Геологический институт КНЦ РАН Российское минералогическое общество Кольское отделение

Труды XVI Всероссийской научной школы "Математические исследования в естественных науқах"



Апатиты, 22 оқтября 2019 г.

УДК 548.1+548.3+549.621.9+550.8+552.323.6+551.50+58.051+51-76 ISSN 2074-2487

Математические исследования в естественных науках. Труды XVI Всероссийской научной школы. Апатиты, Геологический институт КНЦ РАН, Кольское отделение РМО, 22 октября 2019 г. / Научн. ред. Ю.Л. Войтеховский. – Апатиты, 2019. - 180 с.

В сборнике представлены материалы XVI Всероссийской научной школы «Математические исследования в естественных науках», прошедшей в Геологическом институте КНЦ РАН, г. Апатиты, 22 октября 2019 г. при информационной поддержке Кольского отделения и Российского минералогического общества. В секциях «Кристаллография и кристаллохимия», «Геология, геофизика и геохимия» и «Биология и экология» были представлены порядка 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 Фоторепортаж: Н.А. Мансурова, А.В. Чернявский

Фото на обложке: Yandex. Фото Хибин.

© Коллектив авторов, 2019

© Российское минералогическое общество и Кольское отделение, 2019

© Геологический институт – обособленное подразделение Федерального го-

сударственного бюджетного учреждения науки ФИЦ КНЦ РАН, 2019

ПРЕДИСЛОВИЕ

22 октября 2019 г. в Геологическом институте КНЦ РАН при информационной поддержке Кольского отделения и Комиссии по истории РМО прошла XVI Всероссийская научная школа «Математические исследования в естественных науках». Очно и заочно в ней приняли участие сотрудники академических институтов, университетов и горно-геологических компаний из Апатитов (ГИ КНЦ РАН, ИППЭС КНЦ РАН, ПГИ), Владимира (ВГУ), Мирного (НИГП АК «АЛРОСА»), Москвы (МГУ, МГТУ), Петрозаводска (ПетрГУ), Санкт-Петербурга (СПбГУ, ААНИИ), Тольятти (Институт направленного профессионального образования). Тем самым школа традиционно подтвердила свой всероссийский статус.

С устными докладами выступили 9 участников, в том числе неоднократно приезжавшие на конференцию гости из Москвы и Петрозаводска. По традиции, основное внимание участников было направлено на поиск универсальных математических подходов к решению широкого круга задач в естественных науках. В разделе «Кристаллография, кристаллохимия» рассмотрены задачи кристаллографии, способов описания морфологии кристаллов, различные подходы к исследованию реализуемости гранного символа выпуклого полиэдра. В разделе «Геология, геофизика, геохимия» предложен алгебраический подход к определению, классификации, номенклатуре и описанию трансформаций структур горных пород, приведены результаты по геохимическим особенностям минералов – спутников алмаза и моделированию условий алмазообразования, рассмотрены подходы к решению геофизических задач акустополярископии и др. В разделе «Биология, экология» представлены исследования чувствительности численных моделей морских экосистем, анализ динамики температуры горных почв и результаты статистических оценок рядов температуры воздуха на гидрометеообсерватории «Баренцбург» (Шпицберген).

В сборник вошли поданные к печати 17 статей, сгруппированные в три раздела: «Кристаллография, кристаллохимия» (8), «Геология, геофизика, геохимия» (6) и «Биология, экология» (3). Две статьи по просьбе авторов продублированы на английском языке: «Федоровский (математический) подход к анализу петрографических структур» и «Научная школа кристалломорфологии Санкт-Петербургского горного университета». Надеемся, сборник будет интересен широкому кругу естествоиспытателей, особенно молодёжи, пытающимся читать «книгу природы, написанную на языке математики». Приглашаем всех к участию в XVII Всероссийской научной школе «Математические исследования в естественных науках», которая состоится примерно в то же время в 2020 г.

Войтеховский Ю.Л., д.г.-м.н., профессор зав. кафедрой минералогии, кристаллографии и петрографии Санкт-Петербургского горного университета гл.н.с. Геологического института ФИЦ КНЦ РАН вице-президент, председатель комиссии по истории, почётный член РМО Степенщиков Д.Г., к.г.-м.н., н.с. Геологического института ФИЦ КНЦ РАН



КРИСТАЛЛОГРАФИЯ КРИСТАЛЛОХИМИЯ



SCIENTIFIC SCHOOL on CRYSTAL MORPHOLOGY of SAINT-PETERSBURG MINING UNIVERSITY

Voytekhovsky Y.L.¹, Stepenshchikov D.G.²

¹Saint Petersburg Mining University, 2, 21st Line, V.O., 199106, Saint-

Petersburg, Russia, voytekhovskiy_yul@pers.spmi.ru

² Geological Institute of KSC RAS, 14, Fersman Street, 184209, Apatity, Russia, stepen@geoksc.apatity.ru

Summary. The following article elaborates on the past and present of one of the scientific schools that originated in Saint-Petersburg Mining University. It was based on the idea to analyze the morphology of crystals from the point of the P. Curie dissymmetry principle [6] in order to reconstruct the conditions of their formation. I.I. Shafranovsky is rightfully considered as the leader of this scientific school, in the years 1954-1975 he wrote quite a few number of articles on this topic. The article by E.S. Fedorov [14] «Foundations of morphology and systematics of polyhedra» is related to the problem as well. An algorithm for enumerating the full combinatorial variety of convex polyhedra had been first proposed in the above mentioned article. The authors of this article emphasize on defining the concept of «real crystal forms» and the development of computer programs for their enumeration, given the ideal crystal form, as the recent progress of the theory. It is applied to the garnet crystals of Western Keyvy Ridge at the Kola Peninsula.

Keywords: crystal morphology, convex polyhedra, Fedorov's generating algorithm, Curie's dissymmetry principle, ideal and real crystal forms.

Introduction

Mineral forms have always been in sight of the researchers. From this point of view, mineral individuals are broadly represented in nature by crystals (with flat facets) and grains (without flat facets). The solid part of the lithosphere is composed mainly of mineral grains. C.F. Naumann wrote: «Die einzelnen Individuen erscheinen dann nur in mehr oder weniger verdrückten oder verkrüppelten Gestalten, deren Contouren durch ganz zufällige und regellose Contactflächen bestimmt werden, welche meist in gar keiner Beziehung zu derjenigen Krystallform stehen, auf deren Ausbildung die Natur doch eigentlich in jedem Individuum hinarbeitete» [23(S.4)]. «Separate individuals appear only in more or less oppressed or crippled forms, the contours of which are determined by completely random and irregular contact surfaces, which have mostly nothing to do with those crystalline forms, the creation of which nature still, in essence, worked at in each individual» (transl. from German by the authors). It is natural that the ideal minority was step by step covered by mathematical theory in the first place: the law of constancy of angles (N. Steno, 1669), the law of rational relations of parameters (R.J. Haüy, 1784), 32 symmetry point groups (M.L. Frankenheim, 1826; J.F.C. Hessel, 1830; A.V. Gadolin, 1867; E.S. Fedorov, 1883; P. Curie, 1884).

In line with these ideas, the founder of the Department of Crystallography of Saint Petersburg Mining University E.S. Fedorov has formulated his crystal chemical method further developed by A.K. Boldyrev and V.V. Dolivo-Dobrovolsky.

Overwhelming majority of mineral grains are usually regarded as smaller or larger deviation from the ideal crystals (ideology of idiomorphism – xenomorphism). E.S. Fedorov [14] published an article entitled «Foundations of morphology and systematics of polyhedra». It lies away from the main line of his scientific work and therefore was forgotten for a long time. At first glance, this is a purely mathematical article that continues the works of predecessors in this very special area of geometry [22]. E.S. Fedorov was the first to propose in it an algorithm for generating the full combinatorial variety of convex polyhedra from a tetrahedron. And it is easy to see that the mineral grains in a rock can be viewed in the combinatorial approximation precisely as convex polyhedra with faces – intergrain contacts (neglecting the nuances of their geometry). And such a presentation is of fundamental importance for recent petrography, since it allows us to mathematically strictly define the category of «petrographic structures» and classify them through statistics of various intergrain contacts.

On the other hand, mineralogists have learned to use widespread deviations from the ideal forms [16] to reconstruct the conditions for the formation of mineral individuals. One of the guiding principles on this path is P. Curie's principle of dissymmetry. «When several different phenomena of nature overlap each other, forming a single system, their dissymmetries add up. As a result, only those elements of symmetry remain that are common to each phenomenon taken separately. <...> When certain causes give rise to known effects, the elements of symmetry of the cause should be contained in the generated effects. When known effects reveal a known dissymmetry, this latter should also be contained in the causes that gave rise to these effects. The provisions inverse to the two previous ones are incorrect, at least in practice, i.e. effects may be more symmetrical than their causes» [6, 7]. This principle has been noticed and used in geology [1, 19-21, 24-26, 38]. As applied to mineralogy, the absence of some symmetry elements in the form of the crystal allows us to restore the symmetry of the medium at the time of its formation. The principle of reconstruction consists in finding the minimum P. Curie's limit symmetry group, in which the symmetry point group of the crystal is embedded. The leader of this scientific school, which originated in the Saint Petersburg Mining University, is rightly considered to be I.I. Shafranovsky, who wrote on this topic about 20 articles and books [27-36 et al.].

Within the framework of the scientific school on crystal morphology at Saint Petersburg Mining University one can list many different studies. But below we discuss the latest results only in the two indicated directions, since the authors work in them.

Combinatorial variety of convex polyhedral

Since the publication of the article by E.S. Fedorov (1893) great efforts were made to enumerate the combinatorial variety of convex polyhedra

[2-5, 8-13, 17, 18]. The most recent results in this area have been obtained by the authors. Namely, all 4- to 12-hedra and simple 13- to 16-hedra are listed and characterized by symmetry point groups [39, 40, 42-45, 51, 52, 54, 55]. This became possible due to some simplification and computerization of the E.S. Fedorov generating algorithm. The use of symmetry point groups, not automorphism group orders, makes the results as much as possible adapted to the problems of crystal morphology. Today, this result is the world priority of Russian science.

Among the studied combinatorial variety of convex polyhedra, representatives of 24 crystallographic (1, -1, 2, m, 3, 222, mm2, 4, -4, 2/m, 32, -6, 3m, 4mm, mmm, -42m, -6m2, -3m, 6mm, 23, 4/mmm, 6/mmm, -43m, m-3m) and 20 noncrystallographic (5m, 7m, -8m2, 8mm, 9m, -10m2, -5m, 10mm, 11m, -12m2, -7m, -14m2, 8/mmm, -18m2, 10/mmm, -22m2, 12/mmm, -26m2, 14/mmm, -3-5m) symmetry point groups were established. Among such a huge variety there are no representatives of 8 crystallographic symmetry point groups: 422, 4/m, -3, 6, 622, 6/m, m-3, 432. Let us emphasize that we are talking about the most symmetric convex polyhedra of any given combinatorial type.

All the 4-, 5-, and 6-hedra (1, 2, and 7, respectively) are combinatorially symmetric. Among the 7-hedra (34) only 7 (20.588 %) are combinatorially asymmetric, 8-hedra (257) – 140 (54.475 %), 9-hedra (2606) – 2111 (81.005%), 10-hedra (32300) – 30014 (92.923 %), 11-hedra (440564) – 430494 (97.714 %), 12-hedra (6384634) – 6336013 (99.238 %), simple 13-hedra (49566) – 47030 (94.884 %), 14-hedra (339722) – 331796 (97.667 %), 15-hedra (2406841) – 2382352 (98.983 %), and 16-hedra (17490241) – 17411448 (99.550 %). Thus, with an increase in the number of facets the proportion of combinatorially asymmetric convex polyhedra is rapidly growing, asymptotically striving for 100 %. On the contrary, with an increase in the automorphism group order, the proportion of convex polyhedra rapidly decreases. This is important, since each combinatorially asymmetric convex polyhedron can be considered as a primitive triclinic crystal.

E.S. Fedorov was the only mineralogist who considered the symmetry of crystals in comparison with the symmetry of abstract convex polyhedra. And he truly anticipated the tendency revealed by us. In a letter to P. Groth on March 26, 1893, he wrote: «In a week I hope to send you my new small work «The minimum problem in the theory of symmetry». This paper explains why it turns out that most natural crystals are symmetric and not asymmetric, as might be expected from the theory of probability. This is a consequence of the principle of least action, which leads to the fact that when a crystal is formed, the minimum surface principle comes into force. And it is proved in my work that the most symmetrical forms also have a minimum surface. So the symmetry manifested in nature should be considered as a natural consequence of economy, expressed strictly mathematically in the known law of least action» [37 (p. 35)].

Symmetry statistics of mineral crystals is a classic topic in the mineralogy of the last century. Interest in it is understandable. Just as the deviations of the mineral individuals from the ideal (in composition, structure and form) tell us about the conditions and growth mechanisms, the symmetry statistics of crystals in the earth's crust generally characterize their diversity. The importance of the result obtained by the authors of the paper consists in the fact that the peculiarity of the crystalline space is revealed only against the background of the similar symmetry statistics of abstract convex polyhedra resolved in 3D Euclidean space.

Real crystal forms

It was noted above that the formation of crystals that are close to ideal (i.e. with the equal facets of the same simple form) can be considered an exception in nature. For cubic crystals, this is possible only in an isotropic medium. For crystals of the middle and lower syngonies, this is possible with a unique agreement of the crystal symmetry elements (i.e. the specific initial position of the nucleus) and the medium. Only primitive triclinic crystals (rare in nature), bounded by the unique monohedra, formally fall into the category of ideal ones. In all other cases, the use of P. Curie's dissymmetry principle to reconstruct the formation conditions for the distorted crystals requires a preliminary listing of possible forms for a given ideal crystal form or combination of forms.

The definition of a real crystal simple form (or combination of forms) as a convex polyhedron bounded at least by some of the facets of an ideal crystal simple form (or combination of forms) that are in the correct orientation, but at an arbitrary distance from the origin, was suggested in the article [41]. Owing to the computer implementation of the algorithms, the authors have listed and characterized by the symmetry point groups the following varieties of real crystal simple forms and their combinations: octahedra (33); trigonal (36), tetragonal (55) and rhombic (80) bipyramids; trigonal (63) and tetragonal (11854) trapezohedra [46, 48]; rhombododecahedra (625) [47], combinations of a cube and an octahedron (77657) [53]. In general, the number of real simple forms grows with the number of non-parallel facets and different inter-faceted angles in the original ideal simple form. This is the combinatorial-geometric bank from which nature takes realizations, in accordance with physical expediency.

Rhombododecahedra: garnets of Western Keivy Ridge, the Kola Peninsula

The theory was applied to the garnets from the deposits of Western Keivy Ridge: Makzapakhk, Berezovaya, Rovozero, Takhlintuayv [49, 50]. As a result of studying more than a hundred well-cut garnets, it was found that full-faceted rhombododecahedra of the [0, 12] m-3m and [0804] 4/mmm morphotypes are the most common while the [048] 4/mmm, [0921] mm2, and [084] mm2 are less common (fig. 1). In single crystals, the morphotypes [0462] mm2, [0624] mm2, [0462] m, and [0642] m were found. The relation between the frequency of the morphotypes and their symmetry point groups is obvious – of the five reliably diagnosed, three are the most (m-3m, 4/mmm), and two are moderately (mm2) dissymmetric. Rare forms are moderately (mm2) and strongly (m) dissymmetric. The full facetness and belonging mainly to high symmetry point groups indicate that garnets under discussion were formed mostly in weakly and moderately

Труды XVI Всероссийской научной школы. Математические исследования в естественных науках. 2019. С. 5-16



Tig. 1. Tull-Jacelea Teal Mombouodecaneara.

anisotropic media. Apparently, this is typical for mineral-forming media in the earth's crust.

The reconstruction of the garnet morphotypes is to establish and interpret the minimum P. Curie limit symmetry group, including the symmetry point group of the real rhombododecahedron. For example, the symmetry *m-3m* embeds only in P. Curie's group $\infty/\infty m$. Such, conventionally accepted as perfect, crystals grew in isotropic conditions, i.e. under lithostatic pressure and all-round diffusion of chemical elements.

The symmetry point group 4/mmm is a subgroup (besides the previous one) of the group ∞/mm . Such crystals grew under directional pressure, axes 4 and ∞

were orthogonal to the plane of principal stresses. The 4/mmm symmetry point group includes two real rhombododecahedra – [0804] (with a belt of hexagons due to preferential growth along the 4 axis) and [048] (with a belt of tetragons due to the growth along the normal to the 4 axis). To explain them, we apply C. Riecke's principle, according to which a crystal can dissolve under the action of stress and grow on other sides. Apparently, the form [0804] is originated when axis 4 is orthogonal to the stress, and [048] – when they are co-directed.

The symmetry point group mm2 embeds into the group ∞m . This is flow symmetry. It is possible that such crystals grew under not only stress, but also the feeding solutions. Finally, the symmetry point group m embeds into the group ∞/m . It contains an axis of «active» rotation and allows us to conclude that such crystals rotated during growth. This phenomenon is already known for garnet porphyroblasts from the West Keivy Ridge as so-called «snowball structures» formed by the S-shaped inclusions of paragenetic minerals.

Combinations of a cube and an octahedron: diamonds

For the past 150 years, from the discovery of deposits in South Africa, the crystal morphology of diamonds has been an enduring theme of mineralogy. At the early stages of studying, the form distortions were recognized as important data for genetic reconstructions. Many distorted forms are shown in the monograph [15] and the fundamental atlas [16]. Studies at many deposits have shown that the most common simple forms on natural diamonds are the octahedra, rhombododecahedra and cubes, which appear separately or in various combinations. The full variety of combinations of a cube and an octahedron found by the authors of the paper with the original computer programs is amazing – 77657 combinatorially different forms.

In view of the above results on the garnets, which have been formed in the metamorphic schists of the Kola Peninsula, it should be expected that the diamonds formed in the melts should be of even weaker dissymmetry. Fig. 2 shows the most symmetric combinations of a cube and an octahedron belonging to the following symmetry point groups: m-3m (5), -43m (3), 4/mmm (9), -3m (13), -42m (8), 4mm (33), mmm (22), and 3m (70). Determining the most frequent morphotypes in the world's deposits and testing the above hypothesis would be of great importance for mineralogy as a whole and confirming P. Curie's dissymmetry principle in particular.

Conclusion

Every natural science is based on fundamental constants. For geometric crystallography, these are 7 syngonies, 32 symmetry point groups, 47 geometric simple forms, 146 crystallographic simple forms, 14 Bravais lattices, 230 spatial symmetry groups. A number of constants added by extensions of classical symmetry: groups of antisymmetry, color symmetry, homology, and everything called – in multidimensional spaces. It would seem, turning to crystal morphology of natural minerals, we are entering the field of rather approximate descriptions.

Труды XVI Всероссийской научной школы. Математические исследования в естественных науках. 2019. С. 5-16



Fig. 2. The most symmetric (the automorphism group orders are not less than 6) combinations of a cube (k) and an octahedron (o).



But E.S. Fedorov [14] showed (although his article was forgotten for many years) that the enumeration and characterization of combinatorial types of convex polyhedra makes sense. The authors of the article have mastered the systematic approach of E.S. Fedorov (i.e. what can be listed should be listed), simplified his algorithm, advanced enumeration of convex polyhedra and their characterization

with the symmetry point groups up to the world record using original computer programs and applied the theory to mineral grains in rocks.

Another fundamental constant is 7 (10 if taking in mind enantiomorphic pairs) P. Curie's limit symmetry groups. I.I. Shafranovsky has shown their productivity for the reconstruction of the medium symmetry for quartz crystals. The authors introduced the general definition of a real crystal simple form and their combinations, developed original computer programs for their enumeration, listed a number of their varieties, applied the theory to the garnets from the Kola Peninsula, forecasted the most symmetrical combinations of a cube and an octahedron on diamond crystals. The latter result is recommended for testing at the deposits of «ALROSA» JSC. In general, the results show that crystal morphology as a historically first chapter of modern crystallography has not exhausted the fundamental and applied results. Scientific school on crystal morphology created by E.S. Fedorov and continued by I.I. Shafranovsky in Saint Petersburg Mining University develops in current directions. In the above issues it occupies a leading position in the world.

References

1. Amstutz G.C. La symétrie comme critère génétique en géochimie et en gîtologie // Schweiz. mineral. und petrogr. Mitt. 1966. Bd 46. N 2. S. 329-335.

2. Bouwkamp C.J. On the dissection of rectangles into squares. Pt I // Proc. Nederl. Akad. Wetensch. 1946a. A49. P 1176-1188; Pt II, III // Proc. Nederl. Akad. Wetensch. 1946b. A50. P. 58-71, 72-78.

3. Bowen R., Fisk S. Generation of triangulations of the sphere // Math. Comp. 1967. V. 21. P. 250-252.

4. Britton D., Dunitz J.D. A complete catalogue of polyhedra with eight or fewer vertices // Acta Cryst. 1973. A29. P. 362-371.

5. Brückner M. Vielecke und Vielflaeche. Leipzig: Teubner, 1900. 250 S.

6. Curie P. Sur la symetrie dans les phenomenes physiques, symetrie d'un champ electrique et d'un champ magnetique. In: J. de Physique. 1894. V. 3. N. 3. P. 393-416.

7. Curie P. On symmetry in physical phenomena: symmetry of electric and magnetic fields // Selected works. Moscow-Leningrad: Nauka, 1966. P. 95-113. In Russian.

8. Duijvestijn A.J.W., Federico P.J. The number of polyhedral (3-connected planar) graphs // Math. Comp. 1981. V. 37. P. 523-532.

9. Engel P. On the enumeration of polyhedra // Discrete Math. 1982. V. 41. P. 215-218.

10. Engel P. On the morphology of polyhedra // Zapiski VMO (Proc. All-Rus. Miner. Soc.) 1994. N. 3. P. 20-25.

11. Engel P. On the enumeration of the simple 3-polyhedra // Acta Cryst. 2002. A59. P. 14-17.

12. Federiko P.J. Enumeration of polyhedra: the number of 9-hedra // J. Comb. Theory. 1969. N. 7. P. 155-161.

13. Federiko P.J. Polyhedra with 4 to 8 faces // Geometr. Dedicata. 1975. V. 3. P. 469-481.

14. Fedorov E.S. Foundations of morphology and systematics of polyhedra // Zapiski Imper. St. Petersburg Miner. Obshch. (Proc. St. Petersburg Miner. Soc.). 1893. Pt 30. P. 241-341. In Russian.

15. Fersmann A., Goldschmidt V. Der Diamant. Heidelberg: Carl Winter's Universitätsbuchhandlung, 1911. 274 S.

16. Goldschmidt V. Atlas der Krystallformen. Heidelberg: Carl Winter's Universitätsbuchhandlung, Bd 1, 2 – 1913, Bd 3 – 1916, Bd 4, 5 – 1918, Bd 6 – 1920, Bd 7, 8 – 1922, Bd 9 – 1923.

17. Grace D.W. Computer search for non-isomorphic convex polyhedra. Ph.D. Thesis. Comp. Sci. Dept., Stanford University, California, USA. 1965.

Hermes O. Die Formen der Vielflache // J. reine angew. Math. 1899. V. 120.
 S. 305-353.

19. Kirchmayer M. Das Symmetrie-Konzept von Curie 1884 in der Makrogefügekunde // N. Jb. Geol. Paläont. Abh. 1965. Bd 122. N 3. S. 343-350.

20. Kirchmayer M. Die Beschreibung tektonischer Stockwerke mit Hilfe des Symmetrie-Konzept // Geol. Föreningens i Stockholm Förhandlingar. Stockholm, 1966. Bd 88. S. 75-89.

21. Kirchmayer M. Beispiele zum Curie'schen Symmetrie-Konzept, entnommen aus der Klüft und Schlechtentektonik des Ruhrgebietes und aus der Sedimentologie. Sonderdrück aus den Mitteilungen der Geologischen Gesellschaft Essen. H. 6. Essen: Schrepper & Co, 1968. 15 S.

22. Kirkman T.P. Applications of the theory of the polyedra to the enumeration and registration of results // Proc. Royal Soc. London. 1862/1863. V. 12. P. 341-380.

23. Naumann C.F. Elemente der Mineralogie. 15te Aufl. Leipzig: Verlag fon W. Engelmann, 1907. 821 S.

24. Paterson M.S., Weiss L.E. Symmetry concepts in the structural analysis of deformed rocks // Geol. Soc. Amer. Bull. 1961. V. 72. P. 841-882.

25. Sander B. Gefügekunde der Gesteine. Wien: Springer, 1930. 352 S.

26. Sander B. Einführung in die Gefügekunde der geologischen Körper. Wien: Springer. Bd. 1. 1948. 215 S. Bd 2. 1950. 409 S.

27. Shafranovsky I.I. External symmetry of real crystals and symmetry of the supply medium // Zapiski VMO (Proc. All-Rus. Miner. Soc.). 1954. N 3. P. 198-211. In Russian.

28. Shafranovsky I.I. Symmetry groups in structural petrology // Zapiski VMO (Proc. All-Rus. Miner. Soc.). 1956. N. 4. P. 491-497. In Russian.

29. Shafranovsky I.I. False forms of crystals and their mineragenetic value // Zapiski VMO (Proc. All-Rus. Miner. Soc.). 1959. N. 1. P. 13-20. In Russian.

30. Shafranovsky I.I. To the question of clarifying the universal Curie principle of symmetry // Zapiski VMO (Proc. All-Rus. Miner. Soc.). 1964. N. 4. P. 460-463. In Russian.

31. Shafranovsky I.I. A few words about the Russian translation of the works of P. Curie // Zapiski VMO (Proc. All-Rus. Miner. Soc.). 1966. N. 6. P. 758-760. In Russian.

32. Shafranovsky I.I. Symmetry in the nature. Leningrad: Nedra, 1968. 184 p. In Russian.

33. Shafranovsky I.I. Modeling external dissymmetry of the crystalline form // Crystallography. 1971. N. 6. P. 1097-1100. In Russian.

34. Shafranovsky I.I. Crystal forms as indicators of the peculiarities of the mineral-forming environment. In: Typomorphism of minerals and its practical significance. Moscow: Nedra, 1972. P. 64-67. In Russian.

35. Shafranovsky I.I. Dynamic symmetry in crystallography, mineralogy, petrography and organic world // Zapiski LGI (Proc. Leningrad Mining Inst.). 1974. V. 67. N. 2. P. 174-184. In Russian.

36. Shafranovsky I.I. The form of minerals – an indicator of the environment symmetry // Proc. Geol. Inst. Kar. Branch Acad. Sci. USSR. V. 27. 1975. P. 4-9. In Russian.

37. Shafranovsky I.I., Frank-Kamenetsky V.A., Dolivo-Dobrovolskaya E.M. (Eds.) Evgraf Stepanovich Fedorov. Correspondence. Unpublished and littleknown work. Ser.: Scientific heritage. V. 16. Leningrad: Nauka, 1991. 320 p. In Russian.

38. Turner F.J., Weiss L.E. Structural analysis of metamorphic tectonites. New York: McGraw-Hill, 1963. 545 p.

39. Voytekhovsky Y.L. On the symmetry of 4- to 11-hedra // Acta Cryst. 2001a. A57. P. 112-113.

40. Voytekhovsky Y.L. The Fedorov algorithm revised // Acta Cryst. 2001b. A57. P. 475-477.

41. Voytekhovsky Y.L. On the real crystal octahedra // Acta Cryst. 2002. A58. P 622-623.

42. Voytekhovsky Y.L., Stepenshchikov D.G. On the symmetry of 9- and 10-hedra // Acta Cryst. 2002a. A58. P. 404-407.

43. Voytekhovsky Y.L., Stepenshchikov D.G. On the symmetry of simple 12and 13-hedra // Acta Cryst. 2002b. A58. P. 502-505.

44. Voytekhovsky Y.L., Stepenshchikov D.G. On the symmetry of 11-hedra // Acta Cryst. 2003a. A59. P. 195-198.

45. Voytekhovsky Y.L., Stepenshchikov D.G. On the symmetry of simple 14and 15-hedra // Acta Cryst. 2003b. A59. P. 367-370.

46. Voytekhovsky Y.L., Stepenshchikov D.G. Combinatorial crystal morphology. Book I. Real crystal simple forms. Apatity: K & M, 2004a. 275 p. In Russian.

47. Voytekhovsky Y.L., Stepenshchikov D.G. On the real crystal rhombododecahedra // Acta Cryst. 2004b. A60. P. 582-584.

48. Voytekhovsky Y.L., Stepenshchikov D.G. Real crystal simple forms // Zapiski VMO (Proc. All-Rus. Miner. Soc.). 2004 c. N. 2. P. 112-120. In Russian.

49. Voytekhovsky Y.L. The Curie principle and garnets from the Makzapakhk Mt. // Doklady AN. 2005. V. 400. N. 3. P. 355-358. In Russian.

50. Voytekhovsky Y.L., Stepenshchikov D.G. Real rhombododecahedra: theory and applications to the garnets from the Makzapakhk Mt., West Keivy, Kola Peninsula // Zapiski RMO (Proc. Rus. Miner. Soc.). 2005a. N 1. P. 97-103. In Russian.

51. Voytekhovsky Y.L., Stepenshchikov D.G. The variety of convex 12-hedra revised // Acta Cryst. 2005b. A61. P. 581-583.

52. Voytekhovsky Y.L., Stepenshchikov D.G. On the symmetry of simple 16-hedra // Acta Cryst. 2006. A62. P. 230-232.

53. Voytekhovsky Y.L., Stepenshchikov D.G. Combinatorial crystal morphology. Book III. Combinations of a cube and an octahedron. Apatity: K & M, 2007. 834 p. In Russian.

54. Voytekhovsky Y.L., Stepenshchikov D.G. Combinatorial crystal morphology. Book IV. Convex polyhedra. V. I. 4- to 12-hedra. Apatity: KSC RAS, 2008a. 833 p. In Russian.

55. Voytekhovsky Y.L., Stepenshchikov D.G. Combinatorial crystal morphology. Book IV. Convex polyhedra. Vol. II. Simple 13- to 16-hedra. Apatity: KSC RAS, 2008b. 828 p. In Russian.

НАУЧНАЯ ШКОЛА КРИСТАЛЛОМОРФОЛОГИИ САНКТ-ПЕТЕРБУРГСКОГО ГОРНОГО УНИВЕРСИТЕТА

Войтеховский Ю.Л.¹, Степенщиков Д.Г.²

1 Санкт-Петербургский горный университет, Санкт-Петербург,

Voytekhovskiy_YuL@pers.spmi.ru

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

Аннотация. Статья посвящена прошлому и настоящему одной из научных школ Санкт-Петербургского горного университета. Она возникла вокруг идеи рассматривать форму кристалла с точки зрения принципа диссимметрии П. Кюри [26] с целью реконструкции условий формирования минерала. И.И. Шафрановский справедливо считается лидером научного направления. В период 1954-1975 гг. он опубликовал на эту тему много работ. Между тем, забытая статья Е.С. Фёдорова «Основания морфологии и систематики многогранников» также относится к этой теме [9]. В ней впервые предложен алгоритм генерирования из тетраэдра полного комбинаторного многообразия выпуклых полиэдров. Современный прогресс этого направления состоит в определении категории «реальной кристаллической формы» и создании компьютерных программ для их перечисления, если задана идеальная простая форма или их комбинация. Приложение теории показано на примере гранатов Западных Кейв, Кольский полуостров.

Ключевые слова: кристалломорфология, выпуклые полиэдры, алгоритм Е.С. Фёдорова, принцип диссимметрии П. Кюри, идеальные и реальные кристаллические формы.

Введение

Формы минералов всегда были в поле зрения исследователей. С этой точки зрения, минеральные индивиды представлены в природе кристаллами (с плоскими гранями) и зёрнами (без плоских граней). Твёрдая часть литосферы сложена главным образом минеральными зёрнами. Классик минералогии К.Ф. Науманн писал: «Die einzelnen Individuen erscheinen dann nur in mehr oder weniger verdrückten oder verkrüppelten Gestalten, deren Contouren durch ganz zufällige und regellose Contactflächen bestimmt werden, welche meist in gar keiner Beziehung zu derjenigen Krystallform stehen, auf deren Ausbildung die Natur doch eigentlich in jedem Individuum hinarbeitete» [41(с. 4)]. «Отдельные индивиды появляются только в более или менее угнетённых или искалеченных формах, контуры которых определяются совершенно случайными и незакономерными контактными поверхностями, которые большей частью не имеют никакого отношения к тем кристаллическим формам, над созданием которых природа всё же, в сущности, трудилась в каждом индиви*де» (пер. с нем. авторов).* Естественно, что идеальное меньшинство шаг за шагом было охвачено математической теорией в первую очередь: закон постоянства углов (Н. Стено, 1669), закон рационального отношения параметров (Р.Ж. Гаюи, 1784), 32 точечные группы симметрии и 47 простых форм (М.Л. Франкенгейм, 1826; И.Ф.Х. Гессель, 1830; А.В. Гадолин, 1867; Е.С. Фёдоров, 1883; П. Кюри, 1884). В русле этих идей основатель кафедры кристаллографии Санкт-Петербургского горного университета Е.С. Фёдоров (1920) сформулировал кристаллохимический метод, далее развитый А.К. Болдыревым и В.В. Доливо-Добровольским (1937).

Довлеющее большинство минеральных зёрен обычно рассматривается как меньшее или большее отклонение от идеального кристалла (идеология идиоморфизма – ксеноморфизма). Но тот же Е.С. Фёдоров опубликовал статью «Основания морфологии и систематики многогранников» [9]. Она лежит далеко в стороне от его основных воспринятых идей и потому была надолго забыта. На первый взгляд, эта сугубо математическая статья продолжает труды предшественников [40] в очень специальной области геометрии. В ней впервые предложен алгоритм генерирования из тетраэдра полного комбинаторного многообразия выпуклых полиэдров. Но легко видеть, что минеральные зёрна в горной породе могут быть рассмотрены в комбинаторном приближении именно как полиэдры с гранями – межзерновыми контактами (пренебрегая нюансами их геометрии). И такое представление имеет важное значение для современной петрографии, позволяя математически строго определить категорию «петрографической структуры» и классифицировать их на основе статистик различных межзерновых контактов.

С другой стороны, минералоги давно заметили [34] и стали использовать широко распространённые отклонения от идеальных форм для реконструкции условий образования минеральных индивидов. Один из руководящих на этом пути – принцип диссимметрии П. Кюри. «Когда несколько различных явлений природы накладываются друг на друга, образуя одну систему, диссимметрии их складываются. В результате остаются лишь те элементы симметрии, которые являются общими для каждого явления, взятого отдельно. <...> Когда определённые причины порождают известные следствия, элементы симметрии причины должны содержаться в порождённых следствиях. Когда известные следствия обнаруживают известную диссимметрию, эта последняя должна содержаться и в причинах, породивших эти следствия. Положения, обратные двум предыдущим, неправильны, по крайней мере, на практике, т.е. следствия могут быть симметричнее вызывающих их причин» [8 (с. 598-600), 26]. Этот принцип был замечен и использован в геологии [21, 37-39, 42-45].

Применительно к минералогии, отсутствие некоторых элементов симметрии в форме кристаллов позволяет восстановить симметрию среды во время его образования. Принцип реконструкции состоит в отыскании минимальной предельной точечной группы П. Кюри, в которую вкладывается точечная группа симметрии искажённого кристалла. Лидером этого научного направления, возникшего в Санкт-Петербургском горном университете, по праву считается И.И. Шафрановский, опубликовавший на эту тему более 20 статей и книг [10-19 и др.]. В рамках научной школы кристалломорфологии в Санкт-Петербургском горном университете выполнено множество различных исследований. Далее сообщаются последние результаты лишь в двух указанных направлениях, в которых работают авторы статьи.

Комбинаторное многообразие выпуклых полиздров

С момента выхода в свет статьи [9] Е.С. Фёдорова были предприняты значительные усилия по перечислению комбинаторного многообразия выпуклых полиэдров [22-25, 27-32, 35, 36]. Последние результаты в этой области получены авторами статьи. А именно, перечислены и охарактеризованы точечными группами симметрии все 4- ... 12-эдры и простые 13- ... 16-эдры [6, 7, 46, 47, 49-52, 54, 55]. Использование точечных групп симметрии, а не порядков групп автоморфизмов делает результаты максимально адаптированными к задачам кристалломорфологии. На сегодня этот результат составляет мировой приоритет российской науки. Он стал возможным благодаря упрощению и компьютеризации алгоритма Е.С. Фёдорова.

Среди изученного комбинаторного многообразия выпуклых полиэдров установлены представители 24 кристаллографических (1, -1, 2, m, 3, 222, mm2, 4, -4, 2/m, 32, -6, 3m, 4mm, mmm, -42m, -6m2, -3m, 6mm, 23, 4/mmm, 6/mmm, -43m, m-3m) и 20 некристаллографических (5m, 7m, -8m2, 8mm, 9m, -10m2, -5m, 10mm, 11m, -12m2, -7m, -14m2, 8/mmm, -18m2, 10/mmm, -22m2, 12/mmm, -26m2, 14/mmm, -3-5m) точечных групп симметрии. Среди столь огромного многообразия не оказалось представителей 8 кристаллографических точечных групп симметрии: 422, 4/m, -3, 6, 622, 6/m, m-3, 432. Подчер-кнём, что речь идёт о наиболее симметричных выпуклых полиэдрах данного комбинаторного типа.

Все 4-, 5- и 6-эдры (1, 2 и 7, соответственно) комбинаторно симметричны. Среди 7-эдров (34) комбинаторно асимметричны 7 (20.588 %), 8-эдров (257) – 140 (54.475 %), 9-эдров (2606) – 2111 (81.005 %), 10-эдров (32300) – 30014 (92.923%), 11-эдров(440564) – 430494(97.714%), 12-эдров(6384634) – 6336013 (99.238 %), простых 13-эдров (49566) – 47030 (94.884 %), 14-эдров (339722) – 331796 (97.667 %), 15-эдров (2406841) – 2382352 (98.983 %) и 16-эдров (17490241) – 17411448 (99.550 %). Таким образом, с ростом числа граней доля комбинаторно асимметричных выпуклых полиэдров быстро растёт, асимптотически стремясь к 100 %. Наоборот, с ростом порядка группы автоморфизмов доля выпуклых полиэдров быстро падает. Это важно, так как каждый комбинаторно асимметричный выпуклый полиэдр может рассматриваться как примитивный кристалл триклинной сингонии.

Е.С. Фёдоров – единственный минералог, рассматривавший симметрию кристаллов в сравнении с симметрией абстрактных выпуклых полиэдров. Он верно предчувствовал выявленную нами тенденцию. В письме к П. Гроту от 26 марта 1893 г. он писал: «Через неделю я надеюсь отправить Вам свою новую небольшую работу «Проблема–минимум в учении о симметрии». В этой работе объясняется, почему получается так, что большинство естественных кристаллов симметричны, а не асимметричны, как этого можно было бы ожидать исходя из теории вероятностей. Это следствие принципа наименьшего действия, который приводит к тому, что при образовании кристалла вступает в силу принцип минимальной поверхности. И вот в моей работе доказывается, что самые симметричные формы обладают также и минимальной поверхностью. Так что проявляющуюся в природе симметрию следует рассматривать как закономерное следствие экономии, выраженной в известном законе наименьшего действия строго математически» [20 (с. 35)].

Симметрийная статистика кристаллов – классическая тема в минералогии последнего столетия. Интерес к ней понятен. Подобно тому, как отклонения минерального индивида от идеала (по составу, структуре и форме) говорят исследователю об условиях и механизмах роста, симметрийная статистика кристаллов в земной коре обобщённо характеризует их многообразие. Важность полученного нами результата состоит в том, что специфика кристаллического пространства выявляется лишь на фоне аналогичной симметрийной статистики абстрактных выпуклых полиэдров, разрешённых в евклидовом пространстве.

Реальные кристаллические формы

Образование в природе кристаллов, близких к идеальным (то есть с равным развитием граней одной простой формы), может считаться исключением. Для кубических кристаллов это возможно лишь в изотропной среде, для кристаллов средней и низшей сингоний – при уникальном согласовании элементов симметрии кристалла (то есть начального положения зародыша) и среды. Только кристаллы примитивного вида симметрии триклинной сингонии (редкие в природе), в силу огранения моноэдрами, формальным образом попадают в категорию идеальных. Во всех других случаях использование принципа диссимметрии Кюри для реконструкции условий формирования искажённых кристаллов требует предварительного перечисления таковых для заданной идеальной кристаллической формы или комбинации форм.

Определение реальной кристаллической простой формы (или комбинации форм) как выпуклого полиэдра, ограниченного хотя бы некоторыми из граней идеальной кристаллической простой формы (или комбинации форм), находящимися в правильной ориентации, но на произвольном расстоянии от начала координат, предложено в статье [48]. Благодаря компьютерной реализации алгоритмов, на сегодня авторами перечислены и охарактеризованы точечными группами симметрии следующие многообразия реальных кристаллических простых форм и их комбинаций: октаэдры (33); тригональные (36), тетрагональные (55) и ромбические (80) бипирамиды; тригональные (63) и тетрагональные (11854) трапецоэдры [1, 2]; ромбододекаэдры (625) [53], комбинации куба и октаэдра (77657) [5]. В целом, число реальных простых форм растёт с числом непараллельных граней и различных межгранных углов в исходной идеальной простой форме. Это тот комбинаторногеометрический ресурс, из которого природа выбирает реализации, сообразуясь с физической целесообразностью.

Ромбододекаэдры: гранаты Зап. Кейв, Кольский п-ов

Теория нашла приложение на месторождениях Зап. Кейв: Макзапахк, г. Берёзовая, Ровозеро, Тахлинтуайв [3, 4]. В результате изучения более ста хорошо ограненных гранатов установлено, что наиболее распространены полногранные реальные ромбододекаэдры морфотипов [0, 12] m-3m и [0804] 4/mmm. Реже встречаются [048] 4/mmm, [0921] mm2 и [084] mm2 (рис. 1), в единичных кристаллах – [0462] mm2, [0624] mm2, [0462] m и [0642] m. Очевидна связь между частотой формы и её точечной группой симметрии – из 5 достоверно диагностированных 3 относятся к наиболее (m-3m, 4/mmm), 2 - к умеренно (mm2) диссимметричным. Редкие формы относятся к умеренно (mm2) и сильно (m) диссимметричным. Полногранность и принадлежность в основном к высоким точечным группам симметрии говорит о том, что гранаты формировались большей частью в слабо и умеренно анизотропных средах. По-видимому, это типично для минералообразующих сред в земной коре.

Реконструкция морфотипов гранатов состоит в том, чтобы установить и интерпретировать минимальную предельную группу симметрии Кюри, включающую точечную группу симметрии реального ромбододекаэдра. Точечная группа симметрии *m-3m* вкладывается лишь в группу Кюри $\infty/\infty m$. Такие, условно принятые за совершенные, кристаллы росли в изотропных условиях – под действием литостатического давления и всесторонней диф-фузии химических элементов.

Точечная группа симметрии 4/mmm является подгруппой – помимо предыдущей – группы ∞/mm . Такие кристаллы росли в условиях направленного давления, оси 4 и ∞ были ортогональны плоскости главных напряжений. К группе симметрии 4/mmm принадлежат два реальных ромбододекаэдра – [0804] (с поясом гексагонов за счёт преимущественного роста вдоль оси 4) и [048] (с поясом тетрагонов за счет роста по нормали к оси 4). Для их объяснения применим принцип Рикке, согласно которому кристалл может растворяться под действием направленного давления и расти с других сторон. Видимо, форма [0804] образуется, когда ось 4 ортогональна главному сжимающему напряжению, [048] – когда они сонаправлены.

Точечная группа симметрии mm2 вкладывается в группу Кюри ∞m . Это симметрия потока. Возможно, такие кристаллы росли в условиях не только направленного давления, но и просачивания питающих растворов. Наконец, точечная группа симметрии m вкладывается в предельную группу ∞/m . Она содержит «активную» ось вращения и позволяет предположить, что такие кристаллы во время роста вращались. Это явление известно для порфиробластов граната Зап. Кейв по «структурами снежного кома» – S-образным включениям парагенетических минералов.



Комбинации куба и октаэдра: алмазы

На протяжении последних 150 лет – с открытия месторождений в Ю. Африке – кристалломорфология алмаза является непреходящей темой минералогии. Уже на ранних стадиях изучения искажения формы были признаны важными для генетических реконструкций известных и поисков новых объектов. Множество таких форм показано в монографии [33] и фундаментальном атласе [34]. Исследованиями на многих месторождениях установлено, что наиболее распространённые простые формы в огранке алмаза – октаэдр, ромбододекаэдр и куб, встречающиеся раздельно или образующие комбинации. Полное многообразие комбинаций куба и октаэдра найдено авторами с помощью оригинальных компьютерных программ – 77657 комбинаторно различных форм.

Ввиду результатов изучения гранатов, образовавшихся в метаморфических сланцах Кольского п-ова, следует ожидать, что алмазы, формирующиеся в расплавах, должны показывать тем более слабую диссимметрию формы. На рис. 2 приведены самые симметричные (порядок группы автоморфизмов не менее 6) комбинации куба и октаэдра, принадлежащие к точечным группам симметрии: m-3m (5), -43m (3), 4/mmm (9), -3m (13), -42m (8), 4mm (33), mmm (22), 3m (70). Анализ распространённости морфотипов на месторождениях мира и проверка высказанной гипотезы имела бы большое значение для минералогии в целом и подтверждения принципа диссимметрии П. Кюри, в частности.

Заключение

Каждая естественная наука базируется на фундаментальных константах. Для геометрической кристаллографии это 7 сингоний, 32 точечные группы симметрии, 47 геометрических простых форм, 146 кристаллографических простых форм, 14 решёток Браве, 230 пространственных групп симметрии. Целый ряд констант добавляют расширения классической симметрии: группы антисимметрии, цветной симметрии, гомологии, и всё названное – в многомерных пространствах. Казалось бы, переходя к кристаллографии природных минералов, начиная с кристалломорфологии, мы вступаем в область приблизительных описаний. Но уже Е.С. Фёдоров показал в [9] (хотя статья и была забыта на долгие годы), что систематическое перечисление комбинаторных типов выпуклых полиэдров имеет смысл. Авторы статьи приняли систематический подход Е.С. Фёдорова (что может быть перечислено – должно быть перечислено), упростили его алгоритм, с помощью оригинальных компьютерных программ продвинули перечисление выпуклых полиэдров и их характеризацию точечными группами симметрии до мирового рекорда и применили результаты к описанию минеральных зёрен в горных породах.

Ещё одна фундаментальная константа – 7 (с учётом энантиоморфных разновидностей 10) предельных групп симметрии П. Кюри. И.И. Шафрановский показал продуктивность их применения для реконструкции симметрии среды образования для кристаллов кварца. Авторы ввели общее определение реальной кристаллической простой формы и их комбинаций, разработали оригинальные компьютерные программы их перечисления, перечислили ряд их многообразий, применили теорию к гранатам Зап. Кейв на Кольском п-ове, выполнили прогноз наиболее симметричных комбинаций куба и октаэдра на кристаллах алмаза. Последний результат рекомендован к проверке на месторождениях АО «АЛРОСА». В целом полученные результаты показывают, что кристалломорфология как исторически первая глава кристаллографии не исчерпала фундаментальных и прикладных результатов. Научная школа кристалломорфологии Санкт-Петербургского горного



Рис. 2. Самые симметричные (порядок группы автоморфизмов не менее 6) комбинации куба (k) и октаэдра (o).

Труды XVI Всероссийской научной школы. Математические исследования в естественных науках. 2019. 16. С. 17-28



университета, созданная Е.С. Фёдоровым и продолженная И.И. Шафрановским, развивается в перспективных направлениях, а в рассмотренных выше вопросах занимает лидирующее положение в мире.

Список литературы

1. Войтеховский Ю.Л., Степенщиков Д.Г. Комбинаторная кристалломорфология // Реальные кристаллографические простые формы. Кн. 1. Апатиты. Изд-во: К & M, 2004 a. 275 с.

2. Войтеховский Ю.Л., Степенщиков Д.Г. Реальные кристаллографические простые формы // Зап. ВМО. 2004 b. № 2. С. 112-120.

3. Войтеховский Ю.Л. Принцип Кюри и гранаты г. Макзапахк // Докл. АН. 2005. Т. 400. № 3. С. 355-358.

4. Войтеховский Ю.Л., Степенщиков Д.Г. Реальные ромбододекаэдры: теория и приложения к гранатам г. Макзапахк, Зап. Кейвы, Кольский п-ов // Зап. РМО. 2005. № 1. С. 97-103.

5. Войтеховский Ю.Л., Степенщиков Д.Г. Комбинаторная кристалломорфология // Комбинации куба и октаэдра. Кн. Ш. Апатиты. Изд-во: К & М, 2007. 834 с.

6. Войтеховский Ю.Л., Степенщиков Д.Г. Комбинаторная кристалломорфология // Выпуклые полиэдры. Кн. IV. Т. I. 4- ... 12-эдры. Апатиты. Изд-во: КНЦ РАН, 2008 а. 833 с.

7. Войтеховский Ю.Л., Степенщиков Д.Г. Комбинаторная кристалломорфология // Выпуклые полиэдры. Кн. IV. Т. II. Простые 13- ... 16-эдры. Апатиты. Изд-во: КНЦ РАН, 2008b. 828 с.

8. Кюри П. О симметрии в физических явлениях: симметрия электрического и магнитного полей // Избр. труды. М.-Л.: Наука, 1966. С. 95-113.

9. Фёдоров Е.С. Основания морфологии и систематики многогранников // Зап. Импер. С.-Петербург. минер. об-ва. 1893. Ч. 30. С. 241-341.

10. Шафрановский И.И. Внешняя симметрия реальных кристаллов и симметрия питающей среды // Зап. ВМО. 1954. № 3. С. 198-211.

11. Шафрановский И.И. Группы симметрии в структурной петрологии // Зап. ВМО. 1956. № 4. С. 491-497.

12. Шафрановский И.И. Ложные формы кристаллов и их минерагенетическое значение // Зап. ВМО. 1959. № 1. С. 13-20.

13. Шафрановский И.И. К вопросу об уточнении универсального принципа симметрии Кюри // Зап. ВМО. 1964. № 4. С. 460-463.

14. Шафрановский И.И. Несколько слов по поводу русского перевода трудов П. Кюри // Зап. ВМО. 1966. № 6. С. 758-760.

15. Шафрановский И.И. Симметрия в природе. Л.: Недра, 1968. 184 с.

16. Шафрановский И.И. Моделирование внешней диссимметрии кристаллической формы // Кристаллография. 1971. № 6. С. 1097-1100.

17. Шафрановский И.И. Кристаллические формы как индикаторы особенностей минералообразующей среды // Типоморфизм минералов и его практическое значение. М.: Недра, 1972. С. 64-67.

18. Шафрановский И.И. Динамическая симметрия в кристаллографии, минералогии, петрографии в органическом мире // Зап. ЛГИ. 1974. Т. 67. № 2. С. 174-184. 19. Шафрановский И.И. Форма минералов – индикатор симметрии внешней среды // Тр. ИГ Кар ФАН СССР. Вып. 27. 1975. С. 4-9.

20. Шафрановский И.И., Франк-Каменецкий В.А., Доливо-Добровольская Е.М. (Сост.) Евграф Степанович Фёдоров. Переписка. Неизданные и малоизвестные работы. Сер.: Научное наследство. Т. 16. Л.: Наука, 1991. 320 с.

21. Amstutz G.C. La symétrie comme critère génétique en géochimie et en gîtologie // Schweiz. mineral. und petrogr. Mitt. 1966. Bd 46. N. 2. S. 329-335.

22. Bouwkamp C.J. On the dissection of rectangles into squares. Pt I // Proc. Nederl. Akad. Wetensch. 1946 a. A49. P 1176-1188; Pt II, III // Proc. Nederl. Akad. Wetensch. 1946 b. A50. P. 58-71, 72-78.

23. Bowen R., Fisk S. Generation of triangulations of the sphere // Math. Comp. 1967. V. 21. P. 250-252.

24. Britton D., Dunitz J.D. A complete catalogue of polyhedra with eight or fewer vertices // Acta Cryst. 1973. A29. P. 362-371.

25. Brückner M. Vielecke und Vielflaeche. Leipzig: Teubner, 1900. 250 S.

26. Curie P. Sur la symetrie dans les phenomenes physiques, symetrie d'un champ electrique et d'un champ magnetique. In: J. de Physique. 1894. V. 3. N. 3. P. 393-416.
27. Duijvestijn A.J.W., Federico P.J. The number of polyhedral (3-connected planar) graphs // Math. Comp. 1981. V. 37. P. 523-532.

28. Engel P. On the enumeration of polyhedra // Discrete Math. 1982. V. 41. P. 215-218.

29. Engel P. On the morphology of polyhedra // Зап. ВМО. [Zapiski VMO (Proc. All-Rus. Miner. Soc.)] 1994. N. 3. P. 20-25.

30. Engel P. On the enumeration of the simple 3-polyhedra // Acta Cryst. 2002. A59. P. 14-17.

31. Federiko P.J. Enumeration of polyhedra: the number of 9-hedra // J. Comb. Theory. 1969. N. 7. P. 155-161.

32. Federiko P.J. Polyhedra with 4 to 8 faces // Geometr. Dedicata. 1975. V. 3. P. 469-481.

33. Fersmann A., Goldschmidt V. Der Diamant. Heidelberg: Carl Winter's Universitätsbuchhandlung, 1911. 274 S.

34. Goldschmidt V. Atlas der Krystallformen. Heidelberg: Carl Winter's Universitätsbuchhandlung, Bd 1, 2 – 1913, Bd 3 – 1916, Bd 4, 5 – 1918, Bd 6 – 1920, Bd 7, 8 – 1922, Bd 9 – 1923.

35. Grace D.W. Computer search for non-isomorphic convex polyhedra. Ph.D. Thesis. Comp. Sci. Dept., Stanford University, California, USA. 1965.

Hermes O. Die Formen der Vielflache // J. reine angew. Math. 1899. V. 120.
 S. 305-353.

37. Kirchmayer M. Das Symmetrie-Konzept von Curie 1884 in der Makrogefügekunde // N. Jb. Geol. Paläont. Abh. 1965. Bd 122. N. 3. S. 343-350.
38. Kirchmayer M. Die Beschreibung tektonischer Stockwerke mit Hilfe des Symmetrie-Konzept // Geol. Föreningens i Stockholm Förhandlingar. Stockholm, 1966. Bd 88. S. 75-89.

39. Kirchmayer M. Beispiele zum Curie'schen Symmetrie-Konzept, entnommen aus der Klüft und Schlechtentektonik des Ruhrgebietes und aus der Sedimentologie. Sonderdrück aus den Mitteilungen der Geologischen Gesellschaft Essen. H. 6. Essen: Schrepper & Co, 1968. 15 S.

40. Kirkman T.P. Applications of the theory of the polyedra to the enumeration and registration of results // Proc. Royal Soc. London. 1862/1863. V. 12. P. 341-380.

41. Naumann C.F. Elemente der Mineralogie. 15te Aufl. Leipzig: Verlag fon W. Engelmann, 1907. 821 S.

42. Paterson M.S., Weiss L.E. Symmetry concepts in the structural analysis of deformed rocks // Geol. Soc. Amer. Bull. 1961. V. 72. P. 841-882.

43. Sander B. Gefügekunde der Gesteine. Wien: Springer, 1930. 352 S.

44. Sander B. Einführung in die Gefügekunde der geologischen Körper. Wien: Springer. Bd. 1. 1948. 215 S. Bd 2. 1950. 409 S.

45. Turner F.J., Weiss L.E. Structural analysis of metamorphic tectonites. New York: McGraw-Hill, 1963. 545 p.

46. Voytekhovsky Y.L. On the symmetry of 4- to 11-hedra // Acta Cryst. 2001a. A57. P. 112-113.

47. Voytekhovsky Y.L. The Fedorov algorithm revised // Acta Cryst. 2001b. A57. P. 475-477.

48. Voytekhovsky Y.L. On the real crystal octahedra // Acta Cryst. 2002. A58. P 622-623.

49. Voytekhovsky Y.L., Stepenshchikov D.G. On the symmetry of 9- and 10-hedra // Acta Cryst. 2002a. A58. P. 404-407.

50. Voytekhovsky Y.L., Stepenshchikov D.G. On the symmetry of simple 12and 13-hedra // Acta Cryst. 2002b. A58. P. 502-505.

51. Voytekhovsky Y.L., Stepenshchikov D.G. On the symmetry of 11-hedra // Acta Cryst. 2003a. A59. P. 195-198.

52. Voytekhovsky Y.L., Stepenshchikov D.G. On the symmetry of simple 14and 15-hedra // Acta Cryst. 2003b. A59. P. 367-370.

53. Voytekhovsky Y.L., Stepenshchikov D.G. On the real crystal rhombododecahedra // Acta Cryst. 2004. A60. P. 582-584.

54. Voytekhovsky Y.L., Stepenshchikov D.G. The variety of convex 12-hedra revised // Acta Cryst. 2005. A61. P. 581-583.

55. Voytekhovsky Y.L., Stepenshchikov D.G. On the symmetry of simple 16-hedra // Acta Cryst. 2006. A62. P. 230-232.

О ПРОСТЕЙШИХ ВЫПУКЛЫХ ПОЛИЭДРАХ ТОЧЕЧНЫХ ГРУПП КОМБИНАТОРНОЙ СИММЕТРИИ 422, 4/m, -3, 6, 622, 6/m, m-3, 432

Войтеховский Ю.Л.¹, Степенщиков Д.Г.²

¹Санкт-Петербургский горный университет, Санкт-Петербург,

voytekhovskiy_yul@pers.spmi.ru

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

Аннотация. Статья посвящена более подробному изложению ранее сформулированной и в значительной мере решённой авторами задачи об отыскании простейших (с минимальным числом граней или вершин, что равнозначно в силу дуального перехода, сохраняющего симметрию) выпуклых полиэдров с заданной точечной группой комбинаторной симметрии. В первую очередь авторов интересуют кристаллографические точечные группы симметрии, из которых неизвестны простейшие представители групп: 422, 4/*m*, -3, 6, 622, 6/*m*, *m*-3, 432.

Ключевые слова: кристалломорфология, выпуклый полиэдр, комбинаторный тип, фёдоровский алгоритм, точечная группа симметрии.

Введение

Задача об отыскании простейших (с минимальным числом граней или вершин, что равнозначно в силу дуального перехода, сохраняющего симметрию) выпуклых полиэдров с заданной точечной группой комбинаторной симметрии сформулирована в [3] в связи со следующим. Перечисление комбинаторных типов всех выпуклых 4- ... 12-эдров и простых (в каждой вершине сходятся ровно три грани) 13- ... 16-эдров [1,2,6-13] с помощью компьютеризованного фёдоровского алгоритма [5] позволило установить представителей 24 кристаллографических (1, -1, 2, m, 3, 222, mm2, 4, -4, 2/m, 32, -6, 3*m*, 4*mm*, *mmm*, -42*m*, -6*m*2, -3*m*, 6*mm*, 23, 4/*mmm*, 6/*mmm*, -43*m*, *m*-3*m*) и 20 некристаллографических (5m, 7m, -8m2, 8mm, 9m, -10m2, -5m, 10mm, 11m, -12m2, -7m, -14m2, 8/mmm, -18m2, 10/mmm, -22m2, 12/mmm, -26m2, 14/mmm, -3-5*m*) точечных групп комбинаторной симметрии. Не обнаружены представители 8 кристаллографических групп: 422, 4/m, -3, 6, 622, 6/m, m-3, 432. Под комбинаторной симметрией понимается симметрия самого симметричного представителя среди выпуклых полиэдров данного комбинаторного типа, то есть одинаково составленных из одинакового набора граней (переводимых друг в друга непрерывной деформацией с сохранением рёберного графа). Акцент на кристаллографических точечных группах симметрии обусловлен минералогическими пристрастиями авторов. Но очевидно, что тот же вопрос может быть сформулирован относительно любой точечной группы комбинаторной симметрии. Насколько известно авторам, этот вопрос систематически не изучен.



Рис. 1. Кристаллические полиэдры точечных групп симметрии 422 (дитрихлордиацетат калия), 4/т (повеллит), -3 (диоптаз), 6 (сульфат лития и калия), 622 (высокотемпературный кварц), 6/т (апатит), т-3 (пирит), 432 (хлористый аммоний).

Кристаллические полиэдры точечных групп симметрии 422, 4/*m*, -3, 6, 622, 6/*m*, *m*-3, 432.

На рисунке 1 даны кристаллические полиэдры искомых точечных групп симметрии [4, Приложение 1. С. 336-357]. Но симметрия этих полиэдров либо может быть повышена непрерывной деформацией (как в случае комбинации куба и пентагондодекаэдра на кристалле пирита – до *m*-3*m* у комби-



Рис. 2. Известные выпуклые полиэдры искомых точечных групп комбинаторной симметрии. F – число граней (facets), V – число вершин (vertices), число рёбер E (edges) может быть найдено из соотношения Эйлера: F + V = E + 2.

нации куба и ромбододекаэдра), либо кристаллический полиэдр заведомо не является простейшим в указанном выше смысле (это показано в следующем разделе предъявлением выпуклых полиэдров с меньшим числом граней).

Известные выпуклые полиэдры точечных групп комбинаторной имметрии 422, 4/*m*, -3, 6, 622, 6/*m*, *m*-3, 432

На рисунке 2 показаны известные авторам выпуклые полиэдры искомых точечных групп комбинаторной симметрии. Эвристичные принципы построения указаны далее, но нет уверенности, что найденные полиэдры минимальны.

Полиэдры с точечными группами комбинаторной симметрии 422 и 622 построены по одному принципу: у 2n-угольной призмы (n – порядок глав-

ной оси симметрии) боковые 4-угольные грани через одну единообразно изламываются надвое по диагоналям. У полученного полиэдра: 3n+2 граней, 4n вершин, гранный символ [2n, n, ..., 2]. Последняя цифра 2 указывает на две 2n-угольные грани.

Полиэдры с точечными группами комбинаторной симметрии 4/*m* и 6/*m* построены по тому же принципу, что и простейший представитель в классе 3/*m* (то есть -6): у n-угольной бипирамиды (n – порядок главной оси симметрии) с поясом смежных по вершинам ромбов каждый из них делится ребром на 5- и 3-угольную грани. У полученного полиэдра: 4n граней, 5n+2 вершин, гранный символ [n, 0, 3n] – полиэдр ограничен лишь 3- и 5-угольными гранями (последних втрое больше).

Полиэдр с точечной группой комбинаторной симметрии -3 построен из гексагональной призмы, боковые грани которой изломаны рёбрами так, что образуют 3- и 5-угольные, чередующиеся вдоль периметров верхнего и нижнего оснований. Гранный символ [6, 0, 6, 2].

Полиэдр с точечной группой комбинаторной симметрии 6 построен по аналогии с простейшими представителями в классах 3 и 4: у n-угольного трапецоэдра (n – порядок главной оси симметрии) каждая «верхняя» 4-угольная грань делится ребром на 3- и 4-угольную, причём 3-угольные грани единообразно примыкают к «нижним» граням исходного трапецоэдра то нацело, то частично. Гранный символ [6, 6, 6].

Полиэдр с точечной группой комбинаторной симметрии *m*-3 (F=20, V=36) построен из пентагондодекаэдра усечением вершин, лежащих на осях симметрии 3-го порядка (что соответствует вершинам куба и граням октаэдра). Гранный символ [8, 0, 0, 0, 12]. Среди рассмотренных это первый простой полиэдр – в каждой вершине сходятся ровно три грани. Но при фиксированном числе граней все непростые полиэдры получаются в фёдоровском алгоритме последовательной редукцией рёбер, последовательно уменьшающей число вершин. Поэтому закономерно, что второй известный авторам полиэдр с точечной группой комбинаторной симметрии *m*-3 непростой и имеет V=24. Он получен из октаэдра, усечённого гранями куба, переламыванием последних вдоль диагоналей, как показано на рисунке 2. Гранный символ [12, 0, 0, 8].

Полиэдр с точечной группой комбинаторной симметрии 432 – пентагонтриоктаэдр, гранный символ [0, 0, 24].

Заключение

Внимательный анализ показывает, что интересующие нас точечные группы комбинаторной симметрии характеризуются осями чётного порядка, иногда в сочетании с перпендикулярными к ним плоскостями, или инверсионными осями нечётного порядка – всё это вынуждает искомые простейшие полиэдры иметь чётное число граней (это именно так для всех рассмотренных выше полиэдров). Но все комбинаторные типы простых полиэдров изучены авторами до F=16 [2], непростых – до F=12 [1]. Поэтому мож-

но утверждать, что описанные непростые полиэдры с точечными группами комбинаторной симметрии 422 и -3 (F=14, рис. 2) относятся к искомым с наименьшим возможным F. Но для них встаёт вопрос о единственности в своём классе. Так одна задача порождает другую, способствуя дальнейшему развитию кристалломорфологии – первой и «поверхностной» главы современной кристаллографии, далеко не исчерпавшей своего ресурса.

Список литературы

1. Войтеховский Ю.Л., Степенщиков Д.Г. Комбинаторная кристалломорфология // Выпуклые полиэдры. Кн. IV. Т. I. 4- ... 12-эдры. Апатиты. Изд-во: КНЦ РАН, 2008. 833 с.

2. Войтеховский Ю.Л., Степенщиков Д.Г. Комбинаторная кристалломорфология // Выпуклые полиэдры. Кн. IV. Т. II. Простые 13- ... 16-эдры. Апатиты. Изд-во: КНЦ РАН, 2008. 828 с.

3. Войтеховский Ю.Л., Степенщиков Д.Г. Метод поиска выпуклых полиэдров с заданной точечной группой симметрии // Тр. XVI Всерос. (с межд. участием) Ферсмановской научной сессии. Апатиты, 8-10 апр. 2019 г. Апатиты. Изд-во: КНЦ РАН, 2019. С. 77-79.

4. Попов Г.М., Шафрановский И.И. Кристаллография. М.: Высшая школа. 1964. 370 с.

5. Фёдоров Е.С. Основания морфологии и систематики многогранников // Зап. Импер. С.-Петербург. минер. об-ва. 1893. Ч. 30. С. 241-341.

6. Voytekhovsky Y.L. On the symmetry of 4- to 11-hedra // Acta Cryst. 2001. A57. P. 112-113.

7. Voytekhovsky Y.L. The Fedorov algorith*m* revised // Acta Cryst. 2001. A57. P. 475-477.

8. Voytekhovsky Y.L., Stepenshchikov D.G. On the symmetry of 9- and 10-hedra // Acta Cryst. 2002. A58. P. 404-407.

9. Voytekhovsky Y.L., Stepenshchikov D.G. On the symmetry of simple 12- and 13-hedra // Acta Cryst. 2002. A58. P. 502-505.

10. Voytekhovsky Y.L., Stepenshchikov D.G. On the symmetry of 11-hedra // Acta Cryst. 2003. A59. P. 195-198.

11. Voytekhovsky Y.L., Stepenshchikov D.G. On the symmetry of simple 14- and 15-hedra // Acta Cryst. 2003. A59. P. 367-370.

12. Voytekhovsky Y.L., Stepenshchikov D.G. The variety of convex 12-hedra revised // Acta Cryst. 2005. A61. P. 581-583.

13. Voytekhovsky Y.L., Stepenshchikov D.G. On the symmetry of simple 16-hedra // Acta Cryst. 2006. A62. P. 230-232.

ОСНОВНАЯ ТЕОРЕМА КРИСТАЛЛОГРАФИИ ¹

Войтеховский Ю.Л. Санкт-Петербургский горный университет, Санкт-Петербург, Voytekhovskiy_YuL@pers.spmi.ru

К 170-летию выхода в свет мемуара О. Браве «Замечания о симметричных многогранниках в геометрии» ².

Аннотация. Статья посвящена основной теореме классической кристаллографии – о невозможности осей симметрии *n*-го порядка при n = 5 и n > 6. Она имеет фундаментальное значение в естественных науках, резко разделяя минеральные и биологические структуры. Рассмотрены доказательства теоремы в ряде академических монографий и университетских учебников за последние 170 лет. Обращено внимание на методические нюансы доказательств.

Ключевые слова: основная теорема кристаллографии, оси симметрии, кристаллическая решётка.

Summary. The article is devoted to the main theorem of classic crystallography – on the impossibility of the *n*-fold axes of symmetry with n = 5 and n > 6. It is of fundamental meaning in the natural sciences, sharply separating mineral and biological structures. The proofs of the theorem in many academic monographs and university textbooks over the past 170 years are considered. Attention is paid to the methodological nuances of proofs of the theorem.

Keywords: the main theorem of crystallography, symmetry axes, crystalline lattice.

Введение

Основная теорема кристаллографии – о невозможности осей симметрии *n*-го порядка при n = 5 и n > 6 – имеет в естественнонаучном образовании (по меньшей мере, в образовании геолога) мировоззренческое значение, так как радикально отделяет минеральные структуры от биологических в том

¹ Так её назвал выдающийся российский кристаллограф и кристаллофизик, новаторпедагог и популяризатор науки Ю.В. Вульф: «Следующая теорема является основной для всего учения о кристаллографической симметрии» [6, с. 176].

² Е.С. Фёдоров [12, с. 8, 10] заметил: «Бравэ полагает начало новому направлению, по которому кристаллогра-фия является наукой дедуктивной, имеющей математический характер. Из весьма несовершенных воззрений Гаюи на структуру кристаллов, в трудах Бравэ выработалась изящная дедуктивная теория, не только не встретившая возражений, но имевшая с самого начала отклик в Германии в работах Франкенгейма, незави-симо и одновременно с Бравэ пришедшего к некоторым общим с ним результатам. Кроме теории структуры кристаллов Бравэ положил основание и теории симметрии – одному из важнейших отделов современного уче-ния о фигурах. <...> Это сочинение можно считать началом возобновления в новейшее время геометрического учения о фигурах <...>, так как все предшествовавшие работы этой области были слишком отрывочны и ка-сались почти всегда лишь небольшой группы вопросов».

смысле, что в последних указанные оси симметрии возможны. Поэтому в университетских курсах доказательства этой теоремы должны быть строгими и ясными. Исторический обзор показывает, что при немалом разнообразии они базируются, как правило, на решётчатом (трансляционном) строении кристалла и чаще всего выполняются методом «от противного»: «Допустим, ось симметрии 5-го порядка в кристалле возможна» – и сводятся к противоречию. Завершаются они обычно фразой: «Невозможность осей *n*-го порядка при n > 6 можно доказать аналогично». Это плохой методический приём, приглашающий в потенциальную бесконечность и опирающийся более на интуицию, чем на логику. А ведь кристаллография – последний оплот строгого мышления в образовании геолога. Есть доказательства, получающие разрешённые порядки осей симметрии в виде решения тригонометрического уравнения. Но и в них есть важные методические нюансы, заслуживающие обсуждения.

Важное замечание касается шехтманитов – сплавов, в которых есть локальные упорядоченные области, но нет глобальной трансляционной структуры. Последнее подчёркнуто приставкой «квази», то есть «почти», в их названии – «квазикристаллы». Они быстро вошли в сферу интересов кристаллографов. Чтобы узаконить это, в 1992 г. Международный союз кристаллографов (МСК) переопределил кристалл как конденсированное вещество, которое даёт дискретную дифракционную картину рассеяния рентгеновских лучей. Классический кристалл стал частным случаем в мире кристаллов, а основная теорема кристаллографии потеряла свой статус... Шаг, предпринятый МСК, методологически некорректен. Понятие «кристалл» подменено понятием «объект кристаллографии» или даже «объект, интересный ряду кристаллографов». Определяя природный феномен по сути, следует апеллировать к ней же, а не к физическому методу диагностики. Что касается сути, при отнесении «почти-кристаллов» к миру кристаллов акцент был заинтересованно сделан на локальных порядках, несмотря на «запрещённые» для кристаллов оси симметрии. С тем же логическим основанием он мог быть сделан на «запрещённых» осях симметрии и отсутствии трансляционного порядка.

В этой статье под кристаллом понимается классический кристалл, как он понимался всеми далее упомянутыми авторами. «Основная теорема кристаллографии» для автора статьи, как и для назвавшего её Ю. В. Вульфа, сохраняет свой статус.

Исторический обзор.

О. Браве (1849) доказал основную теорему в «Мемуаре о системах точек, правильно расположенных на плоскости или в пространстве» [4, с. 83]. Из предшествующего текста (рис. 1): О – точка пересечения оси симметрии порядка q с плоскостью рисунка (сетки), М – узел сетки, МО – перпендикуляр к оси симметрии, Q = 360°/q = MOM' = M'OM'' – элементарный угол поворота.

«Совокупность (точек, образующих примитивную решётку – Ю.В.) может обладать только двойными, тройными, четверными и шестерными осями симметрии. На ММ', М'М'' строим ромб ММ'М''т. Точка т будет узлом совокупности. Легко находим, что Om = OM' (1 – 4 sin² Q/2). Если: q = 2, Q = 180°, Om = –3 OM'; q = 3, Q = 120°, Om = –2 OM'; q = 4, Q = 90°, Om = –OM'; q = 5, Q = 72°, Om = – $3\sqrt{5/2}$ OM' \approx –0.382 OM'; q = 6, Q = 60°, Om = 0; q > 6, Q < 60°, Om < OM'. Решения q = 5 и q > 6, очевидно, невозможны, ибо всегда можно предположить, что M взята на наименьшем расстоянии от оси вращения и, следовательно, неравенство Om < OM' невозможно, исключая случай, когда Om = 0, ибо тогда O будет узлом совокупности. Следовательно, если совокупность обладает осью симметрии, то порядковый номер симметрии, свойственной этой оси, может быть равен q = 2, 3, 4, 6». Доказательство требует пояснений.

(1) Характер поворотной точки О не оговорен. При q = 6 она совпадает с m, поэтому – узел сетки. Но это не обязательно [11, с. 38]: «В частном случае О может совпадать с одним из узлов». Нет пояснений в [13, с. 39]: «Точка L_n – выход оси симметрии n-го порядка <...>. Точку L_n принимаем за узел кристаллической решётки». Аналогично в [15, с. 83-84]: «Выберем произвольную точку A на оси симметрии, которая перпендикулярна плоскости чертежа. <...> Все точки A, B, C, B – узлы решётки». Как A превратилась в узел решётки? Пояснение есть в [5, с. 67]: «Операции переноса t_1 , t_2 совмещают между собой все трансляционно равные точки, в том числе и поворотные точки (оси), следовательно, эти точки образуют сетку».

Оно есть и у О. Браве [4, с. 84] со ссылкой на О. Коши: «Когда в совокупности существует ось симметрии, не проходящая через узлы, то прямые, параллельные этой оси и проходящие через узлы, обладают той же симметрией. <...> Может случиться, что новая ось будет иметь более высокий порядок, который всегда должен быть кратным порядку симметрии рассматриваемой оси. <...> Без нарушения строгости можно ограничиться рассмотре-



Рис. 1. К доказательству основной теоремы [4, с. 135, рис. 13].

нием осей, проходящих через узел».

(2) Алгебраическое выражение для От «легко находим» из подобия равнобедренных треугольников mMM' и MOM' с углами при основании (180° – Q) / 2 = 90° – Q/2. Из пропорции mM' / MM' = MM' / OM следует mM' = (MM')² / OM. Но MM' = 2 OM cos (90° – Q/2) = 2 OM sin Q/2. Поэтому mM' = 4 OM sin² Q/2. Окончательно Om = OM' – mM' = OM' (1 – 4 sin² Q/2), т. к. OM = OM'.

(3) При q = 2 - 5 смущают отрицательные расстояния Om = -3 OM', -2 OM', -OM' и -0.382 OM'. Они означают, что точки m и M' лежат по разные стороны от O. Но нельзя требовать от студента (не математика) столь абстрактного мышления (более того, метафорического, поскольку отрицательное расстояние – нонсенс и в математике), каким обладал O. Браве. Исправить ситуацию можно, заключив тригонометри-
ческую часть формулы под знак модуля. Но для случаев q = 1 - 6 рис. 1 следует «распаковать» (рис. 2). В данном виде он соответствует порядкам осей q > 6 и, конечно, доказывает их невозможность, так как при $0 < Q < 60^{\circ}$ имеем Om < OM' = OM - противоречие с предположением об отсутствии узлов внутри круга радиуса OM.

(4) Доказательство сводится к противоречию с решётчатым строением кристалла. Это понятно, ибо оно опубликовано рядом с выводом знаменитых «решёток Браве».

А.В. Гадолин (1867) дал исторически первый строгий вывод 32 кристаллических видов симметрии. Это было бы невозможно без доказательства основной теоремы. Оно дано в работе [7] в виде ряда утверждений: «Несколько возможных кристаллографических осей, направленных вдоль по рёбрам правильной пирамиды, могут существовать только тогда, если косинус центрального угла основания этой пирамиды есть рациональная величина» (с. 15). «При существовании оси совмещения угол совмещения может



Рис. 2. К доказательству основной теоремы. Слева направо, сверху вниз: q = 1 - 6.

иметь только некоторые определённые значения, а именно 60°, 90°, 120° и 180°» (с. 17). Последнее содержит две леммы: «угол совмещения непременно составляет целую часть от 360°» (с. 17) и «в приложении В доказано, что целые части от 360° могут иметь рациональные косинусы только тогда, если эти косинусы имеют одно из значений $0, \pm \frac{1}{2}, \pm 1$ » (с. 18). Заметим, что приложение В (с. 66-69) – исследование тригонометрических рядов, неподъёмное для большинства студентов-геологов. В целом, доказательство А.В. Гадолина оригинально, но по сравнению с предыдущим более сложно. Оно интересно тем, что согласует разрешённые оси симметрии непосредственно

с законом Р.Ж. Гаюи рационального отношения параметров, предшествовавшим результатам О. Браве.

Ю.В. Вульф (1897) дал своё доказательство основной теоремы, отметив: «Приводимое доказательство принадлежит Бравэ, но несколько изменено автором. Основной закон кристаллографии допускает между плоскостями симметрии только углы в 30°, 45°, 60°, 90° и 180°» [6, с. 176]. «Наиболее простое доказательство этого положения получим, исходя из понятия о кристаллической однородности. <...> Одинаковые по своим свойствам точки кристаллической среды располагаются по прямым на равных расстояниях друг от друга, причём для различного направления прямых расстояния точек вообще различны» (ibid.). Ю.В. Вульф получает соотношение, сходное с таковым О. Браве и разрешимое относительно углов между плоскостями симметрии: 0° и 180°, 30°, 45°, 60° и 90°. Далее использована теорема: «Мы должны принять во внимание результаты действия обеих плоскостей симметрии, т. е. вращение, величина которого будет 2 α , если назвать α угол между плоскостями» (ibid.). Удвоением получаются элементарные углы вращения, которым соответствуют порядки осей симметрии 2, 3, 4 и 6.

Акцент на плоскостях симметрии понятен. Именно Ю.В. Вульф в поисках единого основания свёл все элементы симметрии к плоскостям, показав, что две конечные (совместимо или зеркально) равные фигуры можно совместить не более чем тремя отражениями. И всё же предложенное им доказательство кажется отягощённым по сравнению с таковым О. Браве.

А.К. Болдырев (1926, 1930, 1931, 1934) в доказательстве основной теоремы полностью следует О. Браве. «При помощи теории Браве легко показать, что в кристаллах, кроме одинарных, двойных, тройных, четверных и шестерных осей, никаких других быть не может. Докажем это положение только для пятерной поворотной оси. Для семерной, восьмерной и т. д. доказательство будет аналогично. <...> Предположим, что пятерная поворотная ось симметрии существует в пространственной решётке...» [2, с. 83-84; 3, с. 72]. По-видимому, именно с учебников А.К. Болдырева началось пренебрежение формулами и апеллирование к аналогии, возможно, потому, что они написаны для рабфаковской молодёжи и инженерных специальностей.

В.В. Доливо-Добровольский (1937) принимает то же доказательство. Возможность дигиры (оси 2-го порядка), тригиры и тетрагиры он показывает на примере примитивной кубической, гексагиры – на примере гексагональной решётки. Это удачный приём. Остаётся доказать невозможность других гир. «Теорема 10. Кристаллические решётки, а следовательно, и кристаллы не могут обладать пентагирами. Предположим противное... <...> Теорема 11. Кристаллические решётки, а следовательно, и кристаллы не могут обладать пентагирами предположим противное... <...> Теорема 11. Кристаллические решётки, а следовательно, и кристаллы не могут обладать гирами наименования n = 7, 8, 9 и выше. Доказательство совершенно аналогично...» [10, с. 115-116].

Е.Е. Флинт (1937) ограничивается схемой доказательства, отсылая к предыдущим теоремам. «Эти положения ограничивают возможные поряд-

ки для поворотных осей симметрии всего четырьмя: L², L³, L⁴ и L⁶ <...>. Причина этому очень простая. На основании теоремы 3 (всякая плоскость, проходящая через узел решётки перпендикулярно оси симметрии решётки, есть сетчатая плоскость – HO.B.) всякий узел при вращении около оси симметрии должен оставить на сетчатой плоскости след в виде многоугольника, а согласно теореме 1 (всякая прямая, параллельная оси симметрии и проходящая через узел решётки, есть ось симметрии того же порядка для этой решётки – HO.B.), вся эта сетчатая плоскость должна быть покрыта такими многоугольниками, плотно прилегающими друг к другу. Это вполне возможно в том случае, когда сетка состоит из параллелограммов (в частности ромбов, прямоугольных четырёхугольников, квадратов и правильных треугольников. Но из пятиугольников сетку построить уже нельзя, следовательно, L⁵ в кристаллах невозможна. Невозможны также и все оси порядка выше 6 по той же причине» [14, с. 33-34].

Г.М. Попов и **И.И. Шафрановский** (1941, 1947, 1955, 1964, 1972) следуют А.К. Болдыреву и В.В. Доливо-Добровольскому, опуская выкладки. «В решётчатых системах, а следовательно, и в кристаллах, невозможны оси пятого порядка и оси порядка выше шести. Докажем это положение для пятерной оси. Предположим, что пятерная ось в кристаллах возможна. <...> Пятерная ось противоречит расположению атомов в решётчатых системах и тем самым невозможна в кристаллах. Подобным же путём доказывается невозможность существования в кристаллических телах осей семерного, восьмерного и выше порядков» [11, с. 38-39].

О.М. Аншелес (1952) повторяет предыдущих авторов. «Докажем, что в пространственной решётке невозможны оси симметрии пятого порядка и порядков выше шестого. <...> Применим метод доказательства, которым часто пользуются в геометрии и который называется «доказательством от противного». Предположим, что пятерная ось симметрии возможна в пространственной решётке. <...> Таким образом, существование пятерной оси симметрии противоречит свойствам пространственных решёток. <...> Таким же образом доказывается невозможность существования в кристаллах осей симметрии n-го порядка, если n > 6» [1, с. 88-90].

Б.Н. Делоне, Р.**В. Галиулин** и **М.И. Штогрин** (1974) излагают схему доказательства по О. Браве в двух предложениях. «Порядок поворотной оси, совмещающей решётку с собой, может быть только 2, 3, 4 или 6. Для доказательства примем за точку М самую близкую к оси точку решётки, лежащую в плоскости Р, перпендикулярной к оси, но не лежащую на самой оси. Для всех правильных многоугольников, кроме двуугольника, правильного треугольника, квадрата и правильного шестиугольника, откладывая соответствующим образом вектор, соединяющий две последовательные его вершины, из какой-нибудь его вершины, можно получить точку решётки, лежащую в плоскости Р, не лежащую на оси, но лежащую к ней ближе, чем точка М, что противоречит нашему предположению о точке М» [9, с. 314; 8, с. 62].



Рис. 3. К доказательству основной теоремы [5, с. 67, рис. 39].

Б.К. Вайнштейн (1979) тоже следует О. Браве (рис. 3). «Рассмотрим плоскую сетку и возможные повороты плоскости, совмещающие сетку с собой. Поворотные точки (оси), если они есть, сами являются точками этой плоскости. Операции переноса t_1 , t_2 совмещают между собой все трансляционно равные точки, в том числе и поворотные точки (оси), сле-

довательно, эти точки образуют сетку. Выберем в сетке ряд таких точек, для которого расстояние *а* между ними – кратчайшее, и рассмотрим действие какой-то поворотной точки N из этого ряда на две ближайшие точки N' и N''» [5, с. 67].

Далее показано, что оси N = 2, 3, 4 и 6 не противоречат, а оси N = 5 и N > 6 противоречат минимальности расстояния *а* между узлами. Но автор обходится без построения ромба, порождающего узел сетки, противоречащий допущению. При N = 5 повороты точек N' и N'' в разных направлениях дают вершины правильного 10-угольника. При N > 6 достаточно поворотов одной из точек N' или N''. Во всех этих случаях противоречие создаётся тем, что при N > 6 сторона правильного N-угольника меньше радиуса описанной окружности.

Е.В. Чупрунов, **А.Ф. Хохлов**, **М.А. Фаддеев** (2006) и **С.К. Филатов**, **С.В. Кривовичев**, **Р.С. Бубнова** (2018) приводят два сходных доказательства, интересных тем, что разрешённые порядки осей симметрии получаются из тригонометрического уравнения (рис. 4). «Одним из красивейших следствий решётчатого строения кристаллов является основной закон симметрии кристаллов, утверждающий, что в кристаллах возможны поворотные и инверсионные оси симметрии лишь 1, 2, 3, 4 и 6 порядков. Докажем

эту теорему. На рисунке точка L_n – выход оси симметрии n-го порядка с элементарным углом поворота 360 / n = α . Точку L_n принимаем за узел кристаллической решётки. Слева и справа от неё на расстоянии *а* расположены узлы решётки A и B. Повернём эти узлы на угол α вокруг оси симметрии: точку A по ходу часовой стрелки, точку B – против часовой стрелки (в обоих случаях решётка совме-



Рис. 4. К доказательству основной теоремы [13, с. 39-40, рис. 2.2].

стится сама с собой в соответствии с определением оси симметрии L_n). Полученные точки A' и B' лежат на прямой, параллельной трансляции *a*, следовательно, в кристалле между ними должно укладываться целое число трансляций *na*. Из рисунка следует также, что *na* = A'B' = 2 *a* соs α, откуда *n* = 2 соs α. В правой части последнего равенства стоит целочисленная функция. Это возможно при значениях косинуса 1, 1/2, 0, -1/2 и -1, что отвечает элементарным углам поворота 0°, 60°, 90°, 120° и 180° соответственно, т. е. осям симметрии 1, 6, 4, 3 и 2 порядков» [13, с. 39-40].

Шероховатости рассуждения очевидны. (1) Точку L_n можно принять за поворотную, но за узел решётки – с пояснениями (см. выше). (2) Важно подчеркнуть, что узлы А и В – ближайшие к L_n , т. е. *а* – элементарная трансляция, иначе в отрезке А'В' не обязано вмещаться целое число трансляций *na*. (3) При отрицательных значениях соз α получаем отрицательное число трансляций. Следует пояснить, что при углах 120° и 180° трансляции в направлении АВ противоположны трансляциям в направлении А'В'. (4) Следует убедиться, что для полученных углов α между образами точек А и В нет расстояний, меньших *a*, как это сделано в [5, с. 67].

Обсуждение

Обзор показал, что в доказательстве основной теоремы почти все авторы (кроме А.В. Гадолина) отталкиваются от решётчатого строения кристалла по О. Браве. И почти все (кроме Ю.В. Вульфа) работают прямо с осями симметрии. Часть авторов строго следуют О. Браве, получая двуединый результат: непротиворечивость порядков n = 2, 3, 4, 6 и, наоборот, противоречивость n = 5 и n > 6. При этом В.В. Доливо-Добровольский «разрубает гордиев узел», доказывая возможность порядков n = 2, 3, 4, 6 предъявлением примеров (рис. 5). Заметим, что на них же удобно пояснить теорему Коши-Браве о соотношении порядков осей симметрии, проходящих и не проходящих через узлы решётки. Невозможность порядков n = 5 и n > 6 легче всего показать по О. Браве (рис. 1) с учётом сделанных оговорок. Впрочем, последние два доказательства (рис. 3) привлекают тем, что получают разрешённые порядки осей симметрии из уравнения, не оставляя места рассу-



Рис. 5. Решётки с осями симметрии 6, 3, 2 (слева) и 4, 4, 2 (справа).

ждениям о запрещённых порядках. Но и здесь важен ряд оговорок и предъявление решёток с разрешёнными осями симметрии.

Заключение

Ещё раз подчеркнём мировоззренческое значение основной теоремы кристаллографии, резко разделяющей минеральные и биологические структуры. Вспоминается метафора, приписываемая Н.В. Белову: «Жизнь защищается от кристаллизации осью пятого порядка», и рефрен И.И. Шафрановского: «Крепко запомните – не бывает пятиугольных снежинок!» Что касается доказательств теоремы в университетском курсе кристаллографии, преподаватель волен выбирать, исходя из подготовленности студентов и личных пристрастий. Лучше всего показать студентам (факультативно) весь спектр доказательств, расширяя их кругозор, прививая любовь к строгости мышления и истории науки. Мы постарались оттенить особенности разных подходов. Основная теорема кристаллографии не сложна, но не примитивна. В любом доказательстве есть целый ряд нюансов. Как всегда, «дьявол кроется в мелочах».

В связи с объективным расширением круга кристаллографических объектов профессиональному сообществу следует определить принципы и предвидеть последствия. Кажется очевидным, что не относится к кристаллографии объект, в котором нет никакого порядка. Но математическое определение порядка весьма широко. Поэтому, разрешая глобальные и локальные, строгие и нестрогие, квази- и фрактальные (масштабно-инвариантные) порядки, мы закономерно придём к инвариантности произвольной характеристики объекта. Грядущий методологически последовательный результат – Земля как кристалл: в пространственной организации видим оболочки, в истории реконструируем периодические процессы... Но не слишком ли много для кристаллографии?

Выше сказано, вослед многим предшественникам, что основная теорема кристаллографии резко разделяет минеральные и биологические структуры. Эта формулировка была бы ещё более корректной, если бы в биологии имела место сходная теорема, пусть не исчерпывающая вопрос, хотя бы ослабленная, запрещающая какие-либо элементы симметрии и их сочетания. Разрешённые элементы симметрии и их сочетания известны исключительно по наблюдениям в природе. Возможны ли такие теоремы для биологических объектов? Отметим эту тему для другой статьи...

Список литературы

- 1. Аншелес О.М. Начала кристаллографии. Л. Изд-во: ЛГУ, 1952. 276 с.
- 2. Болдырев А.К. Основы кристаллографии. Л. Изд. КУБУЧ'а, 1926. 186 с.
- 3. Болдырев А.К. Кристаллография. Л.: Областлит, 1930. 331 с. (2 изд. 1931. 331 с.; 3 изд. 1934. 431 с.)
- 4. Браве О. Избранные научные труды. Кристаллографические этюды. Л.: Наука, 1974. 419 с.

5. Вайнштейн Б.К. Современная кристаллография. Т. 1. Симметрия кристаллов, методы структурной кристаллографии. М. Изд-во: Наука, 1979. 384 с.

6. Вульф Ю.В. Симметрия и вывод всех её кристаллографических видов // Избранные работы по кристаллофизике и кристаллографии. М.-Л.Изд-во: Гостехиздат, 1952. С. 167-191.

7. Гадолин А.В. Вывод всех кристаллографических систем и их подразделений из одного общего начала. Л. Изд-во: АН СССР, 1954. 156 с.

8. Галиулин Р.В. Кристаллографическая геометрия. М.: URSS, 2009. 136 с.

9. Делоне Б.Н., Галиулин Р.В., Штогрин М.И. Геометрический вывод результатов Браве // Браве О. Избранные научные труды. Кристаллографические этюды. Л. Изд-во: Наука, 1974. С. 310-322.

10. Доливо-Добровольский В.В. Курс кристаллографии. Л.-М.: ОНТИ, 1937. 348 с.

11. Попов Г.М., Шафрановский И.И. Кристаллография. М.-Л. Изд-во: Госгеолиздат, 1941. 242 с. (2 изд. 1947. 262 с.; 3 изд. 1955. 296 с.; 4 изд. 1964. 370 с.; 5 изд. 1972. 352 с.)

12. Фёдоров Е.С. Курс кристаллографии. СПб.: Тип. П.П. Сойкина, 1897. 376 с.

13. Филатов С.К., Кривовичев С.В., Бубнова Р.С. Общая кристаллохимия. СПб. Изд-во: СПбГУ, 2018. 276 с.

14. Флинт Е.Е. Практическое руководство по геометрической кристалло-графии. М.-Л.: ОНТИ, 1937. 156 с.

15. Чупрунов Е.В., Хохлов А.Ф., Фаддеев М.А. Основы кристаллографии. М. Изд-во: Физматлит, 2006. 500 с.

О ЧИСЛЕ РАЗБИЕНИЙ ПЛОСКОСТИ НА ПОЛИМИНО ИЛИ ПОЛИГЕКСЫ ЗАДАННОЙ ПЛОЩАДИ

Коломейкина Е.В.¹, Шутов А.В.²

¹ Московский государственный технический университет им. Н.Э. Баумана, Mocквa, pihta2@rambler.ru

² Владимирский государственный университет, Владимир, a1981@mail.ru

Аннотация. В работе представлен перечень результатов авторов, описывающих нижнюю и верхнюю оценки числа решётчатых и р2-разбиений плоскости на полимино, центрально-симметричные полимино, полигексы и центрально-симметричные полигексы заданной площади. Доказательство оценок для разбиений основано на критерии существования решётчатых разбиений на полимино или полигексы, а также на теории самонепересекающихся блужданий.

Ключевые слова: разбиения, решётчатые разбиения, р2-разбиения, полимино, полигексы, самонепересекающиеся блуждания.

Abstract. We study a problem about a number of lattice plane tilings and p2-plane tilings by the given area polyominoes, centrosymmetrical polyominoes, polyhexes and centrosymmetrical polyhexes. The list of results about a number such tilings is introduced in this paper. In the proof of a lower bound we give an explicit construction of required lattice plane tilings. The proof of an upper bound is based on a criterion of the existence of lattice plane tiling by polyominoes, and on the theory of self-avoiding walks on a square lattice.

Keywords: tilings, lattice tilings, p2-tilings, poliomino, polyhexes, the self-avoiding walks.

Введение

Полимино представляет собой связную фигуру на плоскости, составленную из конечного числа единичных квадратов, примыкающих друг к другу по сторонам. Понятие это было введено Голомбом [1], и с тех пор занимает внимание любителей математики, а позднее и профессиональных исследователей всего мира. Можно считать, что все вершины полимино являются точками целочисленной решётки. Одной из важных задач, связанных с полимино, является нахождение необходимых и достаточных условий существования разбиения плоскости на заданные полимино. В работе [2] найдены все классы полимино, разбивающие плоскость, с числом клеток не больше 7. Позднее в работе Роадса [3] было проведено аналогичное исследование для числа клеток не больше 9. В работе Майерса [4] приведена классификация полимино по типу даваемого ими простейшего разбиения плоскости для числа клеток полимино не больше 25.

Полигекс представляет собой связную геометрическую фигуру на плоскости, составленную из конечного числа правильных шестиугольников площади 1, таких, что каждый шестиугольник, входящий в полигекс, имеет ребро с каким-либо другим шестиугольником этого полигекса. Отметим, что полигексы можно рассматривать как конечные подмножества шестиугольного паркета со связной внутренностью. Полигексы изучались в работах Голомба, Гарднера, Роадса, Майерса, Малеева [5] и других авторов. В популяризацию математических задач, связанных с полигексами, большой вклад внёс Гарднер и включил соответствующие главы в свои книги.

Разбиение плоскости называется трансляционным, если любую фигуру разбиения можно перевести в любую другую фигуру разбиения некоторым параллельным переносом. Разбиение плоскости на полигоны (ячейки) называется решётчатым, если любой полигон (ячейку) можно перевести в любой другой полигон (ячейку) разбиения параллельным переносом, совмещающим всё разбиение с собой. Иными словами, разбиение на полигоны считается решётчатым, если существует группа трансляций (параллельных переносов) плоскости, которая действует на множестве ячеек транзитивно. Очевидно, что решётчатые разбиения являются подмножеством трансляционных разбиений. Мы рассматриваем решётчатые разбиения плоскости на полимино и полигексы, гомеоморфные диску. Два разбиения плоскости будем называть эквивалентными, если существует движение плоскости, переводящее одно разбиение в другое. Число трансляционных разбиений плоскости на полимино заданной площади, топологически эквивалентных правильному разбиению плоскости на квадраты, было рассмотрено в работе Бреко и Фросини [6]. Разбиение плоскости на полигоны мы называем *p2-разбиением*, если любой полигон можно перевести в себя отражением или параллельным переносом, совмещающим всё разбиение с собой.

Результаты

Пусть площадь полимино n, то есть полимино состоит из n квадратов площади 1 каждый. Возникает вопрос о подсчёте числа t(n) решётчатых разбиений, а также p2-разбиений плоскости на полимино или полигексы заданной площади n. Числа t(n) для малых значений n были вычислены в работах Глена Роудса и А.В. Малеева. Приведём здесь список основных результатов, полученных авторами, связывающих эти понятия.

Теорема 1 [7]. Если *t*(*n*) – число решётчатых разбиений плоскости на полимино заданной площади *n*, то справедливы следующие неравенства:

$$2^{n-3} + 2^{\left\lfloor \frac{n-3}{2} \right\rfloor} \le t(n) \le C(n+1)^3 2.7^{n+1}.$$

Теорема 2 [8]. Для числа $t_C(n)$ решётчатых разбиений плоскости на центрально-симметричные полимино заданной площади *n*, решётка периодов которой является подрешёткой решётки Z^2 , имеют место следующие оценки:

$$C_1 2^{\frac{n}{2}} \le t_c(n) \le C_2 n^2 2.68^{\frac{n}{2}}.$$

Теорема 3 [9]. Для числа *t*(*n*) p2-разбиений разбиений плоскости на полимино заданной площади *n*, решётка периодов которой является подрешёткой решётки, справедливы следующие оценки:

 $C_1 2^{\frac{n}{2}} \le t(n) \le C_2 n^2 1.85^n$.

Теорема 4 [10]. Для числа *t*(*n*) решетчатых разбиений плоскости на центрально-симметричные полигексы заданной площади *n*, решётка периодов которой является подрешёткой гексагональной решётки, справедливы следующие оценки:

$$C_1 2^n \le t(n) \le C_2 n^4 2.68^n$$
.

Теорема 5 [11]. Для числа t(n) p2—разбиений плоскости на полигексы заданной площади n, решётка периодов которой является подрешёткой гексагональной решётки, справедливы следующие оценки:

$$C_1 2^n \le t(n) \le C_2 n^5 3.42^n$$
.

Все константы в теоремах не зависят друг от друга и различны. При доказательстве нижних оценок данных утверждений была использована явная конструкция, позволяющая построить требуемое число решётчатых разбиений плоскости. Доказательство верхней оценки основано на критерии существования решётчатого разбиения плоскости на полимино, а также на теории самонепересекающихся блужданий на квадратной решётке [12].

Также заметим, что p2-разбиения плоскости на центральносимметричные полимино – это тоже самое, что и решётчатые разбиения плоскости на центрально-симметричные полимино, а p2-разбиения плоскости на центрально-симметричные полигексы – это тоже самое, что и решётчатые разбиения плоскости на центрально-симметричные полигексы. Оценки для них представлены выше.

Список литературы

- 1. Голомб С. Полимино М. Изд-во: Мир, 1975. 207 с.
- 2. Гарднер М. Путешествие во времени. М. Изд-во: Мир, 1990. 341 с.
- 3. Glenn C. Rhoads Planar tilings by polyominoes, polyhexes, and polyiamonds // Journal of Computational and Applied Mathematics. 2005. 174 C. 329-353.

4. Myers J. Polyomino, polyhex and polyiamond tiling. URL: http://www.srcf. ucam.org/jsm28/tiling/

5. Малеев А.В. Кристаллография. 2013. Т. 58(5). С. 749-756.

 Brlek S., Frosini A., Rinaldi S., Vuillon L. Tilings by translation: enumeration by a rational language approach // The electronic journal of combinatorics. 2006.
 R15. 7. Шутов А.В., Коломейкина Е.В., Оценка числа решётчатых разбиений плоскости на полимино заданной площади // Моделирование и анализ информационных систем. 2013. Т. 20(5). С. 148-157.

8. Шутов А.В., Коломейкина Е.В. Оценка числа решётчатых разбиений плоскости на центрально-симметричные полимино заданной площади // Моделирование и анализ информационных систем. 2015. Т. 22(2). С. 295-303.

9. Шутов А.В., Коломейкина Е.В. Оценка числа p2-разбиений плоскости на полимино заданной площади // Чебышевский сборник. 2016. Т. 17. Вып. 3(59). С. 204-214.

10. Шутов А.В., Коломейкина Е.В. Оценка числа решётчатых разбиений плоскости на центрально-симметричные полигексы заданной площади // Дальневосточный математический журнал. 2017. Т. 17. № 2. С. 257-265.

11. Шутов А.В., Коломейкина Е.В., Оценка числа p2-разбиений плоскости на полигексы заданной площади // Математические исследования в естественных науках. Тр. XIV Всероссийской научной школы. Апатиты. Изд-во: К&М. 2017. С. 63-68.

12. Madras N., Slade G. The self-avoiding walk // Birkhauser. ISBN 978-0-8176-3891-7.

КРИСТАЛЛОГРАФИЯ МНОГОГРАННИКА ИВАНОВА Q₁

Кучериненко Я.В.¹, Макаров В.С.² ¹ МГУ им. М.В.Ломоносова, геологический факультет, Москва, yar_kuch@mail.ru ² МГУ им. М.В.Ломоносова, механико-математический факультет, Москва, vsmak@mail.ru

Аннотация. Показано, что многогранник Иванова Q₁ является трёхмерной гранью одной из четырёхмерных простых форм (изоэдров) в четырёхмерной точечной группе, порождённой винтовой осью 12/5. Приведена полная классификация простых форм для указанной группы.

Summary. It's shown, that Ivanov solid Q_1 is a 3-face is one of four-dimensional regular crystal forms (isohedra), in four-dimensional point group generated by screw rotation axis 12/5. Classification of all crystal forms (isohedra) in this group was studied.

Многогранник Иванова Q_1 (рис. 1) – это скошенная шестиугольная призма с правильными шестиугольными основаниями, парой противоположных квадратных боковых граней и четырьмя боковыми ромбическими гранями, составленными каждая из двух правильных треугольников (паркетные грани) [1, 2]. Многогранник Q_1 является параллелоэдром, т.е. разбивает пространство параллельными копиями и это разбиение тесно связано с разбиением пространства на тетраэдры и октаэдры, хорошо известное в теории плотнейших упаковок шаров.

Классифицируя выпуклые многогранники в порядке понижения правильности, вслед за пятью платоновыми телами и тринадцатью архимедовыми (вместе с правильными призмами и антипризмами), на наш взгляд, следует упомянуть 92 правильногранных многогранника Джонсона [3], полнота списка которых была установлена Залгаллером [4], а также 28 несо-



Рис. 1. Многогранник Q₁. Пунктиром показаны условные рёбра.

ставных правильногранных многогранников Залгаллера [4]. Естественными их обобщениями являются паркетогранники Иванова $Q_1 - Q_5$ [1] и Пряхина Q_6 [5]. Это класс правильногранных многогранников, в которых считаются допустимыми т.н. паркетные грани – выпуклые многоугольники, составленные из правильных многоугольников, и возникающие в связи с этим условные рёбра. Если условимся считать, что этих рёбер нет, то многогранник становится строго выпуклым, если же считать, что они есть – то правильногранным. Многогранники $Q_1 - Q_6$ являются несоставными (при условии недопущения условных вершин). Полный список составных паркетогранников был получен А.В. Тимофеенко [2]. Их 3D изображения можно посмотреть на сайте по ссылке http://tupelo-schneck.org/ polyhedra.

Многогранник Q_1 заинтересовал нас при рассмотрении описаний геометрии бикристаллов и трёхмерных сферических многообразий [6, 7], когда он появился в виде гномонической проекции ячейки правильного разбиения трёхмерной сферы в группе $C_3^* \times C_2^*$ (наряду с разбиением S³ на правильные шестиугольные призмы). В данной работе мы покажем, что многогранник Q_1 является гранью одного из четырёхмерных изоэдров (простых форм) в указанной четырёхмерной точечной группе симметрии, а также будет приведена полная классификация простых форм в этой группе.

Теорема. В группе $C_{3}^{*} \times C_{2}^{*}$ возможны три типа изоэдров:

1) с трёхмерными гранями – пинакоидами (трёхмерными слоями, ограниченными двумя параллельными плоскостями);

2) правильными призмами;

3) скошенными призмами, в том числе – многогранниками Иванова Q₁ (общая простая форма).

Для доказательства рассмотрим вначале действие порождающей операции – винтового поворота 12/5, действующего на трёхмерной сфере (рис. 2). Пусть ось винтового поворота направлена на нас (точка в центре рис. 2). Операция представляет комбинацию сдвига вдоль оси на 1/12 окружности большого круга и поворота вокруг неё на величину, в пять раз большую. Точка 0 переходит в точку 1. Точка 1 повёрнута вокруг оси 12/5 на $2\pi/(12/5)$ (по отношению к точке 0) и сдвинута вдоль оси на $2\pi/12$.

Легко видеть, что, повторив описанный винтовой поворот пять раз подряд, получим поворот исходного вида, но вокруг другой оси, ортогональной к первой (на рис. 2 она символически показана внешней окружностью). Каждая точка одной оси удалена от любой точки другой оси на π/2 и обе оси



Рис. 2. Вспомогательный чертёж, поясняющий винтовой поворот 12/5, порождающий группу C^{*}₃×C^{*}₂ – конечную циклическую группу 12-го порядка.

эквивалентны, т.е. вокруг каждой из них осуществляются одни и те же геометрические операции, причём порождающая операция, осуществлённая вокруг одной оси, является пятой степенью аналогичной операции другой оси. Поэтому существует всего три различные возможности поместить на трёхмерную сферу исходную касательную точку: на одной из осей 12/5, ровно посередине между ними, а также (третий и последний вариант) – в общем положении на любом другом расстоянии от осей. Фактически надо точку, удалённую от оси 12/5 на величину $\theta \in [0, \pi/4]$ – замкнутый промежуток, включающий и крайние и внутренние значения.

1) Очевидно, что если исходная точка лежит на одной из осей 12/5, то и все остальные размноженные точки орбиты точки также лежат на ней, разбивая её на дуги длиной $2\pi/12=\pi/6$, как риски на циферблате часов. Касательные трёхмерные гиперплоскости, пересекаясь, дадут бесконечный многогранник, аналогичной 12-гональной призме – открытую простую форму с 12-ю трёхмерными гипергранями, каждая из которых является областью трёхмерного пространства, заключённой между двумя параллельными плоскостями (т.е. имеем 12 пинакоидов).

Для рассмотрения двух других случаев воспользуемся тем свойством группы $C_3^* \times C_2^*$, что любая её орбита состоит из двух подмножеств по 6 точек в каждом, причём располагаются они в вершинах правильного шестиугольника (это следует из свойства группы C_3^* , каждая орбита которой является именно такой шестёркой точек (см., например, [6, 7]). Поэтому каждая из касательных плоскостей пересечётся (так, что это пересечение даст общие двумерные грани, рёбра и вершины) только с парой ближайших гиперплоскостей из своей шестёрки, но со всеми плоскостями из соседней шестёрки (см. рис. 3).

На рисунке 3 показан известный четырёхмерный многогранник (см., например, [8]), трёхмерная поверхность которого состоит из 12-ти правильных шестиугольных призм, причём они образуют два многогранных полнотория, по 6 призм в каждом. Это свойство поможет относительно наглядно найти символы граней и координаты вершин исследуемых четырёхмерных



Рис. 3. Четырёхмерный изоэдральный многогранник с трёхмерными гранями – правильными шестиугольными призмами. Проекция Шлегеля.

многогранников, по аналогии с тем, как это сделано на рисунке 4 для условного гексагонального кристалла (в данном случае просто правильного шестиугольника): координаты его вершин, символы граней и матрицы поворота симметрии имеют целочисленный вид. Добиться этого удалось благодаря гексагональной координатной системе, специально приспособленной для данной фигуры (чтобы все координатные характеристики записывались наиболее удобным образом, см. также [9]).





Рис. 4. Символы граней (hkl) и координаты вершин x,y,z условного гексагонального кристалла. Каждая грань и принадлежащая ей вершина удовлетворяют уравнению hx+ky+lz=1. Приведены матрицы поворота симметрии на 60 градусов, действующие на множестве граней и на множестве вершин (см. также [9]).

Порождающую (и все остальные операции) винтового поворота оси 12/5, а также координаты всех (касательных) точек орбиты можно записать в матрично-векторном виде:

$(\cos \alpha_2)$	$-\sin \alpha_2$	0	$\begin{pmatrix} 0 \end{pmatrix}'$	$(\sin\theta)$
$\sin \alpha_2$	$\cos \alpha_2$	0	0	0
0	0	$\cos \alpha_1$	$\sin \alpha_1$	0
0	0	$-\sin \alpha_1$	$\cos \alpha_1$	$\left(\cos\theta\right)$

где $\alpha_1 = \pi/6$, $\alpha_2 = -5\pi/6$, $0 < \theta \le \pi/4$, а m=0,1,...11. Легко видеть, что выбрав подмножество с m=0,2,3,5, взяв соответствующие радиус-векторы в качестве специально приспособленной координатной системы и, записав в ней те же преобразования и координаты, получим целочисленную запись тех же движений и координат:

(0	0	$\overline{1}$	$\overline{1}$	m(1)		(1)	(0)	(0)	(0)	$(\overline{1})$	(0)	$(\overline{1})$	$\left(0 \right)$	(0)	(0)	(1)	(0)
0	0	1	0	0	=	0	0	1	0	1	0	0	0	$\left \overline{1} \right $	0	$\left \overline{1} \right $	0
1	1	0	0	0		0	1	" 0 "	1	0	0	0	"1	0	$\overline{1}$	" 0	0
$\left(\overline{1}\right)$	0	0	0)	$\left(0\right)$		(0)	$\left(\overline{1}\right)$	(0)	(0)	$\left(0\right)$	(1)	$\left(0\right)$	(1)	$\left(0\right)$	$\left(0\right)$	(0)	$\left(\overline{1}\right)$

(соответственно для m=0, 1, ..., 11; чёрточками обозначены минусы, как это принято в кристаллографии).

Это координаты касательных точек трёхмерных гиперплоскостей, касающихся трёхмерной сферы. Их можно сопоставить с синими точками на рисунке 4, только в данном случае число точек равно 12 и располагаются они на трёхмерной сфере в четырёхмерном пространстве. Наша задача – найти теперь все вершины, рёбра и грани четырёхмерного многогранника. С учётом того, что, подмножество точек, соответствующих чётным *m* (также, как и для нечётных) всякий раз лежит в одной плоскости, причём в вершинах правильного шестиугольника, таблицу инцидентности можно составить в двумерном виде. На рисунке 5 показана таблица инцидентности вершин, рёбер и граней всех размерностей рассматриваемого многогранника. Каждой грани соответствует символ, каждой вершине – координаты (если двум вершинам приписаны одни и те же координаты – значит это одна и та же вершина). Рёбрам – соединяющие точки отрезки, двумерным четырёхугольным граням – квадратные ячейки (внутри изображён квадрат, если соответствующая грань квадратная, или ромб, если грань ромбическая). Горизонтальные и вертикальные узловые ряды соответствуют шестиугольным граням. Строки ячеек соответствуют шести трёхмерным многогранникам, образующим вместе одну «стопку» (полноторие); столбцы ячеек – другим таким же шести многогранникам. Используя матрицу скалярных произведений (матрицу Грама) координатных векторов (радиус-векторов точек касания при m = 0, 2, 3, 5), легко вычислить двугранные углы между трёхмерными гранями:

$$\cos(H_1, H_2) = - (H_1^T A^* H_2) / ((H_1^T A^* H_1) (H_2^T A^* H_2))^{(1/2)},$$

где

$$A^* = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 2 & 1 & 0 & -\sqrt{3}\cos 2\theta \\ 1 & 2 & \sqrt{3}\cos 2\theta & 0 \\ 0 & \sqrt{3}\cos 2\theta & 2 & 1 \\ -\sqrt{3}\cos 2\theta & 0 & 1 & 2 \end{pmatrix},$$

(коэффициент 1/2 означает, что каждый элемент матрицы надо разделить по-полам).

Обратная матрица A=(A*)-1

$$A = \frac{2}{3\sin^2 2\theta} \begin{pmatrix} 2 & -1 & 0 & \sqrt{3}\cos 2\theta \\ -1 & 2 & -\sqrt{3}\cos 2\theta & 0 \\ 0 & -\sqrt{3}\cos 2\theta & 2 & -1 \\ \sqrt{3}\cos 2\theta & 0 & -1 & 2 \end{pmatrix}$$



Рис. 5. Таблица инцидентности вершин, рёбер и граней (двумерных и трёхмерных) для простых форм общего положения в группе $C_3^* C_2^*$ (при $0 < \theta < \pi/4$) и для частной простой формы при $\theta = \pi/4$. Жирным шрифтом выделены индексы трёхмерных граней. Точками обозначены координаты вершин. Легко видеть, что в случае инцидентности соответствующие скалярные произведения всякий раз равны 1. Клеткам таблицы соответствуют четырёхугольные двумерные грани рассматриваемого многогранника, узловым рядам (и столбцам) – шестиугольные грани.

аналогичными методами расчётов позволяет вычислить (проверить) все плоские углы двумерных граней, а также вычислить длины рёбер (и подтвердить, что все они равны). А именно, квадрат длины любого ребра равен 4/($3\sin^2 2\theta$). В то же время квадрат любой короткой диагонали ромба равен ($8-4\times 3^{(1/2)}\cos 2\theta$))/($3\sin^2 2\theta$). Легко видеть, что при $\theta=\pi/4$ квадрат диагонали становится ровно вдвое больше квадрата длины ребра, а значит, все двумерные четырёхугольные грани становятся квадратными, все трёхмерные грани – правильными шестиугольными призмами, как показано на рис. 3. Если же θ имеет другое значение, большее нуля, то трёхмерные грани будут наклонными шестиугольными призмами. В частности, при $\cos 2\theta=3^{(-1/2)}$ длины диагоналей ромбов становятся равными длинам его рёбер, соответствующие ромбы становятся паркетными (т.е. состоящими каждая из двух правильных треугольников), а трёхмерные грани – многогранниками Иванова Q₁. Таким образом, классификацию простых форм в четырёхмерной точечной группе C^{*}₃×C^{*}₂, считаем выполненной и на этом завершаем доказательство теоремы.

Отметим только, что в равенстве длин всех рёбер рассмотренного четырёхмерного многогранника можно убедиться не только их расчётом с помо-



Рис. 6. На многогранной поверхности, образованной четырёхугольными гранями действует симметрия, весьма похожая одну из групп симметрию слоёв p_{1}^{22} . Кроме того, зелёным показаны зеркальные плоскости, действующие локально на каждом трёхмерном многограннике. Из обозначенных элементов симметрии в группу $C_{3}^{*} \times C_{2}^{*}$ входят только оси 12/5, показанные стрелками с одной зазубриной (вообще говоря, не являющиеся осями 2_{1}^{*} , однако выглядящими именно таковыми на чертеже).

щью матрицы A, но и с помощью наглядных симметрийных соображений. Следует заметить, что глядя на таблицу на рис. 5, легко убедиться, что любая трёхмерная грань центральносимметрична. Это становится очевидным, поскольку для любой вершины **x** такой найдётся и принадлежащая этой же грани вершина **2с–x**, где вектор **c** – координаты центра тяжести трёхмерной грани (его координаты – средние арифметические координат вершин рассматриваемой трёхмерной грани). Отметим, что хотя такой центр симметрии есть у каждой трёхмерной грани, действует он только на эту грань, но не на её окружение. В то же время (хотя порождающая группа $C_{3}^{*} \times C_{2}^{*}$ не имеет операций, оставляющих на месте хотя бы одну точку), но каждая трёхмерная грань имеет ещё ось второго порядка, которая действует и на всём четырёхмерном многограннике. В частности, она переводит в себя две ромбические грани с общим ребром. Это (в комбинации с локальным центром симметрии) приводит к появлению зеркальных плоскостей симметрии, действующих так же, как и центр симметрии, локально на каждой трёхмерной грани. Упомянутые двойные оси показаны двуугольниками на рис. 6. (упомянутые локальные зеркальные плоскости для трёхмерных граней, соответствующих строкам таблицы показаны зелёным цветом). Двойные оси, взаимодействуя с осью (осями) 12/5, приводят к новым двойным осям (показаны горизонтальными стрелками с двумя зазубринами). Для обозначения осей 12/5 использованы стрелки с одной зазубриной с каждого конца – значок, традиционно используемый для обозначения винтовых осей второго порядка 2,, при которых поворот на 180° вокруг оси сопровождается сдвигом вдоль неё. Поворотная составляющая оси 12/5 – не 180°, а 150°, так, что применённое обозначение является спорным (по крайне мере дискуссионным). Однако на самой таблице, как видно на рисунке 6, эта ось действует именно так, как должна действовать ось 2₁. Кроме того, можно вспомнить рекомендации из [10] по вычислению трансляционной составляющей винтовых осей (если они заданы в матрично-векторной записи): возведём операцию в такую степень, что поворотной части будет соответствовать единичная матрица. Эта степень будет порядком оси. Далее разделим на это число получившуюся векторную компоненту. Полученный вектор задаёт направление оси поворота и при этом равен величине трансляционной компоненты исходного преобразования. Если применить сходную рекомендацию к оси 12/5, то, возведя её в квадрат, получим клиффордов параллельный перенос, сдвигающий каждую точку трёхмерной сферы на одну и ту же величину (в каком-то смысле аналог параллельного переноса). Вот почему ось 12/5, действующая на трёхмерной сфере, в некотором смысле имеет сходные черты с действием оси 2, в трёхмерном евклидовом пространстве. Совокупность элементов симметрии, показанных на рис. 6 (за исключением локальных зеркальных плоскостей) во многом похожа на одну из групп симметрии слоёв, а именно на группу р2,22, (группу № 38 в [11]). Применённое короткое обозначение оси 12/5, такое же, как и для оси 2₁, может, на наш взгляд, и упростить обозначение, и помочь наглядно продемонстрировать действие оси 12/5 (конечно при наличии необходимых оговорок и пояснений). Применённый подход является попыткой преодолеть проблему, отмеченную нами в [7], когда в конечных сферических группах приходится иметь дело с дробными осями, а соответствующие звездчатые многоугольники, хотя и точно, но не всегда наглядно иллюстрируют их действие.

На рисунке 6 фиолетовым цветом отмечена также пара рёбер, связанных горизонтальной двойной осью, а, следовательно, равных по длине. Легко видеть, что действие локальной зеркальной плоскости даст ещё пару равных им рёбер. Затем ещё одна горизонтальная, а затем вертикальная двойная ось (перпендикулярная к чертежу), позволят убедиться в равенстве всех рёбер трёхмерной грани, соответствующей нижней строке клеток таблицы. А это означает равенство вообще всех рёбер четырёхмерного многогранника, ведь все его грани связаны группой симметрии.

Список литературы

1. Иванов Б.А. Многогранники с гранями, сложенными из правильных многоугольников, Укр. геометр. сб. Харьков. Изд-во: ХГУ, 1971. № 10. С. 20-34.

2. Тимофеенко А.В. О соединении несоставных многогранников // Алгебра и анализ. 2009. Т. 21. Вып. 3. С. 165-209.

3. Johnson, Norman W. Convex Solids with Regular Faces // Canadian Journal of Mathematics. 1966. N. 18. P. 169-200.

4. Залгаллер В.А. Выпуклые многогранники с правильными гранями // Зап. научн. сем. ЛОМИ, 2. М.–Л. Изд-во: Наука, 1967. С. 5-221.

5. Пряхин Ю.А. О выпуклых многогранниках с правильными гранями // Укр. геометр. сб., Харьков. Изд-во: ХГУ, 1973. № 14. С. 83-88.

6. Кучериненко Я.В., Макаров В.С. Геометрия бикристаллов и трехмерные сферические многообразия // Материалы XII Международного семинара Дискретная математика и ее приложения имени академика О.Б. Лупанова (Москва, МГУ, 20–25 июня 2016 г.). М. Изд-во: МГУ, 2016. С. 360-362.

7. Кучериненко Я.В., Макаров В.С. Теория двойников и сростков кристаллов как раздел четырехмерной кристаллографии // Труды XIII Всероссийской (с международным участием) научной школы «Математические исследования в естественных науках». Апатиты. Изд-во: К&M, 2016. С. 52-63.

8. Долбилин Н.П. О правильных разбиениях Дирихле сферы. Москва. 1972.

9. Литвинская Г.П., Загальская Ю.Г., Галиулин Р.В, Коваленко В.С. О матричной записи кристаллических классов в репере Браве // Сб. Проблемы кристаллологии. М. Изд-во: МГУ, 1971. С. 284-288.

10. Wondratschek H. Matrices, Mappings and Crystallographic Symmetry // International Union of Crystallography. 2002. P. 64. (URL: https://www.iucr. org/__data/assets/pdf_file/0019/15823/22.pdf).

11. Шубников А.В., Копцик В.А. Симметрия в науке и искусстве // Москва-Ижевск: Институт компьютерных исследований. 2004. С. 207, 211.

КООРДИНАЦИОННЫЕ ПОСЛЕДОВАТЕЛЬНОСТИ ГРАФА USM

Мокрова А.А., Малеев А.В., Шутов А.В.

Владимирский государственный университет им. Александра Григорьевича и Николая Григорьевича Столетовых, Владимир, albina.mokrova@yandex.ru; andr_mal@mail.ru; a1981@mail.ru

Аннотация. Используя подход, основанный на концепции послойного роста и на изучении геодезических в периодических графах, в работе получены явные формулы координационных последовательностей для 2-однородного периодического графа *usm*.

Summary. We take an approach, that is based on the concept of layer-by-layer growth and on the study of geodesics in periodic graphs. We obtain explicit coordination sequences formulas for 2-uniform *usm* graph.

Важным элементом анализа структуры кристаллов, структурными единицами которых являются атомы (ионы, молекулы), является учёт окружения этой структурной единицы: количества соседних структурных элементов, их типов и расстояний до них. Всё это аспекты единой концепции: координация. Простейшей характеристикой координации атома (иона, молекулы) в кристаллической структуре является координационное число. Согласно наиболее общему определению, координационным числом является число соседних атомов (ионов, молекул), ближайших к данному атому (иону, молекуле) в кристалле. Объединение этих ближайших атомов или ближайших молекул образует первое координационное окружение. Следующие на расстоянии структурные элементы образуют второе координационное окружение и т.д. [20]. Количества элементов в координационных окружениях (координационные числа) всех порядков образуют так называемую координационную последовательность.

Концепция координационных последовательностей как топологической характеристики кристаллических структур была впервые предложена в [3], а затем в [7]. Эта концепция активно использовалась для изучения топологии трёхмерных 4-валентных сетей цеолитов [4, 5, 8, 12, 13], гипотетических и реальных алмазоподобных структур размерности три и выше [14] и других классов соединений [15]. Для реальных кристаллических структур первые члены координационных последовательностей можно рассчитать с помощью компьютерной программы ToposPro [2]. Координационные последовательности также важны при изучении топологической плотности кристаллов [6, 11, 14, 15].

В [10] поставлена задача строгого доказательства явных формул для координационных чисел 2-однородных периодических графов *G*, то есть графов, для которых фундаментальная область относительно полной кристаллографической группы симметрий содержит ровно две независимые вершины, причём граф, вложенный в плоскость, образует разбиение на правильные многоугольники. На плоскости существует ровно 20 таких графов. Их полный список содержится в [9].



Рассмотрим 2-однородный периодический граф *G*, имеющий двумерную группу пространственной симметрии *p4gm*. Фрагмент этого графа изображён на рис. 1. Данный граф известен под кодом *usm* в базе RSCR [17]. В базисе элементарной ячейки e_1 , e_2 симметрически независимые вершины $x_1 = (0,1057;0,1830)$ и $x_2 = (0,1057;0,6057)$ имеют степень 5, то есть из каждой из них выходит по 5 рёбер. Так как в графе две кристаллографически независимых вершины, он имеет ровно 2 различные последовательности координационных

чисел $e(x_1, n)$ и $e(x_2, n)$. Первые члены этих последовательностей приведены в базе OEIS [19] под номерами A301712 и A301714, соответственно.

Рассматриваемый в работе метод получения явных формул для координационных чисел 2-однородных периодических графов впервые был описан в [18]. Он основан на концепции послойного роста и изучении последовательности координационных окружений eq(x, n).

Данную последовательность можно определить индуктивно:

– координационное окружение eq(x, 0) представляет собой саму вершину х;

– координационное окружение eq(x, n + 1) определяется как множество вершин графа, имеющих общее ребро с вершинами из координационного окружения eq(x, n) и не входящих в координационные сферы eq(x, k) с $0 \le k \le n$.

n-ое координационное число e(x, n) вершины x – это число вершин графа G, входящих в координационное окружение eq(x, n).

Введём ряд определений.

Цепью Г в графе назовём последовательность $x, z_1, z_2, ..., z_n, y$ вершин графа, такую, что точки в парах $(x, z_1)(z_1, z_2), ..., (z_n, y)$ соединены ребром. Если k – число вершин, входящих в цепь, то длиной цепи назовём число k–1. Расстоянием $d(x_1, x_2)$ между двумя вершинами назовём длину кратчайшей из соединяющих их цепей, а саму кратчайшую цепь будем называть геодезической (заметим, что геодезическая в графе может быть определена не единствен-

ным образом). Координационное окружение eq(x, n) может быть определено как $eq(x, n) = \{y \in G : d(x, y) = n\}$.

Для произвольной цепи Γ графа G будем использовать обозначения Γ для вектора, соединяющего начальную и конечную вершины цепи Γ , и $d(\Gamma)$ для длины цепи Γ .

Пусть *G* периодический граф, решётка трансляций которого *L*. Цепь Г будем называть лучом, если выполнены следующие условия:

1. Г является геодезической;

2. Начальная и конечная вершины цепи Г сравнимы по модулю решётки L;

3. Никакие другие две вершины Г несравнимы по модулю решётки *L*.

Пусть Pol_{G} – многоугольник, представляющий собой выпуклую оболочку векторов вида $\frac{1}{d(\Gamma)}\Gamma$ соответствующих всем лучам Γ графа G. Пусть pol_{G} – граница многоугольника Pol_{G} .

Справедлива следующая фундаментальная теорема [1].

Теорема 1. Существует не зависящая от *n* постоянная *C* такая, что координационное окружение eq(x, n) лежит в *C*-окрестности многоугольника $x+n \cdot pol_G$ (полученного из pol_G растяжением в *n* раз и сдвигом на вектор $\vec{0x}$). Многоугольник pol_G является центрально-симметричным.

Для произвольного (не обязательно периодического) графа предел $\gamma = \lim_{n \to \infty} \left\{ \frac{eq(x, n)}{n} \right\},$ если он существует, называется формой роста графа.

Из теоремы 1 следует, что формой роста любого периодического графа *G* является выпуклый центрально-симметричный многоугольник *pol*_G, который называют многоугольником роста периодического графа *G*.



Puc. 2.

Форма роста графа *usm* – выпуклый 12-угольник, изображённый на рис. 2. Пусть плоский граф имеет форму роста *pol*_G в виде некоторого *p*-угольника.

Пусть v_i – некоторая вершина многоугольника роста, \mathbf{v}_i – вектор из центра многоугольника роста в v_i . Луч Γ_i будем называть соответствующим данной вершине, если $\mathbf{v}_i = \frac{1}{d(\Gamma_i)} \Gamma_i$. Непосредственная проверка показывает, что из каждой вершины графа[']usm выходят все 12 лучей, соответствующих верши-



Рис. 3.

нам многоугольника роста. Для вершин x₁ и x₂ эти лучи изображены на рис. 3.

Пусть \mathbf{v}_i и \mathbf{v}_{i+1} – два вектора, выходящих из центра многоугольника роста pol_G в две его соседние вершины v_i и v_{i+1} . Здесь i = 0,1,..., p-1. Если i = p-1, в качестве второй вершины берётся вершина v_0 . Пусть Sec_i(x) – внутренняя область сектора, порождённого векторами \mathbf{v}_i и \mathbf{v}_{i+l} , выходящими из вершины x. Назовём e(x, n) – число вершин из eq(x, n), лежащих в $Sec_i(x)$, секторным координационным числом.

Имеет место формула

$$e(x,n) = \sum_{i} e_{i}(x,n) + \sum_{i} b_{i}(x,n) + c(x,n).$$
(1)

Здесь $b_i(x,n)$ – число вершин, лежащих на луче, порождённом вектором **v**_{*i*}, выходящим из вершины *x*, $c(x,n) = \begin{cases} -11, n = 0 \\ 0, n > 0 \end{cases}$. При фиксированном *i* последовательность $b_i(x,n)$ является периодической. Отметим, что период последовательности $b_i(x, n)$ равен $d(\Gamma_i)$.

Основная идея состоит в том, чтобы для произвольной вершины $y \in \text{Sec}_i(x)$ построить каноническую геодезическую вида

$$x \to n_i \Gamma_i \to n_{i+1} \Gamma_{i+1} \to \gamma \to y$$
 (2)
Здесь Г. и Г., – некоторые фиксированные лучи, соответствующие

векторам \mathbf{v}_i и \mathbf{v}_{i+1} то есть такие, что $\mathbf{v}_i = \frac{\Gamma_i}{d(\Gamma_i)}$ и $\mathbf{v}_{i+1} = \frac{\Gamma_{i+1}}{d(\Gamma_{i+1})}$. Суммарная

длина цепей γ – ограничена абсолютной константой, а сами цепи зависят только от класса вершины *у* по модулю решётки, порождённой векторами Γ_i и Γ_{i+1} .

При этом и для вершины x₁, и для вершины x, имеет место формула

$$d(\Gamma_i) = \begin{cases} 8, i \equiv 0, 2 \pmod{3} \\ 5, i \equiv 1 \pmod{3} \end{cases}.$$

Лучи Γ_i и Γ_{i+1} порождают геодезический подграф в секторе. Данный подграф в секторе $\text{Sec}_0(x_1)$ для графа *usm* изображён на рис. 4. Из существования этого подграфа вытекает, что для любой вершины $y \in \text{Sec}_i(x)$ существует каноническая геодезическая вида (2).

Пусть r(n; a, b) – число решений уравнения $an_1 + bn_2 = n$ в целых неотрицательных числах n_1, n_2 . Тогда из разложения (2) вытекает формула

$$e_i(x,n) = \sum_{\gamma} r(n - d(\gamma); d(\Gamma_i), d(\Gamma_{i+1}))$$
(3)

Формулы (1) и (3) позволяют свести вычисление координационных чисел к вычислению функции r(n; a, b), которое производится при помощи следующих теорем [16].



Теорема 2. Пусть K = HOK (a, b). Тогда существуют числа a_j и β_j , $0 \le j \le K - 1$ такие, что $r(n; a, b) = a_j n + \beta_j$ если $n \equiv j \pmod{K}$. **Теорема 3.** Пусть d = HOД (a, b). Тогда

$$r(n;a,b) = \begin{cases} r(n/d;a/d,b/d) & n \equiv 0 \pmod{d} \\ 0, n \neq 0 \pmod{d} \end{cases}$$

Теорема 4. Пусть *НОД* (a, b) = 1. Тогда $r(n; a, b) = \frac{n + aa' + bb'}{ab} - 1$, где, $aa' \equiv -n \pmod{b}, bb' \equiv -n \pmod{a} \le a' \le b'$ и $1 \le b' \le a$. Найдём теперь число цепей γ , заданной длины, соответствующих различным по модулю решётки L_i точкам для графа *usm*. Здесь решётка L_i , задаётся векторами Γ_i , Γ_{i+1} . Пусть $\sigma_i(k)$ – число вершин из eq(x, k), лежащих в параллелограмме $P_i = \{x + \lambda_i \Gamma_i + \lambda_{i+1} \Gamma_{i+1} : 0 < \lambda_i, \lambda_{i+1} \le 1\}$ (рис. 5). Тогда

$$e_i(x,n) = \sum_k \sigma_i(k)r(n-k); d(\Gamma_i), d(\Gamma_{i+1})) = \sum_k A_I(k)r(n-k); 5,8) + \sum_k A_{II}(k)r(n-k); 5,8),$$

$$\Gamma_{II}e A_I(k) = \sum_{i=I} \sigma_i(k), A_{II}(k) = \sum_{i=II} \sigma_i(k), I = \{0,1,3,4,6,7,9,10\}, II = \{2,5,8,11\}.$$

Из приведённых рассуждений мы получаем, что существуют при $K = HOK(d(\Gamma i)) = 40$ числа $\alpha_i \mu \beta_i, 0 \le j \le K - 1$ такие, что $e(x, n) = \alpha_j n + \beta_j$ если $n \equiv j \pmod{K}$.

Значения $\sigma_i(k)$, $A_I(k)$ и $A_{II}(k)$ для вершин типа x_1 и x_2 приведены в таблицах 1 и 2, значения $b_i(x,k)$ – в таблице 3.



Из таблицы 3 следует, что $b_0(x,k) = b_2(x,k) = b_3(x,k) = b_5(x,k) = b_6(x,k) = b_8(x,k)$ = $b_9(x,k) = b_{11}(x,k)$ для вершин x_1 и x_2 , $b_1(x,k) = b_4(x,k)$ для вершины x_2 .

Из таблиц 1 и 3 получаем:

e(x,n) = 5r(n-1;8,5) + 6r(n-2;8,5) + 8r(n-3;8,5) + 8r(n-4;8,5) + 11r(n-5;8,5) + 11r(n-6;8,5) + 8r(n-7;8,5) + 12r(n-8;8,5) + 8r(n-9;8,5) + 7r(n-10;8,5) + 12r(n-8;8,5) + 8r(n-9;8,5) + 7r(n-10;8,5) + 8r(n-9;8,5) + 7r(n-10;8,5) + 8r(n-9;8,5) + 8r(n-9;8,5) + 8r(n-9;8,5) + 8r(n-9;8,5) + 8r(n-9;8,5) + 8r(n-9;8,5) + 8r(n-10;8,5) + 8r(n-10;8) + 8r(n-10;8) + 8r(n-10;8) +

 $\begin{aligned} &4r(n-11;8,5) + 8r(n-12;8,5) + 3r(n-8,8) + 4r(n-1;8,8) + 9r(n-2;8,8) + 12r(n-3;8,8) \\ &+ 15r(n-4;8,8) + 20r(n-5;8,8) + 21r(n-6;8,8) + 20r(n-7;8,8) + 21r(n-8;8,8) + 20r(n-9;8,8) + 15r(n-10;8,8) + 12r(n-11;8,8) + 9r(n-12;8,8) + 4r(n-13;8,8) + 3r(n-14;8,8) + 4r(n-15;8,8) + 8b_0(x,k) + b_1(x,k) + b_4(x,k) + b_7(x,k) + b_{10}(x,k) + c(x,n) \end{aligned}$

Из таблиц 2 и 3 получаем:

$$\begin{split} e(x,n) &= 2r(n;8,5) + 9r(n-1;8,5) + 13r(n-2;8,5) + 16r(n-3;8,5) + 21r(n-4;8,5) \\ &+ 25r(n-5;8,5) + 27r(n-6;8,5) + 27r(n-7;8,5) + 32r(n-8;8,5) + 29r(n-9;8,5) + 27r(n-10;8,5) + 24r(n-11;8,5) + 23r(n-12;8,5) + 17r(n-13;8,5) + 17r(n-14;8,5) + 19r(n-15;8,5) + 4r(n-1;8,8) + 4r(n-2;8,8) + 3r(n-3;8,8) + 4r(n-4;8,8) + 4r(n-5;8,8) + 4r(n-6;8,8) + 4r(n-7;8,8) + 6r(n-8;8,8) + 4r(n-9;8,8) + 4r(n-10;8,8) + 3r(n-11;8,8) + 4r(n-12;8,8) + 8b_0(x,k) + 2b_1(x,k) + b_7(x,k) + b_{10}(x,k) + c(x,n) \end{split}$$

Таблица 1. Значения $\sigma_i(k)$, $A_i(k)$ и $A_{ii}(k)$ для вершины x_i .

Номер									k							
сектора, і	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16
0	0	0	1	1	1	1	2	1	2	1	1	0	1	0	0	0
1	0	1	1	1	1	1	1	1	2	1	1	0	1	0	0	0
2	0	1	2	3	4	5	5	5	6	5	4	3	2	1	1	1
3	0	0	1	1	1	1	2	1	2	1	1	0	1	0	0	0
4	0	0	1	1	1	1	2	1	2	1	1	0	1	0	0	0
5	1	1	2	3	3	5	5	5	5	5	4	3	3	1	1	1
6	0	1	1	1	1	2	1	1	1	1	0	1	1	0	0	0
7	0	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	0	0	0
8	1	1	2	3	4	5	6	5	5	5	4	3	2	1	0	1
9	0	1	0	1	1	2	1	1	1	1	1	1	1	0	0	0
10	0	1	0	1	1	2	1	1	1	1	1	1	1	0	0	0
11	1	1	3	3	4	5	5	5	5	5	3	3	2	1	1	1
$A_{I}(k)$	0	5	6	8	8	11	11	8	12	8	7	4	8	0	0	0
$A_{\mu}(k)$	3	4	9	12	15	20	21	20	21	20	15	12	9	4	3	4

Таблица 2. Значения $\sigma_i(k)$, $A_I(k)$ и $A_{II}(k)$ для вершины x_2 .

Номер									k							
сектора, <i>i</i>	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16
0	0	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	0	0	0
1	0	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	0	0	0
2	1	1	2	3	4	5	6	5	5	5	4	3	2	1	0	1
3	0	1	1	0	1	1	1	1	2	1	1	1	1	0	0	0
4	0	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	0	0	0
5	0	1	2	3	4	5	5	5	6	5	4	3	2	1	1	1
6	0	1	1	1	1	1	1	1	2	1	1	0	1	0	0	0
7	0	1	1	1	1	1	1	1	2	1	1	0	1	0	0	0
8	0	1	2	3	4	5	5	5	6	5	4	3	2	1	1	1
9	0	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	0	0	0
10	0	1	1	0	1	1	1	1	2	1	1	1	1	0	0	0
11	1	1	2	3	4	5	6	5	5	5	4	3	2	1	0	1
$A_{I}(k)$	2	9	13	16	21	25	27	27	32	29	27	24	23	17	17	19
$A'_{\mu}(\vec{k})$	0	4	4	3	4	4	4	4	6	4	4	3	4	0	0	0

								Ì	k								
Номер	0	1	2	3	4	5	6	7	0	1	2	3	4	5	6	7	
cektopa, t			для	вер	шин	ы х,		для вершины х,									
0	1	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	
1	1	1	0	0	0	_	_	_	1	0	0	1	0	_	_	_	
2	1	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	
3	1	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	
4	1	1	1	0	0	_	_	_	1	0	0	1	0	_	_	_	
5	1	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	
6	1	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	
7	1	0	0	0	1	_	_	_	1	0	0	0	0	_	_	_	
8	1	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	
9	1	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	
10	1	0	0	1	1	_	_	_	1	0	0	1	0	_	—	_	
11	1	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	

Таблица 3. Значения $b_1(x,k)$ для вершин x_1 и x_2 .

Непосредственное вычисление по теоремам 2-4 даёт значения r(n;a,b). Используя формулы (4), (5), получаем следующие результаты.

(27n

Теорема 5. Пусть *x*₁*u x*₂ – вершины степени 5 графа *usm*. Тогда:

$$\begin{split} & \frac{27n}{5}, n \equiv 0,20 (\mathrm{mod}40) \\ & \frac{27n+1}{5}, n \equiv 7,37 (\mathrm{mod}40) \\ & \frac{27n+1}{5}, n \equiv 3,25,33,35 (\mathrm{mod}40) \\ & \frac{27n+2}{5}, n \equiv 10,29,39 (\mathrm{mod}40) \\ & \frac{27n+2}{5}, n \equiv 10,29,39 (\mathrm{mod}40) \\ & \frac{27n+2}{5}, n \equiv 1,11,30 (\mathrm{mod}40) \\ & \frac{27n+2}{5}, n \equiv 4,9,19,24,29,39 (\mathrm{mod}40) \\ & \frac{27n+2}{5}, n \equiv 4,9,19,24,29,39 (\mathrm{mod}40) \\ & \frac{27n+2}{5}, n \equiv 4,9,19,24,29,39 (\mathrm{mod}40) \\ & \frac{27n+3}{5}, n \equiv 4,24 (\mathrm{mod}40) \\ & \frac{27n+3}{5}, n \equiv 6 (\mathrm{mod}40) \\ & \frac{27n+3}{5}, n \equiv 34 (\mathrm{mod}40) \\ & \frac{27n+4}{5}, n \equiv 38 (\mathrm{mod}40) \\ & \frac{27n+5}{5}, n \equiv 30 (\mathrm{mod}40) \\ & \frac{27n+5}{5}, n \equiv 30 (\mathrm{mod}40) \\ & \frac{27n+5}{5}, n \equiv 10 (\mathrm{mod}40) \\ & \frac{27n+5}{5}, n \equiv 10 (\mathrm{mod}40) \\ & \frac{27n+5}{5}, n \equiv 10 (\mathrm{mod}40) \\ & \frac{27n+8}{5}, n \equiv 21,31 (\mathrm{mod}40) \\ & \frac{27n+8}{5},$$

$$\frac{27n+6}{5}, n \equiv 22 \pmod{40}$$

$$\frac{27n-6}{5}, n \equiv 18 \pmod{40}$$

$$\frac{27n+7}{5}, n \equiv 14 \pmod{40}$$

$$\frac{27n-7}{5}, n \equiv 26 \pmod{40}$$

$$\frac{27n-9}{5}, n \equiv 17, 27 \pmod{40}$$

$$\frac{27n+13}{5}, n \equiv 26 \pmod{40}$$

$$\frac{27n-13}{5}, n \equiv 14 \pmod{40}$$

$$\frac{27n+14}{5}, n \equiv 18 \pmod{40}$$

$$\frac{27n-14}{5}, n \equiv 22 \pmod{40}$$

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (гранты № 17-02-00835-а и № 17-42-330787 р-а).

Список литературы

1. Журавлёв В.Г. Рост случайных замощений и графов: между кристаллом и хаосом // Алгебра и анализ. 2002. Т. 14. Вып. 6. С. 129-168.

2. Blatov V.A., Shevchenko A.P., Proserpio D.M. Applied Topological analysis of crystal structures with the program package ToposPro // Cryst. Growth Des. 2014. 14. 3576.

3. Brunner G.O., Laves F. Zum Problem der Koordinationszahl. Wiss. 7. Techn. Univers. Dresden 20. 1971. 387.

4. Brunner G.O. The properties of coordination sequences and conclusions regarding the lowest possible density of zeolites // J. Solid State Chem. 1979. 29. 41.

5. Brunner G.O. «Quantitative zeolite topology» can help to recognize erroneous structures and to plan syntheses // Zeolites 1993. 13. 88.

6. Eon J.-G., Topological density of nets: a direct calculation. Acta Cryst. 2004. A60. 7.

7. Fischer W. Existenzbedingungen homogener Kugelpackungen zu kubischen Gitterkomplexen mit weniger als drei Freiheitsgraden // Z. Kristallogr. 1973. 138. 129.

8. Grosse-Kunstleve R.W., Brunner G.O., Sloane N.J.A. Algebraic description of coordination sequences and exact topological densities for zeolites // Acta Cryst. 1996. A52. 879.

9. Grünbaum B., Shephard G.C. Tilings and Patterns. New York: W. H. Freeman & Co., 1987.

10. Goodman-Strauss C., Sloane N.J.A. A coloring-book approach to finding coordination sequences // Acta Cryst. Section A. 2019. № 75. P. 121-134.

11. Herrero C.P., Coordination sequences of zeolites revisited: asymptotic behaviour for large distances // J. Chem. Soc. Faraday Trans. 1994. 90. 2597.

12. Meier W.M., Moeck H.J. The topology of three-dimensional 4-connected nets: Classification of zeolite framework types using coordination sequences // J. Solid State Chem. 1979. 27. 349.

13. Meier W.M., Olson D.H. In Atlas of Zeolite Structure Types // Butterworth-Heinemann, London, 3rd edn. 1992.

14. O'Keeffe M. N-Dimensional diamond, sodalite and rare sphere packings // Acta Cryst. 1991. A47. 748.

O'Keeffe M. Dense and rare four-connected nets // Z. Kristallogr. 1991. 196. 21.
 Ramirez Alfonsin J. L. The Diophantine Frobenius Problem // Oxford University Press. 2005.

17. Reticular Chemistry Structure Resource (RCSR). URL: http://rcsr.net/layers 18. Shutov A., Maleev A. Coordination sequences and layer-by-layer growth of periodic structures // Zeitschrift für Kristallographie – Crystalline Materials. 2019. V. 234. № 5. P. 291-299.

19. The On-Line Encyclopedia of Integer Sequences (OEIS). URL: https://oeis.org 20. Vainshtein B.K., Fridkin V.M., Indenbom V.L. Modern Crystallography 2. Structure of crystals. Springer. 2000.

МНОГОГРАННИКИ: ОТ МАТРИЦЫ К МОДЕЛИ

Степенщиков Д.Г., Чернявский А.В. Геологический институт КНЦ РАН, Апатиты, stepen@geoksc.apatity.ru; chernyavsky@geoksc.apatity.ru

Аннотация. В работе представлено развитие способов визуализации многогранников за 20-летнюю историю их изучения в Геологическом институте КНЦ РАН.

Многогранник – один из тех объектов, с которыми человек знакомится ещё в детстве. Самый, пожалуй, известный – это куб, имеющий совершенную симметрию и небольшое число граней. Ряд других многогранников встречается в школьной стереометрии. Более сложные их представители используются в минералогии и кристаллографии для описания форм кристаллов минералов. И здесь уже попадаются неправильные, то есть асимметричные многогранники, которые привычны, разве что, для любителей японской игры Туми иши («Гора камней»), где из плоскогранных «камней» различной формы необходимо построить как можно более высокую конструкцию (рис. 1).



Рис. 1. Деревянные многогранники в японской игре Туми иши.

Как следует из названия, основным элементом многогранника является грань. Их количество, взаимное расположение (топология), форма и размер однозначно определяют конкретный многогранник. Варьирование одного или нескольких параметров расширяет разнообразие многогранников. Например, кроме привычного куба, существует множество «искажённых кубов» – ромбоэдров, тетрагональных трапецоэдров и т.п., грани которых являются не квадратами, а четырёхугольниками (в том чис-

ле и необязательно одинаковыми). Если же не ограничиваться только четырёхугольными гранями, возможны и совершенно другие шестигранники, содержащие трёх-, четырёх- и пятиугольные грани (рис. 2).

В наших работах использовалось понятие «комбинаторный тип многогранника», которое фиксирует только набор граней многогранника и способ их соединения между собой. Форма и размер граней при этом значения не имеют, хотя для наглядности можно считать, что и сам многогранник и его грани по возможности стремятся к наиболее правильному, симметричному виду. Поэтому комбинаторный тип того же куба сопоставляется именно с кубом, а не с ромбоэдром или трапецоэдром.



Рис. 2. Разнообразие многогранников в зависимости от параметров.

Математически комбинаторный тип многогранника может быть представлен в виде графа, который трёхсвязен (между любой парой вершин есть три различных цепочки рёбер) и планарен (его можно изобразить на плоскости без пересечений рёбер) (рис. 3 б). Такой граф (впрочем, не только трёхсвязный и планарный) может быть записан в виде матрицы смежности вершин (рис. 3 в), в которой достаточно рассматривать только верхнюю (или нижнюю) половину матрицы над главной диагональю. Если объединить строки верхней половины в одну, то получится набор из нулей и единиц – своеобразный «номер» многогранника (рис. 3 г). Число символов в строке равно V(V-1)/2, где V – число вершин многогранника.



Рис. 3. а – куб, б – граф куба, в – матрица смежности графа куба, г – верхняя половина матрицы смежности графа куба, записанная в одну строку.

К недостаткам матрицы смежности и полученной из неё строки можно отнести их громоздкость и самое главное – не наглядность. Поэтому с самого начала перечисления комбинаторных типов многогранников упор делался на получение их изображений.

В первых каталогах такие изображения делались вручную – в виде аксонометрических проекций [1, 2] (рис. 4). Этот самый естественный вывод результата, по очевидным соображениям, стал технически неосуществимым,



Рис. 4. Нарисованные вручную изображения 8-гранников в [1].

когда разнообразие комбинаторных типов многогранников, по мере роста числа граней, достигло первых тысяч [2]. Требовался автоматический способ получения изображений многогранников по известному комбинаторному типу.

Для этого нами была использована проекция Шлегеля – изображение, в котором на одну из граней многогранника проецируются все остальные грани. На такой проекции видны все рёбра, и нет необходимости в использовании пунктирных линий как показано на рис. 4. Для получения проекции Шлегеля у многогранника выбирается проективная грань, вершины которой располагаются в углах правильного многоугольника. Остальные вершины помещаются в его центр. Далее проводится серия однотипных шагов, на каждом из которых все вершины, за исключением внешних, меняют свои координаты, образуя рёберную сетку, натянутую на периметр проективной грани (рис. 5). Простейший способ получения такой сетки – замена



Рис. 5. Процесс получения проекции Шлегеля на примере 9-гранника.

координат каждой внутренней вершины средним арифметическим координат смежных с нею вершин. Процесс продолжается до тех пор, пока смещения вершин не станут пренебрежимо малы. В качестве проективной можно выбирать грань с наибольшим числом сторон, обеспечив максимум площади проекции, или грань, проекция на которую наиболее симметрична. Этот способ получения изображений многогранников был реализован в виде компьютерной программы и применён, в частности, при создании каталогов [3-5], а так же в ряде статей (рис. 6).

Проекция Шлегеля удобна тем, что на ней легко видны все грани многогранника и неудобна тем, что её «плоский» вид маскирует возможные элементы симметрии. Например, многогранник \mathbb{N} 13 на рисунке 6 имеет симметрию 3*m*, в то время как на проекции распознаётся лишь одна плоскость



Рис. 6. Изображения 15-гранников в виде проекций Шлегеля из [6].

симметрии. Предпочтительнее «псевдообъёмное» изображение многогранника, при котором пространственное воображение легче справляется с анализом его формы.

Технически аксонометрическая проекция многогранника (см. рис. 4) является двумя проекциями Шлегеля с одним общим контуром – некоторым циклом на соответствующем графе. При этом одна из проекций изображена пунктирными линиями (не считая линий контура). Данный подход был нами так же реализован в виде программы (рис. 7). Этот способ годится только для вывода изображений на плоскость, так как аксонометрическая проекция соответствуют не трёхмерному телу, а двум плоским проекциям Шлегеля. В этом их отличие от изображений, приведённых, например, в [7, 8], которые являлись проекциями предварительно вычисленных трёхмерных моделей многогранников, заданных набором заранее ориентированных плоскостей. Но хотелось бы, чтобы изображения многогранников, построенных на основе комбинаторного типа, действительно соответствовали объёмным моделям, так как современные приложения, например, позволяют создавать динамические и более наглядные иллюстрации в pdf-файлах.

Трудность получения трёхмерной модели многогранника по одному лишь его комбинаторному типу заключается в его «аморфности» – неизвестны точное расположении граней, их размеры, углы между ними и их сторонами и т.п. Такая информация в принципе и не важна, если стоит задача изображения любого многогранника с заданным комбинаторным типом. Но желательно, чтобы все его грани были отчётливо различимы (не было относительно слишком маленьких), а симметрия отвечала симметрии комбинаторного типа (например, модель для графа куба должна быть именно кубом, см. рис. 3).

Разработанный нами алгоритм решает эту задачу следующим образом. Как и в проекции Шлегеля, сначала выбирается некоторая грань многогранника, все вершины которой располагаются на плоскости Оху в вершинах



Рис. 7. Изображения 8-гранников в виде псевдоаксонометрических проекций.

правильного многоугольника с центром в начале координат. Затем эти вершины проецируются на сферу некоторого радиуса, касающуюся плоскости Оху в точке О. Все остальные вершины располагаются в диаметрально противоположной ей точке сферы. Таким образом, на начальном этапе вершины будущего многогранника лежат в вершинах вписанной в сферу пирамиды. Затем расправляется рёберная сетка в предположении, что между любыми двумя смежными вершинами действуют силы притяжения и отталкивания, уравновешивающиеся на определённом расстоянии (как будто бы ребро представляет собой пружину). Данный процесс осуществляется пошагово через малые смещения вершин. После каждого шага вершины каждой грани, определяемой комбинаторным типом, проецируются на аппроксимируемую ими плоскость. Если требуется, чтобы многогранник был вписан в сферу, перед этим, вершины предварительно проецируются на неё. Процесс заканчивается, когда смещения вершин становятся пренебрежимо малы. Алгоритм был реализован нами в виде программного приложения и протестирован на имеющемся множестве комбинаторных типов многогранников (рис. 8).



Рис. 8. Изображения 10-гранников, полученных на основе трёхмерных моделей. а, в – вписанные в сферу многогранники; б, г – они же, не вписанные в сферу. Многогранник в–г (представляющий собой цепочку тетраэдров, склеенных по граням с одним общим ребром) в рамках данной модели получается невыпуклый.

Тестирование показало, что в целом, алгоритм хорошо работает для большинства комбинаторных типов. При этом условие вписанности получаемого многогранника в сферу не сильно влияет на корректность конечного результата, однако с точки зрения эстетики визуально является предпочтительным (см. рис. 8 а, б). Вместе с тем, особенности топологии некоторых комбинаторных типов не позволяют получать соответствующие выпуклые многогранники в рамках рассматриваемой модели и требуют её доработки (см. рис. 8 в, г). Основным же достоинством алгоритма является то, что он позволяет оторваться от абстрактного описания многогранника и практически на всём их разнообразии получить трёхмерные каркасы, которые уже можно двигать и даже воспроизвести в виде материальных моделей. Это стало следующим, на сегодня последним шагом в развитии способов визуализации многогранников.



Рис. 9. Оbj-файл с координатами вершин и поверхностей, открытый в среде Blender 3d.

Для получения моделей нами были использованы программы Blender 3d, Pepakura Designer 3 и Wanhao-cura. На первом этапе мы формируем файл с данными геометрии в формате obj. Формат файлов OBJ – это простой формат данных, который содержит только 3D геометрию, а именно, позицию каждой вершины, связь координат текстуры с вершиной, нормаль для каждой вершины, а также параметры, которые создают полигоны. По большей части это общепринятый формат. Obj-файл содержит два типа определения: вершины и грани. Вершины задаются в строках, начинающихся с литеры v,



Рис. 10. Применение модификатора wireframe для создания рёбер с контролируемой толщиной.
за которой следуют координаты x, y, z. Грани задаются после списка вершин в строках, начинающихся с литеры f, за которой следуют номера вершин, лежащих на этой грани. Номера вершин соответствуют порядку их перечисления в списке вершин. Пример содержимого файла:

```
v -0.533 0.462 0.709
v 0.136 -0.262 0.955
...
f 1 2 3
f 1 4 8 6
```

Сформированный obj-файл может быть открыт для работы в программной среде Blender 3d, задавая модель многогранника (рис. 9). Далее в той же программной среде Blender 3d строится каркасная модель с применением модификатора wireframe, который позволяет создавать рёбра многогранника регулируемой толщины (рис. 10).

Готовая каркасная модель подготавливается к печати в приложении Wanhao-cura в формате stl-файла, предназначенного собственно для 3D-принтера. В приложении производится настройка размеров модели, толщина слоя (чем тоньше - тем лучше качество печати, но дольше время изготовления модели), толщина стенок и заполненность пустот между стенками. Последнее важно, поскольку при печати могут возникать нависающие элементы конструкции, которые могут деформироваться под действием силы тяжести. В таких случаях, для этих элементов устанавливается поддержка (вертикальные стенки от основания, на которых лежит нависающий элемент). В готовой каркасной модели эти поддержки демонтируются. В зависимости от настроек, для получения оптимальной по качеству модели, например, размером 50×50×50 мм, потребуется около 2.5 метров PLA-пластика и 1-1.5 часа времени печати на 3D-принтере Wanhao Duplicator i3. Результат печати показан на рис. 11. Возможно также создание сплошных моделей. В этом случае удаление внутренних поддерживающих конструкций (соответственно, ручного труда) не требуется.

Ещё один способ получения материальных моделей многогранников заключается в построении развёртки поверхности многогранника в приложении Pepakura. Для этого может быть использован тот же obj-файл (рис. 12).



Рис. 11. Распечатанные на 3D-принтере каркасные модели многогранников.



Рис. 12. Развёртка трёхмерной модели в приложении Pepakura Designer 3.

Результат может быть сохранён в виде растрового или векторного изображения. Далее развёртку можно вырезать, например, на лазерном станке из любого достаточно твёрдого материала и склеить, что более экономично по сравнению с 3D-печатью.

Таким образом, за всё время изучения авторами многообразия многогранников, был пройден большой путь от ручной зарисовки полученных результатов, до возможности автоматического создания физических трёхмерных каркасных моделей.

Список литературы

1. Войтеховский Ю.Л. Грануломорфология: приводимые 4-... 8-эдры, простые 9-и 10-эдры. Апатиты: КНЦ РАН. 1999. 60 с.

2. Войтеховский Ю.Л. Грануломорфология: простые 11-эдры. Апатиты. Изд-во: КНЦ РАН, 2000. 72 с.

3. Войтеховский Ю.Л., Степенщиков Д.Г., Ярыгин О.Н. Грануломорфология: простые 12- и 13-эдры. Апатиты. Изд-во: КНЦ РАН, 2000. 75 с.

4. Войтеховский Ю.Л., Степенщиков Д.Г. Фуллерены С₂₀-С₆₀: каталог комбинаторных форм и точечных групп симметрии. Апатиты. Изд-во: ЗАО К&М, 2002. 55 с.

5. Войтеховский Ю.Л., Степенщиков Д.Г. Фуллерены C₆₂-C₁₀₀: каталог комбинаторных типов и точечных групп симметрии. Апатиты. Изд-во: ЗАО К&М, 2003. 50 с.

6. Voytekhovsky Y.L., Stepenshchikov D.G. On the symmetry of simple 14- and 15-hedra // Acta Crystallographica. 2003. A59. P 367-370.

7. Войтеховский Ю.Л., Степенщиков Д.Г. Реальные кристаллографические простые формы // ЗВМО. №2. 2004. С. 112-120.

8. Войтеховский Ю.Л., Степенщиков Д.Г., Макаров М.С. Теорема Минковского и описание формы кристалла // ЗРМО. № 5. 2006. С. 101-102.

О НЕРЕАЛИЗУЕМОСТИ ОПРЕДЕЛЁННОГО ВИДА ГРАННОГО СИМВОЛА ПОЛИЭДРА

Ярыгин О.Н.

Институт направленного профессионального образования, Тольятти, onyx2602@rambler.ru

Аннотация. В статье продолжается обсуждение различных подходов к исследованию реализуемости гранного символа многогранника. Предлагается новый критерий «нереализуемости» и показывается его применимость в общем случае решения диофантовых уравнений для гранных символов выпуклых простых полиэдров.

Продолжая обсуждение проблемы реализуемости гранных символов, представляю читателям один (единственный правильный!) отклик, полученный на предложение доказать нереализуемость выпуклого простого 6-эдра с гранным символом $\{1,4,1\}$, на известном интернет-ресурсе Quora (www.quora.com), на котором среди множества любителей математики часто выступают высококвалифицированные учёные, не чурающиеся благородной работы по математическому просвещению и популяризации математики. В надежде на получение новой идеи в решении проблемы реализуемости, автор предложил эту задачу для специалистов в области теории графов и геометрии (https://www.quora.com/How-can-I-prove-that-there-is-no-6-hedronwith-1-triangular-face-4-quadrilateral-faces-1-pentagonal-face). Увы, получен был всего лишь один, к сожалению, анонимный ответ, повторяющий одно из известных решений (стиль корреспондента сохранён): «Assume this polyhedron exists. Counting up the edges on all the faces, there are 4+4+4+4+3+5=24, and the same number of vertexes. Since each edge is shared with two faces, there are a total of 12 edges. Using Euler's polyhedron formula, this polyhedron has 8 vertexes. Each vertex must have at least three faces meeting there. There are just enough vertexes to account for all 24 face vertexes. There can be no vertexes with four faces, because that would leave other vertexes with only two faces.

Consider the dual of this hypothetical polyhedron. Since all vertexes of the original had 3 faces, the dual must only have triangular faces (8 of them). The six vertexes of the dual will have meetings of 5, 4, 4, 4, and 3 triangles. Consider the vertex of the dual with five faces surrounding it. These must be placed as a pentagonal pyramid (possibly with a non-planar base). This alone establishes all six vertexes of the dual, and the remaining triangles must be placed around the pentagonal base with no further vertexes being created. There is only one way to do this (up to rotation), and the arrangement finishes additional vertexes with of

Ярыгин О.Н.

3, *3*, *4*, *4*, *4* faces. Which is not what we required. (It does show the possibility of a polyhedron with one pentagon, three quadrilaterals, and two triangles.)»¹

Поблагодарим неизвестного автора и покажем, что этот известный подход может быть применён и для доказательства невозможности реализовать полиэдр с гранным символом {3,0,3}, имеющим тот же эйлеров тип (V,E,F)=(8,12,6), что и гипотетический полиэдр с гранным символом {1,4,1}.

Предположим, что полиэдр с гранным символом {3,0,3} существует.

Степень d_i каждой из 8 вершин равна 3 (поскольку $d_1+d_2+...+d_8=2E=24$ и $d_i\geq 3$, i=1,..8). Рассмотрим двойственный полиэдр Р'. Его гранный символ равен {8}, а эйлеров тип – (V', E',F')=(6,12,8). Р' имеет 8 треугольных граней и 6 вершин. Вершины имеют степени 3,3,3,5,5,5. Вершинный символ полиэдра Р' совпадает с гранным символом полиэдра Р. Рассмотрим вершину степени 5, ($d'_1=5$). Она инцидентна 5 рёбрам, вторые концы которых образуют все оставшиеся 5 вершин. Причём вершины соседних (например, по часовой стрелке) рёбер должны соединяться новыми рёбрами, так как все грани полиэдра Р' являются треугольниками. Таким образом, задействованы 5+5=10 рёбер. Эти 5 вершин образовавшегося пятиугольника (возможно неплоского) должны быть соединены в три недостающих треугольника двумя (E'-10=2) рёбрами. Это возможно только за счёт проведения двух рёбер от одной вершины v_k к двум несмежным ей вершинам. При этом степень вер-



Рис. 1. Диаграмма Шлегеля для двойственного полиэдра Р'.

шины станет равной 5, а степени еще двух вершин возрастут от 3 до 4 (рис. 1). Таким образом, может быть получен только вершинный символ полиэдра Р' $\{2,2,2\}$, что не совпадает с предположенным вершинным символом $\{3,0,3\}$.

Продемонстрированный подход, представляет собой алгоритмическое доказательство невозможности построить полиэдр, имеющий рассматриваемый конкретный гранный символ методом «от противного»:

¹ «Предположим, этот многогранник существует. Подсчитывая рёбра всех граней, получим 4+4+4+4+3+5=24 и столько же вершин. Поскольку каждое ребро совместно используется двумя гранями, всего имеется 12 рёбер. Формула Эйлера показывает, что этот многогранник имеет 8 вершин. В каждой вершине сходятся как минимум три ребра. Вершин достаточно ровно для 24 исходящих рёбер. Не может быть вершин с четырьмя рёбрами, потому что это оставило бы другие вершины только с двумя рёбрами.

Рассмотрим двойственный многогранник для этого гипотетического многогранника. Поскольку все вершины оригинала имели по 3 грани, двойственный многогранник должен иметь только треугольные грани (8). В шести вершинах двойственного многогранника будут сходиться 5, 4, 4, 4 и 3 треугольника соответственно. Рассмотрим вершину двойственного многогранника с пятью гранями, окружающими её. Они должны быть расположены в виде пятиугольной пирамиды (возможно, с неплоским основанием). Одно это устанавливает все шесть вершин двойственного многогранника, а оставшиеся треугольники должны быть размещены в пятиугольном основании без создания дополнительных вершин.

Есть только один способ сделать это (с точностью до поворота), и такое расположение завершает дополнительные вершины с 3, 3, 4, 4, 4 гранями. Это не то, что нам требовалось. (Показана возможность многогранника с одним пятиугольником, тремя четырёхугольниками и двумя треугольниками.)»

- 1. Предположение существования полиэдра Р, переход к рассмотрению двойственного полиэдра Р';
- 2. Диаграмма Шлегеля для полиэдра Р', ввиду простоты полиэдра Р, представляет собой «триангуляцию треугольника»;
- 3. Выполнение необходимых шагов последовательных построений треугольников на диаграмме Шлегеля приводит к противоречию: две вершины имеют степень 5. (Отметим, что триангуляция треугольника, имеющая V'=6 вершин имеет 2V'-4=8=F' граней [1]).

Подобный подход можно характеризовать как *ad hoc*, так как он требует модификации в каждом конкретном случае, и для полиэдров с гранями больших порядков представляется весьма громоздким. В работах [3-5] представлены некоторые подходы, позволяющие переложить эту работу на компьютерные программы. Кроме того, были сформулированы и доказаны некоторые теоремы, позволяющие сделать вывод о реализуемости полиэдра, «численно» проанализировав вид его гранного символа [6].

Представим ещё один из таких признаков. Рассмотрим, для примера, 6-эдр Р, имеющий гранный символ {3,0,3}. Предположим, что этот граф реализуем. Следовательно, реализуем двойственный полиэдр Р'. Значит, граф для Р', является полиэдрическим: планарным и 3-связным. Двойственный по-



Рис. 2. Граф предполагаемого полиэдра Р'.

лиэдр Р' имеет вершинный символ [3,0,3]. Каждая из 3 вершин степени 5 соединена со всеми остальными вершинами. Таким образом, каждая из трёх вершин инцидентна трём остальным вершинам, то есть граф полиэдра Р' имеет подграф К_{3,3} (рис. 2). Следовательно, по теореме Куратовского, граф полиэдра Р' не является планарным. Значит, этот граф не является полиэдрическим. Таким образом, получено противоречие.

Обобщим этот пример. Пусть при решении уравнений для гранных символов полиэдров [6], относящихся к эйлерову типу (V,E,F), получен гранный символ $[f_3, f_4, ..., f_m]$.

Критерий нереализуемости гранного символа: Если F \geq 6, *m*=F-1, $f_m \geq$ 3, то гранный символ [f_3, f_4, \dots, f_m] нереализуем.

Примером срабатывания представленного критерия является решение уравнений для 7-эдров и 8-эдров [6].

Для выпуклого простого 7-эдра получим V=10, E=15, m=F-1=6. Гранный символ простого 7-эдра имеет вид { f_3, f_4, f_5, f_6 }, а система уравнений:

$$f_3 + f_4 + f_5 + f_6 = 7, (1)$$

$$3f_3 + 4f_4 + 5f_5 + 6f_6 = 30.$$
 (2)

Ярыгин О.Н.

Общее решение этой системы описывается двумя целочисленными параметрами [6]:

$$f_{3} = 7 - s - t,$$

$$f_{4} = t,$$

$$f_{5} = -(9 - t) + 3s,$$

$$f_{6} = (9 - t) - 2s.$$

при ограничениях:

$$s + t \le 7,$$

$$0 \le t,$$

$$9 - 3s \le t,$$

$$t \le 9 - 2s,$$

$$0 \le s.$$

При *s*=3, *t*=0 получаем гранный символ $\{f_3, f_4, f_5, f_6\} = \{4, 0, 0, 3\}$. Действительно, такой гранный символ является нереализуемым [2].

Для выпуклого простого 8-эдра получим V=12, E=18, *m*=7. Гранный символ простого 8-эдра имеет вид $\{f_3, f_4, f_5, f_6, f_7\}$, а система уравнений:

$$f_3 + f_4 + f_5 + f_6 + f_7 = 8, (3)$$

$$3f_3 + 4f_4 + 5f_5 + 6f_6 + 7f_7 = 36.$$
(4)

Общее решение этой системы описывается тремя целочисленными параметрами:

$$f_{3} = 8 - s - t - r,$$

$$f_{4} = t,$$

$$f_{5} = s,$$

$$f_{6} = -(12 - t - 2s) + 4r,$$

$$f_{7} = (12 - t - 2s) - 3r.$$

при ограничениях:

$$s + t + r \le 8,
0 \le t,
0 \le s,
0 \le -(12 - t - 2s) + 4r,
0 \le (12 - t - 2s) - 3r,
0 \le r.$$

При *s*=0, *t*=0, *r*=3 получаем гранный символ $\{f_3, f_4, f_5, f_6, f_7\} = \{5,0,0,0,3\},$ который также является нереализуемым [2].

В общем случае гранный символ простого F-эдра имеет вид $\{f_3, f_4, \dots f_{m-1}, f_m\}$, а система уравнений:

$$f_3 + f_4 + \dots + f_{m-1} + f_m = \mathbf{F},$$
 (5)

$$3f_3 + 4f_4 + \dots (m-1)f_{m-1} + mf_m = 2E = 2(3F-6)$$
 (6)

Множество решений для гранного символа выпуклого простого F-эдра, то есть при *m*=F-1 задаётся равенствами:

$$f_{3} = F - t_{1} - t_{2} - \dots - t_{F-5},$$

$$f_{4} = t_{1},$$

$$f_{5} = t_{2},$$

$$\dots$$

$$f_{F-3} = t_{F-6},$$

$$f_{F-2} = -[3F - 12 - t_{1} - 2t_{2} - \dots - (F-6)t_{F-6}] + (F-4)t_{F-5},$$

$$f_{F-1} = [3F - 12 - t_{1} - 2t_{2} - \dots - (F-6)t_{F-6}] - (F-5)t_{F-5}.$$

при ограничениях:

$$\begin{split} t_1 + t_2 + \ldots + t_{\text{F-5}} &\leq \text{F}, \\ t_i &\geq 0, \ 1 \leq i \leq \text{F-5}, \\ [3\text{F} - 12 - t_1 - 2t_2 - \ldots - (\text{F-6})t_{\text{F-6}}] - (\text{F-4})t_{\text{F-5}} &\leq 0, \\ [3\text{F} - 12 - t_1 - 2t_2 - \ldots - (\text{F-6})t_{\text{F-6}}] - (\text{F-5})t_{\text{F-5}} &\geq 0. \end{split}$$

Всегда ли существует решение, подверженное действию предлагаемого критерия «нереализуемости»? Будет ли существовать среди решений такой гранный символ, что

$$f_{F-1} = [3F - 12 - t_1 - 2t_2 - \dots - (F-6)t_{F-6}] - (F-5)t_{F-5} = 3,$$

$$f_3 = F - t_1 - t_2 - \dots - t_{F-5} \ge 3?$$

При $t_1 = t_2 = \dots t_{F-6} = 0$ получаем

$$f_{3} = F - t_{F-5},$$
(7)

$$f_{4} = 0,$$
(7)

$$f_{5} = 0,$$
(7)

$$f_{5} = 0,$$
(7)

$$f_{5-2} = 0,$$
(8)

$$f_{F-2} = -[3F - 12] + (F-4)t_{F-5},$$
(8)

$$f_{F-1} = [3F - 12] - (F-5)t_{F-5} = 3.$$
(9)

Из (9) получаем, что $t_{F-5} = 3$, из (7) $-f_3 = F - 3$ и из (8) $-f_{F-2} = 0$. Таким образом, системе уравнений удовлетворяет, в частности, гранный символ вида {F-3,0,0,...,0,3}.

Узок круг гранных символов, отсекаемых предложенным критерием, страшно далеки они от остальных гранных символов, но они пробуждают интерес к дальнейшему исследованию проблемы реализуемости.

Список литературы

4. Берцун В.Н. Математическое моделирование на графах. Ч. 1. Томск. Изд-во: НТЛ, 2006. 88 с.

5. Войтеховский Ю.Л. Грануломорфология: приводимые 4-...8-эдры, простые 9- и 10-эдры. Апатиты. Изд-во: КНЦ РАН, 1999. 62 с.

6. Ярыгин О.Н. Матричный алгоритм проверки реализуемости гранных символов. Труды VII седьмой Всероссийской (с международным участием) научной школы «Математические исследования в естественных науках», посвящённой 300-летию со дня рождения М.В. Ломоносова. Апатиты, 3-6 октября 2011. Апатиты. Изд-во: К&М. С. 143-148.

7. Ярыгин О.Н. Подходы к проблеме реализуемости последовательности чисел как гранного символа полиэдра. Труды VIII Всероссийской научной школы «Математические исследования в естественных науках», Апатиты, 15-16 октября 2012. Апатиты. Изд-во: К&M. 2012. С. 59-66.

 Безгинов А.А., Ярыгин О.Н. Построение 3D-визуализации полиэдра на основании проекции Шлегеля. Математические исследования в естественных науках. Труды IX Всероссийской научной школы. Апатиты. Геологический институт Кольского НЦ РАН, Кольское отделение РМО, 10-11 октября 2013 г. / Ред. Ю.Л. Войтеховский. Апатиты. Изд-во: К&М, 2013. С. 106-111.
 Ярыгин О.Н. Уравнение Эбергардта и другие диофантовы уравнения полиэдров. Труды VII Всероссийской (с международным участием) научной школы «Математические ис-следования в естественных науках», Апатиты, 3-6 октября 2011. Апатиты. Изд-во: К&М. С. 152-156.

ГЕОЛОГИЯ

ГЕОФИЗИКА



ГЕОХИМИЯ

E.S. FEDOROV'S (MATHEMATICAL) APPROACH IN ANALYSIS OF PETROGRAPHIC STRUCTURES

Voytekhovsky Y.L.

Saint-Petersburg Mining University, 2, 21st Line, V.O., 199106, Saint-Petersburg, Russia, voytekhovskiy_yul@pers.spmi.ru

Summary. The article proposed an algebraic approach to the definition, classification, nomenclature and description of transformations of rock structures. This is the most descriptive part of modern petrography. The proposed mathematical approach logically follows the scientific method of E.S. Fedorov, who showed its effectiveness in crystallography, and develops the scientific school of petrography of the Saint-Petersburg Mining University.

Keywords: petrographic structure, E.S. Fedorov, algebraic quadratic form, classification, nomenclature, structural transformations.

Introduction

Rock structures are very important for their correct diagnosis and reconstruction of the conditions of formation. At the same time, it is the most descriptive part of modern petrography. The petrographic dictionaries [5, 6] contain hundreds of terms characterizing the rock structures. As a rule, morphological and genetic aspects are mixed in them. And it does not allow us to build an exhaustive classification and the corresponding nomenclature of petrographic structures.

E.S. Fedorov noted [2(p. 164)]: «If we take into account that different types of structures depend on the external conditions that occurred during the formation of the rock, conditions constantly changing, it becomes clear how difficult it is to distinguish between types of rocks originated from magma of the same or similar composition. The fundamental difference between rocks is, of course, the initial chemical composition; but this composition is very variable, and in this respect there are a variety of transitional stages between different rocks that do not allow a sharp distinction between one type of rock and another. <...> It is easy to understand that with a large variety in the composition it is impossible to establish a natural classification that could give each rock its own place».

English classic of petrology A. Harker [4(p. 20)] wrote about the same: «Classification and nomenclature of rocks. Petrology has not yet arrived at any philosophical classification of rocks. Further, it is easy to see that no classification can be framed which shall possess the definiteness and precision found in some other branches of science. The mathematically exact laws of chemistry and physics, which give individuality to mineral species, do not help us in dealing with complex mineral aggregates, and any such fundamental principle as that of descent, which underlies classification in the organic world, has yet to be found in petrology. Rocks of different types are often connected by insensible gradations, so that any artificial classification with sharp divisional lines can not truly represent the facts of nature. At present, therefore, the best arrangement is that which brings together as far as possible, for convenience of description, rocks which have characters in common, the characters to be first kept in view being those which depend most directly upon important genetic conditions. The grouping adopted below must be regarded as one of convenience rather than of principle». Note that the «adopted below» is quite a modern grouping of rocks into plutonic, hypabyssal, volcanic, sedimentary – with their further division according to chemical and mineral composition and structure, and metamorphic – with division according to the type of metamorphism.

The above approach to the description of petrographic structures accepted by E.S. Fedorov and A. Harker and the contradiction between the need for classification (always with sharp boundaries), on the one hand, and continuous transitions between them, on the other hand, have been preserved until now. In recent petrography there is a strange situation. With the visible rock elements (mineral grains) and their fundamental relations (to belong to the same or different mineral species, to contact or not to contact each other), the conceptual theory of the rock is not built. Rock as an aggregate of a huge number of mineral grains is not enough. More precisely, this representation contains only the physical side of the phenomenon. But what is the mathematical idea?

The history of crystallography shows that the use of mathematics is the only correct method. The geometric correctness of the external form of crystals once prompted scientists to search for the correctness of the structure and led to the 230 space groups. Geometric irregularity of geological bodies does not indicate the impossibility of building a mathematical theory, but only the need to search for more flexible concepts that correspond to this level of matter organization. The above elements and relationships are enough to define crystalline rock as space: topological (with discrete topology), tolerant (with a generating relationship of non-contacting mineral grains), measurable (with various measures), metric (with various non-Euclidean metrics) and partly ordered [7,8]. Further, the category of petrographic structure is defined and the principles of classification, nomenclature and description of their transformations are formulated below.

Rock organization: an equation of state

Let us borrow the ideas about the organization and structure from the general system analysis. Organization – the totality of all relations between parts of a whole. Structure – a set of fundamental relationships that essentially define the whole. It is convenient to record the organization of a rock by the probability distribution of intermineral contacts as follows:

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

Voytekhovsky Y.L.

This and the following algebraic expressions are of fundamental importance and require clarification. 1. The complexity of any system is determined by the diversity of not only the elements (although everything begins with them), as inter-element relations. Geologist perceives the structure of a rock mainly through the contacts of mineral grains. 2. The probabilities of contacts of mineral grains of various types with their uniform distribution in space are proportional to their concentrations and, therefore, to their product. This approach is used in a number of sciences: in chemistry when calculating the equilibria of reactions; in physics, in the derivation of the thermodynamic macro-parameters of gases through the kinematics of molecules; in biological models of the «predator-prey-type», etc. 3. Probabilities p_{ij} should be considered in 3D, but there are no non-destructive physical methods for this. How do the p_{ii} , calculated in 2D (thin or polished section), correlate with them in 3D, this stereological problem has not yet been strictly solved. It is assumed that those are the same. 4. The structures of rocks are such that in 3D three grains are in contact along the edge, while four grains meet at a point. An ideal description would be in the probabilities p_{iikl} . But there is no algebraic theory for this. The below description of petrographic structures in probabilities p_{ii} , counted in 2D, is the maximum possible.

It follows from the above formalism, that a rock is a multi-valued mapping (apparently first used in natural sciences) of a set of minerals onto itself, controlled by the operator P_{ii} of inter-mineral contact probabilities:

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

Petrographic structure: definition, classification, nomenclature

The operator P_{ij} is a symmetric matrix of quadratic form coefficients of n variables, where n is the number of minerals in a rock. The corresponding quadratic surface in n-dimensional space is called a structural indicatrix. It is convenient to relate any petrographic structure to its quadratic indicatrix and its algebraic characteristic – the canonical diagonal form of the matrix P_{ij} .

Definition

The petrographic structure is a rock invariant, fixed (geometrically) by the quadratic indicatrix and (algebraically) by the canonical diagonal form of the matrix P_{ii} .

Thus, the classification of petrographic structures is reduced to that of quadratic forms (surfaces). The author has shown that, in the accepted definitions for n-mineral rocks, there are exactly n structures in accordance with the numbers m = 1, ..., n of positive elements in the diagonal form of the matrix P_{ij} . The nomenclature of structures is given by the symbol S_n^m . Moreover, any structure admits C_n^m states depending on the location of m positive elements in n positions of the diagonal form of the matrix P_{ij} . In total: $C_n^1 + ... + C_n^n = 2^n - 1 - just$ as

many structural states are possible for n-mineral rocks. It is appropriate to discuss with A. Harker [4], who said: *«In an ideal system, the nomenclature should be combined with the classification. Of course, this is impossible in petrology today».* The above shows that this is already possible today.



Fig. The structures of norites from the Fedorovo-Pansky massif, the Kola Peninsula.

All possible structures of bimineral and trimineral rocks are found in norites and gabbronorites of the Fedorovo-Pansky massif, the Kola Peninsula. Fig. shows the transition from state 1 (elliptic type) to 5 (hyperbolic type). The boundary between the structural types S_2^2 and S_2^1 at point 3 is the condition $p_{11}p_{22} = p_{12}^2$. In geometrical images, the structural transition consists in continuous rotation and elongation of the ellipse, its breaking out at an infinitely distant point, bending of a pair of parallel lines to the hyperbola, its further rotation and deformation. Corresponding changes in the probabilities of various intermineral contacts in petrographic thin sections are invisible, which formed the popular opinion: «No classification can be framed which shall possess the definiteness and precision found in some other branches of science. < ... > Rocks of different types are often connected by insensible gradations, so that any artificial classification with sharp divisional lines can not truly represent the facts of nature» [4]. In fact, every petrographic structure is stable with respect to some continuous variations in the probabilities p_{ii} of various intermineral contacts. But this does not contradict its abrupt change at the boundaries of the classification.

Matrix description of transformations

In the proposed classification of petrographic structures, transformations of two types are possible – within classes and between them. The first are known in algebra as similarity transformations and are easily interpreted geometrically: petrographic structures of the same type are similar in the same sense as ellipses, hyperbolas (2D), ellipsoids, hyperboloids (3D) among themselves. For any two states $[P_{ij}]$ and $[*P_{ij}]$ of a rock with one structure, there is a similarity transformation [Q] connecting them, so that $[*P_{ij}] = [Q]^T [P_{ij}] [Q] [1, 3]$. Similarity transformations form a multiplicative group.

The second transformations are more complicated. They can be explained geometrically by virtue of the isomorphism constructed between the n-mineral petrographic structures and their indicatrices – second-order surfaces in n-dimensional space. How to convert an ellipse into a hyperbola, and an ellipsoid into a 1-cavity or 2-cavity hyperboloid? How complex mathematical transformations do we need? Means of algebra make it possible to solve the problem by packing complexity into formalisms. Our first idea is to describe the transitions between the representatives of the classes defined by the canonical forms of the matrices $[P_{ij}]$ with ± 1 on the diagonals. Then the transition from the canonical matrix to any representative of the same class can be described as a similarity transformation. Thus, on the 3 structural states of bimineral rocks, the multiplicative group G_2 of order 4 with an irreducible system of generators of order 2 is defined:

$$\begin{array}{cccc} \mathbf{1} & \mathbf{m}_{\mathbf{y}} & \mathbf{m}_{\mathbf{x}} & -\mathbf{1} \\ \begin{bmatrix} 1 \\ & 1 \end{bmatrix} & \begin{bmatrix} 1 \\ & -1 \end{bmatrix} & \begin{bmatrix} -1 \\ & 1 \end{bmatrix} & \begin{bmatrix} -1 \\ & -1 \end{bmatrix} \end{array}$$

The irreducible system of generators for G₂:

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

On the 7 structural states of trimineral rocks, the multiplicative group G_3 of order 8 with an irreducible system of generators of order 3 is defined:

The irreducible system of generators for G₃:

$$\begin{bmatrix} -1 & & \\ & 1 \\ & & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & & \\ & -1 & \\ & & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & & \\ & 1 & \\ & & -1 \end{bmatrix}$$

They have analogues in symmetric transformations on the plane (G_2) and in space (G_3) – reflections relative to the planes, axes and the origin. But this analogy should rather be abandoned than followed. The meaning of «reflections» in petrography corresponds to the renaming of mineral species, *i.e.* replacing each other in the same structural positions. The result is generalized to n-mineral rocks. On $2^n - 1$ structural states, a multiplicative group of transformations G_n of order 2^n with the irreducible system of generators of order *n* is defined. It seems that the application of group theory to the description of transformations of petrographic structures means a step forward, as it happened in crystallography more than 100 years ago.

Conclusion. Historians of natural sciences have to understand why the structural theory of crystalline rock from visible elements, *i.e.* mineral grains, and their relations has not yet been built, although the theory of a crystal of invisible atoms has been known for more than 100 years. We do not know what kind of mathematical idea nature laid in the structure of crystalline rock – in the sense that it laid down 230 space groups in the structure of crystals. The author has developed the theory of a rock as a topological, tolerant, measurable, metric and partly ordered space. For any rock, various topologies, measures and metrics can be defined. Thus, the petrographic space received mutually additional views. Such relativity does not contradict the fact that one of them may turn out to be fundamental, characterizing the petrographic space most rationally. For example, the crystalline space is built on both the wave and particle principles. But it is only in the second case that space groups recognized by its fundamental representation are deducible. The author does not insist that the theory proposed is the one that should become the mathematical basis of petrography, but aims to show that such a theory can be created by means of modern mathematics.

References

1. Borevich Z.I. Determinants and matrices. Moscow: Science, 1988. 184 p.

2. Fedorov E.S. The foundations of petrography. St.-Petersburg: P.P. Soikin's typography, 1897. 236 p.

3. Gantmaher F.R. Theory of matrices. Moscow: Science, 1988. 552 p.

4. Harker A. Petrology for students. Cambridge: University Press, 1908. 336 p.

5. Petrographic dictionary by F.Yu. Levinson-Lessing and E.A. Struve / Eds.

G.D. Afanasyev et al. Moscow: Gosgeoltekhizdat, 1963. 448 p.

Petrographic dictionary / Eds. V.P. Petrov *et al.* Moscow: Nedra, 1981. 496 p.
 Voytekhovsky Y.L. Rock: experiences of comprehension. Apatity: K & M,

2005. 167 p.

8. Voytekhovsky Y.L. 12 etudes on the themes of crystallography, mineralogy and petrography. Apatity: K & M, 2011. 204 p.

ФЁДОРОВСКИЙ (МАТЕМАТИЧЕСКИЙ) ПОДХОД К АНАЛИЗУ ПЕТРОГРАФИЧЕСКИХ СТРУКТУР

Войтеховский Ю.Л.

Cанкт-Петербургский горный университет, Cанкт-Петербург, voytekhovskiy_yul@pers.spmi.ru

Аннотация. В статье предложен алгебраический подход к определению, классификации, номенклатуре и описанию трансформаций структур горных пород. Это самая описательная часть современной петрографии. Предлагаемый математический подход логически следует научному методу Е.С. Фёдорова, показавшего его эффективность в кристаллографии, и развивает научную школу петрографии Санкт-Петербургского горного университета.

Ключевые слова: петрографическая структура, Е.С. Фёдоров, алгебраические квадратичные формы, классификация, номенклатура, структурные трансформации.

Введение

Структуры горных пород очень важны для их правильной диагностики и реконструкции условий образования. В то же время, это самая описательная часть современной петрографии. В петрографических словарях [5, 6] приведены сотни терминов, характеризующих структуры горных пород. Как правило, в них смешаны морфологические и генетические аспекты. И это не позволяет построить исчерпывающую классификацию и соответствующую номенклатуру петрографических структур.

Е.С. Фёдоров отмечал [7(с. 164)]: «Если принять во внимание, что различные виды структуры зависят от внешних условий, имевших место при образовании породы, условий постоянно изменявшихся, то станет понятно, как трудно разграничить по структуре типы пород, происшедших из одной и той же или близких по составу магм. Коренное различие между породами есть, конечно, первоначальный химический состав; но и этот состав весьма изменчив, и в этом отношении между различными породами существуют самые разнообразные переходные ступени, не позволяющие резко разграничивать одни типы пород от других. <...> Легко понять, что при большом разнообразии в составе невозможно установить естественной классификации, которая могла бы дать каждой породе принадлежащее место».

Английский классик петрологии A. Харкер [8(p. 20)] писал о том же: «Classifcation and nomenclature of rocks. Petrology has not yet arrived at any philosophical classifcation of rocks. Further, it is easy to see that no classifcation can be framed which shall possess the defniteness and precision found in some other branches of science. The mathematically exact laws of chemistry and physics, which give individuality to mineral species, do not help us in dealing with complex mineral aggregates, and any such fundamental principle as that of descent, which underlies classifcation in the organic world, has yet to be found in petrology. Rocks of different types are often connected by insensible gradations, so that any artificial classifcation with sharp divisional lines can not truly represent the facts of nature. At present, therefore, the best arrangement is that which brings together as far as possible, for convenience of description, rocks which have characters in common, the characters to be first kept in view being those which depend most directly upon important genetic conditions. The grouping adopted below must be regarded as one of convenience rather than of principle».

«Классификация и номенклатура горных пород. Петрология до сих пор не выработала никакой философской классификации горных пород. Далее, легко видеть, что не может быть создана никакая классификация, которая обладала бы определённостью и точностью, найденными в некоторых других областях науки. Математически точные законы химии и физики, которые придают индивидуальность минеральным видам, не помогают нам в работе со сложными минеральными агрегатами и какой-то фундаментальный принцип, наподобие лежащего в основании классификации органического мира, ещё должен быть найден в петрологии. Горные породы различных типов часто связаны непрерывными переходами, так что никакая искусственная классификация с резкими разделительными границами не может истинно представлять факты природы. На сегодня, следовательно, наилучшей систематикой является та, которая объединяет, насколько это возможно ради удобства описания, горные породы с общими свойствами, в первую очередь имея в виду те свойства, которые наиболее прямо зависят от важных генетических условий. Использованная ниже группировка должна рассматриваться скорее как одно из соглашений, чем как принцип» (пер. авт.). Заметим, что «ниже использована» вполне современная классификация горных пород на плутонические, гипабиссальные, вулканические, осадочные - с дальнейшим их делением по химическому и минеральному составу и структуре, и метаморфические – с делением по типу метаморфизма.

Принятый Е.С. Фёдоровым и А. Харкером подход к описанию петрографических структур и противоречие между необходимостью классификации (всегда с резкими границами), с одной стороны, и непрерывными переходами между ними, с другой стороны, сохранились до сих пор. В петрографии сложилась парадоксальная ситуация. При очевидности элементов горной породы (минеральные зёрна) и их фундаментальных отношений (принадлежать к одному или разным минеральным видам, контактировать или не контактировать), концептуальная теория горной породы не построена. Горная порода как агрегат большого числа минеральных зёрен – этого мало. Точнее, в этом представлении содержится лишь физическая, осязаемая сторона явления. Но в чём состоит математическая идея? История кристаллографии показывает, что применение математики – единственно правильный методический приём. Геометрическая правильность внешней формы кристаллов некогда подтолкнула учёных к поиску правильности структуры и привела к выводу 230 пространственных групп Фёдорова-Шёнфлиса. Геометрическая неправильность геологических тел указывает не на невозможность построения математической теории, а лишь на необходимость поиска концепций, соответствующих этому уровню организации материи. Перечисленных выше элементов и отношений достаточно, чтобы определить кристаллическую горную породу как пространство: топологическое (с дискретной топологией), толерантное (с порождающим отношением неконтактирования минеральных зёрен), измеримое (с различными мерами), метрическое (с различными неевклидовыми метриками) и частично упорядоченное [2,3]. Далее определена категория петрографической структуры и сформулированы принципы классификации, номенклатуры и описания их трансформаций.

Организация горной породы: уравнение состояния

Из системного анализа заимствуем представления об организации и структуре. Организация – совокупность всех отношений между частями целого. Структура – совокупность принципиально важных отношений, определяющих целое по существу. Организацию горной породы удобно зафиксировать распределением вероятностей межзерновых контактов [1,4]:

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

Это и последующее алгебраические выражения имеют фундаментальное значение и требуют пояснений. 1. Сложность системы определяется разнообразием не столько элементов (хотя всё начинается с них), сколько межэлементных отношений. Петрограф воспринимает структуру горной породы главным образом через контакты минеральных зёрен. 2. Вероятности контактов минеральных зёрен различных видов при их равномерном распределении в пространстве пропорциональны их концентрациям и, следовательно, их произведениям. Такой подход используется в ряде наук: в химии при расчёте равновесий реакций; в физике при выводе макропараметров газов через кинематику молекул; в биологических моделях эволюции популяций типа «хищник – жертва», и т.д. 3. Вероятности p_{ii} следовало бы считать в 3D, но для этого нет неразрушающих физических методов. Как соотносятся с ними p_{ii} , подсчитанные в 2D (штуфе, шлифе) – эта стереологическая задача пока не имеет строгого решения. Принимается, что те и другие совпадают. 4. Строение горных пород таково, что в 3D три зерна контактируют по ребру, а четыре зерна – в точке. Идеальное описание было бы в вероятностях p_{iikl} . Но для этого пока нет алгебраической теории. Предлагаемое описание петрографических структур в вероятностях p_{ij} , считаемых в 2D – максимум возможного.

Из приведенного формализма следует, что горная порода представляет собой много-многозначное отображение (по-видимому, впервые используемое в науках о минеральном веществе) набора минералов на себя, управляемое оператором Р₁₁ вероятностей межзерновых контактов:

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

Петрографические структуры: определение, классификация, номенклатура

Оператор P_{ij} представляет собой симметрическую матрицу коэффициентов квадратичной формы от n переменных, где n – число минералов в горной породе. Соответствующую квадратичную поверхность в n-мерном пространстве назовём структурной индикатрисой. Отсюда следует, что петрографической структуре удобно сопоставить индикатрису и её алгебраическую характеристику – каноническую диагональную форму матрицы P_{ij} .

Определение

Петрографическая структура – инвариант горной породы, фиксируемый (геометрически) индикатрисой и (алгебраически) канонической диагональной формой матрицы Р₁₁ вероятностей межзерновых контактов.

Тем самым классификация петрографических структур сведена к таковой для квадратичных форм (поверхностей). Автором показано, что в принятых определениях для п-минеральных горных пород существует ровно п структур по числу m = 1, ..., n положительных элементов в диагональной форме матрицы P_{ij} . Номенклатура структур задаётся символом S_n^m . При этом каждая структура допускает C_n^m состояний в зависимости от расположения m положительных элементов в п позициях диагональной формы матрицы P_{ij} . Итого: $C_n^{-1} + ... + C_n^{-n} = 2^n - 1$ – именно столько структурных состояний возможно для п-минеральных горных пород. Здесь уместно возразить А. Харкеру [8], сказавшему: «В идеальной системе номенклатура должна сочетаться с классификацией. Конечно, сегодня это в петрологии невозможно». Выше показано, что это уже возможно.

Все возможные структуры би- и триминеральных горных пород найдены в норитах и габброноритах Фёдорово-Панского массива, Кольский п-ов.. На рис. показан условный переход от состояния 1 (эллиптический тип) к 5 (гиперболический тип). Граница между структурными типами C_2^{1} и C_2^{2} – условие $p_{11} \times p_{22} = p_{12}^{2}$ в точке 3. В геометрических образах структурный переход состоит в непрерывном повороте и удлинении эллипса, его разрыве в бесконечно удалённой точке, изгибании пары параллельных прямых в гиперболу, её дальнейшем повороте и деформации. Соответствующие измене-



Рис. Структуры норитов Фёдорово-Панского массива, Кольский п-ов.

ния вероятностей межзерновых контактов в петрографических шлифах визуально неуловимы, что и сформировало мнение: «*Не может быть создана никакая классификация, которая обладала бы определённостью и точностью, найденными в некоторых других областях науки* <...> Горные поро*ды различных типов часто связаны непрерывными переходами, так что никакая искусственная классификация с резкими разделительными границами не может истинно представлять факты природы»* (Harker, 1908). На самом деле всякая петрографическая структура устойчива относительно некоторых непрерывных вариаций вероятностей p_{ij} межзерновых контактов. Но это не противоречит её скачкообразному изменению на границах классификации.

Матричное описание трансформаций

В предложенной классификации петрографических структур возможны преобразования двух типов – в пределах классов и между ними. Первые известны в алгебре как преобразования подобия и легко интерпретируются геометрически: петрографические структуры одного типа подобны в том же смысле, что и эллипсы, гиперболы (2D), эллипсоиды, гиперболоиды (3D) между собой. Для любых двух состояний [P_{ij}] и [*P_{ij}] горной породы с одной структурой найдётся связывающее их невырожденное преобразование подобия [Q], так что: [*P_{ij}] = [Q]^T [P_{ij}] [Q] [1,4]. Преобразования подобия образуют мультипликативную группу. Преобразования второго типа сложнее. Их можно пояснить геометрически в силу построенного выше изоморфизма n-минеральных петрографических структур и их индикатрис – поверхностей 2-го порядка в n-мерном пространстве. Как преобразовать эллипс в гиперболу, а эллипсоид в 1-полостный или 2-полостный гиперболоид? Сколь сложные математические преобразования могут обеспечить результат? Средства алгебры позволяют решить задачу, упаковав сложность в формализмы. Идея состоит в том, чтобы сначала описать переходы между представителями классов, определяемыми каноническими формами матриц [P_{ij}] с ±1 на диагоналях. Для этого используем те же диагональные ± 1 матрицы, образующие мультипликативную группу. Затем переход от канонической матрицы к любому представителю того же класса выполняется как преобразование подобия. Так, на 3 структурных состояниях биминеральной горной породы определена мультипликативная группа преобразований Γ_2 порядка 4 с неприводимой системой образующих порядка 2 [1, 4]:

 $\begin{array}{cccc} \mathbf{1} & m_y & m_x & -\mathbf{1} \\ \begin{bmatrix} 1 \\ & 1 \end{bmatrix} & \begin{bmatrix} 1 \\ & -1 \end{bmatrix} & \begin{bmatrix} -1 \\ & 1 \end{bmatrix} & \begin{bmatrix} -1 \\ & -1 \end{bmatrix} \\ \end{array}$

Неприводимая система образующих для Г₂:

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

На 7 структурных состояниях триминеральной горной породы определена мультипликативная группа преобразований Г₃ порядка 8 с неприводимой системой образующих порядка 3:

Неприводимая система образующих для Г₃:

$$\begin{array}{ccc} m_x & m_y & m_z \\ \begin{bmatrix} -1 & \\ & 1 \\ & & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & \\ & -1 \\ & & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & \\ & 1 \\ & & -1 \end{bmatrix}$$

Они имеют аналоги в симметрических преобразованиях на плоскости (Γ_2) и в пространстве (Γ_3) – отражениях относительно плоскостей, осей и начала координат. Но от этой аналогии следует скорее отказаться, чем ей следовать. Смысл «отражений» в петрографии отвечает переименованию минеральных видов, т.е. замещению друг друга в тех же структурных позициях. Результат обобщается на п-минеральные горные породы. На 2^n -1 струк-

турных состояниях определена мультипликативная группа преобразований Γ_n порядка 2^n с неприводимой системой образующих порядка n. Представляется, что применение теории групп к описанию трансформаций петрографических структур означает существенный шаг вперёд, как это случилось в кристаллографии более 100 лет тому назад.

Заключение

Историкам естественных наук предстоит понять, почему до сих пор не была построена структурная теория кристаллической горной породы из видимых элементов – минеральных зёрен, хотя теория кристалла из невидимых атомов известна уже более 100 лет. Мы не знаем, какую математическую идею заложила природа в строение кристаллической горной породы – в том смысле, что в строение кристаллов она заложила 230 пространственных групп Фёдорова-Шёнфлиса. Автором разработано представление о горной породе как топологическом, толерантном, измеримом, метрическом и частично упорядоченном пространстве. Для горной породы определены различные топологии, меры и метрики. Тем самым петрографическое пространство получило взаимно дополнительные представления. Такая относительность не противоречит тому, что одно из них может оказаться фундаментальным, характеризующим петрографическое пространство наиболее рационально. Так, кристаллическое пространство строится на волновых и корпускулярных принципах. Но лишь во втором случае выводимы пространственные группы, признанные его фундаментальным представлением. Автор не настаивает на том, что предложенная им теория – именно та, которая должна стать математическим основанием петрографии, но имеет целью показать, что такая теория может быть построена средствами современной математики.

Список литературы

1. Боревич З.И. Определители и матрицы. М. Изд-во: Наука, 1988. 184 с.

2. Войтеховский Ю.Л. (сост. и ред.) Горная порода: опыты постижения. Апатиты. Изд-во: К & M, 2005. 167 с.

3. Войтеховский Ю.Л. 12 этюдов на темы кристаллографии, минералогии и петрографии. Апатиты. Изд-во: К & M, 2011. 204 с.

4. Гантмахер Ф.Р. Теория матриц. М. Изд-во: Наука, 1988. 552 с.

5. Петрографический словарь Ф.Ю. Левинсон-Лессинга и Э.А. Струве / Ред. Г.Д. Афанасьев и др. М. Изд-во: Госгеолтехиздат, 1963. 448 с.

6. Петрографический словарь / Ред. В.П. Петров и др. М. Изд-во: Недра, 1981. 496 с.

7. Фёдоров Е.С. Основания петрографии. С.-Петербург. Изд-во: Типография П.П. Сойкина, 1897. 236 с.

8. Harker A. Petrology for students. Cambridge: University Press, 1908. 336 p.

МЕТОДИКА ОПРЕДЕЛЕНИЯ В КИМБЕРЛИТАХ ПАРАСТЕРЕЗИСОВ ХРОМДИОПСИДОВ С ПИРОПАМИ

Иванов А.С.¹, Стегницкий Ю.Б.¹, Феликс Т.² ¹ НИГП АК «АЛРОСА», IvanovAS@alrosa.ru ² Горнорудное Общество Катока. Республика Ангола

Аннотация. В данной работе исследованы взаимные частоты встречаемости кластерных групп составов пиропов и хромдиопсидов из 36 кимберлитовых трубок из районов и кимберлитовых полей республики Ангола. В ксенолитах часто встречаются два минерала – пироп и хромдиопсид. Прозрачные разновидности хромдиопсидов принято называть ещё сибирскими алмазами из-за их изумруднозелёного яркого свечения. По составам пиропов и хромдиопсидов многими авторами предложены алгоритмы вычисления геотермометров и геобарометров [5]. Но в данной работе за основу взяты вещественные разновидности химических составов кластерных групп пиропов и хромдиопсидов. Изучения вещественного состава пиропов и хромдиопсидов выполнено по паспортизированным минеральным эталонам в аналитической лаборатории АК «АЛРОСА» на микроанализаторах японской фирмы Джеол – JXA-8800R и JXA-8230. В результате статистических пересчётов определены геохимические особенности совместного образования кластерных групп составов пиропов и хромдиопсидов на разных глубинах. За основу взята предложенная академиком Н.В. Соболевым [1] классификации трёх фаций глубинности. В вычислениях используются частоты встречаемости известных кластерных групп пиропов по классификации Dawson J.B. and Stephens W.E. [2] и рассчитанных авторами кластерных групп хромдиопсидов.

Ключевые слова: пироп, хромистый диопсид, кластерные группы, кимберлит.

Summary. In this work mutual frequencies of occurrence of clusters groups of structures pyrops and hromdiopsids from thirty six kimberlites tubes from areas and kimberlites fields of the republic Angola are investigated. In xenoliths two minerals pyrops and hromdiopsied often meet. Hromdiopsids it is accepted to call transparent versions still the Siberian diamonds because of them a green bright luminescence. On structures pyrops and hromdiopsids many authors offered algorithms of calculation of geothermometers and geobarometers [3]. But in this work their material versions of chemical compositions of clusters groups are taken for a basis pyrops and hromdiopsids. Studying of material structure pyrops and hromdiopsids it is executed on the passported mineral standards in analytical laboratory JSC ALROSA on microanalyzers of Japanese firm Jeol-JXA-8800R and JXA-8230. As a result of statistical recalculations geochemical features of joint formation of clusters groups of structures pyrops and hromdiopsides at different depths are defined. For a basis it is taken [1] classification of three fatsias of a deps offered by academician N.V. Sobolevym. In calculations frequencies of occurrence of known clusters groups pyrops on Dawson J.B classification are used. and Stephens W.E. [2] and the clusters groups calculated by authors hromdiopsides.

Keywords: pirop, chromic diopside, clusters groups, kimberlite.

Хромистые моноклинные пироксены-хромдиопсиды, с повышенным содержанием натрия, как обычно, встречаются в эклогитовых алмазоносных ксенолитах (глиноземистых-В, магнезиально-железистых-С, и железисто-

магнезиальных-А). Составы пиропов алмазоносных эклогитовых парагенезисов характеризуются повышенным содержанием окиси натрия более 0.07 % весовых значений [2]. Повышенный процент таких составов в пробах указывает на принадлежность их кимберлитовых источников к алмазоносным месторождениям. К подобным составам хромдиопсидов принадлежит кластерная группа (КГ) S15. Более чем 20 % таких зёрен хромдиопсидов в кимберлитах тр. АС006 и АС060 богаты и на зёрна пиропов алмазоносных эклогитовых парагенезисов (рис. 1, 2).

На диаграмме (рис. 1) отмечены кластерные области повышенного процентного содержания КГ хромдиопсидов, которые и являются характеристическими показателями для ряда близких по набору групп хромдиопсидов кимберлитовых трубок. Статистический анализ выполнен по опубликованной методике [3].

Для алмазоносных кимберлитов (рис. 2) отмечены повышенные содержания КГ хромистых диопсидов алмазоносных ультраосновных парагенезисов, которые окрашены в зелёные и красные оттенки. Алмазоносные эклогитовые их парагенезисы показаны на диаграмме синими, голубыми и оранжевыми тонами. Частоты встречаемости КГ хромдиопсидов, которые характеризуют слабо алмазоносные кимберлиты окрашены в серые, тёмные и лиловые тона.

Ниже приведена бинарная диаграмма всех изученных зёрен хромдиопсидов и большими крестиками показаны области средних кластерных значений для их 15 КГ (рис. 3).

Изученные составы хромдиопсидов по частотам встречаемости КГ из 36-и кимберлитовых тел разделяются на несколько однородных групп. На гистограммах показано, что кимберлитовые трубки AC060 и AC006 содержат больше зёрен низкохромистых высоконатриевых пироксенов.

Частоты встречаемости зёрен КГ хромдиопсидов неалмазоносных парагенезисов окрашены тёмно-чёрным цветом на гистограммах (рис. 2). Такие КГ хромдиопсидов преобладают в убого алмазоносных кимберлитах типа тр. Tchandongo и тр. AC023.

По групповому кластерному анализу частот встречаемости КГ хромдиопсидов кимберлитовые тела тр. Луэле и тр. Катока и тр. Камачия довольно хорошо различимы. Куст кимберлитовых тел Альто-Куило содержит в кимберлитовых телах больше зёрен КГ хромдиопсидов с меньшими содержаниями хрома, чем кимберлиты поля Катока. В тр. Камачия очень большой процент зёрен КГ G1 и G2.

Ниже приведены результаты совместного статистического анализ (группового кластерного и факторного) КГ составов пироксенов и пиропов из 36-и проб кимберлитов республики Ангола (рис. 4, 5).

КГ пиропов и КГ пироксенов по их частотам встречаемости спроектированы на оси главных разделяющих факторов для 36-и кимберлитовых тел Анголы (рис. 5)

		Г	4			-	4	_	L,		Г	4	F		-			
	ПИР	0,5	0,4	-0,1	0,3	0,4	-0,1	0,7	-0,1	0,1	0,5	0,1	0,3	0,3	0,2			
ПРОБА	ПИР	S12	S10	S 9	S5	S4	S2	S14	S 8	S15	S13	S3	S11	S6	S 7	S1	3EPEH	
CatE22	0,5	19	2	12	4	1	0	4	6	0	19	6	1	0	21	4	99	
Luaxe 087	0,9	2	6	0	0	0	2	2	2	0	14	14	14	8	29	8	51	h
Luaxe 146	1,0	0	0	0	0	0	0	0	8	0	23	16	6	8	26	13	62	
Luaxe 148	0,9	2	0	0	0	0	0	0	4	0	21	18	11	9	27	9	56	h N
Luaxe 123	0,7	10	0	2	2	0	0	2	6	0	12	10	14	10	22	12	51	Phil
AC045	0,5	1	0	0	0	2	0	4	20	0	9	15	7	2	25	16	102	
Luaxe 143	0,9	20	4	0	0	0	0	2	2	0	4	15	11	11	22	11	55	
Luaxe 150	0,3	24	2	0	0	0	0	0	9	0	9	14	9	7	22	5	58	
p. Loreley	0,1	3	0	0	3	0	0	0	10	0	3	5	3	2	26	45	62	
AC016	0,8	0	13	3	7	7	3	0	30	0	0	10	0	10	17	0	30	
AC197	0,8	5	2	0	2	0	5	12	49	0	5	0	0	5	15	0	41	h h
AC254	0,8	1	0	0	0	0	2	15	32	1	25	6	0	2	15	2	103	
AC063	0,9	0	0	0	0	0	1	11	22	0	25	21	3	1	8	8	76	
Камачия	0,7	2	0	1	1	1	0	0	21	0	19	29	8	1	6	11	145	
AC098	0,1	14	8	6	0	2	0	4	22	0	14	18	0	2	8	0	49	
Furo-37, 66	0,8	0	0	0	0	0	0	2	13	0	4	15	31	0	22	13	54	
Luaxe 025	0,9	0	0	0	0	0	0	6	6	0	8	9	45	9	13	4	53	
Luaxe 058	0,9	4	2	0	0	0	0	0	2	0	12	4	41	22	14	0	51	J
Luaxe 122	0,6	9	0	0	3	0	0	0	3	0	16	9	31	9	9	9	32	
Luaxe 003	0,9	5	3	8	0	0	0	0	0	0	5	8	19	30	19	3	37	
Luaxe 124	0.7	9	2	0	0	2	0	0	4	0	7	7	20	29	11	9	55	Ь
Луите	0.7	0	0	0	0	0	10	3	8	0	3	5	0	43	18	13	40	
Luaxe 071	0.9	4	0	0	9	0	0	0	4	0	0	12	8	23	33	8	93	L h
vane (Luaxe 072)	0.6	4	0	0	4	0	0	0	9	0	0	6	13	32	26	6	53	
Luave 061	0.9	0	0	0	0	0	6	1	24	0	13	10	8	16	16	6	208	
Luave 092	0.7	n n	2	0	0	0	0	2	18	ő	18	11	å	27	11	2	55	Lh I
Катока	0.0	3	4	5	1	1	7	1	12	5	5	10	13	15	13	5	358	
CatE/2	0.6	22	8	22	0	2	0	0	6	0	8	18	0	8	0	4	40	
Luave 004	0.5	10	6	16	0	3	0	0	3	0	3	16	16	16	6	3	31	
Euro 25 28	0.0		15	20	0	0	0	2	2	0	2	10	6	4	12	12	52	
AC243	0.1		16	20	4	12	1	4	2	0	2	1	2	4	0	14	07	
A0240	0.7	1	20	0	-	0	0		0	0	4	2	2	0	2	0	54	
Luaxe 004	0,1	1	39	2	2	0	0	0	3	0	4	2	0	0	2	0	24	
nawyko-namasaMo	-0,1	44	0	0	5	0	10	0	3	0	0	9	0	0	3	3	34	
p. renandongo	0,9	2	2	0	90	4	0	0	4	0	0	0	0	4	2	19	20	
AC023	0,0	3	3	0	00	0	0		0	0	0	0	0	0	3	0	30	
ACOUS	0,8	13	4	0	6	3	4	0	5	24	8	11	0	4	0	10	9/	
AC060	0,0	1	1	1	4	2	0	1	1	21	14	15	0	1	2	22	98	
AC012	0,8	0	0	5	0	11	35	0	8	0	1	12	0	13	9	8	103	
чиузу	0.5	12	3	0	1	6	67	0	0	0	0	1	0	3	0	1	69	
	ЭЛ-ы	S12	S10	S9	85	S4	S2	S14	S8	\$15	\$13	\$3	511	S6	\$7	\$1	2875	
	Na2O	2,1	2,7	3,2	0,9	2,6	2,2	5,1	3,6	7,1	4,1	3,0	3,2	2,0	2,7	2,2		
	MgO	18,1	18,5	15,2	16,6	14,5	14,8	13,3	14,6	9,6	14,1	15,4	14,4	15,5	15,2	16,1		
	AI203	2,2	3,1	3,1	1,4	5,2	1,9	3,9	2,6	9,7	3,4	2,8	2,8	0,9	2,0	2,1		
	SiO2	54,8	54,7	54,7	53,7	53,0	53,4	54,6	54,1	55,0	54,6	54,7	55,2	54,7	54,6	54,5		
	CaO	17,1	14,2	17,6	23,0	20,7	20,2	15,5	18,2	13,2	17,0	18,5	18,3	21,4	19,6	20,3		
	TiO2	0,3	0,3	0,3	0,1	0,5	0,1	0,3	0,2	0,5	0,2	0,2	0,2	0,1	0,2	0,1		
	Cr203	1,3	1,0	0,5	0,8	1,1	0,7	4,1	2,9	0,1	3,2	1,8	2,8	2,0	2,5	1,6		
	MnO	0,1	0,1	0,1	0,1	0,1	0,1	0,1	0,1	0,0	0,1	0,1	0,1	0,1	0,1	0,1		
	FeO	3,5	4,5	5,4	2,7	1,8	5,7	2,8	2,8	4,6	2,8	3,0	2,4	2,9	2,4	2,5		
	NiO	0,07	0,07	0,02	0,03	0,03	0,04	0,03	0,04	0,01	0,04	0,04	0,05	0,03	0,04	0,04		
	Сумма	99	99	100	99	100	99	100	99	100	100	100	99	100	99	99		

Рис. 1. Групповой и матричный кластерный анализ частот встречаемости КГ составов хромдиопсидов.

Кластерные группы составов пиропов вычислены для 12250 составов зёрен пиропов из известных кимберлитовых трубок Анголы по методике, предложенной в работе Dawson J.B. and Stephens W.E. [2]. Ниже перечислены основные химические характеристики составов этих основных кластерных групп с указанием процента встречаемости с составами этих групп кристаллов алмазов.



Рис. 2. Гистограммы частот встречаемости КГ хромистых диопсидов из кимберлитов Анголы.

Группа G1. 3.33 % зёрен были с алмазами. MgO (20 %); средние содержания TiO₂ (0.58 %) и низкими содержаниями Cr_2O_3 (1.34 %). Группа G2. в 2009 году были обнаружены включения таких составов в крупных алмазах слабо алмазоносного кимберлита тр. Корове. Ботсвана [4], Группа G3. были с алмазами 46.15 % зёрен. В сравнении с группами G1 и G2 к данной группе можно отнести зёрна с наиболее высокими содержаниями FeO и CaO (16.49 % и 6.5 % соответственно), наряду с этим MgO имеет пониженные содержания (13.35 %), а также понижены содержания TiO₂ и Cr_2O_3 . Группа G4. Были с алмазами 77.78 % зёрен. Данная группа характеризуется повышенными содержаниями FeO (17.9 %) и TiO₂ (0.90 %). Группа G5. Были с алмазами 6,25% таких зёрен. К данной группе относятся гранаты с высоким содержанием FeO (в среднем 28.3 %) – высокожелезистые гранаты.

Группа G6. Были с алмазами 44.0 %. Средние содержания СаО составляют (14.87 %), a FeO (10.77 %), MgO (10.38 %). Группа G7. Зёрна характеризуются высокой гроссуляровой составляющей. Группа G8. Характерно высокое содержание CaO (24.8 %), но в отличие от 7 группы наблюдается пониженное содержание Cr₂O₂. Группа G9. 5.17 % были с алмазами. Гранаты данной группы обеднены по содержанию титана, а также характеризуются пониженными содержаниями CaO (5.17 %), средние содержания Cr₂O₃ достигают 3.5 %. Группа G10. 41.56 % – с алмазами. Гранаты данной группы характеризуются пурпурным или пурпурно-красным цветом с высокими содержаниями MgO (23.2 %), повышенными содержаниями Cr₂O₃ (7.7 %) и исключительно низкими содержаниями CaO (2.13 %). Группа G11. 6.67 % - с алмазами. Средние содержания MgO (15.6 %), наряду с высокими содержаниями CaO (10.3 %); Cr₂O₃ (9.5 %) и TiO₂ (0.51 %). Группа G12. 3.85 % – с алмазами. FeO, MgO и CaO характеристики данной группы схожи с группой 11, наряду с этим данная группа характеризуется пониженными содержаниями TiO₂ (0.18 %), а Cr₂O₃ очень высокими (15.9 %) [2].

В алмазоносном кимберлите тр. Катока (рис. 6) встречаются разнообразные составы пиропов из кластерных групп Dawson J.B. and Stephens W.E. По частотам встречаемости с ними прямо взаимосвязаны частоты кластерных групп и хромдиопсидов.





99



n

\$ ก

STUD URXe

Lunxe 025 unce 000

ø

Furo-15, uro.37.

Navi-Navin

ichel.

unxe (184

0,5

SII

0,2

0,5

INPCOH

TH AN

ð

-

Cafe 22

Celif 4 AC098

ŝ

Рис. 4. Совместный групповой и матричный кластерный анализ частот встречаемости КГ составов хромдиопсидов и пиропов.

=

-

3 2

ន P

unxe 123

Karrosa

unce 148

unxe 146 unce 150

unce 071

unxe 092

8 3

g

and a

Ħ -

c

a

-

AC016 **A045**



Рис. 5. Факторный анализ частот встречаемости КГ составов пиропов и моноклинных пироксенов.

Составы алмазоносных высоко кальциевых эклогитовых парагенезисов зёрен пиропов КГ G6 характерны для кимберлитов тр. Катока, также как и составы хромдиопсидов КГ S4 (рис. 7). Необходимо отметить, что зёрна пиропов и пироксенов этих КГ по прямой корреляции их частот встречаемости часто встречаемы в алмазоносных кимберлитах и определены в шпинель пироксеновую (7-11 кбар) и шпинель пироповою фацию глубинности (17-21 кбар). Данная обстановка для КГ пиропов и пироксенов показана на диаграмме главных факторов внизу графика (рис. 5) и характерна для таких



Рис. 6. Комплекс диаграмм составов пиропов тр. Катока с характерным набором групп составов по классификации Доусона.



Рис. 7. Комплекс диаграмм для составов кластерной группы моноклинных пироксенов, которые чаще встречаются в пробах с пиропами алмазоносных эклогитовых парагенезисов, что показывает и факторный анализ.



Рис. 8. Составы хромдиопсидов из алмазоносных эклогитовых парагенезисов.



Рис. 9. Комплекс диаграмм для составов кластерной группы моноклинных пироксенов S12, которые чаще встречаются в пробах с пиропами повышенного содержания титана КГ G1, G2, G11.

высоко алмазоносных кимберлитов как тр. Луэле. В данном статистическом авторами предложено КГ Dawson J.B. and Stephens W.E. разделить дополнительно на подгруппы с индексом «а», такие составы характеризуют пиропы с повышенными содержаниями окиси натрия более 0.07 %, что характерно для низко хромистых пиропов встречаемых часто в сростках с алмазами.

На представленных (рис. 7) двух крайних диаграммах выделенные лучами области соответствуют фациям глубинности по классификации Н.В. Соболева:

- 1. шпинель пироксеновая (7-11 кбар) и шпинель пироповая фация глубинности (17-21 кбар);
- 2. гроспидитовая фация глубинности (21-34 кбар);
- 3. коэситовая фация глубинности (34-40 кбар).

Составы пиропов КГ G3a очень характерны для кимберлитов тр. Катока, также как и составы пироксенов КГ S15 (рис. 8). Необходимо отметить, что зёрна пиропов и пироксенов этих КГ взаимно встречаемы в алмазоносных кимберлитах и характерны для образования в шпинель пироксеновой (7-11 кбар) и шпинель пироповой фации глубинности (17-21 кбар). Данная обстановка для КГ пиропов и пироксенов показана на диаграмме главных факторов внизу графика (рис. 5) и также характерна для алмазоносных кимберлитов Анголы и Якутии.

На гистограммах частот встречаемости хромдиопсидов КГ S15 (из кимберлитовых трубок Анголы) это ярко голубой цвет (рис. 2).

Составы моноклинных пироксенов КГ S12 чаще встречаются в пробах кимберлитов Анголы с составами КГ титанистых пиропами КГ G1, G2, G11 (рис. 9), которые с небольшой долей также присутствуют в пробах пиропов из тр. Катока. Для упомянутых составов КГ S12 хромдиопсидов характерно и повышенное содержание до 0.1 % никеля. Этот факт является их геохимической особенностью, и более высокой гроспидитовой фацией глубинности (21-34 кбар) их образования. С такими моноклинными пироксенами сосуществовали и оливины в слабо алмазоносных парагенезисах. Данная обстановка для КГ пиропов и пироксенов показана на диаграмме главных факторов справа (рис. 6) и характерна для кимберлитов убогой степени алмазоносности.

Составы моноклинных пироксенов КГ S3 чаще встречаются в пробах кимберлитов Анголы с составами КГ низко титанистых и высоко натриевых



Рис. 10. Комплекс диаграмм для составов кластерной группы моноклинных пироксенов S3, которые чаще встречаются в пробах с низко титанистыми и высоко натриевыми пиропами КГ G9a эклогитовых парагенезисов.



Рис. 11. Комплекс диаграмм составов пиропов тр. Камачия с характерным набором групп составов по классификации Доусона.



Рис. 12. Комплекс диаграмм для составов кластерной группы моноклинных пироксенов S7, которые чаще встречаются в пробах с пиропами КГ G10 пиропами алмазоносных ультраосновных парагенезисов.



Рис. 13. Комплекс диаграмм составов пиропов для тр. Луэле с ураганной алмазоносностью.

пиропов КГ G9a (рис. 10), которые с небольшой долей также присутствуют в пробах пиропов из тр. Камачия и являются для кимберлитовых трубок этого района характеристическими. Для составов хромдиопсидов этих КГ характерно более высокое содержание хрома и натрия, чем для КГ S12, но их особенностью, также является гроспидитовая фацией глубинности (21-34 кбар). Данная обстановка для КГ пиропов и пироксенов показана на диа-



Рис. 14. Комплекс диаграмм составов пиропов тр. АС060 и с характерным набором групп составов по классификации Доусона и повышенным содержанием КГ G3a.



Рис. 15. Комплекс диаграмм составов пиропов тр. CatE22 и с характерным набором групп составов по классификации Доусона и повышенным содержанием КГ G1a + G2a.

грамме главных факторов слева (рис. 5) и характерна для кимберлитов низкой степени алмазоносности.

Для составов пиропов тр. Камачия также характерно высокое присутствие в пробах КГ пиропов с повышенным титаном, что сильно сказывается на растворении алмазов при метасоматозе и понижении их качества. Данная трубка не является промышленным месторождением. Стоимость кристаллов алмазов низкая. Хотя в результате доразведки рудника Камачия было выделено два рудных ствола с разными по качеству алмазосодержащими породами. Западный ствол состоит из порфирового кимберлита с низким содержанием алмазов, а восточный сложен в основном кимберлитовыми туфами, где содержание алмазов несколько выше. Рудник не рентабельный.

Составы моноклинных пироксенов КГ S7 чаще встречаются в пробах кимберлитов Анголы с составами КГ высокохромистых низко титанистых пиропов КГ G10 (рис. 12), которые с повышенной долей присутствуют в пробах высоко алмазоносного кимберлита тр. Луэле, особенно в блоке с ураганным содержанием алмазов [4]. Для этих составов КГ хромдиопсидов характерно высокое содержания хрома и натрия и низкие содержания глино-

зёма. Особенностью, для таких составов является и самая глубинная коэситовая фация глубинности (34-40 кбар). Данная обстановка для КГ пиропов и пироксенов показана на диаграмме главных факторов в центре диаграммы (рис. 5), что очень характерно для кимберлитов высокой степени алмазоносности (рис. 12-13).

Выводы

В алмазоносных кимберлитовых трубках из разных кимберлитовых полей присутствуют пиропы и пироксены разных составов. Для изученных составов пиропов и моноклинных пироксенов из алмазоносных трубок разных полей явно выражены определённые и частоты встречаемости КГ составов. Для более северо-восточной части кимберлитов, где изучены составы индикаторных минералов кимберлитов, примером служит не промышленное кимберлитовое тело тр. Камачия, где характерной является КГ пиропов G9а. КГ группа такого состава пиропов G9a характерна и для алмазоносных кимберлитовых тел Мирнинского поля, где почти все кимберлитовые тела содержат алмазы, похожим примером могут быть тр. Таёжная.

Для кимберлитового поля Альто-Куило (тр. AC060), как и для кимберлитового Накынского поля Якутии характерны повышенные содержания эклогитовых алмазоносных парагенезисов (рис. 14).

Наличие в пробах из кимберлитов более трети зёрен хромистых пиропов с повышенным титаном не благоприятно для высокого содержания алмазов. К убого алмазоносным телам относятся пробы пиропов из тр. CatE22, которые содержат в пробах зёрна КГ пиропов с высокими значениями окиси титана G1 и G2, их более 30 %. Не важно, что в этом кимберлите присутствую зёрна пиропов алмазоносных парагенезисов по классификации H.B. Соболева (рис. 15) – кимберлит убого алмазоносный.

Исключением из правил является кимберлит тр. Коровэ (Ботсвана) с низкой алмазоносностью менее 30 карат на тонну кимберлита, в котором кроме 20 % пиропов КГ G10, присутствуют и 17 % зёрен КГ пиропов G2a. Стоит обратить внимание, что составы пиропов группы G2a были обнаружены во включениях гигантских алмазов весом более 1000 карат [7].

Список литературы

4. Соболев Н.В. О минералогических критериях алмазоносности кимберлитов // Геология и геофизика. 1971. № 3. С. 70-80.

5. Dawson J.B. and Stephens W.E. Statistical classification of garnets from kimberlite and associated xenoliths // J. Geol. 1975. V. 83. P. 589-607.

6. Иванов А.С. Статистический анализ индикаторных минералов кимберлитов. Труды XIII Всероссийской (с международным участием) Ферсмановской сессии. КНЦ РАН г. Апатиты, 2017. С. 172-181.

7. Иванов А.С., Помазанский Б.В. Взаимозависимость типоморфных особенностей алмазов с определёнными составами минералов из кимберлитов. Вестник ВГУ. 2018. № 4. С. 20-27. 8. Иванов А.С., Специус З.В. Особенности составов пиропов с высокими значениями уваровитового минала. Материалы 2-й научно-практической конференции. Геология и геофизика и минеральное сырьё Сибири. Т. 1. 2015. С. 144-145.

9. Иванов А.С., Феликс Ж.Т., Стегницкий Ю Б. Составы пиропов из кимберлитов с разной алмазоносностью трубки Луеле (Ангола). Вестник ВГУ. 2018. № 2. С. 93-97.

10. Moore A.E. Type II diamonds, Flamboyant Megacrysts. 2009 March Geological Society of South Africa.

МЕХАНИЗМ ТЕКТОНИЧЕСКОГО РАССЛОЕНИЯ ЗЕМНОЙ ОБОЛОЧКИ, ЗАКОН ВСЕМИРНОГО ТЯГОТЕНИЯ, ЭФФЕКТ ССВ И ГРАВИТАЦИОННЫЕ ВОЛНЫ

Ильченко В.Л.

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

Аннотация. На основании принципа эквивалентности гравитирующих масс (ЭГМ), по результатам исследования механизма тектонического расслоения земной корово-мантийной оболочки с построением соответственных моделей, а также в ходе проведения анализа закона всемирного тяготения для миров с разными метриками (с разным количеством пространственных измерений), предложен ряд новых гипотез, включая вывод о возможности использования корово-мантийной оболочки Земли в качестве гравитационно-волнового интерферометра.

Summary. Based on the principle of Equivalence of gravitating masses (EGM), based on the results of studying the mechanism of tectonic stratification of the earth's crust-mantle shell with the construction of corresponding models, as well as during the analysis of the law of gravity for worlds with different metrics (with different numbers of spatial measurements), a number of new hypotheses, including the conclusion about the possibility of using the crust-mantle shell of the Earth as a gravitational-wave interferometer.

Механизм тектонического расслоения земной оболочки в режиме затухающей колебательной системы установлен в ходе изучения упругих свойств керна Кольской сверхглубокой скважины (СГ-3) и создания модели геолого-геофизического строения земной коры Печенгского блока (Балтийский щит) [6]. Он основан на идее, что масса Луны (M_л), в итоге обмена с Землёй гравитонами [8], в эквивалентном M_л количестве, превращает корово-мантийную оболочку Земли (КМОЗ) в колебательную систему, затухающую в динамическом режиме стоячей волны, что напоминает затухание звуковой (стоячей) волны в натянутой струне.

Затухание это протекает в шаговом ритме с развитием системы неподвижных узловых точек: первый узел (исключая 2 узла в точках «крепления» струны) появляется в середине струны (длина струны L= λ – длине стоячей волны), разделяя струну пополам, а волну – на две полуволны (λ /2); затем в середине каждой из этих полуволн возникают ещё узлы и т.д.; процесс затухания протекает по закону: $\lambda_n = \lambda_0/2^n$ (n – номер моды: 0, 1, 2,... все целые числа, λ_n – длина n-й моды – расстояние между соседними узлами, λ_0 – длина волны). Затухание звука в натянутой струне мало отличается от затухания стоячей волны в породах земной коры; оно приводит к развитию системы неподвижных узловых точек, куда и «отжимается» часть напряжений из колеблющихся зон пучностей; со временем эти узлы превращаются в концентраторы избыточно высоких напряжений, что подтверждено эксперимента-
ми [5]. В районе узлов наблюдается увеличение диаметра скважины – следствие вывала горных пород. Система узловых точек создаёт предпосылки для развития в породах КМОЗ протяжённых субгоризонтальных зон с избыточно высоким напряжённым состоянием, обусловливающим положение тектонических границ и ритмично-фрактальный характер расслоения.

Глубину проникновения (влияния) лунной гравитации в недра Земли определяет принцип эквивалентности гравитирующих масс (ЭГМ) – не путать с эквивалентностью в ОТО А. Эйнштейна (!), т.к. эквивалентности между инерцией и гравитацией не существует [7]. Наш принцип ЭГМ означает, что масса вещества в области лунного приливного возмущения в оболочке Земли равна массе источника возмущения, т.е. Луны (количество возмущающих гравитонов эквивалентно массе их источника), а радиус волны лунного прилива R_{ппв} в оболочке Земли определяют по формуле: $R_{J\Pi B} = \sqrt[3]{3M_{JI}/4\pi\rho_{KMO3}}$, где $M_{JI} = 7,3477 \times 10^{22}$ кг – масса Луны, $\pi \approx 3.14$, $\rho_{KMO3} = 4500$ кг/м³ – средняя плотность КМОЗ. Подставим все эти значения в формулу и посчитаем: $R_{\pi \eta R} = \sqrt[3]{3 \cdot 7,3477 \times 10^{22} / 4 \cdot 3,14 \cdot 4500} \approx 1600$ км. «Вечное» влияние приливов обособило во внешней земной оболочке главную колебательную систему (ГКС) со средней мощностью М₀ ≈ 1600 км с тектоническим расслоением, переменной мощностью по латерали (из-за пространственных вариаций плотности пород) и ритмично-фрактальным строением. В соответствии с механизмом тектонического расслоения, который (подобно затуханию колебания – стоячей волны – в натянутой струне: $\lambda_n = \lambda_0/2^n$, действует по правилу: $M_n = M_0/2^n$ (n – номер моды расслоения: 0, 1, 2,... все целые числа, M_n – мощность n-го элемента расслоения, M₀ – мощность ГКС). Глубине залегания границы Мохо для слоя ГКС, отвечает 1-я сверху граница M₅ (M₅=1600/2⁵=50км). Для модельных построений в пределах земной коры за моду Мо удобней принимать глубину залегания границы Мохо [6]. По мощности ГКС можно легко найти среднюю плотность породного вещества ρ_{KMO3} в составе радиуса R_{IIIIB} по формуле: $\rho_{KMO3} = 3M_{II}/4\pi R_{IIIIB}^{3}$.

Справочные данные об известных физических взаимодействиях [11] свидетельствуют, что гравитационное взаимодействие (также как и электромагнитное) возможно на любом расстоянии, вплоть до бесконечности. Сейчас нам предоставляется возможность этот момент немного прояснить.

Считается, что «пространство-время» имеет «плоскую» форму [8]. Плоскими, по крайней мере, выглядит эклиптика Солнечной системы, в которой расположены орбиты почти всех планет (кроме Плутона), а также к условно «плоским» можно отнести галактику Млечный путь (радиус её спирального «диска» в 20 раз превышает «высоту»). При этом существует теоретическая интерпретация квантовой физики, описывающей сосуществование множества различных миров [8]. Науки о Земле пока не научились использовать квантовую теорию гравитации и геологам ближе законы Ньютона, в частности, закон всемирного тяготения. Закон всемирного тяготения $F = \gamma \frac{m_1 m_2}{R^2}$ действует в нашем 3-мерном мире (\mathbb{N}_2 3), который измеряется в кубометрах (\mathbb{M}^3), а сила взаимодействия масс зависит лишь от квадрата расстояния между ними: $F_3 = \gamma \frac{m_1 m_2}{R^{3-1}}$; это повод для рассуждений. По аналогии, в мире \mathbb{N}_2 4 эта зависимость уже куби-

ческая: $F_4 = \gamma \frac{m_1 m_2}{R^3}$, в мире №5 — биквадратная и т.д. Вывод: положительный рост номера ослабляет силу F и все прочие связи и, значит, ведёт к снижению стабильности таких систем.

Если пойдём в обратную сторону (с сокращением количества измерений ~ «свёртка пространства»): ...2, 1, 0, -1... (все целые числа), по мере уменьшения номера сила тяготения будет расти. Так, при №2 (плоскость): $F_2 = \gamma \frac{m_1 m_2}{R^1}$ – зависимость от R будет обратная; при №1 (прямая = «струна»):

 $F_1 = \gamma \frac{m_1 m_2}{R^0}$. Так как R⁰≡1, любое значение R не влияет на F. Если всё верно, динамические параметры – скорость V и время T в мире №1 тоже (как буд-то) теряют смысл.

Последняя ситуация №1 имеет отношение к гравитационному взаимодействию масс, расположенных на одной силовой линии (струне), связующей центры масс, например система Земля-Луна, в соответствии с принципом ЭГМ – с возмущением волны твёрдого прилива, чей радиус составляет часть этой самой силовой линии. В случае №1, по-видимому, эта «единичная» длина силовой линии г=1=const, имеет важно натурфилософское значение: любая дистанция между двумя массивными объектами – это струна и, в то же время, стоячая волна = Мода M_0 на струне между этими объектами. Если «струнная» связь действительно существует и объединяет все массивные объекты в космосе, на основании этой гипотезы можно проводить различные теоретические исследования, которые могут привести к самым неожиданным открытиям неизвестных пока природных свойств гравитации.

Каждая планета (или массивный космический объект) имеет свой постоянный момент количества движения: M=mvr=const (m – масса планеты, v – скорость, r – радиус орбиты). Постоянство, к примеру, для Луны, вызвано её движением со знакопеременным ускорением: при удалении от Земли радиус орбиты растёт, а скорость убывает, при сближении радиус сокращается, а скорость возрастает.

Эффект ССВ – сжимание стоячей волны – обусловлен обычным положительным ускорением среды (ветер), в которой наблюдается эта самая стоячая волна [4].

Луна на околоземной лунной орбите пребывает в непрестанном ускорении (±) – под влиянием массы Солнца, вызывающей вариации длины радиуса (Δr) и эллиптичность формы лунной орбиты.

Приняв лунный радиус за струну, в которой возбуждается колебание – стоячая волна, равная радиусу по длине – можно, по аналогии с эффектом ССВ, попытаться прояснить смысл равенства г⁰≡1: лунный радиус – как «струна» – имеет свою определённую длину, но эта «струна» испытывает вариации (±) в её натяжении из-за вариаций скорости (в принципе, тот же самый эффект ССВ).

По современным понятиям, космический вакуум, заполняющий всё межзвёздное (и межпланетное) пространство, обладает своей, вполне определённой, энергией и плотностью энергии [2], что, теоретически, служит заменой ветру, создающему эффект ССВ в «Ритмодинамике» [4].

Мир № 0 (R=0) означает внедрение двух точечных масс в одну точку. Если там есть место лишь для одной точечной массы, такой опыт приведёт к резкому росту давления (или плотности) в точке до критической массы и может вызвать взрыв этой точки.

По правилам «свёртки пространства», за № 0 следует №–1, где: $F_{-1} = \gamma \frac{m_1 m_2}{R^{-2}} = \gamma m_1 m_2 R^2$; сила F будет теперь квадратично прирастать пропорционально расстояниюмежду массами (как при растяжении пружины и т.п.). Вывод: в мирах с отрицательными номерами удаление номера по числовой прямой влево от 0 означает добавочное уплотнение и упрочнение связей в системе. Всё это напоминает описание тяготения в гипотетическом объекте «чёрной дыре» [8]. Закон всемирного тяготения $F_n = \gamma \frac{m_1 m_2}{R^{n-1}}$ для некоторых измерений (вправо и влево от 0) показан в таблице.

N⁰	Формула F*	Место в иерархии взаимодействий
4	$F_4 = \gamma \frac{m_1 m_2}{R^3}$	Вероятно, связи молекул (CH ₄), ионов (NH ₄ ⁺ , SO ₄ ²⁺) и т.п.
3	$F_3 = \gamma \frac{m_1 m_2}{R^2}$	Внутри- и межпланетные силы
2	$F_2 = \gamma \frac{m_1 m_2}{R^1}$	Взаимодействие в плоскости эклиптики планетных и звёздных систем (галактик)
1	$F_1 = \gamma \frac{m_1 m_2}{R^0}$	Взаимодействие вдоль силовых линий между центрами масс: Земля-Луна и др.
0	$F_0 = \gamma m_1 m_2 R^1$	Создание «критических масс»
-1	$F_{-1} = \gamma m_1 m_2 R^2$	Чёрные дыры («антимиры»?)

Таблица. Вариации силы тяготения F миров с метриками от 4 до -1.

*Индекс F – номер измерения.

Ильченко В.Л.

Одна из Нобелевских премий 2017 г. присуждена за создание интерферометра Advanced LIGO и обнаружение, с его помощью, гравитационной волны амплитудой $A=10^{-18}$ м. Эта волна была, якобы, вызвана «слиянием» двух чёрных дыр, которое случилось ≈ 1.3 млрд. лет назад [9] (в Релятивистской теории гравитации А.А. Логунова [7] существование черных дыр представляется невозможным). Полагая скорость распространения гравитационных волн равной скорости света, это событие должно было бы произойти на расстоянии L ≈ 1.3 млрд. св. лет от Земли (т.е. очень далеко за пределами нашей галактики Млечный путь, чей диаметр диска оценивается как D ≈ 100 тыс. св. лет [10].

Теперь рассмотрим условия, возникающие при возмущении вещества в составе радиуса лунной приливной волны (в слое ГКС). Средняя мощность этого слоя ГКС=М_{ГКС} ≈1600 км; превышение земной поверхности в «вершине» волны твёрдого прилива: h≈0.5 м [1]. Это превышение можно представить как «упругое растяжение» радиуса приливной волны или «струны» - в итоге гравитационного возмущения (средний радиус приливной области H=M_{ГКС}). Тогда деформация растяжения этой «струны»: $\Delta h = h/H = 0.5 \text{ м}/1600000 \text{ м} = 3.125 \times 10^{-7}$ и это для каждого метра в «струне». Если «средний» радиус атома ≈ 1 Å, 1 м = 10^{10} Å или цепочка из 10^{10} атомов. Отношение удлинения радиуса к числу атомов в этой их цепочке позволяет вычислить «деформацию растяжения» (м.б. электронных оболочек) одного атома: $\Delta h_{2}=3.125\times10^{-7}/10^{10}=3.125\times10^{-17}$ м; что отличается от амплитуды нобелевской волны А=10⁻¹⁸ м всего на один порядок. Ионные радиусы химических элементов, как правило, меньше атомных, причём – часто – в разы [3], и значит, этим различием можно пренебречь. Если взаимодействие в системе Земля-Луна происходит именно так, как в мире №1, то сразу возникают вопросы к LIGO-нобелевским лауреатам: 1) почему столкнулись именно «чёрные дыры», а не что-то ещё и 2) откуда взялась эта их дата столкновения: Т≈1.3 млрд. лет назад.

Выводы

1. Земную оболочку можно использовать как гигантский (по сравнению с Advanced LIGO) и совершенно «бесплатный» интерферометр для наблюдения гравитационных волн (лунные приливы и т.п.).

2. Обнаружение эффекта ССВ на «струне» радиуса лунной околоземной орбиты относит его к разряду гравитационных и может служить серьёзным аргументом в пользу доказательства «струнной» природы гравитационного силового взаимодействия (поля).

Работа выполнена в соответствие с Госзаданием ГИ КНЦ РАН по теме НИР № 0226-2019-0052.

Список литературы

1. Авсюк Ю. Н. Приливные силы и природные процессы. М.: ОИФЗ РАН, 1996. 188 с.

2. Глинер Э.Б. Раздувающаяся вселенная и вакуумоподобное состояние физической среды // УФН. 2002. Т. 172. № 2. С. 221-228.

3. Зуев В.В. Конституция, свойства минералов и строение Земли (энергетические аспекты). СПб. Изд-во: Наука, 2005. 402 с.

4. Иванов Ю.Н. Ритмодинамика. М. Изд-во: ИАЦ Энергия, 2007. 215 с.

5. Ильченко В.Л. Физическое моделирование напряженного состояния и деформаций в нагружаемой твердой среде, находящейся под воздействием ультразвуковых стоячих волн// Тр. Всероссийского совещания «Напряженнодеформированное состояние и сейсмичность литосферы». Новосибирск. Изд-во: СО РАН, Филиал «Гео», 2003. С. 49-53.

6. Ильченко В.Л. Тектоностратиграфическая модель блока земной коры как колебательной системы (на примере Печенгского блока, Кольский полуостров) // Вестник КНЦ РАН. 2012. № 1. С. 173-178.

7. Логунов А.А. Релятивистская теория гравитации: новые результаты // Природа. 2014. № 4. С. 6-11.

8. Окунь Л.Б. Азы физики. Очень краткий путеводитель. ИТЭФ. М.: 29.08.2012. 138 с. URL: https://nashol.com/2015040883954/azi-fiziki-ochen-kratkii-putevoditel-okun-l-b-2012.html (pdf-формат).

9. Понятов А. Открытие, которого ждали сто лет // «Наука и жизнь». 2017. № 11. С. 8-12.

10. Ранцини Ж. Космос. Сверхновый атлас Вселенной / Пер. с англ. Г. Семеновой. М. Изд-во: Эксмо, 2004. 216 с.

11. Яворский Б.М., Селезнев Ю.А. Справочное руководство по физике для поступающих в вузы и самообразования. Изд. 3-е, испр. М. Изд-во: Наука, 1984. 384 с.

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ ПОДТВЕРЖДЕНИЕ УСЛОВИЙ ОБРАЗОВАНИЯ АЛМАЗОВ

Каржавин В.К. ГИ КНЦ РАН, Апатиты, karzhavin@geoksc.apatity.ru

> Математика – замечательное орудие исследования. Она даёт возможность до тонкости изучить явление и даже предугадать его. *А.М. Ляпунов*

Аннотация. Результаты исследования поведения компонентов системы С–Fe–O реализовано при различных величинах давления, температуры и переменной концентрации кислорода. Данное исследование было проведено при постоянной, близкой эвтектической концентрации углерода (4 вес. %) и температуре выше и ниже эвтектики данной системы (т.е. в твёрдом и жидком состояниях). Результаты исследования методом физико-химического моделирования позволили установить области существования углерода и цементита при разных величинах Р и Т. Образование алмаза в данной системе зафиксировано в районе температуры эвтектики при давлении 50000 бар и низкой величине парциального давления кислорода.

Ключевые слова: метастабильное состояние, давление, температура, низкая величина парциального давления кислорода, диаграмма, система, эвтектика, вектора, математическое моделирование, расчёт, углерод, карбиды, цементит, алмаз.

Магматическая (высокобарическая) теория создана как результат теоретических расчётов определения полей устойчивости полиморфных модификаций углерода фазового равновесия углерод – алмаз, которые были теоретически исследованы [6]. Этой работой впервые были предсказаны возможные условия промышленного синтеза алмаза из графита.

Эти условия соответствовали: Р = 60000 атм, Т = 2300К.

Впоследствии результаты этих теоретических расчётов нашли широкое практическое применение и явились одним из современных способов технологического синтеза промышленных алмазов из графита. Уже в 1953 году впервые в Швеции (компания ASEA), а впоследствии в США (General Electric) были получены синтетические алмазы. Образованные в специальных установках кристаллы имели размеры менее 1 мм. Их производство осуществлялось в интервалах температур 1200-2400 °С и давлений 55-100 кбар (рис. 1). Эти условия синтеза соответствуют на Земле глубине около 200 км.

Исследование возможности промышленного синтеза алмаза проводилось в присутствии различных катализаторов. Предварительно опробованными в качестве катализаторов исследователи и производственники использовали металлические Ti, Cr, Fe, Co, Ni, Ru, Pt, Pd, In и др., а также различные сплавы. Впоследствии оказалось, что наиболее успешный синтез



Рис. 1. Р – Т диаграмма состояния полиморфных модификации графита.

алмаза протекал при контакте железа с графитом (а именно железные тиглиампулы) [7].

На рис. 2 представлена диаграмма фазового равновесия графит – алмаз в широком интервале температуры и давления. На рисунке прослеживаются характерные контакты жидкого углерода и полиморфных модификаций графита. Наибольший интерес представляет прямой переход жидкого углерода в алмаз. Для этого необходимы высокие величины температуры и давления.

Железо и графит в железоуглеродной системе – элементы полиморфные. На примере металлических сплавов это бинарная диаграмма железоуглерод в координатах состав (концентрация примеси или примесей) – температура, которая схематически приведена на рисунке (рис. 2). Диаграмма Fe–C создавалась в течение многих лет учеными различных стран. Особенно большой вклад в построение этой диаграммы внес русский металлург Д.К. Чернов, которому принадлежит приоритет открытия превращений в сталях и критических точек [1, 2]. Обычно по горизонтальной оси диаграммы откладывается содержание углерода в сплаве в процентах, по вертикальной оси – температура в °C.

Углерод относительно свободно растворяется в железе в жидком и твердом состояниях в любых пропорциях с образованием однородной жидкой фазы. При этом он может присутствовать в сплавах в виде графита или связан образуя химическое соединение – цементит Fe₃C. Цементит — метаста-



Рис. 2. Диаграмма состояния железо – углерод (цементитная).

бильная фаза, при длительным нагреве самопроизвольно разлагается с выделением графита. Диаграмма (Fe–Fe₃C) называется цементитной (метастабильная, содержание углерода только до 6.67 %), вторая (Fe–C) – графитной (стабильная). Оба варианта диаграммы приводятся вместе в одной системе координат.

Жидкий раствор углерода в железе существует при температурах выше линии ABCD на диаграмме. Химическое соединение Fe₃C (цементит) соответствует правой области диаграммы. Линии на диаграмме отделяют области существования различных жидких и твердых фаз. Шкала концентрации углерода на диаграмме приведена только до 6.67 вес. % С, т.к. в смеси с другими составляющими цементит может существовать на всем поле диаграммы состояния Fe–C. Сплавы, содержащие в своём составе углерода более 6.7 вес. %, после закалки в обычных условиях, содержали только Fe₃C, других карбидов при этом не обнаружено. Однако аналогичная процедура, проведённая в области повышенного давления, позволила установить несколько разных неустойчивых карбидов: Fe₇C₃, Fe₂C, FeC и даже присутствие образованного при этом алмаза [2]. Именно факт образования алмаза в системе жидкий металл – графит явился причиной постановки теоретического физико-химического исследования условий образования алмаза на примере простейшей системы С–Fe–O.

Эвтектика в рассматриваемой системе обладает свойствами нонвариантного равновесия и может быть графически изображена точкой С при 4.25 вес. % углерода на координатной плоскости диаграммы (рис. 2). Эвтектика данной двухкомпонентной системы является точкой равновесия между расплавом и её твёрдыми компонентами (аустенита + цементита) при 1147 °С. А предсказанный переход углерода в алмаз, как было установлено [6], может осуществляться при давлении 60 кбар и температуре 2300К. Отсюда следует, что температура эвтектики значительно ниже и обычно ниже температуры металлического компонента системы. Причём её состав значительно сдвинут в сторону более растворённого компонента. Аналогичные свойства прослеживаются у многих Ме–С систем (табл. 1):

Система	Т пл. металла, °С	Т эвтектики, °С	С вес.%	ΔΤ
Fe–C	1536	1147	4.25	389
Cr–C	1933	1448	3.0	485
Ni–C	1455	1319	2.2	136

Таблица 1. Величины перепада температуры между точкой эвтектики и температурой плавления металлов в системах.

В связи с этим нами предпринята попытка оценить путём физикохимического моделирования поведение компонентов системы С–Fe–O при различных величинах давления, температуры и переменной концентрации кислорода. Данное исследование предполагается проводить при постоянной, близкой эвтектической концентрации углерода (4 вес. %) и температуре выше и ниже 1147°C. В жидком состоянии компоненты системы Fe–O также обладают хорошей взаимной растворимостью.

Представленный графический материал диаграммы Fe-C позволяет предположить, что переход углерода (жидкое состояние) в алмаз может осуществляться при более низких температурах и давлениях. Планируемое теоретическое физико-химическое исследование позволит оценить условия, влияющие на процесс преобразований зависимых (химические соединения), независимых компонентов (элементы) и всё многообразие протекающих преобразований в С-Fe-O системе. Каждая из рассмотренных систем (мультисистем) в данной работе имеет реальные границы термодинамических параметров. Численная реализация мультисистем проводилась при помощи метода минимизации свободной энергии Гиббса (программный комплекс «Селектор») [3, 5]. Данный программный комплекс был использован нами ранее и является действительным универсальным инструментом решения сложных конкретных физико-химических задач в геохимии на основе расчёта полных, метастабильных и промежуточных химических равновесий [4]. Физико-химический расчёт мультисистем осуществляется через применение минимизации термодинамических потенциалов компонентов системы. Исходными данными для модельных исследований системы С-Fe-O были использованы представленные в таблице 2 независимые компоненты в виде векторов (вектора $b_1 - b_4$).

	Вектора, моли						
	b ₁	b ₂	b ₃	b ₄			
С	3.330	3.330	3.330	3.330			
Fe	17.189	16.473	15.756	15.040			
Ο	—	0.25	0.5	0.75			

Таблица 2. Мольное содержание элементов системы С-Fe-О.

Определение состава твёрдой и флюидной фаз осуществлялось при различных величинах давления (1, 1000, 10000, 30000, 40000 и 50000 бар) и соответствующих температур расплава и твёрдых компонентов (1100, 1150 и 1200 ° C).

В результате проведенных физико-химических исследований, представленного в форме табличного материала (табл. 3 и 4) следует, что переменное содержание железа и кислорода в исследуемой системе способствует постепенному росту восстановительных условий, увеличению содержания СО и даже появлению алмаза. Это свидетельствует о том, что рассмотренный в этой системе процесс происходит в неравновесной окислительновосстановительной обстановке.

Состав: С (40 г/кг)=3.33 моля; Fe(920 г/кг)=16.47 моля; O(40 г/кг)=2.5 моля									
	Р = 1 бар								
TTO C		Графит	Алмаз	Fe ₃ C	CO	CO ₂	O_2	V	
T° C		Ве	c.%		Парци	альное да	вление	CM ³	
1100	1e-4	47.86	_	52.14	9.9e ⁻¹	2.2e ⁻³	1.7e ⁻¹⁸	4574.6	
1150	48.6	51.35	_	2e ⁻⁴	9.9e ⁻¹	1.4e ⁻³	4.2e ⁻¹⁸	4745.3	
11200	48.6	51.34	—	1e ⁻⁴	9.9e ⁻¹	8.6e ⁻⁴	8.2e ⁻¹⁸	4913.9	
				P = 1000) бар				
1100	1e ⁻⁴	47.86	—	52.14	9.9e ⁺²	$2.2e^{0}$	1.9e ⁻¹⁵	21.46	
1150	1e-4	47.86	_	52.14	9.9e ⁺²	$1.3e^{0}$	3.9e ⁻¹⁵	21.63	
1200	48.6	51.34	—	2e-4	9.9e ⁺²	8.2e ⁻¹	7.5e ⁻¹⁵	22.75	
	Р = 10000 бар								
1100	-	47.86	_	52.14	9.9e ⁺³	1.5e ⁺¹	8.3e ⁻¹⁵	17.36	
1150	-	47.86	—	52.14	9.9e ⁺³	$8.8e^{0}$	$1.7e^{-14}$	17.38	
1200	1e-4	47.86	_	52.14	9.9e ⁺³	5.6e ⁰	3.4e ⁻¹⁴	17.39	
	Р = 50000 бар								
1100	_	_	47.86	52.14	5.1e ⁺⁴	$1.3e^{+1}$	$1.2e^{-15}$	11.11	

Таблица 3. Результаты расчёта системы С–Fе–O в зависимости от температуры и давления при постоянном содержании железа и кислорода.

Таким образом, термодинамические исследования подтверждают возможность анализа процессов, сопровождаемых химическими и фазовыми

превращениями в широком интервале температур и давлений. Такой подход

Таблица 4. Результаты расчёта системы С-Fe-O в зависимости от температуры и давления при переменном содержании железа и кислорода.

Состав: С (40 г/кг)=3.33 моля; Fe(880 г/кг)=15.756 моля; О(80 г/кг)=5 моля									
Р = 30000 бар									
T ^o C	Fe	Графит	Алмаз	Fe ₃ C	CO	CO ₂	O	2	V
ΓC			Bec.%		Парц	иальное д	авлени	e	CM ³
1100	-	49.73	_	50.27	3.0e ⁺⁴	1.7e ⁺¹	3.96	-15	17.07
	Р = 40000 бар								
1100	-	49.73	_	50.27	4.0e+4	$1.4e^{+1}$	2.06	e ⁻¹⁵	17.00
				P = 5000	0 бар				
1100	-	_	47.86	52.14	5.0e ⁺⁴	5.2e ⁰	6.06	-15	11.11
Соста	ав: С	С (40 г/кг)=	3.33 моля;	Fe(840 г/н	кг)=15.040	моля; О(120 г/кг)=7.5	моля
				P = 4000	0 бар				
1100	-	49.76	_	50.24	4.4e ⁺⁴	$1.4e^{+1}$	2.0e ⁻¹⁵	1	7.00
	Р = 50000 бар								
1100	_	_	49.76	50.24	5.0e+4	$1.3e^{+1}$	$1.2e^{-15}$	1	1.05
1200	_	_	49.76	50.24	5.0e ⁺⁴	5.2e ⁰	6.0e ⁻¹⁵	1	1.07

сопровождается относительно высокой точностью моделирования реальных условий, и предоставляет информацию, которую пока невозможно осуществить экспериментальным путём.

Полученные результаты позволяют утверждать, что с позиций физикохимического анализа можно объективно оценить роль Т и Р условий алмазообразования в области низких температур на примере железоуглеродной системы, в которой углерод находится в жидком состоянии. Появление алмаза зафиксировано в этой системе С–Fe–O при давлении 50000 бар, низкой температуре и низкой величине парциального давления кислорода. Установленный факт присутствия алмаза в железоуглеродной системе находится в хорошем согласии с информацией о находках алмазов в чугуне [2], что является математическим подтверждением возможных условий образования алмазов.

Список литературы

1. Банных О.А., Будберг П.Б., Алисова С.П. и др. Диаграммы состояния двойных и многокомпонентных систем на основе железа. М. Изд-во: Металлургия, 1986. 440 с.

2. Диаграммы состояния двойных металлических систем (ред. Лякишева Н.П.). М. Изд-во: Машиностроение, 1996-2000.

3. Казьмин Л.А., Халиуллина О.А., Карпов И.К. Расчет химических равновесий поликомпонентных гетерогенных систем методом минимизации свободной энергии // Информ. Бюл. «Алгоритмы и программы» / ВНТИЦ. 1975. № 3. С. 18-19. 4. Каржавин В.К. Алмазы свиты Кейв (Кольский полуостров). Математические исследования в естественных науках. XV Всероссийская научная школа. Апатиты: Изд-во К & M, 2018. С. 94-101.

5. Карпов И.К., Киселёв А.И., Летников Ф.А. Моделирование природного минералообразования на ЭВМ. М. Изд-во: Недра, 1976. 256 с.

6. Лейпунский О.И. Об искусственных алмазах // Успехи химии. 1939. Т. 8. Вып. 10. С. 1519-1534.

7. Чепуров А.И., Сонин Е.И., Жимулев Е.И., Чепуров А.А., Томиленко А.А. Об образовании элементарного углерода при разложении CaCO₃ в восстановительных условиях при высоких Р-Т-параметрах // ДАН. 2011. Т. 441. № 6. С. 800-809.

К ВОПРОСУ О РАЗРАБОТКЕ ПЛАСТИНЧАТЫХ ПРЕОБРАЗОВАТЕЛЕЙ ПОВЕРНУТЫХ СРЕЗОВ С ЦЕЛЬЮ ПРИМЕНЕНИЯ В ЗАДАЧАХ ГЕОФИЗИКИ

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 оптимальных характеристик 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 зависимости для различных углов среза преобразователей.

Алгоритм расчёта частотных характеристик

Для реализации метода акустополярископии [1-7] измерительная аппаратура должна включать в себя преобразователи поперечных линейнополяризованных колебаний.

Ранее в [8] рассмотрен теоретический анализ и расчёт преобразователей в различных режимах работы излучения и приёма. Целью данной работы является расчёт частотных характеристик разрабатываемых преобразователей, при которых различные типы упругих колебаний зависят от изменения частоты воздействия.

Для расчёта частотных характеристик, разрабатываемых преобразователей и анализа влияния параметров конструкции на характеристики акустической системы измерительного устройства, был предложен алгоритм и составлена программа на языке C++. Схема алгоритма представлена на рис. 1.

Программа включает в себя несколько основных модулей:

• блок пересчёта параметров пьезокерамики в повёрнутую систему координат. При этом выполняются матричные преобразования тензоров модулей упругости C_{ik} , пьезоэлектрических постоянных e_{pq} и диэлектрических проницаемостей ε_{rs} в новую систему, повёрнутую относительно кристаллографической системы координат на заданный угол (вокруг оси Ox). Выбором угла поворота можно подобрать оптимальные срезы для одновременного возбуждения как продольных, так и поперечных волн. В этом же блоке вычисляются характеристики квазипродольной и квазипоперечной волны в пьезокерамике, скорости v_{l} , v_t и ориентация векторов поляризации $(P_2/P_3)_l$ и $(P_3/P_2)_t$;

• блок расчёта коэффициентов граничных уравнений. При этом используются выражения, полученные в [7]. Отдельно анализируются режимы излучения и приёма. Размерность получаемых систем в режиме излучения – 16×16, в режиме приёма – 17×17. Итоговый коэффициент передачи является произведением полученных коэффициентов для двух режимов.



Рис. 1. Алгоритм расчёта частотных характеристик преобразователя.

Результаты численного анализа

 блок решения системы линейных алгебраических уравнений с комплексными коэффициентами. Для решения системы использовался метод Гаусса. Блок реализован в виде подпрограммы, входными данными которого является размерность решаемой системы и указатели на массивы коэффициентов системы линейных уравнений и векторы свободных членов. В программе предусмотрен цикл расчёта при изменении рабочей частоты (задаётся начальная, конечная частота и шаг изменения).

Входные данные для расчёта получаются из файла исходных параметров пьезоматериала и при вводе оператором с клавиатуры. Величины f, f_{μ}, f_{κ} – частоты соответственно текущая, начальная, конечная.

Результаты расчёта выводятся на экран монитора и в файлы *K_iz.dat* – результаты излучения, *K_pr.dat* – результаты приёма, *K_pered.dat* – коэффициент преобразования продольных и поперечных волн.

Для представления результатов анализа в графической форме, файлы данных можно экспортировать, например, в программу пакета Microsoft Excel.

На основе компьютерной программы был проведён численный анализ частотных зависимостей коэффициента передачи для продольных и поперечных волн при различных параметрах конструкции элементов акустической системы.

Требуемые резонансные частоты для поперечной и продольной волны (соответственно 0.6 и 1.2 МГц), достигаются при толщине пьезопластины (керамика ЦТС-19) d=1.5 мм. На рис. 2–4 представлены сравнительные зависимости коэффициентов передачи при различных углах поворота пьезопластины: 30° – рис. 2, 45° – рис. 3 и 60° – рис. 4. На графиках кривые 1 и 2 – частотные зависимости передачи продольных и поперечных волн недемп-

фированной пьезопластины, 3 и 4 – частотные зависимости передачи продольных и поперечных волн для демпфированного преобразователя (материал буферного стержня и демпфера – плавленый кварц) при нулевой толщине контактного слоя, 5 и 6 – те же зависимости при толщине контактных слоёв 5 мкм.

Можно видеть, что в случае угла поворота среза пьезопластины 45° получаются наиболее оптимальные характеристики. Для угла поворота 60° слабый коэффициент передачи продольных волн, для угла поворота 30° мало соотношение эффективностей возбуждения при работе на поперечной моде.

Также из графиков видно, что демпфирование приводит к уменьшению коэффициентов передачи и расширению резонансной кривой, особенно для продольной волны, что ухудшает разделение мод при работе на поперечной волне.

Рисунок 5 иллюстрирует влияние толщины контактного слоя на получаемые характеристики, на котором кривые 1 и 2 – соответствуют толщине контактного слоя 5 мкм, 3 и 4 – соответствуют толщине контактного слоя 15 мкм, 5 и 6 – соответствуют толщине контактного слоя 30 мкм. Можно сказать, что увеличение толщины слоя приводит к обострению резонансных кривых и повышению коэффициента передачи, а, следовательно, и улучшению разделения мод. Это является положительной тенденцией, т.е. при изготовлении преобразователя не стоит стремиться к уменьшению толщины контактного слоя.

Для проверки возможности использования других материалов буферных стержней были выполнены расчёты конструкции буферного стержня из титана. Соответствующие зависимости представлены на рис. 6, где кривые 1 и 2 – продольные и поперечные волны, в случае недемпфированной пьезопластины, 3 и 4 – продольные и поперечные волны при демпфировании плавленым кварцем (толщина слоя 5 мкм).

Возможности улучшения характеристик (титанового буферного стержня) проверены путём расчёта в более широком диапазоне контактных слоёв рис. 7, где кривые 1 и 2 – продольная и поперечная волна при толщине слоя 5 мкм, 3 и 4 – продольная и поперечная волна при толщине слоя 15 мкм, 5 и 6 – продольная и поперечная волна при толщине слоя 30 мкм. Увеличение толщины контактного слоя улучшает зависимости, однако сравнение с аналогичными характеристиками для плавленого кварца (рис. 5) свидетельствует о том, что буферный стержень, изготовленный из плавленого кварца, является более предпочтительным.

Выводы

Возможность работы в двухрезонансном режиме определяется углом среза пьезопластины (керамика ЦТС-19) относительно кристаллографических осей. Как показали приведённые расчёты, оптимальный режим, для возбуждения продольных и поперечных волн, достигается при угле среза



Рис. 2. График зависимости для повёрнутого преобразователя с углом среза 30°.



Рис. 3. График зависимости для повёрнутого преобразователя с углом среза 45°.



Рис. 4. График зависимости для повёрнутого преобразователя с углом среза 60°.



Рис. 5. Влияние толщины контактного слоя (буферный стержень – плавленный кварц).



Рис. 6. График зависимости для буферного стержня из титана.



Рис. 7. Влияние толщины контактного слоя (буферный стержень – титан).

порядка 45-50°. При этом погрешности в определении угла среза оказывают несущественное влияние на характеристики датчика.

Материалом демпфера преобразователя является предварительно металлизируемая пирамида из плавленого кварца, боковые грани которой обладают большой шероховатостью для рассеяния ультразвуковых волн.

Составные части преобразователя: буферный стержень, пьезопластина и демпфер соединены между собой с помощью эпоксидной смолы ЭД-5, толщина слоя которой может быть достаточно существенна, порядка 20-30 мкм. При этом расчёты показали, что при увеличении толщины слоя характеристики преобразователя улучшаются.

Толщина пьезопластины определяется рабочими частотами измерителя скорости. Для применения в геофизических задачах, в расчётной конструкции, для частот 0.6, 1.2 МГц, соответственно для поперечной и продольных волн, толщина пьезопластины составляет 1.5 мм, а диаметр 30 мм.

Список литературы

1. Горбацевич Ф.Ф. Акустополярископия горных пород. Апатиты. Изд-во: КНЦ РАН, 1995. 204 с.

2. Горбацевич Ф.Ф. Акустополярископия породообразующих минералов и кристаллических пород. Апатиты. Изд-во: КНЦ РАН, 2002. 140 с.

3. Ковалевский М.В. Повышение информативности акустополяризационного метода определения упругих характеристик горных пород: Дис... канд. техн. наук: Спец. 01.04.06, 05.11.13 / М.В. Ковалевский; СПбГЭТУ. СПб., 2002. 202 с.

4. Ковалевский М.В. К вопросу о разработке методики определения скоростных соотношений упругих волн в задачах акустополярископии // Материалы XVIII молодёжной науч. конф. Актуальные проблемы геологии докембрия, геофизики и геоэкологии. СПб. Изд-во: ЛЕМА, 2007. С. 183-185.

5. Автоматизированный программно-аппаратный комплекс Acoustpol (АПАКА) для оценки качества материалов и объектов из природного камня // Контрольно-измерительные приборы и системы. Изд-во: Московский гос. тех. университет им. Н.Э. Баумана, 2012. № 4. С. 10.

6. Ковалевский М.В. Автоматизированный программно-аппаратный комплекс Acoustpol: Учеб. пособие: Апатиты. Изд-во: ООО К&М, 2009. 54 с.

7. Ковалевский М.В., Горбацевич Ф.Ф. Методика определения скоростных соотношений упругих волн в задачах изучения петрофизических свойств метаморфизованных пород методом акустополярископии // Математические исследования в естественных науках. Труды XV Всероссийской (с международным участием) научной школы. Апатиты. Изд-во: К&M, 2018. С. 102-106.

8. Ковалевский М.В. Теоретический анализ демпфированных пластинчатых преобразователей повёрнутых срезов для возбуждения продольных и поперечных ультразвуковых колебаний // Математические исследования в естественных науках. Труды XV Всероссийской (с международным участием) научной школы. Апатиты. Изд-во: К&M, 2018. С. 107-115.

К ВОПРОСУ ОПРЕДЕЛЕНИЯ ГРАФИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРОВ В ГЕОФИЗИЧЕСКИХ ЗАДАЧАХ АКУСТОПОЛЯРИСКОПИИ

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

Аннотация. В работе рассматривается корректировка анализа экспериментальных результатов в геофизических задачах акустополярископии. Представлен более достоверный подход для определений графических параметров акустополяризационных измерений твёрдых анизотропных сред. Может применяться в следующих сферах промышленности: авиастроение, спортивное оборудование, машиностроение, металлургия, энергетика, разработка месторождений, сейсморазведка, строительство, бурение, космостроение, утилизация 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 [4-7].

127

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 [8]. Инструментальная погрешность 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 и вышеуказанных недостатков.

Постановка задачи

Необходимые акустополяризационные измерения производят на образце, грани которого образованы параллельно и перпендикулярно выявленным элементам симметрии. Перед проведением измерений образец помещается между преобразователями, совмещая его центр с центром контактных площадок. Измерения осуществляются при разной ориентации векторов преобразователей (ОВП). Наиболее подробно методика проведения измерения описывается в работе [2-7].

В экспериментальной практике проведения акустополяризационных измерений нередко наблюдаются случаи, когда направления наибольшего или наименьшего пропускания упругих волн, определяемые при скрещенной ОВП датчиков в процессе проведения измерений не совпадают с полученными аналогичными направлениями на акустополяриграмме – в некоторых случаях угол расхождения составляет до 15°. Окончательным результа-



Рис. 1. Изменение амплитуды сигнала: а) в относительных амплитудах, D=0.24, \angle Анпмакс=65°, \angle Анпмин =167°; б) без преобразований, в dB, D=0,14, \angle Анпмакс=64°, \angle Анпмин =167°.

том, который заносится в исследовательский журнал и используется в дальнейших расчётах, является именно результат, полученный на акустополяриграмме. На рисунке 1 представлены акустополяриграммы, на примере образца h001 керна скважины КТВ двух вариантов анализа проекций элементов упругой симметрии. Имеем две акустополяриграммы – в относительных амплитудах (традиционный случай, рис. 1а) и без преобразований в децибелах (dB, рис. 1б). Если проводить измерения для обеих акустополяриграмм, то зависимости направления наибольшего (наименьшего) пропускания сигнала от амплитуды сигнала не должно быть. Действительно, мы должны зафиксировать в журнале измерений положение (направление) датчиков, при котором наблюдаются максимальный (минимальный) сигнал. В журнале результат фиксируется в dB. Далее в соответствии с методикой [2-5], этот результат переводится в относительные амплитуды и осуществляется построение акустополяриграммы в этих амплитудах.

Чтобы были понятны дальнейшие рассуждения, вынесем отдельно проекции элементов упругой симметрии на сетку полярных координат (рис. 2). Предположим следующие показания ультразвукового прибора:

 $C_{\nu} \angle 70^{\circ}, 20^{\circ} \text{ dB-}$ отрезок *OC*, соответствует максимуму в І-ой четверти.

 C_2 , угол 210°, 40 dB – отрезок *OB*, соответствует максимуму в III-ей четверти.

C = 40 dB – максимальное показание эксперимента.

Считаем традиционно:

$$A_1 = C - C_1 = 40 - 20 = 20 \text{ dB}$$

 $A_2 = C - C_2 = 40 - 40 = 0 \text{ dB}$

Применяем таблицу перевода в относительные амплитуды или формулу:

$$A_{H_1} = \frac{1}{10^{\frac{A_1}{20}}} = 0.1 \qquad \qquad A_{H_2} = \frac{1}{10^{\frac{A_2}{20}}} = 1 \tag{1}$$

Осуществляем построения на рис. 2 а. в масштабе 1:4.



Рис. 2. Изменение амплитуды сигнала: а) в относительных амплитудах; б) без преобразований, в dB.

Осуществляем построение изменения без преобразований, в dB (данные C_1 и C_2) на рис. 2 б. в масштабе 1:10.

Из рис. 2 видно, что углы β_1 и β_2 не совпадают вследствие существования некоторого угла α и разницы в величинах C_1 и C_2 . В существующей теории [2] угол $\alpha = 180^{\circ}$, однако в экспериментальной практике часто наблюдается $\alpha \neq 180^{\circ}$. При наличии угла α и разницы в величинах C_1 и C_2 в традиционном случае (рис. 2 а), C_1 и C_2 будут вести себя следующим образом.

Пусть $C_2 = 40 \text{ dB} - \phi$ иксированное показание (отрезок *OB*), соответствующее максимальному показанию прибора после проведения эксперимента. Что будет с C_1 ? В соответствии с традиционной методикой к C_1 , после того как вычитаем от максимального *C*, применяется таблица перевода в относительные амплитуды или формула (1). График зависимости формулы (1) представлен на рисунке 3. На графике видно, что в диапазоне от ~10 до 60 существует нелинейный участок (провал). Соответственно и показания C_1 (рис. 2 а), в большую или меньшую сторону от 20 dB по кривой *OA* относительно максимального значения *C*, будут меняться нелинейно. Причём, чем меньше α и больше разница между C_1 и C_2 , тем большая нелинейность будет присутствовать в графических построениях направлений наименьшего и наибольшего пропускания.



Рис. 3. График зависимости функции по формуле (1).

В свою очередь показания C_1 (отрезок *OC*) в случае построения на рис. 2 б будут изменяться по линейному закону, так как в этом случае нет дополнительных вычислений по формуле (1).

В связи с вышеуказанным возникает задача. Обе акустополяриграммы в одинаковой степени имеют право на существование. Часто направления, построенные графически, получаются в некоторых практических случаях разные (наличие α и существование разницы между C_1 и C_2). В одном случае существует нелинейность, в другом линейность. Нелинейность исследователи, как правило, стараются избегать и это возможно сделать (рис. 2 б).

Обсуждение

На практике исследователь может наблюдать два варианта нелинейности. Возможно, они являются погрешностями – требует отдельной работы. Первый тип: в акустополяризационных измерениях достаточно часто наблюдается несимметричность полученного результата при повороте датчика на угол 180°. Второй тип: нередко происходит отклонение центра акустополяриграммы от центра сетки полярных координат. Второй тип необходимо более детально изучать, так как данный тип погрешности не относится к систематическим. Для акустополяриграммы в dB это одно отклонение, для традиционной акустополяриграммы – это несколько другое отклонение, так как производилось преобразование в относительные амплитуды.

После получения акустополяриграмм производится определение соответствующих максимальных и минимальных точек и построения направлений наибольшего (наименьшего) пропускания сигнала и проекций элементов упругой симметрии. Если на акустополяриграмме имеются два типа вышеописанных погрешностей, то построение линий наибольшего и наименьшего пропусканий упругих колебаний для акустополяриграммы в dB будет отличаться от линий для традиционной акустополяриграммы. Это можно представить таким образом. Первоначально мы получили максимальный (минимальный) сигнал в dB при строгом положении датчиков (например, 20 и 30 dB; 60 и 230 градусов соответственно). После преобразования в относительные амплитуды через степенную функцию численные показания изменились для амплитуды, для направлений градусов они остались такими же. После построения традиционной акустополяриграммы, мы получаем направление, отличающееся на некоторый угол от того, что получили на акустополяриграмме в dB. Как следствие нам необходимо повернуть датчик на этот некоторый угол. Однако если мы это сделаем, то датчик покажет уже не максимальный (минимальный) сигнал. Для решения данной задачи нами предлагается более развёрнутый отчёт по каждому измерению, который включает в себя все возможные варианты акустополяриграмм с целью более детального анализа результатов акустополяризационных измерений в подобных случаях.

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 молодёжной науч. конф. Актуальные проблемы геологии докембрия, геофизики и геоэкологии. СПб. Изд-во: ЛЕМА, 2007. С. 183-185. 5. Ковалевский М.В. Автоматизированный программно-аппаратный комплекс Acoustpol: Учеб. пособие: Апатиты. Изд-во: ООО «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. Изд-во: «Московский государственный технический университет им. Н.Э. Баумана», 2012. № 4. С. 10. 7. Ковалевский М.В., Горбацевич Ф.Ф. Методика определения скоростных

7. Ковалевскии М.В., Гороацевич Ф.Ф. Методика определения скоростных соотношений упругих волн в задачах изучения петрофизических свойств метаморфизованных пород методом акустополярископии // Математические исследования в естественных науках. Труды XV Всероссийской (с международным участием) научной школы. Апатиты. Изд-во: К&M, 2018. С. 102-106. 8. Фадеев М.А. Элементарная обработка результатов эксперимента: учебное пособие. Нижний Новгород. Изд-во: ННГУ, 2010. 122 с.

экология

БИОЛОГИЯ



ПРОВЕРКА КЛИМАТИЧЕСКОЙ ОДНОРОДНОСТИ РЯДОВ ТЕМПЕРАТУРЫ ВОЗДУХА В БАРЕНЦБУРГЕ (ШПИЦБЕРГЕН)

Демин В.И.¹, Иванов Б.В.²

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

² Арктический и антарктический НИИ, Санкт-Петербург, b_ivanov@aari.ru

Аннотация. Проведена проверка рядов температуры воздуха на гидрометеорологической обсерватории «Баренцбург» (Шпицберген). Измерения начались в 1932 г., но метеорологическая площадка переносилась в 1978 и 1984 гг. Несмотря на переносы, статистические тесты не показали нарушений методической однородности. Ряды температуры воздуха в Баренцбурге можно использовать для оценок изменений климата в регионе за весь период наблюдений с 1932 г.

Summary. Time series of the air temperature in the Barentsburg hydrometeorological observatory (Svalbard) were checked. The measurements started in 1932. The meteorological station was moved in 1978 and 1984. Homogeneity testing by the Standard Normal Homogeneity test, the Buishand test, the Pettitt test and the Von Neumann ratio test did not detect any inhomogeneities in the series. The whole series of the Barentsburg air temperature can be used to estimation of the regional climate changes.

Введение

Метеорологические наблюдения в Баренцбурге начались в 1932 г. и продолжаются по настоящее время (гидрометеорологическая обсерватория (ГМО) Мурманского УГМС). Это наиболее длительный ряд наблюдений среди всех метеорологических станций (МС), когда-либо работавших на архипелаге Шпицберген, в т.ч. числе по непрерывности измерительной серии. В состав глобальной сети станций наблюдений за климатом от Шпицбергена включена МС «Svalbard Airport» (аэропорт в г. Лонгйир). МС «Svalbard Airport» работает только с 1975 г. Существуют методики, позволяющие рассчитать температуру на станции в периоды отсутствия наблюдений по её значениям на ближайших МС (см., например, [5, 13, 14]). Благодаря таким процедурам, температурные ряды для МС «Svalbard Airport» были продлены до 1898 г. [14]. Однако использование оригинальных данных вместо восстановленных каким-либо путём, безусловно, представляет больший научный интерес.

Одним из главных требований, предъявляемых в климатологии к рядам наблюдений, является однородность: характеристики рядов должны меняться только в соответствии с естественной изменчивостью макропроцессов и не содержать эффектов, вызванных сменой методики производства измерения, типов измерительных приборов, переносом измерительной площадки или искусственным изменением окружающей местности. Известно, что метеорологическая площадка в Баренцбурге неоднократно переносилась, а своё современное положение она занимает только с 1984 г. Целью данной работы является проверка климатической однородности рядов температуры воздуха на ГМО «Баренцбург» и возможности их использования для оценок долговременных изменений климата.

Использованные данные

В работе использованы данные ВНИИ Гидрометеорологической информации – Мировой центр данных (ВНИИГМИ-МЦД) и Норвежского метеорологического института (Осло).

История метеорологических наблюдений в Баренцбурге

Первая советская МС на архипелаге Шпицберген была открыта в конце 1931 г. на руднике Грумант-Сити (южное побережье залива Ис-фьорд). Но уже в 1932 г. её перенесли к руднику Баренцбург в заливе Грен-фьорд. Метеорологическая площадка располагалась на северо-восточной окраине посёлка у подножья горы на высоте около 70 м в 400-450 м от восточного берега залива Грен-фьорд и примерно в 100 м от жилых зданий. С 1 июня 1978 г., в связи с расширением поселка (строительство новых жилых и административных зданий), метеонаблюдения перенесли на узкую прибрежную террасу с отметкой 22 м н. у. м. в 70-80 м от залива. Последний перенос произошёл в феврале 1984 г.: с этого момента и по настоящее время метеорологические наблюдения проводятся на южной окраине посёлка на расстояние ~330 м от залива и на высоте 74 м н. у. м. Положение метеорологических площадок в разные годы показано на рисунках 1 и 2.

Исходя из истории наблюдений, можно предположить в рядах температуры воздуха на ГМО «Баренцбург» два потенциально возможных наруше-



Рис. 1. Посёлок Баренцбург (фото Дмитрия Дексгеймера); отмечены положения метеорологической площадки ГМО: 1 – 1932-1978 гг., 2 – 1978-1984 гг., 3 – с 1984 г.



Рис. 2. Топографическая карта Баренцбурга и его окрестностей; отмечены положения метеорологической площадки в разные годы (номера соответствуют подписям к рис. 1).

ния однородности, вызванные переносами метеорологической площадки: в 1978 и 1984 г.

Первый фактор, который мог привести к нарушению однородности, – изменение расстояния от метеорологической площадки до берега залива Грен-фьорд (400-450 м, 70-80 м, 330 м соответственно для участков 1, 2, 3 на рис. 1 и 2). Зимой вода теплее воздуха, и даже подо льдом арктические моря «работают» как огромные резервуары тепла. В этот период года воздух над заливом должен быть теплее по сравнению с участками, удаленным от берега. Летом температура воды ниже температуры воздуха, и тепловой эффект залива имеет обратный знак.

Существует также предположение, что в период нахождения приборов на площадке 2, значения температуры воздуха могли искажаться (завышаться) вследствие протекания по оврагу в 10 м от метеорологических будок с термометрами тёплых сточных вод столовой рудника и подсобного хозяйства [4, 13]. Однако тепловая мощность этого источника, очевидно, невелика. В любом случае, ручей только усиливал отепляющий эффект залива зимой, обостряя контраст участка 2 по отношению к участкам 1 и 3.

Другой фактор, который мог привести к появлению неоднородности – изменение высоты размещения метеорологической площадки: 70, 22 и 74 м н. у. м. соответственно для участков 1, 2, 3. Зимой из-за преимущественно инверсионного распределения температуры воздуха в приземном слое перенос наблюдений на нижерасположенный участок должен привести к пони-

жению температуры, а летом – к её повышению. Согласно измерениям, проведённым на склоне вблизи Petuniabukta (~90 км на CB от Баренцбурга), вертикальный градиент температуры в слое 23-136 м зимой равен –0.53 ° C/100 м, а летом 0.53 ° C/100 м [8].

Более критичным, чем различие высот, могло бы стать изменение формы окружающего рельефа. Известно, что даже слабовыраженные изменения рельефа сильно влияют на термический режим местности из-за неодинаковых условий для стока и накопления холодного воздуха. Например, по измерениям на Кольском п-ове, разность температур между верхней частью небольшого холма и его подножием на расстояние 2 км и разности высот между ними около 20 м достигает зимой 10-12 °C [3]. На Шпицбергене при установлении тихой и ясной погоды за счёт длительного радиационного выхолаживания (полярная ночь) должны существовать не меньшие по величине пространственные неоднородности.

Однако вся территория Баренцбурга располагается у подножия гор на довольно крутом склоне (рис. 1-3). Условия для накопления и застоя холодного воздуха отсутствуют во всех трёх местоположениях, где находилась ГМО.

Искажающее влияние посёлка, на окраине которого находится метеорологическая площадка, ожидается малым по величине. Например, даже в таком крупном городе как Мурманск, несмотря на 300-тыс. население и активную промышленную и хозяйственную деятельность, показания городской MC не искажены городским островом тепла [2].



Puc. 3. Баренцбург на склоне горы (фото с сайта: https://knowhow.pp.ua/northernmost towns svalbard).



Рис. 4. Схематичные изменения температуры воздуха при переносе ГМО «Баренцбург»: 1 – за счёт изменения высоты, 2 – за счёт изменения расстояния до залива; а – зима, б – лето.

С учётом отмеченных особенностей участков 1, 2, 3, возможные изменения температуры воздуха на ГМО «Баренцбург» при переносе в 1978 г. (с участка 1 на участок 2) можно представить следующим образом: зимой температура воздуха должна была повыситься из-за отепляющего влияния залива, и уменьшиться за счёт понижения высоты; летом температура должна была понизиться из-за близости холодной воды и повыситься за счёт понижения участка. При переносе в 1984 г. (с участка 2 на участок 3) изменения должны были произойти с обратным знаком. Качественная картина ожидаемых сдвигов в рядах температуры воздуха при переносах метеорологической площадки в Баренцбурге показана на рисунке 4.

Методы обнаружения неоднородностей в метеорологических рядах

Традиционный в климатологии метод установления однородности – анализ разности или отношения синхронных значений метеорологических величин на соседних станциях. Долгое время считалось, что ряды разностей (отношений) остаются приблизительно постоянными от года к году, так как атмосферные процессы охватывают одновременно большие пространства и сказываются на данных близкорасположенных МС примерно одинаково. Появившийся в ряду разностей сдвиг рассматривали как признак нарушения методической однородности.

Ближайшая MC, которая не меняла своего положение в периоды переносов ГМО «Баренцбург», – MC «Svalbard Airport» (~37.5 км на CB от Баренцбурга). На рис. 5 показаны разности сезонных температур между ГМО «Баренцбург» и «Svalbard Airport». Разности температур не остаются постоянными на всём интервале параллельной работы данных MC. Однако важно, что: 1) нет «скачка» в разностях сразу после переносов ГМО «Баренцбург» в 1978 и 1984 гг.;

2) основные изменения пришлись не на годы переносов ГМО в «Баренцбурге», а в более поздний период;

3) изменения разностей происходят по-разному в разные сезоны.

Оснований для заключения о нарушении однородности на ГМО «Баренцбург» нет.

Современными исследованиями показано, что утверждение об относительном постоянстве разностей (или отношений) метеоэлементов, строго говоря, не является правильным. В зависимости от характера макроциркуляционных процессов в конкретном месяце или сезоне создаются температурные аномалии различной географической локализации. Положение сравниваемых станций относительно зон аномалий оказывает влияние на временной ход разности температур между ними. Кроме того, повторяемость метеорологических условий, благоприятных для проявления микроклиматических особенностей местности в разные циркуляционные эпохи неодинаковая. Это также приводит к изменению разностей температуры на МС, расположенных на участках с разным микроклиматом.

В соответствии с принятой в настоящее время международной практикой при проверке однородности метеорологических рядов используется комбинированный статистический подход [6, 9]. При этом последовательно используются четыре статистических теста.



Рис. 5. Разности средних сезонных температур между ГМО «Баренцбург» и МС «Svalbard Airport»: а – зима, б – весна, в – лето, г – осень.

1. Стандартный нормальный тест для проверки однородности (SNHT) [7]

Имеется ряд метеорологической величины Y_1, \ldots, Y_n . Ряд длиной *n* разбивается на 2 части, содержащий *k* и *n*–*k* членов.

$$T_{k} = k(\overline{z_{1}})^{2} + (n-k)(\overline{z_{2}})^{2},$$

$$T_{k} = \frac{1}{k} \frac{\sum_{i=1}^{k} (Y_{i} - \overline{Y})}{s} \quad \text{if } \overline{z_{2}} = \frac{1}{n-k} \frac{\sum_{i=k+1}^{n} (Y_{i} - \overline{Y})}{s}, \quad \overline{Y} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} Y_{i}, \quad s^{2} = \frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^{n} (Y_{i} - \overline{Y}).$$

Если в момент *K* имеет место сдвиг, функция T(k) достигает максимального значения вблизи k=K. Нулевая гипотеза (ряд однороден) отвергается, если T_{max} выше некоторого критического значения, определяемого по длине выборки.

Пример работы SNHT показан на рисунке 6.



Рис. 6. Вариации функции Т(k) в тесте SNHT (описание в тексте) для средних зимних (а) и летних (б) температур в Баренцбурге.

2. Тест Буишанда [11]

Находятся суммы

$$S_k^* = \sum_{i=1}^k (y - y_i), k=1, ..., n$$

Если ряд однороден, то ряд, составленный из разностей значений $y - y_i$ – случайный, а сумма близка к нулю ($S_n^* = 0$).

Если в *k*-ый год произошло нарушение однородности, то сумма, составленная из разностей значений, симметричных относительно момента нарушения однородности, достигает экстремума (максимума или минимума). Статистическая значимость сдвига оценивается по параметру $R = \frac{S_{\text{max}} - S_{\text{min}}}{c}$.

3. Непараметрический тест Петита [15]

Ряд метеорологической величины $Y_1, ..., Y_n$ ранжируется, а полученные $r_1, ..., r_n$ ранги используются для расчёта статистики

$$X_{k} = 2\sum_{i=1}^{k} r_{i} - k(n+1)$$

Если сдвиг имеет место в момент *E*, статистика достигает максимального или минимального значения

$$X_E = \max_{1 \le k \le n} |X_k|$$

4. Отношение Фон-Ноймана [17]

$$N = \frac{\sum_{i=1}^{n-1} (Y_i - Y_{i+1})^2}{\sum_{i=1}^{n} (Y_i - \overline{Y})^2}$$

Ряд считается однородным, если значение N близко к 2. Если ряд содержит сдвиг, значение N меньше 2. Если в ряду происходят быстрые изменения (имеется тренд), значения N могут превышать 2 [10]. Тест Фон-Ноймана указывает только на факт сдвига без указания года.

Следует заметить, что в случае быстрых климатических изменений статистические тесты могут показать нарушение однородности, даже если его на самом деле не было. Например, быстрое потепление последних десятилетий многие тесты часто «принимают» за перенос МС в более тёплое местоположение. По этой причине утверждение о нарушении однородности принимается только с учётом истории МС: статистическое нарушение должно обнаруживаться не в одном из месяцев, а в нескольких (а лучше и не в одном сезоне) и быть близким по времени к моменту переноса МС.

Результаты применения тестов

Значения температуры воздуха с ГМО «Баренцбург» доступны с 1932 г. Однако с началом войны в июле 1941 г. метеорологические наблюдения в Баренцбурге прекратились и возобновились только в 1947 г. Учитывая большой временной разрыв, данные за 1932-1941 гг. в анализе не использовались. Последующая непрерывная серия наблюдений 1947-2018 гг. была разбита на 2 периода: с декабря 1947 г. по май 1984 г. (включает перенос ГМО в 1978 г. и потенциальный сдвиг в рядах, показанный на рис. 4), и с июня 1978 г по декабрь 2018 г. (содержит перенос 1984 г. и обратный сдвиг (рис. 4).

К рядам среднемесячной температуры воздуха в данных периодах были применены тесты SNHT, Буишанда, Петита и Фон-Ноймана. В соответствие с установленными правилами [6] ряд считается однородным, если не выполняется только один из тестов. В случае, когда два теста отрицают однородность на 1% уровне вероятности, ряд считается сомнительным. Если наличие неоднородности ряда подтверждается третьим или четвёртым тестами, ряд считается неоднородным.

Так как средние температуры относительно малочувствительны к изменениям микроклимата, тестированию были подвергнуты также ряды среднемесячных минимальных и максимальных температур (получены по суточным данным с сайта ВНИИГМИ-МЦД (содержат много пропусков). Результаты проверки представлены в таблицах 1-6, где указаны годы нарушения однородности по тому или иному тесту.

В период декабрь 1947 – январь 1984 гг. тесты SNHT, Буишанда, Петита, Фон-Ноймана не показывают нарушений однородности в рядах температуры (средней, средней минимальной и максимальной), причём как в комплексе, так и каждый в отдельности (табл. 1-3). Перенос метеорологической площадки ближе к заливу и понижение её высоты никак не проявилось в рядах температуры воздуха, точнее, обусловленные переносом изменения температуры оказались очень малы по сравнению с их естественными вариациями и ими можно пренебречь. Ряды в период 1947-1984 гг. следует считать однородными.

M	Тест						
месяц	SNHT	Тест Буишанда	Тест Петтита	Фон-Ноймана			
Январь	_	_	_	_			
Февраль	_	_	_	_			
Март	_	_	_	_			
Апрель	_	_	_	_			
Май	-	_	_	_			
Июнь	_	_	_	_			
Июль	_	_	—	_			
Август	_	_	_	_			
Сентябрь	_	_	_	_			
Октябрь	_	_	_	_			
Ноябрь	_	_	_	_			
Декабрь	_	_	_	_			

Таблица 1. Результаты тестирования рядов среднемесячной температуры на ГМО «Баренцбург», 1947-1984 гг.

Во время переноса в 1984 г. изменения должны были носить противоположный характер, чем в 1978 г.: ГМО отнесли дальше от берега и практически возвратили на тот же высотный уровень. Уже одно это обстоятельство не позволяет ожидать выраженного нарушения однородности. Статистические тесты показывают на присутствие сдвигов в рядах (табл. 3-6) в отдельные месяцы, однако все они происходят в годы, далёкие от 1984 г. Это реакция те-

142

стов на современное потепление климата. Ряды температуры воздуха на МС «Баренцбург» в период 1978-2018 гг. также следует считать однородными.

С учётом того, что измерения, выполненные в 1932-1941 гг., фактически являются дополнением ряда 1947-1978 гг., можно говорить об однородности рядов температуры за весь период наблюдений в Баренцбурге с 1932 г.

	Тест					
Месяц	SNHT	Тест Буишанда	Тест Петтита	Фон-Ноймана		
Январь	_	—	_	_		
Февраль	_	—	_	_		
Март	_	_	_	_		
Апрель	_	_	_	_		
Май	_	—	_	_		
Июнь	_	_	_	_		
Июль	_	_	_	_		
Август	_	_	_	_		
Сентябрь	_	—	_	_		
Октябрь	_	_	_	_		
Ноябрь	_	_	_	_		
Декабрь	—	_		_		

Таблица 2. Результаты тестирования рядов среднемесячной минимальной температуры на ГМО «Баренцбург», 1947-1984 гг.

Таблица 3. Результаты тестирования рядов среднемесячной максимальной температуры на ГМО «Баренцбург», 1947-1984 гг.

M	Тест						
месяц	SNHT	Тест Буишанда	Тест Петтита	Фон-Ноймана			
Январь	_	_	_	_			
Февраль	_	_	_	_			
Март	_	_	—	_			
Апрель	_	_	_	_			
Май	_	_	_	_			
Июнь	_	_	_	_			
Июль	_	_	—	_			
Август	-	_	—	_			
Сентябрь	_	_	—	_			
Октябрь	_	_	_	_			
Ноябрь	_	_	_	_			
Декабрь	_	_	_	_			

Обсуждение результатов

В климатологии известно, что не всякий перенос MC сопровождается нарушением однородности в рядах метеорологических параметров. Например, перенос в 1974 г. MC в Ню-Олесунне на 1.6 км от прежнего местополо-

жения с изменением высоты с 42 до 8 м н. у. м., согласно [12], не сказался на однородности температурных рядов. Тем не менее, отсутствие в статистической структуре рядов температуры воздуха на ГМО «Баренцбург» реакции на изменение положения требует некоторого объяснения.

Мооди	Тест						
месяц	SNHT	Тест Буишанда	Тест Петтита	Фон-Ноймана			
Январь	2005	2005	2005	+			
Февраль	2005	2005	2005	_			
Март	-	_	_	_			
Апрель	-	_	_	_			
Май	2004	2004	2004	_			
Июнь	2002	2002	2002	+			
Июль	_	_	_	_			
Август	1998	1998	1998	_			
Сентябрь	_	_	_	_			
Октябрь	_	2000	2000	+			
Ноябрь	-	1996	1996	_			
Декабрь	2004	2004	2004	+			

Таблица 4. Результаты тестирования рядов среднемесячной температуры
на ГМО «Баренцбург», 1978-2018 гг.

Таблица 5. Результаты тестирования рядов среднемесячной минимальной температуры на ГМО «Баренцбург», 1978-2018 гг.

Мооди	Тест					
месяц	SNHT	Тест Буишанда	Тест Петтита	Фон–Ноймана		
Январь	2005	2005	2005	+		
Февраль	2005	2001	2000	+		
Март	_	_	—	_		
Апрель	_	_	_	_		
Май	2003	2004	2003	_		
Июнь	2002	2002	2002	+		
Июль	_	_	_	_		
Август	2001	1998	_	—		
Сентябрь	_	_	_	_		
Октябрь	2014	2000	2009	_		
Ноябрь	_	-	1996	-		
Декабрь	2004	2004	2004	_		

Тепловой эффект залива резко убывает с удалением от берега. Влияние крупных водоёмов (морей) зимой обычно прослеживается на расстояние до 2–3 км, но в случае холодных морей воздействие на средний минимум (не путать с абсолютным минимумом!) не обнаруживается даже в при
Мооди	Тест						
месяц	SNHT	Тест Буишанда	Тест Петтита	Фон-Ноймана			
Январь	2005	2005	2005	+			
Февраль	2005	2005	2005	_			
Март	—	_	_	_			
Апрель	_	_	—	—			
Май	2003	2003	2003	+			
Июнь	2002	2002	2002	—			
Июль	_	_	_	_			
Август	—	_	2001	—			
Сентябрь	_	_	_	_			
Октябрь	2014	2000	2007	—			
Ноябрь	_	_	_	_			
Декабрь	2004	2004	2004	_			

Таблица 6. Результаты тестирования рядов среднемесячной максимальной температуры на ГМО «Баренцбург», 1978-2018 гг.

брежной зоне. Например, влияние Балтийского моря проявляется только в западных районах (Калининградская область, Литва) [1]. В холодное время года не даёт увеличения среднего минимума и северная половина Азовского моря [1]. Очевидно, что влияние узких заливов еще слабее, чем обширных морских акваторий. Можно предположить, что влияние залива Грен-фьорд на термический режим прибрежных территорий ограничивается только первыми десятками метров от кромки воды. По этой причине переносы метеорологической площадки, когда расстояние до залива менялось с 400-450 до 70-80 м (1978 г.), а потом – до 330 м (1984 г.), в температуре воздуха практически не проявились. Летом, благодаря меньшей разности температур между воздухом и водной поверхностью, тепловое воздействие залива должно быть еще менее выраженным, чем зимой.

Нельзя также исключить, что зимой повышение температуры за счёт приближения к заливу (1978 г.) было скомпенсировано переносом измерений в более низкое местоположение, где в это время года холоднее из-за инверсионного распределения температуры. Летом, наоборот, – более низкая высота площадки могла «нейтрализовать» охлаждающее влияние залива. В 1984 г. суммарный эффект от переноса метеоплощадки мог также оказаться нулевым из-за одновременного удаления от залива и повышения высоты.

Немаловажен и ещё один фактор: микроклиматические неоднородности между отдельными местоположениями в наибольшей степени проявляются только в тихую и ясную погоду. Облачность ослабляет радиационное выхолаживание, а при скоростях ветра более 2-3 м/с возникает интенсивное турбулентное перемешивание, которое выравнивает распределение температуры воздуха. Повторяемость ситуаций, когда в Баренцбурге ясно или малооб-

лачно и почти отсутствует ветер, небольшая (рис. 7). Вследствие этого вклад микроклимата в среднемесячные значения оказывается незначительным.



Рис. 7. Повторяемость малооблачной погоды (общая облачность ≤ 3 баллов) и скорости ветра ≤ 1 м/с (построен по данным массива срочных данных основных метеорологических параметров ВНИИГМИ-МЦД).

Влияние макроциркуляционных процессов и микроклимата на точность восстановления длинных температурных рядов

В настоящее время базовым температурным рядом для оценок климатических изменений на архипелаге Шпицберген является ряд MC «Svalbard Airport». Он содержит данные о температуре воздуха с 1898 г. Однако оригинальные (измеренные) значения на MC «Svalbard Airport» имеются только с августа 1975 г. Все значения в предыдущие годы были получены восстановлением с использованием данных других MC. Как правило, для такого восстановления находятся коэффициенты линейных регрессий (*a*, *b*), связывающие температуру воздуха на изучаемой MC (*T*) с температурой на MC-аналоге (T_a) в период их совместной (параллельной) работы по формуле $T=aT_a^+b$. Далее по найденным выражениям выполняется расчёт отсутствующих значений *T* на искомой MC по известным значениям T_a на MC-аналоге.

Такой метод подразумевает, что численные значения коэффициентов *a* и *b*, установленные по какому-либо периоду, сохраняются и в прошлом. Это предположение, строго говоря, не является верным. Выше уже отмечалось, что разности температур даже между достаточно близкорасположенными MC не остаются постоянными из-за меняющихся макроциркуляционных процессов.



Рис. 8. Сдвиги в разностях средних сезонных температур на ГМО «Баренцбург» и MC «Svalbard Airport», выявленные тестом Родионова (p=0.01, длина временно-го лага – 10 лет).

Применим к разностям сезонных температур на ГМО «Баренцбург» и MC «Svalbard Airport» тест С. Родионова (Rodionov test) [16], позволяющий обнаруживать статистически значимое различие между средними значениями на отдельных участках ряда. Данный тест показывает, что ряд разностей во все сезоны разбивается на отдельные интервалы (рис. 8). Например, осенью (сентябрь-ноябрь) можно выделить 3 интервала: 1976-1988, 1989-2003, и 2004-2018 гг., на границах которых разность получает статистически значимый сдвиг. Соотношения между температурами на МС в эти периоды разные.

На рис. 9а показана связь средних осенних температур на MC «Svalbard Airport» и на ГМО «Баренцбург» в период их параллельной работы 1975-2018 гг. Хорошая корреляция (коэффициент корреляции равен 0.988) позволяет нам использовать полученное уравнение регрессии для расчёта средних осенних температур на MC «Svalbard Airport» в 1932-1974 гг., когда MC «Svalbard Airport» не существовало, по значениям температуры на ГМО «Баренцбург» – выполнить реконструкцию ряда на MC «Svalbard Airport».

На рисунке 96 показано, как все точки на рисунке 9а, по которым была удачно построена линейная регрессия, совсем неслучайно разбиваются на 3 группы (границы установлены тестом С. Родионова), в каждой из которых своя (и не менее хорошая) регрессия (коэффициенты корреляции 0.990, 0.997 и 0.993). Например, приняв значение температуры в Баренцбурге –10°С, по

уравнению, полученному по выборке 1976-2018 г., найдём расчётное значение температуры на MC «Svalbard Airport» равное -11.2 °C. Если же период параллельной работы со MC-аналогом пришёлся бы на другие годы, уравнение связи оказалось бы с другими численными параметрами, и при температуре на MC-аналоге -10 °C, расчётные значения температуры были бы -11.2, -10.8, и -10 °C. Расхождения представляются большими для решения климатических задач.



Рис. 9. Связь осенней (сентябрь–ноябрь) температуры воздуха на MC «Svalbard Airport» (tS) и MC «Баренцбург» (tБ), 1976-2018 гг.

Проверим, есть ли статистически значимое различие между этими тремя линиями на рис. 11 б. Процедура сравнения наклонов нескольких регрессий подробно рассмотрена в [18]. Нулевая гипотеза: уравнения регрессии идентичны. Для проверки по всем уравнениям вычисляется общая сумма квадратов отклонений *SSt*, объединённая остаточная оценка дисперсии *SSp*, и рассчитывается параметр

$$F = \frac{\frac{(SSt - SSp)}{2(k-1)}}{\frac{SSp}{DFp}},$$

который сравнивается с критическим значением $F_{\kappa p}$ для 2(k-1) и *DFp* степеней свободы, где k – число регрессий.

Результаты расчёта представлены в таблице 7. Так как F(4.38) = 17.1956 > 2.63 ($\alpha = 0.05$), т.е. $F > F_{\kappa p}$, нулевая гипотеза (уравнения регрессии идентичны) отклоняется. Если провести расширенную проверку, то окажется, что нет статистически значимого различия в углах наклона регрессии на рис. 96, но есть статистически значимые различия в свободных членах регрессий.

I			1		,
Период	N	b	а	SS	DF
1975-1988	14	-0.2834	1.0949	0.8942	12
1989-2003	15	0.1700	1.0949	0.2143	13
2004-2018	15	0.2219	1.0199	0.6211	13
SSp				1.7297	38
SSt				4.8605	

Таблица 7. Параметры линейных регрессий, связывающих осеннюю температуру воздуха на МС и МС «Баренцбург», для разных периодов времени (описание обозначений приведено в тексте статьи).

Рассмотренный пример показывает, что использование регрессий, рассчитанных по коротким периодам (а нередко в работах ограничиваются всего несколькими годами параллельных измерений), для восстановления рядов в прошлом приводит к дополнительной ошибке, так как параметры этих регрессий могут менять свои численные значения на других временных интервалах из-за изменения макроциркуляционных условий. Данный факт свидетельствует в пользу использования оригинальных значений температуры воздуха на МС «Баренцбург» с 1932 г., вместо любого другого более короткого ряда на арх. Шпицберген, дополненного восстановленными значениями до 1932 г.

Выводы

Несмотря на переносы метеорологической площадки в Баренцбурге в 1978 и 1984 гг. принятые в климатологии статистические тесты не показывают признаков нарушения методической однородности в рядах температуры воздуха (средней месячной, среднемесячной минимальной и максимальной). Ряды температуры воздуха на ГМО «Баренцбург» можно использовать для решения задач региональной и глобальной климатологии за весь период наблюдений с 1932 г. Ряды на ГМО «Баренцбург» должны быть базовыми для оценок долговременных изменений климата на Шпицбергене и восстановления рядов на других МС, так как обладают наибольшей длиной среди всех других метеорологических станций архипелага., в том числе и по непрерывающейся серии (с 1947 г.).

Список литературы

1. Гольцберг И.А. Микроклимат СССР. Л.: Гидрометеоиздат, 1967. 282 с

2. Демин В.И., Анциферова А.Р., Чаус О.М. Влияние микроклиматических условий на расчёты городского острова тепла и тренды температуры в Мурманске // Тр. Гидрометцентра РФ. 2017. 363. С. 160-175.

3. Демин В.И. О роли антропогенных и естественных факторов в оценке городского острова тепла // Современные проблемы дистанционного зондирования Земли из космоса. 2019. Т. 16. № 5 С. 38-46 (в печати).

4. Иванов Б.В., Священников П.Н. Российская метеорология на Шпицбергене // Русский вестник Шпицбергена. 2012. № 12. С. 26-28. 5. Лобанов В.А., Жильцова Е.Л., Лемешко Н.А. Восстановление многолетних рядов температуры воздуха на европейской территории России // Метеорология и гидрология. 2005. № 2. С. 5-14.

6. Руководство по специализированному обслуживанию экономики климатической информацией, продукцией и услугами / Под редакцией д-ра геогр. наук, профессора Н.В. Кобышевой. СПб. 2008. 336 с.

7. Alexandersson H.A homogeneity test applied to precipitation data // J. Climatol. 1986. N. 6. P. 661-675.

8. Ambrozova K. and Laska K. Air temperature variability in the vertical profile over the coastal area of Petuniabukta, central Spitsbergen // Pol. Polar Res. 38 (1). P. 41-60. 2017.

9. European Climate Assessment & Dataset (ECA&D). Algorithm Theoretical Basis Document (ATBD)// ECA&D: Project number: EPJ029135. Royal Netherlands Meteorological Institute KNMI. Version : 10.7. 2013. Эл. док. Доступен по: https://www.ecad.eu/documents/atbd.pdf

10. Bingham C, Nelson LS. An approximation for the distribution of the Von Neumann ratio.Technometrics. 1981.23. pp. 285–288.

11. Buishand, T.A. Some Methods for Testing the Homogeneity of Rainfall Records // J. Hydrol.1982. 58. P. 11-27.

12. Nordli Ø., Hanssen-Bauer I. & Førland E.J. Homogeneity analyses of temperature and precipitation series from Svalbard and Jan Mayen. Klima 16/96. Oslo: Norwegian Meteorological Institute.1996.

13. Nordli Ø. The Svalbard Airport temperature series. //Bulletin of Geography, Physical Geography Series. 2010. 3. P. 5-25.

14. Nordli Ø., Przybylak R., Ogilvie A. E.J. & Isaksen K. Long-term temperature trends and variability on Spitsbergen: the extended Svalbard Airport temperature series, 1898–2012 // Polar Research. 2014. 33. 21349. http://dx.doi.org/10.3402/polar.v33.21349.

15. Pettitt A.N. A non-parametric approach to the change-point problem // Journal of Applied Statistics. 1979. 28. P. 126-135.

16. Rodionov, S.N., 2004: A sequential algorithm for testing climate regime shifts. Geophys. Res. Lett., 31, L09204, doi:10.1029/2004GL019448.

17. Von Neumann J. Distribution of the ratio of the mean square successive difference to the variance. Annals of Mathematical Statistics.1941.12. P. 367-395.

18. Zar H.J. Biostatistical Analysis. Pearson. 2009. 946 p.

ПАРАМЕТРИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ ЧУВСТВИТЕЛЬНОСТИ МОДЕЛИ МОРСКОЙ ЭКОСИСТЕМЫ

Еннэ А.И. ПетрГУ, Петрозаводск, enne.anastasia@gmail.com

Аннотация. В статье рассматривается применение метода Морриса для исследования чувствительности численной модели морской экосистемы BFM, а также сходимость метода Морриса.

Summary. We consider an implementation of the Morris method for sensitivity analysis of the Biogeochemical Flux Model along with convergence of this method.

Математические модели природно-технических систем зачастую насчитывают десятки нелинейных дифференциальных уравнений с большим числом параметров, значения которых определяются из наблюдений (например, [4]). Такие модели необходимо верифицировать, калибровать и адаптировать для других внешних условий. Анализ чувствительности предлагает набор методов для исследования отклика модели на изменения параметров. Целью нашей работы являлось проведение анализа чувствительности модели морской экосистемы BFM и исследование сходимости выбранного метода анализа чувствительности. Из всех методов анализа чувствительности мы выбрали метод Морриса [3], особенности которого позволяют его использовать для сложных моделей с большим числом параметров, где вычислительная стоимость каждого запуска модели может существенно ограничивать возможности численного анализа.

Модель BFM (Biogeochemical Flux Model) [4] – это численная модель морской экосистемы, которая была создана и поддерживается консорциумом научных центров Италии и ЮАР. Модель описывает циклы азота, кремния, кислорода, углерода, фосфора и хлорофилла, содержащихся в детрите, планктоне, растворённых и взвешенных в морской воде. Благодаря большому объёму данных, собранных в акватории Средиземного моря, параметры BFM позволяют ей очень точно приближать средиземноморские условия. В настоящее время ведётся работа по адаптации модели для моделирования биогеохимических процессов в Белом море [1].

Методы анализа чувствительности делятся на три категории: локальные, глобальные и скрининговые. Скрининговые методы используются на предварительном этапе исследования для того, чтобы из общего числа параметров выделить группу наиболее важных параметров, с которой в дальнейшем будет проводиться более тщательный анализ. Метод Морриса относится к скрининговым методам. Пусть результат работы нашей модели – это функция $y(x) = y(x_1, x_2, ..., x_k)$ от *k* параметров. Для простоты предполо-

жим, что x_1 принимают значения от 0 до 1. В методе Морриса на каждом этапе меняется ровно один параметр и вычисляется значение у. Для двух последовательных запусков модели считается так называемый элементарный эффект $EE_i = ((y(x_1, \dots, x_i + \Delta, \dots, x_k) - y(x_1, \dots, x_i, \dots, x_k))/\Delta$, где $(x_1, \dots, x_i, \dots, x_k)$ – вектор из параметров модели, а $(x_1, \dots, x_i + \Delta, \dots, x_k)$ – вектор, в котором *i*-ый параметр увеличен на Δ . Величина Δ определяется исходя из шага решётки дискретизации пространства параметров, а именно: пусть область значения каждого параметра дискретна и параметр принимает значения из множества 0, 1/(p-1), 2/(p-1), 1, где p чётно. Тогда Δ возьмём равным p/2/(p-1). Назовём последовательность векторов параметров, в которой каждый вектор отличается от предыдущего ровно в одной координате, траекторией. Метод Морриса заключается в выборе r траеткорий, вдоль которых считаются элементарные эффекты для каждого параметра. Таким образом, для каждого параметра получают выборку элементарных эффектов, затем в качестве меры важности параметра используется модуль среднего значения и дисперсия. Процедура выбора траекторий проходит следующим образом. Сначала случайно и равновероятно выбирается точка из пространства параметров, которая будет являться начальной для всех траекторий. Конечная точка определяется начальной однозначно, а именно, её координаты отличаются от соответствующих координат начальной точки на Δ , которая стремится к 1/2 при уменьшении шага дискретизации. И, наконец, траектория получается равновероятным выбором случайной перестановки параметров и их последовательным изменением на Δ. Для метода Морриса число запусков модели равняется r(k+1), где r – число траекторий, а k – количество исследуемых параметров.



Рис. 1. Графическое представление результата работы метода Морриса для хлорофилла (а) и биомассы (б).



Рис. 2. Сходимость ранжирования для модуля среднего (а) и сходимость ранжирования для медианы (б).

Из всех параметров модели мы выбрали 178 экологических параметров, описывающих межвидовое взаимодействие микроорганизмов, скорости усвоения ими химических веществ и т. д., поскольку значения этих параметров могут существенно меняться при изменении климатических условий, и исследовали их влияние на хлорофилл и биомассу. Графически можно представить результаты в виде множества точек, расположенных на координатной плоскости, где по горизонтальной оси отмечается модуль среднего значения, а по вертикальной оси – дисперсия распределения элементарных эффектов. Таким образом, каждая точка на рисунке – это параметр, причём, чем дальше от начала координат он находится, т. е. чем больше дисперсия и модуль среднего, тем более важным этот параметр является (рис. 1).

Важным параметром метода анализа чувствительности является его сходимость. Для скрининговых методов можно рассмотреть три типа сходимости. Сходимость индексов чувствительности достигается, если значения мер важности меняются в небольшой окрестности или не меняются вовсе с увеличением числа траекторий. Сходимость ранжирования означает, что, начиная с некоторого момента, упорядочение элементов по степени важности не меняется при добавлении новых траекторий. Сходимость скрининга достигается, если разбиение параметров на важные и не важные перестаёт меняться. Мы составили рейтинг важности параметров для хлорофилла, используя модуль среднего значения в качестве меры важности, а затем проследили за изменениями ранжирования группы параметров, в итоге получивших наивысший рейтинг. Также мы рассмотрели рейтинг, основанный на альтернативной мере важности, а именно, на медиане. На рисунке 2 видно, что при использовании медианы метод сходится быстрее в смысле сходимости ранжирования, чем при использовании модуля среднего значения. Этот результат совпадает с результатами, полученными в работе [2].

Нам удалось выявить важные экологические параметры модели BFM с помощью метода Морриса и изучить его сходимость ранжирования с разными мерами чувствительности.

Список литературы

1. Толстиков А.В., Чернов И.А. Изменчивость биогеохимических процессов в Белом море для разных климатических условий по данным моделирования // Серия Экспериментальная биология. 2019. №. 6. С. 92-102.

2. Awad M. et al. Convergence of sensitivity analysis methods for evaluating combined influences of model inputs // Reliability Engineering & System Safety. 2019. T. 189. C. 109-122.

3. Morris M.D. Factorial sampling plans for preliminary computational experiments // Technometrics. 1991. T. 33. №. 2. C. 161-174.

4. Vichi M. et al. The biogeochemical flux model (BFM): Equation description and user manual, BFM version 5.1., BFM Report series N.1, Release 1.1, August, 2015. Bologna, Italy. 2015. 104 pp.

АНАЛИЗ ГОДИЧНОЙ ДИНАМИКИ ТЕМПЕРАТУРЫ ГОРНЫХ ПОЧВ С ПРИМЕНЕНИЕМ МЕТОДОВ ОПИСАТЕЛЬНОЙ СТАТИСТИКИ В ВЫСОТНОМ ГРАДИЕНТЕ ГОРЫ КУЭЛЬПОРР

Штабровская И.М., Зенкова И.В.

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

Аннотация. Представлена возможность использования статистических методов и их основные возможности: описательная статистика, дисперсионный анализ и корреляционный анализ при обработке полученных данных 2018-2019 гг. горы Куэльпорр. Был установлен ход годовой динамики температуры высотном градиенте горы Куэльпорр с шагом 50 метров над ур. м. Полученные данные сравнивали с контрольным участком, расположенным в 3 км от г. Апатиты.

Summary. The possibility of using statistical methods and their main capabilities is presented: descriptive statistics, analysis of variance and correlation analysis when processing the data obtained in 2018-2019 Kuelporr (Khibiny Mountains). The course of the annual temperature dynamics was established for the high-altitude gradient of Mount Kuelporr with a step of 50 meters above sea level. m. The data obtained were compared with a control site located 3 km from Apatity.

Объекты и методы

Колебания температуры – важный компонент почвенного микроклимата. Следуя годичным циклам изменения температуры воздуха, температура почвы оказывает существенное влияние на многие протекающие в ней процессы.

С тепловым режимом почв тесно связаны начало и окончание вегетационного периода, пространственное размещение растений и животных, характер распространения корневых систем, скорость поступления к корням питательных элементов. Температура почвы влияет на скорость поступления воды в корни растений, на транспирацию, на продуктивность растительности.

Температурный режим почв регулирует численность микроорганизмов и их активность, минеральные преобразования и процессы разложения органических остатков и трансформации почвенного гумуса. Контролируются фазовые переходы в системе почва-почвенный раствор-почвенный воздух, процессы растворения солей и газов, скорость выветривания минералов. Таким образом, исследования тепловых свойств почв и хода годовой динамики их температур необходимы при детальных исследованиях всех процессов, протекающих в почвах, при количественных расчётах соле-, водо- и газопереносов [2].

Температурный режим горных почв Хибин охарактеризован в значительном числе работ [3-9]. На сегодняшний день изучение температурного



Рис. 1. Местоположение Хибинского горного массива.

режима как зональных лесных, так и горных почв Хибин проводится сотрудниками лаборатории Наземных экосистем ИППЭС КНЦ РАН.

Основной объект наших исследований – Хибины. Хибинский массив расположен на северо-западе европейской части России – в Мурманской области, которая географически охватывает территорию Кольского п-ова и часть материка (рис. 1). Площадь Хибин оценивается в 1300 км², что составляет 0.89 % от общей площади Мурманской области, равной 144.9 тыс. км² [1].

Vuostov	Куэльпорр, 2018-2019 гг.						
участок	1	2	3	4	5	5	
Экспозиция склона	C3-3	C3-3	C3-3	C3-3	C3-3	5	
Горно- растительный пояс	Горно- таёжный пояс	Горно- таёжный пояс	Горно- таёжный пояс	Пояс берёзовых криволесий	Горная тун- дра	5	
Высота над ур. м., м	300	350	400	450	500		
Координаты	67°47'26,2" 33°36'20,5"	67°47'23,5" 33°36'34,8"	67°47'23,2" 33°36'40,0"	67°47'22,3" 33°36'45,2"	67°47'24,5" 33°36'29,2"		

Таблица 1. Характеристика участков горы Куэльпорр.

В полевые сезоны 2018 и 2019 гг. были получены данные по годичной динамике температуры атмосферного воздуха, поверхности и толщи подстилки в высотном градиенте Хибинской горы Куэльпорр (67°47′ с.ш., 33°36′ в.д.). За период с сентября 2018 по сентябрь 2019 гг. определены следующие показатели: средние значения температуры, минимальные темпера-



Расположение исследованных участков. Ущелье Скальное, 2017 г.



Горно-таёжный пояс, 300 м. н. ур. м. Горно-таёжный пояс, 350 м. н. ур. м.



Горно-таёжный пояс, 400 м. н. ур. м. Пояс берёзовых криволесий, 450 м. н. ур. м.



Рис. 2. Участки горной тундры, берёзового криволесья и горно-таёжного поясов, обследованные на склоне СЗ-3 горы Куэльпорр.

Горная тундра, 500 м. н. ур. м.

туры, максимальные температуры, вариабельность температуры, сумма температур (положительные и отрицательные). Характеристика участков приведена в таблице 1 (рис. 2).

На каждом участке в подстилку на глубину 5 см, на поверхность подстилки и воздух на высоту 2 м закладывали термохроны серии TPB-2, TP-1 и TP-2 с предельным диапазоном измерений от -25 до +40 °C (рис. 3). Термохроны предварительно программировали на измерение температуры с периодичностью 2 часа (внутрисуточная динамика). По 12 измерениям за каждые сутки рассчитывали среднесуточные значения $Tcym_{cp}$. По усреднённым за каждый месяц среднесуточным значениям вычисляли среднемесячные температуры подстилок $Tmec_{cp}$. Одновременно с установкой термохронов на всех участках были установлены почвенные ловушки для изучения динамики таксономического разнообразия и численности почвенной фауны. Получены данные по фаунистическому и микробиологическому разнообразию и интенсивности дыхания горно-лесных подстилок в градиенте высот от 300 до 500 м над ур. м. Результаты обрабатываются.



Рис. 3. Закладка термохронов на глубину 5 см, воздух и на поверхность подстилки.

Таблица 2. Объём температурных измерений, выполно	енных на участках
горы Куэльпорр в полевые сезоны 2018-201	9 гг.

	гора Куэльпорр					Всего
Показатели / Участки		350 м	400 м	450 м	500 м	5
Число исследованных участков	1	1	1	1	1	5
Число заложенных термохронов, шт.	3	3	3	3	3	15
Дата начала / окончания измерения температуры	17.09.2018 - 03.09.2019				IX по IX	
Период измерения температуры, сут.			352			352
Количество полученных показаний термохрона, ед.	9017	9012	9013	9015	9015	45072

После выемки термохронов из почвы данные переносили на компьютер при помощи специального USB-переходника и управляющей программы (рис. 4). Далее полученные данные обрабатывались в программах Excel и Statistica-7 (описательная статистика, корреляционный и дисперсионный анализ).

За каждые сутки по 12 измерениям 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, – среднегодовые значения ($Tcod_{cp}$).

Сравнивали максимальные и минимальные внутрисуточные, среднесуточные и среднелетние температуры, а также суммы эффективных температур в пределах высотного градиента с шагом в 50 метров для 5 участков – склона СЗ-3 с использованием *t*-критерия Стьюдента. Методом корреляционного анализа оценивали зависимость годовой динамики среднесуточной температуры подстилок и атмосферного воздуха за аналогичный период исследования.

Динамику температуры атмосферного воздуха за период исследования анализировали по собственным полученным данным. Для оценки достоверности коэффициентов корреляции при корреляционном анализе с метеоданными использовали *t*-критерий Стьюдента.

Вариабельность ежемесячной и летней динамики температуры подстилок оценивали по коэффициенту вариации *СV*, %.

Достоверность различий температурной динамики подстилок между участками разных высотных поясов оценивали методом дисперсионного анализа с использованием *F*-критерия Фишера. Все оцениваемые параметры сведены в таблицу 3.

Показатели	Месячная динамика, за VII, VIII, IX	Годовая динамика за 352 сут
Минимальные температуры, °С	T _{MEC} min	T _{rod} min
Максимальные температуры, °С	T _{MEC} max	Т _{год} тах
Колебания температуры, °С	$T_{MEC}max - T_{MEC}min$	$T_{\Gamma O Z} max - T_{\Gamma O Z} min$
Вариабельность температуры (коэфф. вариации, %)	$CV_{\scriptscriptstyle MEC}$	CV _{год}
Среднее значение температуры, °С	Среднемесячная температура $T_{_{MEC}}cp$	Среднелетняя температура <i>Т_{год}ср</i>
Сумма положительных температур, °С	$\sum T_{_{MEC}} cp > 0$ $\sum T_{_{MEC}} cp \ge +5$ $\sum T_{_{MEC}} cp \ge +10$	$\sum T_{rod} cp > 0$ $\sum T_{rod} cp \ge +5$ $\sum T_{rod} cp \ge +10$

Таблица 3. Температурные показатели, рассчитанные на основе данных термохронов.

Результаты и обсуждение

На протяжении периода измерений с 17.09.2018 по 03.09.2019 гг. в горно-таёжном поясе (300-400 м. н. ур. м) среднегодовые значения температуры подстилки изменялись от -4...+7 °C, в то время как среднегодовая температура воздуха и поверхности изменялась от -11...+9 °C. В поясе берёзового криволесья (450 м. н. ур. м) и горной тундры (500 м. н. ур. м.) температура изменялась: в подстилке от -2...-4 °C до +6...+7 °C; на поверхности от -3...-5 °C до +8 °C; воздух от -9...-8 °C до +8...+9 °C (рис. 4). Различия среднелетних значений температуры на участках были достоверны для подстилки и поверхности, но недостоверны для воздуха (табл. 4).



Рис. 4. Среднегодовые значения температуры для поверхности, подстилки и воздуха на исследованных участках.

Различия в динамике среднесуточной температуры воздуха за исследованный период (233 сут) между исследуемыми участками также были недостоверны (F < 1.94 при p > 0.16) и объяснялись её сходным изменением: на протяжении июля (с 04.07.19 по 29.07.19 число, всего 26 суток) наблюдался наибольший прогрев подстилок до +19...+22 °C и последующий постепенный осенний спад $Tcym_{cp}$ с середины сентября (рис. 5).

Таблица 4. Значения *t*-критерия Стьюдента при сравнении среднегодовой температуры подстилок, воздуха, поверхности (*T*год_с) между участками.

Tst	Участки									
Поверхность	300/350	300/400	300/450	300/500	350/400	350/450	350/500	400/450	400/500	450/500
	2.63	2.15	0.21	1.89	0.47	2.57	0.84	2.05	0.34	1.78
Подстилка	2.97	1.70	0.30	1.35	1.28	2.70	2.01	1.42	0.55	1.03
Воздух	0.76	0.95	1.39	0.76	0.20	0.63	0.001	0.43	0.20	0.63

Примечание. Различие достоверно при t(998; 0.05) ≥ 1.64. Красным цветом отмечены достоверные различия.



Рис. 5. Динамика среднесуточной температуры воздуха (Тсутср, °С) на исследуемых участках горы Куэльпорр (300, 350, 400, 450 и 500 м. н. ур. м.).

Различия в динамике среднесуточной температуры подстилки и поверхности в высотных поясах за исследованный период (352 сут) были достоверны (F > 4.03 при p < 0.05). Наибольший прогрев $Tcym_{cp}$ подстилок до +16 ... +22 °C в первой декаде (рис. 6).



Рис. 6. Динамика среднесуточной температуры подстилки и поверхности (Тсутср, °С) на исследуемых участках горы Куэльпорр (300, 350, 400, 450 и 500 м. н. ур. м.).

В целом динамика *Tcym*_{*cp*} подстилок горно-таёжного пояса на протяжении 352 сут определялась динамикой температуры атмосферного воздуха, что подтверждается достоверными значениями коэффициента 0.39>*r*>0.62.

На протяжении сезона *Тсут_{ср}* атмосферного воздуха превышала таковую в подстилках на +1.3 °C и +2.8 °C (рис. 7).

На протяжении всего исследуемого периода вариабельность (*CV*, %) температуры была выше в подстилках горно-растительных поясов по сравнению с воздухом и на поверхности (рис. 8).

В целом большая вариабельность температуры в подстилке по сравнению с воздухом и поверхностью определялась различиями в минимальных



Рис. 7. Корреляция годовой динамики среднесуточной температуры подстилки с (Tcym_{cp}, °C) с температурой атмосферного воздуха сентябрь 2018 по сентябрь 2019 г. на исследуемых участках горы Куэльпорр (300, 350, 400, 450 и 500 м. н. ур. м.).



Рис. 8. Значения коэффициента вариации (СV, %) средней годовой температуры подстилок, воздуха и поверхности (Тгод_{ст}) на исследуемых участках горы Куэльпорр.



*Рис. 9. Минимальные и максимальные значения температуры подстилок, воздуха и поверхности (Тгод*_{ст}) на исследуемых участках горы Куэльпорр.

значениях температуры подстилок и, в меньшей степени, – различиями в её максимальных значениях (рис. 9).

При сравнении годовой динамики среднесуточной температуры подстилки, воздуха и поверхности с $(Tcym_{cp}, {}^{\circ}C)$ на исследуемых участках горы Куэльпорр с контрольным участком за сходный период с 15.05.19 по 03.09.19 (рис. 10). Контрольный участок располагается в лесном массиве района экспериментального участка ПАБСИ КНЦ РАН в 3 км от г. Апатиты [8].



Рис. 10. Динамика среднесуточной температуры подстилки, поверхности и воздуха ($Tcym_{cp}$, $^{\circ}C$) на исследуемых участках горы Куэльпорр (300, 350, 400, 450 и 500 м. н. ур. м.) и на контрольном участке.

В целом, наблюдается сходная динамика по всем исследованным участкам. Наибольший прогрев начинается с 04.06.19 по 28.07.19, затем наблюдается постепенный осенний спад.

Заключение

Благодаря математическому аппарату стало возможным обрабатывать большие объёмы, получаемых нами данных, строить модели, создавать базы данных, а кроме этого получать наиболее достоверные результаты.

Таким образом, обобщая полученные данные, в годовой динамике температуры атмосферного воздуха, поверхности и толщи подстилки (на глубине 5 см) в высотном градиенте наблюдалось устойчивое снижение температур ниже $Tcym_{cp} = 0$ °C (всего 220 суток) с 29.09; обратный весенний переход – с 5-7 мая. В подстилках контрольного участка в сосново-мелколиственном северотаёжном лесу установление снегового покрова наблюдалось на 26 суток позже, а весенний сход снега с 12 мая, что на 5-7 суток позже, чем в горно-растительных поясах горы Куэльпорр. Средние годовые значения температуры ($Teod_{cp}$) в горно-растительных поясах горы Куэльпорр варьировали от +1.53 ± 0.3 °C на 300 м до 2.67 ± 0.2 °C на 350 м, при этом наименьшие значения характерны для подстилок елового леса на высоте 300 м, а наибольшие значения $Teod_{cp}$ характерны для подстилок горно-тундрового пояса на высоте 450 м.

Список литературы

1. Атлас Мурманской области. М.: ГУГК, НИГЭИ, ЛГУ, 1971. 34 с.

2. Белицина, Г.Д. Почвоведение: учебник для университетов. В 1 ч. Почва и почвообразование / Г.Д. Белицина, В.Д. Василевская, Л.А. Гришина и др. М.: высш.шк., 1988. 400 с.

3. Крючков, В.В. О факторах, определяющих верхний предел березы и ели в Хибинских горах / В.В. Крючков // Вестн. МГУ, 1957. № 3. С. 58-71.

4. Крючков В.В. Факторы определяющие верхние пределы растительных поясов в Хибинских горах / В.В. Крючков // Ботанич. журнал, 1958. Т. 43. № 6. С. 16.

5. Крючков В.В. Границы древесной растительности как фиксаторы климатических условий / В.В. Крючков // Информ. сборн. о работе географического ф-та МГУ по МГГ, 1958. № 3. С. 47.

6. Крючков В.В. Некоторые данные о температуре почв в различных растительных сообществах Мурманской области. М.-Л., 1961. 33 с.

7. Шмакова Н.Ю., Ушакова Г.И., Костюк В.И., Горно-тундровые сообщества Кольской Субарктики (эколого-физиологический аспект). Апатиты: КНЦ РАН, 2008. 167 с.

8. Штабровская И.М., Зенкова И.В. Исследования температуры лесных подзолов Мурманской области: ретроспективный анализ и современные методы // Экологические проблемы северных регионов и пути их решения: Тезисы докладов VII Всероссийской научной конференции с международным участием, посвящённой 30-летию Института проблем промышленной экологии Севера ФИЦ КНЦ РАН и 75-летию со дня рождения доктора биологических наук, профессора В.В. Никонова (Апатиты, 16-22 июня 2019 г.). / Е.А. Боровичёв, О.И. Вандыш (ред.). Апатиты. Изд-во: ФИЦ КНЦ РАН. 2019. С. 200-202.

9. Штабровская И.М., Зенкова И.В. Исследование температуры горных почв Хибин с использованием автоматических термохронов // Фундаментальные концепции физики почв: развитие, современные приложения и перспективы: Сборник трудов конференции., посвящённой 90-летию со дня рождения проф. МГУ А.Д. Воронина (Москва, 27-31 мая 2019). М., 2019. С. 781-784. (URL: https://lomonosov-msu.ru/ file/event/5470/eid5470_attach_54 5020d81f77c3bcfea19169d24f72cce32807a9.pdf).















МЕХАНИЗМ ТЕКТОНИЧЕСКОГО РАССЛОЕНИЯ ЗЕМНОЙ ОБОЛОЧКИ, ЗАКОН ВСЕМИРНОГО ТЯГОТЕНИЯ, ЭФФЕКТ ССВ И ГРАВИТАЦИОННЫЕ ВОЛНЫ

Ильченко В.Л.

Геологический институт Кольского научного центра РАН, Апатиты, Россия

МЕХАНИЗМ ТЕКТОНИЧЕСКОГО РАССЛОЕНИЯ ЗЕМНОЙ ОБОЛОЧКИ, ЗАКОН ВСЕМИРНОГО ТЯГОТЕНИЯ, ЭФФЕКТ ССВ И ГРАВИТАЦИОННЫЕ ВОЛНЫ

Ильченко В.Л

Геологический институт Кольского научного центра РАН, Апатиты, Россия (











СОДЕРЖАНИЕ

Предисловие
КРИСТАЛЛОГРАФИЯ, КРИСТАЛЛОХИМИЯ
Voytekhovsky Y.L., Stepenshchikov D.G . Scientific school of crystallomorphology of St. Petersburg Mining University
Войтеховский Ю.Л., Степенщиков Д.Г. Научная школа кристалломорфологии Санкт-Петербургского Горного университета
Войтеховский Ю.Л., Степенщиков Д.Г. О простейших выпуклых полиэдрах точечных групп комбинаторной симметрии 422, 4/ <i>m</i> , -3, 6, 622, 6/ <i>m</i> , <i>m</i> -3, 432
Войтеховский Ю.Л. Основная теорема кристаллографии
Коломейкина Е.В., Шутов А.В. О числе разбиений плоскости на полимино или полигексы заданной площади
Кучериненко Я.В., Макаров В.С. Кристаллография многогранника Иванова Q ₁
Мокрова А.А., Малеев А.В., Шутов А.В. Координационные последовательности графа usm
Степенщиков Д.Г., Чернявский А.В. Многогранники: от матрицы к модели
Ярыгин О.Н. О нереализуемости определённого вида гранного символа полиэдра

ГЕОЛОГИЯ, ГЕОФИЗИКА, ГЕОХИМИЯ

Voytekhovsky Y.L. E.S. Fedorov's (mathematical) approach in analysis of petrographic structures
Войтеховский Ю.Л. Фёдоровский (математический) подход к анализу петрографических структур
Иванов А.С., Стегницкий Ю.Б., Феликс Т. Методика определения в кимберлитах парастерезисов хромдиопсидов с пиропами
Ильченко В.Л. Механизм тектонического расслоения земной оболочки, закон всемирного тяготения, эффект ССВ и гравитационные волны
Каржавин В.К. Математическое подтверждение условий образования алмазов

Ковалевский М.В. К вопросу о разработке пластинчатых	
преобразователей повернутых срезов с целью применения	
в задачах геофизики	
Ковалевский М.В. К вопросу определения графических	
параметров в геофизических задачах акустополярископии	

БИОЛОГИЯ, ЭКОЛОГИЯ

Демин В.И., Иванов Б.В. Проверка климатической однородности	
рядов температуры воздуха в Баренцбурге (Шпицберген)	134-150
Еннэ А.И. Параметрический анализ чувствительности модели морской экосистемы	151-154
Штабровская И.М., Зенкова И.В. Анализ годичной динамики	
температуры горных почв с применением методов описательной	
статистики в высотном градиенте горы Куэльпорр	155-164
ФОТОРЕПОРТАЖ	. 165 - 177

<i>Труды XVI Всероссийской научной школы "Математические исследования в естественных науках"

Апатиты, 22 оқтября 2019 г.

*<i>Пира*ж 100 экз.