

*Пруды IV Всероссийской научной школы*

*“Математические исследования  
в кристаллографии,  
минералогии и  
петрографии”*

*27-28 октября 2008 г.  
г. Анапиты*



*Геологический институт КНЦ РАН  
Кольское отделение РМО*

*Пруды IV Всероссийской научной школы*

*“Математические исследования  
в кристаллографии, минералогии  
и петрографии”*

*Апатиты, 27-28 октября 2008 г.*



*Апатиты, 2008*

**УДК 548.12 + 549.21 + 552.122  
ISBN 978-5-91137-068-8**

**Труды IV Всероссийской научной школы “Математические исследования в кристаллографии, минералогии и петрографии”. Апатиты, 27-28 октября 2008 г. / Сост. и ред. Ю.Л. Войтеховский. – Апатиты: Изд-во К & М, 2008. – 167 с.**

В сборнике представлены доклады, прочитанные на IV Всероссийской научной школе “Математические исследования в кристаллографии, минералогии и петрографии”, состоявшейся в г. Апатиты 27-28 октября 2008 г. Они объединены идеей упорядоченности, разнообразно проявляющей себя в кристаллах минералов, горных породах и биологических структурах. Биологическая тематика все активнее заявляет о себе в рамках научной школы. Представленные к печати статьи показывают богатый арсенал методических установок и математических подходов, развиваемых авторами.

Сборник представляет интерес для кристаллографов, минералогов, петрографов и биологов, использующих в своих исследованиях математические методы, а также для студентов названных специальностей.

**Рекомендовано к печати Ученым советом Геологического института КНЦ РАН и Советом Кольского отделения РМО**

Издано при финансовой поддержке Комиссии РАН по работе с молодежью (программа “Поддержка молодых ученых – 2008”) и Департамента экономического развития при Правительстве Мурманской области.

**Художественное оформление А.И. Марковой**

© А.И. Маркова, 2008  
© Коллектив авторов, 2008  
© Кольское отделение РМО, 2008  
© Геологический институт КНЦ РАН, 2008

**Глубокоуважаемые коллеги,**

я рад приветствовать вас в связи с открытием IV Всероссийской научной школы “Математические исследования в кристаллографии, минералогии и петрографии”, проводимой Геологическим институтом КНЦ РАН и Кольским отделением Российского минералогического общества. Финансовую поддержку школе оказали Комиссия РАН по работе с молодежью и Департамент экономического развития при Правительстве Мурманской области.

Наша конференция, задуманная на базе творческой лаборатории, объединившей студентов факультета информатики и прикладной математики Кольского филиала Петрозаводского госуниверситета, аспирантов и молодых ученых Геологического института КНЦ РАН, получила известность далеко за пределами Кольского региона. Это показывает устойчивый интерес молодежи к математическим исследованиям в кристаллографии, минералогии и петрографии. Время показало, что в нашем педагогическом эксперименте эффективно реализовалась схема подготовки кадров: университет – аспирантура (докторантура) – Российская академия наук.

Неожиданно для организаторов школы, биологическая тематика в этом году едва не стала преобладающей. Возможно, это знак времени, состоящий в том, что, проникая все глубже в строение живого вещества и пытаясь математически описать его, биологи открывают для себя фундаментальные основы кристаллографии. Так ли это – покажет время, мы же рады способствовать взаимодействию всех естественнонаучных дисциплин. В сборник включены все доклады участников школы, своевременно представленные в оргкомитет. Несколько докладов приняты к опубликованию заочно.

Искренне благодарю всех за участие в школе. В первую очередь это касается наших гостей. Особую признательность выражаю д.б.н. Г.А. Савостьянову (Санкт-Петербург) и д.ф.-м.н. А.А. Шестакову (Апатиты) за яркие выступления перед молодежной аудиторией с лекциями, доставившими истинное интеллектуальное удовольствие.

**Директор Геологического института КНЦ РАН**

**Председатель Кольского отделения РМО**

**д.г.-м.н., проф.**



**МАТЕМАТИЧЕСКИЕ ИССЛЕДОВАНИЯ В  
КРИСТАЛОГРАФИИ, МИНЕРАЛОГИИ И ПЕТРОГРАФИИ**



# МОДАЛЬНЫЙ АНАЛИЗ ГОРНЫХ ПОРОД ПО ДЕЛЕССУ- РОЗИВАЛЮ-ГЛАГОЛЕВУ: К ИСТОРИИ ВОПРОСА

Войтеховский Ю.Л.  
Геологический институт Кольского НЦ РАН  
Апатиты; <[woyt@geoksc.apatity.ru](mailto:woyt@geoksc.apatity.ru)>

**Аннотация.** В статье дан краткий исторический обзор истоков модального анализа горных пород под микроскопом. Внимание акцентировано на том, что, несмотря на компьютеризацию метода, его математическое обоснование до сих пор не исчерпано. Показано, что ссылки некоторых авторов на принцип Кавальери являются некорректными и лишь затеняют суть проблемы. Сделан вывод о том, что повышение точности метода требует развития стереологического анализа.

**Summary.** A brief historical review of the modal analysis of rocks under the microscope is given in the paper. It is emphasized that the mathematical background of the method is not exhausted up to now despite the fact that it is highly computerized. The references to the Cavalieri principle are shown to be incorrect and shade the problem. It is concluded that the higher precision of the method needs the stereological analysis to be developed.

Знание модального состава горной породы или руды весьма важно для решения петрологических и минералого-технологических вопросов. Некогда велись весьма ожесточенные дискуссии о том, какие виды анализа (геометрические под микроскопом или количественно-минералогические с дроблением горной породы и разделением фаз комплексом методов) быстрее ведут к цели и дают более точный результат [1]. Истина оказалась посередине – у каждого подхода нашлись достоинства и недостатки общего порядка и, в особенности, применительно к конкретным горным породам и рудам с их огромным диапазоном составов и структурно-текстурных характеристик. В данной статье коротко обсуждаются истоки модального анализа горных пород под микроскопом, его математические основания и перспективы.

Сегодня модальный анализ горных пород под микроскопом выполняется с помощью анализаторов изображений, в состав которых входят компьютерные системы. Вот наиболее удачные из них: Magiscan, Quantimet, Videolab, System III, Vids II (Великобритания), Videoplan, IBAS, Leitz TAS Plus (ФРГ), Ommimet (ФРГ-США), Pericolor (Франция), Omega (Польша), Robotron (ГДР). Отечественные производители поставляли анализаторы: Свят (ИКИ РАН – Дезинтегратор), Video-Master (ООО “НВП Центр ЭСТАгэо”) и МИУ-5м (ЛОМО ЦКБ). Этот немалый список создает иллюзию благополучия и прогресса. Но в рассматриваемом нами аспекте ситуация мало изменилась со времен создания метода. Еще раз подчеркнем, что имеющиеся компьютер-

ные системы позволяют охарактеризовать изображение различными параметрами, мгновенно выполнить сложные математические пересчеты и вывести результаты на печать. Но фундаментальный вопрос состоит в том, насколько характеристики двумерных или одномерных сечений минеральных зерен соответствуют искомым характеристикам реальных зерен для произвольной горной породы (рис. 1)?

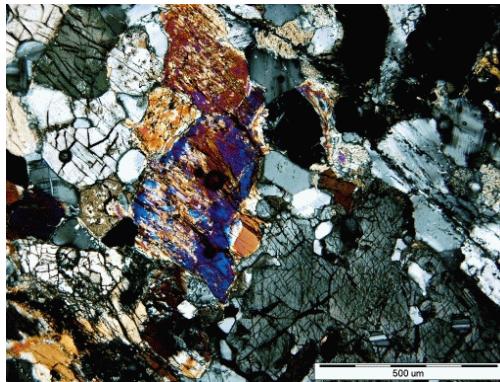


Рис. 1. Сечение горной породы (в данном случае ее петрографический тип не важен). Вопрос состоит в том, в какой мере метрические параметры сечений отвечают таковым самих зерен.

координат ХУZ. Обозначим  $p(z)$  площадь некоторой минеральной фазы в плоскости, непрерывно скользящей вдоль Z. Тогда объем фазы в образце равен:  $V = \int p(z)dz$ . В силу естественных причин площадь  $p(z)$  заключена между минимумом m и максимумом M. Поэтому  $mZ < V < MZ$ , где Z – высота образца. Для случая, когда  $p(z) = \text{const} = p$ , объем фазы равен  $pZ$  – объему цилиндра с основанием  $p$  и высотой  $Z$ . То же верно для любой другой фазы, из чего сразу следует приведенное выше соотношение, означающее по сути, что отношение объемов цилиндров с равными высотами равно отношению площадей их оснований. Итак, главное условие, на котором стоит метод,  $p(z) = \text{const}$ . По Делессу, оно должно соблюдаться для «достаточно больших» сечений образца тем точнее, чем равномернее фаза распределена в горной породе.

Легко видеть, что на практике эти условия не соблюдаются. Варьирующие в широком диапазоне площадные доли минеральных фаз обычно суммируются для “достаточно большого” числа шлифов (разных по площади и потому имеющих разный “вес” в статистической совокупности) и принимаются за объемные доли. Эта процедура не имеет отношения к методу

В методе Делесса [2] утверждается, что объемные доли n пордообразующих фаз равны их площадным долям в плоских сечениях, измеренным так или иначе:  $dV_1 : dV_2 : \dots : dV_n = dS_1 : dS_2 : \dots : dS_n$ . Делесс опробовал свой метод на макроскопических образцах, Солла (W.J. Sollas, 1887-1892) – на зарисовках петрографических шлифов, Джоли (J. Joly, 1903-1905) – на их микрофотографиях. Обоснование метода выполнено в целом корректно. Делесс рассуждал так. Пусть образец горной породы соотнесен с прямоугольной декартовой системой

Делесса ни в случае, когда каждый новый шлиф принимается за последовательное сечение образца, скользящее вдоль  $Z$ , ни тогда, когда все шлифы в совокупности представляются его единственным сечением. На практике обычно  $p(z) \neq \text{const}$ . Влияние этого обстоятельства на точность метода изучалось многими авторами уже на заре его применения [3, 4].

Акер (A. Hacquert. *Modification de l'appareil de Shand et son employ dans l'analyse mineralogique quantitative des roches meubles*. Liege, 1929. Цит. по [5, с. 15-16]) обосновал метод Делесса ссылкой на принцип Кавальери. В работе “*Geometria Indivisibilium continuorum nova quadam ratione promota*” (1635) (Геометрия, изложенная новым способом при помощи неделимых непрерывного. М.-Л.: Гостехиздат, 1940. Цит. по [6]) Кавальери развел “метод неделимых” определения площадей и объемов. Неделимыми он назвал параллельные хорды плоской фигуры или плоские сечения трехмерной фигуры и ввел понятие “суммы всех неделимых” внутри контура фигуры, ставшее зародышевой формой определенного интеграла. Принцип Кавальери формулируется следующим образом: *если при пересечении двух тел плоскостью, параллельной некоторой ранее заданной плоскости, получаются сечения равной площади, то объемы тел равны между собой*. Это положение (и аналогичное ему для плоских фигур) было известно древнегреческим математикам, и Кавальери, строго говоря, его доказывает, а не принимает как принцип. Труды Кавальери сыграли большую роль в развитии интегрального исчисления. Но в целом оно пошло по более плодотворному пути разложения величины на элементарные части того же измерения. Неправильный шаг Кавальери состоял в рассмотрении плоской фигуры как суммы конечного числа узких прямоугольных полосок, а трехмерной фигуры как суммы конечного числа цилиндрических пластинок вместо рассмотрения их как *пределов* указанных сумм [7-10].

Автор статьи встречал рассуждения коллег, пользующихся методом Делесса, почти повторяющие историческую ошибку Кавальери: “Поскольку петрографический шлиф весьма тонок, то различием сечений минерального зерна на его двух сторонах можно пренебречь. Тогда объем зерна в теле шлифа определяется как объем цилиндра с высотой, равной толщине шлифа, а отношения объемов нескольких зерен – как отношения площадей оснований, то есть сечений, что и требовалось доказать. А если это верно для одного шлифа, то верно и для других...” Суть софизма кроется в мелочах, которыми предлагается пренебречь. Действительно, *конечная сумма бесконечно малых величин тоже бесконечно мала*. Но объем тела есть интеграл, то есть общий предел верхней и нижней сумм Дарбу, которые суть *суммы бесконечно большого числа бесконечно малых величин* – ими пренебречь уже нельзя.

Через 50 лет после Делесса, Розиваль повторил его рассуждение, понизив на 1 размерность пространства. “В соответствии с принципом

Делесса, объем содержащихся в породе составных частей сведен к площади их сечений. Но в соответствии с простыми фундаментальными положениями аналитической геометрии она может быть далее определена с помощью простой суммы длин, если исходить из тех же соображений, которые руководили Делессом, когда он предпринял редукцию объемного отношения к площадному. Итак, мы видим, что в методе Делесса в качестве подлежащего измерению элемента тела фактически служит материальная поверхность, очень малая толщина  $dz$  которой может считаться постоянной. Такую материальную поверхность представляет собой всякий прозрачный шлиф, если он был изготовлен столь тонким, что все подлежащие измерению составные части породы фактически пересекаются его двумя, лишь на несколько сотых долей миллиметра отстоящими друг от друга параллельными плоскостями. Вместо этой материальной поверхности в качестве подлежащего измерению элемента я теперь беру материальную линию, поперечный размер которой теоретически выражается бесконечно малой величиной  $dydz$ , которую следует рассматривать постоянной и конечные отрезки которой  $x_1, x_2, x_3 \dots$  дают нам меру относительного количества минеральных компонентов в породе. Таким образом, вместо породного листа Делесса появляется породная нить, в высшей степени тонкая призма, приблизительно сравнимая с чрезвычайно тонким керном скважины, подобно измеряющему зонду пронзающая породу и в линейных долях ее составных частей сообщающая нам об их объемных долях в самой породе.

Эту измерительную материальную линию, состоящую из отдельных однородных отрезков внутри пересекаемых минеральных зерен, я называю количественной индикатрисой. В отношении суммы длин сечений, приходящихся на определенный минерал, к ее общей длине одновременно выражается и объемная доля минерала в породе, при этом расчет отношения редуцируется из третьего измерения прямо в первое” [11, здесь и далее пер. с нем. автора].

Таким образом, к методу Розивала следовало бы сделать те же замечания, что и к методу Делесса. Но важной особенностью работы [11] является попытка разобраться в вопросах о характере индикатрисы. Так, сделана важная оговорка о том, что индикатриса не обязана быть серией параллельных равнотстоящих линий (рис. 2, слева), но может иметь вид пилообразных (рис. 2, справа) или даже хаотических (рис. 3, слева) кривых, равномерно покрывающих плоскость шлифа. Насколько известно автору, последние два вида индикатрис не реализованы в современных анализаторах структур. Следующее рассуждение показывает, как Розиваль оценивал суммарную длину индикатрисы для достижения требуемой точности измерения под микроскопом. “Нетрудно адаптировать метод для микроскопических исследований, при этом следует предусмотреть лишь некоторые правила предосторожности, для микроскопистов понятные сами собой.

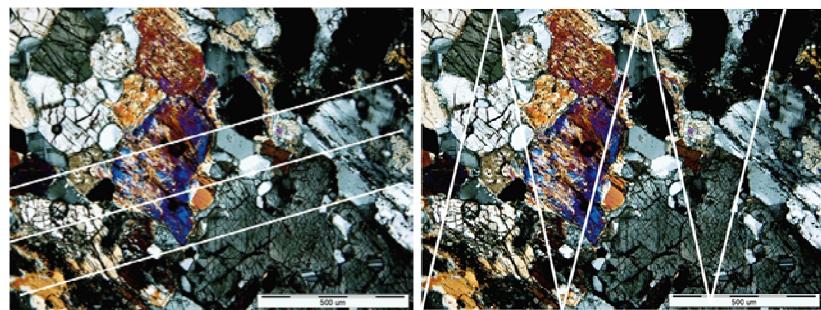


Рис. 2. Параллельная (слева) и пилообразная (справа) индикатрисы.

Если в прозрачных шлифах нужно изучить грубозернистую породу, то следует обратить внимание на то, что одного шлифа нормального размера (около  $2 \times 2$  см) для точного расчета соотношения ее составных частей обычно мало. Для измерения с точностью в 1 % размер зерна в 5 мм требует длины индикатрисы по крайней мере в 500 мм. Расстояние между двумя соседними отрезками системы индикатрис в любом случае должно быть не менее размера зерна, иначе в расчет дважды попадут те же самые индивиды, чего следует избегать. Размер шлифа в этом случае допускает только систему индикатрис из  $4 \times 4$ , в лучшем случае  $5 \times 5$  линейных пересечений по 2 см, то есть от 320 до 500 мм суммарной длины, что находится на пределе требуемой точности и представляется недостаточным. Поэтому здесь необходимо измерение второго шлифа и желательно – третьего для контроля за равномерностью распределения составных частей.

Но для характеристики однородной мелкозернистой породы одного шлифа уже достаточно, так как число возможных линий индикатрисы с уменьшением размера зерен возрастает и, например, для зерен в 1 мм в нормальном шлифе помещается сеть из  $20 \times 20 = 400$  сечений по 20 мм длиной, итого в целом 8000 мм, в то время как точность измерения в 1 % требует индикатрисы длиной лишь в 100 мм. В этом случае для измерения достаточно 5-6 линий по 20 мм, произвольно расположенных на площади шлифа. При еще меньшем размере зерен требуемая длина линии уменьшается еще более” [11, с. 162-163].

Следующий концептуальный шаг в развитии метода сделал А.А. Глаголов [3, 5]. По сути, он снова уменьшил на 1 размерность пространства, превратив индикатрису, по Розивалю, в систему точек. “Точечный метод заключается в том, что в некотором плоском сечении анализируемой горной породы распределяют большое число точек и затем подсчитывают, какое число точек из общего числа попало на зерна каждого из компонентов горной породы. Под словом “равномерно” подразумевается такое распределение

точек, при котором вероятно попадание одинакового числа точек в одинаковые по размерам части пространства, где бы они не находились, или, иначе, такое распределение, при котором не было бы закономерного сгущения или разрежения точек. Равномерное (в этом статистическом смысле) распределение точек в сечении породы не противоречит их беспорядочному расположению” [5, с. 78] (рис. 3, справа).

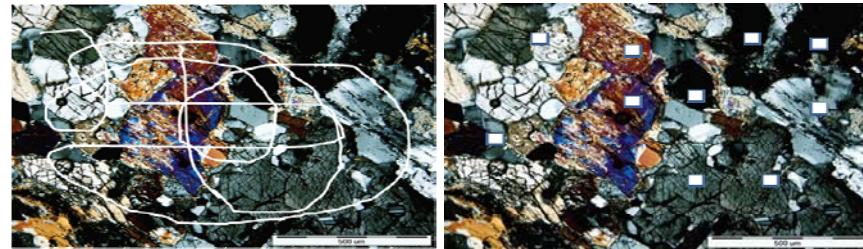


Рис. 3. Хаотическая индикатриса, по Розивалю (слева), и точечный метод, по Глаголеву (справа).

Показателен интерес А.А. Глаголева к вопросам точности оценок модального состава горной породы под микроскопом всеми тремя методами. “Автор вполне сознает недостаточную полноту своей работы и слабость ее математической обработки, в особенности раздела “Влияние структуры”...” [3, с. 5]. “Точность в определении состава породы определяется числом обсчитанных зерен. То есть, если в шлифе есть всего  $n$  зерен, то точность в определении состава породы соответствует числу  $n$ . Главное – зацепить все зерна, то есть проводить линии сканирования на расстоянии среднего поперечника зерна. Если же проводить линии чаще, то мы увеличим точность определения состава шлифа, но ответ будет равновероятен с предыдущим и определяться тем же  $n$ . В.Н. Лодочников и В.А. Николаев как раз и путали одно и второе, рекомендую сгущать линии” [там же, с. 22]. “Поскольку точность определения состава породы соответствует числу зерен, то при числе точек, равном числу зерен, точечный метод достигает максимальной возможной точности и линейный и плоскостной методы не могут ничего добавить” [там же, с. 29]. По-видимому, А.А. Глаголев был первым среди российских авторов, кто разработал систему формул для определения погрешностей метода Делесса-Розиваля-Глаголева при анализе горных пород с различными структурами.

Приведенный исторический обзор подводит к следующим выводам. (1) Делесс вполне корректно установил, что объем минеральной фазы в образце заключен между  $mZ$  и  $MZ$ , и чем ближе  $m$  к  $M$ , тем точнее оценка объема. Сказанное верно и для оценок, выполненных по Розивалю и Глаголеву. (2) Ссылка на принцип Кавальери в обоснованиях методов Делесса и Розиваля неуместна: во-первых, потому, что приводит к исторической ошибке самого Кавальери (см. выше) и, во-вторых, потому,

что требование Кавальери о равенстве (или пропорциональности) суммарных площадей сечений различных минералов от шлифа к шлифу никогда не выполняется. (3) Последнее обстоятельство неизбежно привело к исследованиям форм тел по их сечениям и созданию нового междисциплинарного направления – стереологического анализа.

По-видимому, среди российских авторов за решение задач такого рода первым взялся А.М. Журавский. “Работа проф. А.М. Журавского является новой формой приложения метода исчисления вероятностей к задаче определения минералогического строения ископаемых по данным микроскопического анализа шлифов. Эта задача имеет огромное значение как для механической или химической обработки ископаемых, так и для познания их генезиса и свойств... Возникает вопрос, в какой мере изучение шлифов, измерение содержания компонента и размера зерен по шлифу или ряду шлифов дают право судить об истинном содержании в породе компонентов, истинном размере зерен и расстоянии между ними. Шлиф есть случайный плоский разрез породы. Поэтому представляется естественным приложить к изучению поставленного вопроса, к оценке результатов измерений по шлифам методы изучения случайных явлений, т.е. обратиться к исчислению вероятностей” [12, с. 3-5]. Но рассмотрение методов и главных результатов стереологического анализа требует отдельной статьи.

### Список литературы

1. Глаголев А.А. Геометрические методы количественного анализа агрегатов под микроскопом. М.-Л.: Госгеолиздат, 1941. 263 с.
2. Глаголев А.А. О геометрических методах количественного минералогического анализа горных пород. Тр. ИПМ. № 59. М.-Л.: Госгеолиздат, 1933. 47 с.
3. Говард И. Нарежьте потоньше // Математический цветник. М.: Мир, 1983. С. 130-143.
4. Журавский А.М. Минералогический анализ шлифа с точки зрения вероятностей // Отдельный оттиск. Материалы по обогащению полезных ископаемых. М.-Л.: Госгеолиздат, 1932. 20 с.
5. Зворыкин А.А. (отв. ред.) Биографический словарь деятелей естествознания и техники. Т. 1. М.: Гос. научн. изд-во “БСЭ”, 1958. С. 385.
6. Кларнер Д.А. (ред.) Математический цветник. М.: Мир, 1983. С. 487.
7. Прохоров А.М. (гл. ред.) Большая советская энциклопедия. М.: Изд-во “Сов. энцикл.”, 1973. С. 109.
8. Чирвинский И.Н. Очередная задача современной петрографии в связи с вопросом о способах определять количественно минералогический состав горных пород // Зап. Уральского общества любителей естествознания. 1908. Т. XXVIII. С. 1-38. [Отдельный оттиск этой статьи найден автором в личном фонде акад. А.Е. Ферсмана библиотеки Кольского НЦ РАН. Интересно знать, что и эта тема была в его поле зрения.]
9. Delesse M. Procede mecanique pour determiner la composition des roches. // Annales des mines. De memoires sur l'exploitation des mines. Quatrieme serie. Tome XIII. Paris: Carilian-Goeury et Dalmont, 1848. Р 379-388. [См. рус. перевод: Ю.Л. Войтеховский (сост. и ред.). Горная порода: опыты постижения. Апатиты: Изд-во К & М. 2005. С. 148-154.]

10. Rosiwal A. Über geometrische Gesteinanalysen. Ein einfacher Weg zur ziffernmässigen Feststellung des Quantitätsverhältnisses der Mineralbestandtheile gemengter Gesteine // Verhandlungen der keiserlich-königlichen Geologischen Reichsanstalt. Wien: Verlag der k. k. Geologischen Reichsanstalt, 1898. S. 143-175. [См. рус. перевод: Ю.Л. Войтеховский (сост. и ред.). Горная порода: опыты постижения. Апатиты: Изд-во К & М, 2005. С. 155-165.]
11. Teuscher E.O. Methodisches zur quantitativen Strukturgliederung körniger Gesteine // Sonderdruck aus "Mineralogische und Petrographische Mitteilungen". 1933. Bd. 44, H. 5, S. 410-421. Akademische Verlagsgesellschaft m. b. H. in Leipzig. 1933. Nr. 329. [Отдельный оттиск этой статьи также найден автором в личном фонде акад. А.Е. Ферсмана библиотеки Кольского НЦ РАН.]
12. The Encyclopedia Americana. V. 6. New York, Chicago: Americana Corp., 1944. P. 137.

**МАТЕМАТИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ КЛАССИФИКАЦИИ СОСТАВА  
ПОРОД (МИНЕРАЛОВ) И АНАЛИЗ ФАКТОРОВ ВАРИАЦИИ  
ЭЛЕМЕНТОВ СОСТАВА В ГЕОЛОГИЧЕСКИХ СИСТЕМАХ**

Голубева Э.Д.

Дальневосточный геологический институт ДВО РАН

Владивосток, <office@fegi.ru>, <gol\_ed@mail.ru>

Использование математических методов анализа является необходимым этапом во многих отраслях науки при изучении сложных объектов. Общепринято рассматривать изучаемый геологический объект как единую систему условно однородных единиц, проявляющих на этапе его изучения элементы неоднородности. В отличие от «хорошо организованных систем», функционально зависящих от небольшого числа переменных, геологические объекты, как правило, являются «сложно организованными системами», т.е. вариация их характеристик обусловлена влиянием множества различных факторов, что объясняется сложностью геологических процессов, малодоступностью изучаемых геологических систем и несопоставимостью их размеров с количеством и размерами отбираемых проб. Иногда сложно интерпретировать тенденции изменения параметров геологических систем, не поддающихся строгому количественному описанию. В связи с этим понятие зависимости или закона для сложных систем часто заменяется более широким понятием модели, обеспечивающей приближенное представление о строении и динамике изучаемого объекта. В этом смысле вероятностные математические модели обычно не всегда отражают все параметры изучаемой геологической системы, поскольку изучению подвергаются те свойства систем, которые можно представить в основном количественными аналитическими данными (химический, геохимический и минералогический состав пород и минералов). В общем, особенностью геолого-математического моделирования является изучение вариации свойств объектов, зависящих от природных факторов его формирования и детальности геологического опро-

бования [Крамбейн и Грейбилл, 1969; Миллер и Канн, 1965]. В настоящее время количество работ, основанных на моделировании геологических систем с применением математической обработки информации довольно ограничено.

Первый этап математической обработки данных представляет собой обычный статистический анализ форм распределения в выборках признаков (элементов) и проб (объектов), включая хорошо освещенные в специальной литературе методы исследования выборок проб, определения в них аномальных значений признаков и исключения аномальных проб [Ван дер Варден, 1960; Андерсен, 1963; Крамер, 1975]. В практике петро-геохимических исследований за аномальное значение признака принимается значение, разность которого от среднего содержания по абсолютной величине превышает удвоенное стандартное отклонение от среднего содержания этого признака.

Второй этап предполагает применение методов численной таксономии и кластерного анализа с целью автоматического разделения изучаемой выборки проб (объектов) на объективно существующие группы (таксоны или кластеры). Группы выделяются на основе вычисления обычных евклидовых многомерных расстояний между объектами, в результате сравнительного анализа которых выявляются «сгущения» фигуративных точек, которые оконтуриваются гиперсферами, содержащими пробы близкого состава [Cattell, Coulter, 1966].<sup>8</sup>

Факторный анализ представляет собой математический метод описания системы аналитических данных с помощью основополагающих комплексных параметров - факторов, представляющих собой линейные комбинации изучаемых признаков. Основными этапами анализа являются: нормирование данных, расчет корреляционной матрицы, определение матрицы факторных нагрузок и матрицы значений факторов в пробах. Исходной матрицей для расчета факторного пространства является корреляционная матрица, т.е. в факторном анализе факторы определяются по принципу максимизации связи между переменными, а главный фактор представлен вектором в многомерном пространстве признаков с максимальным вкладом в изменчивость системы. Поскольку исходная матрица данных представлена в двух измерениях: пространстве признаков (R-модификация) - и объектов (Q-модификация), то взаимосвязи между признаками отражает R-метод, а между пробами Q-метод факторного анализа. Вычисленные факторы являются линейными комбинациями признаков, каждый из которых вносит вклад, соответствующий его информативности.

Процедура нормировки данных при расчете в варианте согласования необходима для того, чтобы векторы переменных и объектов имели одинаковый масштаб, соответствующий их доле вклада в изменчивость системы. Использование простейшего нормирования данных  $Y=(X - X_{cp})/X_{cp}$  (табл. 1), уравнивает суммы элементов матрицы по всем столбцам-признакам (они равны  $n-1$ , где  $n$  - число проб). Длина каждого факторного вектора

переменной соответствует ее относительной нагрузке в долях вариации признаков в общей системе. Близость в графическом факторном пространстве направления двух векторов переменных означает наличие положительной корреляции между этими переменными, а противоположная направленность – отрицательной. В случае расчета петрохимических выборок все анализы приводятся к 100% и уравниваются только суммы строк а для расчета выборок минералогических, геохимических или петрогохимических данных, кроме введенного нормирования по столбцам, все полученные значения нормированной матрицы необходимо разделить на сумму всех ее элементов матрицы, что, в конечном счете, не нарушает пропорциональности соотношений между строками и столбцами. [Голубева, 1988].

Расположение фигуративных точек объектов на факторных диаграммах соответствует доле вклада соответствующего фактора в изменчивость состава проб. Обычно за некоторым исключением близко расположенные точки на графике отражают близкие по составу объекты и наоборот. Этот момент контролируется фиксированием на факторной диаграмме соответствия изучаемых проб к определенным таксонам. Ограничение на многозначность факторных решений производится в результате требования ортогональности (независимости) вычисляемых факторов и стабилизации направления одного из векторов-признаков (например, кремнекислоты для петрохимических факторных диаграмм).

Расчеты выборок данных проводится по специальной программе «STATISTICA», которая в разделе «Descriptive statistic» позволяет рассчитывать не только статистические данные, но и корреляционные матрицы. Соответственно с помощью подраздела программы «Basic statistic» рассчитываются кластеры. Кроме того, этот подраздел позволяет провести факторный анализ выборки. Описание вычислительных операций факторных параметров также приведено в литературе [Харман, 1972; Иберла, 1980; Йереског и др., 1980 и др.]. Получение результатов расчёта R- и Q-методов факторного анализа в одинаковой размерности основано на разработанном Дж. Бензекри и М. Дэвидом «корреспондентном анализе» [Benzecri, 1973; David et al., 1974].

Примеры решения задач моделирования с использованием методов факторного анализа:

1. Моделирование эволюции толеитового магматизма Гавайских островов (рис. 1).

Постановка задачи моделирования в этих вулканических цепочках, кроме обычного прослеживания зависимости расстояния островов от “горячих точек” и их возраста сводится к попытке определения тенденций изменения состава выплавок первичных пород очага магмогенерации, образующегося в результате действия “горячей точки”. Моделирование толеитового магматизма Гавайского архипелага, проведено автором [Голубева, 1990] с помощью методов факторного анализа в варианте

согласования. Рассчитывались петрохимические данные состава вулканов главной последовательности - от вулкана Килауэа до о-ва Лаперуз. В окончательном варианте математическая обработка проведена с учетом выведенных Р. Кирпатриком с соавторами [Init. Repts DSDP, v. 55, 1980] средних составов оливиновых толеитов, представленных этими авторами как близкие составам материнских магм.

Результаты моделирования по гавайским островам представлены на рис. 1, где по вертикали указаны вулканы в порядке увеличения их расстояний от вулкана Килауэа, а по горизонтали (внизу) - абсолютный возраст вулканов и

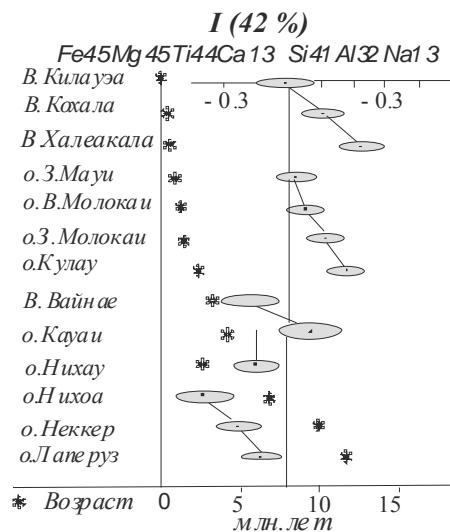


Рис. 1. Диаграмма значений главного фактора изменчивости оливиновых толеитов Гавайских островов.

Вулканы и острова расположены в порядке увеличения их расстояния от вулкана Килауэа. Факторные нагрузки (%) элементов в положительном поле (справа): Si-41, Al-32, Na-13; в отрицательном поле (слева): Fe-45, Mg-45, Ti-44, Ca-13.

значения главного фактора толеитов- (вверху). Как видно из диаграммы, фигуративные точки составов образуют четыре параллельные цепочки, наклонно пересекающие вертикальную линию, разграничитывающую поля сиалической (Si, Al, Na) и мафической (Fe, Mg, Ti, Ca) ассоциаций параметров. В пределах каждой цепочки составы с уменьшением возраста изменяются антидромно, т. е. каждый ритм (или цикл) начинается с более сиалических лав; при этом в целом вся главная последовательность

развивается гомодромно- с увеличением сиаличности по мере омоложения вулканов. Интерпретация полученной математической модели представляется следующим образом: (1) магматическая камера, сформировавшаяся в литосферной плите над “горячей точкой” (диапир глубинного субстрата-источник тепла и флюидов), действует в течение длительного периода после отодвигания от “горячей точки” (до 3 млн. лет), формируя 3-4 вулкана с относительно повышающейся мафичностью лав; (2) в течение этого периода в “горячей точке”- апикальной части диапира и прикровельной астеносфере, благодаря экранированию движущейся плитой, происходит накопление летучей фазы, а затем ее эксплозия, инициирующая селективное плавление субстрата плиты и формирование магматического очага; (3) участие водной фазы в процессах селективного плавления и магматической дифференциации приводит при одних и тех же РТ-условиях к образованию более кислых расплавов [Майсен, Бетчер, 1979], формировавших начальные вулканы ритмов, тогда как последующие извержения из магматических камер, теряя летучую фазу, приобретают все более основной состав; (4) общая гомодромная направленность вулканизма главной последовательности обусловлена, очевидно, прогрессировавшим накоплением летучих в системе “горячей точки” (апикальная часть диапира- прикровельная фиксированная часть астеносферного слоя) в процессе ее действия.

2. Типизация базальтов скв. 597 Восточно-Тихоокеанского поднятия (ВТП) (рис. 2).

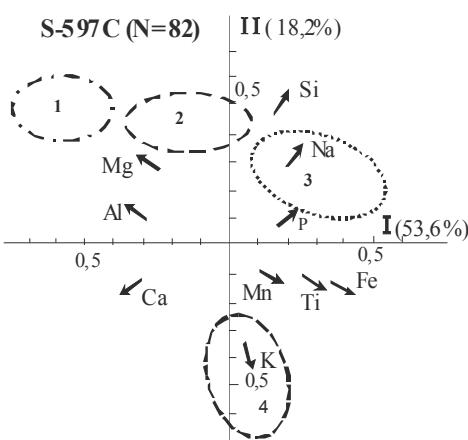


Рис. 2. Факторная диаграмма толеитовых базальтов СКВ. 597 С.

1 – толеиты D – типа; 2 – толеиты N типа; 3 – ферротолеиты; 4 – калиевые ферротолеиты.

Координаты центра:  $\text{SiO}_2$  – 49.84;  $\text{TiO}_2$  – 1.25;  $\text{Al}_2\text{O}_3$  – 14.79;  $\text{Fe}_2\text{O}_3$  – 11.36;  $\text{MnO}$  – 0.17;  $\text{MgO}$  – 7.49;  $\text{CaO}$  – 12.15;  $\text{Na}_2\text{O}$  – 2.31;  $\text{K}_2\text{O}$  – 0.22;  $\text{P}_2\text{O}_5$  – 0.12.

Скважина глубоководного бурения 597С западного фланга ВТП прошла около 100 метров позднеолигоценовых базальтовых потоков и массивных базальтов [Init. Repts. DSDP. V. 89. 1986]. Состав базальтов характерный для ВТП толеитовый. С помощью факторного анализа определены перемежающиеся в скважине различные по составу подтипы базальтоидов: (1) толеитов D (деплетированного) типа, (2) толеитов N (нормального) типа, (3) ферротолеитов, (4) калиевых ферротолеитов. Верхние горизонты скважины (4-й керн) имеют довольно стабильный толеитовый состав N-типа; базальтовые потоки (керны 5-7) имеют состав перемежающийся от нормальных толеитов до толеитов T-типа и ферротолеитов. Керны 8-10 сложены близкими по составу железистыми толеитами, а на глубине, начиная с 3-й секции керна 10, залегают низкотитанистые, низкощелочные толеиты D-типа. Расчёт выборки базальтов скв. 597С факторным анализом показывает, что области изменчивости составов базальтов в скв. 597С представлены изолированными эллипсOIDАМИ, как бы нанизанными на тренд **I** фактора (рис. 2); исключение составляет расположенная в нижней части графика область фигуративных точек калиевых ферротолеитов. Постепенный переход магнезиальных деплетированных толеитов к нормальным и далее к ферротолеитам свидетельствует о непрерывности процессов формирования различных типов пород. Все типы пород, выделенные соответственно расчитанным по петрохимическому составу таксонам с высокой степенью вероятности разделяются дискриминантными функциями.

В заключение следует отметить, что иногда появляющиеся в печати описания расчётов аналитических данных факторным анализом сложно понять и интерпретировать, поскольку в них в основном часто приводится информация о трендах направления ассоциаций элементов и контуров областей, которые по размерности несоизмеримы с трендами ассоциаций элементов. С другой стороны, рассчитанные методами кластерного и таксономического анализа группы (таксоны) пород на факторных диаграммах часто представляют собой изометричные изолированные области, как бы “нанизанные” на главный вектор изменчивости изучаемой системы пород. В ряде случаев таксоны на диаграммах сливаются в эллипсоиды, вытянутые соответственно их трендам вариации состава. В этом смысле важно вычислить направление этих вариаций и соответственно интерпретировать условия формирования геологических систем. В общем, особенностью геолого-математического моделирования является то, что моделируется изменчивость свойств объектов и признаков в одинаковой размерности, наблюдаемая на уровне изучения строения объекта, зависящего от природных факторов его образования и детальности геологического опробования.

#### Список литературы

1. Андерсен Т. Введение в многомерный статистический анализ // М: Физматгиз, 1963. 500 с.
2. Ван дер Варден Б.А. Математическая статистика // М.: Изд-во иностр. лит., 1960. 434 с.

3. Голубева Э.Д. Эволюция толеит-базальтового магматизма восточной части Тихого океана // Докл РАН СССР. 1988. Т. 302, № 6. С. 1472-1476.
4. Голубева Э.Д. Толеитовые базальты Тихого океана (петрология и геохимия).// Владивосток: ДВО РАН СССР. 1990. 136с.
5. Иберла К. Факторный анализ // М.: Статистика. 1980. 398 с.
6. Йереског С., Клован Д.И., Реймент Р.А. Геологический факторный анализ. // Л.: Недра, 1980. 223 с.
7. Крамер Г. Математические методы статистики. М.: Мир. 1975. 648 с.
8. Крамбейн У., Грейбилл Ф. Статистические модели в геологии // М.: Мир. 1969. 398 с.
9. Майсен Б., Беттчер А. Плавление водосодержащей мантии // М.: Мир, 1979. 123 с.
10. Миллер Р.Л., Кан Дж. С. Статистический анализ в геологических науках // М.: Мир, 1965. 482 с.
11. Харман Г. Современный факторный анализ // М.: Статистика. 1972. 482 с.
12. Benzecri J.P. L'Analyse des Données. 2. L-Analyse des Correspondances // Paris: 1973. 619 p.
13. Cattell R.V. Coulter M. A. Principles of behavioral taxonomy and the mathematical basic of the taxonome computer program // Brit. J. Math. stat. Psychol. 1966. V. 19 P. 237-269.
14. David M., Campiglio C., Darling R. Progress in R- ad Q-mode analysis: Correspondence analysis and its application to the study geological processes // Can. J. Earth Sci.. 1974. V. 11. P. 131-146.
15. Initial Reports of the Deep Sea Drilling Project: 1980. V. 55. 868 p.; 1986. V. 89. 678 p.

## МАТРИЦЫ 4×4 ПРЕОБРАЗОВАНИЙ ГЕКСАГОНАЛЬНЫХ СИМВОЛОВ

Кучериненко Я.В.

Геологический факультет МГУ им. М.В. Ломоносова  
Москва, <kuch@geol.msu.ru>

### 1. Четыре гексагональных индекса и их четырехмерные свойства

Символы граней гексагональных кристаллов, использующие четыре индекса были введены Вейсом через отрезки, отсекаемые гранью на координатных осях [3, 10]. Индексы современного вида ( $hkil$ ) предложил Браве<sup>1</sup> [3], отталкиваясь от индексов Вейса. Кроме того, Браве пришлось обобщить свое собственное определение индексов граней. Если в [2]  $h,k,l$  – это целочисленные коэффициенты уравнения ретикулярной плоскости  $hx+ky+lz=0$ , то в [3] Браве был вынужден дать новое определение, приблизившись к первоначальному определению индексов  $h,k,l$ , данному Миллером в [10]. Если  $a_e, b_e, c_e$  – масштабные отрезки на координатных осях, а  $a, b, c$  – отрезки, отсекаемые искомой гранью, то  $h$  – это такое

---

<sup>1</sup> Сам Браве обозначал символ ( $hkil$ ) их в виде  $g,h,i,k$ , а ( $hkl$ ) - как  $g,h,k$  [2, 3].

число, на которое нужно разделить  $a_e$ , чтобы получить  $a$ :  $a=a_e/h$ ;  $k$  – число, удовлетворяющее равенству  $b=b_e/k$  и т.д. [3]. Такое определение рассматривает по отдельности соотношение искомой грани с каждой из координатных осей, а значит, не возникает проблем в случае, если координатные оси взаимозависимы. Для гексагональных кристаллов удобно выбрать координатную систему с тремя компланарными осями, связанными осью симметрии третьего порядка и перпендикулярной к ним четвёртой осью, совпадающей с тройной осью – это обнаружил еще Вейс. Браве вывел формулу  $h+k+i=0$ . Что касается символов ребер и кристаллографических направлений  $[rswt]$ , где  $r, s, w, t$  – коэффициенты при координатных векторах, то в [9], а затем в [1 и 5] показано, что добавление произвольной константы одновременно к  $r, s$ , и  $w$  не меняет ни направления, ни длины вектора.

Хотя в символах  $(hkil)$  и  $[rswt]$  индексы взаимозависимы, они все же имеют и четырехмерный смысл. Так, межплоскостное расстояние для ретикулярной плоскости  $(hkil)$  в трехмерной гексагональной решетке с параметрами  $a$  и  $c$  равно межплоскостному расстоянию плоскости  $\frac{c}{\sqrt{3}/2}$  с теми же индексами  $(hkil)$  в четырехмерной решетке с параметрами  $\sqrt{3}/2 a, \sqrt{3}/2 a, \sqrt{3}/2 a, c$  и взаимно ортогональными координатными векторами [7]. Длина вектора  $[rswt]$ , заданного в трехмерном гексагональном решете, равна длине проекции четырехмерного вектора с тем же символом  $[rswt]$  на плоскость (1110), заданных в четырехмерной системе с длинами координатных векторов, равных  $\sqrt{3}/2 a, \sqrt{3}/2 a, \sqrt{3}/2 a$  и  $c$  [7]. Для грани  $(hkil)$  и принадлежащего ей ребра  $[rst]$  выполняется закон Вейса  $hr+ks+lt=0$ . Для гексагональных кристаллов справедлива также формула  $hr+ks+iw+lt=0$  [9], которая доказана строго в рамках трехмерного подхода, но справедлива также для четырехмерной грани  $(hkil)$  и принадлежащего ей ребра  $[rswt]$ , взятых в рассмотренном выше четырехмерном ортогональном решете [7].

## 2. Вывод матриц $4\times 4$ преобразований гексагональной симметрии

Преобразования точечных групп гексагональной симметрии могут быть записаны ортогональными (0.1)-матрицами порядка  $4\times 4$  [8]. Там же отмечено, что как следствие, гексагональная голоэдрия, также как и кубическая, изоморфна подгруппе четырехмерного куба. В [8] рассматривались операции симметрии, действующие на координатную систему. Покажем, то же самое, но более подробно, для символов граней гексагональных кристаллов.

Как показано на рис. 1, поворот на  $120^\circ$  против часовой стрелки, или операция симметрии  $L_3^1$ , приводит к круговой перестановке первых трех

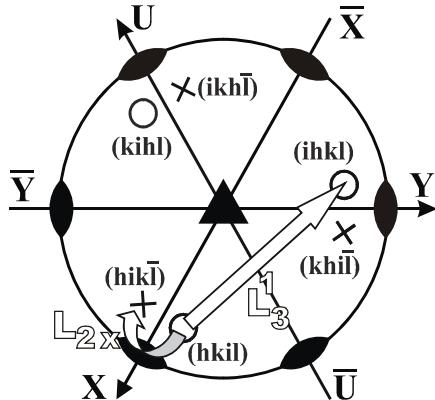


Рис. 1. Грань общего положения в группе D<sub>3</sub>; операции симметрии  $L_3^1$  и  $L_{2x}$ .

индексов, так, что третий из них становится первым, первый – вторым, а второй – третьим, например,  $(hkil) \Rightarrow (ihkl)$ . Поворот на  $180^\circ$  вокруг оси  $L_2$ , совпадающей с осью X, оставляет первый индекс неизменным, второй и третий меняют местами, а у четвертого меняется знак, например,  $(h k i l) \Rightarrow (h i k -l)$ . Те же перестановки можно легко представить в матричной форме:

$$L_3^1 : \begin{pmatrix} i \\ h \\ k \\ l \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} h \\ k \\ i \\ l \end{pmatrix}; \quad L_{2x} : \begin{pmatrix} h \\ i \\ k \\ \bar{l} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} h \\ k \\ i \\ l \end{pmatrix}$$

Благодаря свойству ортогональности, симметрическим преобразованиям,  $L_3^1$  и  $L_{2x}$ , действующим на кристаллографические направления [rswt], соответствуют те же матрицы 4x4. Аналогичным образом можно получить матрицы 4x4 для всех операций гексагональной симметрии (см. таблицу 1).

### 3. Переход от матриц 4x4 к матрицам 3x3

В [6] отмечена возможность перехода от матриц 4x4 к матрицам 3x3 вычитанием третьего столбца из первых двух с последующим вычёркиванием третьего столбца и третьей строки. Покажем, в каких случаях это возможно и почему.

### 3 а) Свойство матриц 4x4, преобразований индексов граней ( $hkl$ )

Преобразование не изменится, если в  $j$ -ой строке ( $j=1, 2, 3$ , или 4) прибавить произвольную константу  $c$  к первым трем коэффициентам  $m_{j1}$ ,  $m_{j2}$  и  $m_{j3}$ . Действительно,

$(m_{j1}+c)h+(m_{j2}+c)k+(m_{j3}+c)i+m_{j4}l=m_{j1}h+m_{j2}k+m_{j3}i+m_{j4}l+c(h+k+i)=m_{j1}h+m_{j2}k+m_{j3}i+m_{j4}l$ , т.к.  $h+k+i=0$ . В частности, для каждой  $j$ -ой строки такой константой может быть  $-m_{j3}$ . Тогда весь третий столбец “обнуляется”, и индекс  $i$  в символе ( $hkl$ ) становится ненужным. Если посчитать ненужным и новый индекс  $i'$ , полученный в результате матричного преобразования, то становится ненужной и вся третья матричная строка. Тогда переход от матрицы 4x4 к матрице 3x3 выглядит так, что нужно вычесть третий столбец из первых двух и удалить его и третью строку:

$$\begin{pmatrix} h' \\ k' \\ i' \\ l' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} m_{11} & m_{12} & m_{13} & m_{14} \\ m_{21} & m_{22} & m_{23} & m_{24} \\ m_{31} & m_{32} & m_{33} & m_{34} \\ m_{41} & m_{42} & m_{43} & m_{44} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} h \\ k \\ i \\ l \end{pmatrix} \Rightarrow \begin{pmatrix} h' \\ k' \\ l' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} m_{11}-m_{13} & m_{12}-m_{13} & m_{14} \\ m_{21}-m_{23} & m_{22}-m_{23} & m_{24} \\ m_{41}-m_{43} & m_{42}-m_{43} & m_{44} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} h \\ k \\ l \end{pmatrix}$$

В доказательстве свойства и следующего из него правила пересчета матриц использовано равенство  $h+k+i=0$ , которое может быть интерпретировано двояко. С одной стороны, это характеристика гексагональных индексов трехмерных кристаллов. С другой стороны – это ограничение, характеризующее множество соответствующих четырехмерных гиперплоскостей: рассматриваются только те гиперплоскости, которые содержат четырехмерный вектор [1110]. Свойство и правило относятся как к матрицам симметрических преобразований, так и к матрицам пересчета индексов граней при переходе в другую координатную систему (также гексагональную). Поскольку четвертый координатный вектор  $U=-X-Y$ , и, значит,  $X+Y+U=0$  по аналогии с  $h+k+i=0$ , то приведенные свойство и правило верны и аналогично доказываются для 4x4-матриц преобразований гексагональных координатных систем.

### 3 б) Свойство 4x4-матриц преобразований индексов направлений [ $rswt$ ]

Матричное преобразование не изменится, если в  $j$ -ом столбце ( $j=1, 2, 3$  или 4) прибавить произвольную константу  $c$  к коэффициентам  $m_{1j}$ ,  $m_{2j}$  и  $m_{3j}$ . Покажем это, рассмотрев два матричных преобразования:

$$\begin{bmatrix} r' \\ s' \\ w' \\ t' \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} m_{11} & m_{12} & m_{13} & m_{14} \\ m_{21} & m_{22} & m_{23} & m_{24} \\ m_{31} & m_{32} & m_{33} & m_{34} \\ m_{41} & m_{42} & m_{43} & m_{44} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} r \\ s \\ w \\ t \end{bmatrix} \text{ и } \begin{bmatrix} r'' \\ s'' \\ w'' \\ t'' \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} m_{11}+c & m_{12} & m_{13} & m_{14} \\ m_{21}+c & m_{22} & m_{23} & m_{24} \\ m_{31}+c & m_{32} & m_{33} & m_{34} \\ m_{41} & m_{42} & m_{43} & m_{44} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} r \\ s \\ w \\ t \end{bmatrix}$$

Очевидно, что  $[r'', s'', w'', t''] = [r'+rc, s'+rc, w'+rc, t'] \Rightarrow [r', s', w', t']$ , поскольку добавление произвольной константы к  $r$ ,  $s$  и  $w$  не меняет ни направление вектора  $[rswt]$ , ни его длину. Аналогичные рассуждения проводятся и для любого другого столбца. Если для каждого из столбцов в качестве константы  $c$  выбрать  $-m_{3j}$ , то вся третья строка обнуляется и третий преобразованный индекс  $w'$  всегда будет равен нулю. Если при этом в исходном индексе  $[rswt]$ ,  $w$  также полагать равным нулю, то третий столбец матрицы оказывается также ненужным и матричное преобразование четырех индексов можно переписать в сокращенном виде, приведя его к матрице 3x3, вычитя третью строку из первых двух и удалив ее и третий столбец:

$$\begin{bmatrix} r' \\ s' \\ w' \\ t' \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} m_{11} & m_{12} & m_{13} & m_{14} \\ m_{21} & m_{22} & m_{23} & m_{24} \\ m_{31} & m_{32} & m_{33} & m_{34} \\ m_{41} & m_{42} & m_{43} & m_{44} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} r \\ s \\ w \\ t \end{bmatrix} \Rightarrow \begin{bmatrix} r' \\ s' \\ t' \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} m_{11}-m_{31} & m_{12}-m_{32} & m_{14}-m_{34} \\ m_{21}-m_{31} & m_{22}-m_{32} & m_{24}-m_{34} \\ m_{41} & m_{42} & m_{44} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} r \\ s \\ t \end{bmatrix}$$

Отметим, что свойство эквивалентности символов  $[rswt]$  и  $[r+c, s+c, w+c, t]$  при произвольной константе  $c$  - это, с одной стороны, свойство символов направлений в гексагональных кристаллах, а с другой стороны – степень свободы вдоль вектора  $[1110]$ , заданного в четырехмерном репере. По аналогии с преобразованиями символов граней ( $hkil$ ), для символов направлений  $[rswt]$ , доказанное свойство 4x4-матриц и правило их приведения к 3x3-матрицам, справедливо как для преобразований гексагональной симметрии, так и для пересчета индексов при переходе к другой координатной системе (также гексагональной). В обоих случаях свойство доказывается, исходя из формальной записи матричного преобразования, вне зависимости от его геометрического смысла.

#### 4. Матрицы 4x4 и матрицы 3x3 операций симметрии в группе $D_{6h}$ .

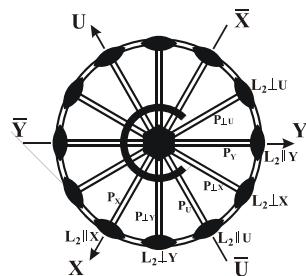


Рис. 2. Стереографическая проекция элементов симметрии группы  $D_{6h}$ .

На рис. 2 показаны элементы симметрии группы в группе  $D_{6h}$ , а в таблице 1 приведены матрицы соответствующих операций симметрии.

Матрицы перестановок индексов (в том числе, с заменой их знаков) всегда ортогональны. Чтобы перейти от матрицы преобразования векторов (или координат точек) к матрице преобразования индексов граней, ее нужно обратить и транспонировать.

Таблица 1.

Матрицы преобразований симметрии группы  $D_{6h}$ . Для каждой операции симметрии приведена матрица  $4 \times 4$  преобразования символов граней и направлений ( $hkl$ ) и  $[rstw]$ , матрица  $3 \times 3$  преобразования символов граней ( $hkl$ ), а также матрица  $3 \times 3$  преобразования символов направлений ( $rst$ ).

Однако, для ортогональных матриц обращение — это и есть транспонирование. Поэтому каждая ортогональная  $4 \times 4$ -матрица преобразования симметрии кристаллографических векторов  $[rst]$  совпадает с матрицей того же преобразования для символов граней  $(hkl)$ . В этом смысле ортогональные  $4 \times 4$ -матрицы универсальны. Для той же операции симметрии, матрица  $3 \times 3$  преобразования тройных гексагональных символов направлений  $[rst]$  вообще говоря, отличается от матрицы преобразования символов граней  $(hkl)$ .

Преобразования координатных систем (в том числе преобразования симметрии) — это транспонированные матрицы преобразований направлений. В силу этого, для  $4 \times 4$  матриц преобразований координатных осей при переходе к матрицам  $3 \times 3$  действует правило вычитания третьего столбца из первых двух. В работах [8, 4] приведены матрицы  $3 \times 3$  симметрических преобразований координатных систем, совпадающие с транспонированными матрицами симметрических преобразований направлений  $[rst]$ .

В качестве главного вывода отметим, что необходимость ориентироваться в основах кристаллографии в размерностях  $d > 3$  очевидна всем, кто имел дело с квазикристаллами, модулированными структурами, или симметрией физических свойств кристаллов. Мы же обращаем внимание на то, что четырехмерные свойства проявляются уже в основах классической трехмерной кристаллографии.

*Работа поддержанна Российской фондом фундаментальных исследований, грант №08-01-90102.*

#### Список литературы

1. Белов. Н.В. Четвёртый индекс в гексагональной системе // ДАН СССР. 1947. Т. 58. № 3. С. 465-467.
2. Браве О. Мемуар о системах точек, правильно распределённых на плоскости или в пространстве // в сб. О. Браве. Избранные научные труды, «Наука». Л. 1974. С. 41-138. Оригинал: Bravais, Auguste. Mémoire sur les systèmes des points distribués régulièrement sur un plan ou dans l'espace // Journal de l'École Polytechnique. 1850. 19. 1-128.
3. Браве О. Кристаллографические этюды // в сб. О. Браве. Избранные научные труды, «Наука». Л. 1974. С. 139-270. Оригинал: Bravais, Auguste. Études cristallographiques // Journal de l'École Polytechnique. 1851. 20. 101-278.
4. Галиуллин Р.В. Лекции по геометрическим основам кристаллографии / Челябинск. 1989. 12 с.
5. Егоров-Тисменко Ю.К. Кристаллография и кристаллохимия / М.: КДУ. 2005. 159 с.
6. Загальская Ю.Г., Литвинская Г.П. Геометрическая кристаллография / М.: изд-во МГУ. 1973. 74 с.
7. Кучериненко Я.В. Простейший пример многомерного подхода в кристаллографии: четыре индекса в гексагональной системе // Труды III Всероссийской научной школы «Математические исследования в кристаллографии, минералогии и петрографии» 22-23 октября 2007 г. Апатиты. С. 56-75.

8. Литвинская Г.П., Загальская Ю.Г., Галиулин Р.В., Коваленко В.С. О матричной записи кристаллических классов в решете Браве // в сб. Проблемы кристаллографии, М.: изд-во МГУ. 1971. С. 284-288.
9. Donnay J. D. H. Hexagonal four-index symbols // Am. Miner. vol.32, N.1-2. 1947. P. 52-58.
10. Miller W.H. A treatise on crystallography. Cambridge – London. 1839.

## ПОВОРОТЫ СИММЕТРИИ В ТРЕХМЕРНОМ И ЧЕТЫРЕХМЕРНОМ ПРОСТРАНСТВАХ

**Кучериненко Я.В.**

**Геологический факультет МГУ им. М.В. Ломоносова**  
**Москва, <kuch@geol.msu.ru>**

Если для поворота в трехмерном пространстве известны угол и ось поворота, а требуется узнать, как этот поворот преобразует координаты векторов, то удобно воспользоваться аппаратом кватернионов – четырехмерным обобщением комплексных чисел, содержащем три мнимые единицы  $i, j, k$ , которые умножаются по правилам:

$$\begin{aligned} i^2 = j^2 = k^2 &= ijk = -1, \\ ij &= -ji = k, \\ jk &= -kj = i, \\ ki &= -ik = j \end{aligned} \quad (1) \quad [13-16].$$

Гамильтон, записывал кватернионы в виде  $Q = w + ix + jy + kz$ , где  $w, x, y, z$  – действительные числа [13, 15, 16].

Клейн [17] записал кватернион в виде  $Q = ai + bj + ck + d$ , ссылаясь на Гамильтона [14]. Отметим, что Гамильтон имел в виду  $Q = a + bi + cj + dk$ , однако именно в статье [14] (в отличие от ряда других) он не выписал кватернион в явном виде, как линейную комбинацию четырех единиц с действительными коэффициентами  $a, b, c, d$ . Видимо поэтому Клейн записал кватернион несколько иначе. Отметим, что это различие не играет никакой существенной роли при записи умножения кватернионов с помощью четырех уравнений, так что формально обозначения в работе Клейна совпадают с Гамильтоновскими с точностью до подстановки символов  $\begin{pmatrix} a & b & c & d \\ d & a & b & c \end{pmatrix}$ . Однако запись того же преобразования в матрично-векторном виде, приводит к визуально различным типам  $4 \times 4$ -матриц. Отметим, что и обозначения Гамильтона, и обозначения Клейна применяются в математике и естественных науках. Мы будем пользоваться обозначениями Клейна.

## Умножение кватернионов

Произведение двух кватернионов  $Q_1=a_1i+b_1j+c_1k+d_1$  и  $Q_2=a_2i+b_2j+c_2k+d_2$  можно записать следующим образом:

$$\begin{aligned}
 Q_3 = Q_1 Q_2 &= (a_1i + b_1j + c_1k + d_1)(a_2i + b_2j + c_2k + d_2) = \\
 &= d_1a_2i - c_1b_2i + b_1c_2i + a_1d_2i + \\
 &\quad c_1a_2j + d_1b_2j - a_1c_2j + b_1d_2j \\
 &\quad - b_1a_2k + a_1b_2k + d_1c_2k + c_1d_2k \\
 &\quad - a_1a_2 - b_1b_2 - c_1c_2 + d_1d_2 = \\
 &= a_1d_2i + b_1c_2i - c_1b_2i + d_1a_2i \\
 &\quad - a_1c_2j + b_1d_2j + c_1a_2j + d_1b_2j \\
 &\quad + a_1b_2k - b_1a_2k + c_1d_2k + d_1c_2k \\
 &\quad - a_1a_2 - b_1b_2 - c_1c_2 + d_1d_2
 \end{aligned} \tag{2} [13-15].$$

Последние два выражения совпадают. Изменен только порядок записи слагаемых. Однако если умножение записать в матрично-векторном виде, эти же две записи формально будут уже различны:

$$\begin{pmatrix} a_3 \\ b_3 \\ c_3 \\ d_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} d_1 & -c_1 & b_1 & a_1 \\ c_1 & d_1 & -a_1 & b_1 \\ -b_1 & a_1 & d_1 & c_1 \\ -a_1 & -b_1 & -c_1 & d_1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_2 \\ b_2 \\ c_2 \\ d_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} d_2 & c_2 & -b_2 & a_2 \\ -c_2 & d_2 & a_2 & b_2 \\ b_2 & -a_2 & d_2 & c_2 \\ -a_2 & -b_2 & -c_2 & d_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ b_1 \\ c_1 \\ d_1 \end{pmatrix} \tag{3}$$

или,  $q_3 = G(Q_1) q_2 = G'(Q_2) q_1$

Здесь  $a_3, b_3, c_3, d_3$  – коэффициенты кватерниона  $Q_3=a_3i+b_3j+c_3k+d_3$ . Формула (2) выглядит «выведенной» в результате раскрытия скобок при умножении кватернионов. На самом деле она является определением правила умножения кватернионов [13, 15].

## Свойства кватернионов, аналогичные комплексным числам

Каждому кватерниону  $Q=ai+bj+ck+d$  можно сопоставить его абсолютную величину, или модуль  $|Q|$ , определяемый из формулы  $|Q|^2=a^2+b^2+c^2+d^2$  [13-15], действительную часть (скаляр)  $Re(Q)=d$ , мнимую часть (вектор)  $Im(Q)=ai+bj+ck$ , а также сопряженный кватернион  $\bar{Q}=-ai-bj-ck+d$ . Легко проверить, что  $Q\bar{Q}=\bar{Q}Q=|Q|^2$  [15], по аналогии с комплексными числами. Обратный кватернион, определяемый по формуле  $Q^{-1}=\bar{Q}/|Q|^2$ , [15] автоматически вытекающей из условия  $QQ^{-1}=1$ . Модуль произведения равен произведению модулей [13-15].

Кроме того, каждому кватерниону  $Q=ai+bj+ck+d$  можно сопоставить две  $4\times 4$ -матрицы:

$$G_Q = \begin{pmatrix} d & -c & b & a \\ c & d & -a & b \\ -b & a & d & c \\ -a & -b & -c & d \end{pmatrix}, G'_Q = \begin{pmatrix} d & c & -b & a \\ -c & d & a & b \\ b & -a & d & c \\ -a & -b & -c & d \end{pmatrix}$$

Легко проверить, что  $\det(G_Q) = \det(G'_Q) = (a^2 + b^2 + c^2 + d^2)^2 = |Q|^4$ . Кроме того, в каждой из матриц, скалярный квадрат каждого столбца равен  $|Q|^2$ , в то время как скалярное произведение двух разных столбцов равно нулю. Таким образом, если  $|Q|=1$ , то матрицы  $G_Q$  и  $G'_Q$  – это ортогональные  $4\times 4$ -матрицы, отвечающие поворотам первого рода в четырехмерном пространстве (или движениям I-го рода в  $S^3 \subset \mathbf{R}^4$ ). Если же  $|Q| \neq 1$ , то  $G_Q$  и  $G'_Q$  – матрицы поворотов с гомотетией. Различие матриц  $G_Q \neq G'_Q$  (для всех кватернионов с ненулевой мнимой частью) наглядно показывает, что умножение кватернионов некоммутативно. Если же у кватерниона  $Q$  мнимая часть равна нулю, то его умножение на любой другой кватернион коммутативно и соответствует умножению кватерниона на число.

### Повороты в трехмерном пространстве

Рассмотрим произведение трех кватернионов  $QX\bar{Q}$ . Это произведение можно представить в матрично-векторном виде, как:

$$\begin{aligned} QX\bar{Q} &= G(Q)X\bar{Q} = G(Q)G'(\bar{Q})X = \\ &= \begin{pmatrix} d & -c & b & a \\ c & d & -a & b \\ -b & a & d & c \\ -a & -b & -c & d \end{pmatrix} \begin{pmatrix} d & -c & b & -a \\ c & d & -a & -b \\ -b & a & d & -c \\ a & b & c & d \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{pmatrix} = \\ &= \begin{pmatrix} a^2 - b^2 - c^2 + d^2 & 2(ab - cd) & 2(ac + bd) & 0 \\ 2(ab + cd) & -a^2 + b^2 - c^2 + d^2 & 2(bc - ad) & 0 \\ 2(ac - bd) & 2(bc + ad) & -a^2 - b^2 + c^2 + d^2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & a^2 + b^2 + c^2 + d^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{pmatrix} \quad (4) \end{aligned}$$

Если  $|Q|=1$ , то  $M=G(Q)G'(\bar{Q})$  – ортогональная матрица, задающая поворот в трехмерном «мнимом» подпространстве. Для преобразования, заданного матрицей  $M$ , можно выбрать другую декартову координатную

систему, в которой это преобразование, запишется матрицей

$$M_1 = \begin{pmatrix} \cos\theta & -\sin\theta & 0 & 0 \\ \sin\theta & \cos\theta & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix},$$

имеющей тот же след. Это следует из известного

свойства ортогональных матриц, согласно которому для любого преобразования заданного с помощью ортогональной  $4\times 4$ -матрицы можно выбрать другую декартову систему координат, в которой это преобразование

$$\text{будет задано уже другой матрицей вида } \begin{pmatrix} \cos\theta & -\sin\theta & 0 & 0 \\ \sin\theta & \cos\theta & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \cos\psi & -\sin\psi \\ 0 & 0 & \sin\psi & \cos\psi \end{pmatrix}, \text{ но}$$

имеющей тот же след [4]. В случае матрицы  $M$ , очевидно,  $\Psi = 0$ . Таким образом, с одной стороны,  $\text{trace}(M)=2\cos(\theta)+2=4\cos^2(\theta/2)$ , а с другой  $\text{trace}(M)=2\cos(\theta)+2=4d^2$ , откуда  $d=\pm\cos(\theta/2)$ . Поскольку  $3\times 3$ -матрица

$$m = \begin{pmatrix} a^2 - b^2 - c^2 + d^2 & 2(ab - cd) & 2(ac + bd) \\ 2(ab + cd) & -a^2 + b^2 - c^2 + d^2 & 2(bc - ad) \\ 2(ac - bd) & 2(bc + ad) & -a^2 - b^2 + c^2 + d^2 \end{pmatrix} \quad \text{также}$$

ортогональна и отвечает повороту трехмерного пространства, то, согласно Эйлеру [11], координаты оси поворота равны ( $m_{32}-m_{23}$ ,  $m_{13}-m_{31}$ ,  $m_{21}-m_{12}$ ) =  $(4ad, 4bd, 4cd) = 4d(a, b, c)$ . Такое рассуждение верно при  $\theta \neq 180^\circ$ . Если же

$$\begin{aligned} m \begin{pmatrix} \gamma a \\ \gamma b \\ \gamma c \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} a^2 - b^2 - c^2 & 2ab & 2ac \\ 2ab & -a^2 + b^2 - c^2 & 2bc \\ 2ac & 2bc & -a^2 - b^2 + c^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \gamma a \\ \gamma b \\ \gamma c \end{pmatrix} = \\ &\begin{pmatrix} 2a^2 - 1 & 2ab & 2ac \\ 2ab & 2b^2 - 1 & 2bc \\ 2ac & 2bc & 2c^2 - 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \gamma a \\ \gamma b \\ \gamma c \end{pmatrix} = \\ &= \left( \begin{pmatrix} 2a^2 & 2ab & 2ac \\ 2ab & 2b^2 & 2bc \\ 2ac & 2bc & 2c^2 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \right) \begin{pmatrix} \gamma a \\ \gamma b \\ \gamma c \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2\gamma(a^2 + b^2 + c^2)a \\ 2\gamma(a^2 + b^2 + c^2)b \\ 2\gamma(a^2 + b^2 + c^2)c \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \gamma a \\ \gamma b \\ \gamma c \end{pmatrix}, \end{aligned}$$

$\theta=180^\circ$ , то  $d=0$  и  $|Q|^2=1=a^2+b^2+c^2$ . Тогда при любом действительном  $\gamma$ :

т.е. и при  $\theta=180^\circ$ ,  $(a, b, c)$  – это координаты оси поворота.

Другое, более простое рассуждение нахождения координат оси поворота подсказано Н.П. Долбилиным [2]: если в выражении  $QXQ^{-1}$ ,  $X=1$ , то  $Q1Q^{-1}=1$ . Значит, координата по действительной оси сохраняется. Следовательно,  $QXQ^{-1}$  – поворот трехмерного «мнимого» подпространства. Если же  $X=Q$ , то  $QQQ^{-1}=Q$ , т.е. при этом повороте  $\text{Im}(Q)$  остается неизменным, значит  $a, b, c$  – координаты оси поворота.

Отметим, что преобразование  $Y=QXQ^{-1}$  задает поворот трехмерного подпространства при любых  $|Q|>0$ . Преобразование  $QX\bar{Q}$  в общем случае задает поворот с гомотетией, а строгий поворот – только при  $|Q|=1$ . В этом случае коэффициенты  $a, b, c, d$  равны  $a=x\sin(\theta/2), b=y\sin(\theta/2), c=z\sin(\theta/2), d=\cos(\theta/2)$ , где  $x, y, z$  – координаты оси поворота в трехмерном пространстве  $\mathbf{R}^3$ , удовлетворяющие условию  $x^2+y^2+z^2=1$ , а  $\theta$  – угол поворота. Приведенный метод вывода матрицы поворота трехмерного пространства, использующий кватернионы, был предложен Кейли в 1845г. [3, 7, 8], преобразование координат, отвечающее трехмерному повороту, полученное с помощью координат оси и половины угла поворота, было открыто независимо Олиндом Родригесом гораздо более сложным способом [18]<sup>2</sup>. Матрицу  $m$  можно переписать в виде:

$$m = \begin{pmatrix} x^2(1-\cos\theta)+\cos\theta & xy(1-\cos\theta)-z\sin\theta & xz(1-\cos\theta)+y\sin\theta \\ xy(1-\cos\theta)+z\sin\theta & y^2(1-\cos\theta)+\cos\theta & yz(1-\cos\theta)-x\sin\theta \\ xz(1-\cos\theta)-y\sin\theta & yz(1-\cos\theta)+x\sin\theta & z^2(1-\cos\theta)+\cos\theta \end{pmatrix}$$

Преобразование координат, соответствующее этой матрице, было получено еще Эйлером, естественно без применения кватернионов [11].

Отметим, что  $(Q_1Q_2)^{-1}=Q_2^{-1}Q_1^{-1}$  при  $|Q_1|, |Q_2|>0$ . Действительно,  $Q_1Q_2Q_2^{-1}Q_1^{-1}=Q_11Q_1^{-1}=Q_1Q_1^{-1}=1$ . Тогда  $(Q_2Q_1)X(Q_2Q_1)^{-1}=Q_2Q_1XQ_1^{-1}Q_2^{-1}=Q_2(Q_1XQ_1^{-1})Q_2^{-1}$ , т.е. поворот в  $\mathbf{R}^3$ , заданный кватернионом  $Q_3=Q_2Q_1$  соответствует комбинации поворотов, соответствующих кватерниону  $Q_1$ , а затем – кватерниону  $Q_2$ . Очевидно также, что  $Q$  и  $-Q$  соответствуют одному и тому же повороту в  $\mathbf{R}^3$ . Поэтому группе поворотов в  $\mathbf{R}^3$  соответствует группа кватернионов, причем каждому повороту соответствует два кватерниона  $Q$  и  $-Q$ , таких, что  $|Q|=1$ . Если эти группы конечны, то группа кватернионов имеет в два раза больший порядок.

Опираясь на работу Браве [6] в которой перечислены точечные группы симметрии в символике Браве, Кейли выписал операции точечных групп поворотов симметрии в виде кватернионов [10]. Например, повороты тетраэдра записаны в следующем виде:

---

<sup>2</sup> Кейли хорошо знал эту работу, и ссылается на нее в [7, 8].

Таблица 1.

Повороты тетраэдра (взята из статьи [10]).

angle	Distances		Azimuths				$\cos X$	$\cos Y$	$\cos Z$	Rot. Symbols
angle	$\cos$	$\sin$	angle	$\cos$	$\sin$					
4 3-axes, $\frac{1}{2}$ Rot. angle = $60^\circ$ , $\cos = \frac{1}{2}$ , $\sin = \frac{1}{2}\sqrt{3}$ .										
54°44'	$\frac{1}{\sqrt{3}}$	$\frac{\sqrt{2}}{\sqrt{3}}$	45°	$+\frac{1}{\sqrt{2}}$	$+\frac{1}{\sqrt{2}}$	$+\frac{1}{\sqrt{3}}$	$+\frac{1}{\sqrt{3}}$	$+\frac{1}{\sqrt{3}}$	$\frac{1}{\sqrt{3}}$	$\frac{1}{2}(1+i+j+k)$
"	"	"	135°	-"	+"	-"	+"	+"	"	$\frac{1}{2}(1-i+j+k)$
"	"	"	225°	-"	-"	-"	-"	+	"	$\frac{1}{2}(1-i-j+k)$
"	"	"	315°	+"	,"	-,"	+"	,"	-,"	$\frac{1}{2}(1+i-j+k)$
3 2-axes, $\frac{1}{2}$ Rot. angle = $90^\circ$ , $\cos = 0$ , $\sin = 1$ .										
0°	1	0	*	*	*	0	0	1	k	
90°	0	1	0°	1	0	1	0	0	i	
"	"	"	90°	0	1	0	1	0	j	

**Повороты в четырехмерном пространстве**

Как уже было видно, если имеется кватернион  $Q$  с модулем  $|Q|=1$ , то  $G(Q)$  и  $G'(Q)$  – ортогональные матрицы  $4\times 4$ , с определителем, равным единице. Значит матрицы  $G(Q)$  и  $G'(Q)$  задают повороты в четырехмерном пространстве. Оказывается, любой поворот в четырехмерном пространстве можно записать в виде  $G(Q_1)G'(Q_2)$ , где  $Q_1$  и  $Q_2$  – кватернионы с абсолютной величиной, равной единице. Чтобы это доказать потребуются несколько свойств матриц  $G(Q)$  и  $G'(Q)$ , которые мы приведем вместе с их доказательствами:

$$G(Q_1Q_2)=G(Q_1)G(Q_2); \quad (5)$$

Доказательство: Для любого кватерниона  $X$ ,  $Q_1Q_2X=G(Q_1Q_2)X$ ;  
 $Q_1Q_2X=G(Q_1)Q_2X=G(Q_1)G(Q_2)X$ .

$$G'(Q_1Q_2)=G'(Q_2)G'(Q_1); \quad (6)$$

Доказательство:  $XQ_1Q_2=G'(Q_1Q_2)X$ ;  
 $XQ_1Q_2=G'(Q_2)XQ_1=G'(Q_2)G'(Q_1)X$ .

$$G(Q_1)G'(Q_2)=G'(Q_2)G(Q_1); \quad (7)$$

Доказательство:  $Q_1XQ_2=G(Q_1)XQ_2=G(Q_1)G'(Q_2)X$ ;  
 $Q_1XQ_2=G'(Q_2)Q_1X=G'(Q_2)G(Q_1)X$ .

$$(G(Q))^{-1}=G(Q^{-1}); \quad (8)$$

Доказательство:  $G(Q)G(Q^{-1})=G(QQ^{-1})=G(1)=E$  (единичная матрица  $4\times 4$ ).

$$(G'(Q))^{-1} = G'(Q^{-1}): \quad (9)$$

Доказательство:  $G'(Q)G'(Q^{-1})=G'(Q^{-1}Q)=G'(1)=E$ .

Известно, что  $Y=Q_1XQ_2$  – общий вид поворотного растяжения в четырехмерном пространстве  $R^4$ , сохраняющего начало координат [3, 9], или – общий вид поворота, если  $|Q_1|=|Q_2|=1$ . Покажем это, следуя [1]. Пусть  $U$  – ортогональная матрица  $4\times 4$  с определителем  $\det(U)=1$ , соответствующая общему виду поворота в  $R^4$ . Пусть  $U\cdot 1=\gamma$ . Очевидно, что  $|\gamma|^2=1$ . Тогда, умножив слева обе части равенства на  $\gamma^{-1}$ , получим, что  $\gamma^{-1}U\cdot 1=\gamma^{-1}\gamma=1 \Leftrightarrow G(\gamma^{-1})U\cdot 1=1$ . Значит,  $G(\gamma^{-1})U$  – матрица специального вида, соответствующая повороту в «мнимом» подпространстве  $R^3$ , представимая в виде произведения  $G(\gamma^{-1})U = G(\alpha)G'(\alpha^{-1})$ . Тогда  $U=G(\gamma)G(\alpha)G'(\alpha^{-1})=G(\gamma\alpha)G'(\alpha^{-1})$ . Здесь было применено свойство (8) и свойство (5).

### Точечные группы поворотов симметрии в четырехмерном пространстве

Если некоторое множество кватернионов образует группу, то и множество соответствующих матриц вида  $G(Q)$  образует группу. То же самое относится и к множеству матриц вида  $G'(Q)$ . Справедливость свойств (5), (6), (8), (9) делает доказательство этих утверждений очевидным. Отсюда автоматически следует, что любая группа поворотов в  $R^4$  представима произведениями вида  $G(Q_i)G'(Q_j)$ .

**Теорема.** Если имеются две группы кватернионов  $\{P_i\}$  и  $\{Q_j\}$ , то и множество матриц  $\{G(P_i)G'(Q_j)\}$  с независимым перечислением элементов из  $\{P_i\}$  и  $\{Q_j\}$ , также образует группу.

**Доказательство.** Согласно Шмидту, если  $A$  и  $B$  – группы с общей единицей, то множество  $AB$  образует группу тогда и только тогда, когда произведение  $AB$  перестановочно, т.е.  $AB=BA$  [5]. Перестановочность  $G(P_i)G'(Q_j)=G'(Q_j)G(P_i)$  следует из свойства (7).

Конечные группы движений в  $R^4$  были выведены Гурса в 1889 году [12] именно путем комбинаций трехмерных групп симметрии.

*Работа поддержанна Российской фондом фундаментальных исследований, грант №08-01-90102.*

### Список литературы

1. Долбилин Н.П. О правильных разбиениях Дирихле сферы / М., 1972, 82 с.
2. Долбилин Н.П. Устное сообщение.

3. Клейн Ф. Элементарная математика с точки зрения высшей. Т1. М.: «Наука». 1987. 110 с.
4. Шилов Г.Е. Математический анализ. Конечномерные линейные пространства / М.: «Наука». 1969. 311 с.
5. Шмидт О.Ю. Абстрактная теория групп / Киев, 1916, 39 с.; Schmidt O.Yu. Abstract theory of groups / Freeman. 1966. P. 31-32.
6. Bravais A. Memoire sur les polyedres de forme symetrique // Journal de Mathematiques Pures et Appliquees (Journal de Liouville), vol. XIV. 1849. P. 141-180.
7. Cayley A. On certain results relating to quaternions // Philosophical Magazine, vol. XXVI. 1845. P. 141-145.
8. Cayley A. On the application of quaternions to the theory of rotation // Philosophical Magazine, vol. XXXIII. 1848. P. 196-200.
9. Cayley A. On the homographic transformation of a surface of the second order into itself // Philosophical Magazine, vol. VII. 1854. P. 208-212.
10. Cayley A. Notes on polyhedra // Quarterly Journal of Pure and Applied Mathematics, vol. VII. 1866. P. 304-316.
11. Euler L. Nova methodus motum corporum rigidorum determinandi // Novi Commentarii academiae scientiarum Petropolitanae 20. 1776. P. 208-238.
12. Goursat E. Sur les substitutions orthogonales et les divisions régulières de l'espace// Annales scientifiques de l'École Normale Supérieure Sér. 3, 6 (1889). P. 9-102.
13. Hamilton W. R. On quaternions; or on a new system of imaginaries in algebra// The London, Edinburgh and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science vol. XXV. July 1844. P. 10-13.
14. Hamilton W. R. Letter to Graves on quaternions; or on a New System of Imaginaries in Algebra// Phil. Mag. Vol. XXV. 1844. P. 489-495.
15. Hamilton. W. R. On a new Species of Imaginary Quantities connected with a theory of Quaternions. (Read November 13, 1843) // Proceedings of the Royal Irish Academy. Vol. 2. 1844. P. 424-434.
16. Hamilton. W. R. On a Theory of Quaternions//Report of the Fourteenth Meeting of the British Association for the Advancement of Science; held at York in September 1844. (John Murray, London, 1845). Part II. P. 2.
17. Klein F. Vorlesungen über das Icosaeder und die Auflösung der Gleichungen von fünften Grade. Teubner Leipzig 1884 S. 35-36; перевод на русский: Ф. Клейн лекции об икосаэдре и решении уравнений пятой степени // М.: «Наука». 1989. С. 40-41].
18. Olinde Rodrigues B. Des lois géométriques qui régissent les déplacements d'un système solide dans l'espace, et de la variation des coordonnées provenant de ces déplacements considérés indépendamment des causes qui peuvent les produire // Journal de Mathématiques Pures et Appliquées (Journal de Liouville). Ser. I, 5. 1840. P. 380-440.

## КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ЛОКАЛЬНОЙ СТРУКТУРЫ И СВОЙСТВ БИНАРНЫХ ТВЕРДЫХ РАСТВОРОВ

Леоненко Е.В., Урусов В.С., Еремин Н.Н.  
Московский Государственный Университет им. Ломоносова,  
Геологический ф-т, Москва, <egorleo@mail.ru>

Методом атомистических парных потенциалов проведено компьютерное моделирование структур, упругих и термодинамических свойств твердых растворов галит-сильвин  $\text{NaCl}-\text{KCl}$  и рутил-кассiterит  $\text{TiO}_2-\text{SnO}_2$  при помощи программного комплекса GULP [2], в основе которого лежит поиск минимума структурной энергии.

Параметры потенциалов межатомного взаимодействия получены оптимизацией в расчетах структурных (параметров ячейки и координат атомов), упругих (модуля сжатия и упругих констант) и термодинамических свойств (энтропии  $S_T$ ) чистых компонентов твердых растворов при стандартных условиях (298 К, 1 атм). Значения  $S_T$ , найденные в температурном интервале от 300 до 1100 К для галита и сильвина и от 300 до 1500 К для рутила и кассiterита с помощью моделирования, хорошо согласуются с экспериментальными данными.

Учитывая практически чисто ионный характер химической связи в галогенидах, для расчета структуры и свойств  $\text{NaCl}$  и  $\text{KCl}$  была использована чисто ионная модель со степенью ионности кристалла  $f = 1$ . Структурная энергия кристалла находилась суммированием кулоновского взаимодействия и потенциала Букингема.

Структура и свойства кристаллов  $\text{TiO}_2$  и  $\text{SnO}_2$  вычислялись в рамках ионной и ионно-ковалентной моделей. В случае ионной модели структурная энергия находились суммированием кулоновского взаимодействия и потенциала Букингема. Для учета поляризации ионов была использована оболочечная модель атома. Согласно проведенным расчетам, ионная модель хорошо описывает структурные и термодинамические свойства рутила и кассiterита, но упругие свойства оказываются сильно завышенными. Выбор степени ионности  $f$  рутила  $\text{TiO}_2$  и кассiterита  $\text{SnO}_2$  в рамках ионно-ковалентной модели основывался на литературных данных по расчету зарядов ионов  $\text{Ti}$  и  $\text{Sn}$ , было выбрано значение  $f = 0.7$ . Для учета ковалентного связывания был использован потенциал Морзе. Ионно-ковалентная модель хорошо описывает как структурные и термодинамические, так и упругие свойства рутила и кассiterита.

В рамках этих моделей было проведено моделирование точечных

дефектов в этих кристаллах с помощью модели Мотта-Литлтона. Для галита и сильвина рассчитаны энергии образования изолированных примесных дефектов  $\text{NaCl}$ :  $\text{K}^+$  и  $\text{KCl}$ :  $\text{Na}^+$ . Для рутила и кассiterита вычислены энергии образования вакансий и интерстиций анионов и катионов, примесного дефекта в  $\text{SnO}_2$ :  $\text{Ti}^{4+}$  и в  $\text{TiO}_2$ :  $\text{Sn}^{4+}$ , тройных дефектов Шоттки и катионных и анионных дефектов Френкеля. Расчет был проведен как по ионной, так и по ионно-ковалентной моделям. Расчет по ионно-ковалентной модели лучше согласуется с экспериментальными данными [4], чем расчеты по ионной модели и «из первых принципов».

Моделирование неупорядоченных концентрированных твердых растворов осуществлялось в сверхячейках с учетверенными параметрами структур кристаллов, содержащей 384 атома. Катионы  $\text{K}$  и  $\text{Na}$  в системе  $\text{KCl-NaCl}$  и катионы  $\text{Ti}$  и  $\text{Sn}$  в системе  $\text{TiO}_2\text{-SnO}_2$  случайным образом распределялись в пределах катионной подрешетки с помощью программы Binar [8]. При этом соотношения катионов соответствовали твердым растворам с определенным составом:  $\text{K}_x\text{Na}_{1-x}\text{Cl}$  при  $x = 0.125, 0.25, 0.5, 0.75$  и  $0.875$  и  $\text{Ti}_x\text{Sn}_{1-x}\text{O}_2$  при  $x = 0.25, 0.5$  и  $0.75$ .

В результате расчетов для этих твердых растворов найдены следующие свойства смешения: энталпия  $\Delta H$ , параметр взаимодействия  $Q$ , энтропия  $\Delta S$ , отклонения объема  $\Delta V$  и модуля сжатия  $\Delta K$  от аддитивности.

Для твердого раствора галит-сильвин полученные результаты находятся в хорошем согласии со структурными, механическими и термохимическими экспериментальными данными [1, 5, 6], а также существенно уточняют представления феноменологической теории твердых растворов [7]. На основании рассчитанных термодинамических свойств смешения оценены значения энергии Гиббса  $\Delta G$  и области стабильности (критическая температура, пределы смесимости на основе обоих компонентов) твердого раствора, которые хорошо согласуются с экспериментальной диаграммой состояния для системы  $\text{NaCl-KCl}$  [1].

Результаты расчета свойств смешения твердого раствора рутил-кассiterит не согласуются полностью с экспериментальными данными [3]. Однако расчет по ионно-ковалентной модели в большей степени соответствует представлениям феноменологической теории твердых растворов.

На основе данных по координатам атомов в сверхячейке, полученных в результате оптимизации структуры при моделировании, проведен анализ искажений структуры эквимолярных твердых растворов  $\text{K}_{0.5}\text{Na}_{0.5}\text{Cl}$  и  $\text{Ti}_{0.5}\text{Sn}_{0.5}\text{O}_2$  за счет релаксации всех позиций атомов и сдвигов катионов и анионов из их идеальных положений. При этом использованы программы

Gistogramma и Relax [9]. Точечная симметрия всех ионных позиций 1.

Анализ релаксации кристаллической структуры твердого раствора  $K_{0.5}Na_{0.5}Cl$  дает более детальную картину локальной структуры по сравнению с феноменологической теорией. В частности, наблюдается тенденция к более заметному увеличению расстояния Na-Cl по сравнению с расстоянием K-Cl. На рис. 1 распределение межатомных расстояний в твердом растворе (кривые линии) сравнивается межатомными расстояниями в чистых галите и сильвине (вертикальные линии).

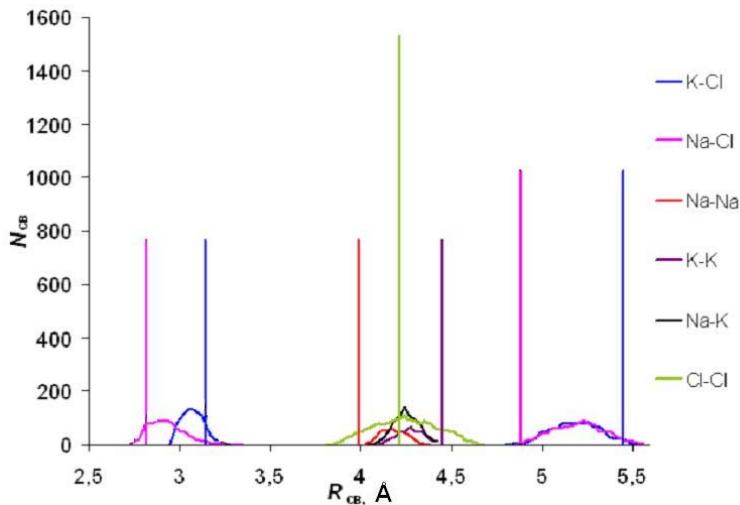


Рис. 1. Частотная диаграмма межатомных расстояний в сверхячейке  $4 \times 4 \times 4$  твердого раствора  $Na_{0.5}K_{0.5}Cl$ .

Для  $K_{0.5}Na_{0.5}Cl$  вычислены значения электростатического потенциала (с симметрией  $\bar{1}$ ) в равновесных позициях всех ионов в твердом растворе зависят как от среднего межатомного расстояния, так и от степени искажения ближайшего окружения катионов  $K^+$  и  $Na^+$  и особенно анионов  $Cl^-$ .

Величина смещений ионов в  $Ti_{0.5}Sn_{0.5}O_2$  в результате релаксации была оценена с помощью среднеквадратичного сдвига каждого иона  $\omega_i$  ( $\text{\AA}^2$ ), который был рассчитан по формуле:

$$\omega_i = \sum_{j=1}^n (R_{i-j} - R'_{i-j})^2 / n,$$

где  $R_{i-j}$  – расстояния между ионом ( $i$ ) и соседними атомами ( $j$ ) в неискаженной структуре рутила, а  $R'_{i-j}$  – соответствующие расстояния в твердом растворе,  $n$  – количество атомов, принимаемых в рассмотрение. На рис. 2 представлены результаты статистического анализа среднеквадратичных сдвигов ионов в твердом растворе. Видно, что анионы сильнее смещаются со своих идеальных позиций в структуре рутила, чем катионы, а атомы Sn смещаются сильнее, чем Ti.

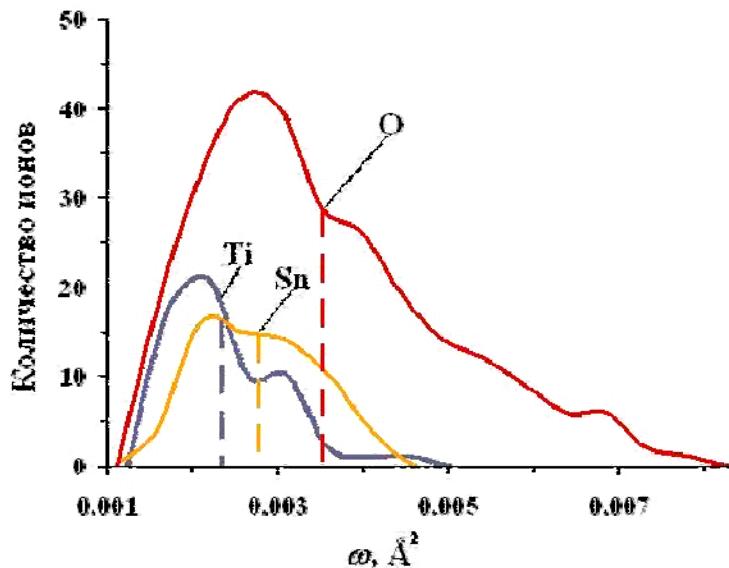


Рис. 2. Частотная диаграмма среднеквадратичных сдвигов ионов в сверхъячейке  $4 \times 4 \times 4$  твердого раствора  $\text{Ti}_{0.5}\text{Sn}_{0.5}\text{O}_2$ . Пунктиром показаны средние значения подвижности Ti, Sn и O.

Для того чтобы оценить релаксацию структуры за счет различных катионных позиций, были рассчитаны податливости катионов  $c_s$  по формуле:

$$c_s = (\bar{R} - R_i) / \Delta R, \quad (3-10)$$

где  $\bar{R}$  – среднее межатомное расстояние в первой координационной сфере позиции в твердом растворе,  $R_i$  – соответствующее расстояние в чистом кристалле – компоненте твердого раствора,  $\Delta R$  – разность межатомных расстояний в кристаллах компонентов бинарного твердого раствора. На рис. 3 представлена диаграмма распределения катионов по их податливости.

Из рисунка видно, что позиции ионов Ti более податливы, чем позиции Sn.

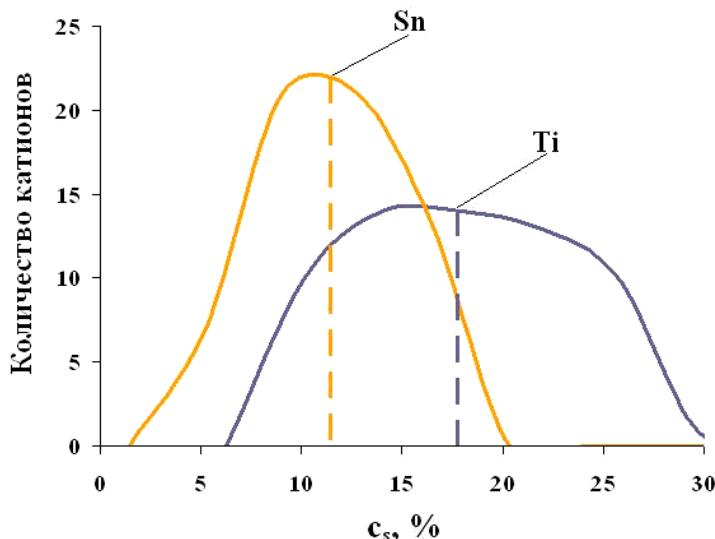


Рис. 3. Частотная диаграмма податливости катионов в сверхъячейке  $4 \times 4 \times 4$  твердого раствора  $\text{Ti}_{0.5}\text{Sn}_{0.5}\text{O}_2$ . Пунктиром показаны средние значения податливости Ti и Sn.

#### Список литературы

1. Еремин Н.Н., Деянов Р.З., Урусов В.С. // Физика и Химия Стекла, 34, 1, 10, (2008).
2. Талис Р.А. // Тезисы конференции Ломоносов-2008.
3. Barett W.T., Wallace W.E. // J. Amer. Chem. Soc. 1954. Vol. 76. P. 366–369.
4. Gale J.D., Rohl A.L. // Mol. Simul., 29, 5, 291, (2003).
5. Park M., Mitchell T.E., Heuer A.H., // J. Am. Ceram. Soc., 58, 1, 43, (1975).
6. Picard C., Gerdanian P. // J. Solid St. Chem., 14, 66, (1974).
7. Walker D., Verma P.K., Cranswick L.M.D. et al. // Amer. Miner. 2004. Vol. 89. P. 204–210.
8. Walker D., Verma P.K., Cranswick L.M.D. et al. // Ibid. 2005. Vol. 90. P. 229–239.
9. Urusov V.S., The phenomenological theory of solid solutions. In Geiger, C.A. (ed.): Solid solutions in silicate and oxide systems /EMU Notes Mineral., 3/. Budapest: Eötvös Univ. Press, (2001).

# О ЧИСЛЕ СТОРОН ЯЧЕЕК БИПРАВИЛЬНОГО РАЗБИЕНИЯ ПЛОСКОСТИ

Маринин Е.С.  
Механико-математический факультет МГУ  
Москва, <[kloplion@list.ru](mailto:kloplion@list.ru)>

В данной работе затрагиваются вопросы, относящиеся к геометрической кристаллографии и дискретной геометрии. Для нас, в первую очередь, будут представлять интерес такие расположения многоугольников (ячеек) на плоскости, которые удовлетворяют условиям *упаковки* (то есть многоугольники не пересекаются по внутренним точкам) и *покрытия* (то есть каждая точка плоскости покрыта многоугольником) одновременно. Такие расположения тел называются *разбиением* плоскости. Разбиение называется *нормальным* или *face-to-face* (*грань-в-грань*), если любые 2 ячейки либо не имеют общих точек, либо имеют общую вершину, либо имеют общее ребро. Другими словами, если любая вершина любого многоугольника принадлежит еще не менее чем двум другим ячейкам, то разбиение нормальное. Так, одним из центральных понятий геометрии чисел является понятие параллелоэдра. Параллелоэдр – это многогранник, который допускает разбиение пространства параллельными копиями нормальным образом. В силу нормальности разбиение на параллелоэдры обладает трансляционной группой симметрий, транзитивно действующей на множестве параллелоэдров. Другими словами, разбиение на параллелоэдры имеет решеточное строение. Обобщением понятия параллелоэдра является понятие стереоэдра. *Стереоэдром* называется многогранник, который допускает разбиение пространства конгруэнтными копиями такое, что его группа симметрий действует транзитивно на множестве всех ячеек данного разбиения. Транзитивность действия группы движений означает, что произвольную ячейку разбиения можно перевести в любую другую ячейку этого разбиения, посредством некоторой симметрии данного разбиения. Подобные разбиения пространства называются правильными. Множество стереоэдров распадается на  $h$  трансляционно правильных орбит. Б.Н. Делоне и Н.Н. Сандакова нашли оценку сверху для числа гиперграней  $d$ -мерного стереоэдра  $f_{d-1} \leq 2(2^d - 1) + (h-1)2^d$ . Эта теорема обобщает оценку Минковского  $f_{d-1} \leq 2(2^d - 1)$  для числа гиперграней параллелоэдра (при  $h=1$ ). Позднее она была улучшена А.Тарасовым. В отличие от результата Минковского, более общая оценка не является точной. Из оценки Делоне-Сандаковой была выведена конечность числа комбинаторно неэквивалентных типов нормальных правильных разбиений пространства на выпуклые многогранники. Геометрия чисел имеет многочисленные приложения в кристаллографии.

Простейшая модель кристалла – это правильное разбиение. Атомы кристалла являются узлами решетки или мультирешетки. В кристалле расположение атомов периодично: сколь угодно большой фрагмент повторяется бесконечное число раз. Положение ближних атомов обусловлено наличием геометрии межатомных химических связей. Атомы одного наименования в процессе кристаллизации стараются окружить себя идентичным образом. Так как взаимодействие между далекими атомами ничтожно, то с физической точки зрения подобная идентичность может быть гарантирована лишь в окрестности каждого атома, а глобальный порядок должен быть следствием локальной идентичности. Приведенное выше определение правильности разбиения использует понятие группы явным образом. Гильберт и Конфоссен требование правильности переформулировали менее формально, а именно: разбиение правильное, если каждая его ячейка окружена до бесконечности так же, как и любая другая. На первый взгляд, в нем не используется понятие группы. Но, как мы видим, это определение носит глобальный характер. Оно, по существу, эквивалентно первому определению. Ведь уточнение того, что все ячейки разбиения окружены другими ячейками до бесконечности идентично, и состоит в том, что каждую ячейку можно перевести в любую другую ячейку движением, совмещающим все разбиение с собой. Но это и есть условие транзитивности группы симметрий разбиения на множестве его ячеек. Таким образом, определение правильности Гильберта и Конфоссена опирается на понятие группы, и эти два определения эквивалентны. Понятие правильности можно обобщить. Нормальное разбиение пространства называется *мультиправильным* или *m-эдральным*, если множество ячеек разбиения состоит из конечного числа  $m$  типов (орбит) ячеек относительно группы симметрий разбиения. При  $m=1$  получаем правильное разбиение, если  $m=2$ , то разбиение называется *биправильным*. Короной радиуса 0 некоторого многоугольника называется сама ячейка, короной радиуса  $k$  ( $k$  – натуральное) многоугольника называется множество ячеек из короны  $(k-1)$  и имеющих с ними общие точки. Н.П. Долбилиным и М.И. Штогриным были найдены локальные условия, необходимые и достаточные для того, чтобы разбиение (а также точечное множество Делоне) были мультиправильными с заданным числом  $m$  орбит. Эта теорема для разбиений формулируется следующим образом:

**Локальная теорема.** Для любого натурального  $m$  разбиение  $T$  является  $m$ -эдральным тогда и только тогда, когда существует такое натуральное  $k$ , что

- (1) Число классов корон радиуса  $k$  и  $(k-1)$  равно  $m$ ;
- (2) Группы симметрий корон радиуса  $(k-1)$  и  $k$  совпадают для каждого многоугольника в разбиении.

Заметим, что группа симметрий корон с увеличением радиуса не возрастает. Пусть в  $T$  число сторон многоугольников ограничено сверху некоторой константой. Тогда найдется такое  $k$ , что для каждого много-

угольника в разбиении группы симметрий корон радиуса  $(k-1)$  и  $k$  будут одинаковыми. Таким образом, если в  $T$  число классов корон радиуса  $k$  и  $(k-1)$  равно  $m$ , то можно утверждать, что разбиение  $m$ -эдральное.

Для  $m=1$  оценка на число сторон – 3, 4, 5, 6, причем в одной вершине может сходиться не более 12 ячеек.

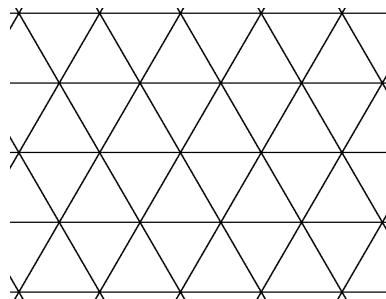


Рис. 1. Правильное разбиение плоскости на треугольники.

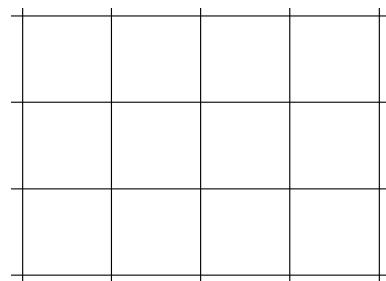


Рис. 2. Правильное разбиение плоскости на четырёхугольники.

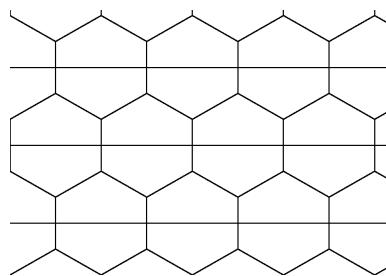


Рис. 3. Правильное разбиение плоскости на пятиугольники.

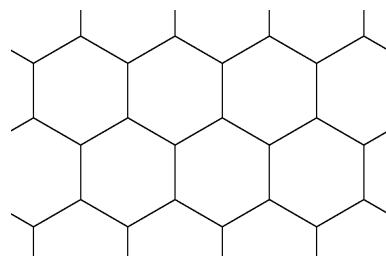


Рис. 4. Правильное разбиение плоскости на шестиугольники.

Этот случай не представляет сложности для изучения. Гораздо сложнее при больших значениях  $m$ . Автором статьи доказана следующая теорема:

**Теорема.** В биправильном разбиении плоскости на выпуклые многоугольники количество сторон ячеек не превосходит 18.

На самом деле оценка 18 точная. Пример был предложен Я..В. Кучериненко (см. рис. 5).

Приведем план доказательства и его основные моменты.

Рассмотрим биправильное разбиение  $T$  плоскости на выпуклые многоугольники. Внутри каждой ячейки  $F_i$  отметим ее центр тяжести  $O_i$ , который, заметим, при любой симметрии ячейки в себя остаётся неподвижным. Так как разбиение  $T$  биправильное, ячейки  $F_i$  распределяются по двум орбитам  $\mathbf{F}_1$  и  $\mathbf{F}_2$ :  $\mathbf{F}_1 \cap \mathbf{F}_2 = \emptyset$ ,  $\mathbf{F}_1 \cup \mathbf{F}_2 = T$ , причём если

$F_i, F_j \in \mathbf{F}_k$  ( $k=1,2$ ), то существует движение  $g_{ij}$  такое, что  $g_{ij}(F_i) = F_j$  и  $g_{ij}(T) = T$ .

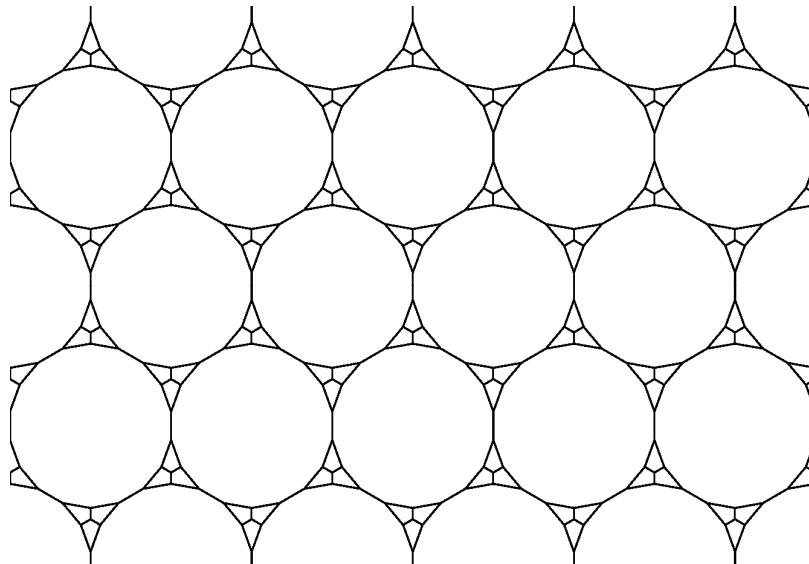


Рис. 5. Пример биправильного разбиения плоскости на 18-угольники и четырёхугольники.

Обозначим через  $\mathbf{O}$  множество всех барицентров  $O_i$  ячеек  $F_i \in T$ . Очевидно, что  $\mathbf{O} = \mathbf{O}_1 \cup \mathbf{O}_2$ ,  $\mathbf{O}_1 \cap \mathbf{O}_2 = \emptyset$ , где  $\mathbf{O}_k$  множество барицентров ячеек  $F_i \in \mathbf{F}_k$  ( $k=1,2$ ). Точки  $O_i, O_j \in \mathbf{O}$  соединим ребром, если соответствующие ячейки  $F_i, F_j$  имеют общее ребро. Полученный граф  $\Gamma$  назовём *графом разбиения*. Соответственно  $O_i, O_j \in \mathbf{O}_k$  ( $k=1,2$ ) соединим ребром, если  $F_i, F_j \in \mathbf{F}_k$  имеют общее ребро. Получившийся граф  $\Gamma_k$  ( $k=1,2$ ) назовём *подграфом типа k*. Отличие от обычного графа в том, что нам важны длины ребер и углы между ними. Вершину с выходящими из неё рёбрами назовём *ежом*. В силу построения дуальный график остается инвариантным при любом движении исходного разбиения в себя, причем существует движение, переводящее любую ячейку в любую эквивалентную, соответственно ежа в ежа. Таким образом, все ежи вершин одной орбиты конгруэнтные. Заметим, что  $\Gamma$ ,  $\Gamma_1$  и  $\Gamma_2$  всегда будут планарными, то есть при их построении рёбра можно "искривить" так, чтобы они не пересекались.

Рассмотрим свойства дуальных подграфов.

- (1) а) Если количество ребер в еже  $\Gamma_k$  ( $k=1,2$ ) не менее 5, то  $\Gamma_k$  ( $k=1,2$ ) будет связным.
- б) Если  $\Gamma_k$  ( $k=1,2$ ) несвязный, то в еже не более 4 ребер, причем если компоненты связности конечны, то в еже не более 2 ребер.

Доказательство опирается на рассмотрение границы граней дуального графа.

(2) Количество ребер в еже  $\Gamma_k$  ( $k=1,2$ ) не превосходит 6.

Доказательство этого факта следует из свойств правильного разбиения.

(3) Если один из  $\Gamma_k$  ( $k=1,2$ ) связный, то другой распадается на конечные компоненты связности.

Это следует из планарности дуального графа.

Дальнейшее сводится к доказательству следующих трех утверждений.

**Утверждение.** Если компоненты связности графа  $\Gamma_k$  ( $k=1,2$ ) число ребер всех вершин  $\Gamma$  превосходит 18.

**Утверждение.** Если  $\Gamma_k$  ( $k=1,2$ ) несвязный, причем компоненты связности бесконечные, то валентность вершин  $\Gamma$  не превосходит 10.

**Утверждение.** Если  $\Gamma_k$  ( $k=1,2$ ) связный, то валентность вершин  $\Gamma$  не превосходит 18.

Автор выражает благодарность своему научному руководителю Н.П. Долбилину за постановку задачи и Я.В. Кучериненко за предоставленные рисунки и обсуждения.

## АСПЕКТЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ ДИФРАКЦИОННОГО ПРОФИЛЯ КРИСТОБАЛИТА

Наумкина Н.И., Ильинчёва О.М.  
ФГУП «ЦНИИгеолнеруд», Казань, [atsic@geolnerud.com](mailto:atsic@geolnerud.com)

Как правило, получаемые на практике рентгенодифракционные спектры природных образцов, представляют собой сложный профиль [1, 2, 4]. Не всегда это связано только с наложением рефлексов отдельных фаз. Зачастую свой вклад в искажение дифракционного профиля вносит отклонение природных минералов от идеальной структуры, наличие полиморфных модификаций. Поэтому выполнить количественный фазовый анализ на должном уровне весьма затруднительно в силу невозможности подобрать точный природный эталон сравнения [2]. Одним из таких минералов является кристобалит (диоксид кремния). Использование теоретических рассчитанных рентгенограмм может расширить границы применимости фазового количественного рентгенографического анализа.

Различие структурных форм кристобалита определяется условиями его происхождения, образуя бесконечное разнообразие твердых растворов [3]. В зависимости от условий синтеза образуются как высокотемпературная полиморфная модификация кристобалита, например, в керамическом производстве, так и плохо раскристаллизованные фазы типа кристобалита –

аморфные гели при химическом осаждении, стекла при охлаждении кремнезема из расплава. В природных образцах наблюдаются в основном низкотемпературные модификации  $\alpha$ -кристобалита - от хорошо окристаллизованного до плохо раскристаллизованного или квазикристаллического (рентгеноаморфного), который часто называют опал-кристобалитом или опалом. Свою лепту в искажение структуры вносят примеси других элементов (например, Na или Al), адсорбционная вода, вхождение OH-группы вместо кислорода, особенно характерное для опала в силу его тонкодисперсности. Полиморфные превращения кристобалита сопровождаются изменением объема.

Изменчивость реальной структуры, полиморфизм отчетливо проявляется на рентгенограммах (рис. 1). Экспериментальные дифракционные кривые порошковых полиморфных образцов кристобалита были получены на рентгеновском дифрактометре D8 ADVANCE фирмы Bruker с использованием монохроматизированного излучения CuK $\alpha_1$  с длиной волны

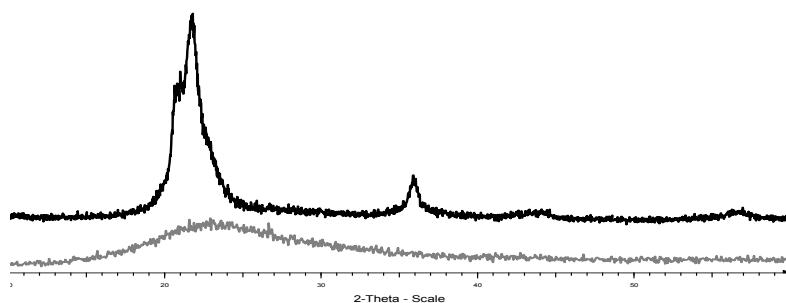


Рис. 1 Дифрактограммы полиморфных модификаций кристобалита - упорядоченного (верху) и аморфного (внизу).

0.1540596 нм. Регистрация проводились в режиме шагового сканирования (шаг 0.02  $^{\circ}$ 2 $\theta$ , время экспозиции в точке 3 сек.). Наибольший интерес представляет относительно небольшая угловая область от 18 до  $25^{\circ}\Theta$  на медном излучении. Именно здесь сосредоточена основная информация, позволяющая воспроизвести структуру – вид дифракционного профиля, его полуширота, угловое положение. Проведение полнопрофильного анализа в данной работе было реализовано с помощью программы TOPAS (фирмы Bruker AXS) и freeware программа PowderCell.

TOPAS – это программа уточнения структуры и количественного анализа минеральных фаз по дифракционной картине. Она основана на принципе «синтезирования» рентгенограммы, т.е. построения дифракционных картин по данным о кристаллической структуре для каждой фазы,

присутствующей в образце. Эти построенные (теоретические) картины суммируются и приближаются к рентгенограмме реальной пробы по методу наименьших квадратов. Основы описанного метода см. в [6, 8]. Рассматриваемая программа позволяет учитывать самые различные параметры, которые определяют профиль рассчитываемой кривой: инструментальный нуль, факторы ширины пика, значения параметров элементарной ячейки, фактор формы Pearson VII, преимущественная ориентация, асимметрия, экстинкция, температурный фактор.

Программа PowderCell (PCW) предназначена для интуитивной генерации начальных моделей структуры (более 740 различных установок типов пространственных групп), которые используются в процедурах уточнения, например, в ритвельдовских программах. С помощью PCW можно трансформировать различные установки от одного типа пространственной группы к другому для моноклинной, орторомбической и ромбодрической сингоний, варьировать структуру внутри элементарной ячейки, используя вращение и трансляцию выбранных атомов или молекул, имитировать различные условия дифракции, например: длина волны излучения, расщепление дублета, геометрия эксперимента, переменные щели, предпочтительная ориентация, аномальное рассеяние, любые объемные или массовые фракции в смеси фаз и т.д. Сравнение с экспериментальной дифрактограммой дает качественную оценку правильности интуитивно выбранной модели.

Кристаллическая структура кристобалита сложена тетраэдрами  $\text{SiO}_4$ , которые формируют открытый трёхмерный каркас и соединяются через общие кислороды (рис. 2). При высоких температурах образования в идеальной структуре кристобалита идет переслаивание по типу ABCABC... вдоль направления [111]. С понижением температуры увеличивается количество ABAB... слоев, строгая пространственная трехмерная упорядоченность нарушается, что отражается на условиях возникновения рентгеновской дифракции и, следовательно, на виде дифракционного профиля (рис. 1), положении рефлексов, значениях параметров элементарной ячейки. Кроме того, картина может обладать асимметрией в распределении угловой интенсивности и различным функциональным характером вблизи вершины и основания для каждого рефлекса.

Рассчитанные рентгеноструктурные данные некоторых кристобалитов приведены в таблице 1, источником послужила международная база порошковой дифрактометрии [7].

Помимо приведенных в таблице 1 данных для построения теоретического дифракционного профиля необходимо знать пространственную заселенность кристаллографических позиций атомами определенного сорта, в нашем случае кремнием и кислородом.

Таблица 1.

Рентгеноструктурные параметры кристобалита.

Номер карточки PDF	Название минерала	Сингония	Пространственная группа	Параметры элемент. ячеек, Å			d max, Å	$hkl$	Диагностические данные порошковых рентгенограмм
				a	c	$\alpha$			
27-0605	Cristobalite, high	F.c. cubic	Fd3m	7.130	-	362.47	4.11	111	
76-0934	Cristobalite high	F.c. cubic	Fd-3m	7.166	-	367.99	4.14	111	
85-0621	Cristobalite high	Cubic	P2 <sub>1</sub> 3	7.160	-	367.06	4.13	111	
39-1425	Cristobalite, syn	Tetragonal	P4 <sub>1</sub> 2 <sub>1</sub> 2	4.973	6.924	171.24	4.04	101	
76-0935	Cristobalite low	Tetragonal	P4 <sub>1</sub> 2 <sub>1</sub> 2	4.979	6.950	172.28	4.05	101	
76-0938	Cristobalite low	Tetragonal	P4 <sub>1</sub> 2 <sub>1</sub> 2	4.990	6.992	174.09	4.06	101	
76-0941	Cristobalite low	Tetragonal	P4 <sub>1</sub> 2 <sub>1</sub> 2	4.998	7.024	174.49	4.07	101	
77-1315	Cristobalite low, syn	Tetragonal	P4 <sub>1</sub> 2 <sub>1</sub> 2	4.957	6.890	169.31	4.02	101	
77-1317	Cristobalite low, syn	Tetragonal	P4 <sub>1</sub> 2 <sub>1</sub> 2	4.988	6.970	173.39	4.06	101	
82-0512	Cristobalite	Tetragonal	P4 <sub>1</sub> 2 <sub>1</sub> 2	4.997	7.070	176.54	4.08	101	
82-1233	Cristobalite alpha	Tetragonal	P4 <sub>1</sub> 2 <sub>1</sub> 2	4.950	6.876	168.49	4.02	101	
82-1235	Cristobalite alpha	Tetragonal	P4 <sub>1</sub> 2 <sub>1</sub> 2	4.876	6.716	159.66	3.95	101	
82-1403	Cristobalite alpha, syn	Tetragonal	P4 <sub>1</sub> 2 <sub>1</sub> 2	4.978	6.932	171.78	4.04	101	
82-1406	Cristobalite alpha, syn	Tetragonal	P4 <sub>1</sub> 2 <sub>1</sub> 2	4.923	6.817	165.20	3.99	101	
82-1407	Cristobalite alpha, syn	Tetragonal	P4 <sub>1</sub> 2 <sub>1</sub> 2	4.912	6.789	163.79	3.98	101	
82-1410	Cristobalite alpha, syn	Tetragonal	P4 <sub>1</sub> 2 <sub>1</sub> 2	4.965	6.895	169.97	4.03	101	

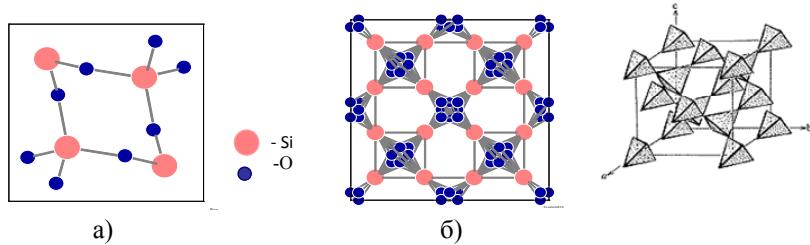


Рис. 2. Кристаллические структуры  $\alpha$ -кристобалита в проекции (001) (а),  $\beta$ -кристобалита в проекции (001) и (hkl) (б).

Атомы высокотемпературного кристобалита заселены в соответствии с пространственной группой Fd3m. Причем три ряда занимают 8 атомов кремния и 4 кислорода в следующих позициях: ( $u, u, u$ ); ( $u+\frac{1}{2}, \frac{1}{2}-u, -u$ ); ( $\frac{1}{2}-u, -u, u+\frac{1}{2}$ ); ( $-u, u+\frac{1}{2}, \frac{1}{2}-u$ ), в которых для Si(I) значение  $u$  равно 0.255, для Si(II) –  $u = -0.008$ , для O(III) –  $u = 0.125$  [3]. Оставшиеся двенадцать атомов кислорода занимают  $x, y, z = 0.66, 0.66, 0.062$ .

Атомы низкотемпературного кристобалита заселены в соответствии с пространственной группой P4<sub>1</sub>2<sub>1</sub>2 [3]. Четыре атома кремния занимают следующие позиции при  $u=0.3$ : ( $u, u, 0$ ); ( $-u, -u, 0.5$ ); ( $0.5-u, 0.5+u, 0.25$ ); ( $\frac{1}{2}+u, \frac{1}{2}-u, 0.75$ ). Восемь атомов кислорода занимают ( $x, y, z$ ); ( $x, y, -z$ ); ( $-x, -y, 0.5-z$ ); ( $-x, -y, z+0.5$ ); ( $x+0.5, 0.5-y, z+0.25$ ); ( $0.5-x, y+0.5, z+0.75$ ); ( $0.5-x, y+0.5, 0.25-z$ ); ( $x+0.5, 0.5-y, 0.75-z$ ) при  $x, y, z$  соответственно равных 0.245, 0.10, 0.175.

Положение дифракционного рефлекса зависит от размера элементарной ячейки, а вид профиля, распределение угловой интенсивности определяется выбранным типом профильной функции и задаваемыми параметрами. Для описания рентгеновского профиля используют аппроксимацию полиномами или «колокообразными» функциями, получившую название полнопрофильного рентгеновского анализа или метод Ритвельда [4, 5, 6]. Обычно это сочетание функций Лоренциана и Гауссиана, но наиболее близкое описание дают функции Пирсона и Псевдо-Войт.

Поскольку разупорядочение нарушает условия дифракции, то оно ведет к уширению линии. В общем случае полуширина линии определяется выражением  $U^* \operatorname{tg}^2 \Theta + V^* \operatorname{tg} \Theta + W$ , в котором мы можем варьировать параметры  $U, V, W$  в широких пределах, добиваясь наилучшего совпадения. На рис. 3 показано влияние различных значений коэффициентов  $U, V, W$  полуширины на уширение дифракционного профиля низкотемпературного кристобалита, связанное с отклонением структуры от идеальной, при неизменных прочих параметрах.

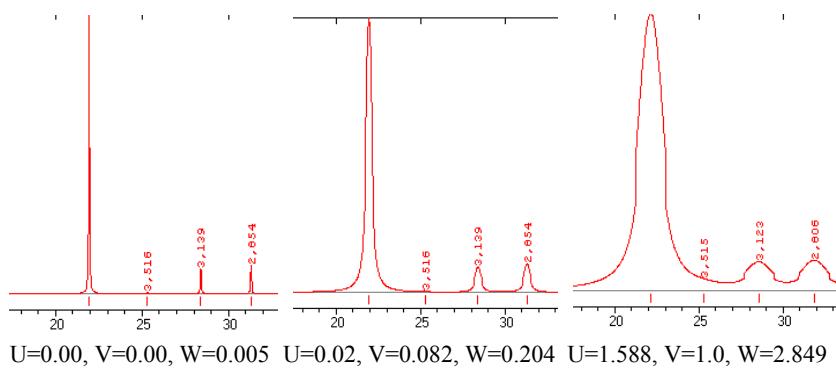


Рис. 3. Вид профиля  $\alpha$ -кристаболита при различных значениях полуширин.

На рис. 4 показан результат аппроксимации рентгеновского профиля силикагеля с использованием профильной функции Псевдо-Войгт при обычных условиях съемки. Процедура уточнения структурных параметров дала следующие значения коэффициентов для расчета полуширины UVW = (0.01973, 0.08177, 0.20415), а = 0.497 нм, с = 0.697 нм, позиции атомов кремния (0.3, 0.3, 0) и кислорода (0.245, 0.10, 0.175). Полученная теоретическая рентгенограмма может в дальнейшем использоваться в качестве эталона для количественного анализа.

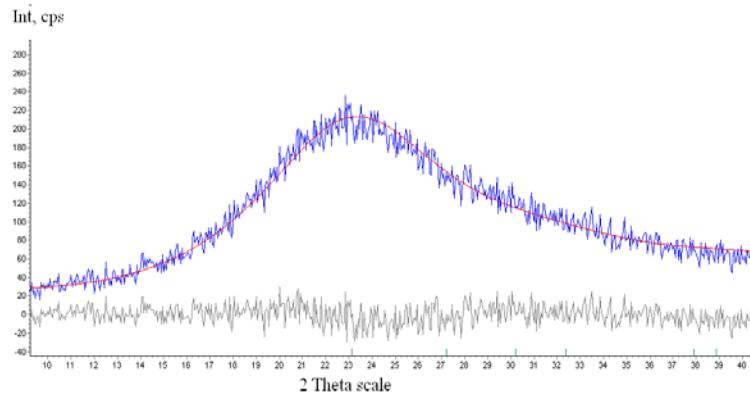


Рис. 4. Аппроксимация рентгеновского профиля разупорядоченного диоксида кремния.

Помимо рассмотренных в данной работе аспектов, в процессе уточнения дифракционного профиля рассчитываются величины, характери-

зующие асимметрию пика, общие тепловые поправки для каждой фазы, а также параметр текстурирования, характеризующий преобладающую ориентацию кристаллитов в образце и др. Правильный выбор значений всех этих параметров позволяет добиться лучшего соответствия теоретической картины и экспериментальной.

### **Список литературы**

1. Бокий Г.Б., Порай-Кошиц М.И. Рентгеноструктурный анализ. Т. 1. М.: Изд-во МГУ. 1964. 489.
2. Власов В.В., Волкова С.А., Ивойлова Э.Х., Лыгина Т.З., Наумкина Н.И. Фазовый минералогический анализ: новые возможности и перспективы изучения поликомпонентных руд// Разведка и охрана недр. 1995. № 2. С. 22-24.
3. Дэна Дж., Дэна Э.С., Фрондель К. Система минералогии. Т. II. Минералы кремнезема. М.: Мир. 1966.
4. Пушаровский Д.Ю. Рентгенография минералов. М.: ЗАО «ГеоИнфоМарк». 2000.
5. Рентгеноструктурный анализ поликристаллов (полнопрофильный анализ): сб. науч. трудов /Калм. гос.ун-т; [редкол.: Е.Г. Фесенко (отв.ред.) и др.] Элиста: КГУ. 1986.
6. Серых В.П. О предельных возможностях полнопрофильной дифрактометрии поликристалла //Заводская лаборатория. Диагностика материалов. № 7. 2000. Т. 66. С. 33-34.
7. PDF-2 from the ICDD. Release 2002 database.

## **О МОДЕЛИРОВАНИИ ФОРМЫ ЦИРКОНА**

**Потапов И.Л.  
Коми НЦ УрО РАН Институт геологии  
Сыктывкар, <slnichipor@geo.komisc.ru>**

Циркон – один из основных акцессорных минералов в большинстве магматических и метаморфических пород. Кристаллы циркона содержат запись множественных геологических событий, которые могут быть отделены во времени миллионами или миллиардами лет. В последнее время исследования циркона непосредственно связаны не только с геохронологией, но и со способностью циркона влиять или «записывать» петрогенетические процессы при магматизме и метаморфизме [4, 5].

Нужно отметить, что на форму кристалла оказывают влияние два фактора – структура кристалла и внешние условия его роста, что необходимо учитывать при моделировании его формы. [1, 2]. Кристаллические формы циркона представлены гранями {011}, {100}, {110}, {211}, {031}, {112}, и т.д.

Теоретическая форма роста циркона, выведенная из кристаллической структуры, предсказана с использованием теории периодических цепей связей (ПЦС) [3, 6, 7]. Теоретическая форма циркона состоит только из кристаллических форм {010} и {011} (F-формы). Остальные формы

классифицируют как S-формы, подразумевая рост с более быстрым механизмом встраивания [7].

По ПЦС-теории форма {010} является F-формой циркона с самой низкой скоростью роста. Из определения F-граней, они должны содержать в себе две и более ПЦС [3, 6]. Форма {100} содержит в себе две ПЦС: <001> и <010>. Поверхность формы {010} состоит из кислорода, принадлежащего кремнекислым ионам. Основной фактор, являющийся причиной пересыщения в кристаллизующейся среде – это скорость охлаждения, и его роль заключается в том, что он сильнее управляет относительной скоростью роста {010} [5, 7].

Второй F-формой циркона является {011}. Ее отличают от {010} существованием больше чем один возможные атомарного строения его кристаллических граней [5, 6]. Она состоит из двух ПЦС: <100> и < $\frac{1}{2} \frac{1}{2} \frac{1}{2}$ >. Ее отличает от {010} существование больше, чем одного из возможных атомарных строений граней. Слой {011} можно поделить на две составляющие {011}<sup>A</sup> и {011}<sup>B</sup>, первая состоит из положительных ионов, вторая – из отрицательных [7]. Согласно теории [3, 6], адсорбция катионов на заряженной поверхности кристалла изменяет поверхностные энергии, и это, в свою очередь, изменяет механизм и скорость роста. Если адсорбция делает поверхностные энергии двух возможных структур равными, рост может происходить путем приложения слоя {022}, являющегося половиной {011}, растущего приблизительно с удвоенной скоростью по сравнению с ростом целых элементарных слоев {011}. Поверхностные энергии нескольких структур не будут оставаться равными, если происходят незначительные изменения в пропорции адсорбированных катионов.

Согласно ПЦС-теории, {110} - S-форма и не присутствует на теоретической форме. Из атомной структуры в грани {110} [6, 7] видно, что адсорбция протонов может преобразовать {110} в F-форму, также адсорбция воды и нейтральных молекул, вероятно, тормозят рост.

Так как смежные кристаллические формы ({011}, {010}, {110}) сильно различаются по скоростям роста, размеры {121} и {031} в форме кристаллов преимущественно управляются геометрическими отношениями [5, 6]. Так быстрый рост {010} позволяет присутствовать и увеличиваю размер {031}, быстрые интервалы роста {011} грани увеличивают размер смежных {121} граней.

Теоретические формы обычно не реализуются в естественных условиях роста, но они служат отправной точкой для оценки влияния внешних факторов. Так, для определения теоретической формы циркона проводится расчет свободной удельной поверхностной энергии. Получив значение поверхностной энергии F-граней, в дальнейшем используем его в вычислении энергии образования двумерного зародыша на гладкой грани и нормальных скоростей роста этих граней. Скорости роста остальных габитусных граней также определяется по тангенциальной скорости разрастания двумерных зародышей гладких граней.

## **Список литературы**

1. Козлова О.Г. Рост и морфология кристаллов. – М.: Изд-во МГУ. 1972.
2. Хонигман Б. Рост и форма кристаллов. – М. : Изд-во Иностранной литературы. 1961.
3. Hartman P., Perdok W.G. On the relation between structure and morphology of crystal I // Acta Crystallogr. 1955. 8. P. 49-52
4. Pupin J.P. Zircon and granite petrology // Contrib. Miner. Petrol. 1980. 73. P.207-220.
5. Vavra G. Systematics of internal zircon morphology in major Variscan granitoid types // Contrib. Mineral. Petrol. 1994. 117. P. 331-344.
6. Woensdregt C.F. Computation of Surface Energies in an Electrostatic Point Charge Model: I. Theory // Phys. Chem. Minerals. 1992, a. 19. P. 52-58.
7. Woensdregt C.F. Computation of Surface Energies in an Electrostatic Point Charge Model:II. Application to Zircon (ZrSiO<sub>4</sub>) // Phys. Chem. Minerals. 1992, b. 19. P. 59-69.

## **МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ В ТРАКТОВКЕ СЛОЖНЫХ ПОЛИМИНЕРАЛЬНЫХ АССОЦИАЦИЙ В КОНТАКТОВО-МЕТАМОРФИЧЕСКИХ ОРЕОЛАХ**

**Селятицкий А.Ю., Хлестов В.В.**

**Институт геологии и минералогии им. В.С. Соболева СО РАН**

**Новосибирск, <dyadyasasha@ngs.ru>**

Для демонстрации широких возможностей методов математического моделирования при петрологических исследованиях нами специально выбран сложный случай – контактовый ореол Баянкольского габбро-монцодиоритового массива (Сангилен, Тыва), в котором характерно присутствие многоминеральных ассоциаций с явными признаками неустановившегося равновесия.

*Геологическая обстановка.* Сангиленский фрагмент Центрально-Азиатского складчатого пояса сформирован в раннекаледонское время (570 - 430 млн. лет) при коллизии Таннуольской островодужной системы с Тувино-Монгольским микроконтинентом [2, 3, 8]. В интервале 535 - 525 млн. лет режиму литосферного сжатия сопутствовал метаморфизм терригенных толщ до верхов эпидот-амфиболитовой фации повышенных давлений [3] при максимальных РТ-параметрах 550 - 650 °C, 6 - 8 кбар (кианит-содержащие ассоциации, этап M1) [6]. В условиях смены тектонических режимов [3] образовывались сдвигово-раздвиговые зоны, обеспечивавшие условия для внедрения базитовых расплавов и высокотемпературного прогрева их обрамления (термальные ореолы вокруг Башкынтугурского, Баянкольского, Правотарлашкинского, Эрзинского массивов [5], метаморфизм M2). Внедрение и становление Баянкольского массива в метаморфические породы M1 с

минеральной ассоциацией Ky-St-Bt-Ms-Pl-Qtz<sup>3</sup> с возрастом 490 млн. лет [5] произошло в пределах Эрзинской сдвиговой зоны. Высокоградиентный метаморфизм вблизи массива до сих пор был освещен недостаточно, однако считается [5, 6], что на всей площади Западного Сангилена метаморфизм М2 в связи с интрузивами основного состава происходил в малоглубинных условиях (2 - 4 кбар).

Исследуемый в настоящей работе пример проявления метаморфизма М2 отвечает зоне в непосредственной близости от интрузивного контакта. Породы здесь имеют грубозернистый облик, бластомилонитовую текстуру и гранопорфиробластовую структуру (матрикс средне-мелкозернистый). Они обладают повышенным содержанием железа (до 14 мас. % в форме FeO) и глинозема (24 - 34 %). В минеральном составе преобладают Sill, Cd, Bt, Grt, Qtz. Присутствуют Sp, Cor, Ilm, Pl; реликты St, Ky и Ms. Все 12 минералов отчетливо диагностируются в шлифах и могут располагаться совместно на площади всего в 2 - 3 см<sup>2</sup>. Рентгенофазовым анализом обнаруживаются также следы Kfs, And, Opx, Sapf, Ol.

*Микроструктурные особенности.* 1 – повсеместное развитие реакционных структур между минералами М1 (St, Ky, Ms, Bt) и сохранение их в виде минеральных реликтов, бронированных Cd коронами; 2 – образование шпинели и корунда в присутствие кварца (прямых контактов с кварцем, правда, нет). Кристаллы корунда (~ 350 мк) окружены кордиеритом и содержат реликты Bt и Ms. Зерна шпинели (45-70 мк) заключены в реликтах ставролита и пойкилитовых порфиробластах силлиманита (до 5x40 мм), насыщенных также ксеноморфными включениями Bt, Ms, Qtz, а также зернами Ilm и Cd. Кристаллы граната (0.1 - 0.5 до 1 см) часто выполняют интерстиции между скоплениями порфиробластов силлиманита или обрастают их. Калиевый полевой шпат в шлифах не диагностирован. При повсеместном отчетливом разложении Bt и Ms это позволяет считать метаморфическую систему открытой в отношении K<sub>2</sub>O с явными признаками процессов выщелачивания. Об этом также свидетельствуют Qtz-Sill графические срастания, возникшие, вероятно, при разложении мусковита по реакционной схеме 2Ms + 2H<sup>+</sup> = 3Sill + 3Qtz + 2K<sup>+</sup> + 3H<sub>2</sub>O. В случае выноса калия эта ионная реакция является альтернативой обычной термической реакции разложения мусковита с кварцем [16].

*Оценка степени равновесности, химический состав минералов.* При минералого-петрографическом исследовании контактового ореола обнаружен ряд признаков не вполне установившегося равновесия:

---

<sup>3</sup> Принятые обозначения: Grt – гранат, St – ставролит, Cd – кордиерит, Bt – биотит, Pl – плагиоклаз, Ms – мусковит, Kfs – калиевый полевой шпат, Qtz – кварц, Sp – шпинель, Cor – корунд, Ilm – ильменит, Sill – силлиманит, Ky – кианит, And – андалузит, Spr – сапфирин, Ol –оливин, Opx – ортопироксен; f<sub>Grt</sub> = Fe/(Fe+Mn+Mg); f<sub>Sp,St</sub> = Fe/(Fe+Mg+Zn); f<sub>Cd,Bt</sub> = Fe/(Fe+Mg).

1 – минеральные реликты М1 и реакционные соотношения между новообразованными фазами этапа М2;

2 – избыточная многофазность пород (равновесные метаморфические ассоциации состоят обычно из 5 - 6 минералов, а многоминеральной считается ассоциация из 7 - 8 фаз [11]; при этом наблюдаемый многоминеральный ансамбль не согласуется с правилом фаз: вариантность метаморфической системы, состоящей из 12 - 17 (см. выше) минеральных фаз и 9 компонентов ( $\text{CaO-Na}_2\text{O-K}_2\text{O-FeO-MgO-Al}_2\text{O}_3-\text{SiO}_2-\text{TiO}_2-\text{ZnO}$ ) варьирует от -1 до -6 (!));

3 – наличие двух (или трех-?) полиморфов  $\text{Al}_2\text{SiO}_5$  (Ky, Sill, And-?);

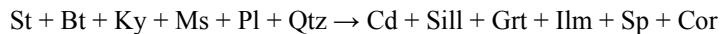
4 – химическая контрастность минерального ансамбля: Sp, Cor, Spr-? в Qtz-содержащей породе (Cor-Qtz парагенезис возможен только при  $P > 11\text{-}13$  кбар и  $T > 1150^\circ\text{C}$  [17]).

Считается, что в породе, достигшей состояния равновесия, состав, слагающих ее минералов в различных частях ее объема должен быть однородным [1]. Химизм минеральных фаз в изученных метапелитах заметно варьирует даже в объеме  $\sim 3 \text{ см}^3$  (по данным микрозондовых анализов минералов в разноориентированных шлифах):  $f_{\text{Bt}} = 0.43 - 0.53$ ;  $f_{\text{Cd}} = 0.30 - 0.36$ ;  $f_{\text{Sill}} = 0.76 - 0.79$ ; содержание  $\text{ZnO}$  в ставролите – 0.85 - 1.2 мас. %. Железистость шпинели от шлифа к шлифу меняется от 0.47 до 0.76 ( $\text{FeO} = 19.83 - 33.2$  мас. %) за счет переменного содержания цинка ( $\text{ZnO} = 3.3 - 12.8$  мас. % – шпинель в Sill;  $\text{ZnO} = 13.9 - 19.3$  мас. % – шпинель в St), при этом соседние зерна шпинели (включения в Sill, 50 - 100 мк друг от друга) по содержанию  $\text{ZnO}$  могут различаться на 5 мас. %. Парадоксально, что в то же время зерна вышеописанных минералов не зональны. Кристаллы граната, как правило, химически однородны с тонкой (10 - 100 мк) каймой более железистого состава: железистость в ядре 0.72 - 0.81 (вариации по разным зернам), в кайме (по-видимому позднего регрессионного происхождения) – 0.80 - 0.84. Содержание гроссуляра 3 - 4 %, спессартина – 2 - 9 %.

*PT*-условия метаморфизма вблизи интрузива мы оценили по минеральной ассоциации Grt-Bt-Cd-Sill-Qtz±Pl с помощью компьютерной программы Thermocalc, использующей внутренне согласованную термодинамическую базу данных [17]. Согласно принципу локального равновесия каждый макроскопически малый элемент объема неравновесной в целом системы в любой момент времени находится в состоянии равновесия. Поэтому для РТ-оценок использовались максимально сближенные зерна Fe-Mg минералов (находящиеся в контакте, либо изолированные друг от друга зернами кварца). При этом выбирались составы центральных частей наиболее крупных зерен с платообразным профилем по Fe и Mg – согласно методике, использованной в [18]. Учитывая упомянутые признаки не вполне установившегося равновесия, мы контролировали результаты по методике, предложенной ранее для таких случаев [13]. РТ-параметры, определенные по серии образцов метапелитов, составляют  $T = 855 - 870^\circ\text{C}$ ,  $P = 6.7 - 7$  кбар, что соответствует гранулитовой фации метаморфизма. Давление метаморфизма

свидетельствует о более глубинном уровне становления Баянкольского интрузива по сравнению с другими габбро-монцодиоритовыми массивами Западного Сангилена (см. выше).

Общая схема минеральных превращений, отражающая эволюцию метапелитов при метаморфизме M2 вблизи Баянкольского массива, выглядит следующим образом:



Таким образом, минеральный ансамбль гранулитов имеет полиметаморфическую природу и представляет собой сочетание реликтовой ассоциации M1 (St-Ky-Bt-Ms-Pl-Qtz) и наложенной ассоциации M2 (Grt-Sill-Cd-Kfs-IIm-Sp-Cor±Spr(?)±And(?)). Оценки давления метаморфизма M2 показывают, что Баянкольский интрузив сформирован на более глубинном уровне континентальной коры, чем другие зонально-метаморфические комплексы (M2) Западного Сангилена, относимые к HT/LP-типу и проявленные вблизи габбро-монцодиоритовых массивов.

Формирование метаморфической ассоциации M2 частично или полностью совпало по времени с этапом вязко-пластичных деформаций. В ходе метаморфизма породы не достигли состояния равновесия. Вероятно, контактный прогрев проходил интенсивно и кратковременно: минеральные реликты M1 (иногда хорошо сохранившиеся) позволяют сделать вывод о том, что нахождение пород в пределах проницаемой зоны обусловило высокие скорости подъема температуры и, вероятно, последующего охлаждения (на это также указывают атолловые формы граната, возникающие в условиях быстрого перегрева), так что длительность метаморфизма оказалась короче времени, которое требуется для полного завершения протекавших в породе метаморфических реакций. Во многом этому способствовала исходная кристалличность (относительная крупнозернистость) и неоднородность метаморфических структур бластомильтонитов M1, поскольку в этом случае (в сравнении с тонкозернистыми структурно-однородными породами) увеличивается дистанция, на которую необходимо диффундировать растворённому веществу к центрам кристаллизации новых фаз, а следовательно, возрастает время необходимое для полного завершения начавшихся минеральных превращений.

Отсутствие ростовой зональности зерен минералов и парадоксальную их однородность в условиях очень быстрого процесса, по-видимому, следует отнести к влиянию синхронных сдвиговых деформаций, характерных в этом регионе. Как известно [9, 12], при интенсивных деформациях коэффициенты массопереноса в твердых фазах возрастают на много порядков.

Для решения вопроса о происхождении избыточной полиминеральности контактных пород и ряда метастабильных минеральных ассоциаций нами осуществлено специальное математическое моделирование динамики минералообразующих процессов при прогрессивном метаморфизме. Для этих целей использован известный пакет компьютерных программ Mathematica-5 фирмы Wolfram Research и современные банки термодинамических данных [14, 15, 17].

*Простейшая термодинамическая модель смещения межминеральных равновесий.* При метаморфизме горных пород, являющихся композитами разнообразных минералов (многие из которых - поликомпонентные твердые растворы) и включающих в определенных небольших количествах также поровый флюид сложного состава, в достаточно широко распространенной части случаев все минеральные превращения можно свести к постепенному изменению лишь количественных соотношений между минералами с параллельными вариациями составов присутствующих твердых растворов, подразумевая при этом, что новые фазы не возникают. В ходе реальной термической эволюции горных масс длительные этапы с таким смещением минеральных равновесий перемежаются с более короткими эпизодами зародышеобразования новых фаз. Корректная термодинамическая модель смещений межминерального равновесия может быть сформулирована для простейшего ("скалярного") случая, когда пространственными градиентами составов минералов допустимо пренебречь. Это равносильно предположению, что скорость перераспределения вещества настолько велика, что не является лимитирующим фактором процесса. Термин "межминеральное равновесие" используется здесь в том смысле, что предполагается только "диффузионный баланс" между фазами (т.е. однородность каждого из химических потенциалов по всей системе), а не "полное термодинамическое равновесие", отвечающее минимизации энергии Гиббса. Тем самым допускаются случаи метастабильных фаз и ассоциаций вне их Р-Т полей устойчивости, незавершенные реакции, примеры несоблюдения правила фаз Гиббса и другие признаки неустановившихся равновесий.

Пусть  $Z$  - матрица составов со строками, отвечающими индивидуально всем минералам твердых растворов, всем минералам постоянного состава, присутствующим в образце, и всем компонентам флюида. Имея в виду, что размерность матрицы равна  $z * k$  (где  $z$  -- число строк, а  $k$  -- число столбцов-компонентов), во всех случаях, когда ранг матрицы  $r < z$ , можно найти  $s \equiv z - r$  независимых реакций между индивидуальными веществами,ключенными в  $Z$ . Этих реакций достаточно для описания любых количественных изменений в образце. В частности, используя пакет Mathematica, получаем весь набор таких реакций с помощью оператора `NullSpace[Transpose[Z]]`, дающего на выходе матрицу  $Q$  размером  $s*m$ , члены которой  $q_{ij}$  - коэффициенты для  $j$ -ых индивидуальных веществ в  $i$ -ых реакциях (по соглашению [4], реагенты имеют отрицательные коэффициенты, продукты реакции - положительные, не участвующие в реакции вещества - нулевые). При этом  $q_{ij}$  нормируются так, чтобы сумма атомов (ионов) всех элементов, участвующих в любой  $i$ -ой реакции равнялась 1.

Введем обозначение  $X$ , подразумевая при этом полную характеристику образца в отношении количественного содержания и составов минералов в нем. Очевидно, что любое изменение, обусловленное реакциями, можно представить как  $\Delta X = \sum \xi_i q_{ij}$ , где  $\xi_i$  - степень реализации  $i$ -ой реакции (она

может быть нулевой, положительной или отрицательно, в зависимости от направления реакции).

Химическое средство ( $A_i$ ) каждой реакции определяется уравнением  $A_i = -\sum \mu_j q_{ij}$ , где  $\mu_j$  - химические потенциалы j-ых индивидуальных веществ [4, 10]. Направление реакции зависит от знака величины  $A_i$ : при  $A_i > 0$  в ходе реакции прирастает количество тех индивидуальных веществ, для которых  $q_{ij} > 0$ , а при  $A_i < 0$  реакция идет в обратную сторону ( $A_i = 0$  отвечает равновесию). В состояниях не слишком далеких от равновесия скорости реакций пропорциональны  $A_i$  [4].

Расчеты на основе имеющихся банков термодинамических данных [14, 15, 17] позволяют определять функциональные зависимости  $A_i = A_i(X, p, T)$ . При этом, имея некоторые конкретные  $X_0$ ,  $p_0$ ,  $T_0$  в качестве характеристик начального состояния образца, для каждой реакции (выведенной из любой выбранной матрицы  $Z$ ) можно очертить и разграничить  $pT$ -области с положительными или отрицательными значениями  $A_i$ . Выделим реакции, для которых среди продуктов имеются новообразованные фазы (по отношению к  $X_0$ ), а все реагенты содержатся в  $X_0$ . Анализируя для них  $pT$ -позиции полей с разными знаками величины  $A_i$ , несложно заключить, какие именно “скачки”  $p$  и  $T$  относительно  $p_0$ ,  $T_0$  способны приводить к образованию соответствующих новых фаз.

*Моделирование применительно к исследуемому случаю включало два этапа.*

1) Для конкретных образцов сначала реконструировалось состояние  $X_0$  при  $p_0 T_0$ -условиях метаморфизма M1 (см. выше). К набору реакций, выведенных из полной матрицы  $Z$ , определялся набор величин  $\xi_i$ , дающий  $\Delta X$  с исчезновением всех фаз, характерных только для наложенного этапа M2 (см. выше). При этом учитывались реальные содержания и составы минералов в ныне наблюдаемых образцах. Из всех возможных решений такого типа, методами вариационного анализа [7 (гл. 11)] выбиралось то решение, которое обеспечивает равновесность  $X_0$  при  $p_0 T_0$ -условиях M1. С этой целью составлялись урезанные матрицы  $Z^*$ , включающие данные только по минералам этапа M1, и определялся набор соответствующих реакций. Вариационная задача формулировалась в виде условия  $\sum [A_i^*(X_0, p_0, T_0)]^2 = \min$  при указанных выше ограничениях для  $\Delta X$ .

2) Для полученного  $X_0$  в соответствии с изложенным выше определялись характерные  $pT$ -области возможного возникновения новых фаз и ассоциаций. Особое внимание при этом удалено тем примерам, которые выглядят метастабильными (шпинель и корунд в кварцодержащем окружении). Расчеты показали, что реализация полного набора наблюдаемых в породе новых фаз достижима лишь в случае, когда температура обрамления в приконтактовой области резко повысилась не менее, чем на 130 - 150 °C выше условий M1 еще до начала минеральных реакций. При этом оказываются возможными параллельные синхронные минеральные превращения с образованием “избыточного” числа минералов и их метастабильных ассоциаций.

С учетом геологической обстановки такая ситуация с инициальным заметным перегревом контактового ореола представляется вполне вероятной. Внедрение магматических масс происходит в ранее метаморфизованную раму, в которой свободный флюид в этот момент практически отсутствует. Основные магмы на соответствующих глубинах также изначально далеки от насыщения водой. Реакции в сухой системе не идут, и реальный метаморфизм в итоге начинается с заметным запаздыванием, лишь когда появляются существенные количества флюида (за счет начинаящейся дегидратации минералов и за счет отделения постмагматической компоненты флюида в процессе развивающейся кристаллизации в апикальных приконтактовых зонах массива).

*Работа проводилась при финансовой поддержке РФФИ (гранты № 06-05-64979 и № 06-05-65052).*

#### **Список литературы**

1. Вернон Р.Х. Метаморфические процессы. М: Недра. 1980. 226 с.
2. Владимиров В.Г., Владимиров А.Г., Гибшер А.С., Травин А.В., Руднев С.Н., Шемелина И.В., Барабаш Н.В., Савиных Я.В. Модель тектоно-метаморфической эволюции Сангилена (Юго-Восточная Тыва, Центральная Азия) как отражение раннекаледонского аккреционно-коллизионного тектогенеза. // ДАН. 2005. Т. 405. № 1. С. 82-88.
3. Гибшер А.С., Владимиров А.Г., Владимиров В.Г. Геодинамическая природа раннепалеозойской покровно-складчатой структуры Сангилена (Юго-Восточная Тыва). // ДАН. 2000. Т. 370. № 4. С. 489-492.
4. Де Гроот С., Мазур П. Неравновесная термодинамика. М., Мир, 1964, 456с
5. Изох А.Э., Каргополов С.А., Шелепаев Р.А., Травин А.В., Егорова Е.В. Базитовый магматизм кембро-ордовикского этапа Алтая-Саянской складчатой области и связь с ним метаморфизма высоких температур и низких давлений. Актуальные вопросы геологии и минерагении юга Сибири: Материалы науч.-практ. конференции. Н-сибирск.: 2001. С. 68-72.
6. Каргополов С.А. Малоглубинные гранулиты Западного Сангилена (Юго-Восточная Тыва). Автореф. дис. канд. геол.-минерал. наук. Новосибирск: ОИГТМ СО РАН. 1997. 16 с.
7. Корн Г., Корн Т. Справочник по математике. М. Наука. 1973.
8. Кузьмичев А.Б. Тектоническая история Тувино-Монгольского массива: раннебайкальский, позднебайкальский и раннекаледонский этапы. М.: Пробел-2000. 2004. 192 с.
9. Панин В.Е., Гриняев Ю.В., Данилов В.И. и др. Структурные уровни пластической деформации и разрушения. Новосибирск, Наука, Сиб. Отд. 1990. 254с.
10. Пригожин И., Кондепуди Д. Современная термодинамика. М. Мир. 2002. 461 с.
11. Ревердатто В.В. Фации контактового метаморфизма. М.: Недра. 1970. 272 с.
12. Хлестов В.В., Волкова Н.И. Эффекты неоднородных сдвиговых деформаций на глубинных уровнях коллизионных комплексов. Петрология литосферы и происхождение алмаза. Тезисы докладов Международного симпозиума в честь 100-летию В.С. Соболева. Новосибирск. 2008. С. 106.

13. Ashworth J.R., Sheplev V.S., Khlestov V.V., Ananyev V.A. Geothermobarometry using minerals at non-equilibrium: a corona example // European J. Mineral. 2001. V. 13. N 6. 1153-1172.
14. Berman, R.G., Aranovich, L.Ya. Optimized standard state and solution properties of minerals I. Model calibration for olivine, orthopyroxene, cordierite, garnet, and ilmenite in the system FeO–MgO–CaO–Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>–TiO<sub>2</sub>–SiO<sub>2</sub>. Contributions to Mineralogy and Petrology, 1996. V. 126. 1-24.
15. Berman, R. G. Internally consistent thermodynamic data for the minerals in the system Na<sub>2</sub>O–K<sub>2</sub>O–CaO–MgO–FeO–Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub>–Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>–SiO<sub>2</sub>–TiO<sub>2</sub>–H<sub>2</sub>O–CO<sub>2</sub>. Journal of Petrology, 1988. V. 29. 445-522.
16. Eugster H.P. Thermal and ionic equilibria among muscovite, K-feldspar and aluminosilicate assemblages // Fortschr. Miner. 1970. V. 47. P. 106-123.
17. Holland T.J.B., Powell R. An internally consistent thermodynamic data set for phases of petrological interest // J. Metamorphic Geol. 1998. V. 16. № 3. P. 309-343.
18. Shylters J.S., Bohlen S.R. The stability of hercynite and hercynite-gahnite spinels in corundum- or quartz-bearing assemblages // J. Petrol. 1989. V. 30. № 4. P. 1017-1031.
19. Smit C.A., Van Reenen D.D., Gerya T.V., Perchuk L.L. P-T conditions of decompration of the Limpopo high-grade terrain: record from shear zone. Jour. Metam. Geol. 2001. V. 19. P. 249-268.

**ГЕНЕТИЧЕСКОЕ СОДЕРЖАНИЕ СТАТИСТИЧЕСКИХ  
ХАРАКТЕРИСТИК ОСЦИЛЛЯЦИОННОЙ ЗОНАЛЬНОСТИ  
В МИНЕРАЛЬНЫХ АГРЕГАТАХ КОНКРЕЦИОННО-  
СЕКРЕЦИОННОГО ТИПА**

Сластиников В.В.<sup>1</sup>, Пунин Ю.О.<sup>2</sup>, Штуценберг А.Г.<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Всероссийский геологический институт им. Карпинского  
Санкт-Петербург, <viktor.slastnikov@gmail.com>;

<sup>2</sup>СПбГУ, геологический факультет, кафедра кристаллографии  
Санкт-Петербург, <shtukenberg@mail.ru>

Осцилляционная композиционная зональность в минеральных агрегатах представляет собой запись колебаний условий на фронте кристаллизации и несет большое количество генетической информации. Подход к анализу ее статистических характеристик идентичен таковому для любых других временных рядов. На основании такого анализа можно судить о динамике роста агрегата. И, хотя в настоящее время большое внимание уделяется проблеме генезиса зональных структур в различных природных объектах, работ, посвященных сравнению этих структур в объектах различного генезиса практически нет [1].

Целью проведенного исследования было изучение и сравнение дина-

ники формирования минеральных агрегатов конкремионно-секреционного типа на основе изучения проявленной в них осцилляционной зональности. А именно: интенсивно-зональные секреции — агаты месторождений Бразилии и Северного Тимана, и конкреции — почковидные агрегаты малахита, месторождение Колвези, Заир и железомарганцевые глубоководные конкреции (ЖМК) Тихого океана.

Для достижения поставленной цели нами был произведен расчет статистических характеристик зональности, на его основе выявлены сходства и различия осцилляционной зональности исследуемых объектов и проведен анализ возможных моделей ее формирования.

В агатах нами изучалась микрозональность по показателю преломления, в малахите - цветовая макрозональность, в железомарганцевых конкрециях - зональность, обусловленная чередованием слоев с плотной массивной и рыхлой дендритной структурой. Зоны с пониженным показателем преломления в микрозональности агатов сложены тонкопористым халцедоном; поры, по-видимому, заполнены аморфным кремнеземом [3; 4]. В малахите зональность образуются за счет периодического чередования обогащенных примесью зон, через которые прорастают волокна малахита. В качестве примеси выступают фосфаты меди (псевдомалахит). Вариации цвета обусловлены различной толщиной волокон малахита в разных зонах. В железомарганцевых конкрециях (ЖМК) осцилляционная зональность представлена чередованием зон с «рыхлой» фестончатой структурой с дендритно-столбчатым строением и ярко выраженным геометрическим отбором, и «плотной» - массивной концентрически-слоистой структурой [2].

Анализ профиля осцилляционной зональности проводился по следующим направлениям: а) распределения мощностей слоев; б) поиск скрытой периодичности; в) выявление характера чередования слоев; г) определение числа степеней свободы (сложности) системы. Все полученные статистические характеристики указывают на то, что зональность во всех объектах частично упорядоченна и имеет скрытую периодичность. Распределения мощностей зон во всех объектах имеют крайне длинные «хвосты» и не спрямляются в полулогарифмическом масштабе — процесс образования зональности во всех исследуемых объектах не является случайным (не подчиняется закону Пуассона), а является детерминированно-хаотическим (фрактальным). На наличие скрытой периодичности в зональности прямо указывает вид автокорреляционной функции: она периодична. Наилучшим образом периодичность проявлена в зональности агатов: зоны с пониженным

показателем преломления агрегируются в пачки, упорядоченность в ней явная. Моделирование поведения системы по процедуре Грассбергера-Прокаччии показало, что для образования зональности в агатах требует минимум 4 - 5 управляющих параметра, а в малахите - только 3 - 4. Таким образом, процесс образования зональности по показателю преломления в агатах более сложен, нежели в малахите, возможно за счет большего влияния колебаний внешних условий.

На основании полученных данных была установлена схожесть динамики образования всех трех исследованных объектах. Итогом нашей работы стало установление общности процессов образования зональности в изученных агрегатах. В качестве ведущего мы предлагаем циклический автоколебательный процесс накопления и последующей ассилияции примеси на фронте роста, сопровождающийся колебаниями пересыщения по основному компоненту. Иными словами, реакция идет по схеме «выгорание» - накопление. Влияние внешних факторов сводится к внесению «шума» в данный циклический процесс. Для каждого из объектов этот механизм имеет свои особенности. В агатах зональность образуется за счет периодического накопления и ассилияции высоких полимеров кремнекислоты на фронте роста [3; 4]. В малахите ситуация сходна: на фронте накапливается примесь фосфатов меди и тормозит рост. При этом идет постепенное падение пересыщения по карбонату меди. После торможения роста примесью пересыщение по основному компоненту восстанавливается, примесь ассилируется, рост продолжается. Для ЖМК процесс сходный, с той лишь разницей, что накопление и выгорание идут для роста из коллоида (рыхлые слои) и придонной воды (плотные слои). Таким образом, в роли «главного» компонента и «примеси» попеременно выступает один из источников вещества.

#### **Список литературы**

1. Горянинов П.М., Иванюк Г.Ю. Самоорганизация минеральных систем. Синергетические принципы геологических исследований. М.: «Геос». 2001. 312 с.
2. Пунин Ю.О., Сметанникова О.Г., Демидова Г.Е., Смольская Л.С. О динамике формирования океанических железомарганцевых конкреций. //Литология. №1. 1995. С. 40-50.
3. Сластиников В.В. Слоистость, связанная с изменением показателя преломления в минералах кремнезема агатов. //Кварц, кремнезем. Материалы международного семинара. С. 308. Сыктывкар: Геопринт. 2004.
4. Сластиников В.В., Пунин Ю.О., Нестеров А.Р. Микрозональность агатов как отражение динамики их формирования. //Записки РМО, часть 136. Вып. 7. 2008. С. 27-37.

# О КОЛИЧЕСТВЕННЫХ ОТНОШЕНИЯХ В СИСТЕМАХ ПРИРОДЫ

Смирнова Н.Л.  
Московский государственный университет  
Москва, [snl194@mail.ru](mailto:snl194@mail.ru)

В своем исследовании всеобщей организационной науки А.А. Богданов изучал универсальные качественные отношения в разных системах. Количественные отношения рассматривались им в терминах мало, много, больше, меньше. Например, анализируя ступенчатое расщепление комплексов, он предполагал, что ступеней расщепления немного. Далее происходит качественное изменение элементов комплекса.

Несмотря на видимую новизну фактов, явлений, качественных, количественных отношений, их трактовки, новизна только кажущаяся. Каждый ученый всегда найдет цепочку своих предшественников. Но каждый ученый всегда сделает новый шаг в науке. Это будет новый факт – новый минерал, его разновидность, новая кристаллическая структура, новый вид организма, породы. Но все они будут вписываться в системы, закономерно их пополняя. Поэтому изучение универсальных количественных системных законов природы чрезвычайно важно. Будем понимать под универсальными количественными системными законами природы сохранение количественных отношений в разномасштабных системах.

По мере изменения масштаба системы, могут сохраняться не только количественные, но и качественные характеристики. Количественными характеристиками любой системы являются исходные элементы, обобщенное представление элементов цифрами, буквами, координация центральных элементов лигандами, структура, поверхность и сечение (граница), порядок, беспорядок, последовательность, стабильность, встречаемость. Универсальными количественными характеристиками являются общее число соседних элементов лигандов (координационное число, КЧ), число различных лигандов в координационной сфере, их последовательность. Число всех элементов в циклической, а также любой линейной последовательности будем называть также КЧ. Например, КЧ последовательности с формулой  $aabbabc$  равно 8. Формула может быть представлена в сокращенном виде  $a_3b_2a_1b_1c_1$ , где  $a$ ,  $b$ ,  $c$  – символы, а 3, 2, 1 – коэффициенты или индексы. Формулу последовательности букв без индексов  $|abab|$  называем **пб**, число букв равное 5 называем **ЧС** (число символов). Формулу последовательности букв с индексами  $|ababc|<32111>$  обозначаем **пбк**, формулу из индексов  $<32111>$  - **пк**, теоретические формулы обозначаем **пbt**, **пбкт**, а реализованные в природе **пбр**, **пбкр**. Формулы координации обозначаем **Bв**, **Gв**, **Bг**, **Gr**, причем первые буквы означают центральный элемент – вершину  $B$ , или  $n$ -гон  $G$ , а вторые буквы означают лиганды, где  $v$  – вершины,  $g$  и  $r$  –  $n$ -гоны.

Сочленение n-гонов по ребрам обозначается буквой р. Буквам соответствуют конкретные элементы, например n-гоны. В этом случае формулы записываем с указанием последовательности n, например, |ababc|<32111>|34345|. Качественный состав из разных n |345| обозначаем формулами **ВВ**, **ВГ**, **ГВ**, **ГР** – соответственно. **ГР** – это качественные гранные формулы Гр формул. Гранные формулы содержат только разные грани-лиганды (n-гоны с разными n). Порядок следования символов n от меньшего к большему. Каждой формуле **пбк** соответствует количественный состав **пс**. Формула **пс** состоит из 1-6 букв a, ab, abc, adcd, abcde, abcdef. Среди всего массива рассмотренных формул составов формула abcdefg установлена один раз. Содержание данной буквы в формуле последовательности **пбк** записываем в виде формулы из символов. Например, формула **пбк** |ababc|<32111>|34345| имеет состав **пс** |abc|{431} или a<sub>4</sub>b<sub>3</sub>c<sub>1</sub>. При наличии в формуле двузначных символов разделяем все символы точками.

Ранее нами были составлены формулы для полигональных поверхностей, сечений многочисленных живых организмов, кристаллов, полизидров, кристаллических структур, расплавов, молекул, разбиений Делоне, Вороного, сеток Кеплера, Лавеса, Кротенхерда и т.д. Целью данной работы было выявить проявление универсальных количественных отношений в системе (сетке) железных дорог (рис.).

Сетка железных дорог была вычленена нами из карты, опубликованной более 30 лет назад [1]. С тех пор изменились границы административных районов и даже государств. Но приведенные на рисунке железные дороги сохранились. Сетка представляет собой граф из n-gonов с n=3-9. Многоугольники с n=3-9 обозначены на рисунке 3-гоном, точкой, пентаклом, солнцем, месяцем, 8-гоном, а 9-гон – цифрой. Тупиковые ответвления в этой сетке не рассматривались. Вершины графа – узлы, из которых выходят 3-6 линий (ребра графа). КЧ вершин равны 3-6. Вершины с КЧ 3-6 обозначены 3-6-гоном. Для сетки железных дорог были установлены формулы. Координационные числа перед формулами выделены полужирно.

**Вв 3** - |a|<3>|3, 4|, |ab|<21>|34, 3.11, 43, 45, 46, 54|, |abc|<111>|345, 34.11, 356|, **4** - |a|<4>|3, 4|, |ab|<31>|34, 35, 43, 45, 4.11, 54|, |ab|<22>|34|, |abc|<211>|345, 34.11, 435, 436, 43.11, 534, .11+.11.4.3|, |abab|<1111>|3434, 4545|, |abac|<1111>|3435, 4345, 4346, 454.11|, **5** - |a|<5>|4|, |ab|<41>|43|, |abab|<2111>|3434|, **6** - |abacd|<12111>|34345|, **11** - |ab|<38>|33344444+444|,

**пбк** |a|<3, 4, 5>, |ab|<21, 31, 22, 41, 38>, |abc|<111, 211>, |abab|<1111, 2111>, |abac|<1111>, |abacd|<12111>, **пк** <3, 4, 5, 21, 31, 22, 41. 38, 111, 211, 1111, 2111, 21111>, **ВВ** |3, 4, 34, 35, 3.11, 45, 46, 4.11, 345, 346, 34.11, 356, 45.11|,

**Гв 3** |a|<3>|4|, |ab|<11>|4.11|, |ab|<21>|34, 43, 45, 4.11, 63|, |abc|<111>|345, 356, 34.11|, **4** |a|<4>|4|, |ab|<31>|35, 3.11, 43, 45, 46, 4.11|, |ab|<22>|34, |abc|<211>|345, 346, 435, 436|, |abab|<1111>|3434, 4545|, |abac|<1111>|4345|, **5** |ab|<41>|34, 43, 45|, |ab|<32>|34, 43|, |abc|<311>|345, 435, 436|, |abab|<2111>|3434|,

$|abac|<2111>|44345, 4356|, |abac|<1211>|4345, 434.11|, \mathbf{6} |ab|<51>|3.11|, |ab|<42>|43|, |ababc|<12111>|43435|, 7 - |ab|<52>|34|, |abab|<21>|4343|, |abac|<4111>|4345|, |ababab|<21111>|434343|,$

**пбк**  $|a|<3, 4, 5>, |ab|<11, 21, 31, 22, 41, 32, 51, 42, 52>, |abc|<111, 211, 311>, |abab|<1111, 2111, 2221>, |abac|<1111, 2111, 1211, 4111>, |ababc|<21111>, |ababab|<211111>, \mathbf{пк} <3, 4, 5, 11, 21, 31, 22, 41, 32, 51, 42, 52, 111, 211, 311, 1111, 2111, 4111, 2221, 21111, 211111>, \mathbf{ГВ} |4, 34, 35, 36, 3.11, 45, 46, 4.11, 345, 346, 356, 34.11, 3456|,$

**Вг 3** -  $|a|<3>|4, 5|, |ab|<21>|43, 45, 47, 53, 54, 57, 73|, |abc|<111>|345, 346, 356, 357, 367, 369, 456, 457, 479, 567|, \mathbf{4} - |a|<4>|4|, |ab|<31>|43, 45, 47, 54|, |ab|<22>|34, 45|, |abc|<211>|345, 356, 435, 437, 457, 467, 534, 537, 745|, |abac|<1111>|3435, 4546, 4547, 4647, 5354, 5657|, |abcd|<1111>|3456, 3465, 3475, 3546, 3547, 3749|, \mathbf{5} - |abc|<311>|435, 436, 456, 546|, |abac|<1211>|5453|, \mathbf{6} - |abc|<321>|453|, \mathbf{11} - |abacdbe|<1411211>|43333463352|.$

**пбк**  $|a|<3>, |ab|<21, 31, 22>, |abc|<111, 211, 311, 321>, |abab|<1111>, |abac|<1111, 1211>, |abcd|<1111>, |ababc|<11111>, |abacbde|<1411211>, \mathbf{пк} <3, 21, 31, 22, 111, 211, 311, 321, 1111, 2111, 11111, 1411211>, \mathbf{ВГ} 4, 5, 34, 35, 37, 45, 47, 57, 34(5, 346, 347, 356, 357, 367, 369, 378, 456, 457, 467, 479, 567, 3456, 3457, 3479, 3567, 23456|,$

**Гр 2**  $|ab|<11>|45|, \mathbf{3} - |a|<3>|4, 5|, |ab|<21>|34, 35, 43, 45, 46, 54, 57|, |abc|<111>|345, 346, 356, 457, 567, 679|, \mathbf{4} - |a|<4>|4|, |ab|<31>|34, 43, 45, 47, 54|, |ab|<22>|45|, |abc|<211>|435, 547, 567|, |abab|<1111>|4545, 7474|, |abac|<1111>|3234, 4345, 5456, 5657, 7476, 7479|, |abcd|<1111>|3465, 3546, 3576, 4657|, \mathbf{5} - |ab|<41>|54|, |ab|<32>|54|, |abc|<311>|345, 436, 567|, |abc|<221>|346, 543|, |abab|<2111>|3434, 4545|, |abac|<2111>|4345|, |abac|<1211>|36632|, |abcd|<2111>|3457, 4365|, |ababc|<11111>|34345, 45457|, |abacd|<11111>|47456|, \mathbf{6} - |abcd|<3111>|4375|, |ababc|<21111>|54543|, |ababc|<12111>|45453|, \mathbf{7} |abc|<611>|436|, |abac|<2311>|5453|, |abac|<3211>|3435|, |abacd|<13111>|34356|,$

**пбк**  $|a|<3, 4, 5>, |ab|<11, 21, 31, 22, 41, 32, 42>, |abc|<111, 211, 311, 221, 511>, |abab|<1111, 2111>, |abac|<1111, 2111, 1211, 2311, 3211>, |abcd|<1111, 2111, 3111>, |ababc|<11111, 21111>, |abacd|<13111>, \mathbf{пк} <3, 4, 5, 11, 21, 31, 22, 41, 32, 42, 111, 211, 311, 221, 611, 1111, 2111, 3111, 3211, 11111, 21111, 31111>,$

**ГР** /6-4+0=2/ **1** - 3, +4, +5, 6, 7, 8, /15-9+0=6/ **2** - 3(+4, +5, 6, 7, 8), 4(+5, +6, +7, 8), 5(6, +7, 8), 6(7, 8), 7(8), /20-12+4=12/ **3** - 34(+2, +5, +6, 7, 8), 35(+6, 7, 8), 36(+2, 7, 8), +378, 45(+6, +7, 8), 46(+7, 8), 47(8, +9), 56(+7, 8), 578, 67(8, +9), /15-12+0=3/ **4** - 345(+6, +7, 8), 346(7, 8), 3478, 356(7, 8), 3578, 3678, 456(+7, 8), 4578, 4678, 5678, /6-6=0/ **5** - 3456(7, 8), 34578, 34678, 35678, 45678, /1-1+0=0/ **6** - 345678,  $\Sigma 63-44+4=23$

Для ГР приведены все возможные 63 формулы из n=3-8. Полужирно выделены ЧС (числа символов в формулах). Реализовано 2 и 2 формулы с символом 2 и 9. Как и в ранее полученных формулах символ 9 замещает в

формулах символ 8. Число реализованных формул из 63 всего 23.

Ранее нами было установлена 41 формула **пб** для 7 разных элементов, ЧС 1-7 и КЧ 1-7. Во множестве полученных формул **Вв**, **Гв**, **Вг**, **Гр**, из 41 формулы здесь реализованы лишь 10 **пб** |a, ab, abc, abab, abac, abcd, ababc, abacd, ababab, abacdbe|. При ЧС 1-4 выявлены все возможные 6 **пб**. При ЧС 5, 6, 7 из 3, 12, 20 возможных **пб** установлены 2, 1, 1 реализованная **пб**. Формулам **пб** ababab и abacdbe соответствуют лишь по одной **пбк**. Таким образом, распространенность формул **пбк** резко уменьшается с увеличением в первую очередь ЧС и во вторую КЧ. Как и ранее ни одной формулы состоящей из 7 разных букв – не обнаружено. Подавляющее число формул, содержащих символы 8 и 78 – не реализуются. Хотя n-гонов с n равным 6 и 7 немного, тем не менее, они образовали две пары (рис.). А n-гоны с n 4 и 5 образуют не только пары, но и небольшие ленты из 3, 4 n-гонов и даже блоки. Таким образом, несмотря на отсутствие симметрии, наблюдается некоторый локальный порядок. Если построить, используя вершины, разбиение Вороного, то получим сетку отличную от сети железных дорог. Поэтому разбиения Вороного не обязательно адекватны реальным, природным, и условия их применения ограничены.

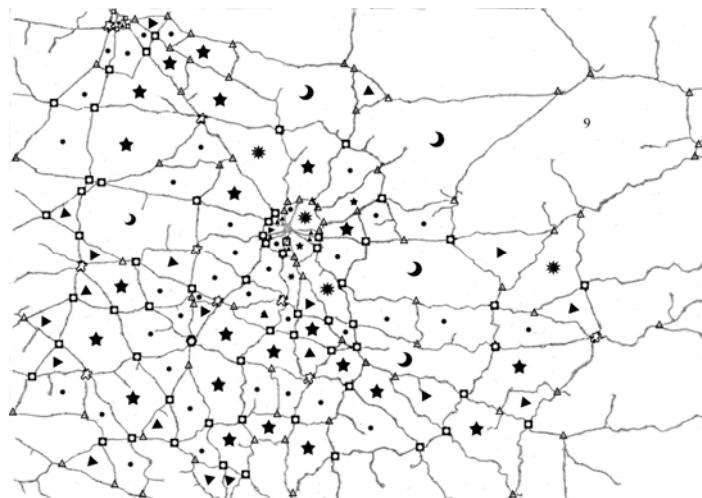


Рис. Сеть железных дорог. В центре находится единственная вершина с КЧ 11.

При выделении точек пересечения (вершин графа) часто возникает проблема однозначности результата. Точки могут быть расположены так близко, что не ясно – это одна точка или две. Какой критерий для оценки

достоверности решения может быть использован? Ответ на этот вопрос получить не удалось. Исходя из интуитивно-субъективных соображений отдано предпочтение объединению двух точек в одну. Так, все же, когда два совмещенных диска при сдвиге одного из них преобразуются в два? Если может быть создана для решения проблемы компьютерная программа, то можно задать какое-либо расстояние или радиус для всех случаев одинаковое. Но почему будет задана именно эта величина, следует обосновать.

При установлении теоретических моделей, в частности формул, их множество должно быть достаточным, чтобы включать все возможные реализованные модели. Вместе с тем это множество не должно быть избыточным, т.е. не должно в пределе включать не реализуемые варианты. Решаема ли эта проблема? С какой точностью можно ее решить? Эту проблему решали химики теоретически (таблица Менделеева) и экспериментально, наполняя пустые клетки таблицы новыми элементами. Таблица Менделеева достаточна и не избыточна, хотя не является прокрустовым ложем. В отличие от Менделеева В. Гольдшмидт ограничил число возможных символов граней кристаллов четырьмя ступенями плоской компликационной схемы ПКС. Нами было установлено, что такое ограничение не удовлетворяет принципу достаточности, и удалось выявить область достаточности и избыточности.

Составляем линейную компликационную схему ЛКС из 63 формул ГР с выделением реализованных формул знаком плюс и добавлением курсивом реализованных формул не входящих в множество из 63 формул. Полужирно выделены бинарные базисные формулы, а кавычками выделены не реализованные.

**78**, +783, 784, 785, 786, 7834, 7835, 7836, 7845, 7846, 7856, 78345, 78346, 78356, 78456, 783456, **67**, 673, +674, +675, 6734, 6735, +6745, 67345, **56**, +563, +564, +5634, +**45**, +453, «79», +794, +796, +**34**, 683, 684, 685, 6834, 6835, 6845, 68345, +342, +**57**, 573, +574, +5734, «23», +46, +463, **58**, 583, 584, 5834, +**35**, +**47**, 473, «12», 36, +362, 48, 483, **37**, **38**, «13», 68, «1», 3, +4, +5, 6, 7, 8.

Как было показано ранее, так и в данном случае подавляющее число реализуемых формул входят в состав 63 формул. Но это множество с одной стороны не достаточно, а с другой стороны избыточно. Однако, по мере увеличения массива исходных данных ситуация меняется. Приводим список формул ВГ и ВГ и ГР из всего рассмотренного ранее массива данных. Не реализованные формулы обозначены знаком минус.

**ВГ** /6-1+0=5/ **1** – |+3, +4, +5, +6, +7, -8|,  
/15-0+11=26/ **2** – |3(+4, +5, +6, +7, +8), 4(+5, +6, +7, +8, +9, +10),  
5(+2, +6, +7, +8, +9, +10, +11, +13), 6(+7, +8, +9, +10, +13), 7(+8, +9)|,  
/20-0+32=52/ **3** – |34(+5, +6, +7, +8, +9, +10), 35(+6, +7, +8, +9, +10),  
36(+7, +8, +10), 37(+8, +9, +13), 45(+2, +6, +7, +8, +9, +10, +11, +13),

$46(+7, +8, +9, +10, +11, +13), 47(+8, +9), 48(+9, +10), 56(+7, +8, +9, +10, +13), 57(+8, +9, +10, +13), 58(+2, +9, +10), 67(+8, +9, +10), +689, +789,$   
 $/15-6+7=16/ \mathbf{4} - |345(+2, +6, +7, -8), 346(+7, -8), -3478, 356(+7, +8), +3578, -3678, 358(+2), 456(+7, +8, +10), -4578, 467(+2, -8, +9, +10), 567(+2, +8)|,$   
 $/6-4+0=2/ \mathbf{5} - |3456(+7, +8), -34578, -34678, -35678, -45678|,$   
 $/1-1+0=0/ \mathbf{6} - |-345678|,$   
 $\sum 63-12+50=101=5+26+52+16+2+0, 50=0+11+32+7+0+0.$

Из 63 формул не реализовано двенадцать. Эти формулы состоят из 4, 5, 6 символов и содержат символы 8 и 78. На весь массив данных установлено лишь две формулы 34567 и 34568, содержащие 5 разных символов.

Объединение всех формул обозначаем ВГ+ГР и дополняем формулами полученных для сети железных дорог. Новых формул всего шесть (выделены курсивом) и они закономерно вкладываются в список.

**ВГ+ГР /6-0+1=7/ 1 - |+3, +4, +5, +6, +7, +8, +10|,**  
**/15-0+19+1=34+1/ 2 - |3(+4, +5, +6, +7, +8, +11), 4(+5, +6, +7, +8, +9, +10, +11, +12), 5(+2, +6, +7, +8, +9, +10, +11, +13, +14), 6(+7, +8, +9, +10, +12, +13), 7(+8, +9, +10, +11), +8.10, +10.14|,**  
 $/20-0+42+4=62+4/ \mathbf{3} - |34(+2, +5, +6, +7, +8, +9, +10, +11), 35(+2, +6, +7, +8, +9, +10, +18), 36(+2, +7, +8, +9+10), 37(+8, +9, +13), 45(+2, +6, +7, +8, +9, +10, +11, +13, +14), 46(+7, +8, +9, +10, +11, +12, +13, +14), 47(+8, +9, +10, +11, +12), 48(+9, +10, +16), 56(+7, +8, +9, +10, +13, +14), 57(+8, +9, +10, +13), 58(+2, +9, +10), 67(+8, +9, +10), +689, +789|,$   
 $/15-1+40+1=54+1/ \mathbf{4} - |345(+2, +6, +7, +8, +9, +10), 346(+7, +8, +9), 347(-8, +9), 348(+9, +10, +16), 356(+7, +8, +14), 357(+8, +10), +358(+2, +12), +3678, 456(+2, +7, +8, +9, +10, +12, +13), 457(+8, +9, +10, +12), 458(+2, +9, +10, +14), 467(+2, +8, +9, +10, +11, +14), 468(+9, +12), +46.10.11, 567(+2, +8, +9, +10, +12, +13, +14), 568(+9, +10, +12)|,$   
 $/6-0+17=23/ \mathbf{5} - |3456(+2, +7, +8, +11, +12, +14), 3457(+8, +9), +34678, 3468(+10, +12), 3567(+8, +9), +3578.10, 4567(+8, +9, +10), 4568(+9, +10), 4578(+2, +9, +10), +56789|,$   
 $/1-1+4=4/ \mathbf{6} - |-34567(+2, -8, 9), +3456.10.11, +456789|,$   
 $\sum 63-2+123+6=184+6=7+34+1+62+4+54+1+23+4, 123+6=1+19+1+42+4+40+1+17+4.$

Из 63 формул не реализовано лишь две -3478, -345678. Они, конечно, когда-либо будут установлены. Но помимо них выявлено 127 дополнительных формул. Они представляют собой комбинации содержащие символы 9-18. При этом в подавляющем большинстве случаев эти символы присутствуют в формулах по одному, т.е замещают в 63 формулах лишь один символ 8. В формулах установлены парные комбинации, в которых символ 8 не замещается, но дополняется только одним символом 89, 8.10, 8.11, 8.12, 8.14, 8.16. Выявлены также две пары .10.11 и 10.14. Ни одной тройной комбинации из дополнительных символов 8 и более - не обнаружено. Таким

образом, достаточно четко очерчивается достаточное и избыточное множество. Символы 18 и большие можно ожидать, но их число, приходящееся на полный массив данных – доли процентов. Практически не следует ожидать пар из дополнительных символов и, тем более, тройных комбинаций.

Распределение формул ВГ по числу символов в формуле ( $101=5+26+52+16+2+0$ ) существенно отличается от распределения формул ГР ( $190=7+35+66+55+23+4$ ). Последовательность разностей ( $89=2+9+14+39+21+4$ ) позволяет увидеть, что это происходит, в основном, за счет формул из 4, 5, 6 символов. Число таких формул ВГ резко выклинивается. Разность дополнительных формул ВГ ( $50=0+11+32+7+0+0$ ) и ГР ( $129=1+20+46+41+17+4$ ) равная  $79=1+9+14+34+17+4$  показывает ту же картину.

По сравнению с представленной ранее ЛКС формул железнодорожных путей для объединенной системы формул ВГ+ГР и других ЛКС существенно представительнее. Все новые формулы закономерно в нее впишутся. Но большинство новых формул будут дублировать приведенные в таблице формулы. Поскольку формулы содержат 1-6 символов, пропуски в ЛКС – легко определить.

«**10.11**», .10.11.3.4.5.6, 10.11.4.6, «**89**», 8934, 894, 8945, 89456, 89457, 8946, 895, 8956, 896, 897, **78**, 78245, 783, -7834, 78345, -783456, 78346, 7835, 78356, 7836, 784, 7845, 78456, 7846, 785, 7856, 786, **67**, 6724, 6725, 673, 6734, 6735, 67345, 674, 6745, 675, **56**, 56234, 563, 564, 5634, **45**, 452, 4523, 453, 8.10, 8.10.3.4, 8.10.3.4.6, 8.10.3.5.7, 8.10.4, 8.10.4.5, 8.10.4.5.7, 8.10.5, 8.10.5.6, **79**, 793, 7934, 79345, 79356, 794, 7945, 79456, 7946, 795, 7956, 796, **34**, 342, 68, 683, 6834, 68345, 6835, 684, 6845, 685, **57**, 573, 574, 5734, .10.14, **7.10**, 7.10.3.5, 7.10.4, 7.10.4.5, 7.10.4.5.6, 7.10.4.6, 7.10.5, 7.10.5.6, 7.10.6, «**23**», 46, 463, 69, 693, 6934, 694, 6945, 695, 8.12.3.4.6, 8.12.3.5, 8.12.4.6, 8.12.5.6, **7.11**, 7.11.4, 7.11.4.6, **58**, 582, 5823, 5824, 583, 584, 5834, **35**, 6.10, 6.10.3, 6.10.4, 6.10.4.5, «**7.12**», 7.12.4, 7.12.4.5, 7.12.5.6, **47**, 473, 8.14.4.5, **59**, 593, 5934, 594, «**6.11**», 6.11.3.4.5, 6.11.4, «**7.13**», 7.13.3, 7.13.5, 7.13.5.6, «**12**», 36, 362, 48, 483, 5.10, 5.10.3, 5.10.3.4, 5.10.4, 6.12, 6.12.3.4.5, 6.12.4, 6.12.4.5, 7.14.4.6, 7.14.5.6, 8.16.3.4, 8.16.4, **6.13**, 6.13.4, 6.13.4.5, 6.13.5, **5.11**, 5.11.4, **49**, 493, **37**, 6.14.3.4.5, 6.14.3.5, 6.14.4, 6.14.5, «**25**», 4.10, 4.10.3, **5.13**, 5.13.4, **38**, **4.11**, 4.11.3, **5.14**, 5.14.4, «**13**», 39, 4.12, «**5.18**», 5.18.3, **3.11**, «**1**», 3, 4, 5, 6, 7, 8, .10.

В [2] была приведена объединенная таблица коэффициентов **пк**. Выписываем формулы **пк** установленные для сети железных дорог  $\langle 3, 4, 5, 11, 21, 31, 22, 41, 32, 51, 42, 52, 83, 111, 211, 311, 221, 321, 611, 1111, 2111, 3111, 4111, 2221, 3211, 11111, 21111, 31111, 211111, 4211111 \rangle$ . Среди них нет ни одной новой.

Сравнение приведенных данных показывает, что исследование большого массива формул позволяет оценить достаточность и избыточность. Однако тенденции прослеживаются уже при рассмотрении небольшого массива формул.

В истории науки неоднократно выделялись магические числа. Четыре таких числа 1-4 выделено нами как для количественного представления закона малых целых чисел и представления 4-частной системы мира. Проведенное исследование указывает на подтверждение этого закона на массиве формул ВГ, которые состоят из 1-4 разных символов. Установлены две формулы, состоящие из 5 разных символов, но закон малых чисел допускает такую возможность. Дополнительно установлено еще одно магическое число 6. Это максимальное число разных символов, из которых состоят формулы Гр. Обнаружена лишь одна формула Гр из 7 разных букв.

Поскольку нами проводилось рассмотрение координации в разномасштабных системах косной и живой природы от молекул до административных делений, сетей железных дорог, можно полагать, что полученные результаты могут быть положены в основу прогноза и организации систем. Они дают возможность оценить достаточность и избыточность, ограничивать число вариантов.

### **Список литературы**

1. Атлас Мира. М. 1954. Изд-во ГУГК МВД СССР. 1954.
2. Смирнова Н.Л. О биниальности, квазибинарности и коронах из первых соседей. // Труды III Всероссийской научной школы. Математические исследования в кристаллографии, минералогии и петрографии. Апатиты. 2007. С. 76-83. 22-23 октября. /Сост. и ред. Ю.Л. Войтеховский. Апатиты: Изд-во К&М, 2007. 184 с.

## **О ГРАНЯХ КРИСТАЛЛА**

**Степенников Д.Г.  
Геологический институт КНЦ РАН  
Апатиты, <dm706390@mail.ru>**

В ходе работы по реализации теоремы Минковского для получения многогранной формы выпуклого кристалла по значениям площадей его граней и их ориентировкам, было сделано интересное наблюдение. Согласно реализации алгоритма построения, грани кристалла сдвигаются вдоль нормалей в сторону, благоприятную для приближения их площадей к заданным значениям. При этом часть граней сдвигается от центра кристалла а часть — к центру, независимо увеличивая или уменьшая свою площадь. Большинство кристаллов имеют грани, ведущие себя вполне определенным образом — при движении любой из них от центра кристалла, площадь грани уменьшается, а сама она затем вырождается в вершину или систему смежных ребер. При движении к центру площадь грани увеличивается. Если рассматривать малые смещения граней, не

изменяющие комбинаторный тип многогранника (порядок соединения элементов поверхности кристалла), то можно ввести некоторую величину — скорость изменения площади грани или просто — скорость роста грани  $V=dS/dH$ , где  $dS$  — прирост площади грани при бесконечно малом движении  $dH$  грани вдоль нормали (положительным считается направление наружу от центра). Для кристаллов, в вершинах которых сходится более 3 ребер (непростые вершины) данная характеристика неприменима, так как любое смещение грани изменит комбинаторный тип формы кристалла (например, у октаэдра исчезнет часть треугольных граней и появятся 4-, 5- или 6-угольные). У большинства выпуклых кристаллов скорость роста грани отрицательна. У куба, параллелепипеда (комбинация ромбической или тетрагональной призм с пинакоидом) и частного его случая — ромбоэдра, скорость роста любой грани равна нулю (рис. 1, а); равны нулю и скорости роста пинакоидальных граней в комбинации с призмами (рис. 1, в). Наиболее интересными случаями являются формы кристаллов, на которых есть грани с положительной  $V$  — таковы например все монодрические грани в комбинациях с пирамидами (рис. 1, б). Элементарный многогранник тетраэдр имеет все грани с положительными скоростями роста, комбинация тригональной призмы с пинакоидом — три таких призматических грани (рис. 1, в). Ряд наблюдений над формами выпуклых кристаллов привел к формулировке следующей гипотезы: **для выпуклого многогранника максимальное число граней с положительными скоростями роста равно четырем.** Попытки «с ходу» доказать это предположение не увенчались успехом, так как выяснилось, что в расчет необходимо принимать не только угловые величины и комбинаторный тип многогранной формы, но также и длины ребер. К настоящему моменту гипотеза не доказана, как и не опровергнута каким-либо контраргументом.

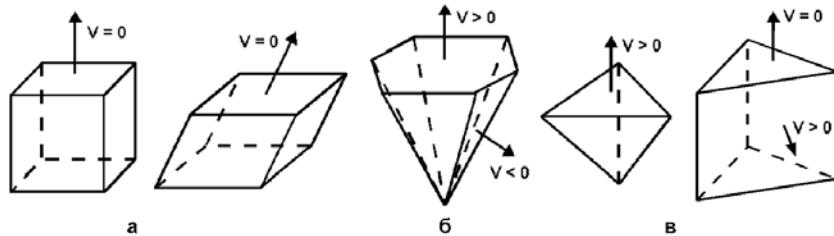


Рис. 1. Примеры различных скоростей роста граней кристаллов.

Сложности здесь добавляет и еще один интересный факт. Оказывается, не всегда грани имеют постоянную тенденцию скорости роста или, проще говоря, ее знак. Рассмотрим форму, образованную из октаэдра, у которого одна из граней немного смещена к центру, так что

непростые ее вершины переходят в ребра. У полученного многогранника данная смещенная грань имеет отрицательную  $V$ . Однако при движении грани далее к центру, при очевидном сохранении комбинаторики и угловых величин, скорость ее роста будет возрастать, пока при пересечении центра не станет нулевой; при дальнейшем перемещении,  $V$  будет положительной. Любая половинка октаэдра, усеченного по центру плоскостью, параллельной одной из граней (на самом деле — всегда двум граням) будет иметь грань в виде правильного гексагона с нулевой скоростью роста (рис. 2). Однако это нулевое значение не значит, что при перемещении грани вдоль нормали ее площадь остается постоянной — в обоих случаях грань будет уменьшать свою площадь. Корректнее будет говорить, об «особом нуле» скорости роста грани. Это еще раз подчеркивает недостаточность знания только комбинаторики формы и углов между гранями и ребрами для доказательства упомянутой гипотезы. Вопрос о числе граней на выпуклом кристалле с «особо нулевыми» скоростями также сам по себе вызывает определенный интерес.

С практической точки зрения, характер поведения граней кристалла позволил бы определенное говорить об ограничениях накладываемых на

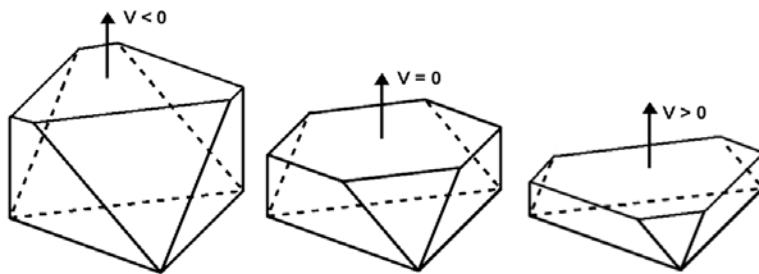


Рис. 2. Формы кристаллов с одинаковой комбинаторикой и различными по знаку скоростями роста одной и той же грани.

его возможную форму. Причем, это ограничение вызвано не кристаллохимическими или структурными, а геометрическими особенностями. Согласно правилу Гиббса предпочтительной является та форма кристалла, которая обеспечивает минимум его суммарной поверхностной энергии при заданном объеме. Границы с положительными скоростями роста, очевидно, являются «нежелательными» в природе, так как не обеспечивают этого минимума. В этом аспекте интересен вопрос о влиянии таких граней на поверхностную энергию нанокристаллов, в связи с возможностью получения наночастиц с заданными свойствами.

## Математические исследования в биологии



# **МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ ПАТОГЕННОГО МИНЕРАЛООБРАЗОВАНИЯ В РОТОВОЙ ПОЛОСТИ ЧЕЛОВЕКА**

**Бельская Л.В., Голованова О.А.  
Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского  
Омск, <LudaB2005@mail.ru>**

Накопление эмпирических наблюдений и результатов анализа биологических систем, а также развитие компьютерных методов описания физико-химических равновесий в многокомпонентных системах делают обоснованными попытки количественного моделирования явлений и равновесий в прототипах биологических сред с целью выявления условий пересыщения и выпадения кристаллических модификаций различных солей и т.д. [2]. Особый интерес представляет моделирование равновесий с участием фосфатов кальция, которые в существенной степени влияют на условия функционирования биологических сред.

Целью данной работы являлось математическое и экспериментальное моделирование химических равновесий в среде (слюна, жидккая фаза зубного налета), в которой протекает процесс образования зубного камня.

**Математическое моделирование.** При проведении термодинамического расчета в качестве прототипа биологической жидкости был взят модельный раствор, минеральный состав (неорганические макрокомпоненты), температура, ионная сила и pH (4.5 – 8.0) которого соответствуют составу смешанной слюны и жидкой фазы зубного налета здорового взрослого среднестатистического человека (табл. 1). При этом в изучаемых системах не учитывалось влияние микроэлементов (в частности ионов тяжелых металлов), а также органических соединений, являющихся компонентами реальных растворов, на образование твердой минеральной фазы.

Значения термодинамических произведений растворимости ( $pK_s^0$ ) малорастворимых соединений, которые могут образоваться в исследуемом растворе, соответствуют данным базы констант нестойкости комплексов SC-database (SCQUERY Version 1.37 (1993)) (табл. 2).

Поскольку основные ионы, входящие в состав модельного раствора, являются слабыми комплексообразователями, то при проведении расчета условных произведений растворимости в качестве конкурирующих учитывали только реакции гидролиза, которые для катионов могут сопровождаться образованием гидроксокомплексов, а для анионов слабых кислот – протонированием. Поэтому гидролиз ионов, имеющий ступенчатый характер, учитывали введением в уравнения для констант равновесия молярных долей тех форм катиона и аниона, которые входят в состав малорастворимого соединения [4].

Таблица 1.  
Минеральный состав слюны [3] и жидкой фазы зубного налета  
“plaque fluid” [5], ммоль/л

Компонент	Минимальная концентрация		Максимальная концентрация		Среднее значение концентрации	
	слюна	“plaque fluid”	слюна	“plaque fluid”	слюна	“plaque fluid”
Кальций	1	2.88	2	12.0	1.5	7.44
Натрий	3.5	18.6	24.3	35.1	13.9	26.9
Калий	14.4	61.5	37.9	85.1	26.2	73.3
Магний	0.4	3.7	0.9	4.1	0.65	3.9
Аммиак	1.2	35.6	6	52.0	3.6	43.8
Хлориды	8.5	28.5	16.9	42.8	12.7	35.7
Фториды	5.3	2.0	15.8	4.9	10.6	3.5
Карбонаты	4.5	5.0	10.2	13.9	7.4	9.5
Фосфаты	3.2	11.5	8.1	23.2	5.6	17.4
Ионная сила	0.024	0.098	0.067	0.166	0.045	0.132

Таблица 2.  
Термодинамические произведения растворимости при 310 К

№	Малорастворимое соединение	pK <sup>0</sup> <sub>s, 310</sub>	№	Малорастворимое соединение	pK <sup>0</sup> <sub>s, 310</sub>
1	Ca(H <sub>2</sub> PO <sub>4</sub> ) <sub>2</sub> ·H <sub>2</sub> O	1.14	9	CaCO <sub>3</sub> (кальцит)	8.35
2	Ca(H <sub>2</sub> PO <sub>4</sub> ) <sub>2</sub>	1.14	10	Ca(OH) <sub>2</sub>	5.26
3	CaHPO <sub>4</sub> ·2H <sub>2</sub> O	6.60	11	MgHPO <sub>4</sub> ·3H <sub>2</sub> O	5.82
4	Ca <sub>4</sub> H(PO <sub>4</sub> ) <sub>3</sub> ·2.5 H <sub>2</sub> O	47.95	12	MgNH <sub>4</sub> PO <sub>4</sub> ·6H <sub>2</sub> O	13.15
5	α-Ca <sub>3</sub> (PO <sub>4</sub> ) <sub>2</sub>	25.50	13	Mg <sub>3</sub> (PO <sub>4</sub> ) <sub>2</sub>	19.3
6	β-Ca <sub>3</sub> (PO <sub>4</sub> ) <sub>2</sub>	29.50	14	MgCO <sub>3</sub> ·3H <sub>2</sub> O	4.67
7	Ca <sub>10</sub> (PO <sub>4</sub> ) <sub>6</sub> (OH) <sub>2</sub>	117.20	15	Mg(OH) <sub>2</sub>	10.74
8	CaCO <sub>3</sub> (арагонит)	8.22			

Таким образом, при построении термодинамической модели были приняты следующие допущения:

- В качестве прототипа биологической жидкости был взят раствор минеральный ионный состав (неорганические макрокомпоненты), температура и pH которого близки к слюне и жидкой фазе зубного налета здорового взрослого среднестатистического человека;
- При расчетах использовались значения произведений растворимости, определенных при температуре 310 К;
- Расчет коэффициентов активности осадкообразующих ионов проводился по уравнению Девиса, ионная сила раствора в исследуемом диапазоне pH считалась постоянной и равной среднему значению диапазона рассчитанного для каждой изучаемой системы;
- Определение условных произведений растворимости производилось только с учетом влияния гидролиза осадкообразующих ионов;
- Считалось, что все физико-химические процессы являются равновесными и протекают в модельных растворах при постоянной температуре.

Биологическая жидкость в среде, которой протекает генезис зубных камней, является сложной многокомпонентной системой, с точки зрения современных теорий растворов она представляет собой раствор с высоким значением ионной силы. Значения коэффициентов активности определялись по уравнению Девиса, основанном на теории Дебая – Гюкеля, которое позволяет вычислить коэффициенты активности ионов для ионных сил 0.2 – 0.5 М (характерных для исследуемой биологической жидкости) с погрешностью, не превышающей 10 %. Значения ионной силы растворов в диапазоне pH 4.5 – 8.0 приведены в табл. 1.

На первом этапе были рассчитаны показатели реальных условных произведений растворимости  $pK_s'$  исследуемых малорастворимых соединений с учетом влияния ионной силы и pH раствора (табл. 3).

Таблица 3.

Показатели условных произведений растворимости в зависимости от состава модельной среды и pH раствора (на примере гидроксилапатита)

Соединение	Среда, ионная сила	pH = 5.00	pH = 6.00	pH = 7.00	pH = 8.00
$\text{Ca}_{10}(\text{PO}_4)_6(\text{OH})_2$	Слюна, I = 0.024	126.13	112.27	99.36	89.24
$\text{Ca}_{10}(\text{PO}_4)_6(\text{OH})_2$	Слюна, I = 0.045	124.69	110.82	97.92	87.80
$\text{Ca}_{10}(\text{PO}_4)_6(\text{OH})_2$	Слюна, I = 0.067	123.68	109.81	96.91	86.79
$\text{Ca}_{10}(\text{PO}_4)_6(\text{OH})_2$	“plaque fluid”, I = 0.098	122.51	108.65	95.74	85.62
$\text{Ca}_{10}(\text{PO}_4)_6(\text{OH})_2$	“plaque fluid”, I = 0.132	118.37	104.51	91.60	81.48
$\text{Ca}_{10}(\text{PO}_4)_6(\text{OH})_2$	“plaque fluid”, I = 0.166	116.41	102.55	89.65	79.53

Анализируя полученные результаты, можно сделать вывод, что в исследуемых растворах термодинамически вероятно образование следующих малорастворимых соединений:  $\text{CaHPO}_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ ;  $\text{Ca}_4\text{H}(\text{PO}_4)_3 \cdot 2.5\text{H}_2\text{O}$ ;  $\text{Ca}_{10}(\text{PO}_4)_6(\text{OH})_2$ ;  $\text{Ca}_3(\text{PO}_4)_2$  ( $\alpha$ ,  $\beta$ );  $\text{CaCO}_3$ ;  $\text{MgHPO}_4 \cdot 3\text{H}_2\text{O}$  и  $\text{MgNH}_4\text{PO}_4 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ . При этом для каждой системы диапазоны рН, при которых достигаются условия осаждения малорастворимых соединений, различны (табл. 4).

Таблица 4.  
Диапазон рН образования твердых фаз в модельных растворах

№	Соединение	Минимальные концентрации ионов		Средние концентрации ионов		Максимальные концентрации ионов	
		слюна	“plaque fluid”	слюна	“plaque fluid”	слюна	“plaque fluid”
1	$\text{CaHPO}_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$	6.7 – 8.0	6.0 – 8.0	6.4 – 8.0	5.5 – 8.0	6.2 – 8.0	5.2 – 8.0
2	$\alpha\text{-Ca}_3(\text{PO}_4)_2$	7.6 – 8.0	7.3 – 8.0	7.5 – 8.0	6.9 – 8.0	7.3 – 8.0	6.7 – 8.0
3	$\beta\text{-Ca}_3(\text{PO}_4)_2$	6.4 – 8.0	6.1 – 8.0	6.3 – 8.0	5.8 – 8.0	6.2 – 8.0	5.6 – 8.0
4	$\text{Ca}_4\text{H}(\text{PO}_4)_3 \cdot 2.5\text{H}_2\text{O}$	6.5 – 8.0	6.0 – 8.0	6.3 – 8.0	5.9 – 8.0	6.2 – 8.0	5.9 – 8.0
5	$\text{Ca}_{10}(\text{PO}_4)_6(\text{OH})_2$	5.7 – 8.0	5.4 – 8.0	5.6 – 8.0	5.1 – 8.0	5.5 – 8.0	5.0 – 8.0
6	$\text{CaCO}_3$ (арагонит)	8.0 – 8.0	7.8 – 8.0	7.8 – 8.0	7.3 – 8.0	7.6 – 8.0	7.0 – 8.0
7	$\text{CaCO}_3$ (кальцит)	7.9 – 8.0	7.7 – 8.0	7.6 – 8.0	7.2 – 8.0	7.4 – 8.0	6.9 – 8.0
8	$\text{MgHPO}_4 \cdot 3\text{H}_2\text{O}$	-	6.8 – 8.0	-	6.6 – 8.0	-	6.5 – 8.0
9	$\text{MgNH}_4\text{PO}_4 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$	-	7.0 – 8.0	-	6.9 – 8.0	7.9 – 8.0	6.8 – 8.0

Известно, что пересыщение в растворе может создаваться под влиянием различных факторов, в частности изменения температуры, рН, концентрации осадкообразующих ионов и т.д. Для оценки возможности образования труднорастворимого соединения в растворе используют рассчитанные значения индексов пересыщения SI [6], при этом, считается, что если  $SI > 0$ , то в данных условиях термодинамически вероятно осаждение твердой фазы из раствора.

Сопоставляя индексы пересыщения, рассчитанные для фосфатов кальция различного стехиометрического состава, следует отметить, что в рамках выбранной термодинамической модели в изучаемых системах (при рН 4.5 – 8.0) наибольшую степень пересыщения, в соответствии с используемым критерием, имеет гидроксилапатит (рис. 1).

При  $\text{pH} < 6.5$  по убыванию значений SI исследуемые фосфаты кальция можно ранжировать в следующий ряд:  $\text{Ca}_{10}(\text{PO}_4)_6(\text{OH})_2 > \beta\text{-Ca}_3(\text{PO}_4)_2 > \text{CaHPO}_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O} > \text{Ca}_4\text{H}(\text{PO}_4)_3 \cdot 2.5\text{H}_2\text{O}$ ; тогда как при  $\text{pH} > 7.0$

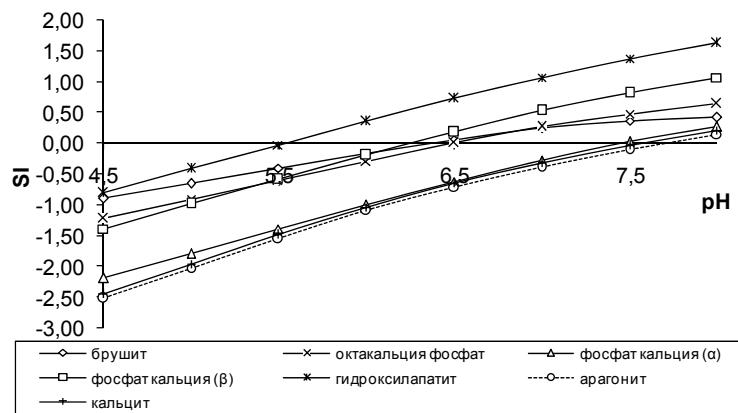


Рис. 1. Зависимость индекса пересыщения от pH раствора для средних значений диапазона концентраций ротовой жидкости.

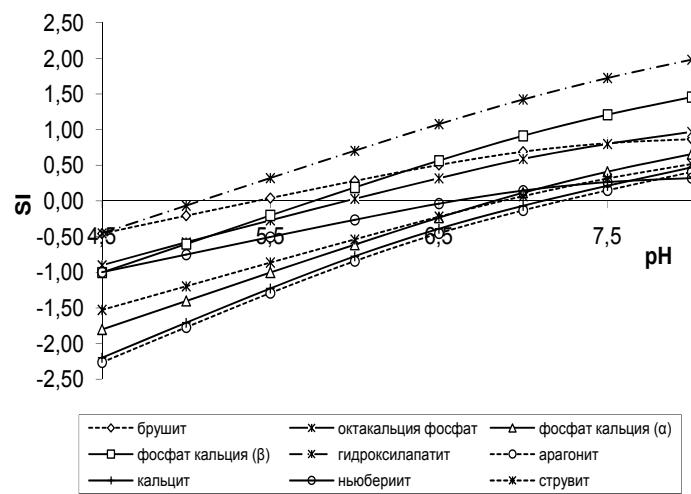


Рис. 2. Зависимость индекса пересыщения от pH раствора для средних значений диапазона концентраций жидкой фазы зубного налета.

последовательность имеет следующий вид:  $\text{Ca}_{10}(\text{PO}_4)_6(\text{OH})_2 > \beta\text{-Ca}_3(\text{PO}_4)_2 > \text{Ca}_4\text{H}(\text{PO}_4)_3 \cdot 2.5 \text{ H}_2\text{O} > \text{CaHPO}_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O} > \alpha\text{-Ca}_3(\text{PO}_4)_2$ . Карбонаты кальция имеют положительные индексы пересыщения при  $\text{pH} > 7.0$ , однако их значение существенно ниже, чем для фосфатов, поэтому в рамках данной модели их образование термодинамически маловероятно.

В растворах, моделирующих состав жидкой фазы зубного налета, выявлены аналогичные закономерности (табл. 5). Следует отметить, что в данных условиях термодинамически вероятно образование фосфатов магния при  $\text{pH} > 6.5$ , а значения  $\text{pH}$  начала образования твердых фаз для всех соединений сдвинуты в более кислую область (рис. 2).

Результаты проведенного термодинамического расчета подтверждены данными по изучению фазового состава коллекции зубных камней пациентов Омского региона [1]. Показано, что основным минеральным компонентом всех образцов является гидроксилапатит. В трех образцах зубных камней обнаружен брушит ( $5 - 10\%$  от содержания апатита).

**Экспериментальное моделирование.** В ходе модельного эксперимента изучалось поведение рассчитанных систем при температуре  $37.0 \pm 0.5^\circ\text{C}$  и четырех значениях  $\text{pH} 5.50 \pm 0.05, 6.00 \pm 0.05, 7.00 \pm 0.05$  и  $8.00 \pm 0.05$ . Показано, что на первом этапе образуется брушит или смесь брушита и витлокита во всем диапазоне  $\text{pH}$ . При увеличении времени кристаллизации происходит переход брушита в более термодинамически стабильную фазу – гидроксилапатит (ГА), причем скорость этого перехода зависит от  $\text{pH}$  раствора (табл. 5).

Таблица 5.  
Результаты модельного эксперимента (слюна)

$\text{pH}$ раствора	14 дней	90 дней	180 дней	270 дней
$5.50 \pm 0.05$	Брушит + ГА		Гидроксилапатит	
$6.00 \pm 0.05$		Брушит + ГА		Гидроксилапатит
$7.00 \pm 0.05$		Аморфный фосфат кальция + витлокит		Аморфный фосфат кальция + ГА
$8.00 \pm 0.05$			Аморфный фосфат кальция	

Во всех образцах присутствует рентгеноаморфная компонента, о чем свидетельствует существенное повышение фона в области  $10^0 - 20^0$  по  $\text{CuK}_\alpha$ . Аналогичная картина наблюдается и для “plaque fluid” (табл. 6).

При сравнении данных, приведенных в табл. 5 и 6, видно, что образование термодинамически стабильной фазы – гидроксилапатита – в среде жидкой фазы зубного налета происходит за более короткий промежуток времени и во всем диапазоне  $\text{pH}$ , тогда как для раствора, моделирующего состав слюны, при  $\text{pH} = 8.00 \pm 0.05$  фаза гидроксилапатита так и не получена.

Вероятно, более высокие концентрации неорганических компонентов в жидкой фазе зубного налета способствуют ускорению процессов минерализации в ротовой полости человека.

Таблица 6.  
Результаты модельного эксперимента (“plaque fluid”)

pH раствора	14 дней	90 дней	180 дней	270 дней
5.50±0.05	Брушил + ГА		Гидроксилапатит	
6.00±0.05	Брушил	Брушил + ГА	Гидроксилапатит	
7.00±0.05	Брушил + ГА		Аморфный фосфат кальция + ГА	ГА
8.00±0.05	Аморфный фосфат кальция + ГА + брушил		Аморфный фосфат кальция + ГА	ГА

**Выходы:**

- На основе данных о составе слюны и жидкой фазы зубного налета проведено термодинамическое моделирование процесса образования зубного камня;
- Установлено, что в рамках выбранной модели в изучаемых системах наибольшую степень пересыщения во всем диапазоне pH имеет гидроксилапатит;
- Результаты экспериментального моделирования процесса образования зубного камня из прототипов биологических жидкостей имеют хорошее согласие с данными термодинамического расчета, а также реально наблюдаемым фазовым составом патогенных минералообразований полости рта. Следовательно, можно сделать вывод о том, что метод моделирования может быть применен для изучения биологических жидкостей, в том числе слюны.

**Список литературы**

1. Голованова О.А., Бельская Л.В., Блинов В.И. и др. Особенности фазового состава и кристаллической структуры зубных и слюнных камней // Вестник Омского университета. № 2. 2006. С. 56-58.
2. Дуров В.А., Бурсулай Б.Д., Новиков А.И., Матковская Т.А. Математическое моделирование химических равновесий в прототипах биологических сред // Журнал физической химии, 1993. Т. 67. № 12. С. 2239-2344.
3. Забросаева Л.И., Козлов Н.Б. Биохимия слюны. Омск. 1992. 44 с.
4. Пятанова П.А. Физико-химическое исследование почечных камней, формальный генезис: Автореф. дис. канд. хим. наук: 02.00.01. Омск. 2004. 20 с.
5. Margolis H.S. An assessment of recent advances in the study of the chemistry and biochemistry of dental plaque fluid // Journal of Dental Research. 1990. V. 69. P. 1337-1342.
6. Mullin J.W. Crystallization, Butterworth-Heinemann, Oxford. 1993. P. 118-122.

## ОСОБЕННОСТИ МИКРОКРИСТАЛЛИЗАЦИИ РОТОВОЙ ЖИДКОСТИ ЧЕЛОВЕКА

Бельская Л.В.<sup>1</sup>, Голованова О.А.<sup>1</sup>, Ломиашвили Л.М.<sup>2</sup>, Борисенко М.А.<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского

<sup>2</sup>Омская государственная медицинская академия

Омск, <LudaB2005@mail.ru>

С каждым годом в различные области медицины все более активно внедряется новая диагностическая технология – морфологическое исследование биологических жидкостей [6]. Получение структур исследуемых биологических жидкостей достигается посредством фазового перевода их из жидкого состояния в твердое путем дегидратации. Согласно синергетике (теории, рассматривающей процессы самоорганизации, устойчивости, распада и возрождения структур живой и неживой материи), информация, содержащаяся в жидкой фазе на молекулярном уровне, при дегидратации переводится на макроуровень в виде различных структур, которые становятся доступными для наблюдателя [8].

Шатохиной С.Н. и соавт. [7] проведены исследования процессов самоорганизации различных физиологических и патологических сред организма и показано, что основную роль в формировании структур играет органическая составляющая, всегда присутствующая в биологических жидкостях в том или ином количестве (от 0.01 мкг до 100 г/л и более).

Разделение структур на органическую и неорганическую составляющие достигается методом клиновидной дегидратации. При этом биологическая жидкость наносится на прозрачную поверхность в форме капли, которая дегидратируется в определенных условиях. Капля – единственно возможная естественная объемная структура любой жидкости. Объем капли определяется главным образом соотношением удельного веса жидкости и силы ее поверхностного натяжения, при этом испарение жидкости происходит равномерно со всей открытой поверхности капли. В силу того, что полусфера имеет разную толщину слоя в центре и на периферии (клину), в исследуемой капле при испарении воды концентрация растворенных веществ изменяется неравномерно: в периферических отделах она возрастает быстрее, чем в центральной части капли. При таких изменениях начинают проявляться осмотические силы, и соли перемещаются к центру капли, в сторону меньшей концентрации растворенных веществ. При этом они отбирают воду у белков и других растворенных веществ с высокой молекулярной массой и выталкивают их на периферию капли. В результате краевая аморфная зона дегидратированной капли представлена структурами органического происхождения, а центральная кристаллическая – структурами солей. Фундаментальный принцип данного метода состоит в том, что он позволяет решить проблему преобразования неустойчивых, высокодинамичных структур

молекулярного уровня в устойчивые макроструктуры твердой фазы [7].

Изучение кристаллизации биологических жидкостей возможно как в нативном состоянии, так и при воздействии различных неблагоприятных факторов внешней среды [2]. Одним из негативных факторов, действующих на организм человека, является электромагнитное излучение. Человек всегда жил в среде, где постоянно присутствует электромагнитные волны различной частоты. За последние 50 лет суточная мощность радиоизлучений суммарно возросла более чем в 50 тысяч раз, таким образом, все мы прямо или косвенно находимся под воздействием электромагнитного излучения. Это особенно актуально, так как в повседневной жизни и работе современного человека компьютер занимает важное место. Особенностью работы на персональном компьютере является то, что пользователь находится в непосредственной близости от монитора, что увеличивает интенсивность воздействия на него упомянутых излучений.

Состояние органов полости рта в немалой степени зависит от состава и свойств окружающей их жидкости, а именно смешанной слюны. Слюна играет важнейшую роль в поддержании физиологического равновесия процессов минерализации и деминерализации в эмали зубов. В полости рта слюна присутствует в виде тонкой пленки жидкости на различных поверхностях. Известно, что заболевания ротовой полости возникают вследствие нарушения равновесия в системе «эмаль зубов – слюна» под действием неблагоприятных факторов. Именно ротовая полость и смешанная слюна, в частности, в первую очередь испытывает воздействие компьютерного излучения. Поэтому изменения состава и свойств ротовой жидкости (смешанной слюны) может оказать существенное воздействие на физико-химические процессы, происходящие в эмали зубов, а в ряде случаев, и на возникновение патологических изменений в ней.

Материалом исследования служила слюна кариесрезистентных лиц в возрасте 18 – 21 г. Сбор слюны производят в химически чистые пробирки в количестве 1 - 2 мл. Слюна из пробирки наносится на химически чистое стекло (3 капли), стекло помещается в термостат (температура 37<sup>0</sup>С) на 30 - 40 минут. Затем образцы исследуют в стереоскопическом микроскопе МБИ-1 с увеличением 2×6, проводят микрофотографирование на цифровой фотоаппарат. Для определения типа микрокристаллизации слюны использовались методики Леуса П.А. [4], Пузиковой О.Ю. [5].

В эксперименте слюну делили на 5 порций. Первая порция служила для фоновых показателей слюны. Вторую порцию оставляли при комнатной температуре, чтобы исключить влияние времени и температуры на состав слюны. Третью, четвертую и пятую порции слюны помещали в закрытых пробирках в разных местах компьютера на 7 часов (табл. 1). Затем образцы высушивали и определяли тип микрокристаллизации слюны (МКС).

В порциях слюны, размещенных в разных местах компьютера, происходит достоверное, по сравнению с исходной порцией слюны, разрушение

кристаллических структур. В порциях слюны, оставленной при комнатной температуре на 7 часов, достоверных различий с исходной порцией не наблюдается. Таким образом, достоверно доказано, что компьютерное излучение при воздействии даже в течение 7 часов очень сильно изменяет картину микрокристаллизации слюны и, следовательно, эту биологическую жидкость можно использовать для диагностических целей.

Таблица 1.  
Характеристики компьютеров и место расположения образцов

Номер пробирки	Место расположения пробирок	Характеристика компьютерного устройства
3	Внутри системного блока современного компьютера (Pentium VI)	Дата выпуска – 2002 г. Частота процессора 2 ГГц. Частота на шине компьютера 400 МГц
4	Рабочее место пользователя компьютера (Pentium VI)	Дата выпуска – 2002 г. Частота процессора 2 ГГц. Частота на шине компьютера 400 МГц
5	Рабочее место пользователя компьютера модели 486. Системный блок расположен в 95 см от оператора	Дата выпуска – 1999 г. Частота процессора 66 МГц. Частота на шине компьютера 33 МГц

В ходе дальнейшего исследования были выделены две группы людей: группа 1 – люди, чья профессиональная деятельность была связана с работой на персональном компьютере. Стаж работы по специальности составлял от пяти до десяти лет, средняя продолжительность времени, проводимого у экрана монитора – восемь часов в сутки и более, при этом люди регулярно обращаются к стоматологу с диагнозом множественный карies зубов – 80 человек (63.0 %). Взятую в качестве сравнения группу лиц, резистентных к заболеваниям, составили люди с одинаковым соматическим статусом «практически здоровые», а также без заболеваний пародонта и слизистой оболочки полости рта - 47 человек (27.0 %).

Микрофотографии кристаллографм сохранялись в виде графических файлов. Для обработки графических изображений (поворот изображений по плоскости, изменение яркости, контрастности, нанесение размеров) использовали программы Adobe Photoshop 6.0 и PhotoDraw 2000. Полученные биометрические результаты заносили в электронную таблицу Excel 2000 из пакета Microsoft Office 2000. Данные анализировали с использованием статистического пакета STATGRAPHICS Plus 5.0.

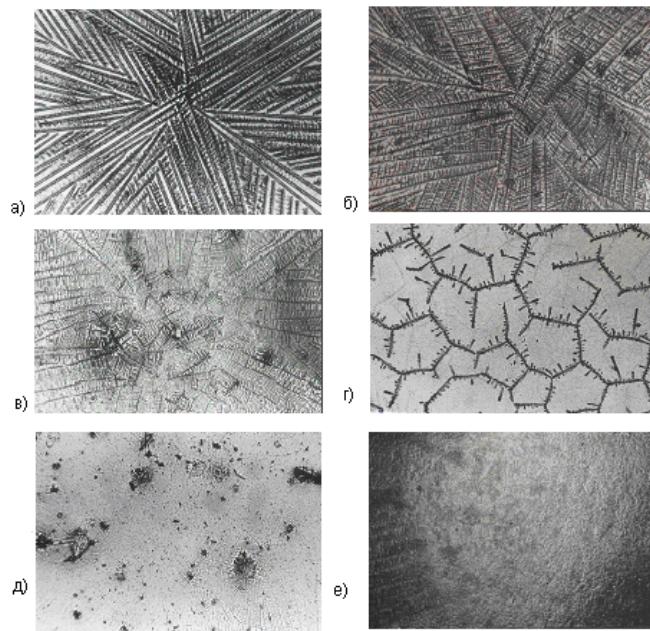


Рис. 1. Типы МКС (а – 5 баллов, б – 4 балла, в – 3 балла, г – 2 балла, д – 1 балл, е – 0 баллов).

Для результатов микрокристаллизации ротовой жидкости кариесерезистентных лиц характерен четкий рисунок крупных удлиненных кристаллопризматических структур, идущих от центра капли, сросшихся между собой и имеющих древовидную или папоротникообразную форму (картина соответствует 5 баллам). При оценке результатов микрокристаллизации ротовой жидкости лиц, работающих с электромагнитным излучением, отмечается разрушение четкой структуры кристаллов (рис. 1). Выявляются следующие типы: рисунок крупных удлиненных кристаллопризматических структур, сросшихся между собой в произвольном порядке (4 балла); в центре капли видны отдельные кристаллы звездчатой формы, по периферии сохранены укрупненные древовидные кристаллы (3 балла); отдельные кристаллы в виде прута или веточки, расположенные по всему полю (2 балла); по всей площади капли большое количество изометрически расположенных кристаллических структур, звездчатой, округлой и неправильной формы (1 балл); полное отсутствие кристаллов в поле зрения (0 баллов).

В исследуемой нами группе людей, работающих за компьютером,

наблюдались типы МКС 0 - 4 (табл. 2), причем преобладают 0 - 2 типы, что свидетельствует о нарушении структурных и минерализующих свойств слюны и снижении уровня резистентности зубов к кариесу.

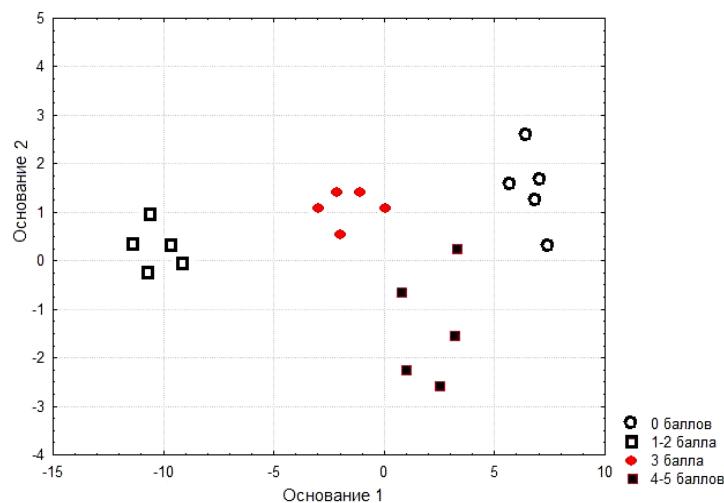


Рис. 2. Диаграмма рассеяния канонических значений.

Таблица 2.  
Результаты определения типа МКС

Тип МКС, балл	Количество человек	
	Группа 1	Контрольная группа
0	14 (17.5 %)	0
1	15 (18.6 %)	0
2	28 (35.0 %)	1 (2.1 %)
3	14 (17.5 %)	4 (8.5 %)
4	9 (11.3 %)	15 (31.9 %)
5	0	27 (57.4 %)

Существенным тормозом в широком распространении методики является высокая вариабельность получаемой картины кристаллических агрегатов. По данным литературы, общий способ роста кристаллов в биологическом объекте – это начальное образование структурного каркаса (органического матрикса), в котором кристалл впоследствии выращивают. Роль этого органического каркаса могут выполнять молекулы муцина, в большом количестве содержащегося в слюне. Существуют две главные причины вариабельности в формообразовании кристаллических агрегатов [1]. Первая – условия роста кристаллов. При кристаллизации слюны на открытой поверхности в высущенной капсule образуются три зоны: центральная, промежуточная и периферическая. В центре капли располагаются наиболее крупные дендритные кристаллы в виде папоротника. По-видимому, эти кристаллы имеют максимальную возможность свободно расти и поэтому участок со структурами «папоротника» можно считать зоной свободного роста. Древовидная форма кристаллов слюны, очевидно, объясняется наличием в их структуре гликопротеина муцина, имеющего разветвленную структуру. Вторая причина вариабельности формообразования кристаллических агрегатов связана с гетерогенностью муцина. Установлено, что даже у практически здоровых людей кристаллизация ротовой жидкости не является строго одинаковой. Этот факт не является новым, но именно это не позволяет до настоящего времени создать «эталон (стандарт) нормы» для последующих исследований. Поэтому для систематизации полученных изображений были использованы экспертные признаки кристаллографии слюны (длина, ширина кристаллов, углы ветвления, параметры асимметрии и т.д.) [1].

При оценке фигур кристаллизации с помощью методов математической статистики также наблюдаются достоверные различия между группами, что подтверждено данными дискриминантного анализа (рис. 2).

Параллельно провели определение электролитного состава ротовой жидкости исследуемых групп пациентов (табл. 3). Параметры pH, pK, pNa слюны определяли методом прямой потенциометрии с помощью ионоселективных электродов на иономере ЭВ-74. В качестве электрода сравнения использовали хлорсеребряный электрод. Белок определяли фотометрически по методу Бенедикта. Неорганический фосфор в слюне определяли по методу Больца и Льюк в модификации Конвай В.Д., Леонтьева В.К. [3], общую концентрацию кальция – методом комплексонометрического титрования. Математическая обработка данных проводилась с помощью статистического пакета STATISTICA 6.0 (StatSoft Inc. USA).

Сравнение количественных характеристик состава слюны контрольной группы с группой людей, работающих за компьютером, статистически значимых различий не показало. Содержания исследуемых компонентов от нормы практически не отличаются, однако, у всех пациентов наблюдаются различные заболевания полости рта. Вероятно, это связано именно с работой за компьютером и вредным воздействием излучения.

Таблица 3.

Электролитный состав ротовой жидкости ( $p=0.95$ )

Показатель	Контрольная группа	Группа людей, работающих на компьютере
pH	$6.80 \pm 0.11$	$6.75 \pm 0.35$
C (Na), г/л	$0.303 \pm 0.037$	$0.305 \pm 0.120$
C (K), г/л	$0.715 \pm 0.053$	$0.769 \pm 0.250$
Общий кальций, г/л	$0.051 \pm 0.004$	$0.049 \pm 0.013$
Фосфор, г/л	$0.158 \pm 0.014$	$0.152 \pm 0.016$
Белок, мг/мл	$1.73 \pm 0.24$	$1.69 \pm 0.07$

Объяснение связи между электромагнитными полями и болезнями основано на том, что все биохимические процессы в клетках, так или иначе, зависят от электрохимических свойств участвующих в них молекул и ионов. Тем не менее, более точные механизмы этой связи не выяснены. Поражение твердых тканей зубов связывают как с непосредственных воздействием излучения, так и с нарушением минерального и белкового обмена в организме, с изменением состава слюны и функционального состояния физиологических систем. Так, даже слабое действие излучения на ткани организма приводит к ионизации отдельных молекул и атомов, образуя новые, в том числе такие реакционноспособные, как свободные радикалы, перекисные соединения и другие. Последние, реагируя между собой и с другими молекулами тканей, вызывают нарушение функций клеток, биохимических процессов в них, вплоть до гибели отдельных клеток.

Таким образом, в данной работе установлено, что электромагнитное излучение способствует нарушению структурных и минерализующих свойств слюны, что может привести к «компьютерному некрозу зубов». Предложен метод оценки типа микрокристаллизации слюны для определения уровня воздействия электромагнитного излучения на человека. Несмотря на негативное влияние перечисленных факторов, их невозможно полностью исключить из жизни современного человека. В настоящее время разработаны методы восстановления пораженных участков зубов, в каждом конкретном случае лечение назначается стоматологом индивидуально.

### Список литературы

- Барер Г.М., Денисов А.Б., Струрова Т.М. Вариабельность кристаллических агрегатов ротовой жидкости в норме// Российский стоматологический журнал. 2003. № 1. С. 33-35.

2. Коротких Н.Г., Пашков А.Н., Болгов С.В., Лошкарев В.П. Влияние факторов внешней среды на кристаллизацию ротовой жидкости// Стоматология. 2002. №4. С. 13-16.
3. Леонтьев В.К., Петрович Ю.А. Биохимические методы исследования в клинической и экспериментальной стоматологии. Омск. 1976. С. 32-33.
4. Леус П.А. Клинико-экспериментальное исследование патогенеза, патогенетической консервативной терапии и профилактики кариеса зубов. Автореферат дис. д-ра мед. наук. – М. 1977.
5. Пузикова О.Ю. Прогнозирование развития кариеса зубов с учетом интегрированных показателей и математического моделирования. Диссертация канд. мед. наук:/ ОмГМА. Омск. 1999.
6. Шатохина С.Н. Диагностическое значение кристаллических структур биологических жидкостей в клинике внутренних болезней: автореф. дис. ... д-ра мед. Наук. М. 1995. 40 с.
7. Шатохина С.Н., Разумова С.Н., Шабалин В.Н. Морфологическая картина ротовой жидкости: диагностические возможности // Стоматология. 2006. № 4. С. 14-17.
8. Хакен Г. Информация и самоорганизация. Макроскопический подход к сложным системам. М.: Мир. 1991. 240 с.

## ГЕОМЕТРИЧЕСКИЕ МОТИВЫ В МОРФОЛОГИИ РЫБ Tetraodontiformes

Войтеховский Ю.Л.<sup>1</sup>, Моргунова О.В.<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Геологический институт Кольского НЦ РАН

<sup>2</sup>Кольский филиал Петрозаводского госуниверситета

Апатиты, <woyt@geoksc.apatity.ru>

На примере семейств Ostraciontidae (кузовковые) и Diodontidae (рыбы-ежи) показано, что в их морфологии заложен дуализм, известный в кристаллографии как дуализм разбиений по Дирихле и Делоне. А именно, если принять основания игл на поверхности Diodontidae в качестве точечной ( $R$ ,  $r$ )-системы Делоне, то соответствующее разбиение по Дирихле даст разбиение поверхности Ostraciontidae на полигональные костные пластины. Это обстоятельство подчеркивает таксономическую близость семейств Ostraciontidae и Diodontidae в составе отряда Tetraodontiformes и указывает на существование в природе принципов целесообразности, одинаково проявляющихся в минеральных и биологических структурах. Характеристики разбиений по Дирихле найдены для четырех экземпляров Diodontidae, вид *Diodon holocanthus*.

В статье (Войтеховский, 2001) для полиздрических колоний *Pandorina morum* (Müll.) Bory (Volvocaceae) комбинаторно-геометрическими методами предсказаны три формы, подчиненные топологическим закономерностям разбиения сферы выпуклыми полигонами. Экспериментально показано (Войтеховский и др., 2006), что в природе из трех форм реализуются только

две, отвечающие фуллеренам – полиэдрам, на которых разрешены лишь пяти- и шестиугольные грани. Они же оказались наиболее симметричными в согласии с принципом диссимметрии Кюри, ведь клетки колоний *Pandorina morum* функционально не специализированы, а сами колонии свободно вращаются в толще воды. Таким образом, нет причин, которые могли бы понизить их симметрию. По-видимому, именно это обусловило отсутствие в эксперименте третьей формы с аксиальной симметрией. В работе (Войтеховский, 2003) на материалах исследований (Геккель, 1902; Мордухай-Болтовской, 1936) показано, что среди радиолярий встречаются геометрически дуальные формы *Circogonia icosahedra* и *Circogonia dodecahedra*. Но додекаэдр – простейший из фуллеренов, а симметрия обеих форм – максимальная из возможных для конечных фигур. Напомним, что фуллерены – это полиэдрические молекулы, чаще всего на основе углерода, активно изучаемые в минералогии, физике и химии из-за их уникальных свойств (Войтеховский, 2002). Поясним также понятие дуальности. Если на гранях полиэдра взять по точке и соединить отрезками те и только те из них, которые лежат на смежных гранях, то получим дуальный полиэдр. Так, куб дуален октаэдру, икосаэдр – додекаэдру, тетраэдр – сам себе. Каждый полиэдр имеет дуальный полиэдр или дуален самому себе. С одной стороны, дуальный – значит, противоположный, так как вершины одного полиэдра соответствуют граням другого, и наоборот. С другой стороны, в дуальности кроется и эквивалентность, поскольку дуальные полиэдры обладают той же симметрией и тем же числом ребер. Наконец, она подчеркивается существованием полиэдров, дуальных самим себе. Как показано далее, это содержательное геометрическое понятие неожиданным образом проявляется в биоморфологии.

Из сказанного (примеры можно продолжить) вытекают следующие выводы:

- 1) в природе действуют принципы целесообразности, сходным образом проявляющиеся в минеральных и биологических структурах;
- 2) не только минеральные, но и биологические структуры могут быть рассчитаны “на кончике пера”, если корректно определены исходные посылки;
- 3) фуллерены – ярчайший пример таких структур;
- 4) симметрия – мощный принцип отбора целесообразных форм в минеральной и биологической природе;
- 5) комбинаторно-геометрический дуализм биологических структур говорит скорее об их таксономической близости, чем удаленности.

В данной статье приводится пример такого дуализма. Он тем более интересен, поскольку речь идет о морфологии высокоорганизованных существ – рыб отряда Tetraodontiformes (иглобрюхообразные), семейств Ostraciontidae (кузовковые, англ. boxfishes) и Diodontidae (рыбы-ежи, англ. porcupinefishes), а дуализм формулируется в терминах разбиений по-

верхностей по Дирихле и Делоне. Эта в высшей степени абстрактная комбинаторно-геометрическая теория лежит в основании современной кристаллографии.

#### Материалы и методы

Исходная идея автора состояла в том, чтобы изучить морфологию представителей семейства Ostraciontidae, известных по замечательным рисункам в атласе Э. Геккеля (1902), а также фотографиям и зарисовкам из определителя (Carpenter et al., 1997) (рис. 1, 2). А именно, было бы интересно получить статистическое распределение полигональных костных пластин,



Рис. 1. *Acanthostracion quadricornis* (вверху) [[http://upload.wikimedia.org/wikipedia/commons/3/36/Acanthostracion\\_quadricornis.jpg](http://upload.wikimedia.org/wikipedia/commons/3/36/Acanthostracion_quadricornis.jpg)] и *Tetrosomus gibbosus* (внизу) [[http://upload.wikimedia.org/wikipedia/commons/c/c5/Tetrosomus\\_gibbosus.jpg](http://upload.wikimedia.org/wikipedia/commons/c/c5/Tetrosomus_gibbosus.jpg)], по Геккелю (1902).

покрывающих поверхность этих экзотических тропических рыб. Вопрос совершенно не обсужден в специальной литературе. По-видимому, интересующее нас распределение представляется ихтиологам совершенно незакономерным. Между тем, уже на приведенных рисунках (и, что надежнее – на помещенных в интернете многочисленных фотографиях) хорошо видно,

что костные пластины в основном шести-, реже пяти-, совсем редко – четырех- и семиугольные. Уже это наблюдение побуждает рассчитать их частотный спектр. Несомненное преобладание пяти- и шестиугольных пластин подсказывает гипотезу – не являются ли формы Ostraciontidae все теми же фуллеренами, а четырех- и семиугольные пластины на изображениях – ошибками визуального восприятия? Как бы то ни было, редкость представителей Ostraciontidae не позволила автору выполнить прямые наблюдения. Но комбинаторика разбиений их поверхностей костными пластинами подсказала другой путь, косвенно решающий поставленную задачу.

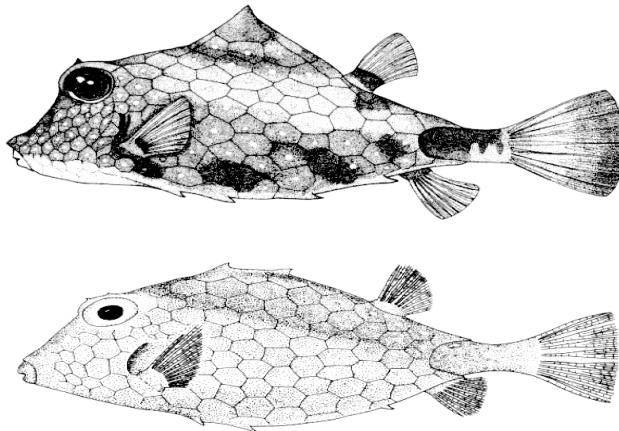


Рис. 2. *Tetrosomus gibbosus* (вверху) и *Tetrosomus reipublicae* (внизу), по Карпентеру и др. (Carpenter et al., 1997).

Исследуя вопрос о том, в соответствии с какими геометрическими принципами встраиваются атомы в решетку растущего кристалла, Б.Н. Делоне (1937, 1938) ввел понятие точечных ( $R, r$ )-систем, подчиняющихся двум аксиомам: дискретности (расстояние между любыми двумя точками системы больше некоторого фиксированного  $r$ ) и покрытия (расстояние от любой точки пространства до ближайшей точки системы меньше некоторого фиксированного  $R$ ). Они не позволяют точкам располагаться друг от друга слишком близко и слишком далеко. Кристаллографическая геометрия на языке ( $R, r$ )-систем изложена в работе (Галиулин, 1984). Ее высшее достижение – локальные (т.е. для конечных областей, окружающих каждую точку системы) условия, из которых неизбежно следует кристаллографическая упорядоченность всей ( $R, r$ )-системы (Делоне и др., 1976). Далее нам понадобятся некоторые основные понятия этой теории.

Для исследования  $(R, r)$ -систем Б.Н. Делоне предложил оригинальный “метод пустого шара”. Пусть дана  $(R, r)$ -система, для определенности – на плоскости. Поместим в нее достаточно малую окружность так, чтобы внутрь не попало ни одной точки, и начнем ее “раздувать”. Когда окружность коснется первой точки системы, потребуем, чтобы она отталкивалась от точки. Когда окружность коснется второй точки системы, потребуем, чтобы она отталкивалась от обеих точек. Наконец, окружность коснется третьей точки. При случайном характере  $(R, r)$ -системы процедура этим и заканчивается – окружность нельзя увеличить, не захватив внутрь одну из точек. Соединив их отрезками, получим треугольник Делоне. Применив метод необходимое число раз, получим разбиение (триангulation) плоскости по Делоне. Проведя ко всем отрезкам срединные перпендикуляры до их взаимного пересечения, получим разбиение плоскости на полигоны по Дирихле (рис. 3, окружности не показаны). Каждый полигон содержит одну точку исходной  $(R, r)$ -системы. Главное свойство любого полигона Дирихле состоит в том, что каждая его внутренняя точка расположена к “своей” точке  $(R, r)$ -системы ближе, чем к любой другой. Для одной  $(R, r)$ -системы разбиения по Делоне и Дирихле дуальны, т.е. однозначно определяют друг друга. Две  $(R, r)$ -системы эквивалентны по Вороному, если соответствующие разбиения по Дирихле (или по Делоне, что равносильно) комбинаторно одинаковы. Последнее означает, что между ними можно установить взаимно-однозначное соответствие, при котором соответствующие полигоны будут окружены равным числом соседей, а в соответствующих вершинах будут сходиться равное число полигонов.

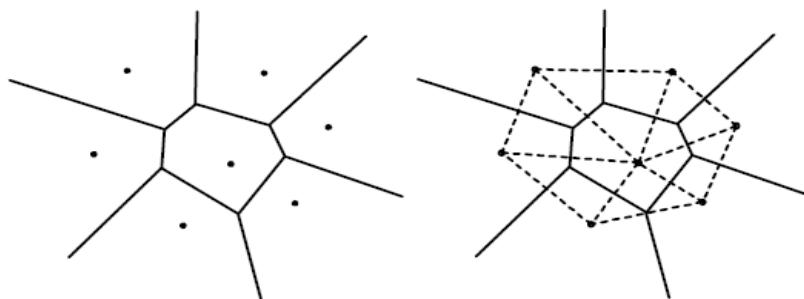


Рис. 3. Разбиение плоскости по Дирихле (слева) и дуальная к нему триангуляция по Делоне (справа).

После необходимого экскурса в комбинаторную геометрию вернемся к рыбам семейства Ostraciontidae. Интересующие нас вопросы теперь можно сформулировать следующим образом. Если принять в качестве  $(R, r)$ -

системы точки, хорошо различимые в центре каждой костной пластины, то будет ли полигональное разбиение поверхности пластинами разбиением по Дирихле? Если да, то являются ли пластинчатые разбиения поверхностей для рыб одного вида эквивалентными по Вороному? Если нет, то чем вызван разброс комбинаторно-геометрических параметров разбиений: возрастными особенностями, условиями обитания или другими причинами?

### Результаты и обсуждение

За неимением представителей Ostraciontidae, автором изучены более доступные Diodontidae вида *Diodon holocanthus*. Оба семейства входят в отряд Tetraodontiformes, родственны друг другу и занимают сходные экологические ниши. В отличие от Ostraciontidae, представители Diodontidae не обладают костными пластинами, образующими разбиения по Дирихле. Но основания их игл красноречиво и однозначно задают на сферической поверхности ( $R, r$ )-системы, для которых эти разбиения могут быть построены. Всего были изучены четыре экземпляра *Diodon holocanthus*, происхождение которых установить не удалось. Три из них (№ 1-3) имеют диаметр 10-12 см, четвертый (№ 4) ~ 25 см (рис. 4). Не ясно, чем определено двукратное различие по размеру: возрастом, условиями обитания или интенсивностью реакции на опасность (как правило, именно опасность приводит к раздуванию рыб этого вида). На поверхности каждого экземпляра выполнены триангуляции по Делоне и дуальные к ним разбиения по Дирихле (рис. 5). Для последних подсчитаны числа образующих полигонов. Результаты приведены в таблице.

Во всех случаях довлеющим образом преобладают пяти- и шестиугольные полигоны, четырех- и семиугольные встречаются в единичных случаях. Это соответствует наблюдениям над Ostraciontidae, приведенным в начале статьи. Напомним, что на любом фуллерене присутствуют ровно 12 пятиугольных граней при неограниченном числе шестиугольных (Войтеховский, 2001). В нашем случае число пятиугольных граней составляет десятки, что не может быть вызвано погрешностями построения разбиений по Дирихле на поверхности *Diodon holocanthus*. Следовательно, их полиздрические аппроксимации не являются фуллеренами, а четырех- и семиугольные полигоны в них – несмотря на редкость – вполне закономерны. Отношения чисел шести- и пятиугольников в разбиениях по Дирихле у экземпляров № 1 - 3 близки ( $1.3 \div 1.4$ ), но резко отличны от такового у № 4 (0.35). Иначе говоря, у экземпляров № 1 - 3 ( $R, r$ )-системы эквивалентны по Вороному, по меньшей мере статистически. ( $R, r$ )-система у экземпляра № 4 резко отлична.

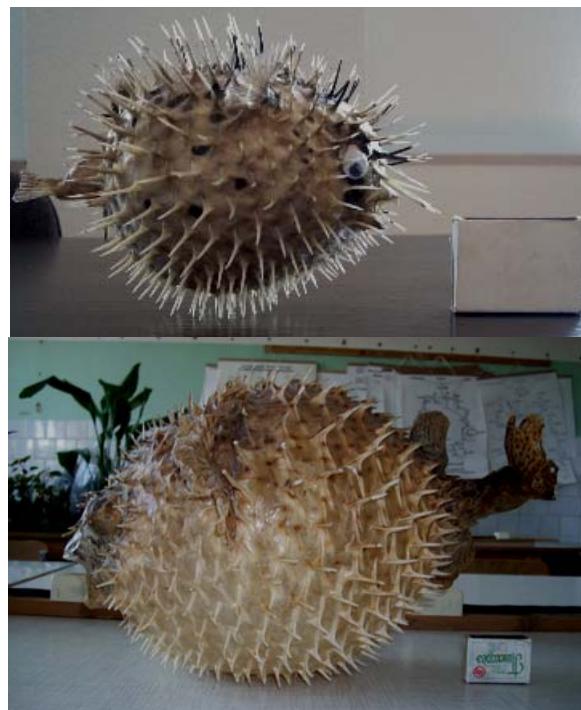


Рис. 4. Общий вид изученных *Diodon holocanthus*. Для масштаба рядом помещен спичечный коробок.

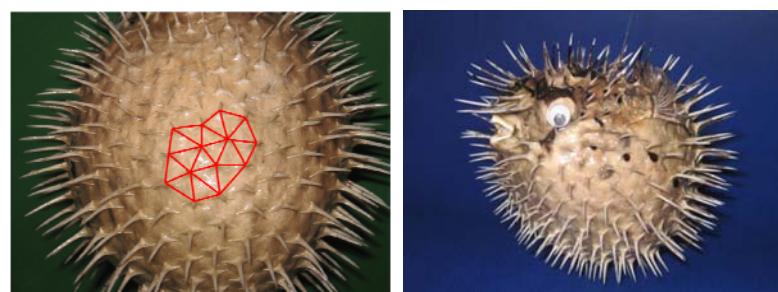


Рис. 5. Триангуляция по Делоне *Diodon holocanthus*, фрагмент брюшной поверхности.

Таблица

Числа n-угольников в разбиениях по Дирихле поверхностей

*Diodon holocanthus*

n	4	5	6	7	6 : 5 *
Экз. № 1	1	48	69	0	1.437
Экз. № 2	0	58	76	1	1.310
Экз. № 3	1	65	84	2	1.292
Экз. № 4	1	127	45	1	0.354

\* Отношение чисел 6- и 5-угольников.

### Заключение

Несмотря на то, что результаты получены на ограниченном материале, они позволяют сделать выводы, отчасти отвечающие на поставленные в начале статьи вопросы, и предположения, побуждающие к продолжению исследований.

Теория (R, r)-систем Делоне замечательно приспособлена к изучению морфологии рыб отряда Tetraodontiformes и предоставляет для этого развитой понятийный аппарат.

Эквивалентность (R, r)-систем Делоне для трех экземпляров Diodontidae и неэквивалентность четвертой (R, r)-системы могут указывать на их внутривидовое сходство и межвидовое отличие. Возможны и другие объяснения. Предложенный подход позволяет дать представителям Tetraodontiformes новые биометрические характеристики. Их информативность требует дальнейшего исследования.

Комбинаторное сходство разбиений Дирихле, построенных для представителей Diodontidae, и данных непосредственно в покрытиях костными пластинами у представителей Ostraciontidae, подчеркивает таксономическую близость этих семейств. Подобно тому, как дуальные разбиения по Делоне и Дирихле указывают на общую исходную (R, r)-систему, морфологический дуализм Ostraciontidae и Diodontidae указывает на общую эволюционную причину.

Уже видно, что дуализм в строении живых организмов проявлен в двух формах: строго геометрической (скелеты радиолярий *Circogonia icosahedra* и *Circogonia dodecahedra* дуальны как полиэдры) и статистической (совпадают частотные распределения различных полигонов, данных непосредственно в костных покровах Ostraciontidae и выявленных геометрическими построениями у Diodontidae). По-видимому, ни одна из них ранее в биоморфологии не обсуждалась. Между тем, обе могут служить дополнительным аргументом в пользу таксономической близости организмов.

Наконец, нельзя не видеть, что в минеральной и биологической природе действуют и проявляются сходным образом в дизайне структур

общие принципы целесообразности, скорее всего, не сводящиеся лишь к экономии вещества и энергии, но имеющие информационное содержание.

Авторы благодарят кафедру биологии Кольского филиала Петрозаводского госуниверситета, предоставившую для исследований экземпляр № 4 *Diodon holocanthus*.

#### **Список литературы**

1. Войтеховский Ю.Л., 2001. О морфологическом разнообразии колоний *Pandorina morum* (Müll.) Bory (Volvocaceae) // Журн. общ. биологии. Т. 62. № 5. С. 425-429.
2. Войтеховский Ю.Л., 2002. Фуллерены: краткий анализ состояния проблемы // Зап. Рос. минерал. о-ва. № 5. С. 1-11.
3. Войтеховский Ю.Л., 2003. Фуллерены как пример биоминеральной гомологии // ДАН. Т. 393. № 5. С. 664-668.
4. Войтеховский Ю.Л., Тимофеева М.Г., Степенщиков Д.Г., 2006. Принцип Кюри и морфологическое разнообразие колоний *Pandorina morum* (Müll.) Bory (Volvocaceae) // Журн. общ. биологии. Т. 67. № 3. С. 206-211.
5. Галиулин Р.В., 1984. Кристаллографическая геометрия. М.: Наука. 136 с.
6. Геккель Э., 1902. Красота форм в природе. СПб.: Просвещение. 90 с.
7. Делоне Б.Н., 1937. Геометрия положительных квадратичных форм // Успехи мат. наук. Вып. 3. С. 16-62.
8. Делоне Б.Н., 1938. Геометрия положительных квадратичных форм // Успехи мат. наук. Вып. 4. С. 102-164.
9. Делоне Б.Н., Долбилин Н.П., Штогрин М.И., Галиулин Р.В., 1976. Локальный критерий определения правильности системы точек // ДАН. Т. 227. С. 19-21.
10. Мордухай-Болтовской Д.Д., 1936. Геометрия радиолярий // Уч. зап. Ростов-н/Д. гос. ун-та. № 8. С. 3-91.
11. Carpenter K.E., Krupp F., Jones D.A., Zajonz U., 1997. FAO species identification field guide for fishery purposes. Living marine resources of Kuwait, eastern Saudi Arabia, Bahrain, Qatar, and the United Arab Emirates. Rome: FAO. 293 p.

#### **ФРАКТАЛЬНОСТЬ КРОН *Betula pubescens Ehrh***

Войтеховский Ю.Л.<sup>1</sup>, Моргунова О.В.<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Геологический институт Кольского НЦ РАН  
<sup>2</sup>Кольский филиал Петрозаводского госуниверситета  
Апатиты, <woyt@geoksc.apatity.ru>

На примере березы пушистой (*Betula pubescens Ehrh.*) исследован вопрос о том, фрактальны ли кроны деревьев. Для семи крон изучена зависимость числа ветвей с длиной L от L, а также числа ветвей с длиной более L от L. Разбиение выборки на классы выполнено по Стрэйджерсу. Первая зависимость имеет показательный характер с основанием степени в узком диапазоне 0.966 ÷ 0.970. При исключении из расчетов двух крайних

классов ( $L < 25$  см и  $L > 250$  см) вторая зависимость имеет фрактальный характер с размерностью  $2.144 \div 2.370$ . Исключение крайних размерных классов оправдано тем, что всякий фрактал узнаваем именно в среднем масштабном диапазоне, когда элемент структуры уже не виден, а вся она еще не охватывается полем зрения. Таким образом, кроны березы пушистой представляют собой рыхлый – с размерностью, далекой от размерности 3 пространства вложения – стохастический фрактал.

## Введение

Биометрия – относительно самостоятельная дисциплина, использующая весь арсенал математических методов для описания биологических объектов от индивида до систем (популяций, биоценозов) различной степени сложности. Исторически сложилось так, что наибольшее употребление в биологии получили методы математической статистики, составившие дисциплину, называемую количественной биологией (биологической статистикой). Это можно считать закономерным, поскольку именно математическая статистика способна выявить закономерности в массовых, на первый взгляд неупорядоченных биологических системах. Арсенал статистических методов огромен и уже поставлен на службу биологии (Рокицкий, 1964; Грейг-Смит, 1967; Лакин, 1973; Ивантер, Коросов, 2003, 2005).

Но развитие математики стремительно продолжается. Новые теории активно используются в науках о природе. На повестке дня – переход от привычной евклидовой геометрии к геометрии фрактальной, имеющей дело с рыхлыми, пористыми, прихотливо и случайным образом изрезанными объектами, самоподобными на разных масштабных уровнях восприятия. В зачаточном, математически не оформленном виде эту идею можно найти еще у И.-В. Гёте. “Чем менее совершенно существо, тем более части его сходны между собой и тем более они подобны целому. Чем совершеннее становится существо, тем менее похожими становятся его части. В первом случае целое более или менее подобно частям, во втором целое не похоже на части. Чем более части похожи друг на друга, тем меньше подчинены они друг другу. Субординация частей является признаком более совершенного существа” (цит. по: Тахтаджян, 1954, с. 15). Математическая теория разработана Б. Мандельбротом (2002). По визуальному сходству с идеальными математическими моделями часто считают, что природными фракталами можно считать едва ли не все биологические объекты подобного рода (Исаева, 2005). Но детальных расчетов, доказывающих это, мало. Данная работа посвящена тому, чтобы на примере пушистой берескобы *Betula pubescens Ehrh.* (рис. 1) установить, фрактальны ли ее кроны. По-видимому, это первое специальное исследование вопроса.

## Материалы и методы

Формы крон настолько характерны для деревьев, что мы издалека и безошибочно узнаем тот или иной вид. Между тем, традиционные способы их описания довольно примитивны. Так, П. Грейг-Смит (1967, с. 220) и А.М. Данченко (1990) рекомендуют измерять высоту, обхват и диаметр



Рис. 1. *Betula pubescens* Ehrh.

мерности применяются различные подходы, наиболее распространен “*box-counting method*”. Поясним его на простом примере. Рассмотрим квадрат со стороной 1. Разобьем ее на  $n$  отрезков длиной  $L = 1/n$ . Очевидно, исходный квадрат покрывается  $N(L) = n^2 = (1/L)^2 = L^{-2}$  малыми квадратиками. Повторив рассуждение с кубом, имеющим единичное ребро, получим, что он покрывается  $N(L) = L^{-3}$  малыми кубиками. Появляющиеся в показателе степени числа 2 и 3 указывают на топологические размерности квадрата и куба, соответственно. Но оказывается, что подход применим и к другим объектам, прихотливо изломанным как траектория броуновской частицы, изогнутым как капустный лист, пористым как губка или рыхлым как крона дерева. Их размерность вычисляется из аналогичного соотношения  $N(L) \sim L^{-D}$ , где  $D$  – хаусдорфова размерность объекта. Объект называется фракталом, если его хаусдорфова размерность превышает топологическую (Божокин, Паршин, 2001; Морозов, 2002), принимающую лишь целочисленные значения 1, 2 и 3. Для модельных математических и физических фракталов величина  $D$ , как правило, бывает дробной (не превышающей топологическую размерность пространства вложения). Это и послужило

причиной названия таких объектов: *fractus* – дробный, ломаный (лат.).

Заменив в приведенном выше соотношении знак пропорциональности на коэффициент  $k$ , получим уравнение  $N(L) = k L^{-D}$ , которое легко логарифмируется:  $\lg N(L) = -D \lg L + \lg k$ . В полученной форме уравнение позволяет применить методы математической статистики для отыскания фрактальной размерности  $D$  как углового коэффициента (с противоположным знаком) прямой, наилучшим образом аппроксимирующей зависимость  $N(L)$  от  $L$  в двойном (т.е. по обеим осям координат) логарифмическом масштабе. Возможность применения методов математической статистики, в том числе отыскания наилучшей линейной регрессии, подразумевает представительность выборки (т.е. числа измеренных веток) и достаточный диапазон изменения величины  $L$  (т.е. длины веток). В последнем условии неявно заложено важное требование, предъявляемое ко всем фрактальным объектам – их фрактальность угадывается в самоподобии, повторяемости структурного мотива на нескольких иерархических уровнях, когда мельчайший элемент структуры еще не различим, а структура в целом уже выходит за поле зрения. Предварительный осмотр крон березы пушистой показал, что в них имеет место 5 - 6 стадий ветвления, а длины ветвей изменяются от 1 до 280 см. Это и послужило основанием для гипотезы о том, что необходимые условия для выявления фрактальности, если таковая имеется, в данном случае выполнены.

Местом для измерений крон была выбрана просека, вырубленная для строительства ЛЭП на окраине г. Апатиты около 40 лет назад. Этим и определяется возраст берез – пионеров заселения пожарищ и вырубок. В начале лета 2007 г. деревья были вырублены при строительных работах. Авторами отобраны семь берез с неповрежденными кронами. Методика измерений проста: ветви измерялись и срезались последовательно, от коротких к длинным. Измерения выполнялись мерной лентой для лучшего учета изгибов веток. В замерах участвовали два исследователя: один измерял и срезал ветви, другой записывал значения в таблицу. Измерение каждой кроны заняло около 5 часов.

### **Результаты и обсуждение**

Для всех семи берез число ветвей оказалось близким:  $N = 1240 \div 1253$ . По формуле Стрэйджерса, число классов при группировке равно:  $n = 1 + 3.32 \lg N = 11.27 \div 11.28 \approx 11$ . Поскольку максимальная зафиксированная длина ветви равнялась 280 см, размах класса равен:  $280/11 = 25.45 \approx 25$  см. Распределения ветвей по классам длины для березы № 1 дано в табл. 1 и рис. 2, из которых видно резкое преобладание коротких ветвей.

Таблица 1.  
Распределение ветвей по классам длины

L, см	N (L)	$\lg N (L)$
0 – 25	826	2.90
25 – 50	307	2.49
50 – 75	66	1.80
75 – 100	25	1.39
100 – 125	8	0.90
125 – 150	8	0.90
150 – 175	3	0.47
175 – 200	1	0
200 – 225	1	0
225 – 250	0	-
250 – 275	1	0

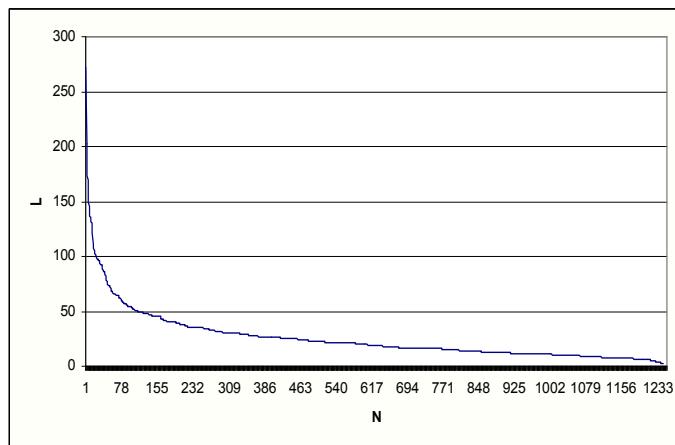


Рис. 2. Соотношение длины ветвей L и их числа N.

Чтобы визуально уменьшить этот эффект, шкала по оси ординат была взята в логарифмическом масштабе (табл. 1, рис. 3). Неожиданно обнаружилось, что для пяти из семи крон небольшое число (1÷2) самых длинных нижних ветвей не вкладывается в хорошо выраженную линейную зависимость  $\lg N(L)$  от L. Более того, они отделены от основной совокупности пустым размерным классом. Это наблюдение не обсуждено в специальной литературе и причина явления не ясна. Но эти ветви исключены из дальнейших расчетов.

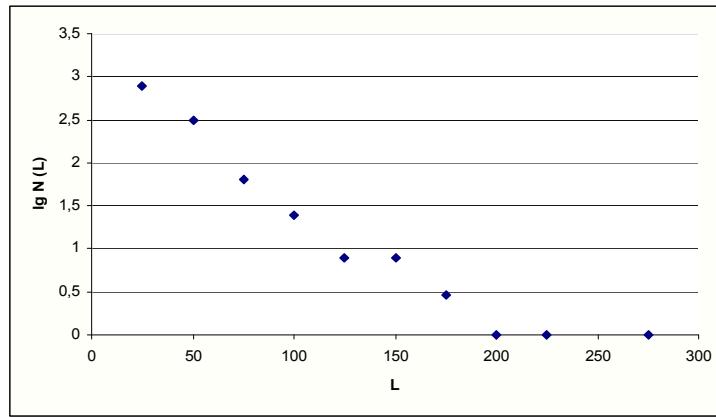


Рис. 3. Зависимость  $\lg N(L)$  от  $L$ .

Линейная зависимость  $\lg N(L)$  от  $L$  для оставшейся однородной выборки показана на рис. 4. Уравнение регрессии имеет вид  $\lg N(L) = -0.0148 L + 3.0572$  и достоверно на уровне значимости  $\alpha = 0.05$  с высоким коэффициентом детерминации:  $R^2 = 0.9632$ . От полученного уравнения линейной регрес-

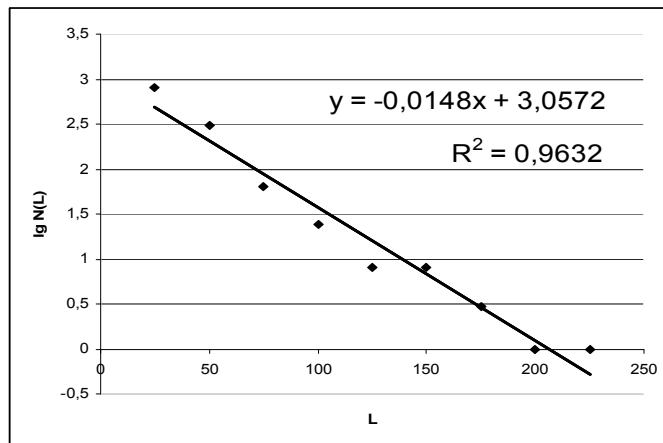


Рис. 4. Линейная зависимость  $\lg N(L)$  от  $L$ .

ции легко перейти к показательной зависимости  $N(L)$  от  $L$ . Для бересы № 1 она имеет вид:  $N(L) = 1122.018 \times 0.966^L$ . В полученных для семи крон уравнениях линейной регрессии угловой коэффициент заключен в узком

диапазоне от -0.0114 до -0.0156. Соответственно, в показательных зависимостях  $N(L)$  от  $L$  основание степени также изменяется в узком диапазоне  $0.966 \div 0.970$ . Обнаружение зависимости  $N(L)$  от  $L$  показательного типа интересно само по себе. Но она не является фрактальной.

Исследуем в двойном логарифмическом масштабе зависимость  $N^*(L)$  от  $L$ , где  $N^*(L)$  – число веток, длина которых превышает  $L$ . Для бересы № 1 график показан на рис. 5. Обнаруживается, что ветви длиной до 25 см, с одной стороны, и более 25 см, с другой, образуют на графике два прямолинейных участка, которые уверенно аппроксимируются линейными регрессиями  $\lg N^*(L) = 3.123 - 0.067 \lg L$  и  $\lg N^*(L) = 5.911 - 2.291 \lg L$ , из которых легко получаем фрактальные зависимости  $N^*(L) = 1327.39 \times L^{-0.067}$  и  $N^*(L) = 814704.28 \times L^{-2.291}$ . На первый взгляд, ветви длиной меньше 25 см образуют в кроне бересы № 1 фрактал с размерностью  $D = 0.067$ , а ветви длиной более 25 см – фрактал с размерностью  $D = 2.291$ . Но выше

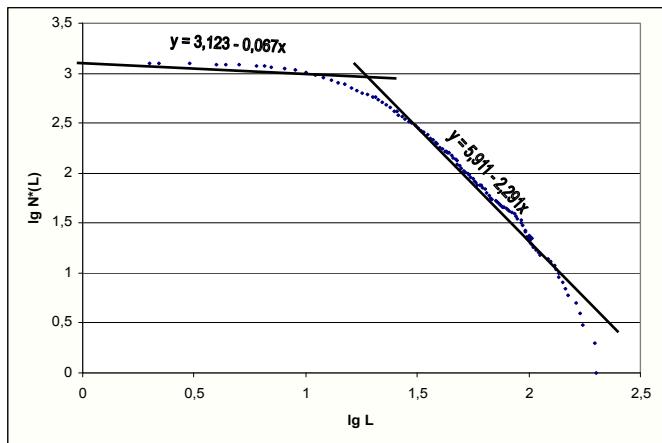


Рис. 5. Зависимость  $\lg N^*(L)$  от  $\lg L$ .

отмечено, что фрактал проявляет свое главное свойство самоподобия в среднем диапазоне масштабов, когда элементы структуры уже не различимы, а сама она еще не охватывается полем зрения. Это означает, что в нашем исследовании по крайней мере крайние размерные классы следует исключить из рассмотрения. Таким образом, фрактал с размерностью  $D = 0.067$  следует считать математическим артефактом. Подлинный фрактал имеет размерность  $D = 2.291$  и образован ветвями длиной более 25 см. Размерность семи изученных крон заключена в диапазоне  $D = 2.144 \div 2.370$ . Размерность фрактала не может превышать топологическую размерность пространства вложения, т.е. 3 в нашем случае. Таким образом, ветви пушистой бересы образуют довольно рыхлые стохастические фракталы, весьма разреженно заполняющие пространства крон.

## **Заключение**

Результаты выполненного исследования семи крон пушистой березы достаточно определены. Они представляют собой довольно рыхлые стохастические фракталы с размерностью  $2.144 \div 2.370$ , если пренебречь в расчетах крайними – до 25 см и более 250 см – размерными классами. Их исключение может показаться искусственным, но оправдывается следующим аргументом. Фрактальность структуры, в основе которой лежит свойство самоподобия, проявляется именно в средней части масштабного диапазона. Наибольший размерный класс выпадает из рассмотрения и по другому признаку – в пяти из семи случаев он отделен от основной совокупности пустым классом. Тем самым выясняется любопытное обстоятельство – несколько (в изученных случаях 1  $\div$  2) самых нижних и длинных ветвей пушистой березы не вписываются в единый фрактальный стиль кроны. Биологическая причина этого не ясна. Полученные результаты побуждают сделать следующий шаг – рас считать фрактальные размерности крон и для других видов деревьев, а также использовать их как биометрические характеристики в экологических исследованиях.

## **Список литературы**

1. Божокин С.В., Паршин Д.А., 2001. Фракталы и мультифракталы. Ижевск: НИЦ «Регулярная и хаотическая динамика». 128 с.
2. Грейг-Смит П., 1967. Количественная экология растений. М.: Мир. 360 с.
3. Данченко А.М., 1990. Популяционная изменчивость березы. Н.: Наука. 202 с.
4. Ивантер Э.В., Коросов А.В., 2003. Введение в количественную биологию: Учебное пособие. Петрозаводск: Изд-во ПетрГУ. 304 с.
5. Ивантер Э.В., Коросов А.В., 2005. Элементарная биометрия: Учебное пособие. Петрозаводск: Изд-во ПетрГУ. 104 с.
6. Исаева В.В., 2005. Синергетика для биологов: Учебное пособие. М.: Наука. 158 с.
7. Лакин Г.Ф., 1973. Биометрия. М.: Высшая школа. 343 с.
8. Мандельброт Б., 2002. Фрактальная геометрия природы. М.: Институт компьютерных исследований. 565 с.
9. Морозов А.Д., 2002. Введение в теорию фракталов. Москва-Ижевск: Институт компьютерных исследований. 160 с.
10. Рокицкий П.Ф., 1964. Биологическая статистика. Мин.: Вышэйшая школа. 328 с.
11. Тахтаджян А.Л., 1954. Вопросы эволюционной морфологии растений. Л.: Изд-во ЛГУ. 215 с.

## **ИСПОЛЬЗОВАНИЕ МНОГОМЕРНЫХ СТАТИСТИЧЕСКИХ МЕТОДОВ В ЭКОЛОГИЧЕСКИХ ИССЛЕДОВАНИЯХ**

**Денисов Д.Б.**

**Институт проблем промышленной экологии Севера КНЦ РАН  
Апатиты, <denisow@inep.ksc.ru>**

В настоящее время очевидно, что при проведении различных экологических исследований существенную роль играют статистические методы, которые дают возможность компактно и информативно описывать полученные результаты, устанавливать степень достоверности сходства и различия исследуемых компонентов экосистем на основании результатов измерений их показателей, анализировать наличие или отсутствие зависимости между различными показателями, количественно описывать эти зависимости, выявлять информативные показатели (Новиков, Новочадов, 2005). При этом объектом исследований часто выступает компонент экосистемы, развивающийся в среде биотических и абиотических факторов, из которых необходимо выделить наиболее информативные и определяющие. С другой стороны, возникает необходимость структурировать и наглядно классифицировать полученные данные для последующего анализа. Решение подобных задач возможно посредством многомерных статистических методов.

### **Кластерный анализ**

В современных экологических исследованиях большое значение имеет информация о развитии экосистем в историческом прошлом, что позволяет делать выводы об их современном состоянии, оценивать степень произошедших антропогенных преобразований, составлять прогнозы дальнейшего развития. Наиболее распространенными методами для получения такой информации являются палеоэкологические реконструкции развития экосистем на основе послойного исследования донных отложений озер. Каждый слой донных отложений накапливался в определенный период, поэтому видовой состав и структура диатомовых комплексов отражает условия, существующие в водоеме в это время. Для классификации палеоэкологической информации и успешно применяется кластерный анализ, позволяющий установить схожие периоды в развитии водоема и оценить степень их различия. На примере водоемов Хибинского горного массива и прилегающих территорий (Кольский полуостров) была восстановлена хронология основных этапов их исторического развития с помощью диатомового анализа (Денисов, 2007). На основе послойной динамики относительной численности таксонов диатомей (которая была использована в качестве меры сходства) посредством кластерного анализа для четырех водных объектов были выделены зоны, объединяющие слои

отложений, сходных по составу и соотношениям численности выбранных таксонов диатомей, представленные в виде иерархического дерева (рис. 1).

На рисунках 2 и 3 представлено распределение по слоям отложений

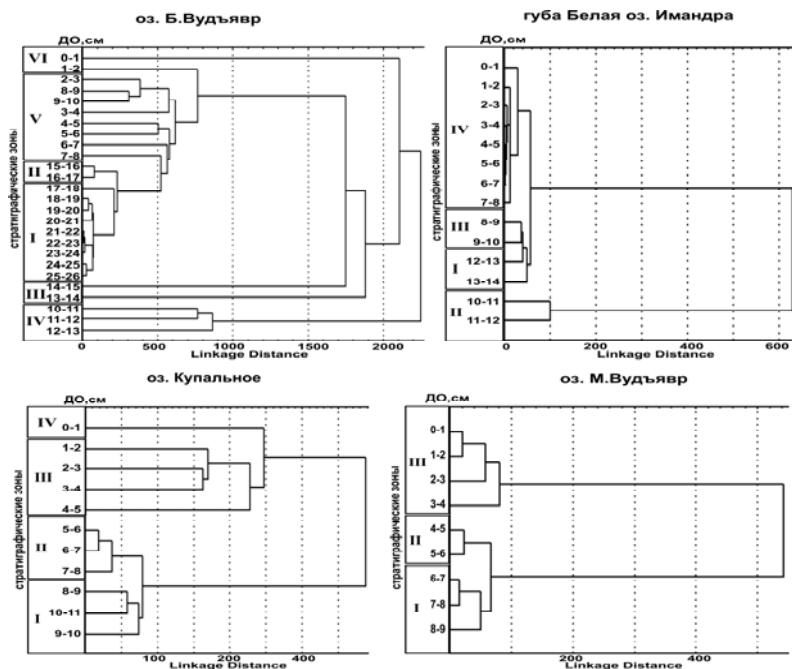


Рис. 1. Стратиграфические зоны колонок донных отложений, выделенные по результатам кластерного анализа на основе различия и сходства видового состава диатомовых комплексов.

относительной численности диатомей для исследованных водоемов, а также общей численности и видового разнообразия. На основе кластерного анализа удалось выделить отдельные слои, резко отличающиеся от других – они соответствуют периодам резких преобразований в экосистемах, связанных с антропогенным воздействием, что было подтверждено характером распределения химических элементов в донных отложениях.

Кроме палеоэкологических исследований, кластерный анализ успешно применим для классификации данных современного состояния экосистем. При исследованиях модельного водосборного бассейна озера Большой Вудъярв был получен огромный массив данных о видовом составе и структуре водорослевых сообществ обрастателей (фитоперифитона)

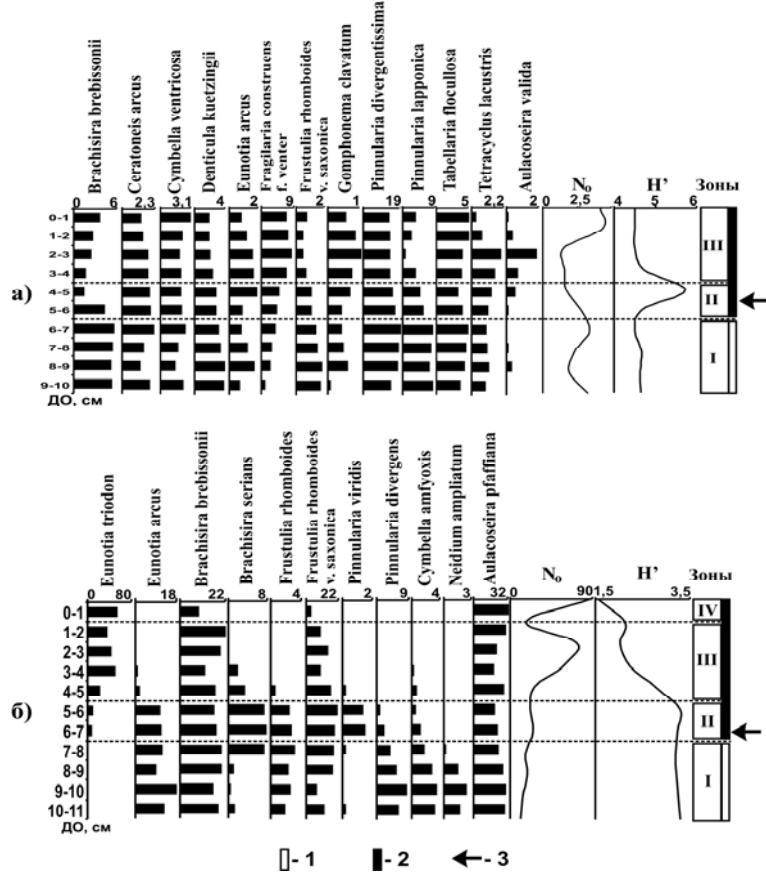


Рис. 2. Динамика относительной численности (%) некоторых таксонов диатомей, общая численность ( $N_0$ , млн.экз./г) и видовое разнообразие ( $H'$ , бит. экз<sup>-1</sup>) в различных зонах ДО оз. М. Вудъярв (а) и оз. Купальное (б). 1 – доиндустриальный период развития водоема; 2 – индустриальный период; 3 – этап преобразований экосистемы водоема.

различных водотоков и литорали водоемов (рис. 4). Фитоперифитон является универсальным широко используемым биоиндикатором качества вод, различные его показатели четко отражают условия обитания (Баринова и др., 2006). Визуализация полученной информации на карте не всегда позволяет классифицировать изученные точки отбора проб, поэтому

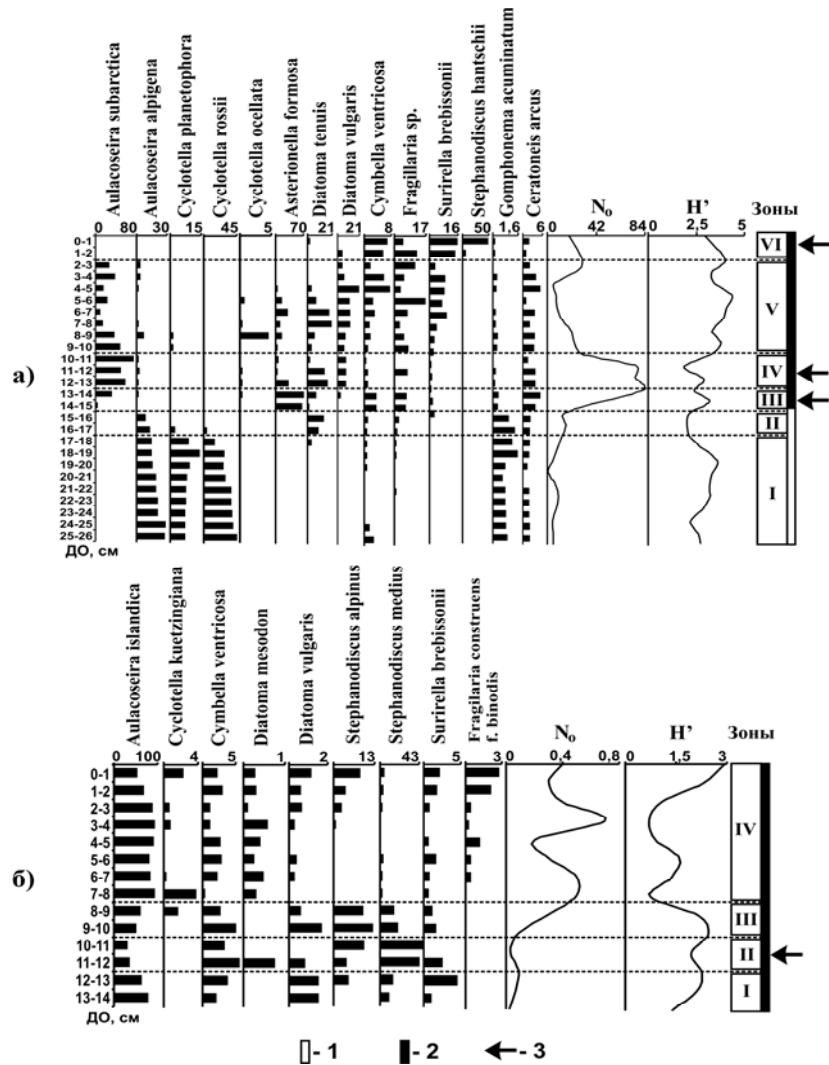


Рис. 3. Динамика относительной численности (%) некоторых таксонов диатомей, общая численность ( $N_0$ , млн.экз./г) и видовое разнообразие ( $H'$ , бит. экз<sup>-1</sup>) в различных зонах ДО оз. Б. Вудъяvr (а) и губы Белая оз. Имандра (б). 1 – доиндустриальный период развития водоема; 2 – индустриальный период; 3 – этап преобразований экосистемы водоема.

целесообразно применять кластерный анализ, для определения схожих по условиям водотоков. Ландшафтно-географические условия изученного водосборного бассейна отличаются сильной пестротой с учетом высотной поясности Хибин а также типом и интенсивностью антропогенных преобразований водотоков, включая загрязнение, нарушение русла,

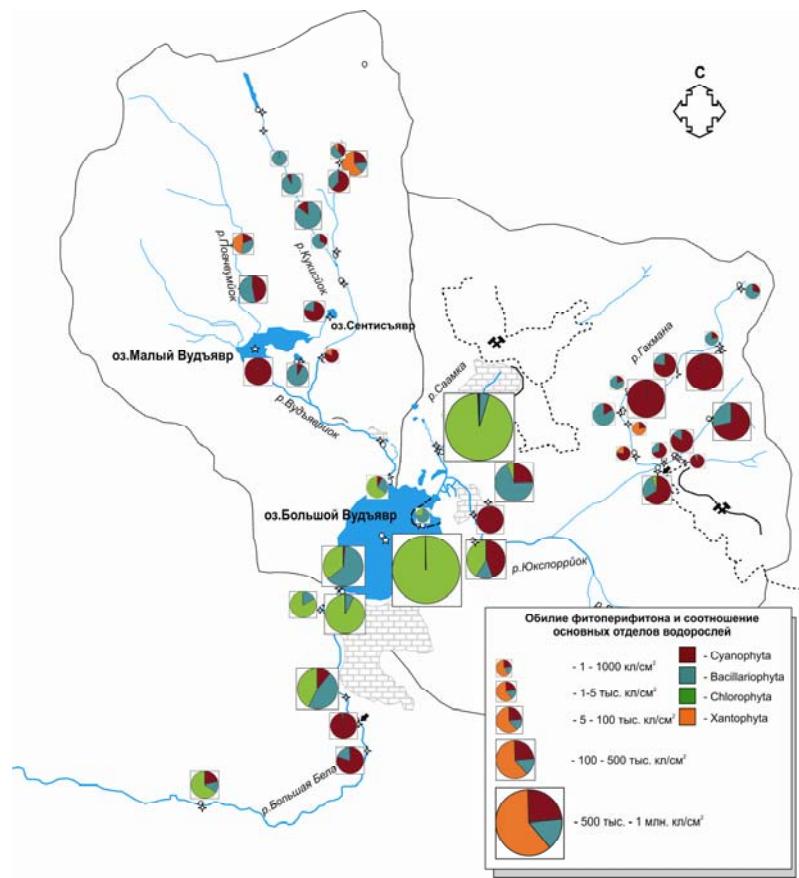


Рис. 4. Численность (клеток на см<sup>2</sup>), обилие и соотношение отделов водорослей перифитона водосборного бассейна оз. Большой Вудъяр.

строительство гидротехнических сооружений и т.д. Этим объясняется разнообразие обнаруженных водорослевых сообществ, которые отличались как для отдельных водотоков, так и для различных участков в одном и том же водотоке. Для проведения анализа в качестве меры сходства были использованы наиболее информативные показатели водорослевых

сообществ – относительная численность массовых таксонов, видовое разнообразие, общее обилие и индекс сапробности (степени органического загрязнения). Лучшие результаты с четкой структурой иерархического дерева были получены методом Варда, который минимизирует сумму квадратов для любых двух кластеров, которые могут быть сформированы на каждом шаге. Для оценки расстояний между кластерами используются методы дисперсионного анализа. В качестве меры расстояния было выбрано так называемое «манхэттенское расстояние», при котором влияние отдельных больших разностей уменьшается (рис. 5).

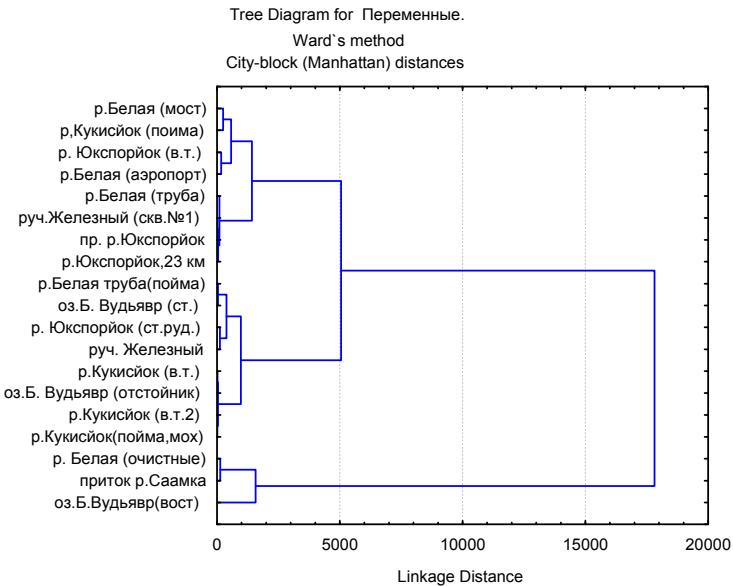


Рис. 5. Иерархическое дерево результатов кластерного анализа различных водотоков водосборного бассейна оз. Большой Вудъяvr (в.т. – верхнее течение, ст. – сток, т.2 – среднее течение).

Результаты показали сложную структуру и пестроту условий исследуемого водосбора. При кластеризации были учтены не только видовой состав и обилие, но также «сложность» структуры сообщества. Из рисунка видно, что очевидное сходство обнаруживается между р. Белой в районе моста, р. Кукисйок, верхним течением реки Юкспорйок и рекой Белой в районе аэропорта, р. Белой в районе трубы, руч. Железным (впадающим в ручей Гакмана), притоком р. Юкспорйок и р. Юкспорйок в районе 23 километра, что очевидно связано с близкими значениями

индексов сапробности и обилия в этих водных объектах, так как в пойме р. Кукисйок элементы минерального питания, поступающие в воды реки в результате процессов выветривания коренных горных пород, создают благоприятные условия для произрастания водорослевых сообществ в районе поймы, то же наблюдается в районе моста на реке Белая где после перемешивания сточных рудничных вод и чистых вод р. Вудъявройок условия оказываются схожими.

В отдельную ветвь были объединены сток озера Большой Вудъяр и пойма р. Белая, верхнее течение р. Кукисйок и отстойник шахтных вод озера Большой Вудъяр, что можно объяснить низкими значениями баллов видового обилия и других показателей, что в случае р. Кукисйок объясняется отсутствием веществ минерального питания, а в отстойнике – наличием значительного количества взвеси, затрудняющей развитие водорослевых сообществ. Сходство между структурой сообществ фитоперифитона на стоке Большой Вудъяр и пойменной части р. Белой так же закономерны, так как река Белая единственная река, которая вытекает из озера, и в условиях поймы формируются условия, близкие к озерным.

Сток очистных сооружений г. Кировска оказался схож с притоком р. Саамка, берущего начало из болот, а также восточного берега оз. Большой Вудъяр. Такое объединение произошло вследствие доминирования представителей зеленых водорослей (*Chlorophyta*) в пробах, для которых подобные условия оказались благоприятными.

Таким образом было показано, что на распределение водорослей фитоперифитона влияет не только степень и характер загрязнения, но и весь комплекс факторов, включая скорость течения, насыщенность биогенными элементами, высота над уровнем моря и т.п. Полученные таким образом результаты о структуре и таксономическом составе водорослей фитоперифитона озерно-речных систем необходима для создания и уточнения систем биондикации, расширения представлений о многообразии условий в пределах одного водного объекта в зависимости от ландшафта, особенностях локальных местообитаний, а также определяющих факторов развития в условиях обедненных биогенными элементами высокогорных водотоков как научной основы для реконструкции условий формирования качества пресных вод высокоширотных регионов в ходе локальных и глобальных изменений окружающей природной среды.

### **Факторный анализ**

Познание сезонных изменений в сообществах фитопланктона является неотъемлемой составляющей мониторинга состояния водных объектов в промышленно развитых регионах Кольского Севера (Денисов, Демин, 2008; Шаров, 2004). На развитие водорослевых сообществ фитопланктона оказывает влияние огромное множество взаимосвязанных комплексов условий, включая естественно-природные и антропогенные;

учет, выделение и оценка соотношение отдельных факторов представляется сложной задачей. На примере оз. Большой Вудъяvr, где с 2005 г. проводятся сезонные наблюдения за развитием водорослевых сообществ, с помощью факторного анализа методом главных компонент были проанализированы факторы, определяющие развитие водорослевых сообществ. В качестве меры состояния фитопланктона были выбраны концентрации хлорофиллов «а», «б» и «с», отражающие биомассу, физиологическую активность и видовой состав водорослей (табл. 1). Были учтены основные метеорологические и гидрохимические факторы.

Таблица 1.

Факторная модель гидрохимических и метеорологических показателей и содержания хлорофиллов «а», «б», «с» в оз. Б. Вудъяvr в 2006 г. (выделены значения с  $r > 0.70$ ).

	<b>Фактор 1</b>	<b>Фактор 2</b>
pH	<b>-0.75670</b>	-0.200174
Минерализация, мг/л	<b>0.88733</b>	-0.037147
Chl «а», г/м <sup>3</sup>	<b>-0.79172</b>	0.152102
Chl «б», г/м <sup>3</sup>	<b>-0.73803</b>	0.194027
Chl «с», г/м <sup>3</sup>	<b>-0.79172</b>	0.152102
Электропроводность, 20 $\square$	<b>0.95671</b>	-0.022181
NO <sub>3</sub> , мкгN/л	<b>0.92860</b>	0.135771
N общ	<b>0.70220</b>	-0.248158
PO <sub>4</sub> , мкгP/л	-0.17360	<b>0.828312</b>
P общ (фильтр.)	-0.32790	<b>0.738677</b>
P общ (нефильтр.)	0.58194	-0.203924
Перманганатная окисляемость	-0.56909	0.066443
Si, мг/л	<b>0.94774</b>	0.132147
Al общ	-0.59672	0.058503
Cu общ	0.43084	0.494464
T воды, $\square$ C	<b>-0.90742</b>	-0.145615
T воздуха, $\square$ C	<b>-0.77410</b>	-0.092334
Ветер, м/с	0.50219	-0.600033
Высота снежного покрова, см	<b>0.71752</b>	0.379669
Продолжительность дождя, ч	-0.15271	<b>-0.877284</b>
Осадки, мм	-0.27304	-0.532333
Солнечное сияние, ч	0.20852	0.575659
<b>Вес фактора, %</b>	<b>45</b>	<b>17</b>

Факторный анализ позволил выявить два основных фактора, сочетающих ряд определяющих гидрохимических и метеорологических параметров.

Первый фактор, на который приходится 45 % общей дисперсии, характеризуется тесной отрицательной связью с pH, электропроводностью, содержанием хлорофиллов «а», «б», «с», температурами воды и воздуха, и положительной связью с минерализацией, электропроводностью, содержанием общего азота, нитратов, кремния. Таким образом, фактор 1 составлен гидрохимическим параметрами в тесной связи с температурным фактором. Сезонная динамика фитопланктона определяется в основном градиентом pH, минерализацией и концентрацией Si, а также наличием доступного азота. Величина pH в свою очередь определяется, вероятно, концентрацией нитратов. Доминирование диатомового планктона подтверждает зависимость от содержания кремния.

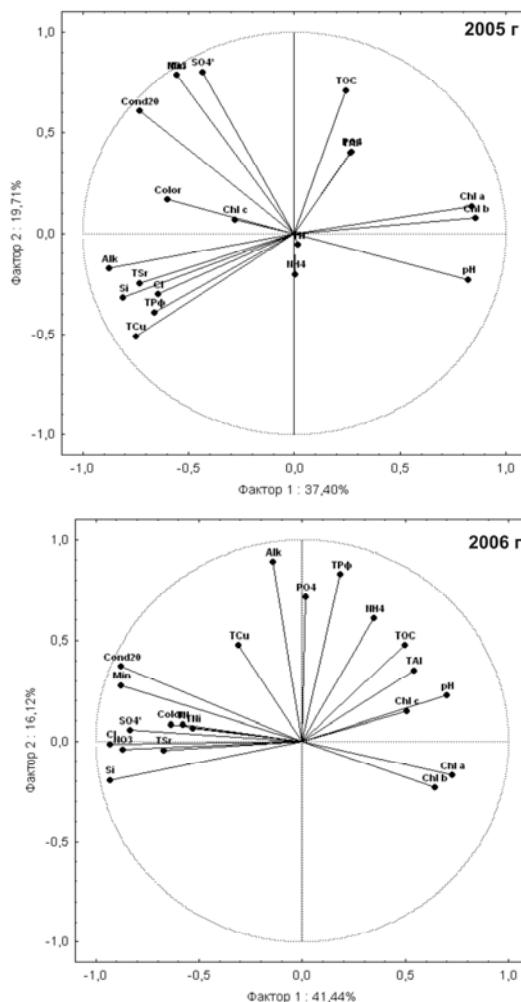
Менее значимый второй фактор, на который приходится 17 % общей дисперсии, отрицательно связан с продолжительностью дождя и положительно с содержанием общего фосфора и фосфатов. Очевидно, этот фактор характеризует процессы разбавления поступающих шахтных вод за счет продолжительных осадков, что приводит к снижению приоритетных загрязняющего вещества – фосфора. Следует отметить, что развитие фитопланктона оз. Б. Вудъяр в течение всего года происходит в условиях постоянного избытка фосфора, что подтверждается отсутствием связи второго фактора с концентрациями хлорофиллов.

Таким образом, используя этот метод удалось установить, что развитие фитопланктона оз. Б. Вудъяр происходит в условиях постоянного наличия доступных биогенных элементов как результат интенсивной фосфорной нагрузки и основными регулирующими факторами являются градиент pH, минерализации и наличие других элементов биогенного питания, в частности, кремния, а также находятся в зависимости от метеорологических факторов – температуры воды и воздуха, времени схода снега. С другой стороны, атмосферные осадки влияют на концентрацию фосфатов антропогенного происхождения в водоемах за счет разбавления дождевой водой, что сказывается на изменении гидрохимических параметров водной среды в течении сезона. В фоновых водоемах преобладающая роль принадлежит метеорологическим факторам, в частности, температуре.

### **Классификационный анализ (PCA)**

Это метод также позволяет выделить регулирующие развитие фитопланктона факторы. Полученные могут существенно дополнить результаты факторного анализа. На основе данных многолетних наблюдений за развитием фитопланктона озер Большой и Малый Вудъяры, был проведен классификационный анализ гидрохимических параметров, содержания хлорофиллов исследуемых озер и метеорологических данных в

едином поле факторных нагрузок, что позволило определить группировки сходной направленности и силы. При этом анализировались направление векторов различных параметров относительно векторов хлорофиллов «а», «б» и «с», которые также послужили мерой состояния сообществ водорослей. Было установлено, что в озерах картина расположения векторов гидрохимических характеристик и содержания хлорофиллов меняется год от года (рис. 6).



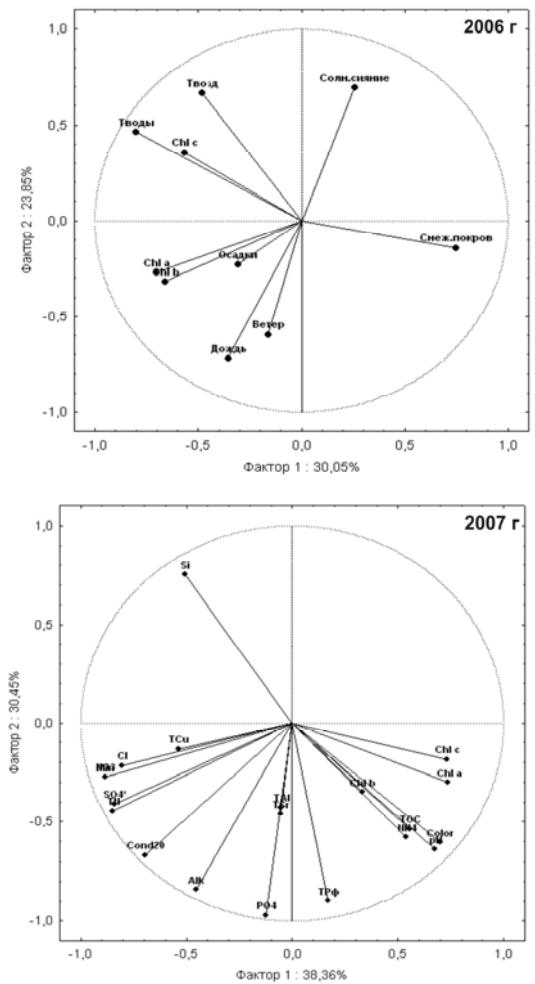


Рис. 6. Результаты РСА: взаимосвязь концентрации хлорофиллов, гидрохимических и метеорологических характеристик в пространстве двух факторов для оз. Б.Вудъявр в разные годы (TOC – содержание органического вещества, мгС/л; Color – цветность, град.; Осадки – продолжительность осадков, ч; Дождь – количество осадков, мм; TP<sub>ф</sub> – содержание общего фосфора, мг/л; TN – содержание общего азота, мг/л, Min – минерализация, мг/л; Cond20 – электропроводность, мСм/л).

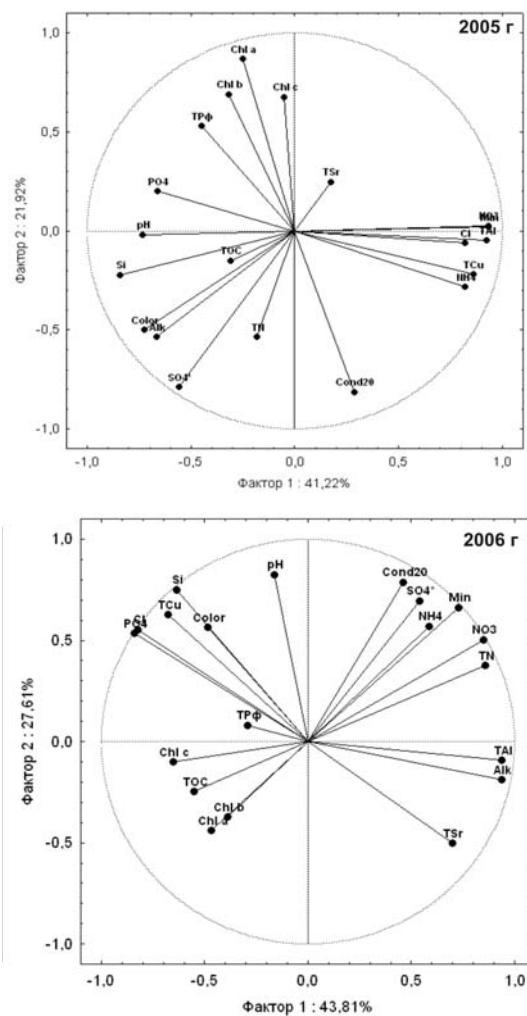


Рис. 7. Результаты РСА: взаимосвязь концентрации хлорофиллов, гидрохимических и метеорологических характеристик в пространстве двух факторов для оз. М. Вудъяvr в разные годы (TOC – содержание органического вещества, мгС/л; Color – цветность, град.;  $TP_{\phi}$  – содержание общего фосфора, мг/л; TN – содержание общего азота, мг/л; Min – минерализация, мг/л; Cond20 – электропроводность, мСм/л).

Это свидетельствует о неодинаковых гидрохимических условиях в водоемах в различные годы. Анализ показал, что концентрации хлорофиллов, преимущественно «а» и «б», в оз. Б. Вудъяр, наиболее тесно положительно зависят от pH, а отрицательно – от концентрации Si, что прослеживается во все годы, в то время как отношение к другим факторам неоднозначно.

В оз. М. Вудъяр подобной взаимосвязи с pH не прослеживается и вектора содержания хлорофиллов близки по направленности с содержанием общего фосфора (рис. 7), что говорит о зависимости водорослей от этого элемента. Была отмечена также отрицательная связь с содержанием общего азота, что говорит о его дефиците.

На примере оз. Б. Вудъяр были проанализированы метеорологические факторы, регулирующие развитие водорослей. Анализ данных за 2006 г. показал, что концентрации хлорофиллов «а» и «б» находятся в некоторой зависимости от атмосферных осадков, особенно продолжительности дождя, определенное значение также имеет сила ветра, в то время как содержание хлорофилла «с» находится в тесной зависимости от температуры. Очевидно, продолжительные дожди приводят к изменению гидрохимических условий в водоеме, а также меняют состав стока за счет разбавления, что приводит к перестройкам в водорослевых сообществах – изменению видового состава и снижению уровня биомассы, затем происходит интенсивное развитие водорослей за счет привнесенных со стоком веществ. Было установлено, что интенсивная прямая солнечная радиация оказывает угнетающее действие на развитие водорослей – в периоды наиболее интенсивного солнечного сияния наблюдались уменьшения концентрации хлорофилла «а».

Массовое развитие водорослей пришлось на дни, когда солнечное сияние составляло 1 - 4 часа. Периоды максимального прогрева воды и высоких температур воздуха также не совпадают с максимумом концентрации хлорофилла «а». Также было отмечено, что рост концентрации хлорофилла «а» в оз. Б. Вудъяр начинается тогда, когда полностью сходит снежный покров в г. Кировске. Это время практически совпадает со вскрытием водоема ото льда.

Таким образом, результаты классификационного анализа позволяют дополнить и расширить результаты факторного анализа, а также обладают высокой степенью наглядности при визуализации в виде пучков векторов в едином поле факторных нагрузок.

## **Выводы**

Рассмотренные примеры показали целесообразность применения многомерных статистических методов в экологических исследованиях, связанных с анализом объекта во взаимосвязи с множеством внешних условий, а также при необходимости классифицировать большие массивы данных для последующей успешной интерпретации.

## **Список литературы**

1. Баринова, С.С., Медведева, Л.А., Анисимова, О.В. Биоразнообразие водорослей-индикаторов окружающей среды. PiliesStudio. Тель Авив. 2006. 498 с.
2. Денисов Д.Б. Изменения гидрохимического состава и диатомовой флоры донных отложений в зоне воздействия горнорудного производства (Кольский полуостров)// Водные ресурсы. 2007. Т. 34. № 6. С. 719-730.
3. Денисов Д.Б., Демин В.И. Сезонная динамика фитопланктона горных субарктических водоемов в условиях воздействия апатитового производства // «Биоразнообразие: проблемы и перспективы сохранения»: материалы международной научной конференции, посвященной 135-летию со дня рождения И.И. Спрыгина (13-16 мая 2008 г.) Часть I. ПГПУ им. Белинского. Пенза. 2008. С. 362-365.
4. Новиков Д.А., Новочадов В.В. Статистические методы в медико-биологическом эксперименте (типовые случаи). Волгоград: Изд-во ВолГМУ. 2005. 84 с.
5. Харман Г. Современный факторный анализ. М.: Статистика. 1972. 477 с.
6. Холлендер М., Вулф Д.А. Непараметрические методы статистики. М.: Финансы и статистика. 1983. 518 с.
7. Шаров А.Н. Фитопланктон водоемов Кольского полуострова. Петрозаводск: Карельский НЦ РАН. 2004. 113 с.

## **ТЕРМИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ КОСТНОЙ ТКАНИ ЧЕЛОВЕКА – «НОРМАЛЬНОЙ» И ИЗМЕНЕННОЙ ПРИ КОКСАРТРОЗЕ**

**Лемешева С.А.<sup>1</sup>, Голованова О.А.<sup>1</sup>, Вотяков С.Л.<sup>2</sup>**

**<sup>1</sup>Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского**

**<s\_lemesheva@mail.ru>, <golovanova2000@mail.ru>,**

**<sup>2</sup>Институт геологии и геохимии им. академика А.Н. Заварицкого УрО РАН**

**<votyakov@igg.uran.ru>**

Сегодня актуальным минералогическим направлением является исследование биоминералов в организме человека. Важнейшим органно-минеральным образованием выступает костная ткань. Изучение ее состава и структуры позволяет оценить механизм заболеваний, в том числе, коксартроза. В ходе данной патологии происходит поражение гиалинового хряща и костной ткани головки бедренной кости, что приводит к потере выполняемых суставом функций и замене его имплантатом [6].

Данное заболевание имеют большое социально-экономическое значение (2005 - 2007 гг. проведено 358 подобных операций, причем большой процент больных приходился на трудоспособную группу населения в возрасте 30 - 49 лет) [5]. Тем не менее, в литературе практически не освещены вопросы патогенной минерализации при коксартрозе на микроструктурном уровне, хотя они являются ключевыми в установлении его генезиса. В

работах нами было проведено изучение пораженной костной ткани с помощью рентгенофазового анализа и ИК-спектроскопии [3, 4]. Настоящее исследование является продолжением и посвящено изучению костных образцов с использованием термического анализа, позволяющего установить не только количественный состав минеральной и органической компоненты кости.

**Цель работы:** отработка экспериментальных методик термоанализа костных тканей человека и сравнительный анализ термических характеристик костных тканей в «норме» и при коксартрозе.

**Объекты и методы исследования.** Проанализировано 54 образца (резца) двух «нормальных» и шестнадцати пораженных коксартрозом головок бедренных костей жителей Омского области мужского и женского пола четырех возрастных групп: 30 - 49, 50 - 59, 60 - 69, 70 - 79 лет. Для исследования брались высушенные при 100 °C средние (интегрированные) порошкообразные пробы массой 25 - 30 мг с близкой дисперсностью частиц трех горизонтальных срезов бедренных головок: верхний–средний–нижний (порядок чередования приведен в направлении гиалиновый хрящ – бедренная кость). Динамика заболевания оценивалась путем сравнительной характеристики состава разных патогенных срезов между собой и с контрольными образцами («нормальная» костная ткань).

Экспериментальные исследования проводились на дериватографе фирмы Perkin Elmer SII Diamond - TG-DTA с программным обеспечением PYRIS 7.0; исследуемый температурный интервал составлял 25 - 1000 °C; скорость нагревания – 5 - 20 °C/мин; использовались пробы массой 25 - 30 мг; чувствительность измерения веса составляла 0.2 мкг (погрешность при определении убыли веса ~ 0.1 %); чувствительность измерения термоэффектов (положения пика на ДТА) 0.06 мкВ. По полученным термогравиметрической (ТГ), дифференциальной-термической (ДТГ) кривым определялись массовые изменения костной ткани при нагревании; дифференциальной-гравиметрическая кривая (ДТА) служила для характеристики наблюдаемых термических эффектов. Все результаты представлены в цифровой форме и статистически обработаны с помощью программного обеспечения Statistic Soft 2006. Организована база экспериментальных термических данных в зависимости от возраста, пола больного, сопутствующих заболеваний и других медико-экологических факторов.

**Результаты и обсуждение.** На всех дериватограммах исследованных костных тканей – патогенных и контрольных отмечаются массовые потери в четырех (далее I - IV) основных температурных диапазонах: 25 - 270 (I), 270 - 430 (II), 430 - 600 (III), 700 - 900 °C (IV) (рис. 1а, б, в), которые соответствуют термопреобразованию разных по своей природе костных составляющих [1, 2, 8]:

- (I) - потере костной тканью адсорбционной воды;
- (II) - испарению структурной воды и удаление низкомолекулярных

органических веществ, представленных неколлагеновыми белками с малой молекулярной массой (альбумин и др.);

(III) - преобразованию высокомолекулярных органических соединений, основным из которых является коллаген – белок, составляющий органический каркас кости и определяющий ее структурные и механические свойства;

(IV) - переходу нестехиометричного карбонатгидроксилапатита, образующего кристаллическую часть кости в стехиометричный за счет удаления летучих компонентов, преимущественно углекислого газа.

Установлено, что максимальные потери массы костной ткани наблюдаются при разложении ее органической фазы в температурном диапазоне 270 - 600 °C, при этом наибольший энергетический эффект наблюдается при потере высокомолекулярных органических веществ (см. рис. 1в).

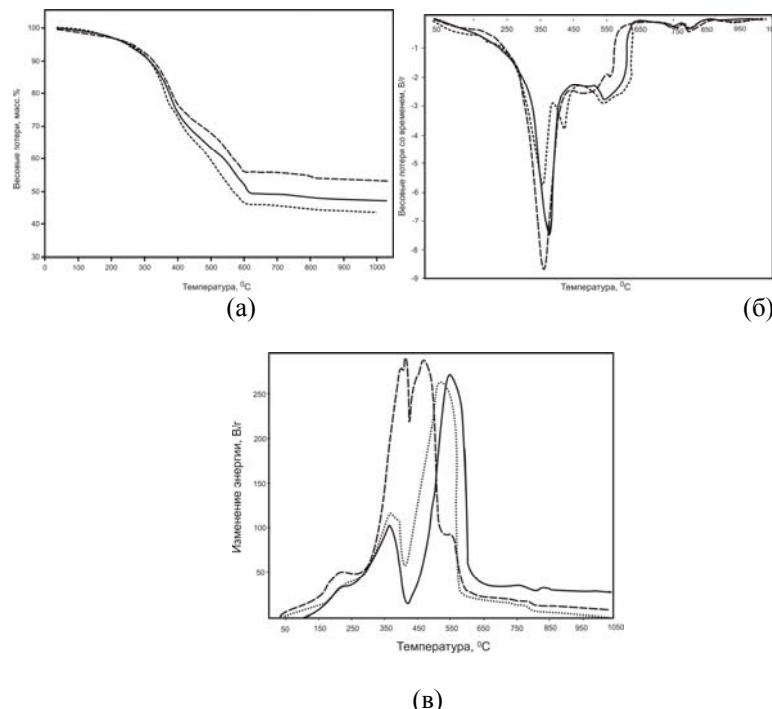


Рис. 1. Термические кривые верхних срезов «нормальной» (-), патогенной мужской (- -) и женской (---) костной ткани: ТГ (а); ДТГ (б); ДТА (в).

Анализ термических кривых массовых потерь «нормальной» костной ткани двух возрастных групп (рис. 2а, б) указывает на равные потери, одинаковое распределение веществ во всех трех срезах головки бедренной

кости, причем, наименьшая потеря органических характерна для образцов возрастной группы 50 - 59 лет, что, видимо, указывает на меньшее их содержание в ткани пациентов 30 - 49 лет и согласуется с литературными данными об увеличении минеральной и уменьшении органической составляющих с возрастом [7].

Математическая обработка рассматриваемых термических характеристик патогенной костной ткани (табл.) и детальное изучение полученных термических кривых (рис. 1а, б, в) показало, что величина массовых потерь веществ и энергетические эффекты определяются степенью поражения ткани.

Таблица  
Термические характеристики костной ткани человека  
в «норме» и при коксартрозе

Пациент, пробы			Весовые потери в разных температурных диапазонах, масс. % (n=4; P=0.95)					
	Возраст, лет	Костная ткань	Срез	Пол	I	II+III	IV	I+II+III+IV
<b>30 - 49</b>	Патогенная	Верх	M	6.83±0.01	42.27±0.45	2.06±0.39	50.17±2.76	
			Ж	7.25±0.01	35.81±1.51	2.56±0.09	45.42±1.41	
		Середина	M	7.43±0.001	35.33±0.001	2.52±0.001	45.28±0.01	
			Ж	6.90±0.26	38.26±1.10	2.27±0.01	46.67±0.03	
		Низ	M	7.12±0.26	37.95±3.33	1.91±0.19	47.35±2.82	
			Ж	6.96±0.06	41.32±3.04	2.10±0.08	50.40±2.89	
	«Нормальная»	M	4.52±0.36	47.38±3.40	2.33±0.23	40.53±3.68		
	Патогенная	Верх	M	6.83±0.01	44.83±3.85	2.86±0.09	50.33±0.39	
			Ж	7.25±0.01	39.56±0.31	2.68±0.07	44.10±3.06	
		Середина	M	7.43±0.001	37.05±0.64	2.63±0.11	46.15±0.76	
			Ж	6.90±0.26	34.85±0.01	2.59±0.001	43.46±0.01	
		Низ	M	7.12±0.26	40.17±5.67	2.31±0.30	45.55±1.36	
			Ж	6.96±0.06	40.21±0.10	2.45±0.04	48.24±0.29	
	«Нормальная»	M	43.7±0.01	4.52±0.36	41.99±1.67	2.30±0.05		

Так, в костной ткани мужчин второй и первой возрастных групп по мере развития заболевания наблюдается их достоверное увеличение, в ткани женщин отмечается обратная закономерность, что вероятно связано с физиологическими особенностями мужского и женского организма. Между составом пораженного нижнего среза мужского образца и контрольной костной ткани нет значимых отличий. Это указывает на направление развития заболевания от верхнего среза к нижнему. В связи с этим оценка глубины поражения женского образца осуществлялась путем сравнения весовых потерь в верхнем и среднем срезах с составом нижней пробы.

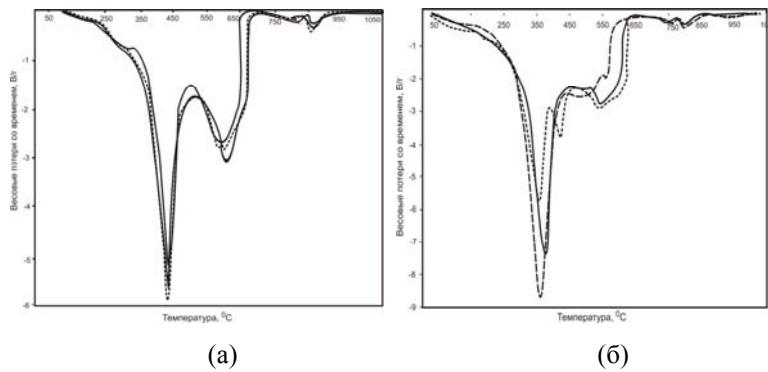


Рис. 2. Термические кривые «нормальной» костной ткани человека (верхний (· · ·), средний (- -), нижний (-) срезы): 30-49 лет (а); 50-59 лет (б).

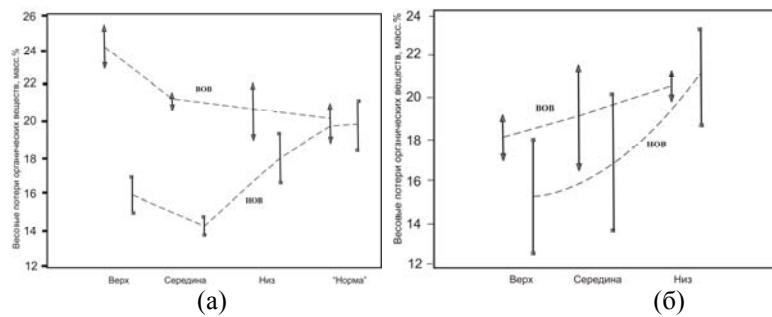


Рис. 3. Содержание низкомолекулярных (НОВ) и высокомолекулярных (ВОВ) органических веществ в костных срезах: мужчин (а) и женщин (б).

Повышение потерь при патологии в мужских костных образцах происходит за счет разложения органической компоненты, а именно, низкомолекулярных веществ (рис. 3а), потери летучих компонентов и адсорбционной воды.

В пораженной ткани женщин занижено содержание органических

компонентов, разложение которых происходит при низких температурах (рис. 3б), по остальным составляющим закономерности аналогичные. В обоих случаях в наиболее патологических верхних пластинках понижено количество высокомолекулярных веществ, что указывает на деградацию, наибольшую взаимосвязь коллагеновых волокон патогенной ткани, что может являться одной из причин повышенной ее твердости при коксартрозе. Тогда как в контрольных пробах процент весовых потерь одинаков для высокомолекулярных и низкомолекулярных органических веществ.

Вид кривых ДТА (рис. 1в) подтверждает приведенное заключение. В верхнем костном срезе мужчины, наибольшее количества тепла выделяется при разложении неколлагеновых белков и др. низкомолекулярных веществ, вероятно, вследствие увеличения их содержания. Часть кривой, соответствующая термическим эффектам коллагеновой фазы (как у мужчин, так и у женщин), смешена в интервал низких температур и характеризуется наибольшим выделением тепла. Возможно, данное явление свидетельствует с одной стороны о менее ориентированной коллагеновой структуре, с другой - о более связанном состоянии нитей коллагена между собой.

### **Выходы**

В работе приведены экспериментальные результаты по термогравиметрическим особенностям костной ткани. Установлено, что при коксартозе в костной ткани человека (30 - 59 лет) наблюдаются патогенные изменения органической и минеральной костных составляющих.

*Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований, гранты: № 08-05-90700 моб\_ст, 07-05-00097, 09-05-00464.*

### **Список литературы**

1. Гилинская Л.Г., Григорьева Т.Н., Окунева Г.Н., Власов Ю.А. Исследование минеральных образований на сердечных клапанах человека // Журнал структурной химии. Том 44. № 4. 2003. С. 678 – 689.
2. Ерош Е.Б., Дмитревский Б. А., Нарыжный В.П., Цветков С.К. Некоторые характеристики синтезированных образцов гидроксиапатита // Журнал прикладной спектроскопии. Т. 74. Вып. 6. 2001. С. 1029-131.
3. Лемешева С.А., Голованова О.А., Маловская Е.А., Муромцев В.И. Особенности химического состава физиогенных биоминералов // Материалы Всероссийской научно-минералогической конференции «Минералогия ультрабазит-базитовых комплексов». Екатеринбург. 2008. С. 106-109.
4. Лемешева С.А., Голованова О.А., Городилов Р.В. Характеристика кристалличности костного апатита по данным ИК-спектроскопии // Материалы Всероссийской научной молодежной школы-конференции «Химия под знаком «Сигма» исследования, инновации, технологии». Омск. 2008. С. 136-138.
5. Сидоренко О.А. Социально-гигиенические особенности заболеваемости и оценка эффективности больных с патологией крупных суставов. Авт. дис. канд. мед. наук. Новосибирск. 2002. 23 с.

6. Коваленко В.Н., Борткевич. О. П. Остеоартроз / Практическое руководство. – К.: Морион. 2003.
8. Прохончуков А.А., Жижина Н.А., Тигранян Р.А. Гомеостаз костной ткани в норме и при экстремальных условиях. - М.: Наука. 1984. 200 с.
9. Dove P.M., De Yoreo J., Weiner S. Biomineralization // Rev. Miner. & Geochem. Ed. V.54. 2003. 381 p.
10. Sahai N., Schoonen M.A. Medical mineralogy and geochemistry // Rev. Miner. & Geochem. Ed. V.64. 2006. 332 p.
11. Zoor G. Fossil age determination by thermal analysis // Journal of Thermal Analysis. Vol. 2. 1982. P. 83-91.

## БИОЛОГИЧЕСКИЕ ТКАНИ КАК КЛЕТОЧНЫЕ РЕШЕТКИ

Савостьянов Г.А.

Институт эволюционной физиологии и биохимии им. И.М. Сеченова РАН  
Санкт Петербург, [gensav@iephb.ru](mailto:gensav@iephb.ru), [gensav38@mail.ru](mailto:gensav38@mail.ru)

Биологические ткани состоят из клеток, находящихся в функциональных взаимодействиях, которые и обеспечивают выполнение тканевых функций. Такие взаимодействия позволяют рассматривать ткани как клеточные сети или решетки. Сказанное относится ко всем тканям независимо от того, контактируют ли их клетки непосредственно своими боками (как в эпителиальных пластиах), своими отростками (как в нервной сети) или через межклеточное вещество (как в крови или соединительной ткани). Изменения тканей в развитии и патологии также затрагивают не только внутриклеточные процессы, но и меняют структуру клеточной сети. Однако в настоящее время основное внимание уделяется изучению внутриклеточной жизнедеятельности, и в особенности – ее молекулярных механизмов, сетевые же свойства ткани остаются в тени. В частности, пространственная организация ткани, т.е. способы упаковки клеток в трехмерном пространстве в норме и патологии, до сих пор неизвестны. Это разительно отличает современную гистологию (науку о тканях) от кристаллографии.

Можно назвать три взаимосвязанные причины застоя в изучении клеточных сетей. Первая состоит в том, что вопрос о них в качестве самостоятельной проблемы пока не сформулирован и потому не привлекает к себе должного внимания. Вторая причина состоит в сложности таких сетей и отсутствии адекватных подходов к их изучению. Так, основным методом гистологии является изготовление и микроскопическое исследование тонких (практически двухмерных) срезов, проведенных в произвольных направлениях. Такие срезы не дают информации о пространст-

венной организации тканей и структуры их клеточных сетей. В то же время эмпирические методы реконструкции трехмерной структуры ткани по серийным срезам даже при использовании современных компьютерных технологий [2] обладают низкой разрешающей способностью. Они дают информацию лишь о геометрических особенностях формы отдельных клеток, но не позволяют определять топологию клеточной решетки. Третья причина состоит в недостаточном развитии формализованной теории строения биологических тканей [3, 7, 9]. Эта теория основана на излишне жесткой аксиоматике, вследствие чего предлагает очень ограниченный набор моделей тканевого строения (по одной для двухмерного и трехмерного случая) и потому не облегчает изучение клеточных сетей реальных тканей. В итоге гистология остается плоскостной, т.е находится на уровне дофедоровской минералогии с ее описаниями сколов и шлифов. Это является тормозом в попытках осмыслить механизмы развития многих патологических процессов, среди которых важнейшим является злокачественный рост.

Для выхода из существующего положения были развиты: а) новая версия формализованной теории строения клеточных сетей; б) построено семейство их моделей; в) на базе этого семейства разработан рациональный метод определения структуры таких сетей в реальных тканях.

Суть новых теоретических представлений состоит в следующем.

#### *1. Новое понятие об элементарной морфофункциональной единице тканей.*

Известно, что успехи в развитии большинства точных наук в значительной степени определялись тем, насколько удачно был выбран элементарный объект исследуемых явлений и построена его идеализированная модель (например, для физики это атом, для химии – молекула, для кристаллографии – элементарная ячейка, и т. д.). Для биологии и, в частности, гистологии важность выбора элементарных объектов и построение их моделей не менее важны. Что же сейчас считается элементарной структурно-функциональной единицей ткани? Долгое время в этом качестве выступала клетка. Однако такое представление нуждается в уточнении по следующей причине.

Представление о клетке как элементарной тканевой единице кажется очевидным и естественным для ткани, состоящей из однотипных клеток (эндотелий, мезотелий и др.). Но такие ткани являются лишь частным случаем. Для большинства же тканей характерно то, что они состоят не из одного, а из нескольких типов клеток (слизистые, ресничные, ворсинчатые и т.д.), которые находятся в различных численных соотношениях и функциональных взаимосвязях. А поскольку элементарная морфофункциональная тканевая единица должна отражать как клеточный состав, так и характер присущих ткани межклеточных взаимосвязей, становится ясным, что отразить это с помощью единственной клетки невозможно. Поэтому неоднократно высказывалась мысль, что в общем случае элементарная

тканевая единица должна состоять не из одной, а из нескольких клеток [1, 6, 8] и др. Более точно эту мысль можно выразить в следующей форме: **элементарной структурно-функциональной тканевой единицей является минимальновозможная клеточная группа, включающая в себя все составляющие ткань клеточные типы, взятые в такой пропорции и объединенные такими межклеточными взаимодействиями, которые присущи самой ткани.**

Число клеток в таких единицах может колебаться в пределах первого десятка и обычно принимает значение от двух до пяти. Такие единицы возникают в развитии в результате специализации и интеграции клеток, т.е. разделения функций между ними, что приводит к образованию множества различно специализированных клеток, возникновению взаимосвязей между ними и становлению элементарных единиц многоклеточности. Эти единицы было предложено называть гистионами [4]. Процесс полимеризации гистионов приводит к формированию клеточных сетей и лежит в основе роста тканей, органов и организмов в целом.

В рамках структурной гистологии были развиты теоретические основы для нахождения состава и структуры гистионов. В частности, было показано, что существует возможность формализованного аксиоматического описания процедуры разделения функций и ее элементарных актов, вычисления множества возможных гистионов и построения их моделей. При этом организация гистионов может быть охарактеризована с точностью до клетки и связи. Их состав, по опыту химии, можно описывать брутто-формулами:  $AB$ ,  $AB_2$ ,  $AB_3$ ,  $AB_2C_3$  и т.д., где  $A$ ,  $B$ ,  $C$  – это разнотипные клетки. Структуру таких единиц удобно описывать с помощью графов.

Важный результат состоит в обнаружении того, что развитие гистионов характеризуется периодическим законом, который формулируется следующим образом: с монотонным ростом общего числа элементарных актов развития структура гистионов периодически повторяется. Это позволяет строить их естественную систему в виде периодической таблицы [4]. Такая таблица дает представление как о множестве направлений специализации клеток, так и о вариантах их взаимосвязей в гистионах. Параметры этой таблицы имеют биологический смысл и пригодны для количественного описания прогрессивного развития как самих гистионов, так и степени детерминации и дифференцировки их клеток. Кроме того, структура этой таблицы хорошо согласуется с существующими представлениями об основных закономерностях развития тканей.

Проведенная верификация моделей гистионов показала, что клеточные группы с предсказываемой пространственной организацией действительно наблюдаются на ранней стадии развития многоклеточных животных. Другими словами, состав и структура гистионов хорошо описывают пространственную организацию дробления.

Таким образом, элементарной структурно-функциональное единицей

ткани в общем случае является не клетка, а гистион. Эти единицы представляют собой самостоятельный, упускаемый до сих пор уровень биологической организации. Они располагаются между уровнями клеток и тканей и играют в развитии и жизнедеятельности тканей организма ту же роль, что и элементы в химии.

## *2. Новые представления о структуре тканей как клеточных решеток.*

Мономерная форма существования гистионов является кратковременной и в развитии организма быстро заменяется полимеризованной формой. Полимеризованные гистионы имеют вид решеток, состоящих из клеток и их связей. В зависимости от числа связей, на которые клетки способны, решетки могут иметь различную размерность: одно-, двух- и трехмерные (т.е. иметь вид нитей, однослойных пластов и объемных многослойных образований соответственно). Обычно решетки имеют регулярную структуру, что является проявлением их гистионного строения. Эти решетки являются моделями тканей. Таким образом, можно сказать, что **ткань – это клеточная решетка, возникающая в результате полимеризации гистионов**. Такое определение не претендует на полноту, его цель – выдвинуть на первый план взаимосвязанность тканевых клеток в пространстве и подчеркнуть ее важность. Свойства таких решеток и гистионов являются тем новым аспектом, который в рамках структурной гистологии выдвигается на первый план при изучении пространственной организации тканей.

Рассмотрение эпителиев как полимеризованных гистионов показало, что состав и структура таких полимеров поддаются аксиоматизированному вычислению. На этом основании был разработан метод построения семейства двух- и трехмерных топологических и геометрических моделей в виде периодических координационных решеток и клеточных мозаик соответственно.

На первых порах удобным объектом для проверки таких моделей могут служить эпителии, поскольку они состоят из плотно упакованных клеток, осуществляющих взаимосвязи путем непосредственного соприкосновения. Поэтому для таких тканей выяснение характера клеточной решетки сводится к определению количества ближайших соседей, с которыми каждая клетка контактирует своими сторонами.

## *3. Пространственная организация однослойных клеточных пластов.*

Для описания таких пластов была предложена новая, более адекватная аксиоматика, в рамках которой возможно семейство моделей из одиннадцати топологических вариантов гистоархитектоники. В виде решеток они известны как сети Шубникова-Лавеса, а в виде мозаик – как правильные паркеты Кеплера. Мы интерпретировали их как математические модели однослойных клеточных пластов [4]. Эти модели обладают трансляционной симметрией, выявляемой в плоскости, параллельной поверхности пласта. В такой

симметрии проявляется гистионное строение ткани. При этом клеточные сети изоморфны своим гистионам в том смысле, что отражают тот же состав и взаимосвязанность клеток.

Проведенная апробация полученных моделей по данным литературы и собственным результатам позволила к настоящему времени установить, что девять из одиннадцати предсказываемых теорией вариантов пространственной организации действительно реализуются в тканях различных животных. Этот результат позволил заключить, что именно предсказываемые моделями варианты пространственной организации и реализуются в развитии реальных клеточных пластов. Он позволил также впервые описать два пока неизвестных варианта топологии однослойных эпителиев и предсказать возможность их обнаружения в будущем.

Следует отметить, что, в отличие от моделей, большинство реальных мозаик характеризуется наличием различных локальных дефектов клеточной упаковки, возникающих в результате пролиферации клеток.

#### *4. Трехмерная организация многорядных и многослойных клеточных пластов.*

Одной из главных особенностей таких пластов является то, что на их базальном, срединном и апикальном уровнях будет реализовываться не одна и та же, а различные варианты клеточных решеток, мозаик и соответственно гистионов. Это означает, что топология таких пластов (т. е. смежность их клеток) на различных уровнях неодинакова. Из этого вытекает важное заключение, что в направлении, перпендикулярном поверхности пласта, такие пласти имеют слайсовое строение, где слайс - это такой интервал пласта, который характеризуется постоянной топологией. Реальные пласти могут состоять из нескольких слайсов. Такие слайсы являются элементарными стандартными «строительными блоками», а их комбинации порождают множество вариантов гистоархитектуры. В связи со слайсовым строением структура таких пластов уже не может быть представлена единичными двумерными моделями, но только их комплексом, что возможно лишь в сложных трехмерных моделях. Поэтому переход к построению трехмерных моделей многорядных и многослойных эпителиев основывается на возможности трансформаций и взаимопревращений двухмерных клеточных мозаик. Для учета такой возможности потребовалась дополнительная модификация аксиоматики [4].

Интерпретируя трансформации мозаик как сечения пласта на различных уровнях, можно создавать семейства трехмерных моделей различного состава и структуры. Такие модели в графической и пластической форме вначале строились вручную. Затем результативность их построения была многократно увеличена благодаря применению компьютерной программы Гистоарх, специально разработанной для создания анимационных моделей пространственной организации клеточных пластов [5]. Программа позволяет визуализировать форму и взаиморасположение клеток, получать сечения моделей в различных направлениях и оценивать их информа-

тивность. В результате экспериментов с моделями было обнаружено, что наименее информативными являются популярные сейчас сечения, перпендикулярные поверхности пласта, а наиболее информативными – тангенциальные сечения (параллельные поверхности пласта), ныне практически не применяющиеся.

##### *5. Новый подход к изучению клеточных решеток.*

Использование моделей позволяет реализовать новый подход к реконструкции трехмерной структуры пластов и исследованию клеточных решеток. Этот подход заключается в сравнении тканевых срезов с сечениями моделей и выборе той из них, сечения которой соответствуют реальным срезам. Применение этого подхода радикально повышает разрешающую способность исследования пространственной организации эпителиев и позволяет определять топологию клеточного пласта, а не только геометрические особенности его клеток. Кроме того, такой подход существенно упрощает методику реконструкции. В частности, он позволяет сократить количество необходимых тканевых срезов и делает ненужным точное их совмещение.

С помощью этого подхода была проведена реконструкция трехмерной организации ряда покровных и сенсорных эпителиев и впервые установлена структура их клеточных решеток [4, 5]. При этом подтверждалась высокая результативность нового подхода. Его можно использовать для изучения пространственной организации различных тканей в норме и ее изменений в патологии.

Итак, новое формализованное описание тканей как клеточных решеток, имеющих гистионное и слайсовое строение, расширяет представления о закономерностях строения реальных клеточных пластов. Эти представления позволяют синтезировать семейства двух- и трехмерных моделей, отражающих как топологию ткани, так и геометрию ее клеток. Такие модели облегчают проведение реконструкции пространственной организации эпителиев, позволяют прогнозировать возможные варианты гистоархитектур и ориентировать исследователей на их целенаправленный поиск. Они также дают комплекс новых информативных признаков для описания пространственной организации клеточных пластов. В целом развитый подход открывает перспективу создания трехмерной структурной гистологии, которая, наподобие геометрической кристаллографии, будет способна находить все возможные варианты клеточных решеток и, тем самым, предсказывать варианты пространственной организации тканей в развитии и патологии.

#### **Список литературы**

1. Ариэль Б.М., Томсон В.В., Барштейн Ю.А. Структурно-функциональная единица и некоторые теоретические вопросы гистологии // Структурно-функциональные единицы и их компоненты в органах висцеральных систем в норме и патологии: Тез. докл. науч.-практ. конф. (1-3 окт. 1991 г.) Харьков: ХОП ВНМТО. 1991. С. 11-13.

2. Буданцев А.Ю., Айвазян А.Р. Компьютерная трехмерная реконструкция биологических объектов с использованием серийных срезов. // Морфология. 2005. Т. 127. Вып. 1. С. 72-78.
3. Маресин В.М. Пространственная организация эмбриогенеза. М.: Наука. 1990. 169 с.
4. Савостьянов Г.А. Основы структурной гистологии. Пространственная организация эпителиев. СПб.: Наука. 2005. 375 с.
5. Савостьянова Е.Г., Воробьев А.В., Грефнер Н.М., Левченко В.Ф. и Савостьянов Г.А. На пути к трехмерной гистологии. Применение компьютерных моделей к реконструкции трехмерной структуры биологических тканей на примере анализа строения слухового эпителия птиц // Морфология. 2007. Т. 131. Вып. 1. С. 8 - 17.
6. Саркисов Д.С. (ред.) Структурные основы адаптации и компенсации нарушенных функций. М.: Медицина. 1987. 448 с.
7. Смолянинов В. В. Математические модели биологических тканей. М.: Наука. 1980. 368 с.
8. Хрущев Г.К. и Бродский В.Я. Орган и клетка // Успехи соврем. биологии. 1961. Т. 52. № 2(5). С. 181-207.
9. Dormer K. J. Fundamental tissue geometry for biologist. London: Cambridge Univ. Press, 1980. 150 p.

## БИОЛОГИЧЕСКАЯ РЕАЛИЗАЦИЯ РАЗБИЕНИЯ ДВУМЕРНОЙ СФЕРЫ

**Тимофеева М.Г.  
Геологический институт КНЦ РАН  
Апатиты,<marhim2003@mail.ru>**

И.П. Павлов (1925) в своей речи «Естествознание и мозг» сказал: «...Вся жизнь от простейших до сложнейших организмов, включая, конечно, и человека, есть длинный ряд все усложняющихся до высочайшей степени уравновешиваний внешней среды. Придет время, пусть отдаленное, когда математический анализ, опираясь на естественнонаучный, охватит величественными формулами уравнений все эти уравновешивания, включая в них, наконец, и самого себя». Не составила исключения и биология.

Систематические исследования комбинаторно-топологических и метрических свойств биологических тканей, рассматриваемых как фрагменты 2- и 3-мерных мозаик, были начаты Льюисом. Также работы в этом направлении проводились Жанэ, Смоляниновым и Маресиным.

Льюис определил расположение плоскостей деления, максимальное превышение размера дочерних клеток над родительскими клетками, и что все получающиеся при делении клетки будут восстанавливаться до первоначальной гексагональной формы за счет упорядочение плоскостей [1].

Деление клетки, если она имеет вид правильного гексагона со

сторонами одинаковой длины, происходит в плоскостях а, б и с (рис.1, 1 и 2). Они разделяют площадь на две половины, что приводит к увеличению периметра; каждая получившаяся клетка является не очень правильным пентагоном.

В клетках с пластичными стенками неправильный пентагон может стать правильным, насколько это возможно, за счет:

- 1) быстрого уменьшения поверхности натяжения относительно наибольшей длины этого периметра;
- 2) путем сокращения своих сторон до одинаковой длины, если площадь остается той же самой.

Но это будет означать соответствующее уменьшение в соприкасающихся сторонах смежных клеток и последовательное увеличение их площадей относительно периметров. Оказываясь в этой ситуации, пентагоны увеличиваются и их стороны становятся одинаковой длины.

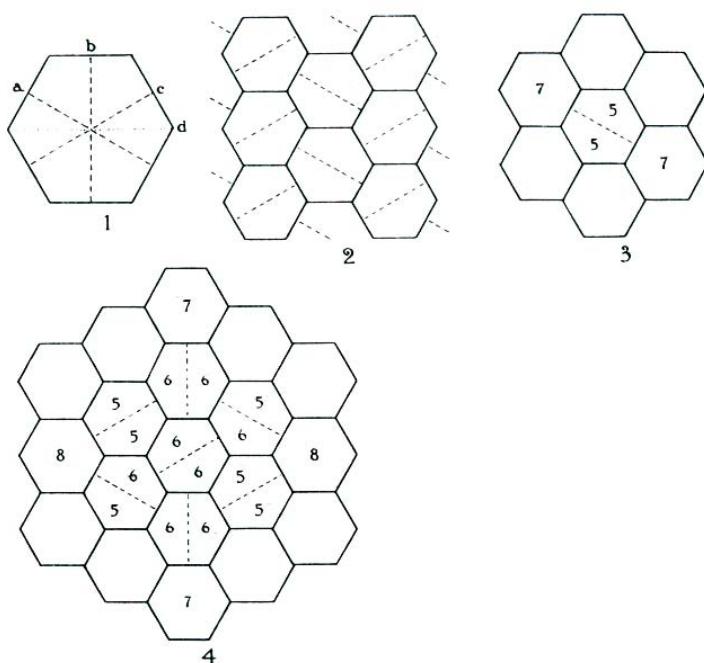


Рис. 1. Влияние клеточного деления на гексагональные клетки.

Деление гексагональной клетки по плоскости  $d$  не происходит по причине того, что со смежными клетками они будут давать нестабильные тетраэдральные углы на каждом конце. Это будет противоречить правилу Эррера, которое гласит, что «начальное разделение стенок делящейся клетки приводит к тому, что их площадь будет наименьшей из возможных, которые могут быть пространственно вложены».

Если в слое гексагональных клеток, одно из делений происходит в плоскости  $a$ ,  $b$  или  $c$ , то при этом будет образовываться пара пентагональных клеток и по этой причине две смежные клетки становятся гептагональными (рис.1, 3).

Если 6 клеток граничащих с делящейся клеткой делятся в плоскостях  $a$ ,  $b$  и  $c$  и эти плоскости будут располагаться, как показано на рис. – в целом будет получаться 8 новых гексагональных и 6 новых пентагональных клеток; 2 смежные клетки будут давать 2 гептагональные и 2 октагональные. Среднее число сторон для этих шести пентагонов, двух гептагонов и двух октагонов составляет 6 (рис.1, 4).

Плоскости для исследования были выбраны случайно, исключая, что плоскость в какой-нибудь клетке никогда не распространяться через плоскость, выбранную смежной клеткой. Но в тканях распространение плоскостей деления через смежные клетки почти не избежать. Некоторая неправильность клеток или небольшое отклонение плоскостей, неизбежно приводит к образованию тетраэдральных углов. Но рисунки показывают, что деление гексагонов происходит на пентагоны и гептагоны, и по мере продолжения деления, как пентагоны так и гептагоны будут восстанавливаться до первоначальной гексагональной формы за счет упорядочение плоскостей.

Если при делении получаются пентагоны абсолютно правильные и их стороны одинаковой длины, то их площадь увеличивается на 32.4%. Они ни коим образом не удваивают свой размер. Если они будут увеличиваться все больше в попытке достичь размера родительской клетки, то это неблагоприятно повлияет на соседние клетки, делая их периметры превосходящими минимум для ограниченных площадей. Следовательно, в этой точке следует ожидать остановку роста, и конечным результатом деления гексагона будет производство пары правильных пентагонов с примерно одинаковыми сторонами.

В работе Льюиса [2] показал при помощи тщательной реконструкции или изоляции отдельных клеток с подсчетом их граней, что типичная форма клеток, если конечно существует какая-либо типичная форма, это 14-гранник. 550 клеток различного вида, выбранных по принципу наличия отчетливых стенок и незначительного межклеточного пространства, были исследованы на предмет числа граней с включением экземпляров, имеющих от 6 до 23 граней включительно. Обычно число граней составляло от 9 до 20, при среднем значении 13.9.

Для каждого из 100 клеток были получены следующие средние значения: сердцевина бузины – 13.96 граней; клетки человеческого жира – 14.01; бузина *Eupatorium* – 13.36 и 14.00 (по данным разных авторов); бузина *Ailanthus* – 14.29;. Пятьдесят предхрящевых клеток также имели среднее значение 13.9 граней.

Незначительное дробное отличие от 14 может быть результатом случайности отбора, но, неизбежно, будет вызвано нетипичными и нестабильными тетраэдральными углами, которые, от случая к случаю, возникают.

Существует только один образец среди всех возможных форм 14-поверхностных клеток, который может существовать постоянно с математической точностью, разделяя пространство идентичными одинаково ориентированными элементами без промежутков. Этот образец существует в нескольких разновидностях. Для минимальной поверхности он принимает форму знаменитого тетракаидекаэдра Лорда Кельвина, который имеет 8 волнистых гексагональных поверхностей и 6 плоских четырехсторонних поверхностей с изогнутыми краями. Очень близкой аппроксимацией к такой минимальной площади является правильный тетракаидекаэдр Кельвина, в котором все поверхности плоские, 6 из которых квадраты, а другие 8 – правильные шестиугольники. У клеток этого не происходит, поэтому мы ищем то, что можно назвать термином *orthoid* тетракаидекаэдры, имеющие шесть четырехугольников (не обязательно прямоугольных, равносторонних и плоских) и восемь неправильных шестиугольников.

Многогранник с 14-ю гранями, что является средним количеством для большего числа клеток, и только трехгранными углами имеет  $3(14-2) = 36$  ребер [3].

Данная формула применима не только для ограниченных поверхностей однородных клеток, в связи с которыми они были впервые установлены, но также и для клеточной мозаики, покрывающей вольвокс, бластулу или любой подобный объект, например, огурец, при условии, что поверхность полностью покрыта клеточными многоугольниками. Она также применима к эпителиальной выкладке любой простой полостью закрытой полости.

В отечественной биологии подходы Льюиса были использованы и развиты в работах В.В. Смолянинова и В.М. Маресина [4, 5, 6]. Авторы смоделировали и экспериментально исследовали рост полиздрических колоний *V. aureus* Ehr., представляющих собой клеточное разбиение сферы.

В своей работе они пытались дать ответ на вопрос: как должны делиться клетки зародыша колонии, чтобы образовалась замкнутая протоплазматическая сеть? Один из способов ответить на этот вопрос – описательный – для каждой стадии развития зародыша они находили такое распределение плоскостей деления, которое переводит зародыш в следующую стадию.

Число клеток в колонии *Volvox aureus* Ehr. составляет от 200 - 300 до

1300 - 3200. При подсчете количества клеток у большого (примерно 100) числа особей *V. aureus* в различных средах культивирования оказалось, что все возможные значения группируются около трех величин. Эти величины, равные 256, 512 и 1024, представляют собой соответственно, 8, 9 и 10-ю степени числа 2, т.е. в культивируемой популяции встречаются только три типа взрослых колоний. Очевидно, деление клеток происходит синхронно и эти три типа колоний получаются при остановке дробления зародыша на 8, 9 и 10 делениях.

В своей работе Смолянинов и Маресин отметили интересный факт. Число клеток материнской колонии никак не определяет число клеток потомков, т.е. не является наследственным признаком (при бесполом размножении). Суммарное число клеток дочерних колоний регулируется просто трофическими возможностями материнской колонии.

Опираясь на данные работы Жанэ (1912, 1923) [5, 6], для процесса деления колоний *V. aureus* были определены плоскости деления и установлено, что их ориентация зависит от геометрии соседства клетки.

Стадии развития зародыша:

- Зародыш развивается из специализированной клетки материнской колонии – гонидия. Зародыш растет внутрь материнской колонии. Деление клеток синхронно, т.е. на n-й стадии число клеток зародыша  $N=2^n$  (начальная стадия n=0 соответствует гонидиальной стадии) (рис. 2, а).
- Плоскость первого деления проходит через ось гонидия. Ось гонидия, перпендикулярная поверхности материнской колонии, совпадает с осью будущего зародыша (рис. 2, б).
- Плоскости второго деления параллельны между собой и параллельны оси зародыша, через которую, однако, не проходят, образуя с плоскостями первого деления угол  $60^\circ$ . Поэтому стадия четырех клеток организована по типу «палитомического креста»: кроме связей между четырьмя клетками по периметру, имеется диагональная связь между одной парой противолежащих клеток (рис. 2, в).
- Согласно Жанэ, плоскости третьего деления проходят с некоторым наклоном к оси зародыша (одинаково у всех 4-х клеток), и 8-кл. стадия должна бы иметь вид, приведенный на рис.2, г [7, 8, 9].
- Согласно наблюдениям Смолянина и Маресина, плоскости третьего деления распределены не одинаковым образом для всех четырех клеток: у одной пары противолежащих контактирующих клеток они квазиэкваториальны, а у другой – квазимеридиональны (рис. 2, д). Поэтому у агрегации третьей стадии шесть граничных клеток и две внутренние. Начиная с третьего деления зародыш приобретает сферическую форму («осферивается»). Описание дальнейших стадий сводится к описанию взаимного положения клеток.

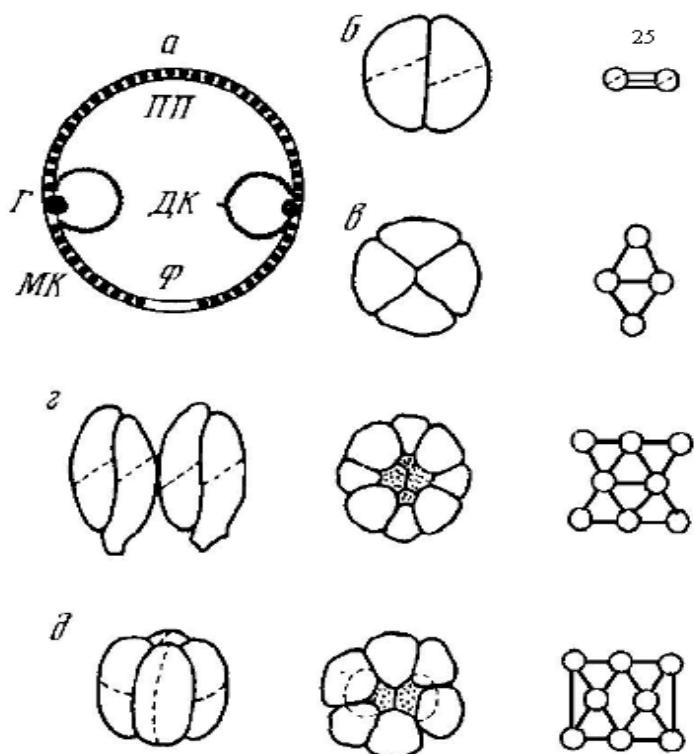


Рис. 2. Стадии деления зародыша Volvox.

Смолянинов и Маресин в своей работе также сформулировали основные условия деления, основные преобразования агрегаций при делении клеток, создали для наглядности плоскую и сферическую модели развития колоний вольвокс.

- Каждая клетка при делении преобразуется в пару одинаковых потомков.
- Все деления синхронны.
- Пара потомков одной родительской клетки сохраняет протоплазматическую связность, каждая последующая стадия сохраняет предыдущие связи.
- Постадийная агрегация клеток двумерна и максимальна компактна.
- Каждая стадия однородна по связности.

Итак, опираясь на все это, они впервые смоделировали рост полиздрических колоний *V. aureus* Ehr.. Но большое число клеток (256, 512, 1024), образующие зрелые колонии, не позволило им рассчитать потенциальное разнообразие их морфологических типов (рис. 3).

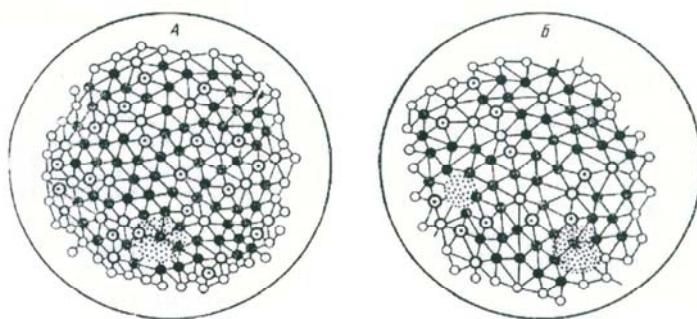


Рис. 3. Примеры сетей колоний *Volvox*  
с различным числом клеток 1024 (а) и 512 (б).

Принцип образования колоний многих видов семейства *Volvocaceae* одинаков. Колонии *Volvocaceae* образуют простые полиздры: клетки примерно равного размера, расположенные на однослойной сфере; в каждой вершине сходится по три грани и содержат они лишь 5-, 6- и 7-угольные грани.

Было показано, что возможны лишь три комбинаторных типа зрелых 16-клеточных полиздрических ценобиев этого вида. Из трех теоретически предсказанных морфотипов колоний *P. morum* в природе реализуются лишь два: -43m и 222 (рис. 4).

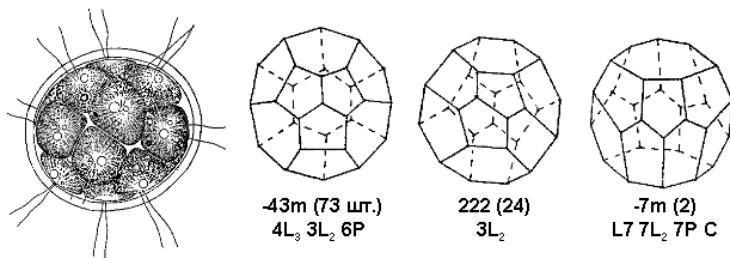


Рис. 4. Реальный облик и комбинаторные типы ценобиев  
*Pandorina morum* (Mull.) Bory.

При определении симметрии было проанализировано 114 16-клеточных колоний и получены следующие результаты: колонии с симметрией -43m и 222 встречаются в пропорции 3:1, т.е. наиболее часто встречающийся морфотип, обладает симметрией -43m. Полученный факт объясняется тем, что это есть максимально возможная для данного случая симметрия. Но то, что симметрия 222 встречается в достаточно большом количестве тоже вполне объяснимо. Данный морфотип имеет 3 взаимно перпендикулярные оси симметрии второго порядка, разрешающие свободное вращение колоний в 3-х мерном пространстве. Колонии с симметрией -7m определены в двух случаях, но это можно отнести к ошибке эксперимента и, скорее всего, колонии данного типа в природе отсутствуют. В организации таких колоний выделяют две 7-угольные клетки, что невозможно при их близком размере.

Колонии Р. могут на любой стадии роста приобретают наиболее симметричную форму. Это было показано не только для 16-клеточных колоний. 4-клеточные колонии – образуют тетраэдр с симметрией -43m; 6-клеточные колонии – образуют октаэдр с комбинаторной симметрией m-3m, но колонии часто сжаты вдоль тройной оси до тригональной антипризмы с симметрией -3m (геометрически). Большинство 8-клеточных колоний – имеют комбинаторную симметрию тетрагонального тетраэдра -42m, но при уплотнении происходит разворот двух 4-клеточных комплексов с понижением симметрии до 222. А для многогранников, содержащее данное число граней – это и есть максимальная симметрия [10].

### Список литературы

1. Фредерик Т. Льюис. Влияние деления клеток на форму и размер гексагональных клеток. 1926. *The anatomical record*. Т. 33. № 5. С. 331-355.
2. Фредерик Т. Льюис. Геометрические расчеты для различных форм 14-гранных клеток: переход от додекаэдров к тетракаидекаэдрам. 1943. *American journal of botany*. Т. 30. С. 74- 81.
3. Фредерик Т. Льюис. Математические признаки эпителиальных мозаик: наблюдение за эндотелиями капилляров. 1933. *The anatomical record*. Т. 55. № 4. С. 323-341.
4. Смолянинов В.В. Организация колонии вольвокс / В.В. Смолянинов, В.М. Маресин // Онтогенез. 1971. Т. 2. № 6. С. 632-640.
5. Смолянинов В.В. Модель роста колонии вольвокс / В.В. Смолянинов, В.М. Маресин // Онтогенез. 1972. Т. 3. № 3. С. 299-307.
6. Смолянинов В.В. Математические модели биологических тканей / В.В. Смолянинов. М. : Наука. 1980. 368 с.
7. Janet, Ch. *Le Volvox* / Ch.Janet. Limoges. 1912. Memoire 1. 151 p.
8. Janet, Ch. *Le Volvox* / Ch.Janet. Paris. 1922. Memoire 2. 66 p.
9. Janet, Ch. *Le Volvox* / Ch.Janet. Paris, 1923. V. 3. 178 p.
10. Войтеховский Ю.Л., Тимофеева М.Г., Степенчиков Д.Г. Принцип Кюри и морфологическое разнообразие колоний *Pandorina morum* (Müll.) Богу (*Volvocaceae*) // Журнал общей биологии. 2006. № 3. С. 207-212.

# СТОХАСТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ЕСТЕСТВЕННОГО ДВИЖЕНИЯ ЛОКАЛЬНО-КОМПАКТНЫХ ПОПУЛЯЦИЙ *PINUS SYLVESTRIS*

Шестаков А.А.

Полярно-альпийский ботанический сад-институт КНЦ РАН  
Апатиты, <v\_zhrov\_1952@mail.ru>

Локально-компактные популяции, как и прочие виды насаждений древесных растений, бывает целесообразно характеризовать исходя из количества и качества запасенной древесины. В этой связи надежный прогноз динамики лесных запасов, необходимый для успешного решения разнообразных лесохозяйственных задач, а также задач рационального природопользования, невозможен без подробного и адекватного математического описания процессов дифференциации особей внутри популяции по заданным классам фенотипов.

В работе обсуждается стохастическая математическая модель естественного развития сообществ индивидов одного вида на общем ресурсе в условиях полного отсутствия миграционных процессов. Основой модели является конечная дискретная цепь Маркова.

## Исходные понятия и рабочие предположения.

Далее всякую локально-компактную популяцию в каждый момент реального времени рассматриваем как множество, элементами (членами) которого являются древесные растения (особи или индивиды). Считаем, что каждый индивид популяции обладает (в данный конкретный момент времени) определенным статусом (скажем определяемым в совокупности, возрастом, размерами, определенными структурой и качеством древесины и т.д. и т.п.). Все элементы, обладающие одним и тем же статусом, образуют статусные группы (или классы). Индивиды в процессе развития популяции могут переходить и переходят из одной статусной группы в другую, т.е. могут изменять свой текущий статус. В названные переходы включим и первоначальное вхождение особи в популяцию (рождение), а также – ее выбытие из состава популяции. Под событием, характеризующим развитие во времени (или естественное движение) популяции, будем понимать всякое изменение в статусе любого из ее членов. Кроме того, будем считать, что события, происходящие в популяции, удовлетворяют следующим предположениям:

- интенсивность  $\mu$  потока введенных событий в данной популяции постоянна, а вероятность отдельного события в популяции за малый промежуток времени  $\Delta t = \tau$  равна произведению  $\mu \cdot \tau$ ;
- все события в популяции являются ординарными событиями;
- для любых подмножеств событий в данной локально-компактной популяции имеет место принцип отсутствия последействия.

Из справедливости перечисленных предположений следует, что число событий в такой популяции (т.е. число переходов из одной группы в другую) подчинено закону Пуассона [3]. Приведенные общие соображения положим в основу математической модели популяции.

#### **Описание математической модели.**

Пусть  $\mathcal{P} = \left\{ \mathcal{P}_i \mid i = \overline{1, n} \right\}$  – некоторая полная и замкнутая система определяющих признаков (классификация) на популяции  $\mathcal{L}$ . Для каждого временного среза  $\mathcal{L}(t)$  популяции  $\mathcal{L}$  система признаков  $\mathcal{P}$  порождает отношение эквивалентности  $\pi(t)$  на  $\mathcal{L}(t)$ . При этом, очевидно, фактор-множество  $\mathcal{L}(t)/\pi(t)$  представляет собой структуру нашей популяции по классификации  $\mathcal{P}$ , а  $n$ -мерный вектор вида

$$\mathbf{M}(t) = M(t) \cdot (M_1(t)/M(t), \dots, M_n(t)/M(t)) = M(t) \cdot \mathbf{s}(t), \quad M(t) = \sum M_i(t), \quad (1)$$

количественную меру этой структуры, определяющей численный состав  $\mathcal{L}(t)$  через мощности  $M_i(t)$  соответствующих классов эквивалентности из  $\mathcal{L}(t)/\pi(t)$ . Переход индивида из  $i$ -ой статусной группы в  $j$ -ю определяется интенсивностью  $\mu_{ij}$ . Факт зависимости интенсивности потока  $\mu_{ij}$  от условных номеров групп  $i$  и  $j$  указывает на явную связь с определяющими условиями принадлежности индивида к названным статусным группам. Из вышесказанного понятно, что число переходов из группы  $i$  в группу  $j$  будет распределено во времени по закону Пуассона. Ясно также и то, что поток таких переходов характеризуется величиной  $\lambda_i = \sum_j \mu_{ij}$ . Величина  $\lambda_i$ , очевидно, снова будет являться интенсивностью некоторого пуассоновского потока, поскольку любая конечная сумма пуассоновских (случайных) величин также распределена по закону Пуассона с параметром, равным сумме параметров интенсивности первичных (исходных) случайных величин [3]. Обозначив

$$q_{ij} = \frac{\mu_{ij}}{\lambda_i} \text{ имеем } \sum_{j=1}^n q_{ij} = 1,$$

где  $p_{ij} \geq 0$  – вероятность среди всех индивидов, покинувших статусную группу  $i$ , перейти в группу  $j$ . Напомним, что при этом вероятность покинуть группу  $i$  индивидом за достаточно малый интервал времени  $\Delta t = \tau$  (такой, чтобы выполнялась ординарность) равна

$$\tau \cdot \sum_{j=1}^n \mu_{ij} + o(\tau) = \tau \cdot \sum_{j=1}^n \lambda_i \cdot q_{ij} + o(\tau) = \lambda_i \cdot \tau + o(\tau) \quad (2)$$

Вероятности  $q_{ij}$  является важной характеристикой событий, происходящих в рассматриваемой популяции. Однако более полное описание движения популяции будут давать вероятности  $P_{ij}(t)$  нахождения индивида в момент времени  $t > 0$  среди элементов группы  $j$ , если в начальный момент времени  $t = 0$  он находился в группе  $i$ . Пусть

$$\Lambda = (\delta_{ij} \cdot \lambda_i)_{nn}; \quad \mathbf{Q} = (q_{ij})_{nn}; \quad \mathbf{P}(t) = (P_{ij}(t))_{nn}.$$

Тогда с учетом введенных обозначений и вероятностей, определяемых (2), имеем:

$$\mathbf{P}(t + \tau) = \mathbf{P}(t) - \tau \cdot \mathbf{P}(t) \cdot \Lambda + \tau \cdot \mathbf{P}(t) \cdot \Lambda \cdot \mathbf{Q} + o(\tau) = \mathbf{P}(t)(\mathbf{I} + \tau \cdot \Lambda(\mathbf{Q} - \mathbf{I})). \quad (3)$$

Теперь, приняв во внимание тот, вполне очевидный факт, что матрица  $\mathbf{Q}$  является Марковской, а  $\mathbf{P}(t=0) = \mathbf{I}$ , то при условии константности матриц  $\Lambda$ ,  $\mathbf{Q}$  и  $\tau = 1$  получим:

$$\mathbf{P}(t) = (\mathbf{I} + \Lambda(\mathbf{Q} - \mathbf{I}))^t. \quad (4)$$

Таким образом, выражение (1) для вектора структуры  $\mathbf{M}(t)$  популяции приобретет вид

$$\mathbf{M}(t) = \mathbf{M}(t) \cdot \mathbf{s}(0) \cdot (\mathbf{I} + \Lambda(\mathbf{Q} - \mathbf{I}))^t. \quad (5)$$

Стохастическая модель (4) является дискретной моделью с шагом  $\tau = 1$ , для которой естественной единицей времени выбран календарный год, вмещающий в себя один вегетационный период. Динамика численности популяции воспроизводится множителем  $\mathbf{M}(t)$ .

Соотношение (3) можно легко модифицировать, если учесть процессы включения индивидов в состав и их выбытие из состава популяции. Пусть  $n \times n$ -матрицы  $\mathbf{B}$  и  $\mathbf{D}$  определяют соответственно интенсивности потоков прибытия и потерь по причинам. Тогда не составляется особого труда показать, что матрица ротаций популяции  $\mathbf{R}$  имеет вид:

$$\mathbf{R} = \mathbf{B} - \mathbf{D} + \Lambda(\mathbf{Q} - \mathbf{I}). \quad (6)$$

В случае постоянства условий воспроизводства в рассматриваемой локально-компактной популяции матрицу  $\mathbf{R}$  можно считать константной матрицей, содержащей лишь постоянные коэффициенты. Отдельно

следует подчеркнуть и то, что матрица  $\mathbf{D}$  выбытий по причинам в равенстве (6) является диагональной, а матрица ротаций  $\mathbf{R}$  – квазинеотрицательной (т.е. с неотрицательными внедиагональными элементами)  $n \times n$ -матрицами.

#### **Анализ математической модели.**

Модели естественного движения популяций на основе матриц ротаций  $\mathbf{R}$  вида (6) являются более широким типом математических моделей, чем модели, определяемые соотношением (5). В самом деле, используя характерные свойства составляющих элементов из правой части матричного равенства (6), имеем:

$$\begin{aligned} \mathbf{e} = (1, 1, \dots, 1)^T &\Rightarrow \mathbf{R} \cdot \mathbf{e} = (\mathbf{B} - \mathbf{D}) \cdot \mathbf{e} + \Lambda(\mathbf{Q} - \mathbf{I}) \cdot \mathbf{e}; \\ \mathbf{Q} \cdot \mathbf{e} = \mathbf{e} &\Rightarrow \mathbf{R} \cdot \mathbf{e} = (\mathbf{B} - \mathbf{D}) \cdot \mathbf{e} + \Lambda(\mathbf{Q} - \mathbf{I}) \cdot \mathbf{e} \Rightarrow \mathbf{R} \cdot \mathbf{e} = (\mathbf{B} - \mathbf{D}) \cdot \mathbf{e} + \Lambda(\mathbf{e} - \mathbf{e}) \Rightarrow \\ \mathbf{R} \cdot \mathbf{e} &= (\mathbf{B} - \mathbf{D}) \cdot \mathbf{e}. \end{aligned} \quad (7)$$

Содержательно равенство (7) означает, что скорость изменения численности популяции полностью определяется соотношениями интенсивностей рождения и смертности по статусным группам и не зависит от переходов индивидов между названными группами. Последняя компонента  $\Lambda(\mathbf{Q} - \mathbf{I})$  модели (6), описывающая интенсивности переходов между статусными группами, влияет лишь на текущую структуру популяции. Поэтому математические модели вида (5) является частным случаем класса моделей с матрицей ротаций (6).

В терминах непрерывного времени модель естественного движения популяции с матрицей ротаций (6) (см. также равенство (2)) будет определяться системой уравнений:

$$\frac{d\mathbf{M}(t)}{dt} = \mathbf{M}(t) \cdot [\Lambda \cdot (\mathbf{Q} - \mathbf{I}) + \mathbf{B} - \mathbf{D}]. \quad (8)$$

Общим решением этой модели является матричная экспонента  $\mathbf{M}(t) = \mathbf{M}(0) \cdot \exp\{\mathbf{R}t\}$ . Поэтому в условиях постоянства параметров воспроизведения численности популяции, общие решения модели (8), а следовательно и дискретных моделей (6) и (5), обладают свойством неотрицательности. Более того, модель (5) обладает свойством сходимости.

#### **Результаты компьютерного моделирования.**

Для параметризации и спецификации модели были использованы априорные и экспертные данные. В основу разбиения на статусные классы были положены бонитировочные шкалы, разработанные для хвойных и семенных твёрдолистных насаждений М.М. Орловым (см., например, [1]).

На основе этих стандартизованных данных были сформированы семь классов продуктивности (эквивалентности), обозначенные как и соответствующие им классы бонитета по Орлову: Ia, I, II, III, IV, V, Va. В качестве модельной популяции было взято гипотетическое насаждение сосны (называемое далее насаждением E01). Для E01 использовалась рабочая гипотеза:

Площадь - 25 га; Численность подроста -  $M(0)=10^6$ ;  $s(0)=(0,5; 0,5; 0; 0; 0; 0)$ ;

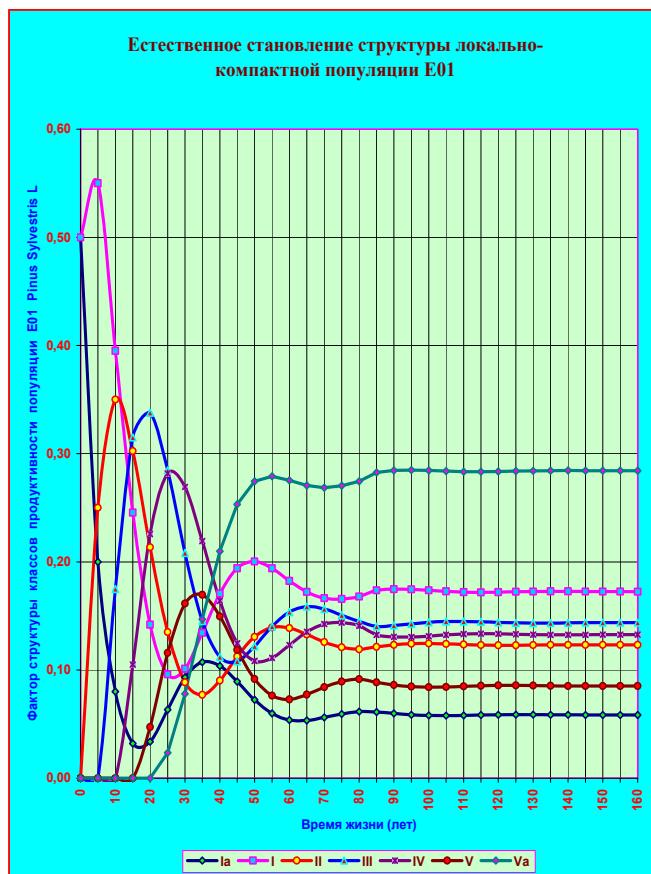


Рис. 1. Эволюция структуры ЛКП Е01.

Динамика общей численности популяции  $M(t)$  в (5) рассчитывалась с помощью  $3 \times 2$  модели развития смешанных локальных популяций, учитывающей ограниченность объема общего ресурса на каждый вегетационный период, а также фертильность и интенсивности выбывания,

деструкции и ассимиляции особей в зависимости от возраста.

Численная мера (4) текущей структуры популяции оценивалась с помощью модели конечного стохастического автомата [2]. Это, с одной стороны, обеспечило на этапе верификации математической модели возможность прямого учета достаточно широкого набора природных факторов, явно не представленных в исходных посылках. С другой стороны, предоставляло в распоряжение вполне прозрачные и простые в вычислительном отношении методы перехода к соответствующим реализациям конечной цепи Маркова.

На рисунке 1 представлены результаты компьютерного моделирования эволюции фактора структуры  $s(\tau)$  модельной популяции сосны **E01** за первые 160 вегетационных периода существования, иллюстрирующие основные свойства модели (5).

Результаты моделирования:

Время становления 145 лет; Предельная численность популяции – M(145) = 10 000; Фактор структуры  $s(145) = (0.06; 0.17; 0.12; 0.14; 0.13; 0.09; 0.28)$ .

**Список литературы**

1. Лесотаксационный справочник / Грошев Б.И., Синицын С.Г., Мороз П.И., Сеперович И.П. М.: Лесная промышленность. 1980.
2. Шестаков А.А., Чирков М.К. Обобщенные конечные автоматы: Поведенческая эквивалентность и проблемы оптимизации. Апатиты: Изд-во КНЦ РАН. 1992.
3. Худсон Д. Статистика для физиков: Лекции по теории вероятностей и элементарной статистике. М.: Мир. 1970.

**МАТЕМАТИЧЕСКОЕ ОПИСАНИЕ ГЕОМЕТРИЧЕСКИХ  
ОСОБЕННОСТЕЙ ПЕРСПЕКТИВНОГО ПРОСТРАНСТВА**

**Шестаков А.А., Жиров В.К.  
Полярно-альпийский ботанический сад-институт КНЦ РАН  
Апатиты, <v\_zhirov\_1952@mail.ru>**

В докладе представлен новый подход к математическому описанию особенностей (точнее, специфических геометрических эффектов) зрительного восприятия человеком окружающего пространства, опирающийся на строение человеческого глаза. Обсуждаемые эффекты человеческого восприятия сами по себе известны давно, более того, их пытаются по возможности регулярно использовать в изобразительном искусстве, архитектуре, ландшафтном дизайне и учитывать во многих других областях деятельности человека (см., например, [1÷4, 7]).

При созерцании реального (физического) пространства его двумерный образ в полном соответствии с оптическими законами формируется на сетчатке глаза. Возникающее нервное возбуждение фоторецепторов сетчатки через зрительный нерв и проводящие пути центральной нервной системы транслируются в головной мозг. В результате сложных и пока не ясных психофизических и биохимических процессов в зрительных центрах головного мозга возникают зрительные ощущения. Эти ощущения осознаются нами как трехмерный образ обозреваемого в данный момент окружающего нас физического пространства (т.е. совокупности зрительных образов различаемых объектов физического мира в их естественной пространственной взаимосвязи). Пространство зрительного восприятия человека, которое в психологии принято называть перцептивным пространством, может, вообще говоря, значительно отличаться от отображаемого реального пространства. Эти различия обычно связывают с тем, что в формировании зрительного образа существенную роль играют сопутствующие зрительной сенсорно-моторная информация и осязательно-кинестетические представления, накопленные в результате индивидуального позитивного опыта взаимодействия с окружающим миром.

Традиционно (на феноменологическом уровне представлений) с геометрической составляющей искажений, характерных для перцептивного пространства, принято связывать ряд мыслимых психофизических процессов, получивших название механизмов константности. К ним, в частности, относят механизм константности величины, механизм константности формы и механизм константности цвета [5]. Первый из механизмов обеспечивает увеличение видимых размеров более удаленных предметов и уменьшает размеры слишком близко расположенных к наблюдателю предметов. Второй из названных механизмов предназначен для аналогичной трансформации формы объектов. В свою очередь, механизм константности цвета позволяет фиксировать цветоощущение от хорошо знакомых предметов в известном диапазоне изменения общей освещенности обозреваемого пространства. Общепринятой является также традиция относить все без исключения характерные отличия перцептивного пространства на счет преобразующей деятельности специальных отделов головного мозга [5].

Ни в коей мере не пытаясь подвергнуть сомнению ведущую роль головного мозга человека в процессе формирования трехмерного перцептивного пространства на основе двумерного ретинального (т.е. сетчатого) образа, отметим следующее. Механизмы константности и связанные с ними эффекты кажущегося увеличения при некоторых условиях видимых размеров более удаленных предметов или возникновение зрительного ощущения обратной перспективы, хорошо известные в психологии и изобразительном искусстве, можно (естественно, в принципе) объяснить, опираясь лишь на “геометрию” сетчатки глаза. Для достижения указанной цели достаточно принять в качестве рабочих следующие предположения:

- (а) ретинотопический принцип организации сенсорных путей зрительной системы человека;
- (б) оптическую систему человеческого глаза считать эквивалентной простой оптической системе с одной преломляющей поверхностью;
- (в) допустить истинность гипотезы о корпускулярной природе ощущения величины линейных размеров ретинального образа.

Предположение (а) в действительности является известным физиологическим фактом. Гипотеза (в) представляется логичной в силу дискретной структуры фоторецепторов сетчатки человеческого глаза и ретинотопического принципа организации сенсорных трактов зрительной системы человека. На предположении (б) остановимся более подробно.

#### **Модель оптической системы человеческого глаза.**

Роговица, водянистая влага, хрусталик и стекловидное тело являются преломляющими свет средами и совместно образуют оптическую систему глаза. По А. Гульстранду она представляет собой центрированную оптическую систему. Сетчатка выстилает в виде тонкой сферической поверхности примерно 2/3 внутренней полости глазного яблока. Диаметр сетчатки “среднего” глаза составляет примерно 23 мм. Оптическая ось проходит через центры преломляющих поверхностей роговицы и хрусталика. Задний фокус лежит на сетчатке, в месте её пересечения с оптической осью. Расстояние между передней и задней главными плоскостями системы составляет не более 0,28 мм, причем первая из них отстоит (вдоль оптической оси) от внешней поверхности роговицы глаза на 1,47 мм [6]. Сказанное (с учетом механизма аккомодации) позволяет заменить две главные плоскости оптической системы в модели Гульстранда одной эквивалентной, касающейся продолжения сферической поверхности сетчатки перед хрусталиком.

#### **Численная оценка линейных трансформаций.**

Рассмотрим схему формирования ретинального образа одномерного линейного объекта, расположенного вертикально и нормально относительно оптической оси  $OO$  глаза (Рис. 1). Объект разместим так чтобы видимый его угловой размер превышения над “горизонтом” был равным  $\psi$ , а угол от “горизонта” до основания –  $\varphi$ . Изображение объекта на сетчатке будет представлять собой направленную дугу. Образу части объекта, расположенной над  $OO$ , сопоставим (картинную) плоскость  $VV$  таким образом, чтобы она отстояла от узловой точки на расстояние  $L_0^\psi$ , равное расстоянию от вершины ретинального образа до главной плоскости оптической системы глаза. Построенную плоскость  $VV$  назовем плоскостью висты. Ясно, что она определена однозначно и обладает свойствами:

- 1) угловые размеры соответствующих размеров части объекта и его

ретинального и ренессансного (т.е. на плоскости висты) образов совпадают;

2) длина ренессансного образа при этом совпадает с превышением  $h_\psi$  вершины ретинального образа над оптической осью. Все сказанное, естественно, относится и к отображениям другой части объекта, видимой под горизонтом, только в этом случае плоскостью висты будет  $V'V'$ . За линейные размеры ретинального и ренессансного образов возьмем их геометрические длины.

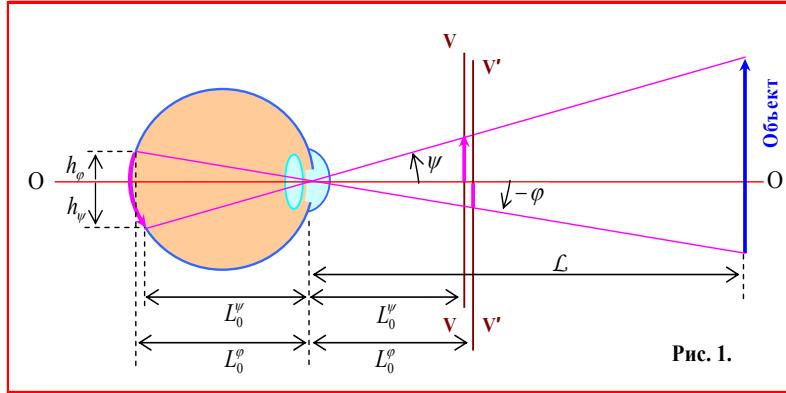


Рис. 1.

В качестве численной оценки геометрических искажений объекта естественно взять коэффициент линейной трансформации  $K_\ell(\psi, \varphi)$ , который определим как отношение длины ретинального образа к длине соответствующего образа висты. Не составляет особого труда видеть, что наш коэффициент трансформации, зависит от формы сетчатки и определяется

$$K_\ell(\psi, \varphi) = \frac{\psi + \varphi}{\sin(\psi + \varphi) \cdot \cos(\psi - \varphi)}, \quad (1)$$

причем в предельных случаях его поведение описывается следующими соотношениями

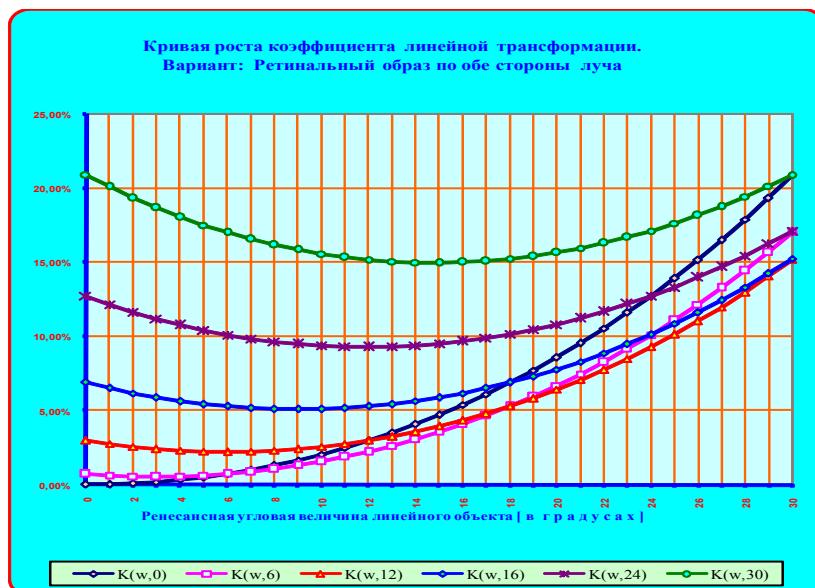
$$\lim_{\varphi \rightarrow 0} K_\ell(\psi, \varphi) = \frac{2\psi}{\sin 2\psi}, \quad \lim_{\varphi \rightarrow 0} K_\ell(\psi, \varphi) = \frac{2\varphi}{\sin 2\varphi}, \quad \lim_{\substack{\varphi \rightarrow 0 \\ \psi \rightarrow 0}} K_\ell(\psi, \varphi) = 1.$$

Из выражения (1) немедленно вытекают три важных следствия: (а) линейный размер ретинального образа линейного объекта всегда превосходит по своей величине аналогичный размер образа висты; (б) величина этого линейного размера является однозначной функцией угловых размеров  $\psi, \varphi$  обозреваемого объекта и радиуса сетчатки; (в) величина линейной деформации ретинального образа объекта по сравнению с его изображением в плоскости соответствующей висты имеет различную интенсивность для

разных областей сетчатки.

### Анализ результатов и выводы.

Функциональный профиль приращений коэффициента линейных трансформаций  $K_\ell(\psi, \varphi)$ , отвечающий ситуации Рис.1, представлен графиками:



Приведенные графики иллюстрируют тот факт, что при постоянных  $\varphi \neq 0$  все без исключения функции профиля имеют явно выраженные локальные минимумы, причем “выраженность” этих минимумов возрастает с ростом угла  $\varphi$ . Содержательно это означает следующее. Для каждого фиксированного угла  $\varphi$  существует такая область изменения  $\psi$ , в которой прирост коэффициента трансформации с ростом  $\psi$  (т.е. с приближением объекта) уменьшается. Но, с другой стороны, в силу возрастания  $\psi$ , должна возрастать и величина ретинального образа, поскольку при этом растет размер ренессансного образа в плоскости висты. В результате одновременно действуют две противоположные тенденции. При этом возможны три варианта. Если названные тенденции компенсируют друг друга, то воспринимаемая глазом линейная величина объекта будет оставаться неизменной с изменением угла  $\psi$ , что должно восприниматься как результат

реализации механизма константности величины. Если же с ростом  $\psi$  преобладает тенденция уменьшения прироста коэффициента трансформации, то это может породить видение в обратной перспективе. И, наконец, если преобладает вторая тенденция над первой, то видение должно соответствовать привычной ренессансной системе.

В терминах абсолютных величин ретинального образа эти зависимости выглядят так:



Здесь точка пересечения кривых, очевидно, определяет область (псевдо) константности величины. Эта же точка является и своеобразной точкой “возврата”, поскольку для каждой данной упорядоченной пары углов  $\langle \varphi_1^*, \varphi_2^* \rangle$  фиксирует границу раздела между зоной дистанций (до объекта) ренессансного видения и зоной дистанций видения в обратной перспективе.

Суммируя сказанное, особо отметим следующее:

- Отказ от планарной формы сетчатки позволяет, даже без привлечения несомненно важных физиологических особенностей строения глаза, объяснить большую часть геометрических эффектов зрительного восприятия человека, включая достаточно тонкий эффект объединения нескольких точек зрения на обозреваемое пространство.
- Использование плоскости висты в качестве реперной системы отсчета, обеспечивает объективность количественных оценок геометрических трансформаций, свойственных человеческой системе зрительного восприятия окружающего мира.

## **Список литературы**

1. Архейм Р. Искусство и визуальное восприятие. М.: Прогресс. 1974.
2. Иодо И.А., Потаев Г.А. Основы градостроительства и территориальной планировки.– Минск: Универсалпресс. 2003.
1. Крылов А.А. Человек в автоматизированных системах управления. Л.: Изд-во ЛГУ. 1972.
2. Сычева А.В. Ландшафтная архитектура: Учеб. пособие для вузов. М.: Изд-во Оникс. 2006.
4. Раушенбах Б.В. Системы перспективы в изобразительном искусстве: Общая теория перспективы. М.: Наука. 1986.
5. Хаппе В. Офтальмология. М.: МЕДпресс-информ. 2005.
6. Хейдметс М. Феномен персонализации среды: Теоретический анализ // Средовые условия групповой деятельности. Таллин: Изд-во ТПИ. 1988.

## **ОБ УПРАВЛЯЕМОМ ФОРМИРОВАНИИ СТРУКТУРЫ ЛОКАЛЬНО–КОМПАКТНЫХ ПОПУЛЯЦИЙ ДРЕВЕСНЫХ РАСТЕНИЙ**

**Шестаков А.А.**

**Полярно-альпийский ботанический сад-институт КНЦ РАН  
Апатиты, <v\_zhirov\_1952@mail.ru>**

Проблемы целевого формирования желаемой структуры эксплуатируемых биологических популяций представляются важнейшими задачами в сфере хозяйственной деятельности человека. Разработка математически обоснованных методов решения названных задач предполагает в конечном итоге (на основе выверенных интенсивных технологий) более рачительное и более полное использование потенциала отдельных растений и их сообществ.

Предлагаемый вниманию доклад является логическим продолжением работы [2]. В нем для стохастической модели естественного движения локально-компактных популяций *Pinus Sylvestris* L. марковского типа обоснованы способы и средства регулирования (управления), позволяющие таким образом направить процесс развития популяции, чтобы он приводил к заранее заданной (“оптимальной” или рациональной) предельной структуре популяции. Это не только расширяет область применения названной стохастической модели на эксплуатируемые популяции, но и в принципе позволяет математически обосновать комплекс мероприятий, обеспечивающий в пределе “целевую” структуру популяции.

Подробный анализ общего решения модели (5) из [2] позволяет констатировать, что процесс регулирования структуры моделируемой популяции может быть обеспечен как путем модификации матрицы потока выходов из статусных групп  $\Lambda$  популяции, так и посредством варьирования

матрицы переходных вероятностей  $\mathbf{Q}$  (см., например, [1, 3]).

Из возможных способов регулирования наиболее подробно был проанализирован метод принудительного регулирования переходов между статусными группами (классами эквивалентности). Это обусловлено тем, что процедура “регулирования переходов” представляется наиболее простым и приемлемым с практической точки зрения типом вмешательства в процессы движения древесных популяций, более того, этот тип вмешательства всегда можно представить как минимальное внешнее регулирование. В свете сказанного задача регулирования предельной структуры популяции может быть сформулирована так. Задан вектор  $\mathbf{f}(\ast)$ , оптимальный для некоторого критерия структуры рассматриваемой популяции  $\mathcal{L}(\ast)/\pi(\ast)$ . Требуется найти такое регулирующее воздействие, которое при постоянстве параметров воспроизводства численности популяции процесс движения популяции приводило бы в пределе к структуре  $\mathcal{L}(\ast)/\pi(\ast)$  (определенной целевым вектором  $\mathbf{f}(\ast)$ ).

Предположим теперь, что требуемое регулирование нашей популяции трансформирует (известную) матрицу  $\mathbf{Q}$  модели (5) из работы [2] в стохастическую (неизвестную на данном этапе рассуждений) матрицу  $\mathbf{Q}'$ . Тогда систему матричных уравнений

$$\begin{cases} \mathbf{Q}' \cdot \mathbf{e} = \mathbf{e}; \\ \mathbf{f}(\ast) \cdot [\Lambda \cdot (\mathbf{Q}' - \mathbf{I})] + c \cdot \mathbf{s}(\ast) = \mathbf{0}; \\ c = \mathbf{f}(\ast) \cdot \mathbf{w}, \end{cases}$$

можно интерпретировать как систему линейных уравнений относительно неизвестных значений элементов искомой матрицы  $\mathbf{Q}'$ . (Заметим, что матрица  $\mathbf{Q}'$  отличается от матрицы  $\mathbf{Q}$  для естественного движения популяции либо всеми, либо частью своих элементов.)

Поскольку  $\mathbf{Q}'$  является стохастической матрицей, то всегда справедлива система неравенств:  $\mathbf{f}(\ast) \cdot \Lambda \cdot \mathbf{Q}' \geq \mathbf{0}$ . По этой причине, в случае, когда число требуемых определению элементов матрицы  $\mathbf{Q}'$  больше  $2n - 1$ , на множестве решений возможна постановка задач оптимизации (например, тогда имеет смысл говорить о задаче нахождения таких решений, которые минимизируют невязки  $\mathbf{Q} - \mathbf{Q}'$ ). Если матрица  $\mathbf{Q}$  и искомая регулирующая матрицы  $\mathbf{Q}'$  различаются менее чем на  $2n - 1$  элементов, то вектор, описывающий целевую структуру локально-компактной популяции, может оказаться недостижимым вектором.

Примером управления, при факторе  $\mathbf{f}(\ast) = (0,12; 0,21; 0,15; 0,10; 0,10; 0,07; 0,24)$  целевой структуры, для опи-

санной в [2] популяции **E01** является минимальное управление:

$$Q' - Q = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0,30 & 0 & 0 & 0 & -0,30 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -0,10 & 0 & 0 & 0 & 0,05 & 0,05 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0,05 & -0,05 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Движение популяции **E01** при данном управлении представлено на рисунке 1.

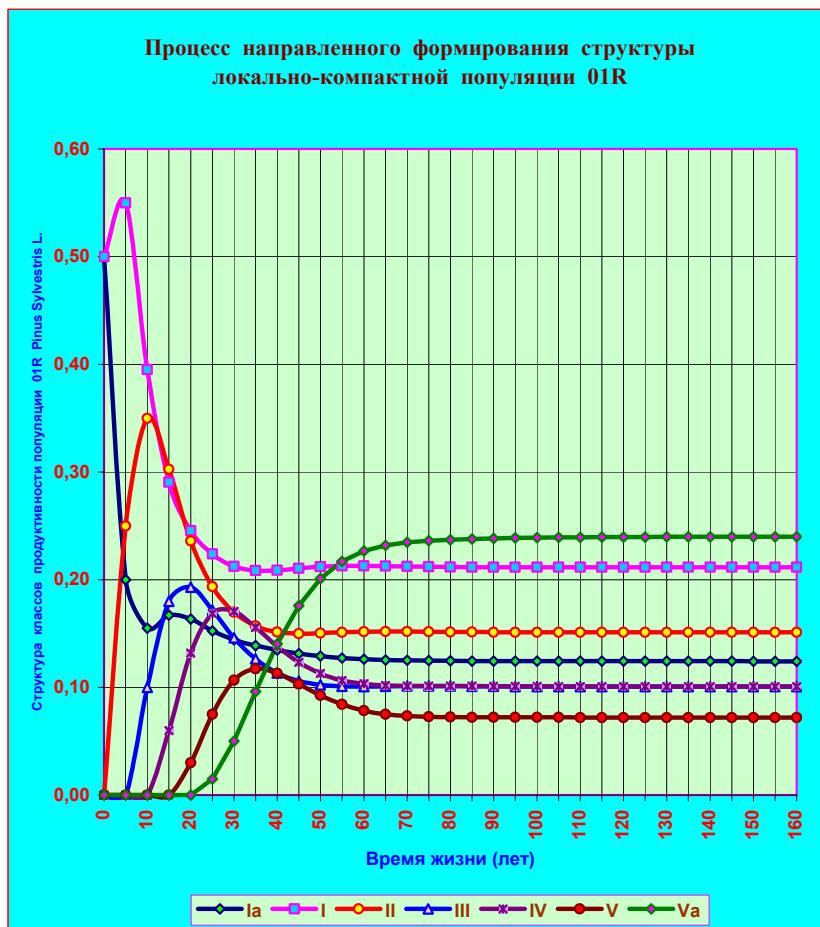


Рис. 1. Вынужденное движение ЛКП Е01 при управлении  $\mathbf{Q} - \mathbf{Q}'$ .

Результаты моделирования:

Время становления 95 лет: Прелельная численность  $M(95) = 16000$ ;  
Фактор структуры  $f(95) = (0,12; 0,21; 0,15; 0,10; 0,10; 0,07; 0,24)$ .

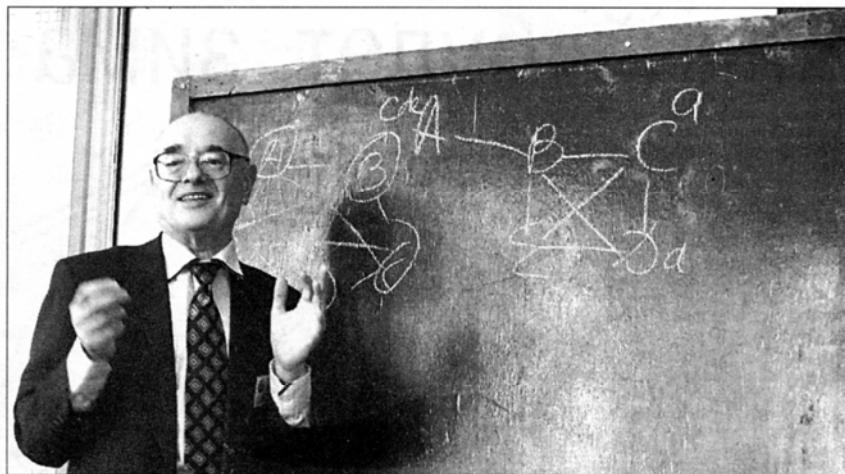
В заключение отметим, что все термины, понятия и обозначения, использованные в настоящем докладе, полностью согласованы с терминологией и нотацией работы [2].

### Список литературы

1. Гантмахер Ф.Р. Теория матриц. М.: Наука. Гл. ред. физ.-мат. лит. 1988.
2. Шестаков А.А. Стохастическая модель естественного движения локально-компактных популяций *Pinus Sylvestris L.* // Настоящий сборник.
3. Шестаков А.А., Чирков М.К. Обобщенные конечные автоматы: Поведенческая эквивалентность и проблемы оптимизации. Апатиты: Изд-во КНЦ РАН. 1992.

## ХРОНИКА





Геннадий Савостянов объясняет, как появляется рак, с точки зрения математики.

# Математика против рака

Апатиты. Что обсуждали ученые в Геологическом институте

Четвертая всероссийская научная школа шла два дня. Ученые выступали с докладами по математике. Их исследования - чистая наука. Но они могут быть полезны в нашей с вами жизни.

Екатерина Малова,  
текст и фото

## НОВЫЙ ПОДХОД

Геннадий Савостянов из Санкт-Петербурга выступил с докладом первый. Он врач по образованию, онколог по специальности.

- Судьба так сложилась, что мне пришлось сблизиться с геологией и математикой, - сказал Геннадий Савостянов. - Мы пытаемся понять, что такое рак. Онкологи говорят, это дезорганизация структуры клеток. Основной способ изучения клеток

сегодня - делать срезы ткани и рассматривать их в микроскоп. Но на этом срезе клетки плоские, они не представляют перед ученым в том виде, в каком существуют на самом деле - в трехмерном пространстве. И отсюда наше бессилие перед раком.

Ученый показал компьютерную программу, которая позволяет создавать трехмерную модель клеток ткани. В будущем она, возможно, облегчит работу врачей, но пока находится в стадии разработки.

## ПОЛЕЗНО И ИНТЕРЕСНО

Исследования математиков можно применять не только в биологии. Ярослав Кучериненко - кристаллограф из МГУ, занимается наукой, но его исследования могут пригодиться:

- Они нужны тому, кто занимается драгоценными камнями, коллекционирует их. Если человек хочет быть не просто знатоком, а профессионалом,

ему было бы полезно знать, как кристаллы устроены внутри и почему.

Математика может быть не только полезной, но и интересной. Юрий Войтеховский, директор Геологического института, показал, как математические формы применяются в природе. Например, иглы колючей розы, парашюты одуванчика, пыльца растений и вирусы имеют форму фуллерена - выпуклого многогранника с пяти- или шестиугольными гранями.

Александр Шестаков, доктор физико-математических наук из Кольского научного центра, показал, как можно просчитать состояние леса через 95 лет. Для этого он провел сложные вычисления с матрицами.

- Математика позволяет моделировать и прогнозировать развитие леса. Мои исследования можно применять в ландшафтном дизайне, сельском хозяйстве, - сказал Александр Шестаков.

# Математика победит болезни

*“Есть ученики, которые не пропустили ни одной Школы. Это говорит о том, что она популярна, чему в немалой степени способствует демократичность её проведения. Профессор общается непосредственно с учениками в узком кругу, за столом, глядя в глаза. Получается задушевный разговор, позволяющий объединить людей разных поколений”.*

## Школа для учёных

Речь идёт о Всероссийской научной школе “Математические исследования в кристаллографии, минералогии и петрографии”, которая ежегодно проводится в Геологическом институте КНЦ РАН.

Школа была задумана четыре года назад нынешним директором Геологического института Юрием Войтеховским. Этого его слова приведены в начале статьи. Будучи человеком науки, Юрий Леонидович особо интересовался тем, как можно применять математику в различных науках о земле. Вокруг него объединились единомышленники, молодые, талантливые студенты местных вузов. Они помогли организовать группу, которая послужила ядром сегодняшней Школы.

Теперь в Апатиты ежегодно приезжают учёные с мировым именем, чтобы поделиться знаниями с молодым поколением. Многочисленной конференции, конечно, не назовёшь, поскольку слишком специализирована и узка тема. Да так ли уж важно количество? Главное, чтобы качество было на высоте. А с этим проблем не было.

## Фуллереновый мотив

Работа Школы из года в год становится возможной благодаря финансовой поддержке Комиссии РАН по работе с молодёжью. В этом году впервые помощь была оказана департаментом экономического развития правительства Мурманской области. Похо-



положить, что всё в природе накладывается на некую матрицу, то есть существует определённая математическая модель для любого явления. А если так, то, зная и учитывая все условия, можно предсказывать будущее. Пусть не со стопроцентной уверенностью, но с большой долей вероятности.

## Рак можно одолеть

С каждым годом математических исследований в области биологии, связанных с математикой, становится больше. Организаторы даже начинают подумывать, не внести ли изменения в название Школы.

В качестве одного из лекторов в этом году был приглашён доктор биологических наук, ведущий научный сотрудник Института эволюционной физиологии и биохимии имени И.М. Сеченова РАН Геннадий Савостьянов.

— Я онколог, — рассказывает Геннадий Александрович, — и занимаюсь изучением устройства биологических тканей, в частности трёхмерным строением тканей в норме и тем, как они перестраиваются в патологии. Сейчас ткани исследуются в основном по срезу. Видно только то, что попало на срез, а трёхмерная структура не видна. Она до сих пор неизвестна, что и тормозит наши попытки выяснить, как изменяются ткани, в частности, при раке.

В кристаллографии проблема трёхмерного строения атомарных решёток уже давно в центре внимания, знание этих решёток позволяет понять многие свойства твёрдых тел. Возможно, трёхмерная модель поможет и в биологии.

Марина Мязина

## **ФОТОРЕПОРТАЖ**







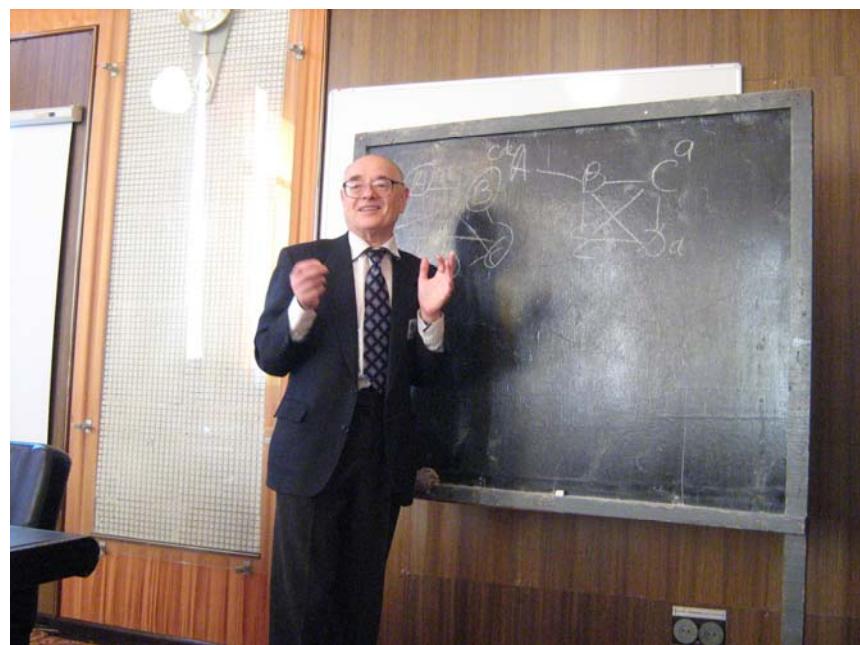


















## СОДЕРЖАНИЕ

<b>Войтеховский Ю.Л.</b> Приветствие участников школы.....	3
<b>МАТЕМАТИЧЕСКИЕ ИССЛЕДОВАНИЯ В КРИСТАЛЛОГРАФИИ, МИНЕРАЛОГИИ И ПЕТРОГРАФИИ</b>	
<b>Войтеховский Ю.Л.</b> Модальный анализ горных пород по Делессу-Розивалю-Глаголеву : к истории вопроса .....	5
<b>Голубева Э.Д.</b> Математические методы классификации состава пород (минералов) и анализ факторов вариации элементов состава в геологических системах .....	12
<b>Кучериненко Я.В.</b> Матрицы 4x4 преобразований гексагональных символов .....	18
<b>Кучериненко Я.В.</b> Повороты симметрии в трёхмерном и четырёхмерном пространствах .....	25
<b>Леоненко Е.В., Урусов В.С., Еремин Н.Н.</b> Компьютерное моделирование локальной структуры и свойств бинарных твердых растворов .....	33
<b>Маринин Е.С.</b> О числе сторон ячеек биправильного разбиения плоскости .....	38
<b>Наумкина Н.И., Ильичёва О.М.</b> Аспекты моделирования дифракционного профиля кристобалита .....	42
<b>Потапов И.Л.</b> О моделировании формы циркона .....	48
<b>Селятицкий А.Ю., Хлестов В.В.</b> Математическое моделирование в трактовке сложных полиминеральных ассоциаций в контактово-метаморфических ореолах .....	50
<b>Сластников В.В., Пунин Ю.О., Штукенберг А.Г.</b> Генетическое содержание статистических характеристик осцилляционной зональности в минеральных агрегатах конкреционно-секреционного типа .....	57
<b>Смирнова Н.Л.</b> О количественных отношениях в системах природы .....	60
<b>Степенщиков Д.Г.</b> О гранях кристалла .....	67
<b>МАТЕМАТИЧЕСКИЕ ИССЛЕДОВАНИЯ В БИОЛОГИИ</b>	
<b>Бельская Л.В., Голованова О.А.</b> Математическое моделирование процессов патогенного минералообразования в ротовой полости человека .....	70
<b>Бельская Л.В., Голованова О.А., Ломиашвили Л.М., Борисенко М.А.</b> Особенности микрокристаллизации ротовой жидкости человека .....	71
<b>Войтеховский Ю.Л., Моргунова О.В.</b> Геометрические мотивы в морфологии рыб Tetraodontiformes .....	78
<b>Войтеховский Ю.Л., Моргунова О.В.</b> Фрактальность крон <i>Betula pubescens Ehrh.</i> .....	85
	93

<b>Денисов Д.Б.</b> Использование многомерных статистических методов в экологических исследованиях.....	101
<b>Лемешева С.А., Голованова О.А., Вотяков С.Л.</b> Термические характеристики костной ткани человека – «нормальной» и измененной при коксартрозе .....	114
<b>Савостьянов Г.А.</b> Биологические ткани как клеточные решетки	120
<b>Тимофеева М.Г.</b> Биологическая реализация разбиения двумерной сферы .....	126
<b>Шестаков А.А.</b> Стохастическая модель естественного движения локально-компактных популяций <i>pinus sylvestris</i> .....	134
<b>Шестаков А.А., Жирор В.К.</b> Математическое описание геометрических особенностей перцептивного пространства .....	139
<b>Шестаков А.А.</b> Об управляемом формировании структуры локально-компактных популяций древесных растений .....	145
<b>Хроника</b> .....	149
<b>Фоторепортаж</b> .....	152

*Пруды IV Всероссийской научной школы*

*“Математические исследования в кристаллографии, минералогии  
и петрографии”*

*г. Апатиты, 27-28 октября 2008 г.*

*Научное издание*

*Рекомендовано к печати Ученым советом Геологического института КНЦ РАН  
и Советом Кольского отделения РМО*

*Издано при финансовой поддержке Комиссии РАН по работе с молодежью  
(программа “Поддержка молодых ученых - 2008”) и Департамента экономического  
развития при Правительстве Мурманской области.*

*Отпечатано в ЗАО “КСМ”*

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

*Приложение 100 экз.*

