

Список литературы

1. Колька В.В., Евзеров В.Я., Мёллер Я.Й., Корнер Г.Д. Перемещение уровня моря в позднем плейстоцене — голоцене и стратиграфия донных осадков изолированных озер на южном берегу Кольского полуострова, в районе по-

- селка Умба // Известия Российской академии наук. Сер. географическая. М.: Наука. 2013. № 1. С. 73-88.
- 2. Колька В.В., Евзеров В.Я., Мёллер Я.Й., Корнер Д.Д. Послеледниковые гляциоизостатические поднятия на северо-востоке Балтийского щита // Новые данные по геологии и полезным ископаемым Кольского полуострова (ред. Митрофанов Ф.П.). Апатиты: Изд-во КНЦ РАН. 2005. С. 15-25.
- 3. Колька В.В., Корсакова О.П., Шелехова Т.С. и др. Временная последовательность перемещения береговой линии Белого моря в голоцене по данным изучения донных отложений озер района Кузема (северная Карелия) // Изв. Русс. географ. общ-ва. 2014. Т. 146. Вып. 6. С. 14-26.
- 4. Колька В.В., Корсакова О.П., Шелехова Т.С. и др. Реконструкция относительного положения уровня Белого моря в голоцене на Карельском берегу (район поселка Энгозеро, Северная Карелия) // ДАН. М.: Наука. 2013. Т. 449. № 5. С. 587-592.
- 5. Колька В.В., Корсакова О.П., Шелехова Т.С., Толстоброва А.Н. Восстановление относительного положения уровня Белого моря в позднеледниковье и голоцене по данным литологического, диатомового анализов и радиоуглеродного датирования донных отложений малых озер в районе пос. Чупа (северная Карелия) // Вестник МГТУ. Мурманск: МГТУ. 2015. Т. 18. №2. С. 255-268.
- 6. Мальцев К.А., Мухарамова С.С. Построение моделей пространственных переменных (с применением пакета Surfer) // Уч. пос. Казань: Казанский университет. 2014. 103 с.
- 7. Система Белого моря. Т. IV. Процессы осадкообразования, геология и история. М.: Научный мир. 2017. 1030 с.
- 8. Толстобров Д.С. Голоценовая тектоника северо-западной части Кольского региона. Автореф. дисс. к.г.-м. н. Апатиты: Изд-во ФГБУН КНЦ РАН. 2018. 28 с.
- 9. Толстобров Д.С., Колька В.В., Толстоброва А.Н., Корсакова О.П. Опыт хронологической корреляции береговых форм рельефа голоценового моря в депрессии реки Тулома и Кольском заливе // Вестник МГТУ. 2016. Т. 19. №1/1. С.142-150.
- 10. Corner G.D., Yevzerov V. Ya., Kolka V.V., Moller J.J. Isolation basin stratigraphy and Holocene relative sea-level change at the Norwegian-Russian border north of Nikel, northwest Russia // Boreas. 1999. V. 28. №1. P. 146-166.
- 11. Corner G.D., Kolka V.V., Yevzerov V.Ya, Moller J.J. Postglacial relative sealevel change and stratigraphy of raised coastal basins on Kola Peninsula, northwest Russia // Global and Planetary Change. 2001. V. 31. P.153-175.
- 12. Donner J., Eronen M., Jungner H. The dating of the Holocene relative sealevel changes in Finnmark, North Norway // Norsk geografisk Tidsskrift. 1977. V. 31. P. 103-128.
- 13. Romundset A., Bondevik S., Bennike O. Postglacial uplift and relative sea level changes in Finnmark, northern Norway // Quaternary Science Reviews. 2011. V. 30. P. 2398-2421.
- 14. Snyder J.A., Forman S.L., Mode W.N., Tarasov G.A. Postglacial relative sealevel history: sediment and diatom records of emerged coastal lakes, north-central Kola Peninsula, Russia // Boreas. 1997. V. 26. P. 329-346.



ЧЕРЕПАШИЙ КАРАПАКС КАК ПРИМЕР ПОЛИГОНАЛЬНОГО РАЗБИЕНИЯ

Войтеховский Ю.Л. 1,2 , Степенщиков Д.Г. 2

- ¹ Санкт-Петербургский Горный университет, Санкт-Петербург, voytekhovskiy yul@pers.spmi.ru
- ² Геологический институт КНЦ РАН, Апатиты, stepen@geoksc.apatity.ru

Аннотация

В ряде статей авторы уже рассматривали закономерности полигональных разбиений плоских, квази-плоских (слегка изогнутых) и квази-сферических поверхностей в минеральной и живой природе. Во всех примерах поражает, сколь разнообразно природа использует оптимальные решения, как в минеральных и живых объектах упрятаны геометрические инварианты пространства вложения, как в онтогенезе и филогенезе случайное борется с закономерным, поливариантность — с предопределённостью. Ранее речь шла о кристаллах, фуллеренах, вирусах, радиоляриях, вольвоксах, колючих и пластинчатых рыбах [3-6, 8, 17-21]. В этой статье рассматриваются черепахи (лат. *Testudines*) — отряд пресмыкающихся, живущих уже 250 млн. лет, включающий около 230 видов, группируемых в 12 семейств и 5 подотрядов, распространённых по всей Земле: на суше, в пресных и солёных водоёмах.

Проблема

В чём состояла закономерность и в чём – случайность при формировании полигонального разбиения карапакса в эволюции черепах? «У всех черепах количество костных пластинок карапакса превышает таковое на пластроне. Например, Plesiochelye, Mauremys, Testudo, Melanochelys имеют в карапаксе до 50, а в пластроне 9 пластинок. Соотношение этих пластинок составляет, соответственно: у Eusarkia 39 и 11, у Trionyx 25 и 9, у Kinosternon 44 и 8, у Archelon 52 и 7 и т.д. Специальные измерения отдельных элементов панциря черепах разного возраста показали, что все пластинки растут в онтогенезе относительно равномерно и нарастают по периферии в области швов. Пропорциональный рост отдельных частей панциря обеспечивается мозаичностью его строения. Функциональное значение наличия в карапаксе относительно большего, чем в пластроне, числа костных элементов мы видим в обеспечении постоянства выпуклости свода спинного щита. <...> Очевидно, в связи с отмеченными особенностями варьирования мозаичности строения костной основы панциря черепах комплекс роговых щитков также подвергался в ходе эволюции изменениям» [14].

От числа пластин зависит выпуклость карапакса, то есть его вместимость и прочность, обеспечивающие жизненно важные потребности вида. Добавим двустороннюю симметрию карапакса как следствие принципа, известного в минералогии и биологии: макроформа индивида формируется как компромисс внутренних потребностей и внешних условий. Как биологическое следствие, все организмы, приспосабливающиеся к движению в поле тяжести по поверхности Земли, приобретают в онтогенезе и филогенезе двустороннюю симметрию [2, 7, 15, 16]. Вполне определилась задача

компьютерного моделирования: для черепахи (рис. 1) и её сородичей (геометрия панциря при взрослении особи не меняется) найти все возможные разбиения центральной части карапакса (она формируется независимо от периферийного пояса) на 4-, 5- и 6-угольные пластины общим числом 13 (для другого вида его следует изменить), контактирующие по 3 в точке. Подчеркнём, что нас интересует комбинаторика разбиений, а не их метрика [9]. Насколько разнообразны искомые разбиения и насколько распространены среди них двусторонне-симметричные?

Решение



Рис. 1. Предмет компьютерного моделирования— центральная часть карапакса пресноводной красноухой черепахи.

Компьютерным моделированием найдено полное число разбиений карапакса 13-ю 4-, 5- и 6-угольными пластинами при условии, что его внешний периметр содержит не менее 6 сторон. Всего таких разбиений 426 (рис. 2, табл.), из них двустороннесимметричных 114, в том числе с «избыточной» симметрией (более одной плоскости симметрии) 14 (рис. 3): ## 1 (6*mm*); 13, 32, 90, 189, 196, 300, 359, 396, 419, 426

(*mm*2); 301 (4*mm*); 330, 383 (3*m*). Среди них – карапакс пресноводной красноухой черепахи (# 396).

Таблица. Группы симметрии для разбиений карапакса (см. рис. 2). Асимметричные формы не указаны.

Точечная группа симметрии	Номера разбиений	Всего
m	2,9-12,16-18,29-31,57-62,80-84,86-89,149-157,180- 188,191,192,242-250,291-299,321-324,329,333-337,353- 358,376-382,394,395,398,399,401-404,408,409,418,424,425	100
2	28,85,179,352	4
mm2	13,32,90,189,196,300,359,396,419,426	10
3 <i>m</i>	330,383	2
4 <i>mm</i>	301	1
6 <i>mm</i>	1	1

Обсуждение

Итак, природе было из чего выбирать. 114 двусторонне-симметричных вариантов — четверть от общего числа — немало в абсолютном и относительном выражениях. Остальные 312 вариантов природой забракованы, ведь двигаться в тяжёлом асимметричном (или всего с одной поворотной осью 2-го порядка) карапаксе неудобно — будет заносить влево или вправо. И это совсем не то, что нужно для выживания вида. Вспомним и про широко распространённый биологический энантиоморфизм (диссимметрию, по Л. Пастеру). Представим, как по Галапагосам кружат гигантские черепахи — все по или против часовой стрелки. Одним словом, зеркально-асимметричные карапаксы определённо не способствуют эволюции вида. Но ведь эта правда выяснилась и закрепилась в генотипе не сразу. Что известно о перипетиях внутривидового отбора? О чём говорят аномалии развития?

«В 1968 г. в Ваилованском заповеднике найден экземпляр средиземноморской черепахи с увеличенным числом вертебральных щитков (8 вместо 5). I и V щитки – без изменения, II, III и IV – удвоены и расположены в два ряда. Отклонения от нормы в числе и форме щитков карапакса встречались и у других экземпляров с.ч. в Вашлованской котловине. Чаще всего ІІ-го, реже III-го щитка, что выражалось в удвоении их числа, щитки были неправильной формы. Частота встречаемости таких экземпляров в Вашлованской котловине выше, чем по остальному ареалу в Грузии. В 1970 г. В.М. Чхиквадзе найдена с.ч. с идентичным расположением щитков в 20 км от первой находки. В 1988 г. в ТГУ доставлена с.ч. с таким же числом и расположением щитков из окрестностей Тбилиси. Отклонения от нормы в щитках карапакса с.ч. отмечены Алекперовым и Хозацким (1971), но они воздержались от суждения о причинах аномалий. Идентичная изменчивость щитков карапакса отмечена у с.ч. (Брушко, Кубыкин, 1980; Стальмакова, Харлампиди, 1987) и для болотной, средиземноморской и степной (Черепанов, 1987). Последний считает её результатом нарушений в эмбриональной стадии. Мы имеем дело с гомологичной аномалией у различных видов черепах, причины которой требуют изучения» [1].

«Исходя из морфогенетических данных, весь спектр изменчивости щитков панциря черепах обусловлен нарушениями эмбрионального развития: асимметричная закладка контралатеральных эпидермальных плакод со сдвигом на сегмент или более, закладка дополнительных плакод в «свободных» септальных углублениях, атипичное слияние соседних эпидермальных плакод, отсутствие закладки регулярных эпидермальных плакод в типичных сегментах тела» (рис. 4) [10-13].

Наконец, почему природа предпочла не просто двустороннесимметричный (*m*), а избыточно симметричный (*mm*2) вариант карапакса? Образно говоря, эта симметрия была бы черепахе «как раз впору», если бы она могла покидать тяжёлый карапакс (как рак-отшельник – раковину) или разворачиваться внутри него, экономя силы на разворотах, ради движения

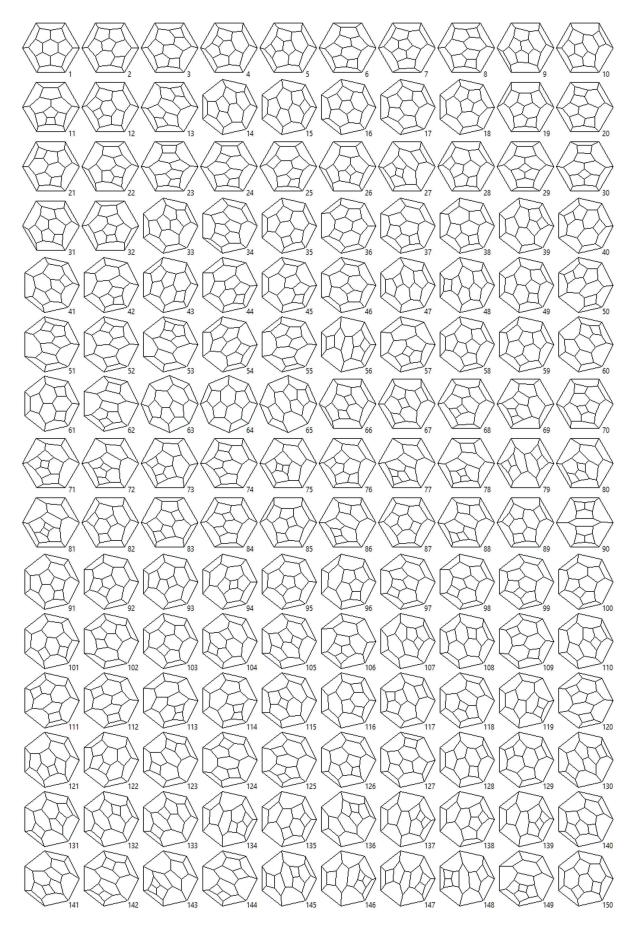


Рис. 2. Разбиения карапакса. Пояснения в тексте.

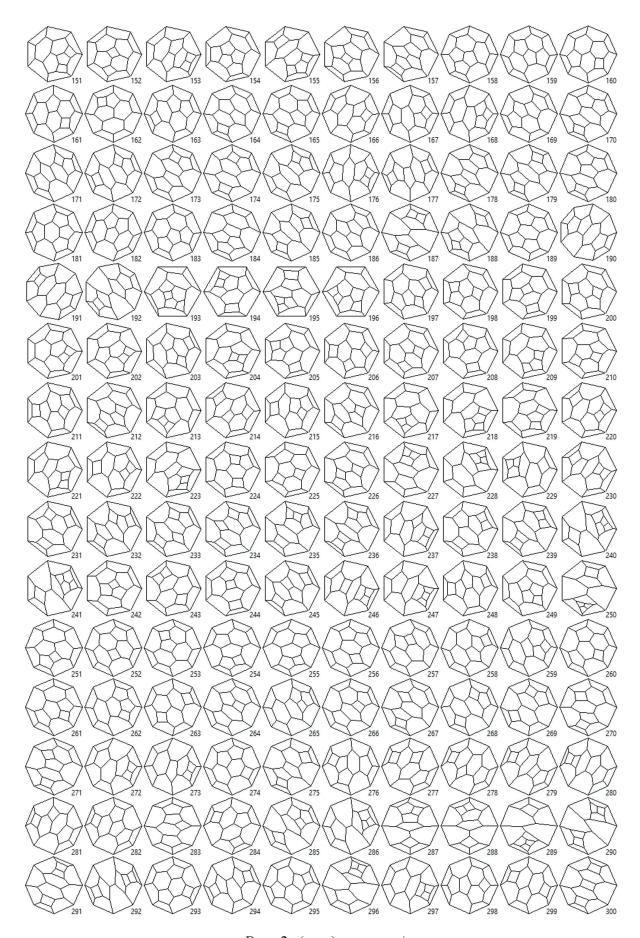


Рис. 2. (продолжение).

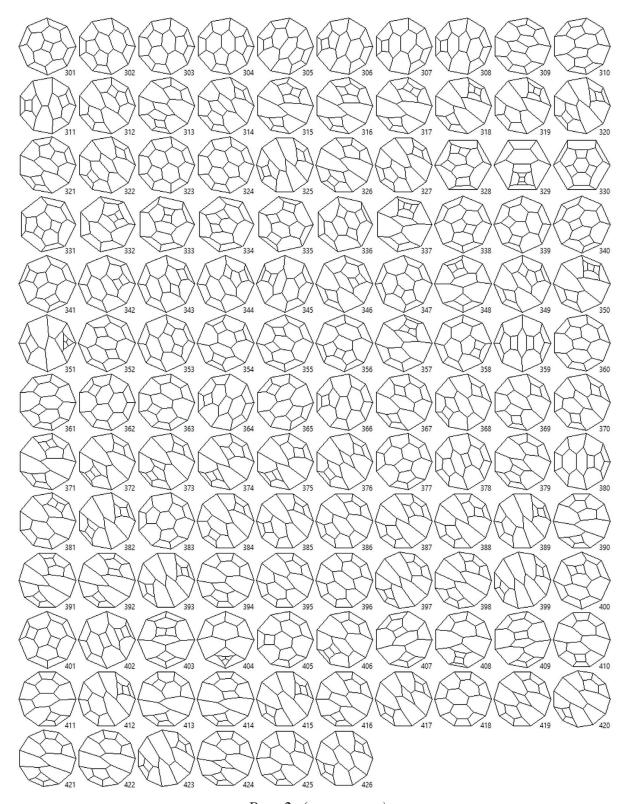


Рис. 2. (окончание).

в двух перпендикулярных направлениях, причём в обе стороны. Ещё больше возможностей дали бы варианты 3*m*, 4*mm* и 6*mm*. Почему выбран простейший из избыточных вариантов, но и тот не использован в полной мере? Или они были опробованы природой, но оказались не оптимальными? Почему бы не пофантазировать о будущих сенсационных палеонтологических находках!

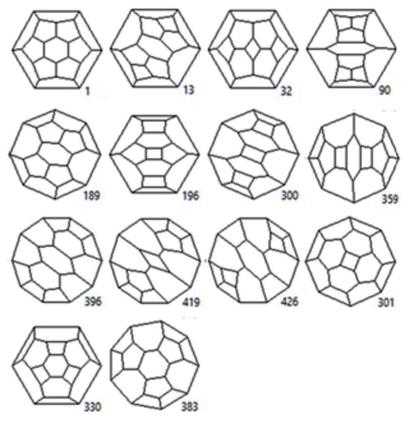


Рис. 3. Разбиения карапакса с избыточной симметрией.

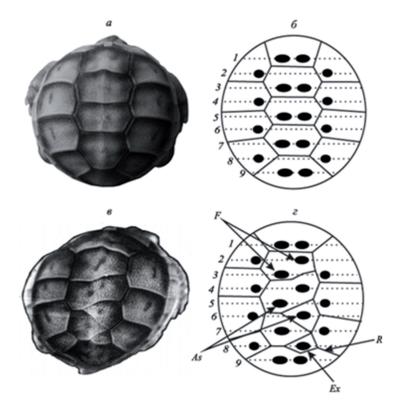


Рис. 4. Правильное (вверху) и неправильное (внизу) формирование карапакса [13].

Заключение

В биологии черепах известно очень многое. Но представляется, что оппозиция случайного и закономерного в филогенезе и онтогенезе изучена не до конца. С точки зрения математика, черепахи — это бегающие и плавающие решения некоторого фундаментального диофантова уравнения, сводящегося для каждого вида к своему характеристическому уравнению (это лишь отчасти метафора, так как перечисление разбиений карапакса на определённые полигоны подразумевает решение диофантовых уравнений). Если угодно, они суть аристотелевы реализации некоторой платоновой идеи карапакса — удивительной структуры среди других совершенных созданий природы. В какой мере полигональное и симметричное строение карапакса определено стилем движения черепах и закреплено эволюцией, а в какой содержит инвариант случайного разбиения фрагмента квази-плоской поверхности? Здесь открывается захватывающая перспектива исследований на стыке биологии развития и математического моделирования.

Список литературы

- 1. Бакрадзе М.А., Пицхвлаури В.П. Интересная морфа средиземноморской черепахи // Вопросы герпетологии. К.: Наук. Думка. 1989. С. 20.
- 2. Беклемишев В.Н. Основы сравнительной анатомии беспозвоночных. М.: Наука. 1964. Т. 1. 432 с. Т. 2. 448 с.
- 3. Войтеховский Ю.Л. О морфологическом разнообразии колоний *Pandorina morum* (*Müll.*) *Bory* (*Volvocaceae*) // Ж-л общ. биол. 2001. Т. 62. № 5. С. 425-429.
- 4. Войтеховский Ю.Л. О кристаллах, полиэдрах, радиоляриях, вольвоксах, фуллеренах и немного о природе вещей // Природа. 2004. № 8. С. 19-24.
- 5. Войтеховский Ю.Л. О кристаллах, полиэдрах, радиоляриях, вольвоксах, фуллеренах и немного о природе вещей // Российская наука: нам гранты думать и жить помогают. М.: Октопус-Природа. 2004. С. 208-217.
- 6. Войтеховский Ю.Л. Геометрические мотивы в морфологии рыб *Tetraodontiformes* // Ж-л общ. биол. 2009. Т. 70. № 3. С. 257-261.
- 7. Войтеховский Ю.Л. Доступно и точно о принципе диссимметрии Кюри // Природа. 2010. № 6. С. 19-23.
- 8. Войтеховский Ю.Л., Тимофеева М.Г., Степенщиков Д.Г. Принцип Кюри и морфологическое разнообразие колоний *Pandorina morum* (*Müll.*) *Bory* (*Volvocaceae*) // Ж-л общ. биол. 2006. Т. 67. № 3. С. 206-211.
- 9. Киладзе А.Б. Морфологическая геометрия карапакса различных экологических форм черепах. М.: РУСАЙНС. 2017. 194 с.
- 10. Черепанов Г.О. Формирование мозаики роговых щитков панциря черепах // Зоол. ж-л. 1987. Т. 66. № 9. С. 1339-1348.
- 11. Черепанов Г.О. Аномалии костного панциря черепах // Зоол. ж-л. 1994. Т. 73. № 6. С. 68-78.
- 12. Черепанов Г.О. Панцирь черепах: происхождение и развитие в онто- и

филогенезе. Автореф. дис. уч. ст. д.б.н. СПб.: СПбГУ. 2004. 34 с.

- 13. Черепанов Г.О. Изменчивость щитков панциря черепах: закономерности морфогенеза и природа аномалий // Вестник СПбГУ. Сер. 3. Биология. 2016. № 3. С. 170-174.
- 14. Чхиквадзе В.М. Мозаичность строения и особенности роста панциря черепах // Вопросы герпетологии. К.: Наук. Думка. 1973. С. 273.
- 15. Шафрановский И.И. Симметрия в природе. Л.: Недра. 1985. 168 с.
- 16. Curie P. Sur la symétrie dans les phénomènes physiques, symétrie d'un champ électrique et d'un champ magnétique // J. Physique. Paris. 1894. N. 3. P. 393-415.
- 17. Voytekhovsky Yu.L. On the exotic fishes given to ... geometry // Nature Precedings. 2008. http://hdl.handle.net/10101/npre.2008.2191.1
- 18. Voytekhovsky Yu.L. Symmetry, asymmetry, dissymmetry and enantiomorphism of the polyhedral forms // Paleont. J. 2014. V. 48. N. 11. P. 1137-1142.
- 19. Voytekhovsky Yu.L. Biomineral analogues in ontogeny and phylogeny // Paleont. J. 2015. V. 49. N. 14. P. 1-7.
- 20. Voytekhovsky Yu.L. Homological series of icosahedral viruses and fullerenes // Paleont. J. 2016. V. 50. N. 13. P. 1505-1509.
- 21. Voytekhovsky Yu.L., Stepenshchikov D.G. Fullerene transformations as analogues of radiolarian skeleton microevolution // Paleont. J. 2016. V. 50. N. 13. P. 1544-1548.

БРОХОСОМЫ - БИОЛОГИЧЕСКИЕ ФУЛЛЕРЕНЫ

Войтеховский Ю.Л. 1, 2, Степенщиков Д.Г. 2

Ранее авторы писали о биологических объектах, явно или неявно использующих структуру фуллерена — выпуклого полиэдра, на котором разрешены лишь 5- и 6-угольные грани, сходящиеся по три в каждой вершине: капсидах икосаэдрических вирусов, ценобиях вольвоксовых водорослей, пыльце некоторых цветочных растений, скелетах некоторых радиолярий... Брохосомы — ещё один пример биологических фуллеренов.

Брохосомы (от др.-греч. βρόχος – ячея сети и σωμα – тело) – квазисферические полые пористые образования размером 0.2-0.7 мкм (рис. 1), выделяемые полужесткокрылыми насекомыми семейства цикадок (Cicadellidae). Установлены с помощью электронного микроскопа в начале 1950-х на теле насекомых и в каплях воды после контакта с ними. Состоят из белков с участием липидов. Механизм формирования брохосом до конца не выяснен, назначение – тоже. Предположительно, насекомые наносятся их на тело и кладки яиц, делая их гидрофобными и тем самым предохраняя от загрязнения [1-4].

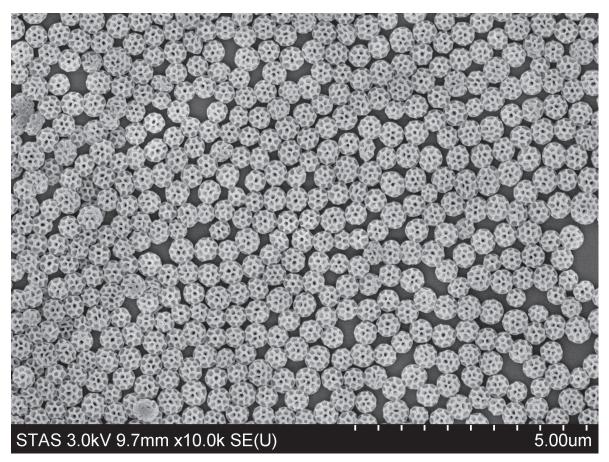


Рис. 1. Брохосомы, съёмка в сканирующем электронном микроскопе [3].

¹ Санкт-Петербургский Горный университет, Санкт-Петербург, voytekhovskiy yul@pers.spmi.ru

² Геологический институт ФИЦ КНЦ РАН, Апатиты, stepen@geoksc.apatity.ru

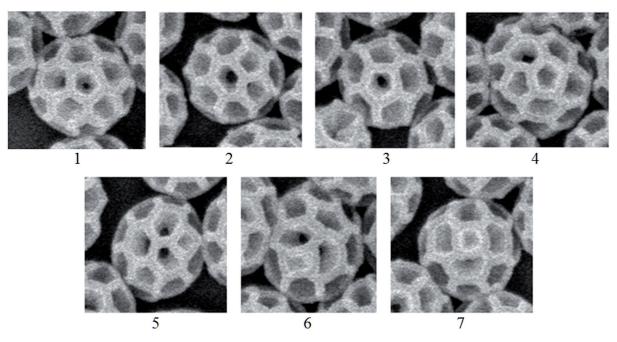


Рис. 2. Некоторые формы брохосом: $1- «фуллерен <math>C_{60}$ », 2-4- брохосомы со смежными пентагональными ячейками, 5-7- брохосомы с тетрагональными ячейками.

В описаниях брохосом обычно указывают, что они представляют собой усечённый икосаэдр, то есть фуллерен C_{60} [5]. Но анализ рис. 1 показывает, что это утверждение не точно. Действительно, некоторые формы соответствуют фуллерену C_{60} (рис. 2). Можно утверждать, что большая часть квази-сферических брохосом отвечает фуллеренам при некотором диапазоне числа граней и морфологических типов. Последнее следует из того, что на некоторых брохосомах 5-угольные ячейки (условные грани) контактируют, тогда как на других — не контактируют друг с другом. Есть формы, на которых различимы 4-угольные ячейки. Они заведомо не отвечают фуллеренам, но их мало (рис. 2).

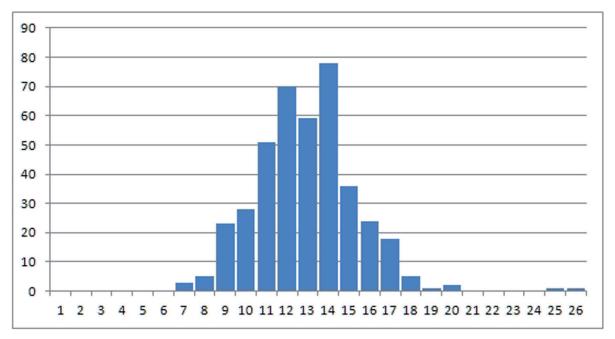


Рис. 3. Зависимость числа брохосом от числа видимых полигональных ячеек (см. табл.).

Результаты подсчёта форм на рис. 1 даны в таблице и на рис. 3. Число ячеек-граней подсчитано лишь с видимой стороны полиэдров. Переход к замкнутой форме содержит условность, так как не ясно, есть ли по периметру видимой полусферы грани, перпендикулярные плоскости изображения. Иначе говоря, получается ли общее число граней простым удвоением числа видимых граней. Если предположить, что преобладающая форма брохосом отвечает фуллерену C_{60} , то общее число граней должно быть 32. Делением на два получаем 16, что не отвечает гистограмме (рис. 3). И следует допустить, что есть грани, перпендикулярные плоскости изображения. Для самых частых чисел полигональных ячеек ситуация выглядит следующим образом: $12 \times 2 + 8 = 13 \times 2 + 6 = 14 \times 2 + 4 = 32$. Доказательное выяснение ситуации возможно прямым изучением форм под микроскопом.

Таблица. Зависимость числа брохосом (всего 405) от числа видимых полигональных ячеек.

Число видимых полигональных ячеек	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20	25	26
Число брохосом	3	5	23	28	51	70	59	78	36	24	18	5	1	2	1	1

Главный результат исследования состоит в установлении широкого диапазона числа граней на квази-сферических брохосомах, действительно большей частью принадлежащих к морфологическому типу фуллеренов, даже для одного вида цикадок. Это открывает перспективы дальнейших исследований, например, в установлении диапазонов и модальных значений частот морфологических типов брохосом для разных биологических видов в разных экологических условиях.

Авторы благодарят Р.А. Ракитова (Палеонтологический институт РАН, Москва), обратившего их внимание на этот удивительный объект.

Список литературы

- 1. Rakitov R.A. Brochosomal coatings of the integument of leafhoppers (Hemiptera, Cicadellidae) // S.N. Gorb (ed.). Functional Surfaces in Biology. 2009. V. 1. P. 113-137. ISBN 978-1-4020-6696-2.
- 2. Rakitov R.A. Contamination as the cause of erroneous records of brochosomes // Psyche. 2011. DOI: 10.1155/2011/767963.
- 3. Rakitov R., Gorb S.N. Brochosomal coats turn leafhopper (Insecta, Hemiptera, Cicadellidae) integument to superhydrophobic state // Proc. Royal Soc. B 7. Febr. 2013. V. 280. DOI: 10.1098/rspb.2012.2391.
- 4. Rakitov R., Gorb S.N. Brochosomts protect leafhoppers (Insecta, Hemiptera, Cicadellidae) from sticky exudates // J. Royal Soc. Interface. 2013. V. 10. DOI: 10.1098/rsif.2013.0445.
- 5. Дубов А. Химики подсмотрели у цикад «выключающие» отражение наночастицы [сайт] URL: https://nplus1.ru/news/2017/11/03/synthetic-brochosomes.

ПРИМЕНЕНИЕ СТАТИСТИЧЕСКИХ МЕТОДОВ В ИССЛЕДОВАНИИ ХИМИЧЕСКОГО СОСТАВА ДОННЫХ ОТЛОЖЕНИЙ ОЗЕРА ИМАНДРА

Мицуков А.С., Даувальтер В.А.

Институт проблем промышленной экологии Севера КНЦ РАН, Апатиты, Mitsukovaleks@gmail.com

Аннотация

Представлены возможности использования статистических методов (корреляционный и факторный анализ) для исследования химического состава донных отложений озера Имандра. Выявлены наиболее значимые факторы, влияющие на формирование химического состава донных отложений.

Summary

The possibilities of using statistical methods (correlation and factor analysis) to study the chemical composition of sediments of Lake Imandra are presented. The most significant factors influencing the formation of the chemical composition of sediments are identified.

Введение

В настоящее время остро стоит проблема антропогенного влияния на водные экосистемы. Происходит качественное истощение крупных водных объектов, как источников питьевого водоснабжения и биоресурсов. В Арктике одно из главных мест среди природных ресурсов занимают поверхностные воды. В Мурманской области расположено озеро Имандра, которое является источником питьевого водоснабжения, объектом рыболовства и имеет важное рекреационное значение, но в тоже время испытывает интенсивную антропогенную нагрузку, которая проявляется, в основном, в поступлении загрязняющих веществ в водоём, и последующее их накопление в донных отложениях, которые представляют собой своеобразный архив данных об изменениях, происходивших на водосборе и в самом водоёме [7]. Поэтому изучение влияния антропогенной деятельности на водные экосистемы является актуальной задачей, для выполнения которой могут быть использованы методы математической статистики, а именно факторный и корреляционный анализ. Цель работы заключается в исследовании химического состава донных отложений, с применением методов математической статистики.

Материалы и методы

Имандра — одно из крупнейших озер Заполярья — расположено на крайнем северо-западе Европейской территории России, в тектонической депрессии, которая делит Мурманскую область на две части: материковую и полуостровную. Озеро состоит из трёх обособленных плёсов: Большая, Йокостровская и Бабинская Имандры, которые соединяются между собой узкими проливами — салмами [1].

Образцы донных отложений (ДО) отбирались на 12 станциях (рис. 1) оз. Имандра сотрудниками Института проблем промышленной экологии Севера (ИППЭС) Кольского научного центра РАН, отборником колонок открытого гравитационного типа, разработанного Скогхеймом [14], сделанным из плексигласа (внутренний диаметр 44 мм), с автоматически закрывающейся диафрагмой. Колонки ДО были разделены на слои по 1 см, помещены в предварительно вымытую кислотой полиэтиленовую посуду и отправлены в лабораторию для анализа. Первичная обработка проб ДО (высушивание, определение влажности, прокаливание и определение потерь при прокаливании), определение содержания металлов (Ni, Cu, Co, Zn, Cd, Pb, Hg, Mn, Fe, Ca, Mg, Na, K, Al) проводились в лабораториях ИППЭС [2]. Длина колонок ДО при исследовании оз. Имандра была, как правило, в диапазоне 17-25 см, следовательно, можно предположить, что в нижних слоях отобранных колонок ДО должны быть зафиксированы природные фоновые содержания элементов [3, 4].

Для определения влияния тех или иных факторов, на формирование химического состава ДО исследуемых станций отбора проб, для каждого из плёсов оз. Имандра были проведены корреляционный и факторный анализы с использованием пакета Statistica (Version 10.0). Значения считались достоверными при р<0.05. При проведении данных анализов не учитывались результаты по ДО станции F-11 (губа Зашеечная) плёса Йокостровская Имандра, так как, скорее всего, в месте отбора ДО были перемешаны, как было отмечено в предыдущих работах [7], и станции I-11 (губа Белая) плёса Большая Имандра, так как при отборе колонки не были получены фоновые слои ДО, по причине высокой скорости осадконакопления в данном месте акватории.

Результаты и обсуждение

Разнообразие химического состава вод притоков, разная антропогенная нагрузка и изолированность плёсов относительно друг друга обуславливают сильные различия в химическом составе ДО оз. Имандра [1], которые формируются преимущественно из минеральных частиц, поступающих с водосборной площади [9, 10].

На территории водосбора оз. Имандра располагаются предприятия горнодобывающей промышленности (комбинат по добыче и переработке апатит-нефелиновых руд — АО «Апатит»), металлургической промышленности (медно-никелевое плавильное производство — Мончегорская промышленная площадка АО «Кольская ГМК»), железорудное производство (АО «Олкон»), энергетический комплекс (Кольская атомная электростанция, с прямоточной системой охлаждения), Апатитская ТЭЦ, каскад Нивских ГЭС), а также муниципальные стоки городов, в которых проживает более 150 тысяч человек. По берегам озера протянулись железная и автомобильная федеральные дороги [11]. На формирование химического состава ДО оказывает влияние множество факторов, среди которых, значительную роль играют техногенные. С помощью факторного анализа удалось выявить

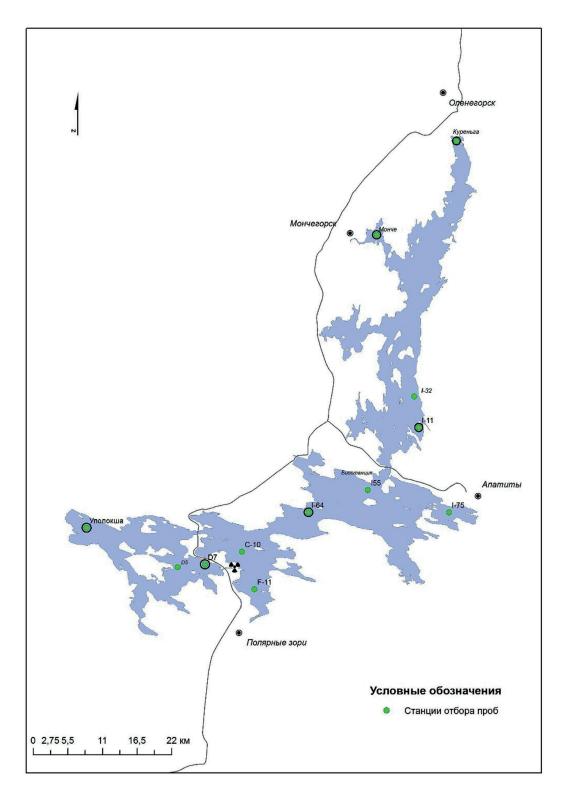


Рис. 1. Схема отбора проб донных отложений на озере Имандра.

три основных фактора определяющих формирование химического состава ДО плёсов оз. Имандра.

Самым загрязнённым считается плёс Большая Имандра, в котором за последние 60-70 лет произошли самые значительные преобразования химического состава ДО [11]. Первый фактор, доля которого от общей дисперсии составляет 45 % (табл. 4), имеет положительные связи с Cu, Ni, Zn, Co, Cd, Pb, Cr, As и Mg, которые отрицательно коррелируют с глубиной слоя, что го-

ворит об их накоплении по направлению к верхним слоям ДО. Таким образом, первый фактор тесно коррелирует с элементами, источником поступления которых в воду, а затем и ДО, вероятно, являются стоки предприятия АО «Кольская ГМК», расположенного на водосборе плёса Большая Имандра [1].

Второй фактор, вклад которого составляет 28 %, отрицательно связан с распределением концентраций в толще ДО, таких элементов, как: Sr, Al, P, K, Ca. Источником поступления данных элементов в большом количестве могут быть стоки предприятия АО «Апатит» и хозяйственно-бытовые стоки населённых пунктов, расположенных на водосборе плёса. Это предположение подтверждается тем, что в составе стоков предприятия АО «Апатит», в оз. Имандра, поступают, прежде всего элементы, содержащиеся собственно в минералах апатите и нефелине – Al, P, K, Ca, Na, а также сопутствующий им щёлочноземельный элемент Sr [8].

Менее значимый третий фактор, на который приходится 10 % общей дисперсии, отрицательно связан с распределением Мп и Fe в толще ДО. Эти элементы чутко реагируют на изменения физико-химических условий в толще воды и ДО, в первую очередь окислительно-восстановительной обстановки [5, 6]. Поступление в данную акваторию Мп и Fe в составе сточных вод АО «Олкон» продолжалось вплоть до 1975 года, и несмотря на введение системы замкнутого водоснабжения, в том или ином объёме эти элементы продолжают поступать в северную часть плёса Большая Имандра — г. Куреньга [1]. Исходя из этого, можно предположить, что третий фактор отражает деятельность Оленегорского комбината и геохимические условия, влияющие на формирование химического состава ДО.

Результаты корреляционного анализа (табл. 1) показали, что в ДО Большой Имандры отмечены две группы элементов, тесно коррелирующих между собой и имеющих незначительные корреляционные связи с остальными исследуемыми элементами. Первая группа элементов Cu, Ni, Co, Cd, Pb характеризуется наибольшими положительными корреляционными связями (r>0.9) между собой, также в эту группу входит Zn, коэффициент корреляции г которого с перечисленными элементами составляет от 0.87 до 0.89. Это может говорить о том, что их поступление в Большую Имандру происходит вместе, и скорее всего, их источником являются сточные воды промышленных предприятий, расположенных на водосборе, в состав стоков которых входят Ni, Cu, Co, Zn и другие загрязняющие вещества [1], а также выбросы в атмосферный воздух и поступление этих элементов вместе с поверхностным стоком. Вторая группа элементов Sr, Al, P, K, Ca характеризуется незначительными корреляционными связями со всеми исследуемыми тяжелыми металлами (TM), но они хорошо коррелируют между собой (r>0.8), также значимая связь, для этих элементов, установлена с Na. Наибольшие коэффициенты корреляции между элементами зафиксированы для Sr, P, Ca (r=0.97), что говорит о возможном совместном поступлении этих элементов в акваторию плёса Большая Имандра.

Менее загрязнённым считается плёс Йокостровская Имандра, он соединяется Йокостровским проливом с плёсом Большая Имандра, из которого посредством стока, поступают загрязняющие вещества, где они осаждаются на дно водоёма и аккумулируются в ДО. Загрязняющие вещества в Йокостровскую Имандру также могут поступать путём стока с площади водосбора.

С помощью факторного анализа выявлены три фактора влияющие на формирование химического состава ДО Йокостровской Имандры (табл. 4). Первый фактор, вес которого составляет 46%, объединяет группу тяжёлых металлов – Cu, Ni, Zn, Co, Hg, а также Sr, Al, P, источником которых, могут являться выбросы и сбросы загрязняющих веществ промышленных предприятий, таких как АО «Апатит», АО «Кольская ГМК», АО «Олкон», которые могут мигрировать в данную акваторию из Большой Имандры [13], поскольку Йокостровская Имандра является единственным местом, где происходит сток всего растворённого и взвешенного материала поступающего в оз. Имандра. Второй фактор, имеет вес в 23 % и положительно коррелирует c Cd, Pb, As. Источником перечисленных элементов, также могут являться сбросы комбината АО «Кольская ГМК», но дополнительным источником данных элементов может быть автотранспорт, поскольку в отработанных газах двигателей внутреннего сгорания содержится Рb, который присутствует в топливе, в качестве добавки (этилированный бензин). Третий фактор, вес которого составляет 14 %, положительно коррелирует с Fe и Mn. Как уже было отмечено выше, эти элементы очень отзывчивы на изменение физикохимических условий [6], а именно, окислительно-восстановительной обстановки, которое происходит на границе ДО и нижних слоёв водной толщи; более детально этот процесс описан в [5]. Таким образом, третий фактор может выражать влияние геохимических условий на формирование химического состава ДО плеса Йокостровская Имандра.

Корреляционный анализ (табл. 2) показал, что практически все рассматриваемые ТМ имеют значимые корреляции с глубиной слоя в ДО исследуемых станций данной акватории озера Имандра, что говорит об увеличении концентраций этих элементов по направлению к поверхности ДО. Fe и Мп значимо, положительно коррелируют между собой (r=0.71), что говорит о схожести их распределения в толще ДО Йокостровской Имандры.

Относительно незагрязнённым считается плёс Бабинская Имандра, по причине его удалённости от промышленных предприятий — источников поступления загрязняющих веществ в составе сточных вод [11, 12], но, несмотря на это, данная акватория подвержена влиянию атмосферных выбросов, а также влиянию хозяйственно-бытовых стоков населённых пунктов и трансграничным переносам загрязняющих веществ из стран Западной Европы [7]. Вдобавок сюда поступают относительно более загрязнённые воды Йокостровской Имандры, в результате работы Кольской АЭС, которая использует воду для охлаждения энергетических установок, забирая её из акватории Йокостровской Имандры и сбрасывая в акваторию Бабинской Имандры [13].

Таблица 1. Значения коэффициентов корреляции г между концентрациями элементов в колонках ЛО исследуемых станиий плёса Большая Иманлра

				N N	UNIOHK	av HC	NCC)II	сдусм.	в колонках до исследуемых станции плеса вольшая имандра.	анции	ווחובכני	1 DOJIE	л крш	ІМанд	pa.				
	Слои	Cu	Ni	Zn	Co	Cd	Pb	Mn	Fe	Sr	Cr	Al	As	Hg	Ь	K	Na	Ca	Mg
Слои	1.00																		
Cu	-0.49	1.00																	
ž	-0.50	0.94	1.00																
Zn	-0.51	0.89	0.89	1.00															
Co	-0.52	0.93	0.97	0.87	1.00														
Cd	-0.53	0.95	0.91	0.88	0.91	1.00													
Pb	-0.58	0.94	0.94	0.89	96.0	0.95	1.00												
Mn	-0.39	-0.13	-0.12	-0.05	-0.16	-0.11	-0.12	1.00											
Fe	-0.21		-0.26 -0.24	-0.14	-0.22	-0.24	-0.22	0.25	1.00										
Sr	-0.21		-0.19	-0.18 -0.19 -0.18	-0.21	-0.20	-0.18	0.03	90.0-	1.00									
Cr	-0.23	0.72	0.79	0.65	0.81	0.74	0.82	-0.25	-0.33	-0.49	1.00								
Al	-0.10	-0.19	-0.21	-0.13	-0.24	-0.22	-0.20	-0.02	-0.13	0.87	-0.55	1.00							
As	-0.52	0.78	0.82	0.78	0.82	0.77	98.0	-0.13	-0.19	-0.19 -0.10 0.75 -0.10	0.75	-0.10	1.00						
Hg	-0.41	0.37	0.46	0.39	0.51	0.40	0.52		-0.16 -0.15	0.37		0.44 0.15	99.0	1.00					
Ь	-0.16	-0.25	-0.27	-0.23	-0.29	-0.27	-0.27	0.00	0.02	0.97	-0.55	0.82	-0.17	0.33	1.00				
K	-0.41	0.05	0.04	0.07	0.02	0.03	90.0	0.04	-0.10	0.82	-0.33	0.89	0.10	0.26	0.78	1.00			
Na	-0.49	0.48	0.39	0.34	0.41	0.49	0.48	-0.19	-0.31	0.48	0.15	0.45	0.32	0.32	0.42	0.72	1.00		
Ca	-0.21	-0.23	-0.24	-0.21	-0.25	-0.25	-0.23		0.06 -0.01	0.97	-0.52	0.83	-0.13	0.39	0.98	0.80	0.44	1.00	
Mg	-0.60	0.59	99.0	0.64	0.65	0.62	0.71		0.46 -0.12	-0.07		0.55 -0.08	99.0	0.44	-0.20	0.10	0.18	-0.09	1.00
,					:		((,	1	\ 	(

Корреляция считается значительной, при r>0.25 (p<0.05) при выборке n=68.

Таблица 2. Значения коэффициентов корреляции г между концентрациями элементов в колонках

1.00 0.82 1.00 Hg 0.58 0.47 1.00 AsДО исследуемых станций плёса Йокостровская Имандра 0.42 99.0 0.92 1.00 Al -0.64 -0.49 -0.43 -0.70 1.00 $C_{\mathbf{r}}$ 0.98 -0.71 0.40 0.88 1.00 84 \mathbf{S} 0 -0.02-0.12 -0.140.39 0.42 1.00 0.03 Fe -0.03 0.04 Mn1.00 -0.010.49 0.00 0.71 0.01 -0.450.26 0.15 1.00 0.05 0.25 0.13 0.72 0.55 Pb -0.53 0.58 99.0 0.30 0.18 0.52 0.53 0.79 0.62 Cq-0.49 97.0 0.73 0.37 0.19 0.19 89.0 0.77 0.64 0.55 1.00 C_0 -0.15 -0.66 0.68 0.46 0.12 -0.01 0.85 0.84 0.29 0.56 0.85 1.00 Zn -0.720.70 0.78 0.12 -0.040.78 0.79 69.0 0.75 1.00 83 0.81 0.51 Z -0.10 -0.68 90.0 0.76 0.76 99.0 0.92 0.74 80 0.74 0.34 0.54 1.00 0.84 Cu Ö Слои -0.26 -0.34 .48 -0.24 -0.20 .43 -0.23 90.0 4. -0.07 0.05 0.12 0.20 0.04 1.00 9 9 9 Слои Mn Hg C_0 As Zn Cq Pb $C_{\mathbf{r}}$ A Ξ \mathbf{S} Д

Корреляция считается значительной, при r>0,2 (p<0,05) при выборке n=104

Таблица 3. Значения коэффициентов корреляции г между концентрациями элементов в колонках ПО исспелуемых станций плёса Бабинская Иманлра.

	Ь															1.00
	Hg														1.00	-0.12
	As													1.00	0.11	0.25
Б	Al												1.00	-0.39	-0.49	-0.01
мандр	Cr											1.00	0.64	-0.49	-0.21	0.12
ги круг	Sr										1.00	-0.36	-0.34	0.46	0.61	-0.10
Баоин	Fe									1.00	0.26	-0.45	-0.58	99.0	0.13	0.49
וווופכמ	Mn								1.00	0.30	0.74	-0.42	-0.46	0.27	0.63	-0.09
нции	Pb							1.00	0.75	0.18	0.82	-0.35	-0.55	0.28	0.83	-0.18
ДО исследуемых станции плеса ваоинская имандра	Сд						1.00	0.77	0.62	0.01	0.79	-0.25	-0.30	0.27	09.0	-0.19
едуем	Co					1.00	0.04	0.09	0.22	0.32	0.13	-0.05	-0.06	0.19	0.04	0.20
	Zn				1.00	0.03	0.57	0.58	0.48	-0.15	0.52	-0.02	-0.06	0.04	0.62	-0.21
1	Ä			1.00	0.67	0.20	0.82	08.0	99.0	-0.06	0.81	-0.16	-0.15	0.27	0.67	-0.12
	Cu		1.00	0.87	0.59	0.10	99.0	0.59	0.47	-0.19	0.73	-0.02	0.16	0.23	0.47	-0.12
	Слои	1.00	-0.21	-0.44	-0.17	-0.01	-0.47	-0.68	-0.47	-0.34	-0.52	0.54	0.54	-0.45	-0.46	0.05
		Слои	Cu	Ni	Zn	Co	Cd	Pb	Mn	Fe	Sr	Cr	Al	As	Hg	Ь

Корреляция считается значительной, при r>0.22 (p<0.05) при выборке n=81

Таблица 4. Факторная модель химического состава ДО исследуемых станций.

Стан	ции Больш	Станции Большой Имандры)bI	Станцик	і Йокостро	Станции Йокостровской Имандры	ндры	Станг	ции Бабинс	Станции Бабинской Имандры)bI
	Фактор 1	Фактор 2	Фактор 3		Фактор 1	Фактор 2	Фактор 3		Фактор 1	Фактор 2	Фактор 3
Слои	-0.59	0.31	09.0	Слои	0.18	-0.74	-0.22	Слои	-0.39	69:0-	-0.04
Cu	0.94	0.07	0.05	Cu	0.82	0.40	-0.03	Cu	0.88	-0.23	0.04
ïZ	96.0	60.0	0.02	Ξ	0.81	0.49	0.01	ïZ	96.0	0.03	0.05
Zn	06.0	90.0	-0.08	Zn	0.92	-0.04	-0.07	Zn	0.77	-0.07	-0.18
Co	96.0	0.10	0.03	Co	92.0	0.39	0.26	Co	0.18	-0.10	0.63
Cd	0.94	80.0	0.02	Cd	0.52	0.73	0.20	Cd	0.84	0.22	-0.07
Pb	0.99	90.0	-0.01	Pb	0.13	0.88	-0.06	Pb	0.83	0.46	90.0-
Mn	-0.11	0.01	-0.88	Mn	0.01	0.22	0.82	Mn	0.70	0.42	0.10
Fe	-0.28	0.11	-0.59	Fe	-0.07	90.0	0.95	Fe	-0.07	0.59	0.72
Sr	-0.12	-0.97	-0.02	Sr	0.95	0.10	-0.10	Sr	0.85	0.31	0.15
Cr	0.81	0.42	0.20	$C_{\mathbf{r}}$	-0.65	-0.42	0.37	Cr	-0.10	-0.81	-0.07
Al	-0.15	-0.90	0.05	Al	0.94	0.02	80.0	A1	-0.12	-0.89	-0.08
As	0.89	-0.01	-0.02	As	0.39	0.74	0.41	As	0.22	0.46	09.0
Hg	0.57	-0.39	0.03	Hg	0.72	0.44	-0.17	Hg	0.72	0.35	-0.13
Ь	-0.21	-0.94	-0.01	Ь	0.97	0.13	0.02	Ь	-0.16	-0.10	0.77
K	0.12	-0.93	90.0-								
Na	0.50	-0.63	0.18								
Ca	-0.16	-0.95	90.0-								
Mg	0.72	0.02	-0.50								
Общая дисперсия	8.50	5.28	1.84	Общая дисперсия	6.92	3.39	2.08	Общая дисперсия	5.73	3.22	1.98
Вес фактора %	45 %	28 %	10 %	Вес фактора %	46 %	23 %	14 %	Вес фактора %	38 %	21 %	13 %
7 0/2 Han Borotelle was magnated	THE POTOTOTION	7 0<1 m									

Нагрузки отмечаются при r>0.7.

При проведении факторного анализа (табл. 4) были выявлены три фактора, воздействующие на формирование химического состава ДО Бабинской Имандры. Первый фактор, доля которого в общей дисперсии составляет 38 %, имеет положительные корреляционные связи с Си, Ni, Zn, Cd, Pb, Mn, Sr, Hg. Вероятно, источником поступления этих элементов является аэротехногенное загрязнение выбросами предприятий региона, сток и поступление их с площади водосбора и трансграничный перенос глобальных загрязнителей из южных регионов.

Второй фактор, вклад которого в общую дисперсию равен 21 %, объединяет такие элементы, как Cr, Al. Коэффициент корреляции между этими элементами равен 0.64 (табл. 3). Также эти элементы положительно коррелируют с глубиной слоя, что говорит об уменьшении, концентрации Cr и Al по направлению к поверхности ДО. В целом, полученные, при проведении корреляционного и факторного анализа результаты для плёса Бабинская Имандра, соотносятся с ранее полученными в [7] результатами.

Выводы

Применение статистических методов в исследовании химического состава донных отложений позволило установить, что техногенные факторы, а именно, поступление загрязняющих веществ в составе стоков и выбросов промышленных предприятий, расположенных на водосборе, оказывают значительное воздействие на формирование химического состава донных отложений озера Имандра.

Список литературы

- 1. Моисеенко Т.И., Даувальтер В.А., Лукин А.А. и др. Антропогенные модификации экосистемы озера Имандра. М: Наука. 2002. 403 с.
- 2. Геоэкология донных отложений озер / В. А. Даувальтер. Мурманск: Изд-во МГТУ. 2012. 242 с.
- 3. Даувальтер В.А. Оценка экологического состояния водоемов по химическому составу донных отложений // Геология, геохимия и экология Северозапада России. Мат. I межд. науч. конф. С-Пб. 2005. С. 94-96.
- 4. Даувальтер В.А. Донные отложения источник информации для оценки экологического состояния водоемов и их водосборов // Мат. межд. науч.техн. конф. «Наука и образование». 2006. С. 830-834.
- 5. Даувальтер В.А., Ильяшук Б.П. Образование железо-марганцевых конкреций в донных отложениях озер Балтийского кристаллического щита // Труды III Ферсмановской научной сессии. 2006. С. 158-161.
- 6. Даувальтер В. А., Кашулин Н. А. Влажность донных отложений озера Имандра как маркер деятельности горно-перерабатывающей промышленности // Межд. науч-техн. конф. «Наука и образование». 2013а. С. 891-895.
- 7. Даувальтер В.А., Кашулин Н.А. Долговременные изменения химического состава донных отложений озера Имандра в зоне влияния стоков Кольской атомной электростанции // Труды КНЦ РАН. 2013б. № 3. С. 6-35.

- 8. Даувальтер В.А., Кашулин Н.А. Влияние разработки апатитонефелиновых месторождений на химический состав донных отложений озера Имандра // Экологическая стратегия развития горнодобывающей отрасли, сборник докладов Всерос. науч-техн. конф. с участием иностр. специалистов. 2014. Т. 1. С. 383-390.
- 9. Даувальтер В.А., Кашулин Н.А. Изменение концентраций никеля и меди в поверхностных слоях донных отложений оз. Имандра за последние полвека // Вестник МГТУ. 2015 а. С. 307-321.
- 10. Даувальтер В.А., Кашулин Н.А. Основные закономерности распределения тяжелых металлов в донных отложениях озер северо-западной части Мурманской области и приграничной территории сопредельных стран // Вестник КНЦ РАН. 2015 б. С. 101-112.
- 11. Даувальтер В. А., Кашулин Н. А. Оценка экологического состояния озера Имандра по результатам исследований химического состава донных отложений // Экологические проблемы северных регионов и пути их решения. Апатиты: Изд-во КНЦ РАН. 2016. С. 181-185.
- 12. Даувальтер В.А., Кашулин Н.А., Денисов Д.Б и др. Комплексная оценка экологического состояния оз. Имандра по результатам гидробиологических и гидрохимических исследований // Матер. VII науч. сессии Геол. ин-та и IV конф. Ассоц. науч. обществ Мурманской области. 2016. С. 21-31.
- 13. Денисов Д.Б. Современное состояние водорослевых сообществ планктона в зоне влияния Кольской АЭС (оз. Имандра) // Труды КНЦ РАН: прикладная экология Севера. 2013. Вып. 3. № 16. С. 68-94.
- 14. Skogheim O.K. Rapport fra Arungenprosjektet. Oslo. 1979. N. 2. P. 7.

АНАЛИЗ ТЕМПЕРАТУРЫ ГОРНЫХ ПОЧВ С ПРИМЕНЕНИЕМ МЕТОДОВ ОПИСАТЕЛЬНОЙ СТАТИСТИКИ

Штабровская И.М., Зенкова И.В.

Институт проблем промышленной экологии Севера КНЦ РАН, Апатиты, ishtabrovskaya@mail.ru; zenkova@inep.ksc.ru

Аннотация

В последние годы проводятся исследования температурного режима горных почв Мурманской области с использованием автономных программируемых терморегистраторов нового поколения [1-3]. Благодаря автономным терморегистаторам, мы получаем огромный массив первичных данных по температуре и влажности горных почв Хибинского горного массива, которые необходимо обрабатывать и анализировать. Получив первичный массив данных, его невозможно обработать без специальных компьютерных программ. Нами использован пакет анализа данных и его основные возможности: описательная статистика, дисперсионный анализ и корреляционный анализ.

Summary

In recent years, the researches the temperature regime of mountain soils in the Murmansk region has been studied using autonomous programmable thermoregulators of a new generation [1-3]. We get a huge array of primary data on the temperature and humidity of mountain soils of the Khibiny Mountain Massif, which must be processed and analyzed. Having received the primary data array, it can't be processed without special computer programs. We used a package of data analysis and its main features: descriptive statistics, variance analysis and correlation analysis.

Объекты и методы

Актуальность исследования температурного режима горных почв определяется несколькими аспектами:

- специфическими особенностями горного микроклимата, который отличается от климата предгорных ландшафтов и определяет особенности развития и функционирования горных почв и своеобразие их растительных, животных и микробных сообществ, а также оказывает влияние на климат окружающих предгорных ландшафтов.
- гетерогенностью почвенного покрова в горах, связанной с высотной поясностью экологических факторов и различной экспозицией горных экосистем;
- индикаторной ролью температурного режима уязвимых горных экосистем заполярных широт в комплексном мониторинге глобальных климатических процессов;
- появлением нового инструмента для учёта температурных показателей в виде автономных программируемых датчиков разной модификации.

Для целей исследования были выбраны 5 участков в горно-тундровом и горнолесном поясах с разной экспозицией в пределах горы Вудъяврчорр, расположенной в южной части Хибин (рис. 1).

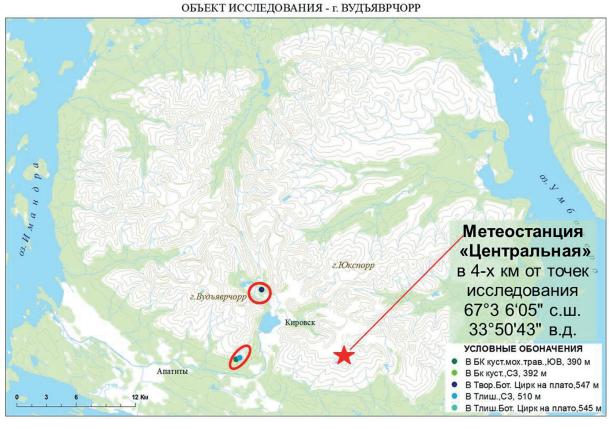


Рис. 1. Местоположение исследованных участков на территории Хибинского горного массива.

В поясе горной тундры два участка — тундра лишайниковая ($T_{\it лиш}$) и тундра вороничная ($T_{\it вор}$) выбраны на плато Ботанического цирка, третий участок — тундра лишайниковая ($T_{\it лиш-сз}$) — на склоне северо-западной экспозиции ущелья Скальное. Оба участка горнолесного пояса были выбраны на сходной высоте на склонах встречной экспозиции ущелья Скальное: участок берёзового криволесья кустарничково-травяно-мохового ($EK_{\it log}$) — на слоне ЮВ экспозиции, участок берёзового криволесья кустарничкового ($EK_{\it cs}$) — на слоне СЗ экспозиции (рис. 2). Работы были выполнены в полевой сезон 2016 г. в Ботаническом цирке и в сезон 2017 года в ущелье Скальное. Характеристика участков приведена в табл. 1.

В полевые сезоны 2016 и 2017 г. в подстилку всех участков на глубину 5 см были заложены автоматические терморегистраторы (термохроны) (рис. 3), запрограммированные на измерение температуры в подстилках каждые 2 часа (внутрисуточная динамика) в период с конца июня до начала октября (летняя динамика).

Сроки закладки и выемки термодатчиков были приурочены к периодам схода снега и начала заморозков в Хибинском горном массиве. Использовали датчики серии ТРВ-2 с техническими характеристиками, наиболее подходящими для климатических условий Мурманской области, в частности, с предельным диапазоном измерений температуры от –25 °C до +40 °C. После выемки термохронов из почвы данные переносили на компьютер при помо-

Ботанический цирк, 2016 г. Горно-тундровый пояс.





 $\mathit{Тундра}$ лишайниковая ($\mathit{T}_{\mathit{ЛИШ}}$).

 $Тундра вороничная (T_{BOP}).$

Ущелье скальное, 2017 г. Горно-тундровый пояс.





Тундровый пояс ущелья.

Тундра лишайниковая, $C3~(T_{{\it ЛИШ-C3}}).$

Горно-лесной пояс.





Березовое криволесье кустарничковотравяно-моховое (EK_{IOB}).

Березовое криволесье кустарничковое (Б K_{C3}).

Рис. 2. Участки горной тундры и березового криволесья, обследованные на плато и склонах горы Вудъяврчорр.

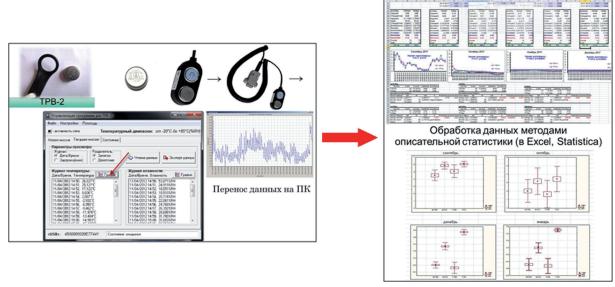
щи специального USB-переходника и управляющей программы (рис. 4). Полученные данные обрабатывались в программах Excel и Statistica-10 (описательная статистика, корреляционный и дисперсионный анализ).



Рис. 3. Закладка автоматических датчиков температуры (термохронов) в подстилку на глубину 5 см.

По 12 измерениям за каждые сутки рассчитывали среднесуточные значения температуры подстилок ($Tcym_{cp}$). По усреднённым среднесуточным значениям вычисляли среднемесячные температуры подстилок для каждого месяца ($Tmec_{cp}$), по значениям, усреднённым за весь период исследования, — среднелетние значения ($Tnem_{cp}$).

Сравнивали максимальные и минимальные внутрисуточные, среднесуточные и среднелетние температуры, а также суммы эффективных температур между соседними поясами в пределах одного склона — склона СЗ экспозиции (EK_{C3} и $T_{\mathit{ЛИШ-C3}}$) и между участками одного (тундрового) пояса в разные сезоны с использованием t-критерия Стьюдента. При сравнении динамики температуры между участками, исследованными в каждый из сезонов,



Puc. 4. Схема переноса информации с термохрона на компьютер и обработка при помощи программных пакетов Excel и Statistica-10.

учитывали сходный период измерений: в 2016 г. с 22.06.2016 по 05.10.2016 (106 сут); в 2017 г. — с 03.07.17 по 20.09.17 (80 сут). Сравнение общей динамики и показателей температуры для 5 участков за два вегетационных сезона проводили для двух наиболее тёплых месяцев — июля и августа, т.е. за период 60 суток.

Методом корреляционного анализа оценивали зависимость летней динамики среднесуточной температуры подстилок и атмосферного воздуха за аналогичный период исследования. Динамику температуры атмосферного воздуха за период исследования анализировали по данным метеостанции «Центральная» [7] в 4-х км от исследованных участков (рис. 1). Для оценки достоверности коэффициентов корреляции при корреляционном анализе с метеоданными использовали t-критерий Стьюдента.

Таблица 1. Характеристика участков Ботанического цирка и ущелья Скальное.

		нический к, 2016 г.	Ущель	е Скальное, 2	017 г.	Всего
Участок	Тундра лишайниковая	Тундра вороничная	Тундра лишайниковая на склоне	Березовое криволесье кустарничковое	Березовое криволесье кустарничково-травяно-моховое	
Экспозиция склона		плато	СЗ	СЗ	ЮВ	2
Аббревиатура	$T_{JJJJJJJ}$	T_{BOP}	Т _{лиш-С3}	EK_{C3}	БК _{ЮВ}	5
Горно- растительный пояс	I	орно- ндровый	Горно- тундровый	_	овых криво-	2
Высота над ур. м., м	545	547	510	392	390	
Координати	67°3	8'34" с. ш.	67°36'01,8"	67°35'56,8"	67°35'56,9"	
Координаты	33°3	9'12" в. д.	33°36'16,6"	33°35'44,3"	33°35'42,4"	

Вариабельность ежемесячной (за июль, август, сентябрь) и летней (с июля по сентябрь) динамики температуры подстилок оценивали по коэффициенту вариации CV, %.

Достоверность различий температурной динамики подстилок между участками разных высотных поясов и разной экспозиции оценивали методом дисперсионного анализа с использованием F-критерия Фишера. Все оцениваемые параметры сведены в табл. 2.

Таблица 2. Температурные показатели, рассчитанные на основе данных термохронов.

	Динамик	а температуры под	стилок
Показатели	Суточная, 12 показаний с интервалом 2 часа	Месячная, за VII, VIII, IX	Летняя, за сезон VII – IX
Минимальные температуры, ° С	$T_{\scriptscriptstyle CVT{ m min}}$	$T_{ m extit{MECmin}}$	$T_{_{J\!E T m min}}$
Максимальные температуры, ° С	$T_{\scriptscriptstyle CVT{ m max}}$	$T_{\rm {\it MEC}max}$	$T_{_{\it J\!ET} m max}$
Колебания температуры, ° С	$T_{\rm {\it CVT}max} - T_{\rm {\it CVT}min}$	$T_{\rm {\it MECmax}} - T_{\rm {\it MECmin}}$	$T_{_{\rm JETmax}} - T_{_{\rm JETmin}}$
Вариабельность температуры (коэфф. вариации, %)	$CV_{\scriptscriptstyle CVT}$	$CV_{{\scriptscriptstyle MEC}}$	$CV_{_{J\!ET}}$
Среднее значение температуры, ° С	Среднесуточная температура $T_{{\it CYT}{\it cp}}$	Среднемесячная температура $T_{{\it MEC}{\it cp}}$	Среднелетняя температура $T_{\it ЛЕТ cp}$
Сумма положительных температур, ° С	не рассм.	$\begin{split} & \sum T_{MECcp} > 0 \\ & \sum T_{MECcp} \geq +5 \\ & \sum T_{MECcp} \geq +10 \end{split}$	$\sum T_{\text{NETcp}} > 0$ $\sum T_{\text{NETcp}} \ge +5$ $\sum T_{\text{NETcp}} \ge +10$

Для визуализации данных по средним значениям температуры горных подстилок в разных высотных поясах и на разных горах Хибинского массива выполняли построение карт в программном пакете ArcGIS (версия 10.4) компании ESRI.

Результаты

Результаты исследования температурного режима, полученные в 2016 и 2017 годах [6, 7], сравнивали с данными собственных исследований в 2014 и 2015 годах, выполненных на склонах Хибинских гор Юкспорр и Суолайв в рамках подготовки бакалаврской квалификационной работы [4]. Также были использованы данные по температуре подстилок на склонах гор Рисчорр, Партомчорр и в межгорной (Путеличорр/Парттомчорр) долине реки Кунийок, полученные в.н.с. Лаборатории наземных экосистем ИППЭС ФИЦ КНЦ РАН И. В. Зенковой в 2013 и 2015 гг. [2, 3, 5] (табл. 3). Общее число участков, на которых были выполнены исследования температуры, составило 11.

Для 5 участков, исследованных в горно-лесном и горно-тундровом поясах горы Вудъяврчорр в полевые сезоны 2016 и 2017 гг., проведено сравнение температурных показателей и их динамики за два наиболее тёплых летних месяца — июль и август (60 суток). Диапазон среднесуточных значений температуры ($Tcym_{cp}$) в подстилках на глубине 5 см составил от +5 до +17°C (рис. 5).

Таблица 3. Местоположение участков в Хибинском горном массиве, на которых выполнены измерения температуры подстилок в 2013-2017 гг.

Гора	Экспозиция склона	Горно- растительный пояс	Координаты	Высота над ур. м., м
Партомчорр	ЮВ	Северо-таежный	67°49'39" с. ш., 33°40'18" в. д.	290-310
	С	Горно-тундровый	67°49'17", 33°40'04"	430
Рисчорр	СЗ	Лесотундровый	67°49'22", 33°40'10"	360-380
	СЗ	Северо-таежный	67°49'36", 33°40'06"	290-310
Долина реки		Горно-лесной	67°50'14.8", 33°39'37.3"	235
Кунийок (между горами Путеличорр и Партомчорр)	межгорная долина	Горно-лесной(ГЛ)	67°50'16.4", 33°39'22.5"	236
	плато	Горно-тундровый	67°39'32", 33°46'44"	710-730
Юкспорр	ЮВ	Горно-тундровый	67°39'06", 33°46'44"	625-645
	ЮВ	Лесотундровый	67°38'59", 33°47'17"	460-490
	3	Горно-тундровый	67°39'32",34°10'03"	387-550
Суолайв	3	Лесотундровый	67°39'30",34°10'13"	328-340
	3	Горно-лесной	67°39'26",34°10'14"	260-270

Наибольшим прогревом на протяжении июля и до 10 августа характеризовалась подстилка $T_{\text{лиш}}$ на площадке Ботанического цирка, наименьшим — $T_{\text{лиш-C3}}$ В этот период различия в температурной динамике между двумя горно-тундровыми участками определялись в первую очередь их положением на разных площадках (Ботанический цирк и ущелье Скальное), которые были исследованы в разные полевые сезоны (2016 и 2017 гг.), достоверно различающиеся по температурным условиям сезоны (рис. 6).

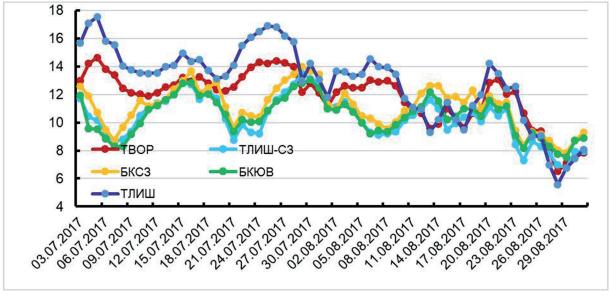


Рис. 5. Динамика среднесуточной температуры подстилок (Tсут $_{cp}$, $^{\circ}$ C) за июльавгуст на исследованных участках горно-лесного и горно-тундрового поясов на площадке Ботанического цирка и в ущелье Скальное (60 сут, сезоны 2016, 2017 гг.).



Рис. 6. Достоверное различие величины и динамики среднесуточной температуры атмосферного воздуха на протяжении вегетационных сезонов 2016 и 2017 гг.

Однако, начиная с 20-ых чисел августа, в подстилках всех участков наблюдалась сходная динамика $Tcym_{cp}$, связанная с уменьшением межсезонных различий в динамике $Tcym_{cp}$ атмосферного воздуха (см. рис. 5, 6). В частности, устойчивое осеннее снижение $Tcym_{cp}$ <+10° С в тундровых подстилках на площадке Ботанического цирка в сезон 2016 г. отмечено с 25 августа и на всех участках в ущелье Скальное в сезон 2017 г. – с 23 августа.

Следовательно, к концу вегетационного сезона, когда температура воздуха имеет сходные или более низкие значения по сравнению с температурой подстилок, различия в температурной динамике, определяемые положением участков в пределах горы Вудъяврчорр, а также межгодовыми различиями в прогреве атмосферного воздуха, становятся невыраженными.

Достоверная корреляция летней динамики температуры в горных подстилках с ходом $Tcym_{cp}$ температуры атмосферного воздуха в сезоны 2016 и 2017 гг. установлена для всех исследованных участков (рис. 7). Коэффициент корреляции превысил уровень 0.9 и был выше для более сухой и тонкой подстилки тундры лишайниковой в Ботаническом цирке (0.96).

Средние за два месяца значения температура ($Tnem_{\rm cp}$) варьировали от $+10.3\pm0.2~^{\circ}$ С в $T_{{\it ЛИШ-C3}}$ на склоне СЗ экспозиции ущелья Скальное до $12.9\pm0.4~^{\circ}$ С в $T_{{\it ЛИШ}}$ на площадке Ботанического цирка, при этом как наименьшие, так и наибольшие значения $Tnem_{\rm cp}$ были характерны для подстилок горно-тундрового пояса (рис. 8).

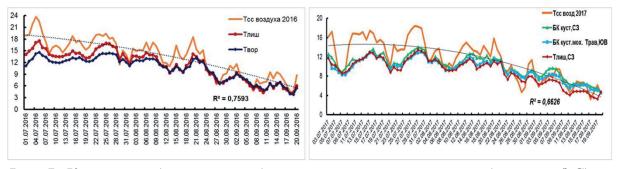


Рис. 7. Корреляция динамики среднесуточной температуры подстилки (° С) на участках горно-лесного и горно-тундрового поясов г. Вудъяврчорр с температурой атмосферного воздуха в сезоны 2016 и 2017 гг.

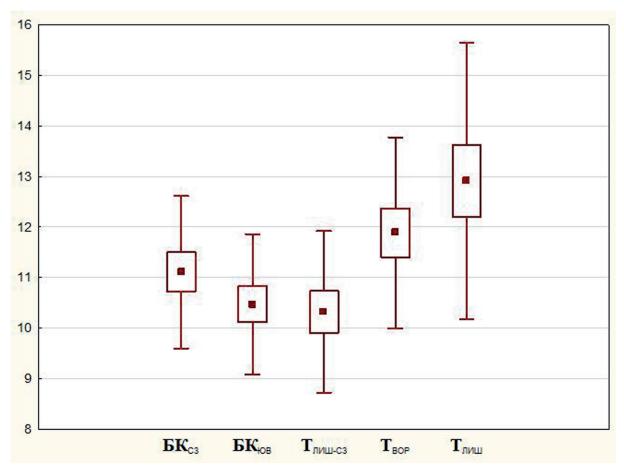


Рис. 8. Средние значения температуры подстилки на участках березового криволесья и горной тундры в ущелье Скальное и на площадке Ботанического цирка за июль-август 2016 и 2017 г.г. (Тлет $_{cr}$, °C; 60 сут).

Сравниваемые значения достоверно отличались между всеми участками, но в большей степени — между более сухой и тонкой подстилкой $T_{\text{лиш}}$ и более холодной и влажной EK_{IOB} , а в меньшей степени — между $T_{\text{лиш}}/T_{\text{BOP}}$ и T_{BOP}/EK_{C3} (табл. 4).

Таблица 4. Значения t-критерия Стьюдента при сравнении средних за июль-август значений температуры подстилок между пятью исследованными участками.

	$T_{\it JIMII}/T_{\it BOP}$	$T_{\mathit{ЛИШ_C3}}T_{\mathit{ЛИШ}}$	$T_{\it JMIIICS}/T_{\it BOP}$	$T_{\text{ЛИШ}}/\mathcal{B}\mathcal{K}_{C3}$	$T_{\it ЛИШ}/\it EK_{\it IOB}$	T_{BOP}/BK_{C3}	T_{BOP}/BK_{IOB}	EK _{C3} /EK _{IOB}
t _{st}	2.39	6.33	4.90	4.47	6.15	2.49	4.69	2.41

Различие достоверно при $t_{(118;0.01)} \ge 2.61$.

Общей особенностью динамики температуры подстилок в самые тёплые летние месяцы была её большая вариабельность в подстилках горнотундровых поясов (как на площадке Ботанического цирка в 2016 г., так и на склоне СЗ экспозиции в 2017 г.) по сравнению с участками на склонах разной экспозиции горно-лесного пояса (рис. 9). Это объясняется сглаживанием температурных колебаний в подстилках под пологие леса.

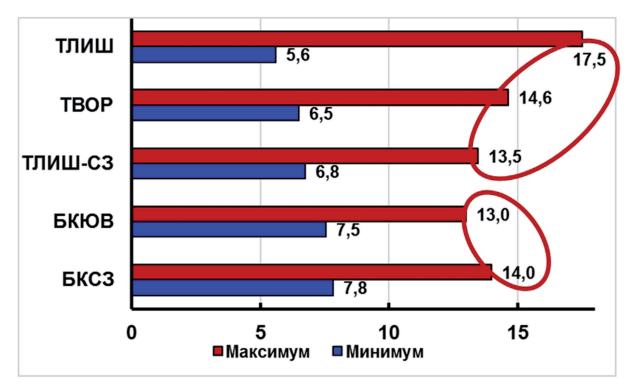


Рис. 9. Степень варьирования среднесуточной температуры подстилок на исследованных участках горно-тундрового и горно-лесного поясов за июль-август 2016 и 2017 гг. (значения коэффициента вариации CV, %; п сут=60).

Различия между участками горно-лесного пояса определялись преимущественно различиями в максимальных среднесуточных значениях температуры подстилок и, в меньшей степени, – различиями минимальных значе-

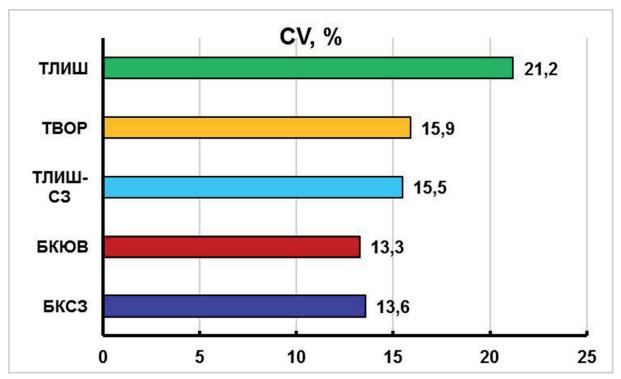


Рис. 10. Минимальные и максимальные значения среднесуточной температуры подстилок горно-тундрового и горно-лесных поясов на исследованных участках за июль-август 2016 и 2017 г.г. (60 сут).

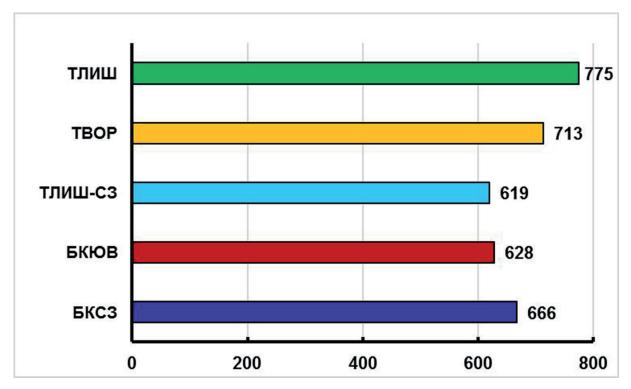


Рис. 11. Сумма среднесуточных температур ($\sum T$ сут $_{cp}$, $^{\circ}$ С) на исследованных участках за июль-август (60 сут, сезоны 2016-2017 гг.).

ний. В горно-тундровых подстилках влияние на различие в вариабельности температурной динамики подстилок оказывала разница как в минимальных, так и в максимальных значениях температуры (рис. 10).

Сумма положительных температур $\sum Tcym_{cp}$ подстилок за два наиболее тёплых летних месяца составила 620-670°С в горных подстилках ущелья Скальное в более прохладное лето 2017 г. и превысила 700°С в горнотундровых подстилках Ботанического цирка в более тёплый сезон 2016 г. (рис. 11).

Обобщая полученные данные по температурным показателям и их летней динамике в экосистемах горы Вудъяврчорр, можно выделить три фактора, оказывающие дифференцирующее влияние на температурный режим горных подстилок: «сезонность», «экспозиция горного склона» и «высотная поясность». Фактор сезонности является основным и определяет сезонное изменение температуры атмосферного воздуха, которая влияет на процессы прогрева и охлаждения подстилок. Следовательно, он оказывает влияние на сезонную смену процесса поглощения и излучения тепла подстилками в осенний период. Высотная поясность определяет достоверные различия среднемесячных, минимальных и максимальных внутрисуточных и среднелетних значений температуры в подстилках; различия в динамике среднесуточных температур, в её сезонной вариабельности, в сроках перехода через среднесуточное значение температуры <+5°C в конце вегетационного сезона (в сентябре). Эти различия проявляются для горно-лесного и горнотундрового поясов на протяжении всего вегетационного сезона, причем усиливаются от июля к сентябрю, то есть так же подвержены влиянию фактора сезонности. Экспозиция горных склонов определяет различия в таких показателях температурного режима горно-лесных подстилок, как: среднемесячные и максимальные значения температуры, число суток с эффективными $Tcym_{cp} \ge +10$ и $<+10\,^{\circ}$ С, сумма положительных температур в подстилке. Однако достоверное дифференцирующее влияние этого фактора установлено для горно-лесных подстилок только в самый тёплый месяц вегетационного сезона — июль.

Заключение

Благодаря регистраторам температуры нового поколения – термохронам – появилась возможность удалённой записи данных (температуры и влажности) горных почв.

В связи с развитием систем вычисления стала возможна обработка огромных массивов полученных данных. При помощи вышеупомянутых методов стало возможным измерение значимости и надёжности полученных результатов, оценка достоверности проверяемых гипотез, а также выделение из множества воздействующих факторов наиболее существенных.

Список литературы

- 1. Зенкова И.В. Летняя динамика температуры в горных почвах заповедника «Пасвик» // Вестник МГТУ. 2013. Т. 16. № 4. С. 715-725.
- 2. Зенкова И.В. Динамика температуры подстилок в высотном градиенте горы Юкспорр (Хибинский массив) // Проблемы изучения и сохранения растительного мира Восточной Фенноскандии». Апатиты. 2015а. С. 34-35.
- 3. Зенкова И.В. К характеристике летней динамики температуры подстилок в горах Хибинского массива (Мурманская область) // Фундаментальные и прикладные вопросы лесного почвоведения. Сыктывкар: Коми НЦ УрО РАН. 2015 б. С. 85-87.
- 4. Штабровская И.М. Летняя динамика температуры в горных почвах Хибин на примере гор Юкспорр и Суолайв / Выпускная квалификационная работа программы бакалавриата по направлению подготовки 05.03.06 Экология и природопользование. Апатиты. 2016. С.59
- 5. Штабровская И.М. Сравнительная динамика температуры подстилки в лишайниковой и кустарничковой тундре Хибин // Труды XIV Всерос. (с межд. уч.) Ферсмановской науч. сессии ГИ КНЦ РАН. Апатиты. 2017. С. 461-464.
- 6. Штабровская И.М. Исследование температуры горных почв хибин с использованием автоматических термодатчиков // Межд. науч.-практич. конф. Использование современных информационных технологий в ботанических исследованиях. Апатиты. 2017. С. 134-136.
- 7. Расписание погоды [сайт] URL: http://rp5.ru

Дополнение к главе "Геология и геофизика"

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ФАКТОРНОГО АНАЛИЗА ДЛЯ ЭКСПРЕСС-ДИАГНОСТИКИ МИНЕРАЛЬНОГО СОСТАВА ГЕОЛОГИЧЕСКИ СЛОЖНЫХ ОБЪЕКТОВ ПО РЕНТГЕНОДИФРАКЦИОННЫМ ДАННЫМ

Козлов Е.Н., Фомина Е.Н.

Геологический институт КНЦ РАН, Апатиты, kozlov_e.n@mail.ru

Аннотация.

В статье представлен новый метод статистического сопоставления минералогических и геохимических данных. На примере карбонатитов Петяйян-Вары (Вуориярви, Кольский регион) показано, что применение этого метода к геологически сложным объектам позволяет 1) экспрессно определить минеральный состав пород на уровне породообразующих и второстепенных минералов; 2) в ряде случаев проследить парагенетические связи; 3) выявить роль каждой из минеральных фаз в распределении петрогенных и редких элементов.

Summary.

The paper presents a new method of statistical comparison of mineralogical and geochemical data. On the example of the Petyayan-Vara carbonatites (Vuorijarvi, Kola region), it is shown that the application of this method to geologically complex objects allows 1) to make an express determination of the mineral composition of rocks (both main and secondary minerals); 2) in some cases to trace paragenetic relations; 3) to identify the role of each mineral phase in the distribution of major and trace elements.

Многие геологи, независимо от сферы их научных интересов, сталкиваются с проблемой сопоставления минералогических и геохимических данных. При отборе геохимических проб геологи стремятся к их максимальной представительности, для чего прибегают к специальным методикам пробоотбора (отбор штуфов «конвертом», сборно-сколковое и бороздовое опробования). Цель всех отмеченных методик – охарактеризовать значительный объём породы. В то же время при минералогических исследованиях, напротив, доминируют локальные методы (микрозонд, LA-ICP-MS и др.), а сами препараты (шлифы, шайбы) представляют двухмерные срезы пород субдюймовой площади. Таким образом, происходит сравнение объектов разного масштаба: геохимические данные характеризуют значительный объём породы, в то время как минералогические – лишь её параметры «в точке», хотя эти параметры и экстраполируются на тот же объём, для которого получена геохимическая информация. Данная экстраполяция не корректна в первую очередь для такситовых пород, к каковым относятся всевозможные метасоматиты, а также многие магматические и метаморфические образования. Предлагаемая нами методика основана на сопоставлении минералогических и геохимических данных, извлечённых из одного и того же объёма вещества, то есть имеющих «единый масштаб».

В качестве источника минералогической информации о породах были

выбраны рентгеновские дифрактограммы их валовых проб, что базировалось на следующем наборе свойств дифрактограмм:

- порошковая дифракционная картина является индивидуальной характеристикой кристаллического вещества;
- каждая кристаллическая фаза дает всегда одинаковый дифракционный спектр, характеризующийся набором межплоскостных расстояний d(hkl), которые также могут быть представлены в величинах угла 2Θ , и соответствующих интенсивностей линий I(hkl), присущих только данной кристаллической фазе;
- рентгенодифракционный спектр от смеси индивидуальных фаз является суперпозицией их дифракционных спектров;
- соотношение интенсивностей присутствующих в конкретном образце кристаллических фаз пропорционально содержанию фаз в нём.

Именно на этих свойствах основываются качественные и количественные методы рентгенофазового анализа [1, 2]. Для нас важным также является то, что интенсивности отдельных пиков каждого минерала пропорциональны друг другу, а значит скоррелированы. Это позволило при разделении скрытой в дифрактограммах информации, относящейся к различным минеральным фазам, в качестве «сита» использовать факторный анализ (ФА). Данный вид статистической обработки ориентирован именно на выделение скоррелированных составляющих данных.

Подробно описания различных методик ФА изложены во многих публикациях, в том числе в свете их применения к геологическим объектам (например, [3, 4]). Мы приведём лишь необходимые общие сведения. Алгоритмы факторного анализа сводятся к понижению размерности признакового пространства за счёт определения небольшого числа скрытых факторов, изменчивость которых объясняется изменчивостью всех наблюдаемых признаков (переменных), связанных с каждым из изученных объектов (в нашем случае — проб). Сами факторы являются линейной комбинацией наблюдаемых переменных, коррелируемых между собой. Необходимо отдельно отметить важное понятие «факторная нагрузка» (в тексте — r^{FA}), применяемое для описания роли признака в формировании определенного фактора. Это — коэффициент корреляции между переменной и фактором, и для оценки его статистической значимости применяются стандартные тесты.

Схематично процедура выделения факторов описывается следующим образом. Первый из факторов подбирается из того условия, чтобы после его исключения из всех наблюдаемых переменных коэффициенты корреляций между всеми парами наблюдаемых переменных были минимальными. Затем процесс повторяется для переменных с исключенным влиянием уже выявленного фактора (факторов). Для упрощения интерпретации результатов на заключительном этапе обычно прибегают к процедуре ортогонального или косоугольного вращения факторов, задача которого состоит в достижении так называемой простой структуры данных. Грубо говоря, структу-

ра считается простой в том случае, если большинство факторных нагрузок каждого «повернутого» фактора близки к нулю, и лишь некоторые из них относительно велики. Цель вращения заключается в представлении каждой исходной переменной лишь несколькими (в идеальном варианте — одним) факторами.

В основу исследования легла коллекция из 43 образцов редкоземельных карбонатитов поля Петяйян-Вара (девонский щелочно-ультраосновный карбонатитовый массив Вуориярви). Эти породы, образовавшиеся в ходе нескольких наложенных метасоматических событий [5], характеризуются структурно-конституционной такситовой текстурой и чрезвычайно сложны для петрографического изучения.

Каждый образец помимо рентгеновских данных (3351 переменная) был дополнительно охарактеризован содержаниями петрогенных и редких элементов (еще 47 переменных). В связи с тем, что объём информации, сосредоточенный в «геохимических переменных» составил порядка 1 % от всего объёма первичных данных, они не оказали какого-либо заметного влияния на структуру выделенных факторов. Это было подтверждено численным экспериментом: графики факторных нагрузок факторов, выделенных лишь по дифрактограммам, аналогичны таковым для факторов с геохимическим «прицепом». В то же время именно этот приём позволил связать изначально «минералогические» факторы с геохимией. Факторы были рассчитаны в программном пакете IBM SPSS Statistics v.23.

Факторный анализ выделил более 3 тысяч факторов, из которых первые 42 объясняют 100.000 % совокупной дисперсии переменных. Мы не интерпретировали все факторы, поскольку, учитывая факторные нагрузки «геохимических» переменных, только 14 из 42 факторов оказали статистически значимое влияние на распределение петрогенных (табл. 1) и большинства редких (табл. 2) элементов. Поэтому изучались только эти 14 факторов. Наше исследование показало, что за данные факторы «отвечают» следующие минералы (в порядке убывания объясненной фактором дисперсии): барит, доломит, кальцит, анкилит—(Се), микроклин, флогопит, фтор-апатит, кварц, стронцианит, гётит, альбит, эгирин, гидроксилбастнезит—(Се) и анкерит (рис. 1).

Основанием для интерпретации послужило то, что графики их факторных нагрузок имеют отчётливое сходство с рентгеновскими спектрами соответствующих минералов из специализированных баз данных (например, ICDD PDF-2, AMCSD, RRUFF). Проиллюстрируем это на примере фактора фтор-апатита (рис. 2), соответствующего спектру (7) на рис. 1. Смещение положений пиков графиков факторных нагрузок r^{FA} от пиков на дифрактограммах стандартов соответствующих минералов не превышает $\pm 0.1^{\circ}$, хотя графики и отличаются морфологией из-за различий интенсивности этих пиков. Принимая это во внимание, мы определили минеральные фазы, ответственные за каждый фактор, путём поиска их в рентгеновских базах данных,

Таблица 1. Факторные нагрузки (r^{EA}) петрогенных компонентов на интерпретируемые факторы

	_	_	_	_	וומ גו			Turk yanı	- Indo	_		_		
Компо-	Brt*	Dol	Cal	Anc	Мс	Phl	Ap	Qz	Str	Gth	Ab	Aeg	Bas	Ank
SiO_2	-0.23	-0.30	-0.04	-0.01	92.0	0.20	0.04	0.38	-0.05	0.08	0.16	0.14	0.07	0.04
TiO_2	-0.25	-0.24	-0.05	-0.14	0.75	0.24	0.06	-0.06	-0.07	-0.08	-0.05	0.03	-0.11	0.00
Al_2O_3	-0.22	-0.31	0.03	-0.10	0.82	0.30	0.14	-0.08	-0.05	-0.01	0.18	0.03	-0.03	0.04
$\mathrm{Fe_2O_3}$	-0.34	-0.39	0.03	-0.18	0.36	0.25	0.15	-0.09	-0.04	0.45	0.14	0.20	-0.06	0.01
FeO	0.29	0.47	-0.42	-0.32	0.02	-0.03	0.02	-0.02	60.0-	-0.16	-0.17	-0.08	0.03	0.37
FeO(T)	-0.21	-0.17	-0.20	-0.38	0.41	0.26	0.18	-0.11	-0.10	0.41	90.0	0.18	-0.05	0.21
MnO	0.36	0.56	-0.23	-0.23	-0.39	-0.10	-0.05	-0.09	-0.07	-0.01	0.12	-0.02	0.13	0.12
MgO	0.13	0.59	-0.56	-0.25	-0.42	-0.03	-0.17	-0.04	0.00	-0.01	90.0-	-0.05	-0.03	-0.05
CaO	-0.25	0.02	0.64	-0.26	-0.54	-0.18	90.0	-0.21	-0.11	-0.08	-0.10	-0.07	-0.05	-0.13
Na_2O	-0.17	-0.29	0.07	-0.10	0.31	0.04	0.08	-0.04	-0.01	0.00	0.41	0.75	-0.02	0.00
K_2O	-0.21	-0.27	0.01	-0.13	0.84	0.29	0.15	-0.07	90.0-	0.00	0.07	0.03	-0.04	0.04
P_2O_5	-0.17	-0.24	-0.02	-0.10	0.10	0.10	0.92	-0.08	-0.04	-0.04	-0.04	-0.04	0.00	0.03
CO_2	-0.13	0.41	0.04	-0.11	-0.73	-0.25	-0.26	-0.11	0.03	-0.13	-0.11	-0.13	-0.01	-0.08
Н	-0.17	-0.27	-0.02	-0.07	90.0	69.0	0.62	-0.02	0.03	-0.04	-0.02	-0.01	0.10	0.00
S(T)	0.93	0.01	-0.12	0.25	-0.11	-0.06	-0.04	-0.03	-0.07	-0.01	-0.02	-0.04	-0.01	90.0
Cl	0.03	0.00	-0.19	-0.07	0.14	-0.04	-0.02	0.03	0.04	0.36	0.04	0.01	-0.12	0.11
SrO	-0.08	-0.15	-0.03	0.72	-0.24	-0.06	-0.07	0.04	0.59	-0.06	-0.04	-0.05	0.04	-0.04
BaO	0.92	0.02	-0.12	0.19	-0.13	-0.06	-0.07	-0.06	-0.08	-0.03	-0.03	-0.04	-0.01	60.0
$\Sigma \mathrm{REE}_2\mathrm{O}_3$	0.02	-0.23	-0.05	0.88	-0.20	90.0-	-0.05	0.14	0.16	-0.01	-0.06	-0.05	0.17	0.01

Здесь и в табл. 2 статистически значимые нагрузки выделены жирным.

* В табл. 1 и 2 и на рис. 1 факторы обозначены аббревиатурами соответствующих минералов: Brt – барит, Dol – доломит, Cal – кальцит, Anc - анкилит-(Ce), Мс - микроклин, Phl - флогопит, Ар - фторапатит, Qz - кварц, Str - стронцианит, Gth - гётит, Ab - альбит, Aeg - эгирин, Bas гидроксилбастнезит-(Ce), Ank – анкерит.

179

- 1		Табли	Таблица 2. Факторные н	кторны	е нагруз	агрузки $(r^{E\!A})$ редких элементов на интерпретируемые факторы	редких	элемент	ов на и	нтерпре	тируем	ые факт	оры	
Brt		Dol	Cal	Anc	Mc	Phl	Ap	Óz	Str	Gth	Ab	Aeg	Bas	Ank
-0.13		0.00	-0.07	-0.10	0.48	0.24	90.0	-0.06	0.03	-0.10	0.03	0.13	-0.13	-0.07
-0.19	_	-0.20	-0.10	-0.18	0.51	0.34	90.0	-0.13	0.22	-0.14	-0.09	0.03	-0.19	0.12
-0.20	0	-0.23	-0.04	-0.13	90.0	-0.02	0.82	-0.01	0.00	0.10	-0.05	0.35	-0.01	-0.01
-0.26	2	-0.29	-0.02	-0.09	0.14	0.02	0.67	-0.05	0.17	0.10	-0.07	0.47	-0.05	-0.01
-0.26	9	-0.25	-0.01	-0.16	0.13	0.17	0.82	0.03	90.0	0.07	90.0-	-0.07	0.12	0.01
0.21	_	-0.23	-0.03	0.10	-0.20	-0.10	0.32	0.14	0.03	-0.07	-0.09	-0.12	0.49	0.22
-0.08	∞	-0.18	0.02	90.0-	0.14	96.0	90.0	-0.03	-0.01	0.00	0.02	0.03	-0.01	-0.01
-0.20	0	-0.28	0.02	-0.12	0.73	0.52	0.12	-0.08	90.0-	-0.01	0.11	60.0	-0.03	0.04
-0.09	6	-0.04	-0.03	0.05	0.12	69.0	0.08	-0.08	-0.12	-0.11	0.04	90.0-	-0.07	90.0
-0.20	0	-0.31	0.13	90.0-	0.05	-0.01	0.87	0.03	0.01	0.05	-0.01	-0.01	-0.04	-0.01
0.02	7	-0.23	-0.05	0.89	-0.20	90.0-	-0.05	0.12	0.14	-0.03	-0.05	-0.04	0.14	-0.01
0.04	4	-0.22	-0.07	0.87	-0.21	-0.07	-0.06	0.16	0.16	-0.02	90.0-	-0.05	0.21	0.01
0.05	2	-0.23	-0.08	98.0	-0.21	-0.07	90.0-	0.17	0.18	0.00	90.0-	-0.05	0.24	0.04
0.04	4	-0.23	-0.07	0.87	-0.21	90.0-	-0.05	0.15	0.17	0.01	-0.05	-0.05	0.22	0.05
0.18	∞	-0.29	-0.09	0.77	-0.23	-0.09	0.07	0.22	0.12	0.05	-0.05	-0.08	0.30	0.05
0.23	3	-0.35	-0.10	0.72	-0.24	-0.10	0.21	0.18	0.11	90.0	-0.02	-0.07	0.27	0.12

-0.06 -0.06 0.23 0.03 -0.05 -0.07 0.23 0.01
0.08 -0.01 0.00
0.04 0.04 0.04 0.03
2
0.72
-0.36 -0.02 0.72 -0.20
-0.02 0.72

ориентируясь по положениям пиков на графиках факторных нагрузок.

Согласно проведённому исследованию, все минералов-«факторообразо-вателей» по содержаниям являются либо главными, либо второстепенными, по меньшей мере, в одном из образцов изученной коллекции. Таким образом, приведённый выше перечень фаз почти полностью соответствует набору породообразующих и вторичных минералов в образцах коллекции Петяйян-Вары. Единственными исключениями стали оксиды титана, которые не образуют своего собственного фактора, хотя этими минералами и богаты некоторые разновидности карбонатитов Петяйян-Вары. Для каждого образца были рассчитаны значения факторов, максимальные величины которых точно «предсказали», какие пробы наиболее насыщены тем или иным из рассматриваемых минералов. Это ещё раз подтвердило то, что выделенные факторы напрямую связаны с минеральным составом пород. Таким образом, в предлагаемом нами подходе отсутствует одна из основных причин критики факторного анализа, заключающаяся в сложности интерпретации получаемых результатов.

Каждый рассматриваемый фактор отмечен значимыми нагрузками одного или нескольких химических элементов, часто достигающими величины 0.8 и более. Эти «элементы-индикаторы» в большинстве своем либо входят в кристаллохимическую формулу соответствующего минерала, либо являются его типичными примесями. Такова, например, природа высоких нагрузок бария (0.92) и серы (0.93) на фактор барита, или лития (0.96) – на фактор биотита. С одной стороны, подобные высокие нагрузки позволяют существенно облегчить определение минерала, отвечающего фактору. В то же время концентрации самих этих элементов являются геохимическими маркерами, позволяющими произвести грубую оценку содержания минерала в породе, что подтверждено петрографическим исследованием. Например, в тех карбонатитах, где было определено менее 10 ppm Li, слюда отсутствовала. В породах, где Li более 10 ppm, объёмные содержания слюды растут пропорционально концентрациям этого элемента и достигают своего максимума в образце, максимально обогащённом литием (450 ррт). Интенсивности рефлексов минерала в дифрактограмме валовой пробы зависят от содержания этого минерала. Поэтому высокая факторная нагрузка элементов-индикаторов свидетельствует только о том, что концентрации таких элементов пропорциональны содержаниям соответствующих минералов-«факторообразователей», что и продемонстрировано на примере Li и биотита.

В этом свете, однако, высокие нагрузки циркония (0.82) и гафния (0.67) на фактор апатита, а также титана (0.70), ниобия (0.48) и тантала (0.51) – на микроклин и ряд других не находят объяснения с позиции кристаллохимии. Кроме того, тщательный анализ графиков r^{FA} показал, что, несмотря на высокое разрешение предлагаемого метода, позволившего отделить Fe-доломит

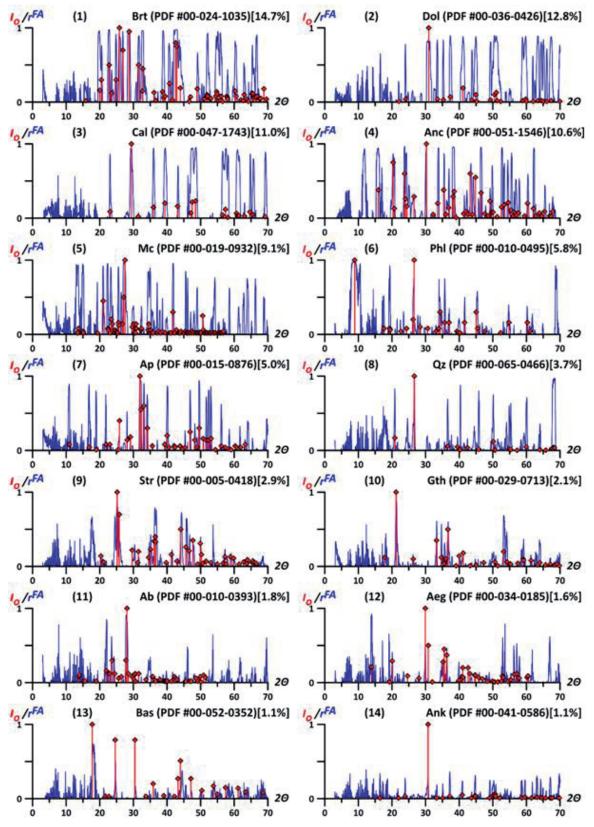


Рис. 1. Сопоставление графиков факторных нагрузок $(r^{\rm FA})$ (синие линии; отрицательные факторные нагрузки для упрощения исключены) с позициями пиков на эталонных дифрактограммах минералов-«факторообразователей» (красные столбики; $I_{\rm O}$ – относительная интенсивность, максимальный пик приравнен к 1). В квадратных скобках – доля объясненной фактором дисперсии. Эталонные дифракционные картины минералов взяты из базы данных ICDD PDF-2, в круглых скобках указаны номера использованных PDF-карточек.

от анкерита (эти фазы имеют чрезвычайно близкие положения всех линий), не во всех случаях сепарация произошла «идеально». Так, на графике факторных нагрузок стронцианита присутствуют интенсивные пики на углах 17.66° и 24.52° (см. график 9 на рис. 1), не характерные для дифрактограмм этого минерала. В то же время не менее яркие пики занимают сходное положение (17.98° и 24.68°) на графике r^{FA} гидроксилбастнезита (см. график 13 на рис. 1). Они отвечают самым выраженным рефлексам дифрактораммы от плоскостей (002) и (300) гидроксилбастнезита-(Ce). Это объясняется тем, что в тесной ассоциации со стронцианитом сосуществует ещё одна генерация бастнезита, по петрографическим данным более ранняя, чем та, что даёт собственный фактор. Именно её присутствие отражают рассмотренные «паразитические» пики графика r^{FA} стронцианита, смещение которых в сторону меньших значений 2Θ , вероятнее всего, связано с тем, что это — бастнезит-(Ce), в состав которого входит не ОН группа, а фтор.

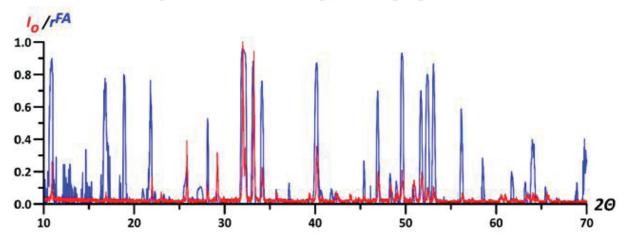


Рис. 2. Сопоставление рентгеновской дифрактограммы фторапатита из базы RRUFF (анализ R050529, красная линия; I_{o} – относительная интенсивность, максимальный пик приравнен к 1) с графиком факторных нагрузок ($r^{\rm FA}$) на фактор апатита (синяя линия, отрицательные факторные нагрузки для упрощения исключены) в диапазоне 2Θ от 10° до 70° .

Мы предполагаем, что причина появления кристаллохимически «запрещённых» высоких нагрузок на геохимические переменные и «паразитических» пиков едина. Как было показано, извлеченные факторы, по крайней мере, в некоторых случаях, являются выражением не одного, а нескольких минералов. Такая комбинация возможна только тогда, когда пики отдельно взятых рентгенодифракционных спектров этих минералов взамопропорциональны. Это свидетельствует о том, что «объединённые» в один фактор фазы возникли в субстехиометрических количествах во время единой реакции минералообразования и являются парагенными.

Кристаллохимически «запрещённые» высокие факторные нагрузки циркония и гафния на фактор фтор-апатита объясняются с той же позиции. Концентратор указанных элементов — циркон, но его содержание настолько мало, что содержание Zr в породах не превышает 320 ppm. Из-за этого на

дифрактограммах нет ни цирконовых рефлексов, ни его «паразитических» пиков на графике r^{FA} фактора фторапатита. Несмотря на это, чрезвычайно высокие значения r^{FA} для Zr и Hf непосредственно указывают на парагенетическую связь этих минералов. Не меньший интерес представляет появление значительных факторных нагрузок Ti, Nb и Ta на микроклиновый и (в меньшей степени) флогопитовый факторы (см. табл. 1 и 2) при отсутствии факторов собственно титановых минералов. Как было установлено, титан, ниобий и тантал в карбонатитах Петяйян-Вары сконцентрированы главным образом в богатом Nb бруките, тесно ассоциирующем с микроклином [5]. Наиболее интенсивные пики дифрактограммы брукита совпадают с пиками микроклина, что, по всей видимости, и не позволяет различить на факторе последнего «пиков-паразитов» брукита. Флогопит же сам оказался концентратором титана.

Таким образом, «неидеальное» разделение минералов хотя и усложняет интерпретацию, но также даёт дополнительную информацию о процессах минералообразования и парагенетических связях.

Анализ факторных нагрузок «геохимических переменных» позволил оценить роль каждого из выявленных минералов в распределении петрогенных и редких элементов. Например, установлено, что в исследованной представительной коллекции проб основной объём Sr и REE содержится в анкилите-(Ce), а не в стронцианите или гидроксилбастнезите-(Ce); главный концентратор Si не кварц, а микроклин; за распределение Na в равной мере отвечают альбит и эгирин и другие сходные нюансы распределения петрогенных и редких элементов. Все эти выводы также были подтверждены «классическими» лабораторными методами.

Работа выполнена в Геологическом институте КНЦ РАН в рамках тем НИР № 0231-2015-0007 и № 0231-2015-0009 при финансовой поддержке Российского ФондаФундаментальных Исследований (Проект № 18-35-00068).

Список литературы

- 1. Jenkins R., Snyder R.L. Introduction to X-ray Powder Diffractometry / ed. Winefordner J.D. Hoboken, NJ, USA: John Wiley & Sons, Inc. 1996. DOI: 10.1002/9781118520994
- 2. Klug H.P., Alexander L.E. X-ray diffraction procedures for polycrystalline and amorphous materials. New York: John Wiley & Sons. 1974. 966 p.
- 3. Jöreskog K.G., Klovan J.E., Reyment R.A. Geological factor analysis. Amsterdam: Elsevier Scientific Pub. Co. 1976. 178 p.
- 4. Le Maitre R.W. Numerical petrology: statistical interpretation of geochemical data. Amsterdam: Elsevier Scientific Pub. Co., 1982. 281 p.
- 5. Kozlov E., Fomina E., Sidorov M., Shilovskikh V. Ti-Nb Mineralization of Late Carbonatites and Role of Fluids in Its Formation: Petyayan-Vara Rare-Earth Carbonatites (Vuoriyarvi Massif, Russia) // Geosciences. 2018. Vol. 8. № 8. P. 281. DOI: 10.3390/geosciences8080281

МАТЕМАТИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ ОБНАРУЖЕНИЯ И АНАЛИЗА ТРЕНДОВ НА ОСНОВЕ ЗАДАННОГО ОТНОШЕНИЯ ЧАСТИЧНОГО ПОРЯДКА

Мартынов Е.В.

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

Аннотация.

В статье представлен разработанный автором нетрадиционный подход к решению ряда содержательных задач естествознания. Для каждой из этих задач построена соответствующая математическая модель. Предложены методы исследования этих моделей на основе поиска трендов, с использованием дополнительной информации в виде заданного отношения частичного порядка.

Summary.

The article provides an innovative approach elaborated by the authors to solve a number of authentic tasks of the natural science. A specific mathematic model has been elaborated for each task. Research methods have been suggested for the models on the basis of the search for trends using additional information as a given partial order relation.

В данной работе вашему вниманию предлагается один из давно разрабатываемых в рамках нашей лаборатории подходов, к решению достаточно широкого класса задач [1, 2], которые представляют серьезный научный интерес в различных областях естествознания. В результате проводимых исследований выяснилось, что геологические процессы очень часто могут быть описаны в виде трендов изменчивости химического состава горных пород относительно некоторого заданного отношения частичного порядка. При этом отношение частичного порядка обычно определяется, исходя из конкретной природной ситуации, в условиях в которой она сложилась. Например, Титовско-Колмозерский (Колмозеро-Вороньинский) пояс является более молодым по отношению к Мурманскому и Кольско-Норвежскому доменам, Лапландско-Колвицкий гранулитовой пояс, вне зависимости от его возраста, является более молодым по отношению к Лоттинскому домену и Беломорскому подвижному поясу и т.д. Это отношение может задавать некий тренд в пространстве химических составов z (z∈Rⁿ) горных пород, его тип (т.е. линейный, квадратичный или иной другой) и направленность изменчивости химических составов при переходе от одной из ассоциаций горных пород к некоторой другой. Поэтому нашей задачей является поиск тренда, который оптимальным образом аппроксимирует вышеуказанное отношение частичного порядка.

Приведем формализованную постановку поставленной задачи поиска тренда. Пусть $G=\{G_i\}$ — множество ассоциаций горных пород (в дальнейшем их будем называть объектами). Каждый из этих объектов G_i характеризуется n-мерной случайной величиной Z_i и выборкой параметров химических составов пород $\{z_{ki}\}$. На множестве $Z\times Z$, где $Z=\{Z_i\}$, задано некое отношение частичного порядка, например «предшествует» или «<». Это отно-

шение можно наглядно проиллюстрировать, т.к. частичный порядок может быть представлен в виде орграфа (рис. 1).

Кроме того, если задан какой-либо n-мерный вектор \mathbf{c} и n-мерная случайная величина Z_i , то скалярное произведение (\mathbf{c} , Z_i) является одномерной

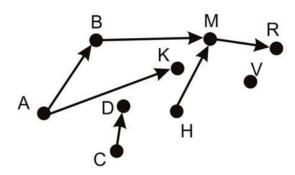


Рис. 1. Пример орграфа, реализующего частичный порядок.

Примечание. Здесь фигуративные точки {A, B, C, D, K, H, M, V, R} представляют собой некоторые средние характеристики в некотором гипотетическом двумерном пространстве (например, средние или медианные значения) исследуемых породных ассоциаций.

случайной величиной. Эту случайную величину можно охарактеризовать её математическим ожиданием $M\{(\mathbf{c},Z_i)\}$. Следует отметить, что в подавляющем большинстве случаев распределение изучаемых нами случайных величин существенно отличается от классических распределений (в частности, от нормального распределения). Возникают определенные проблемы при решении задач поиска абсолютного экстремума при наличии нескольких локальных экстремумов целевой функции. Естественно такую ситуацию обязательно нужно учитывать. В качестве одного из возможных выходов может быть использование критериев непараметрической статистики и интерактивный режим при выборе направления поиска оптимального решения.

В виду вышесказанного, при сравнении математических ожиданий случайных величин, представленных выборками химических составов горных пород, предлагается использовать ранговый статистический критерий Пури-Сена-Тамуры о равенстве средних [4, 5]. Такой выбор указанного статистического критерия определяется его устойчивостью относительно нарушения условия нормальности (и даже унимодальности) распределения случайных величин, а также и относительно наличия в выборках аномальных наблюдений. Эти нарушения (и наличие аномальных наблюдений) характерны для реальных выборок.

Для реализации наших целей, т.е. поиска тренда на основе заданного отношения частичного порядка необходимо произвести оценку средних множеств $\{(\mathbf{c},\mathbf{z}_{ki})|\{\mathbf{z}_{ki}\}$ — выборка параметров химических составов пород ассоциации $G_i\}$ (в качестве этой оценки предлагается использовать медиану $\mathrm{Me}\{(\mathbf{c},\mathbf{Z}_i)\}$) и вычислить статистики Пури-Сена-Тамуры:

$$\Lambda((\mathbf{c}, Z_i), (\mathbf{c}, Z_i)).$$

Статистическое моделирование линейного тренда изменчивости химических составов при переходе от одной ассоциации горных пород к другой

заключается в поиске такого п-мерного вектора с единичной длины, для которого, при выбранном уровне значимости δ, выполняются условия:

$$Me\{(\mathbf{c}, Z_i)\} < Me\{(\mathbf{c}, Z_j)\},$$

$$\Lambda((\mathbf{c}, Z_i), (\mathbf{c}, Z_i)) > \chi^2(\delta);$$

(здесь $\chi^2(\delta)$ – значение квантили χ^2 -распределения для уровня значимости δ для всех пар < Z_{i} , Z_{i} > таких, что Z_{i} < Z_{i}).

Задача моделирования тренда сводится к аппроксимации отношения частичного порядка линейной функции F(z)=(c,z), связанной с параметрами химического состава горных пород z∈Rⁿ. Качество аппроксимации оценивается значением функционала:

$$J = \max_{c} \min_{U} (\Lambda((\mathbf{c}, Z_{i}), (\mathbf{c}, Z_{j})),$$

где
$$U = \{(Z_i, Z_i) | Z_i < Z_i \}$$

где U={ $(Z_i,Z_j)|Z_i < Z_j$ }. Вектор ${\bf c}$ будем называть фактором частичного порядка, который характеризует линейный тренд F изменчивости (рис. 2) химических составов горных пород относительно заданного отношения. Для поиска решения данной задачи можно использовать алгоритм Нелдера-Мида симплекс-метода [6].

Следующей важной задачей, решение которой необходимо получить, в частности, при реконструкции геодинамических режимов в докембрии является поиск тренда смещения химических составов горных пород во времени, т.е. при переходе от докембрия к фанерозою. При этом такого рода сме-

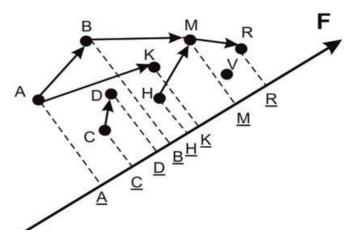


Рис. 2. Пример построения линейного тренда относительно заданного отношения частичного порядка (см. рис. 1).

Примечание. Здесь фигуративные точки $\{\underline{A}, \underline{B}, \underline{C}, \underline{D}, \underline{K}, \underline{H}, \underline{M}, \underline{R}\}$ являются проекциями фигуративных точек {A, B, C, D, K, M, R} в некотором гипотетическом двумерном пространстве на ось F, которая задана вышеуказанной линейной функцией F(z)=(c,z). Оптимальное решение задачи даёт такой п-мерный вектор с единичной длины, на котором достигается максимум минимума статистик Пури-Сена-Тамуры на парах {(A,K), (A,B), (C,D), (H,M), (M,R).

щение, как нами было показано ранее, нельзя достаточно достоверно описать линейной функцией. Обычно для этих целей необходимо использовать комплекс из двух и более линейных функций. Опишем процедуру построения комплекса состоящего из двух функций (для трёх и более функций схема построения аналогичная).

Пусть совокупность разновозрастных образований состоит из двух типов эталонных породных ассоциаций фанерозоя $A = \{A_i\}$ и $B = \{B_i\}$. Причем ассоциации горных пород А и В статистически значимо различаются по химизму. Их химические составы представлены совокупностями п-мерных случайных величин $X=\{X_i\}$ и $Y=\{Y_i\}$. Кроме того метаморфические комплексы докембрия $D=\{D_k\}$ представлены совокупностью совокупностями n-мерных случайных величин $Z = \{Z_i\}$.

Статистическое моделирование комплекса из двух линейных функций изменчивости химических составов при переходе от докембрия к фанерозою заключается в поиске таких n-мерных векторов c_1 и c_2 единичной длины, для которых, при выбранном уровне значимости δ , выполняются условия:

$$\begin{aligned} &\text{Me}\{(\mathbf{c}_{1}, Z_{i})\} < \text{Me}\{(\mathbf{c}_{1}, X_{j})\}, \\ & \Lambda((\mathbf{c}_{1}, Z_{i}), (\mathbf{c}_{1}, X_{j})) > \chi^{2}(\delta), \\ &\text{Me}\{(\mathbf{c}_{2}, Z_{i})\} < \text{Me}\{(\mathbf{c}_{2}, Y_{j})\}, \\ & \Lambda((\mathbf{c}_{2}, Z_{i}), (\mathbf{c}_{2}, Y_{j})) > \chi^{2}(\delta); \end{aligned}$$

(здесь $\chi^2(\delta)$ — значение квантили χ^2 -распределения для уровня значимости δ для всех пар $<\!\!Z_{_{\! i}}\!\!,\!\! X_{_{\! i}}\!\!>$ и $<\!\!Z_{_{\! i}}\!\!,\!\! H_{_{\! i}}\!\!>$).

Задача моделирования тренда сводится к аппроксимации отношения частичного порядка «докембрий<фанерозой» двумя линейными функциями $F_1(z)=(c_1,z)$ и $F_2(z)=(c_2,z)$, связанных с параметрами химического состава горных пород z∈Rⁿ образований. Качество аппроксимации оценивается значением функционала:

$$J=\max(\mathbf{c}_1,\mathbf{c}_2).$$

Для решения данной задачи также можно использовать алгоритм Нелдера-Мида симплекс-метода. Смещение химических составов горных пород при переходе от ассоциаций докембрия к породным ассоциациям фанерозоя можно продемонстрировать с помощью двумерной диаграммы (рис. 3).

В случае, когда у нас имеется только две совокупности породных ассоциации, например, совокупности ассоциаций докембрия $D=\{D_{\iota}\}$ и фанерозоя G={G_i} можно использовать квадратичную поверхность для описания тренда смещения от докембрия к фанерозою, т.е. поверхность, задаваемую следующим выражением:

$$(z-Y)(S_2)^{-1}(z-Y)'-(z-X)(S_1)^{-1}(z-X)' \ge 2\ln(|S_1|^{1/2}/|S_2|^{1/2})$$

 $(z-Y)(S_2)^{\text{--}1}(z-Y)'-(z-X)(S_1)^{\text{--}1}(z-X)\ '\ge 2\ln(|S_1|^{1/2}/|S_2|^{1/2}),$ где S_1 и S_2 – оценки ковариационных матриц, а X и Y – средние объектов докембрия и фанерозоя (рис. 4).

Кроме того, важную роль в научных исследованиях играет задача поиска группы статистически значимо различающихся трендов для изучаемой совокупности [3], охарактеризованной выборкой п-мерных векторов. Рассмотрим один из подходов к её решению на примере типизации нефтегазоносных структур с использованием плотности нефти (параметр у) и содержанию в ней серы (параметр х).

Зависимость между плотностью нефти и содержанию в ней серы обыч-

но пытались выразить с помощью нахождения соответствующего уравнения линейной регрессии у=a·x+b с индикатором адекватности регрессионной модели R². Но анализ структуры данных для выборки объёма 155 составов нефти в координатах «содержание серы – плотность» показал, что такой вывод неправомерен. Во-первых, кластерный анализ показал (рис. 5), что существует, по крайней мере, два кластера Мv и Мn, которые существенно «отскакивают» от предполагаемого линейного тренда Т.

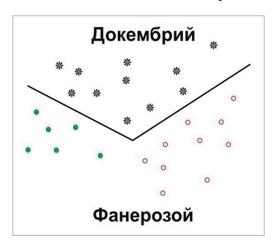


Рис. 3. Смещение химических составов при переходе от породных ассоциаций докембрия к фанерозою (фигуративные точки соответствуют медианам химических составов пород комплексов).

Примечание. * — фигуративные точки проекциий средних характеристик исследуемых породных ассоциаций докембрия в некотором гипотетическом двумерном пространстве (множество D); • — фигуративные точки проекций средних характеристик исследуемых породных ассоциаций фанерозоя (кора океанического типа, множество A); о — фигуративные точки проекций средних характеристик исследуемых породных ассоциаций фанерозоя (кора континентального типа, множество B).

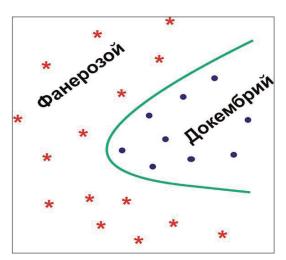
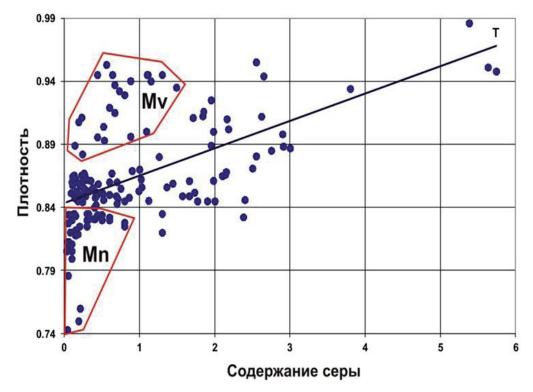


Рис. 4. Квадратичная поверхность, описывающая тренд смещения химических составов горных пород при переходе от структур докембрия к фанерозою.

Примечание: * — фигуративные точки проекций средних характеристик исследуемых породных ассоциаций докембрия в некотором гипотетическом двумерном пространстве (множество D); • — фигуративные точки проекций средних характеристик исследуемых породных ассоциаций фанерозоя (множество G).

А это наводит на мысль о существовании не одного, а нескольких трендов (в данном случае двух). Во-вторых, оказалось, что распределение отклика (т.е. плотности нефти), существенно отличается от нормального. Поэтому



Puc. 5. Предполагаемый линейный тренд <math>T и два «отскакивающих» от него кластера Mv и Mn.

описание зависимости между исследуемыми параметрами линейной функцией некорректно.

Учитывая вышеуказанные соображения, была предпринята попытка аппроксимировать эту связь в виде нескольких линейных трендов и интерпретировать их. Для проверки гипотезы о наличии двух (или более) линий регрессии (ветвей корреляции) был использован следующий метод. А именно, искать эти линии линейной регрессии на основе критерия:

$$\min \sum_{x_i} \min(\rho(x_i, \grave{O} 1), ..., \rho(x_i, \grave{O}))$$
,

где $\{x_i\}$ — множество фигуративных точек, T1,...,Tk — тренды (линии ре-

грессии), ρ — расстояние от этих точек до соответствующего тренда. В результате удалось найти два линейных тренда Т1 и Т2 (рис. 6). Оказалось, что их можно интерпретировать с позиций геодинамики. Тренд Т1 (у=0.0211x+0.8359; R²=0.5088) соответствует нефти месторождений, которые явно тяготеют к активным окраинам континентов и коллизионным швам (множество «А»). А тренд Т2 (у=0.167x+0.8174; R²=0.5903) — нефти из месторождений пассивных континентальных окраин восточного побережья Северной и Южной Америки, а так же западного побережья Африки (мно-

жество «Р»).

Работа выполнена в рамках государственного заказа № 0231-2015-0008.

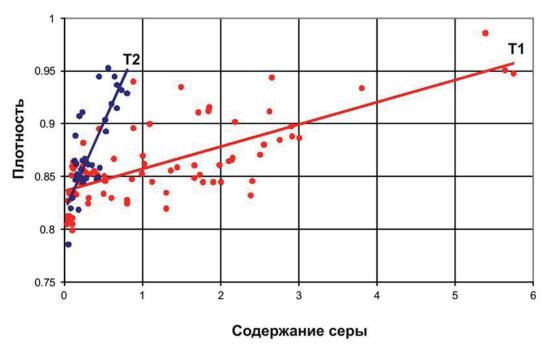


Рис. 6. Линейные тренды T1 (соответствующий множеству «А») и T2 (соответствующий множеству «Р»).

Список литературы.

- 1. Мартынов Е.В. Реконструкция обстановок формирования протолитов метаморфических комплексов докембрия на основе статистического моделирования их характеристик по петрогеохимическим данным. Автореф. дисс. на соискание уч. степени к.г.-м.н. СПб. 1997. 25 с.
- 2. Козлов Н.Е., Сорохтин Н.О., Глазнев В.Н. и др. Геология архея Балтийского щита. Спб.: Наука. 2006. 329 с. (на русском языке).
- 3. Козлов Н.Е., Козлова Н.Е., Мартынов Е.В., Сорохтин Н.О. Геохимическая типизация нефти по плотности и содержанию серы критерий районирования нефтегазоносных провинций по качеству УВ сырья. В кн.: Матлы XXI междунар. науч. конф., посвященной 100-летию со дня рожд. акад. В.И. Смирнова «Фундаментальные проблемы геологии месторождений полезных ископаемых и металлогении». М.: МГУ. 2010. С. 148.
- 4. Puri M. L., Sen P. K. Nonparametric methods in multivar iate analysis. New York: John Wiley & Sons. 1971. 677 p.
- 5. Tamura R. Multivariate nonparametric several-sample tests. // The Annals of Mathematical Statistics. 1966. V. 37. N 3. P. 611-618.
- 6. Nelder J.A., Mead R.A. Simplex Method for Function minimisation. Computer J. 1964. № 7. P. 308-313.

















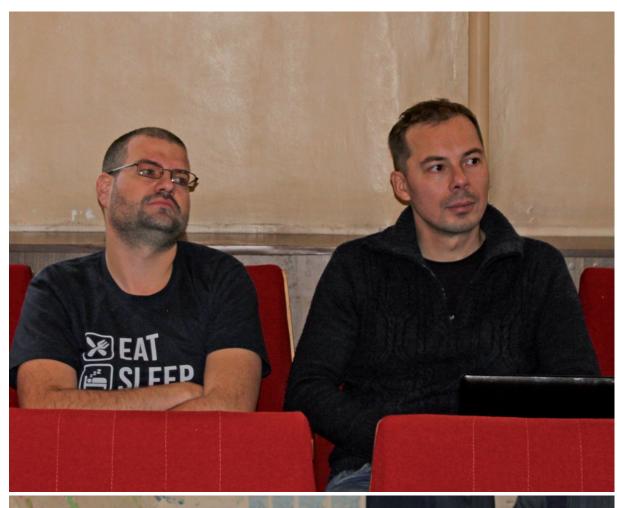


















СОДЕРЖАНИЕ

Предисловие редактора
кристаллография, кристаллохимия
Геворгян А.А., Малеев А.В., Потехин К.А. Структурообразующие фрагменты в молекулярных кристаллах
Мануковская Д.В. Применение анализа фрактальной размерности к картинам фотоиндуцированного рассеяния света в кристаллах ниобата лития
Мокрова А.А., Малеев А.В., Абелашвили И.З. Дифракция на предфракталах и двумерные квазипериодические разбиения с симметрией порядков 4, 7, 8, 9, 14 и 18
Степенщиков Д.Г. Аппроксимация облика кристалла: первые результаты для двумерного случая
Шутов А.В., Малеев А.В., Вилкова А.Е. Гармонический анализ формы молекул
ГЕОЛОГИЯ, ГЕОФИЗИКА
Бурцев А.В. Разработка основы базы данных высоковольтных электрических сетей для создания системы их контроля
Войтеховский Ю.Л., Захарова А.А. Структура гранита массива Акжайляу, Казахстан
Войтеховский Ю.Л., Петров Д.А., Захарова А.А. Структуры гранитов Салминского плутона, Карелия
Войтеховский Ю.Л., Захарова А.А. Массивная текстура горной породы: гранит массива Акжайляу, Казахстан
Дёмин В.И., Козелов Б.В., Собакин А.П., Меньшов Ю.В., Горбань Ю.А . Влияние микроклимата на результаты моделирования городского острова тепла (на примере города Апатиты)
Денисова Ю.В. Термометрия апатита яротского гранитного массива (Приполярный Урал)
Ильченко В.Л. «Геометрический» взгляд на природу степенных зависимостей в развитии геологических (и прочих природных) процессов
Каржавин В.К. Алмазы свиты Кейв (Кольский полуостров) 94

Ковалевский М.В., Горбацевич Ф.Ф. Методика определения
скоростных соотношений упругих волн в задачах изучения
петрофизических свойств метаморфизованных пород методом
акустополярископии
Ковалевский М.В. Теоретический анализ демпфированных
пластинчатых преобразователей повёрнутых срезов для возбуждения
продольных и поперечных ультразвуковых колебаний 107
Пушкин А.А., Римкевич В.С. Математическая обработка
экспериментов по фторидной переработке нефелинов
Русанова И.А. Исследование текстурных и морфологических особенностей мультифрактальной поверхности минералов
с применением бинарного преобразования
Толстобров Д.С., Колька В.В. Схемы изобаз поднятия земной
поверхности северо-востока Фенноскандии за последние 10000 лет 134
БИОЛОГИЯ, ЭКОЛОГИЯ
Войтеховский Ю.Л., Степенщиков Д.Г. Черепаший карапакс
как пример полигонального разбиения
Войтеховский Ю.Л., Степенщиков Д.Г. Брохосомы – биологические
фуллерены
Мицуков А.С., Даувальтер В.А. Применение статистических
методов в исследовании химического состава донных отложений
озера Имандра
Штабровская И.М., Зенкова И.В. Анализ температуры горных почв с применением методов описательной статистики
Дополнение к главе "Геология и геофизика"
Козлов Е.Н., Фомина Е.Н. Использование факторного анализа для
экспресс-диагностики минерального состава геологически сложных
объектов по рентгенодифракционным данным
Мартынов Е.В. Математические методы обнаружения и анализа
трендов на основе заданного отношения частичного порядка 186
ФОТОРЕПОРТАЖ 193
Φ OTOPFHOPTAW 10

Пруды XV Всероссийской научной школы "Математические исследования в естественных науках"

Апатиты, 22 оқтября 2018 г.

Отпечатано в ЗАО "K & M"

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

Пираж 100 экз.

