

**Геологический институт Кольского НЦ РАН
Комиссия по работе с молодёжью РАН
Кольское отделение РМО**

**ТРУДЫ
VII Всероссийской научной школы
«Математические исследования в естественных науках»,
посвящённой 300-летию со дня рождения М.В. Ломоносова**

Апатиты, 3-6 октября 2011г.



*Геологический институт КНЦ РАН
Комиссия по работе с молодёжью РАН
Кольское отделение РМО*

*Труды VII Всероссийской
(с международным участием) научной школы
“Математические исследования
в естественных науках”, посвящённой
300-летию со дня рождения М.В. Ломоносова*

Апатиты, 3-6 октября 2011 г.



Апатиты, 2011

УДК 548.12 + 549.21 + 552.122

ISSN 2074-2487

Математические исследования в естественных науках. Труды VII Всероссийской (с международным участием) научной школы, посвящённой 300-летию со дня рождения М.В. Ломоносова. Апатиты, Геологический институт Кольского НЦ РАН, Кольское отделение РМО, 3-6 октября 2011 г. / Ред. Ю.Л. Войтеховский. – Апатиты: Изд-во К & М, 2011. - 168 с.

Сборник содержит материалы ежегодной Всероссийской научной школы «Математические исследования в естественных науках», проводимой Геологическим институтом Кольского НЦ РАН и Кольским отделением РМО и объединяющей специалистов, творчески применяющих математические методы в естественных науках. VII школа охватила пленарные и молодёжные доклады о применениях классических (фрактальный анализ, численное моделирование и др.) и эвристических методов для описания структур и процессов в геологии, геофизике и биологии. Издание представляет интерес для геологов широкого профиля, геофизиков, биологов, а также аспирантов и студентов соответствующих специальностей.

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

Школа поддержана Комиссией РАН по работе с молодёжью

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

Научный редактор: проф., д.г.-м.н. Ю.Л. Войтеховский
Компьютерный дизайн: А.А. Тележкин, Л.Д. Чистякова
Художественное оформление А.И. Марковой
Фоторепортаж: Тележкин А.А.

© Коллектив авторов, 2011

© Российское минералогическое общество, Кольское отделение, 2011

© Учреждение Российской академии наук Геологический институт Кольского научного центра РАН, 2011

300-летию со дня рождения М.В. Ломоносова посвящается



**«Математику уже затем учить следует,
что она ум в порядок приводит.»**

М.В. Ломоносов

Портрет М.В. Ломоносова работы А.И. Лебедева.

Содержание

Предисловие редактора	6
---------------------------------	---

ПЛЕНАРНЫЕ ДОКЛАДЫ

Войтеховский Ю.Л. Категории формы и структуры в естественных науках	8
Ковалёв М.Д. Геометрия шарнирных конструкций	20
Козелов Б.В., Рипдал К., Клумов Б.А., Мингалёв О.В., Кубе Р. Эволюция мультифрактальной структуры транзиентов в распределённых системах	27
Козелов Б.В. Природа полярных сияний и подходы к описанию структуры аврорального свечения	32
Макаренко Н.Г. Фракталы и мультифракталы: три ипостаси теоремы о неподвижной точке	48

МОЛОДЁЖНАЯ СЕКЦИЯ

Амосова О.Е. Компьютерное моделирование структурных характеристик сыпучих смесей	64
Ахметов О.И., Мингалёв И.В., Мингалёв О.В. Численная модель распространения низкочастотных сигналов в земной атмосфере	70
Бельская Л.В., Голованова О.А. Особенности распределения аминокислот в слюнных камнях человека по данным кластерного анализа.	71
Бельская Л.В., Шукайло Е.С., Голованова О.А. Применение математических методов при анализе ротовой жидкости спортсменов	75
Боровичёв Е.А. Методы количественной биологии при анализе флоры печёночников Лапландского заповедника	79
Гайсина Л.Г. Подсчёт запасов нефти в юрских отложениях Нижневартовского свода	83
Голованова О.А. Математическое моделирование кристаллизации оксалата кальция	86
Голубева Э.Д. Математические методы изучения магматизма Тихого океана	90
Губернаторова Т.Н. Органическое вещество в водной среде: моделирование кинетики биодеструкции.	94
Дёмин В.И. Причинно-следственные связи между солнечной активностью и метеорологическими параметрами	98

Мельник М.Н., Мингалёв О.В. Распараллеливаемый алгоритм численного решения двумерной периодической краевой задачи для уравнения Пуассона методом быстрого преобразования Фурье	104
Орлов К.Г., Мингалёв И.В., Родин А.В. Численное моделирование общей циркуляции атмосферы Венеры с использованием регулярной и нерегулярной пространственных сеток	113
Пушкин А.А., Белов Р.В., Римкевич В.С. Автоматизация расчётов кинетических характеристик физико-химических процессов при переработке силикатного сырья фторидным методом	118
Пчёлкин В.В. Автоматизация поиска редких событий в экспериментальных рядах на примере отбора всплесков Q-типа методами теории распознавания образов	124
Смирнова Н.Л. Формулы из разных символов	129
Степенщиков Д.Г. Предельные группы симметрии в живой природе	131
Шутов А.В. О различных характеристиках непериодичности разбиений	135
Югай В.С., Даувальтер В.А. Применение статистических методов при исследовании донных отложений	140
Ярыгин О.Н. Матричный алгоритм проверки реализуемости гранного символа	143
Ярыгин О.Н. О структуре множества полиэдров	148
Ярыгин О.Н. Уравнение Эбергардта и другие диофантовы уравнения полиэдров	152
Фоторепортаж	157

ПРЕДИСЛОВИЕ РЕДАКТОРА

«Природа написана языком математики» (Г. Галилей). «Математику уже затем учить следует, что она ум в порядок приводит» (М.В. Ломоносов). Кажется, никто не спорит с этими мудрыми сентенциями. Но проблемы начинаются, как только возникает потребность описать явление или процесс средствами математики. Не так-то это просто. Нужен навык, умение, сноровка, одним словом – нужна школа. С 3 по 6 октября под эгидой Геологического института КНЦ РАН и Кольского отделения РМО при финансовой поддержке Комиссии по работе с молодёжью РАН состоялась VII Всероссийская (с международным участием) научная школа «Математические исследования в естественных науках», посвящённая 300-летию со дня рождения нашего великого соотечественника М.В. Ломоносова.

В программе школы – 30 научных докладов о применениях математики в самых различных областях естествознания, многие – на стыках наук, что особо ценно. В работе школы приняли участие пленарные докладчики (доктора наук, профессора) и научная молодёжь (молодые научные сотрудники, аспиранты, студенты) из 9 городов и 17 организаций России: **Апатиты** (Геологический институт КНЦ РАН, Полярный геофизический институт КНЦ РАН, Институт проблем промышленной экологии Севера КНЦ РАН), **Москва** (Институт космических исследований РАН, Объединённый институт высоких температур РАН, Институт элементоорганических соединений РАН, Институт водных проблем РАН, Московский государственный университет, Московский физико-технический институт, Российский государственный университет нефти и газа), **Санкт-Петербург** (Главная Пулковская астрономическая обсерватория РАН), **Владимир** (Государственный гуманитарный университет), **Тольятти** (Государственный университет), **Сыктывкар** (Институт геологии Коми НЦ УрО РАН), **Омск** (Омский государственный университет), **Благовещенск** (Институт геологии и природопользования ДВО РАН), **Владивосток** (Дальневосточный геологический институт ДВО РАН). Иностранное участие обеспечили коллеги из Университета **Тромсё, Норвегия**. География участников охватила огромную территорию от Тромсё и Апатитов до Благовещенска и Владивостока. Среди организаций – 11 научно-исследовательских институтов РАН и 7 университетов, что говорит о тесном союзе академической и университетской науки, а также фундаментальной науки и образования.

Надеюсь, этот сборник будет интересен широкому кругу специалистов, применяющих математику в естественных науках, а также аспирантам и студентам соответствующих специальностей.

Директор Геологического института КНЦ РАН

Председатель Кольского отделения РМО

Д.г.-м.н., проф.

Ю.Л. Войтеховский

ПЛЕНАРНЫЕ ДОКЛАДЫ



КАТЕГОРИИ ФОРМЫ И СТРУКТУРЫ В ЕСТЕСТВЕННЫХ НАУКАХ

Войтеховский Ю.Л.

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

Применение математических методов в естественных науках ставит вопрос о взаимопонимании специалистами различных дисциплин. Категории формы и структуры – из числа краеугольных. В статье предложены их наиболее общие определения, заимствованные из общей теории систем. Рассмотрены примеры структур из предметной области минералогии и петрографии.

Введение. Современные науки о природе – естественные науки – столь дифференцированы, что понимание друг друга представителями различных дисциплин является реальной проблемой. Применение математических методов к описанию явлений и процессов на первый взгляд спасает ситуацию, ведь «природа написана языком математики». Кроме того, история науки убедительно показывает, что удачное применение математики обычно знаменует прогресс той или иной области знания. Всё это так. Но остаётся проблема сращивания понятийной базы естественных наук. Так, важнейшими являются категории формы и структуры, плохо определяемые или даже никак не определяемые в отдельных дисциплинах. Представляется, что здесь полезны достижения общей теории систем. Разные авторы, в зависимости от профессиональной принадлежности, определяют форму и структуру по-разному. Для общего употребления нами предлагаются следующие обобщения бытующих определений.

Форма (организация, конфигурация) – совокупность всех межэлементных отношений в системе. Примечание: ясно, что отношения определяются через ранее определённые элементы; при всей важности элементов акцент сделан на отношениях ради удобства последующего алгебраического описания и сравнения различных структур; определение элементов и отношений зависит от целей исследования, в этом смысле форма системы относительна; среди отношений есть особо важные, устойчивые – связи, устранение хотя бы одной из них делает систему принципиально другой или разрушает её.

Структура – совокупность связей в системе. Примечание: иначе говоря, структура – остов системы, её инвариант в системе отношений с другими выделенными системами; восстановление одного по другому – взаимно дополнительные задачи, наполненные конкретными физическими, химическими, минералогическими, биологическими... смыслами в различных естественных науках.

Далее приведены лишь три примера определения структур в системах и процессах из предметной области минералогии и петрографии. Все три – эвристичны, т. е. не выводимы из устоявшихся узко-специальных представ-

лений, но требуют непредвзятого взгляда на возможные способы их математического описания, при этом принципиально не противоречащие этим представлениям. Системы могут быть пространственно протяжёнными и мыслительными. На наш взгляд, реальны те и другие. Форма и структура – всегда идеальный концепт. Для чего нужен поиск «естественно определяемых» структур в природных системах и процессах? По нашему мнению, в этом и состоит предельное понимание «замыслов» природы, особо интересных для анализа, когда они с точностью до изоморфизма совпадают в системах из различных областей естествознания.

Гранулометрия. Пусть E – некоторое множество и $\mathfrak{S} \subset \mathfrak{R}(E)$. Гранулометрия на \mathfrak{S} есть всякое однопараметрическое семейство ψ_λ ($\lambda \geq 0$) отображений \mathfrak{S} в себя, удовлетворяющее условиям:

- 1) $\psi_\lambda(A) \subset A$ для любых $\lambda \geq 0$ и $A \in \mathfrak{S}$,
- 2) $A, B \in \mathfrak{S}, A \subset B \Rightarrow \psi_\lambda(A) \subset \psi_\lambda(B)$ для любых $\lambda \geq 0$,
- 3) $\lambda \geq \mu \geq 0 \Rightarrow \psi_\lambda(A) \subset \psi_\mu(A)$ для любых $A \in \mathfrak{S}$,
- 4) $\psi_\lambda \times \psi_\mu = \psi_\mu \times \psi_\lambda = \psi_{\max(\lambda, \mu)}$ для любых $\lambda, \mu \geq 0$,
- 5) $(\psi_\lambda \times \psi_\mu) \times \psi_\eta = \psi_\lambda \times (\psi_\mu \times \psi_\eta) = \psi_\lambda \times \psi_\mu \times \psi_\eta = \psi_{\max(\lambda, \mu, \eta)}$ для любых $\lambda, \mu, \eta \geq 0$,
- 6) $\psi_\lambda \times \psi_\lambda = \psi_\lambda$ для любого λ .

Из перечисленных свойств следует, что определённая таким образом «гранулометрия» есть коммутативный и ассоциативный группоид, короче – коммутативная полугруппа, в которой каждый элемент идемпотентен [1]. Но почему мы назвали эту конструкцию гранулометрией? Каково её отношение к технологической процедуре гранулометрического (ситового) анализа, применяемого в геологии к рыхлым отложениям? Оказывается, отношение непосредственное, если под E понимать рыхлую горную породу, \mathfrak{R} – её выделенный объём, \mathfrak{S} – мыслимое многообразие проб из \mathfrak{R} , A и B – некоторые пробы, $\psi(A)$ – процедура ситования пробы A , $\psi_\lambda(A)$ – остаток на сите с ячейкой λ , процедура \times – последовательное выполнение операций (справа налево). Теперь нетрудно убедиться, что свойства 1-6 характеризуют процедуру ситования. Формальный вопрос состоит в том, все ли важные свойства перечислены и нет ли в списке избыточных, выводимых через другие. Предоставляем подумать об этом читателю. По сути процесса стоит добавить, что он реализуется не только в минералогических лабораториях мира. Гораздо масштабнее, буквально по всей поверхности Земли на протяжении миллиардов лет происходит сортировка рыхлого материала, выполняемая реками, озёрами, морями, ветром... Результат фиксируется литологами в разрезах земной коры и используется для решения обратной задачи – восстановления условий и механизмов осадконакопления.

Система минералогии. Р. Декарт в «Рассуждении о методе, чтобы верно направлять свой разум и отыскивать истину в науках» провозгласил анализ и синтез равноправными процедурами мышления. Дополнительные – да. Равноправные – нет. История естественных наук показывает, что расчленение, дробление, выделение элементов осуществляются легче. Лишь в зрелом состоянии каждая из них наилучшим образом, по результатам естественного отбора логических конструкций, осознаёт себя системой с внятно определёнными внутренними и внешними отношениями. Собственно, это и знаменует зрелость научной дисциплины. Минералогия – не исключение...

Классификации. Уже на эмпирической стадии естественные науки систематизируют свои объекты. Определяя, мы отождествляем или различаем их, автоматически попадая в логическую ловушку классификаций – систем с рефлексивными, симметричными и транзитивными отношениями эквивалентности между элементами. Имеет место и обратное: всякая классификация *de facto* порождает отношение эквивалентности «принадлежать одному классу» [14]. Как правило, естественнонаучные классификации далеки от этих формализмов, строятся на «очевидных основаниях», исходя из «здорового смысла». Минералогические – в том числе, базируются на конституционном принципе с акцентом (изначально) на химическом составе или (с открытием фёдоровских групп и рентгеновских методов диагностики) структуре минералов. Длинный ряд авторов следует начать с Я. Берцелиуса (1814-1824), впервые приписавшего минералам химические формулы, и двух первых изданий «Системы минералогии» Дж. Дэна и др. (1837, 1844, рус. 1951, 1953), продолжив современными: Бетехтин, 1950; Поваренных, 1966; Костов, 1971, 1993; Strunz, 1978; Годовиков, 1979, 1983; Семёнов, 1981, 1991; Херблат, Клейн, 1982; Берри и др., 1987; Clark, 1993; Bokij et al., 1994; Vulakh et al., 1995; Бокий, 1997; Anthony et al., 1997; Gaines et al. 1997; и др.).

Главное достоинство любой классификации – строгое определение понятий, обеспечивающее чёткость, непротиворечивость мышления. (К современному определению «минерального вида» есть претензии, но эту проблему мы здесь не обсуждаем.) Классификация может служить основанием для прогнозов (например, различных свойств минералов от их химического состава и структуры) или источником новых проблем (например, о природе «триклинной инверсии» и, вообще, крайне неравномерного распределения минеральных видов по пространственным группам симметрии в трудах А.П. Хомякова). Отдавая должное виртуозам диагностики структур и химических составов минералов, открывателям новых минеральных видов и создателям их классификаций, всё же заметим, что классификация – простейший способ представления системы. Кроме того, по самой сути, классификация – скорее деление целого на части, чем создание целого из частей. Границы классификации – непроницаемы. У представителей разных классов – ничего общего. Удержание в сознании минералогического многооб-

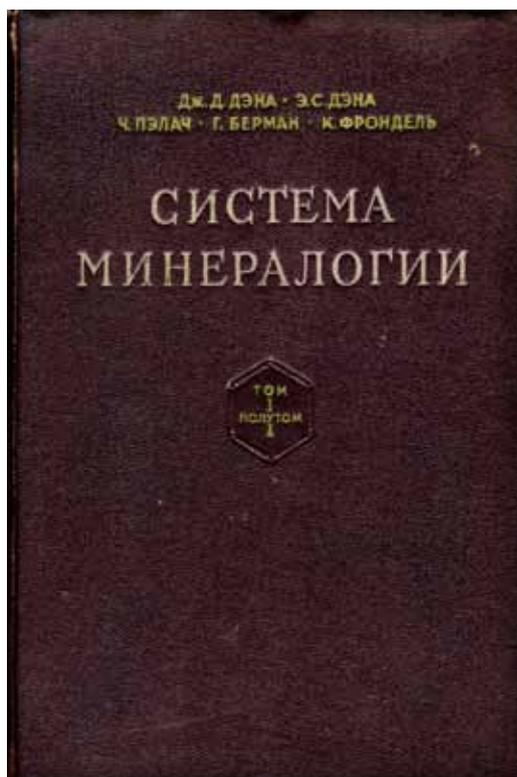
разия как системы требует дополнительного усилия и более общего логического основания.

Пространства толерантности. Система минералогии представима не только как классификация, но и как пространство толерантности с рефлексивным и симметричным отношением между элементами [14]. От классификации его формально отличает отсутствие транзитивности, т. е. транслируемости бинарного отношения по цепочке сравниваемых элементов. И это приводит к совершенно другому представлению системы. Толерантность часто называют частичным сходством из-за следующего примера. Пусть минералы А и Б сходны в том смысле, что содержат хотя бы один общий (для определённости – структурообразующий) химический элемент, Б и В – тоже. Очевидно, А и В могут оказаться не сходными. По этому принципу в виде пространства толерантности можно представить систему минералогии Я. Берцелиуса, основанную на химических составах минералов. Этот взгляд на многообразие химических соединений (не только минералов) впервые предложила и отстаивает Н.Л. Смирнова [11]. Если под сходством понимать наличие общего химического элемента и/или принадлежность к одной пространственной группе, то в пространства толерантности могут быть преобразованы и современные минералогические классификации.

Как и классификации, пространства толерантности требуют строгого определения элементов – иначе невозможно констатировать их сходство или различие. Их принципиальное отличие от классификаций – переходы от одного класса толерантности (см. определение понятия в [14, с. 93]) к другому через общие элементы. Строго говоря, любая классификация – частный, вырожденный случай пространства толерантности, в котором классы не имеют общих элементов [14, с. 100]. Но если таковые имеются – они связывают классы толерантности в систему. Иногда говорят, что при этом «размываются» границы классификации, мыслить о системе, в которой элемент принадлежит сразу многим классам, пересекающимся столь причудливо, что схему не изобразить на листе бумаги – трудно. Но из чего следует, что должно быть просто?

Структуры. Наименее разработано представление о системе минералов как структуре с одним из порождающих отношений между элементами: транзитивного и антирефлексивного строгого порядка; транзитивного, рефлексивного и антисимметричного нестрогого порядка; транзитивного и рефлексивного квазипорядка [14]. Поясним это двумя примерами.

Вспомним нововведение, заявленное в «Системе минералогии» [4]. «Настоящее издание книги явилось по существу совершенно новой работой... Сделаны следующие коренные нововведения: ... новый способ рассмотрения минералов, образующих так называемые серии, заключающийся в описании серии как единого вида» [4, с. 9]. «Минералы, обнаруживающие непрерывное изменение своих свойств с изменением состава, называ-



ются серией и описываются здесь таким же образом, как и вид. В таких случаях естественной минералогической единицей является серия, так как то или иное её произвольное разделение не дает точного представления о частях серии. Плагиоклазы и шпинели представляют собой примеры серий» [4, с. 13]. «В настоящей работе введено понимание минералов как фаз, которые изменяют свой состав в тех или иных естественных пределах, образуя серии, и в соответствии с этим изменяют и свои свойства. За естественную единицу при описании принята серия. И хотя такое единообразное рассмотрение отдельных видов, образующих серию, весьма эффективно в случае бинарных систем, однако сложность некоторых

многокомпонентных систем заставляет считать целесообразным подразделение обширных серий на частные с обоснованно установленными границами состава и раздельное их описание. Эта трактовка считается особенно желательной, хотя она и не подходит в качестве способа представления, отвечающего требованиям описания для некоторых обычных и важных серий, например таких, как группа кальцита. В то же время отдельные описания сделаны так, чтобы подчеркнуть неразрывную связь между видами, заключёнными в серии ... Описательная минералогия в настоящее время перегружена мелкими названиями, а интересы науки, без сомнения, будут лучше удовлетворены при сокращении количества названий и упрощении номенклатуры ... Систематизация номенклатуры таким путем есть естественное выражение концепции изменчивости минерального состава, которая вытесняет старое понимание видов как определенных фаз в основном постоянного состава» [5, с. 7-8].

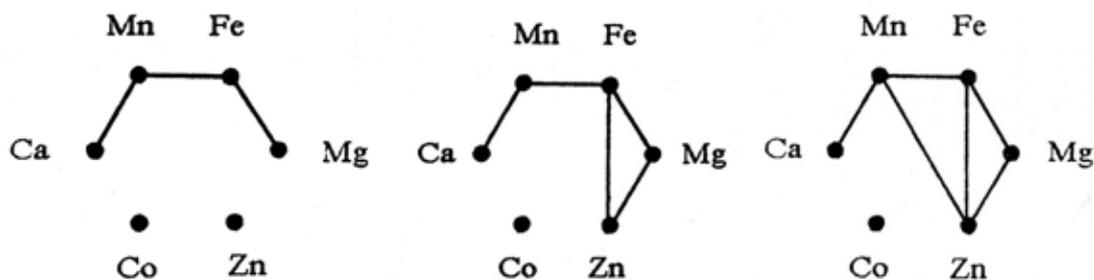


Рис. 1. Соотношения смесимости в группе кальцита: Ca – кальцит, Mn – родохрозит, Fe – сидерит, Mg – магнезит, Zn – смитсонит, Co – сферокобальтит.

Сегодня наука обладает средствами для эффективного описания даже таких «сложных» минеральных серий как группа кальцита. По [1, 2, 5, 6, 15], природные твёрдые растворы не ограничены в парах кальцит-родохрозит, родохрозит-сидерит и сидерит-магнезит, что показано на рис. 1 (слева) в виде графа. Из сравнения размеров ионов предполагается [5, с. 174-175] непрерывная смесимость в парах смитсонит-сидерит и смитсонит-магнезит (рис. 1, в центре), а по наблюдениям составов природных фаз – в паре смитсонит-родохрозит (рис. 1, справа). Аналогично, соотношения смесимости в группе шпинели по [13] показаны на рис. 2 (слева). В [16] сообщается, что при синтезе выше 860 °С появляется непрерывный твёрдый раствор магнетит-герцинит (рис. 2, в центре), а выше 1400 °С – магнетит-хромит (рис. 2, справа). Минеральная серия шпинелидов естественно расширяется за счёт ганита $ZnAl_2O_4$. Постепенно накапливаются данные о его твёрдых растворах с хромитом [9, 18], шпинелью и герцинитом [17]. Сюда же можно включить редкие бруногайерит $GeFe_2O_4$ и купрошпинель $CuFe_2O_4$ [3]. Ещё более интересна серия природных гранатов, в которой на сегодня насчитывается 14 минеральных видов. По данным приведенных авторов и [12], соотношения смесимости в ней показаны на рис. 3.

Теоретико-графовое представление обеспечивает фиксацию, анализ и сравнение даже самых сложных из известных минеральных серий, причём не только относительно смесимости в парах, но также в триадах и более сложных симплексах. Правила 50 % и 33.3 % [7, 8], делящие минеральные серии на куски – минеральные виды, представляются архаичными. Системы минералогии должны учитывать только естественные границы, автоматически выявляемые минеральными сериями. (Строго говоря, они и должны считаться минеральными видами.) Эволюции минеральных серий в меняющихся физико-химических условиях представимы как разрывы рёбер и/или исчезновения вершин графа, а система минералогии – как структура с отношением нестрогого порядка [14] по признаку вложения графов друг в друга.

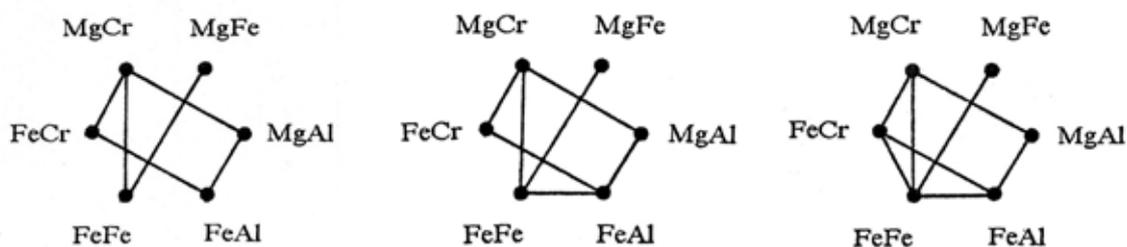


Рис. 2. Соотношения смесимости в группе шпинели: *MgCr* – пикрохромит, *MgFe* – магнезиоферрит, *MgAl* – шпинель, *FeAl* – герцинит, *FeFe* – магнетит, *FeCr* – хромит.

Недавняя работа [10] даёт нам пример ещё одного представления системы минералогии в качестве структуры с лексикографическим упорядочением множества ранговых формул химических составов минералов.

Последние определены как «последовательности символов химических элементов, расположенных в порядке снижения их атомных содержаний в его (минерала – ЮВ) составе» [10, с. 5]. На первый взгляд – весьма формальное построение. Но заметим, что алфавитом здесь является периодическая система элементов, что принципиально отличает R-словарь-каталог от любого минералогического словаря, составленного по орфографическому принципу. Легко видеть, что лексикографическое упорядочение есть отношение строгого порядка.

Представления о системе минералогии становятся всё менее однозначными. Но это не означает утрату определённости. Все логические кон-

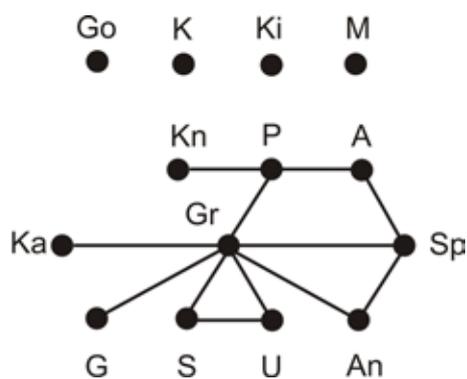
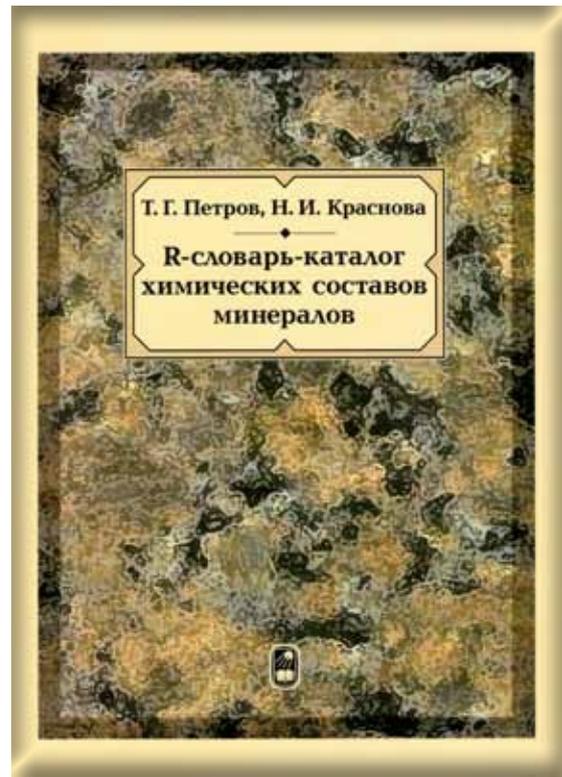


Рис. 3. *A* – алмадин, *An* – андрадит, *G* – гибшит, *Go* – голдманит, *Gr* – грассуляр, *K* – кальдерит, *Ka* – катонит, *Ki* – кимцеит, *Kn* – кноррингит, *M* – меджорит, *P* – пироп, *S* – шорломит, *Sp* – спессартин, *U* – уваровит.

струкции – классификации, пространства толерантности, структуры... – строятся не иначе как на ранее определённых понятиях минеральных видов и серий. (Минеральные серии Дж. Дэна с большим основанием отвечают минералогическим первоэлементам, чем минеральные виды в современном понимании, и в будущем займут их место. Мы не дискутируем здесь этот вопрос.) Их вовлечение в систему минералогии предопределено её потребностью к всё более глубокому самопознанию. Следует ли считать переход от классификаций к пространствам толерантности и структурам всё более содержательным? И нет, и да. Нет – в том смысле, что последующее представление не обязательно охватывает предыдущее. (Классификация есть частный случай пространства толерантности, но последнее не есть частный случай структуры.) Да – в том смысле, что каждое новое представление системы минералогии что-то добавляет в общую картину по логическим свойствам

и минералогическим смыслам определяющих межэлементных отношений. Не может быть «самой правильной» системы минералогии. Перспектива состоит в согласовании очень разных существующих и будущих представлений, дополняющих друг друга.

Петрографические структуры. Горная порода – самый загадочный объект из всех, охватываемых геологическими дисциплинами, поскольку хуже других понята как упорядоченное целое. На уровне метафизическом (там, где два геолога всегда понимают друг друга, хотя пользуются плохо определенными понятиями) она представляется всем именно таковой, ведь иначе «петрографическая структура» (структурой – и еще текстурой – обладает всякая горная порода, как утверждают Петрографические словари) понята быть не может в силу общенаучной смысловой нагрузки категории «структура». Назрела необходимость в математическом формализме, охватившем бы организацию горных пород единым описанием. В его основу следует положить фундаментальные, т. е. присущие любой (для определенности – кристаллической) горной породе, элементы и отношения. Их правильный выбор – едва ли не главная проблема в построении теории.

«Атомами» горной породы автор считает минеральные зерна, фундаментальными отношениями – субстанциальную и видовую (не)тождественность, и пространственное (не)контактирование. Атомы одного вида неразличимы. Для построения теории предложено использовать наиболее общие математические понятия. Показано [3], что кристаллическая горная порода является топологическим пространством с целым спектром допустимых – в диапазоне от тривиальной до дискретной – топологий. В этом представлении находит свое отражение взгляд геологов на горную породу как агрегат не только отдельных минеральных зерен, но и всевозможных ассоциаций (мономинеральных, парагенетических и т. п.). Далее, она является также пространством толерантности как на уровне минеральных зерен (с образующим отношением неконтактирования), так и на уровне ассоциаций зерен (с образующим отношением частичного перекрытия). Она же является метрическим пространством с целым спектром метрик, заданных для минеральных зерен и их произвольных ассоциаций [7]. С помощью метрик можно (в петрографическом шлифе – реально, в 3D – теоретически) рассчитать пространственные ковариации минеральных зерен или их ассоциаций различного вида. Если радиус корреляции отличен от нуля, то горную породу можно считать частично (в силу конечности радиуса корреляции) упорядоченной. Автором это зафиксировано для норитов и габброноритов Федорово-Панского массива и, скорее всего, типично для магматических горных пород (природа корреляции описана в ряде работ А.Б. Вистелиуса).

Последнее обстоятельство подталкивает к следующему (статистическому) взгляду на горную породу. Пространственные коррелограммы для мине-

ральных зерен или их ассоциаций могут быть рассчитаны только при анализе данной горной породы. Они задают ее внутреннюю «систему координат» подобно тому, как кристалл рассматривается в «правильной установке», т. е. в системе координат, жестко связанной с его решеткой. Пространственные коррелограммы позволяют предсказать вид минерального зерна (ассоциации) по окружающим его зернам (ассоциациям), удаленным не более чем на радиус корреляции. Результат прогноза (в терминах вероятностей) может не совпадать с фактической видовой принадлежностью минерального зерна (ассоциации). Но именно это и важно. По-видимому, фундаментальным свойством кристаллической горной породы является то, что наличие в данной «точке» пространства минерального зерна (ассоциации) данного вида есть случайная реализация одной из возможностей. Нет другого – более «идеального» – представления о горной породе. Это отличает ее от идеального кристалла, в пространстве которого положение атомов детерминировано.

Вопрос о классификации традиционно важен в естественных науках. Статистика межзерновых отношений позволяет построить исчерпывающую классификацию петрографических структур. Ранее было показано [1, 2], что статистика p_{ij} бинарных межзерновых контактов $m_i m_j$ естественно сопоставляется кривой 2-го порядка $\sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n p_{ij} m_i m_j = 1$, а теория квадратичных

форм позволяет единым описанием охватить все многообразие горных пород и классифицировать их по типам кривых – структурных индикатрис. Именно они выражают собой типы петрографических структур, при этом вариативность вероятностей p_{ij} в пределах типа отражается в геометрии и положении индикатрисы в системе координат $\{m_i\}$. Следующим шагом является классификация петрографических структур статистиками тройных межзерновых контактов, сопоставляемыми поверхностям 3-го порядка в пространствах, размерности которых совпадают с числом минералов в горной породе:

$$\sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \sum_{k=1}^n p_{ijk} m_i m_j m_k = 1$$

Для биминеральной горной породы это кривые 3-го порядка на плоскости:

$$p_{111} m_1^3 + p_{112} m_1^2 m_2 + p_{122} m_1 m_2^2 + p_{222} m_2^3 = 1$$

Их перечисление и составляет дальнейшую задачу.

Первая классификация кривых 3-го порядка выполнена Ньютоном [4-6] по числу и взаимному положению бесконечных ветвей. Общее уравнение кривой 3-го порядка имеет вид

$$Ax^3 + 3Bx^2y + 3Cxy^2 + Dy^3 + 3Ex^2 + 6Fxy + 3Gy^2 + 3Hx + 3Ky + L = 0 \quad (1)$$

В нашем случае: $A = p_{111}$, $3B = p_{112}$, $3C = p_{122}$, $D = p_{222}$, $E = F = G = H = K = 0$, $L = -1$. Пусть $y = kx + b$ – асимптота. Для кривой (1) ее угловой коэффициент k определяется из уравнения

$$A + 3Bk + 3Ck^2 + Dk^3 = 0 \quad (2)$$

b – из уравнения

$$(B + 2Ck + Dk^2)b = -(E + 2Fk + Gk^2) \quad (3)$$

Уравнение (2) дает три действительных или одно действительное и два комплексных k . Этим определяются число и направления бесконечных ветвей. Чтобы асимптота для k существовала, b должно определяться из (3). В нашем случае $E = F = G = 0$, поэтому

$$(B + 2Ck + Dk^2)b = 0 \quad (4)$$

Если

$$B + 2Ck + Dk^2 \neq 0 \quad (5)$$

то говорят, что ветвь имеет гиперболический тип. Если $b = 0$, то асимптота проходит через начало координат. Если при действительных k коэффициент b не определен, то ветвь не имеет асимптоты и говорят, что кривая имеет параболический тип. В зависимости от вида корней уравнения (2) можно классифицировать все структурные индикатрисы 3-го порядка петрографических структур на четыре группы, которые мы приводим, сохраняя название по Ньютону и указывая характерные формы.

1-я группа: все корни (2) действительны и различны; кривая имеет три асимптоты и три гиперболические ветви. Кривые носят название *hyperbolae redundantantes* (раскинутые гиперболы). Их формы:

- три гиперболические ветви и овал или две гиперболические и одна прямолинейная ветвь; прямолинейной называется ветвь, вытянутая вдоль асимптоты, которую пересекает и к которой приближается в двух противоположных направлениях (рис. 4 а, б),
- три гиперболические ветви (рис. 4 в),
- три гиперболические ветви, две из которых пересекаются, или три гиперболические ветви, одна из которых имеет узловую точку (рис. 4 г, д),
- три гиперболические ветви и изолированная точка (рис. 4 е),
- три гиперболические ветви, одна из которых имеет точку возврата (рис. 4 ж).

2-я группа: уравнение (2) имеет один действительный корень, кривые – одну асимптоту и прямолинейную ветвь. Они называются *hyperbolae defectivae* (дефективные гиперболы). Их формы:

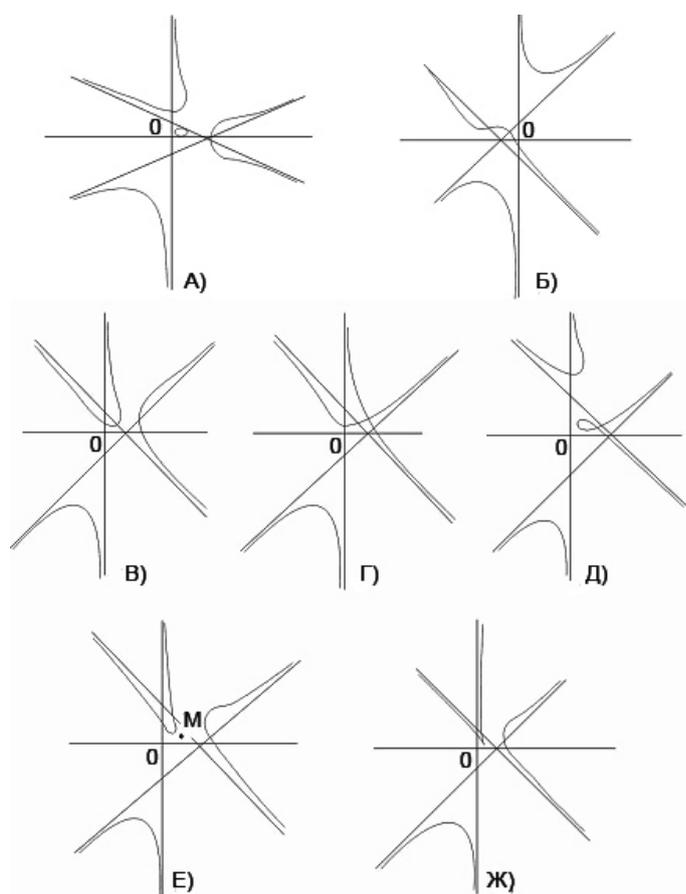


Рис. 4. Кривые 1-ой группы.

4-я группа: уравнение (2) имеет трехкратный действительный корень. Здесь возможен только один случай: $E+2Fk+Gk^2 = F+Gk = 0$, при этом $H+Kk = 0$ – кривая распадается на три параллельные прямые.

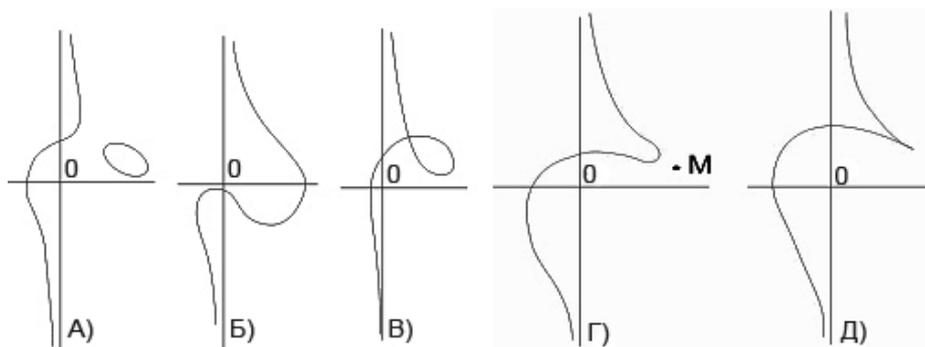


Рис. 5. Кривые 2-ой группы.

Таким образом, даже для биминеральных горных пород уравнение (2) порождает большое разнообразие структурных индикатрис 3-го порядка, выражающих статистики тернарных межзерновых контактов, т.е. в конечном счете – типы взаимных пространственных отношений минеральных зерен различных видов. В этом и состоит важнейшая составная часть катего-

- одна прямолинейная ветвь и овал (рис. 5 а),
- одна прямолинейная ветвь (рис. 5 б),
- прямолинейная ветвь с узлом (рис. 5 в),
- прямолинейная ветвь и изолированная точка (рис. 5 г),
- прямолинейная ветвь с точкой возврата (рис. 5 д).

3-я группа: уравнение (2) имеет двукратный действительный корень и $E+2Fk+Gk^2 = 0$.

Эти кривые называются *hyperbolism sectionum conicarum* (гиперболизмы конических сечений). Их формы:

- две ветви с общими асимптотами и бесконечно удаленной точкой возврата (рис. 6 а),
- прямолинейная ветвь с бесконечно удаленной изолированной точкой (рис. 6 б).

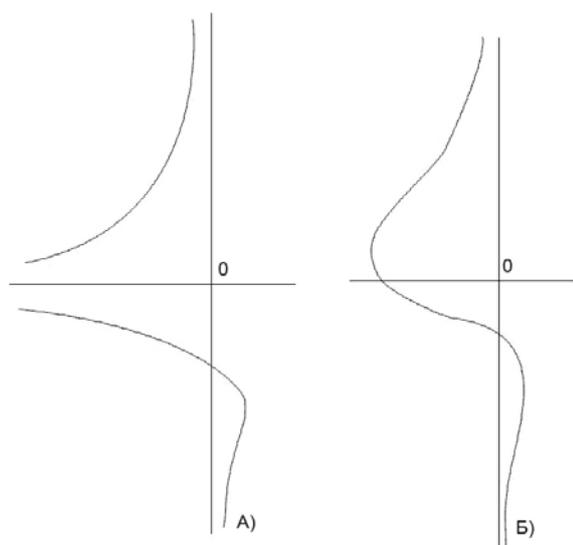


Рис. 6. Кривые 3-ей группы.

рии петрографической структуры в ее традиционном понимании. Методика предлагается для массового тестирования в практике петрографических исследований.

Список литературы к разделу «Гранулометрия»

1. Ляпин Е.С. Полугруппы. М.: Физматгиз, 1960. 592 с.

Список литературы к разделу «Система минералогии»

1. Берри Л., Мейсон Б., Дитрих Р. Минералогия. М.: Мир, 1987. 592 с.
2. Бетехтин А.Г. Минералогия. М.: Госгеолтехиздат, 1950. 956 с.
3. Бонштедт-Куплетская Э.М. Новые минералы – члены изоморфных рядов, структурные аналоги известных минералов // Изоморфизм в минералах. М.: Наука, 1975. С. 15.
4. Дэна Дж.Д., Дэна Э.С., Пэлач Ч. и др. Система минералогии. Т. I, п/том 1: элементы, сульфиды, сульфосоли. М.: Изд-во иностр. лит., 1950. 608 с.
5. Дэна Дж.Д., Дэна Э.С., Пэлач Ч. и др. Система минералогии. Т. II, п/том 1: галоиды, карбонаты, нитраты, йодаты, бораты, сульфаты. М.: Изд-во иностр. лит., 1953. 773 с.
6. Костов И. Минералогия. М.: Мир, 1971. 584 с.
7. Никель Е.Х. Твёрдые растворы в номенклатуре минералов // Зап. ВМО. 1992. № 4. С. 89-92.
8. Никель Е.Х. Содержание понятия минерал // Зап. ВМО. 1995. № 4. С. 98-100.
9. Осокин А.С. Об акцессорных цинксодержащих хромитах // Новые данные по минералогии медно-никелевых и колчеданных руд Кольского п-ова. Апатиты: Изд-во КФ АН СССР, 1979. С. 89-96.
10. Петров Т.Г., Краснова Н.И. R-словарь-каталог химических составов минералов. СПб.: Наука, 2010. 150 с.
11. Смирнова Н.Л. О системе минералов. Уровни // Вестник МГУ. Сер. геол. 1979. № 2. С. 59-63.
12. Соболев Н.В. Парагенетические типы гранатов. М.: Наука, 1964. 218 с.
13. Соколов Г.А. Хромиты Урала, их состав, условия кристаллизации и закономерности распространения // Тр. ИГН АН СССР, сер. рудн. месторожд. Вып. 97. 1948. № 12. 128 с.
14. Шрейдер Ю.А. Равенство, сходство, порядок. М.: Наука, 1971. 255 с.
15. Эссен Э.Дж. Карбонатные твердые растворы и взаимная растворимость их конечных членов применительно к геологической термобарометрии // Карбонаты. Минералогия и химия. М.: Мир, 1987. С. 105-127.
16. Irvine T.N. Chromian spinel as a petrogenetic indicator. Pt 1. Theory // Can. J. Earth Sc. 1965. V 6-7. N 2. P 648-672.

17. Spry P.G., Scott S.D. The stability of zincian spinels in sulfide systems and their potential as exploration guides for metamorphosed massive sulfide deposits // Econ. Geol. 1986. V 81. P 1446-1463.
18. Weiser T. Zink- und Vanadium-fuerende Chromite von Outokumpu, Finland // Neues Jahrb. Miner. Monatsh. 1967. H 7-8. S 234-243.

Список литературы к разделу «Петрографические структуры»

1. Войтеховский Ю.Л. Приложение теории квадратичных форм к проблеме классификации структур полиминеральных горных пород // Изв. ВУЗов. Геол. и разведка. 1995. № 1. С. 32-42.
2. Войтеховский Ю.Л. Количественный анализ петрографических структур: метод структурной индикатрисы и метод вычитания аксессуариев // Изв. ВУЗов. Геол. и разведка. 2000. № 1. С. 50-54.
3. Войтеховский Ю.Л. К формальному определению пространства горной породы // Горная порода: опыты постижения. Апатиты: Изд-во К & М, 2005. С. 84-147.
4. Савелов А.А. Плоские кривые. Систематика, свойства, применение. Москва-Ижевск: НИЦ «Регулярная и хаотическая динамика», 2002. 294 с.
5. Смирнов В.И. Курс высшей математики. Т. 1. М.: Физматиз, 1962. 478 с.
6. Фадеев Д.К. Лекции по алгебре. СПб: Изд-во «Лань», 2002. 416 с.
7. Voytekhovsky Y.L., Fishman M.A. Rock kriging with the microscope // Math. Geol. 2003. V 35. N 4. P 451-458.

ГЕОМЕТРИЯ ШАРНИРНЫХ КОНСТРУКЦИЙ

Ковалёв М.Д.

МГТУ им. Н.Э.Баумана, МГУ, Москва, mdkovalev@mtu-net.ru

Развивается оригинальный подход к изучению геометрических свойств конструкций, составленных из стержней, соединённых шарнирами, основанный на рассмотрении многомерных пространств параметров и т.н. рычажного отображения. Такая формализация предмета исследования даёт результаты общего характера и приводит к новым задачам, имеющим прикладной смысл и развивающим теоретические разделы геометрии и топологии.

Введение. Начну с двух примеров, побудивших меня заняться углубленным изучением геометрических свойств рычажно-шарнирных конструкций и дающих толчок к их рассмотрению в многомерных пространствах параметров. Первый – пример шарнирного механизма с переменным числом степеней свободы, второй касается различных «сборок шарнирного механизма». Затем будет дана математическая формализация шарнирного

механизма, шарнирной фермы, их структурной и кинематической схем, поясняющая геометрическую природу примеров. Наконец, будут приведены некоторые следствия из формализации и порождаемые ею вопросы.

Мы рассматриваем плоские конструкции из абсолютно жёстких прямолинейных стержней (рычагов), на концах имеющих отверстия. Можно считать, что в отверстия вставлены оси, допускающие свободное вращение стержней без люфтов. Если такая ось закреплена в плоскости, играющей роль стойки, мы называем её закреплённым шарниром и обозначаем крестиком. Если ось не закреплена, то она называется свободным шарниром, и мы обозначаем её кружочком. С точки зрения теории механизмов, свободный шарнир может быть: вращательной кинематической парой, если на ось надеты концы в точности двух рычагов; совмещённым шарниром, если на ось надеты концы более чем двух рычагов, а может и не быть кинематической парой, если ось вставлена в конец лишь одного рычага. Закреплённые шарниры являются либо шарнирами в обычном смысле слова, либо совмещёнными шарнирами. Повторю, что шарниры допускают всевозможные вращения сочленённых в них рычагов относительно друг друга и относительно стойки-плоскости. В модели не учитывается, что вращениям может мешать пересечение одних рычагов с другими или с осями конструкции. Такие конструкции можно рассматривать в евклидовом пространстве любой размерности, но ради простоты мы ограничимся плоскостью.

Два примера. Обычно считают, что шарнирный механизм имеет вполне определённое число степеней свободы. Это действительно так, если его конфигурационное пространство является многообразием. В приводимом ниже примере это не так [1, 2].

Механизм на рис. 1 содержит 13 рычагов, 7 свободных (v_1, \dots, v_7) и 3 закреплённых (v_8, v_9, v_{10}) шарнира. Он построен из шарнирных параллелограммов $\Pi_1: v_8 v_1 v_3 v_9$ и $\Pi_2: v_8 v_4 v_6 v_9$. Шарниры v_2 и v_5 лежат посередине рычагов $v_1 v_3$ и $v_4 v_6$. Этого можно достичь, закрепив их рычагами $v_1 v_2$, $v_2 v_3$ и $v_4 v_5$, $v_5 v_6$. Длины дополнительных рычагов $v_2 v_7$ и $v_5 v_7$ равны длинам боковых рычагов $v_1 v_8$ и $v_4 v_8$. Длина рычага $v_{10} v_7$ выбрана так, что шарнир v_7 может оказаться посередине отрезка $v_8 v_9$ (рис. 1, 2 а). Когда шарнир v_7 находится в таком положении, параллелограммы Π_1 и Π_2 можно двигать независимо один от другого с одной степенью свободы каждый. Поэтому число степеней свободы механизма в таких положениях равно 2. Если же механизм привести в положение, когда рычаг $v_2 v_7$ ляжет на рычаг $v_{10} v_7$, а $v_7 v_5$ – на продолжение рычага $v_{10} v_7$, то шарнир v_7 можно сдвинуть со своего места (рис. 2 б). Когда шарнир v_7 не лежит посередине отрезка $v_8 v_9$ (рис. 2 б), число степеней свободы механизма равно 1.

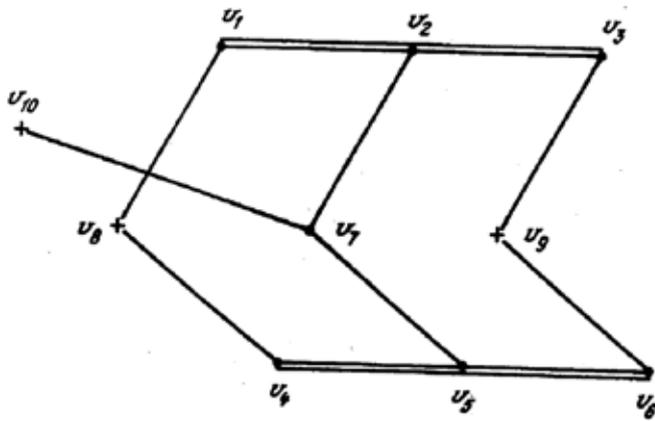


Рис. 1. Пояснения в тексте.

низм впервые был построен автором, видеоклип его движений содержится на сайте «Математические этюды», созданном Н.Н. Андреевым. К. Вольхарт [4] развил этот пример, построив на его основе механизмы с числом степеней свободы, меняющимся от 1 до любого натурального числа.

Шарнирную конструкцию, составленную из одних и тех же рычагов, скреплённых в одном и том же порядке, можно собрать несколькими различными способами. На рис. 3 а это проиллюстрировано на примере простейшей шарнирной фермы. Вторая сборка получается отражением первой относительно прямой, соединяющей закреплённые шарниры. В случае шарнирных механизмов говорят о различных сборках шарнирного механизма. На рисунке 3 б, в показаны две такие сборки, из одной в другую механизм непрерывно перевести нельзя. Но термин «различные сборки шарнирного механизма» представляется неудачным хотя бы потому, что некоторые из сборок шарнирного механизма могут оказаться фермами. Так, уменьшая длины рычагов v_3v_1 и v_4v_3 на рис. 3, можно добиться, чтобы сборка «в» стала фермой. При этом сборка «б» останется механизмом с одной степенью свободы. Встают вопросы: удобно ли механизм и ферму называть разными сборками одного шарнирного механизма? И что такое – этот шарнирный механизм?

Последнее число степеней свободы даёт и формула Чебышёва-Грюблера. В положениях, когда v_7 лежит посередине v_8v_9 , одна из связей v_2v_7 или v_5v_7 оказывается избыточной, ложной или пассивной. Конфигурационное пространство рассмотренного механизма выглядит как связное объединение тора и окружности. Этот меха-

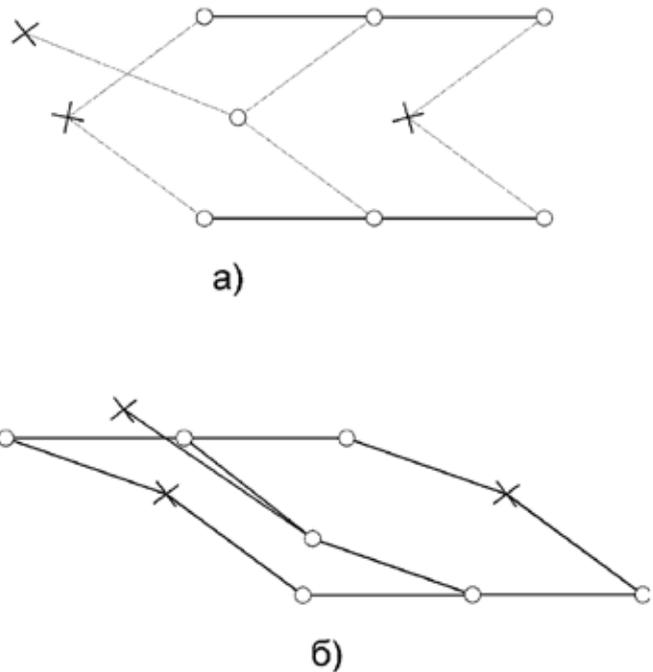


Рис. 2. Пояснения в тексте.

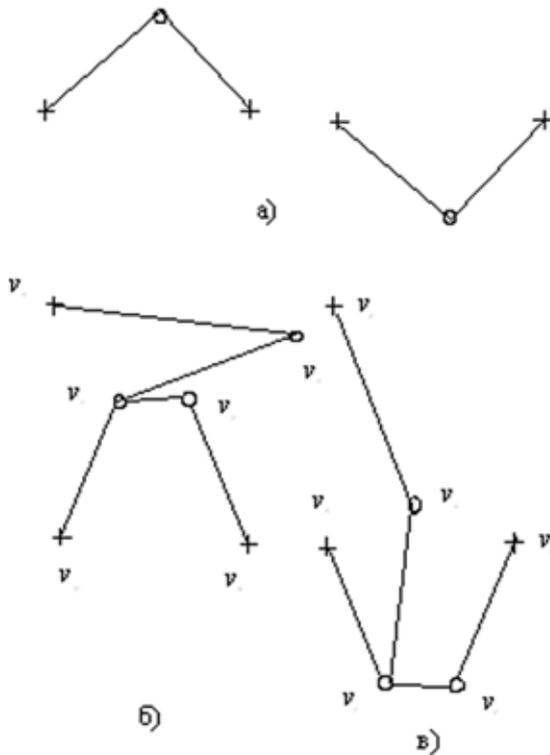


Рис. 3. Пояснения в тексте.

Математическая модель. Шарнирной структурной схемой (ШСС) мы называем [1] абстрактный связный граф $G(V, E)$ без петель и кратных ребер с вершинами двух видов: закреплёнными (отвечают закреплённым шарнирам) и свободными (отвечают свободным шарнирам). Рёбра шарнирной схемы – отрезки, соединяющие её вершины – отвечают рычагам шарнирной конструкции. Пусть $V_1 = \{v_1, \dots, v_m\}$ – совокупность свободных, $V_2 = \{v_{m+1}, \dots, v_{m+n}\}$ – закреплённых вершин, $V = V_1 \cup V_2$. На $G(V, E)$ накладываются два естественных требования: множество E рёбер не содержит рёбер, соединяющих пары закреплённых вершин; его подграф, состоящий из свободных вершин и соединяющих их рёбер, связан. Если не выполнено второе условие, то шарнирная конструкция распадается на несколько независимых частей.

Закрепленной шарнирной схемой (ЗШС) в плоскости назовем ШСС, каждой закреплённой вершине $v_i \in V_2$ которой сопоставлена точка $p_i \in R^2$. Теперь можно рассмотреть возможные отображения абстрактного графа $G(V, E)$ в плоскость, сопоставляющие закреплённым вершинам $v_i \in V_2$ уже выбранные точки $p_i \in R^2$, свободным вершинам $v_i \in V_1$ произвольные точки $p_i \in R^2$, а рёбрам $v_i v_j$ – отрезки $p_i p_j$ прямых, возможно, вырождающиеся в точку. Поскольку при таких отображениях различным и даже смежным вершинам графа может сопоставляться одна и та же точка плоскости, естественно назвать эти отображения проектированиями. Пусть (x_i, y_i) – декартовы координаты точки p_i , тогда существует взаимно однозначное соответствие между множеством всех проектирований графа $G(V, E)$ в плоскость и точками $p = (x_1, y_1, x_2, y_2, \dots, x_m, y_m)$ $2m$ -мерного евклидова пространства

параметров R^{2m} . Одно такое проектирование мы называем шарнирником (англ. «*framework*»). Образ графа при проектировании можно мыслить как конструкцию, составленную из шарниров и соединяющих их рычагов. Причём закреплённые шарниры находятся в заранее выбранных точках. В инженерном понимании это либо шарнирная ферма, либо определённое положение шарнирного механизма.

Кинематической шарнирной схемой (КШС) мы называем закреплённую шарнирную схему, каждому рычагу $v_i v_j \in E$ которой сопоставлено неотрицательное число d_j - квадрат длины рычага. Пусть $|E| = r$, тогда ЗШС определяет отображение $F : R^{2m} \rightarrow R^r$ согласно формулам $d_{ij} = (p_i - p_j)^2$, $v_i v_j \in E$. Оно называется рычажным (англ. *rigidity map*). Образ $F(R^{2m})$ рычажного отображения назовём множеством \tilde{N} существенных КШС. Точки $d \in R^r$, для которых $F^{-1}(d) = \emptyset$, будем называть несущественными КШС. Конфигурационным пространством КШС, изображаемой точкой $d \in R^r$, называется полный прообраз $F^{-1}(d)$ при рычажном отображении. Одноточечная компонента связности конфигурационного пространства отвечает шарнирной ферме в инженерном понимании. Неодноточечная – шарнирному механизму. Если некоторой КШС отвечают лишь фермы, то их число называется кратностью КШС. Вместо различных сборок шарнирного механизма при нашем подходе следует говорить о различных шарнирных устройствах с одной кинематической схемой.

Рассмотрим простейший пример (рис. 4) закреплённой шарнирной схемы в плоскости с одним свободным шарниром $p = (x, y)$ и двумя закреплёнными в точках $(0,0)$ и $(1,0)$ шарнирами. Ей отвечает рычажное отображение $F : R^2 \rightarrow R^2$, $F(x, y) = (x^2 + y^2, (x-1)^2 + y^2)$. Конфигурационное пространство

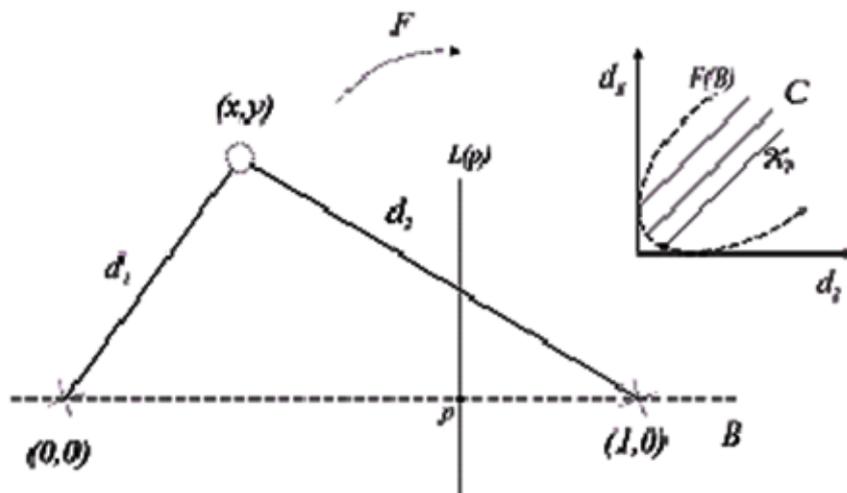


Рис. 4. Пояснения в тексте.

КШС d , лежащей на границе множества $C = F(R^2)$, состоит из одной точки, а КШС, лежащей внутри C - из двух точек. Первому случаю отвечает нежёсткая ферма $p = (x, 0)$, у которой все три шарнира лежат на оси абсцисс, второму – пара жёстких ферм $p = (x, \pm y)$ $y \neq 0$. Якобиан $dF(p)$ отображения равен $4y$.

Ферма p называется жёсткой, если $\text{Rank } dF(p) = 2m$. Если, кроме того, $2m = r$, то ферма является статически определимой. Это означает возможность компенсации любых внешних нагрузок напряжениями, возникающими в рычагах фермы, причём напряжения однозначно определяются внешней нагрузкой. ЗШС в плоскости называется правильной, если для рычажного отображения F , отвечающего ей, $\max \text{Rank } dF = r$. Шарнирная структурная схема называется правильной, если ей отвечает хотя бы одна правильная ЗШС. Правильность отвечает отсутствию в ней ложных или пассивных связей на языке теоретической механики. В плоском случае есть простой критерий правильности ШСС [1]. Пусть граф $G' = G'(V, E')$ получается из графа $G = G(V, E)$ ШСС добавлением всех рёбер $v_{m+1}v_{m+i}$, $i > 1$, соединяющих первый из закреплённых шарниров с остальными закреплёнными шарнирами, а также рёбер $v_{m+2}v_{m+i}$, $i > 2$, соединяющих второй из закреплённых шарниров с третьим и последующими закреплёнными шарнирами.

Теорема 1. ШСС в плоскости правильна, *iff* граф G' имеет свойство: для любого множества из $k > 0$ его рёбер число l инцидентных им вершин удовлетворяет неравенству $k \leq 2l - 3$. (Такого комбинаторного критерия правильности для схем в трёхмерном пространстве до сих пор не найдено. В этом случае шарниры считаются сферическими.)

Теорема о числе сборок фермы. Имеет место общая связь между числом и статической определимостью ферм, отвечающих кинематической шарнирной схеме [1].

Теорема 2. Если КШС d отвечает статически определимая шарнирная ферма p , то этой КШС отвечает кроме фермы p , по крайней мере, ещё одно шарнирное устройство. Если такой КШС отвечают лишь статически определимые фермы, то их число чётно.

Доказательство теоремы опирается на наличие у соответствующего рычажного отображения топологической степени, равной нулю. Она определяется так: $\deg F = \sum_i \text{sign } \det dF(p_i)$, где якобианы берутся во всех прообразах правильной точки отображения, а функция sign принимает значение 1, если её аргумент положителен, и -1 – если он отрицателен.

Геометрическая устойчивость. Шарнирную ферму естественно называть геометрически устойчивой (или просто устойчивой), если при любой достаточно малой ошибке в длинах её рычагов мы сможем собрать ферму, близкую к исходной. Так, простейшая плоская ферма рис. 4 геометрически

устойчива, *iff* её свободный шарнир не лежит на прямой, соединяющей закреплённые шарниры (это совпадает с условием её жёсткости). В рамках нашей модели справедливо определение: плоский шарнирник P называется неустойчивым, если найдётся такая его шаровая окрестность $U(p, \varepsilon) \subset R^{2m}$ радиуса $\varepsilon > 0$, что для $\forall \delta > 0$ в шаровой δ -окрестности $W(d, \delta) \subset R^r$ точки $d = F(p)$ имеется КШС $d' \notin F(U(p, \varepsilon))$. Заметим, что некоторые координаты d'_{ij} , имеющие смысл квадратов длин рычагов КШС d' , могут оказаться отрицательными. При этом КШС d' не лежит в неотрицательном ортанте $Q: d'_{ij} \geq 0$ стандартной координатной системы в R^r и не является существенной.

Существенная КШС d называется неустойчивой, если она лежит на границе множества S существенных КШС. Для неустойчивой КШС возможно сколь угодно малое изменение квадратов длин рычагов, приводящее к несущественной КШС. Из неустойчивости КШС d следует неустойчивость любого шарнирника, имеющего эту КШС.

На рис. 5 а, б даны примеры. Оба шарнирника имеют одну и ту же КШС d_0 . Шарнирник 5 а устойчив. Шарнирник 5 б, шарниры p_1, p_2, p_3 которого лежат на одной прямой, неустойчив, поскольку при сколь угодно малом уменьшении длины хотя бы одного из рычагов $p_1 p_2$ или $p_1 p_3$ становится невозможно собрать шарнирник, близкий к нему. Но кинематическая шарнирная схема d_0 устойчива. В [3] автором построен первый пример устойчивой в плоскости шарнирной фермы, все шарниры которой лежат на одной прямой. Там же впервые дан пример неустойчивой, но устойчивой по малому изменению длины каждого рычага в отдельности, шарнирной фермы, все шарниры которой лежат на одной прямой. Статически определимая ферма всегда является устойчивой. По этой причине её КШС также устой-

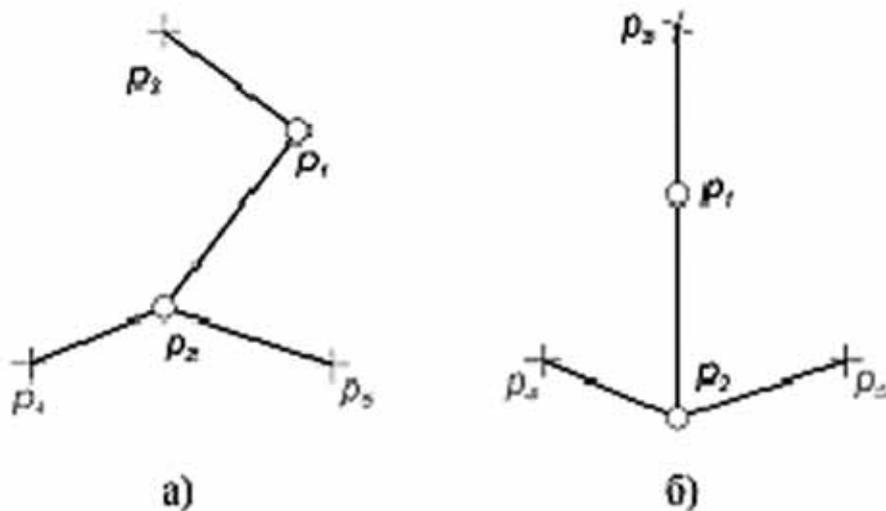


Рис. 5. Пояснения в тексте.

чива, но вследствие теоремы 2 она не может быть однократной. Это приводит к следующему вопросу: возможна ли однократная и устойчивая КШС? На инженерном языке он звучит так: существуют ли устойчивые шарнирные конструкции, собираемые единственным образом? Остаётся открытым и второй вопрос: возможна ли устойчивая КШС, для которой все шарнирники неустойчивы?

Список литературы

1. Ковалёв М.Д. Геометрическая теория шарнирных устройств // Изв. РАН Сер. Математическая. 1994. Т. 58. № 1. С. 45-70.
2. Ковалёв М.Д. Вопросы геометрии шарнирных устройств и схем // Вестник МГТУ им. Н.Э. Баумана. Сер. Машиностроение. 2001. № 4(45). С. 33-51.
3. Ковалёв М.Д. О распрямлённых шарнирных конструкциях // Математич. сб. 2004. Т. 195. № 6. С. 71-98.
4. Wohlhart K. Kinematotropic linkages. Recent advances in robot kinematics. Kluwer Academic Publishers, 1996. P 359-368.

ЭВОЛЮЦИЯ МУЛЬТИФРАКТАЛЬНОЙ СТРУКТУРЫ ТРАНЗИЕНТОВ В РАСПРЕДЕЛЁННЫХ СИСТЕМАХ

Козелов Б.В.¹, Рипдал К.², Клумов Б.А.³, Мингалёв О.В.¹, Кубе Р.²

¹ Полярный геофизический институт КНЦ РАН, Апатиты,
boris.kozelov@gmail.com;

² Университет Тромсё, Норвегия, kristoffer.rypdal@uit.no;

³ Объединённый институт высоких температур РАН, Москва,
klumov@ihed.ras.ru

В работе проводится сравнение динамики переходных процессов в четырёх различных моделях двумерных распределенных систем: клеточный автомат модели Занга (модель песочной кучи), затухающая турбулентность в жидкости, МГД модель взаимодействующих за счёт сил Ампера токовых волокон, модель кристаллизации пылевой плазмы. Пространственное распределение двумерных полей описывается с помощью мультифрактального формализма. Показано, что эволюция пространственных структур, возникающих из случайного начального состояния, имеет общие закономерности, несмотря на значительное различие действующих в моделируемых системах связей.

Введение. Возникновение «сложных» структур, широко распространённых в природе, является интригующим и не до конца понятным явлением.

Они характерны для динамики открытых пространственно распределённых систем с нелинейными связями. Попытки геометрического описания природных структур и их «сложности» привело к созданию фрактальной геометрии [5]. В основе этого подхода лежит понятие самоподобия (скейлинга), которое подразумевает, что элементы структуры на разных масштабах в каком-то смысле (обычно статистическом) подобны друг другу. В этом случае разложение по зависящим от пространственного масштаба пробным функциям даёт степенной спектр. В простейшем варианте структура задается значением наблюдаемой величины $I(x)$ в определенных точках $\{x_i\}$ пространства R^n , а в качестве пробной функции используется приращение $dI(x, s) = I(x+s) - I(x)$ на пространственном масштабе s . Тогда статистическое усреднение величины $dI(x, s)^q$ по всем точкам x даёт статистический момент порядка q , $S(s, q) = \langle dI(x, s)^q \rangle$. Степенной вид зависимости статистических моментов от масштаба s при малых s , $S(s, q) \sim s^{\square(q)}$, свидетельствует о фрактальной структуре, при линейной зависимости показателя степени от номера момента, $\square(q) = Hq$, говорят о монофрактале, а при нелинейной – о мультифрактале. В данной работе мы используем в качестве пробных функций имеющие ряд преимуществ вейвлет-лидеры [7], а для характеристики (мульти) фрактальной структуры используем разложение зависимости $\square(q)$

в ряд Тейлора при $q \rightarrow 0$: $\square(q) = \sum_{p \geq 1} \frac{c_p}{p!} q^p$. В этом случае значения первых двух кумулянтов имеют простую интерпретацию: $c_1 = H > 0$ и $c_2 = 0$ в случае монофрактала, а отклонение c_2 от 0 характеризует степень мультифрактальности.

Численные модели. В статье рассмотрены пространственные структуры, генерируемые четырьмя различными распределенными динамическими моделями во время переходных процессов из случайного начального состояния. Первая модель – клеточный автомат модели Занга [8], часто обсуждаемый в исследованиях состояния самоорганизованной критичности [2]. Он определен на двумерном массиве вещественных чисел $z_t(i, j)$, $i, j = 1, \dots, 512$. Значение $z_t(i, j)$ интерпретируется как потенциальная энергия. Начальные значения $z_{t=0}$ в массиве задаются случайным числом (в нашем случае равномерно распределенным от 0 до 1.4). Далее изменения значений энергии происходит по простому пороговому правилу: если $z_t(i, j) > 1$, то на следующем временном шаге значение $z_t(i, j)$ поровну распределяется между четырьмя соседними ячейками. Границы считаются открытыми, т.е. часть энергии на них теряется. Кроме того, на каждом шаге в случайно выбранную ячейку добавляется фиксированная величина dz (в рассмотренном случае $dz = 0.1$). После некоторого переходного процесса полная энергии такой системы выходит на псевдостационарное состояние, в котором потери на границах в среднем компенсируются добавками dz . Но мы рассматриваем эволюцию структуры пространственного распределения энергии в системе именно во время

начального переходного процесса. Примеры пространственных распределений энергии в различные моменты переходного процесса приведены на рис. 1.

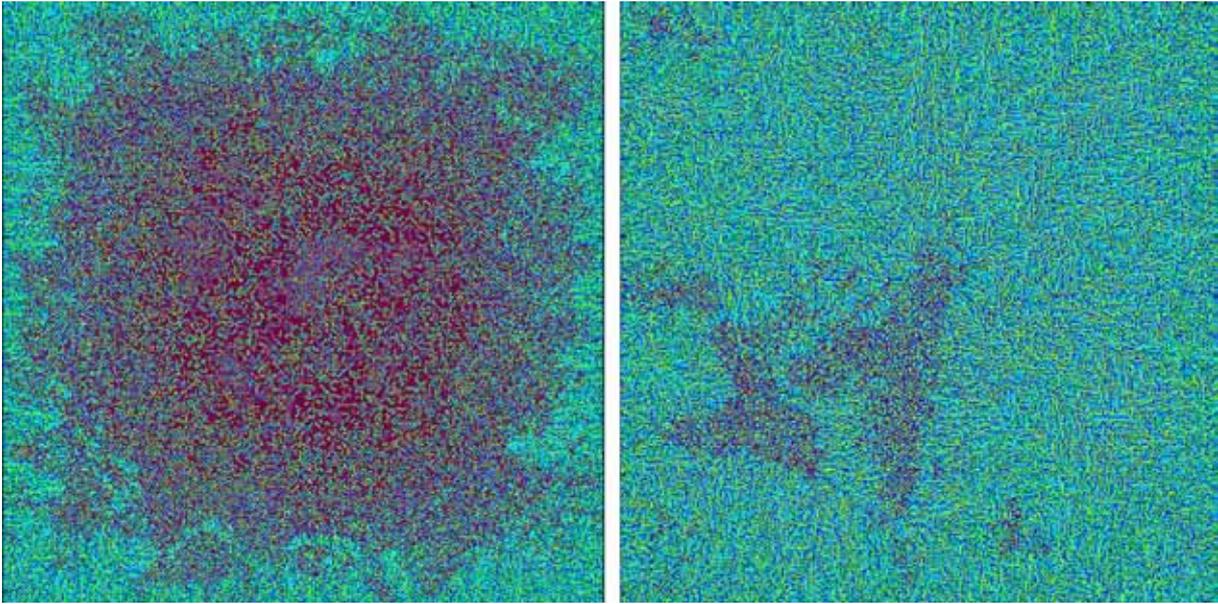


Рис. 1. Примеры пространственных распределений энергии в модели Занга в начале (слева) и конце (справа) начального переходного процесса.

В качестве второй модели использован стандартный решатель уравнений Навье-Стокса для затухающей двумерной жидкостной турбулентности на сетке 512×512 с периодическими граничными условиями. Начальные флуктуаций скорости задавались с максимумом на $k = 3$ (в пространстве волновых чисел) и случайными фазами. Анализировалась эволюция пространственного распределения скорости убывания энтропии (квадрата завихренности) [3, 6]. Примеры распределений приведены на рис. 2.

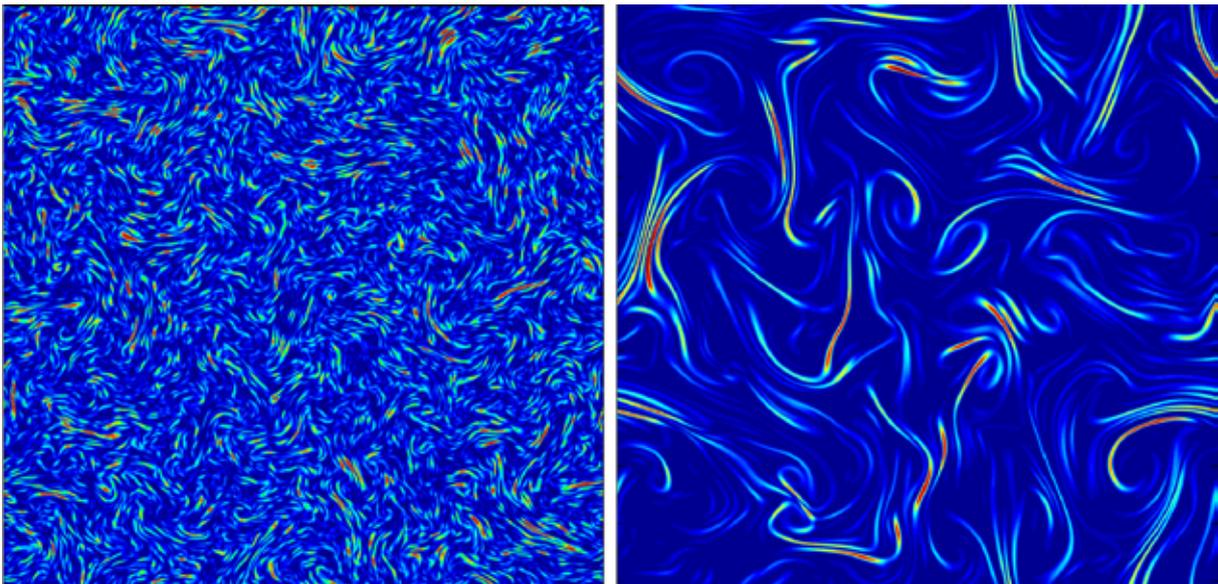


Рис. 2. Примеры пространственных распределений скорости убывания энтропии в модели жидкостной турбулентности.

Третья модель – основанная на методе крупных частиц пространственно двумерная МГД модель коллективного поведения нелинейных когерент-

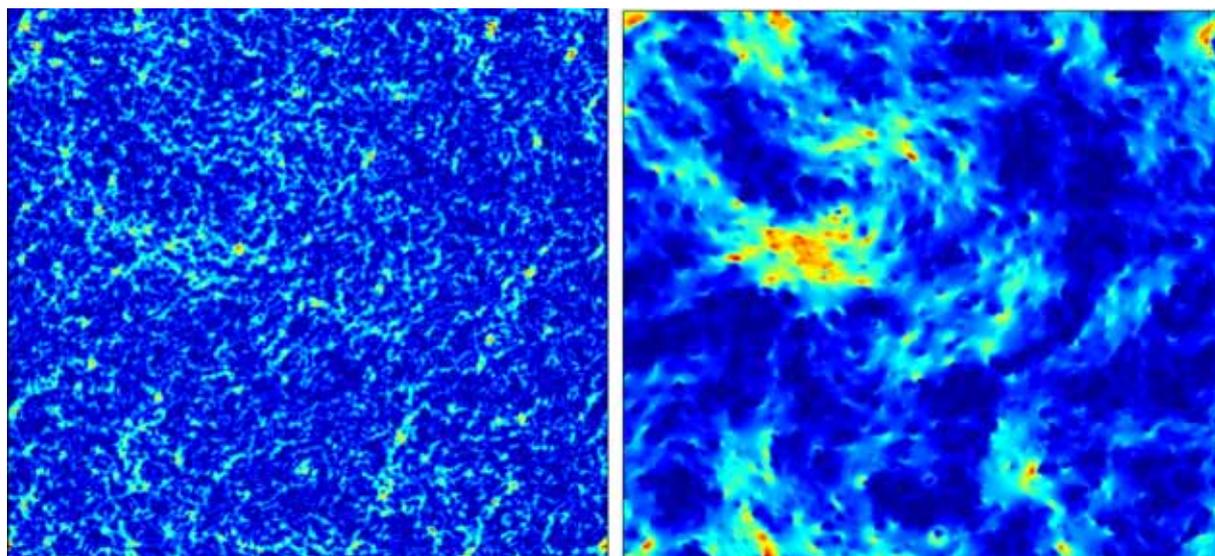


Рис. 3. Примеры распределений энергии возмущённой части магнитного поля в модели коллективной динамики системы токовых волокон.

ных структур – токовых волокон, которые взаимодействуют между собой посредством силы Ампера [4]. В неё включены макрочастицы двух сортов – трубки с постоянным продольным током обоих направлений вдоль фонового однородного магнитного поля и перпендикулярно области моделирования. Используются периодические граничные условия, по $\sim 67 \times 10^6$ частиц каждого сорта, причем начальное пространственное распределение макрочастиц близко к белому шуму, а полный продольный ток через область моделирования равен 0. Анализировалась эволюция пространственного распределения энергии возмущенной (самосогласованной) части магнитного поля (рис. 3).

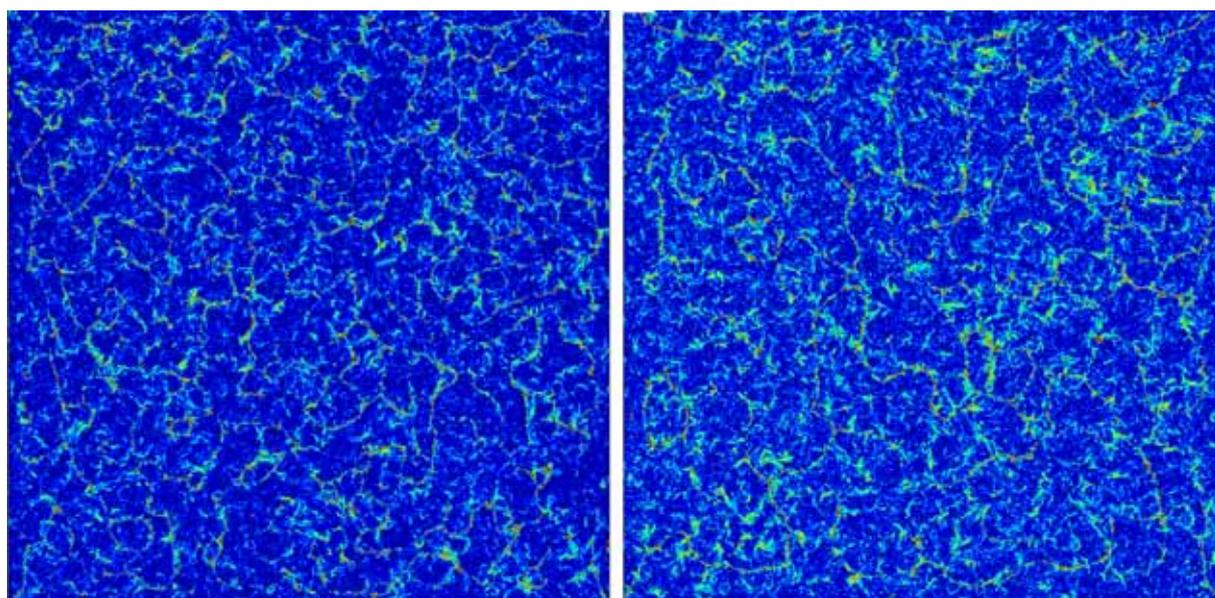


Рис. 4. Примеры полей смещения частиц в модели пылевой плазмы.

Четвёртая модель – система 10^6 заряженных микрочастиц, взаимодействующих посредством экранированного кулоновского потенциала Юкавы, динамика которой моделируется методом молекулярной динамики с ланжевенским термостатом [1]. Параметры модели выбраны так, что в системе наблюдается кристаллизация доменов упорядоченной гексагональной решётки из случайного начального распределения микрочастиц. Их подвижность характеризуется полем смещения за заданный промежуток времени. Анализировалась структура поля (рис. 4).

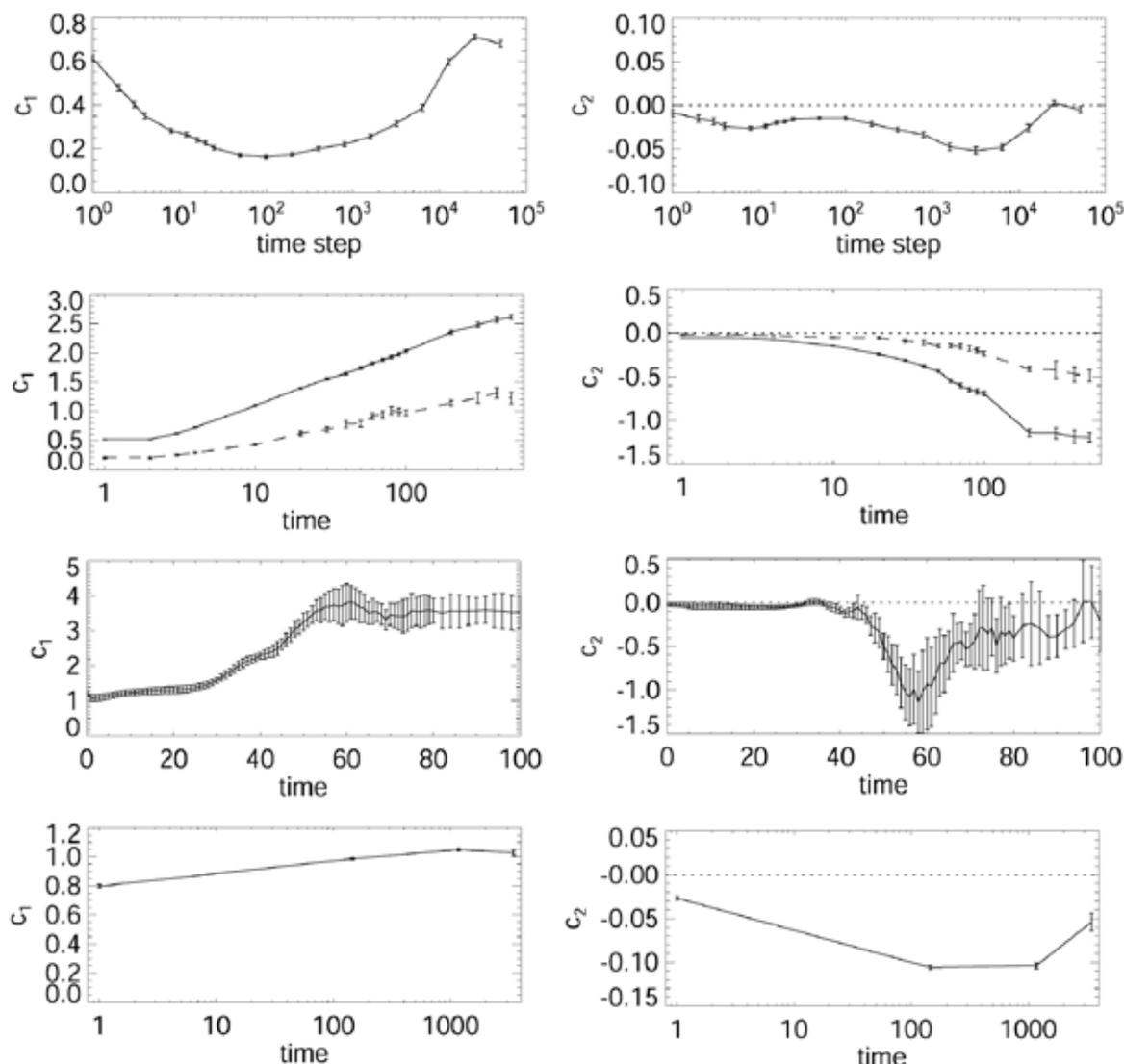


Рис. 5. Эволюция показателя самоподобия s_1 (левая колонка) и параметра мультифрактальности s_2 (правая колонка) для четырёх моделей. 90% доверительные интервалы оценены бутстреп-перестановками коэффициентов вейвлет-разложения [7]. Для второй модели пунктиром приведены те же зависимости для больших пространственных масштабов (октавы с 4 по 6).

Результаты. Временная эволюция характеристик пространственной структуры во время начального переходного процесса для всех моделей приведена на рис. 5. Отметим общие закономерности.

1) Показатель самоподобия c_1 растёт и достигает насыщения. Исключение – начальное падение c_1 для модели Занга – объясняется формированием начального транзиента на первых 100 временных шагах, для других моделей временное разрешение не позволяет видеть аналогичный процесс.

2) Параметр мультифрактальности c_2 уменьшается, удаляясь от 0 с развитием переходного процесса, а затем возвращается к нулевому значению. Для второй модели этого возвращения не видно, скорее всего, из-за недостаточного времени счёта.

Благодарности. Работа поддержана программой ОФН РАН «Плазменные процессы в солнечной системе».

Список литературы

1. Клумов Б.А. О критериях плавления комплексной плазмы // Успехи физ. наук. 2010. Т. 180. № 10. С. 1095-1108.
2. Bak P. How nature works. The science of self-organized criticality. Oxford Uni. Press. 1997.
3. Frisch U. Turbulence: the legacy of A.N. Kolmogorov. New-York: Cambridge Uni. Press, 1995.
4. Kozelov B.V., Golovchanskaya I.V., Mingalev O.V. Inverse cascade in the structure of substorm aurora and non-linear dynamics of field-aligned current filaments // Ann. Geophys. 2011. V 29. P 1349-1354.
5. Mandelbrot B. The fractal geometry of nature. San-Francisco: Freeman, 1982.
6. Tabeling P. Two-dimensional turbulence: a physicist approach // Phys. Rep. 2002. V 362. P 1-62.
7. Wendt H., Roux S.G., Abry P. et al. Wavelet leaders and bootstrap for multifractal analysis of images // Signal Proces. 2009. V 89. P 1100-1114.
8. Zhang Y.-C. Scaling theory of self-organized criticality // Phys. Rev. Lett. 1989. V 63. P 470-473.

ПРИРОДА ПОЛЯРНЫХ СИЯНИЙ И ПОДХОДЫ К ОПИСАНИЮ СТРУКТУРЫ АВРОРАЛЬНОГО СВЕЧЕНИЯ

Козелов Б.В.

Полярный геофизический институт КНЦ РАН, Апатиты,
boris.kozelov@gmail.com

Полярные сияния являются уникальным природным явлением, позволяющим наблюдать динамику магнитосферно-ионосферной плазмы в виде двумерного распределения аврорального свечения. По информативности оптические наблюдения превосходят все остальные виды наземных и спутниковых наблюдений. В статье дан обзор современных представлений об

основных физических процессах, приводящих к авроральному свечению атмосферы. Обсуждаются различные подходы к описанию пространственно-временной структуры полярных сияний: как традиционные, так и основанные на понятиях самоподобия и самоорганизации.

Введение. Полярные сияния (северные сияния, сполохи) интересовали людей с древнейших времен. К 1500 г. в Европе и Китае было известно несколько сотен письменных упоминаний атмосферных явлений, по-видимому, полярных сияний. Попытки их объяснения в то время были далеки от науки. Одну из первых догадок о природе полярных сияний сделал М.В. Ломоносов (1743), который считал, что полярные сияния образуются «движением эфира», что в современной терминологии означает движение электрических зарядов.

К концу XIX в. о полярных сияниях было известно довольно много. Это обычное явление в высоких широтах, наблюдаемое и в южном полушарии. Сияния образуют окружность вокруг полюсов [24], сопровождаются магнитными возмущениями, имеется связь с активностью Солнца. К этому времени относятся первые инструментальные наблюдения полярных сияний с фоторегистрацией на территории севера России и Шпицбергена. В начале XX в. в работах К. Биркеланда заложены основы экспериментальных исследований полярных сияний (установка «Геррелла»).

Во второй половине XX в. началось быстрое развитие оптического оборудования и методов регистрации, а также радиофизических методов наблюдений, широко использовались одновременные наземные, ракетные и спутниковые наблюдения в высоких широтах. Все это дало обширный экспериментальный материал для современного теоретического описания феномена полярных сияний и связанных с ними явлений.

Происхождение полярных сияний. Для описания процессов, участвующих в формировании полярных сияний, используем аналогию с электронно-лучевой трубкой (рис. 1).

Источником энергии для полярных сияний является солнечный ветер, который представляет собой поток плазмы с вмороженным в него межпланетным магнитным полем (ММП). Скорость солнечного ветра 300-600 км/с, плотность – от 0.1 до 10 частиц / м³. В результате взаимодействия солнечного ветра с магнитным полем Земли образуется земная магнитосфера (рис. 2). Около Земли магнитосфера имеет внешнюю форму, близкую к параболоиду, и располагается над её поверхностью на высотах от 100 км (от высоты, на которой частота соударений протонов с нейтральными атомами равна гирочастоте протонов) до ~10 земных радиусов (63 800 км) в направлении к Солнцу и до нескольких сотен земных радиусов в направлении от Солнца. Магнитосфера состоит из полей и частиц магнитосферной плазмы, в основном электронов и протонов. **Источник частиц** для магнитосферы – плазма солнечного ветра и продукты ионизации верхних слоёв атмосферы (ионос-

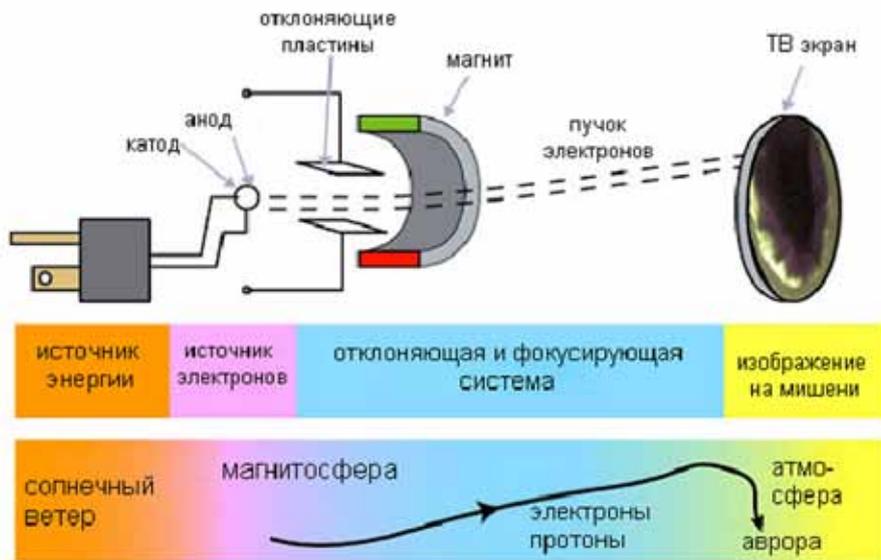


Рис. 1. Аналогия между образованием полярных сияний и формированием изображения в электронно-лучевой (телевизионной) трубке.

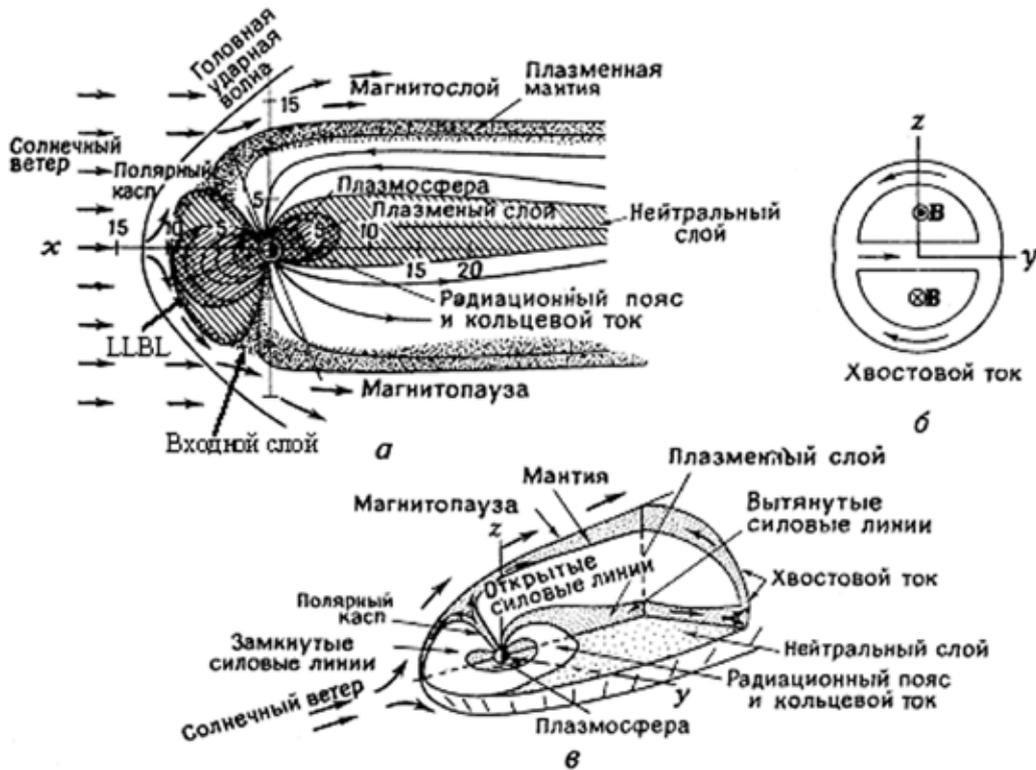


Рис. 2. Строение магнитосферы Земли.

фера Земли). По морфологическим признакам (свойствам полей и плазмы) в магнитосфере выделяют составные части (рис. 2). Они значительно отличаются параметрами полей, токов, потоков частиц, а также происходящими в них процессами. В целом, магнитосфера Земли играет роль **отклоняющей и фокусирующей системы**, формирующей потоки энергичных частиц, выпадающих в атмосферу.

Известно несколько механизмов, приводящих к высыпанию энергичных частиц в атмосферу. Они действуют в различных областях зоны полярных сияний, что приводит к различиям в спектрах (распределениях по энергии и направлению скорости) высыпающихся частиц. В значительной степени действие этих механизмов обусловлено конфигурацией силовых линий магнитного поля. Частицы входного слоя могут двигаться по силовым линиям магнитного поля, пересекая магнитопаузу, и высыпаться в конус потерь в каспе и области полярной шапки. Это области открытых силовых линий. Частицы, захваченные на замкнутые силовые линии, высыпаются благодаря процессам, нарушающим сохранение первого адиабатического инварианта и сбрасывающим частицы в конус потерь. Таковыми являются рассеяние частиц на токовом слое (неадиабатическое движение в области слабого магнитного поля) и рассеяние при взаимодействии частиц с волнами в плазме. Адиабатические процессы, не требующие изменения магнитного момента частиц, также могут перевести частицы в конус потерь. К ним относятся ускорение в электрических полях, параллельных магнитному полю, и адиабатический дрейф за счёт градиента и кривизны магнитного поля, заставляющий частицы пересекать эквипотенциали электрического поля и двигаться в области повышенного магнитного поля.

Высыпающиеся в атмосферу потоки заряженных частиц теряют энергию в результате столкновений с атомами и молекулами атмосферных газов, что приводит к их свечению. Основные атмосферные газы на высотах полярных сияний (100-200 км) – молекулярные азот (N_2), кислород (O_2) и атомный кислород (O). Свечение атмосферных эмиссий обусловлено наличием возбужденных частиц и их переходом (за один или несколько шагов) в основное состояние. Возбужденные атомы, молекулы и ионы атмосферных составляющих появляются в результате столкновений с энергичными электронами и протонами, а также с вторичными частицами, появляющимися в результате такого взаимодействия. Атмосфера играет роль **экрана**, на который проецируется динамика магнитосферно-ионосферной плазмы.

Морфология полярных сияний. Итак, полярные сияния – это свечение атмосферных газов, вызванное прохождением энергичных частиц (электронов и протонов) в верхних слоях атмосферы (> 100 км). Несмотря на то, что наиболее заметными являются полярные сияния в ночные часы, они происходят в течение всех суток, причем область аврорального свечения образует овал приблизительно вдоль геомагнитной параллели 67° – зоны Фритца [24], смещённый на дневной стороне приблизительно на 10° к полюсу [8-10]. Радиус овала около 20° , в утренние часы может иметь разрыв по долготе. Он хорошо виден со спутников (рис. 3). Но полярные сияния бывают видны более или менее часто в полярных шапках и к экватору от зон полярных сияний. Формы последних при наблюдении с поверхности Земли весьма разнообразны, но обычно сводятся к четырём структурам и их комбинациям

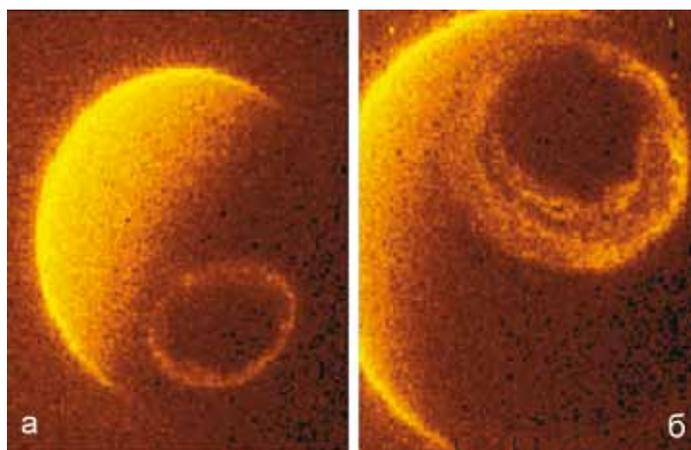


Рис. 3. Снимки овала сияний в УФ со спутника DE-1 для спокойных (а) и возмущенных (б) условий.

[4, с. 11]: 1) спокойные однородные дуги и полосы, протянувшиеся через весь небосвод в виде прямой или изогнутой линии, 2) лучи, длина которых может существенно меняться, 3) диффузные пятна, 4) большие однородные поверхности.

Интенсивность полярных сияний может меняться на несколько порядков. Классификация полярных сияний по интенсивности свечения дана в

табл. 1 [11, с. 221]. Для сравнения приведены типичные явления, которые могут быть использованы при визуальном наблюдении в ночное время, эквивалентная интенсивность в килорелеях и приблизительная скорость выделения энергии. Используемая для измерения интенсивности свечения атмосферы единица – релей – определена как интегрированная по атмосферному столбу скорость излучения, регистрируемая фотометром на поверхности Земли [11, с. 108], причем $1 \text{ релей} = 10^6 \text{ фотон см}^{-2} \text{ с}^{-1}$.

Таблица 1. Классификация интенсивности свечения полярных сияний.

Тип (балл) свечения	Явления, эквивалентные по свечению	Интенсивность, килорелей	Энергия, вносимая частицами, эрг $\text{см}^{-2} \text{ с}^{-1}$
I	Свечение млечного пути	1	3
II	Тонкие освещённые луной перистые облака	10	30
III	Освещённые луной кучевые облака	100	300
IV	Свечение полной луны	1000	3000

Морфологические особенности сияний дневной и ночной частей овала различны. Сияния на дневной стороне овала – в основном короткие лучистые дуги, отдельные лучи и пучки лучей вне зависимости от степени геомагнитной возмущенности. Ночные сияния при спокойных магнитных условиях – однородные дуги и полосы, переходящие в другие формы при увеличении возмущённости (в условиях магнитосферной суббури). Таким образом, овал не является физически однородной полосой свечения.

С ростом геомагнитного возмущения (во время геомагнитных бурь) овал полярных сияний (рис. 4): расширяется, особенно в полуночном секторе;

границы овала смещаются к экватору; уменьшается асимметрия овала. Кроме того, уменьшается средняя высота сияний вдоль авроральной зоны [5]. Изменение параметров солнечного ветра и межпланетного магнитного поля (ММП) отражается на динамике полярных сияний. Наиболее сильное влияние на положение овала полярных сияний оказывает z-компонента (B_z) ММП (рис. 5). Уменьшение B_z приводит к расширению овала и сдвигу в более низкие широты. К такому же эффекту приводит увеличение скорости солнечного ветра [74].

Все геофизические явления, происходящие в магнитосфере и ионосфере Земли в зоне полярных сияний, принято называть авроральными. Так или

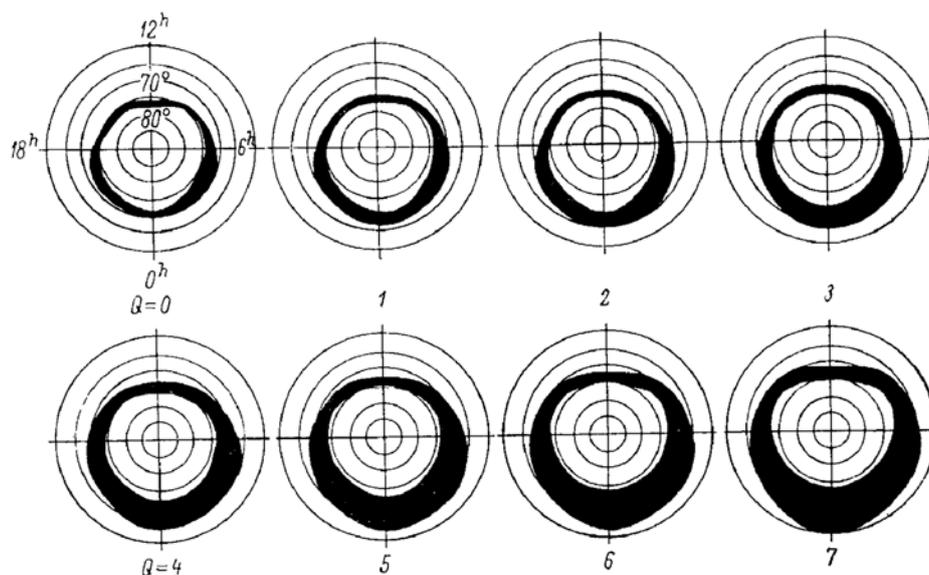


Рис. 4. Авроральный овал при различных уровнях магнитной активности [6].

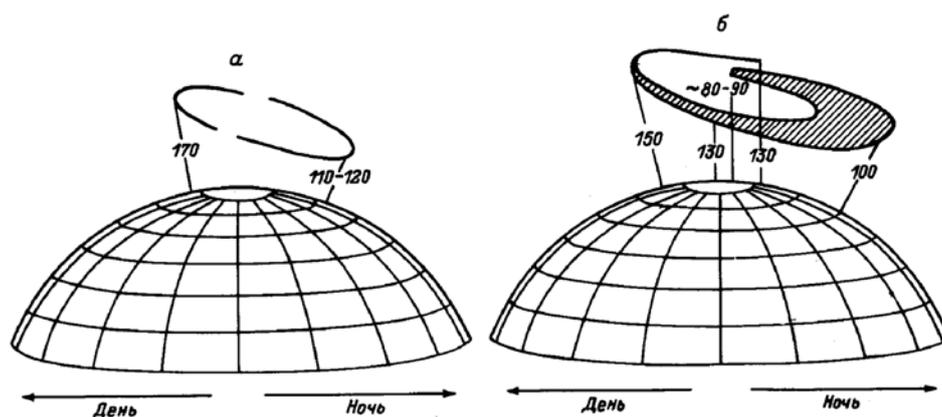


Рис. 5. Расположение овала сияний над полярной шапкой для спокойных (а) и возмущенных (б) условий [5].

иначе, они являются следствием вторжения энергичных частиц в атмосферу или тесно связаны с высыпанием частиц. К авроральным явлениям, кроме самих полярных сияний, относятся [11, с. 221]:

а) радиосияния, при которых регистрируют радиоэхо от ионизации в области полярного сияния;

б) авроральное поглощение радиоволн за счёт избыточной ионизации, производимой авроральными частицами;

в) авроральное рентгеновское излучение, обнаруживаемое шарами-зондами;

г) магнитные возмущения, производимые электрическим током в авроральной ионосфере, регистрируемые наземными магнитометрами;

д) ОНЧ радиоизлучение, генерируемое в магнитосфере.

Спектр и высотный профиль полярных сияний. Спектр полярных сияний состоит из большого числа линий и полос газов и ионов атмосферных составляющих в широком диапазоне длин волн. Яркое полярное сияние зрительно воспринимается как зелёное или красное. Эти цвета обусловлены эмиссиями атомного кислорода с длинами волн 557.7 и 630.0/636.4 нм. Их излучение имеет ряд особенностей, сильно влияющих на динамику и высотное распределение свечения. Это связано с тем, что состояния 1S и 1D метастабильны, а их времена жизни составляют 0.74 и 110 с. Из-за значительного времени жизни, состояние 1D эффективно гасится в последующих столкновениях. Поэтому некоторые лучи в полярных сияниях кажутся красными на больших высотах, но становятся зелёными ниже за счёт гашения 1D состояния атомного кислорода на малых высотах, где больше частота столкновений. Такие сияния известны как сияния класса А (рис. 6). В сияниях класса В зелёная окраска располагается выше красной окантовки нижнего края. Они вызываются более энергичными электронами, проникающими



Рис. 6. Полярные сияния типа А и В.

до высот ниже 100 км, где играют роль другие физико-химические реакции.

Вклад молекулярных полос в свечение полярных сияний значительно превышает вклад атомных линий. Основную роль играют полосы азота, соответствующие разрешённым переходам. В видимой области преобладают первая и вторая положительные системы полос N_2 и первая отрицательная система ионизованного азота N_2^+ . Эмиссии первой отрицательной системы N_2^+ -391.4 нм (колебательный переход 0-0), 427.8 нм (0-1) и 470.9 нм (0-2) возбуждаются из основного состояния молекулы N_2 в реакциях ионизации. Возбуждение из основного состояния иона N_2^+ маловероятно из-за относительно малого количества ионов на высотах полярных сияний. Время жизни этих состояний мало, поэтому высотный профиль эмиссий полос первой отрицательной системы N_2^+ подобен высотному профилю ионизации молекулярного азота.

В излучении полос системы Вегарда-Каплана иона N_2^+ , как и для 1D состояния атомного кислорода, важную роль играет гашение на малых высотах.

Примеры высотных профилей аврорального свечения для различных форм полярных сияний приведены на рис. 7. Спектр полярных сияний сильно зависит от высотного профиля энерговыделения, который определяется энергетическим и pitch-угловым распределением частиц в высыпающемся потоке. По соотношению интенсивности линий, имеющих различный высотный профиль объёмной светимости, возможна диагностика характеристик высыпающих потоков частиц. Энергия, вносимая в атмосферу высыпающими потоками протонов, в несколько раз меньше вносимой электронами [31, 32]. Кроме того, пучки высыпающих протонов в результате перезарядки испытывают значительное радиальное расплывание [1, 16]. Это приводит к тому, что свечение, вызванное потоками протонов, имеет диффузную, размытую форму. Поэтому видимые невооруженным глазом структуры полярных сияний отражают структуру высыпания электронов. Наличие

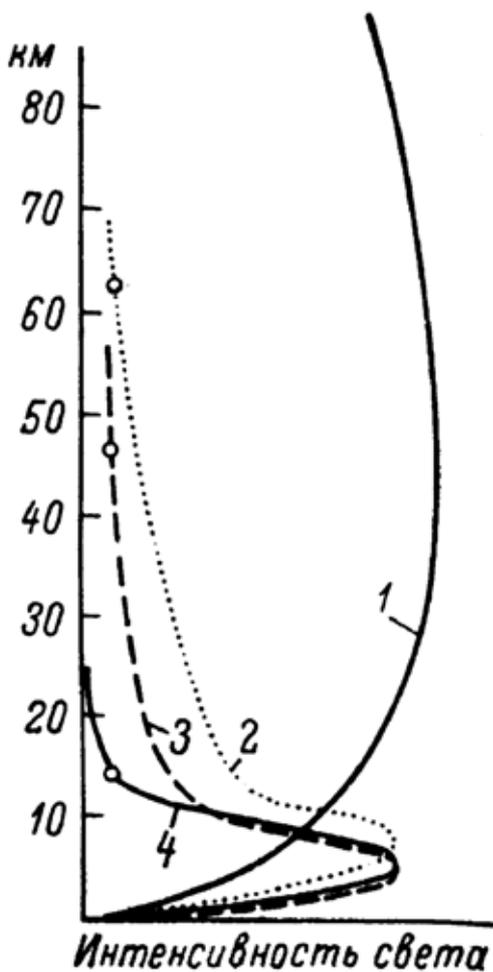


Рис. 7. Высотные профили аврорального свечения для различных форм полярных сияний [34]. Вертикальная ось — расстояние от нижней границы сияния. 1 — лучи, 2 — драпри, 3 — дуги с лучевой структурой, 4 — дуги.

протонов в высыпающемся потоке частиц обычно определяется по присутствию в спектре полярных сияний водородных Бальмеровских линий, $H\alpha$ (656.3 нм) и $H\beta$ (486.1 нм), с доплеровским смещением частоты в фиолетовую сторону при наблюдении вдоль силовой линии магнитного поля [71].

Классификация форм сияний. Морфологическому описанию форм полярных сияний, кроме многочисленных работ, посвящены классические международный атлас [35] и монография [20]. Геометрические размеры дискретных структур, наблюдаемых в полярных сияниях, исследовались многими авторами по наземным (камеры всего неба и телевизионные наблюдения) и спутниковым данным. Во многом приводимые авторами значения зависят от характеристик приборов и методики обработки наблюдений. Протяженность дуг и полос может превышать 1000 км. Данные о ширине дуг противоречивы: от менее 100 м для отдельных волокон до 8-15 км для спокойных дуг [14, 39, 48]. Многие авторы отмечают, что с ростом интенсивности свечения дуги утончаются.

Яркие дискретные формы (дуги и лучевые структуры) обычно погружены в более слабое диффузное свечение. Лучи вытянуты вдоль силовых линий магнитного поля. Их видимая длина варьируется от десятков до сотен километров. Иногда длина лучей составляет всего несколько километров. Теоретически нижний предел толщины лучей определяется гирорадиусом авроральных электронов и составляет несколько метров. Типичные значения толщины лучей по данным [30, 48] составляют 150-300 м.

Пульсирующие диффузные пятна имеют неправильную форму со средними размерами в несколько десятков километров. Они появляются преимущественно в утренние часы, их яркость невелика.

Особый класс авроральных явлений составляют «чёрные» сияния. Они представляют собой резко очерченные провалы интенсивности свечения в области, занятой сияниями. Тёмные волокна внутри однородных дуг описаны еще в [66]. По форме чёрные сияния бывают такими же, как и обычные – дуги, полосы, лучи, пятна и пульсирующие структуры. Внутри однородных дуг при наблюдении вблизи зенита во время понижения яркости часто появляются вытянутые вдоль дуги тёмные волокна шириной 150-1500 м и длиной ~20 км. Наблюдаются также тёмные полосы, окаймляющие яркие формы.

Структуры полярных сияний не являются статичными. Их формы и положения непрерывно меняются. Особенно наглядные изменения происходят с дискретными формами (дугами) в активные периоды (взрывная фаза суббури). Многими авторами обнаружено, что авроральные дуги подвергаются разнообразным мелко- и крупномасштабным, иногда пространственно-периодическим, искривлениям (рис. 8-11). Интерес к исследованию искривлений и деформаций авроральных форм и их движений обусловлен тем, что они отражают динамику электрических полей и токов в ионосфере и магнитосфере Земли.

Изучением элементарных деформаций полярных сияний занимались многие авторы, причем в основном исследовались деформации белых и чёр-

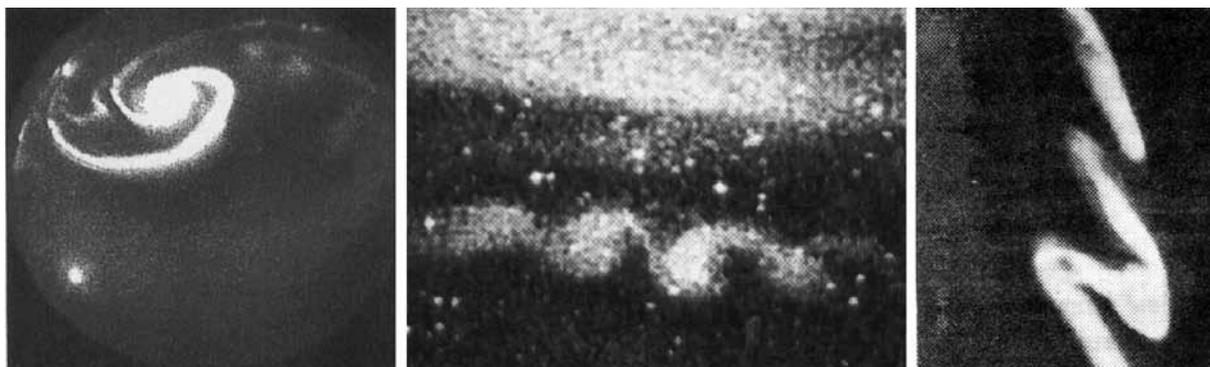


Рис. 8. Деформации авроральных форм: спираль [57, 58], вихри [67], складки [29].

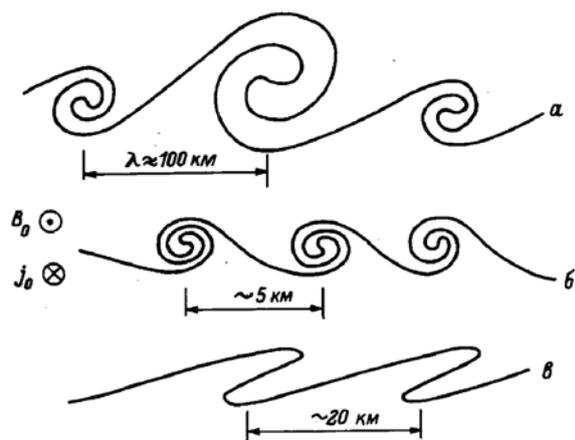


Рис. 9. Схема поперечного сечения трёх типов элементарных деформаций авроральных дуг, сверху вниз: спирали, вихри, складки.

ных дуг. Обзор ранних работ приведен в [3]. Наиболее детальными экспериментальными работами в этой области остаются [29, 53, 54]. Группа Дэвиса наблюдала сияния на Аляске высокочувствительными телевизионными камерами с полем зрения $12 \times 16^\circ$, направленными в зенит, вела наблюдения камерами полного обзора неба и использовала данные, полученные со спутников DMSP.

Группа Огути проводила наблюдения более широкоугольной телевизионной камерой с полем зрения $\sim 60^\circ$ на ст. Сева (Антарктида), а также

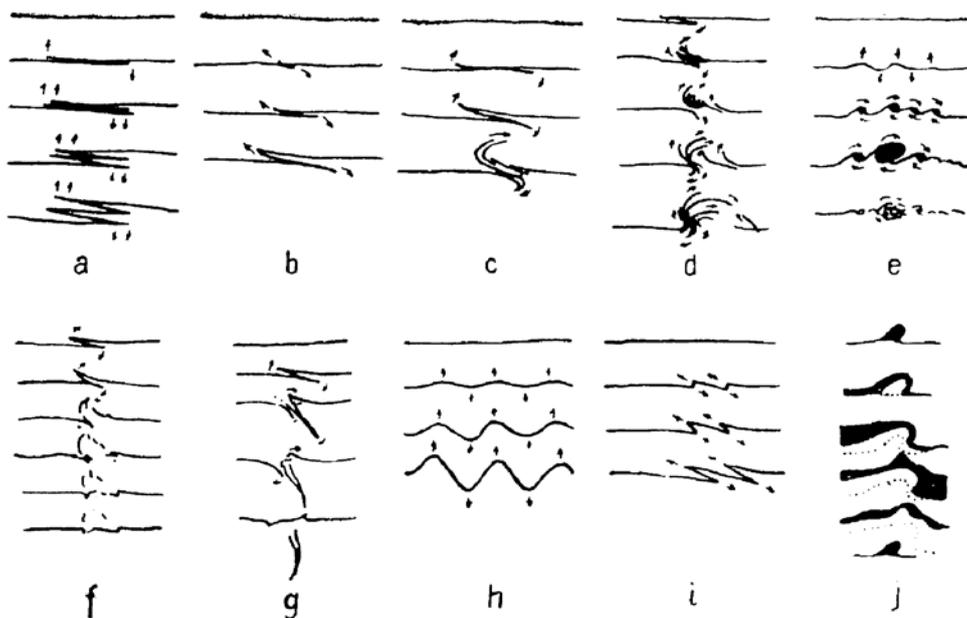


Рис. 10. Основные деформации протяжённых форм сияний, по Огути.

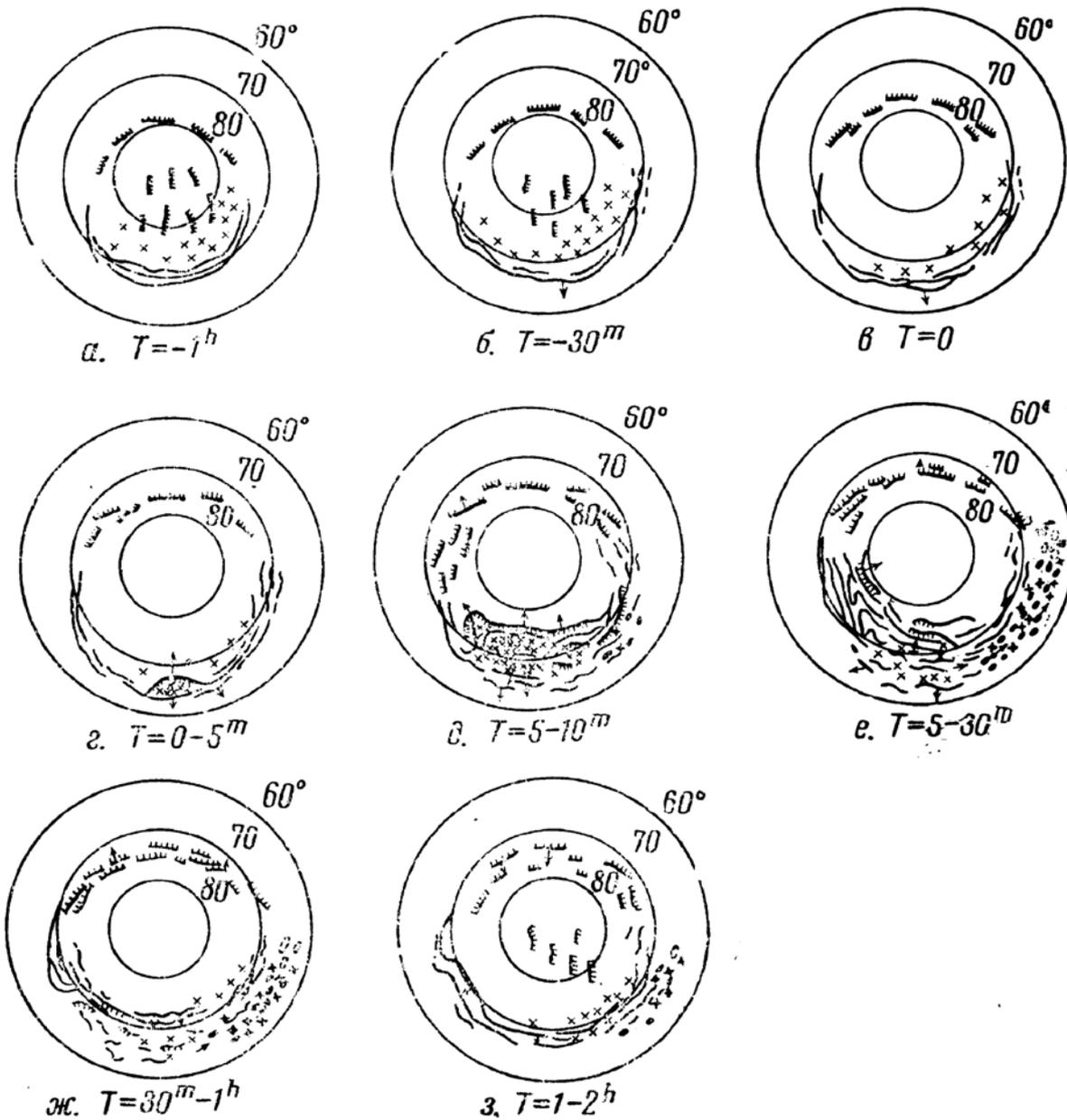


Рис. 11. Схема развития авроральной суббури [7]. Сплошные линии – дуги и полосы, сплошные линии с чёрточками – лучистые формы, чёрные кружки – пульсирующие сияния, крестики – диффузное свечение.

использовала данные спутников DAPP и ISIS. В отличие от классификации Дэвиса и Халлиана, где за основу берётся направление закручивания формы и пространственный масштаб, в классификации Огути основное внимание обращено на эволюцию самих деформаций и их появление в зависимости от фазы суббури [53, 54]. В классификацию Огути включено значительно большее число разновидностей деформаций.

Суббури в полярных сияниях. Многолетние наблюдения показали, что появление различных форм в той или иной области овала полярных сияний,

их деформации и движения в целом укладываются в общую схему (псевдо) периодического крупномасштабного процесса, который принято называть суббурей. Результаты наблюдений полярных сияний суммированы в общей схеме суббури в полярных сияниях в работах [7, 12].

Современные подходы к исследованию структуры полярных сияний. Наряду с традиционным морфологическим подходом к описанию структуры полярных сияний и попытками связать отдельные элементы этой структуры со специфическими процессами (неустойчивостями) в магнитосферно-моносферной плазме, в последние годы развивается другой, комплексный подход, основанный на представлениях теории открытых распределённых систем. Магнитосфера Земли является открытой распределённой нелинейной диссипативной системой вдали от состояния термодинамического равновесия, к тому же находящейся под постоянным внешним воздействием со стороны солнечного ветра, который также имеет сложную пространственно-временную структуру. Поступающий в магнитосферу поток энергии и вещества частично накапливается в хвосте магнитосферы и в среднем компенсируется потерями в многочисленных диссипативных процессах, происходящих в заполняющей магнитосферу плазме и на её границах [46]. Тем самым, магнитосфера Земли балансирует вблизи так называемого неравновесного (квази) стационарного состояния [52]. Типичными примерами таких состояний являются турбулентность (для жидкости) и состояние самоорганизованной критичности [13, 36]. Динамика таких систем обычно весьма сложна, не поддаётся полному морфологическому описанию, но обладает особой симметрией, выражающейся в степенных законах распределения статистических характеристик [50]. Таким образом, исследование систем такого класса сводится к отысканию этих степенных законов и пределов их применимости по экспериментальным данным [47].

В ряде работ [2, 26, 40-46, 69, 70] этот подход использовался при анализе данных оптических наблюдений полярных сияний. Наиболее интересны результаты анализа пространственно-временной области аврорального свечения в околополуденной области овала. В работе [43] показано, что плотности распределения вероятности их характеристик имеют степенные законы распределения в широком диапазоне масштабов: от 1 сек. до ~3 часов по времени, от 10 до 10^7 км² по максимальной площади и от 10 до 10^{11} км²с по интегральной плотности (рис. 12). При этом показатели степени, полученные по наземным данным для сравнительно малых масштабов, хорошо согласуются с величинами, полученными для больших масштабов по данным спутника Поляр [70]. Этот результат является экспериментальным свидетельством в пользу гипотезы о существовании режима самоорганизованной критичности в магнитосферно-ионосферной плазме.

Благодарности. Работа поддержана программой ОФН РАН «Плазменные процессы в солнечной системе».

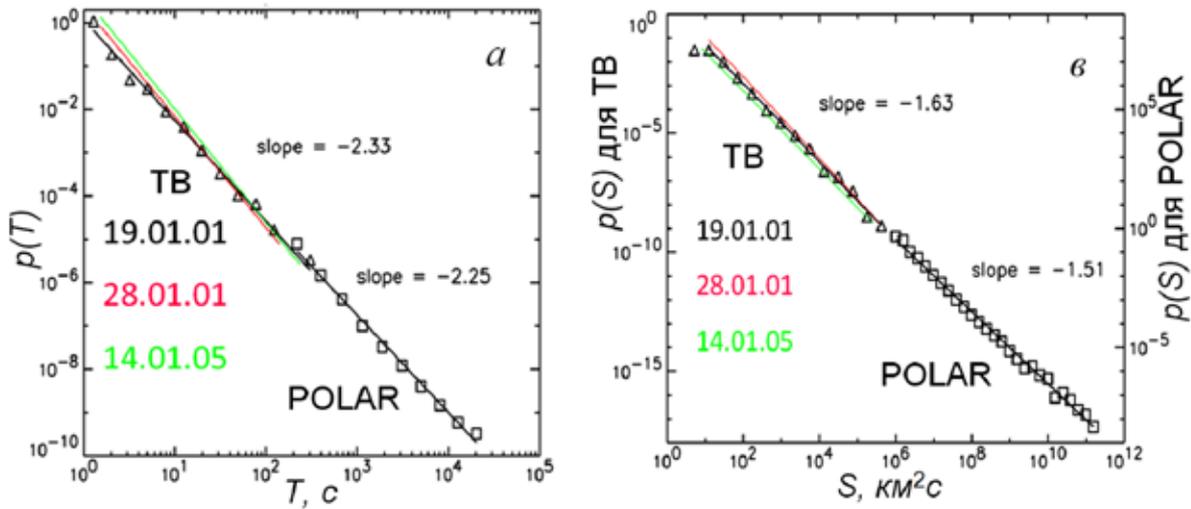


Рис. 12. Плотность распределения вероятности для характеристик областей аврорального свечения, сравнение ТВ и спутниковых наблюдений: а – время жизни; в – интегрированный размер. Для ТВ данных приведены распределения для трёх случаев.

Список литературы

1. Иванов В.Е., Козелов Б.В. Прохождение электронных и протонно-водородных пучков в атмосфере Земли // Апатиты: Изд-во КНЦ РАН, 2001. 260 с.
2. Козелов Б.В. Фрактальные характеристики пространственной структуры полярных сияний // Физика околоземного космического пространства. Апатиты: Изд-во КНЦ РАН, 2000. С. 572-597.
3. Корнилова Т.А. Тонкая структура авроральных форм. Апатиты: Изд-во КНЦ РАН, 1989. 35 с.
4. Омхольт А. Полярные сияния. М.: Мир, 1974. 248 с.
5. Старков Г.В. // Полярные сияния. 1974. № 21. С. 5-25.
6. Старков Г.В., Фельдштейн Я.И. // Полярные сияния. 1968. № 17. С. 22.
7. Старков Г.В., Фельдштейн Я.И. // Геомагнетизм и аэрономия. 1971. Т. 11. С. 560.
8. Хорошева О.В. Пространственно-временное распределение полярных сияний и их связь с высокоширотными геомагнитными возмущениями // Геомагнетизм и аэрономия. 1961. Т. 1. № 5. С. 695-701.
9. Фельдштейн Я.И. // Геомагнетизм и аэрономия. 1963. Т. 3. С. 227-239.
10. Фельдштейн Я.И. // Исследования полярных сияний. 1960. № 4. С. 61-78.
11. Харгривс Дж.К. Верхняя атмосфера и солнечно-земные связи // Л.: Гидрометеоиздат, 1982. 351 с.
12. Akasofu S.-I. Polar and magnetospheric substorm // Dordrecht, Holland, 1968. Перевод: Акасофу С.-И. Полярные и магнитосферные суббури. М.: Мир, 1971. 316 с.
13. Bak P. How nature works. The science of self-organized criticality // Oxford Uni. Press, 1997.
14. Borovsky J.E. Auroral arc thicknesses as predicted by various theories // J. Geophys. Res. 1993. V 98. P 6101-6138.

15. Brändström U. The auroral large imaging system-design, operation and scientific results. PhD thesis. Inst. of Space Physics, Kiruna, Sweden, October 2003. IRF Sci. Rep. 279. ISBN 91-7305-405-4.
16. Davidson G.T. Expected spatial distribution of low-energy proton precipitated in the auroral zones // *J. Geophys. Res.* 1965. V. 70. P. 1061.
17. Davis T.N. Observed characteristics of auroral forms // *Space Sci. Rev.* 1978. V 22. N 1. P 77-113.
18. Davis T.N., Hallinan T.J. Auroral spirals. 1. Observations // *J. Geophys. Res.* 1976. V 81. N 22. P 3953-3958.
19. Davis T.N., Hallinan T.J., Stenback-Nielsen H.C. Auroral conjugacy and time-dependent geometry of auroras // *The radiating atmosphere*. Ed. McCormac. 1971. P 160-169.
20. Eather R.H. *Majestic Lights. The aurora in science, history and the arts*. Washington, 1980. 323 p.
21. Eather R.H., Mende S.B. Systematic in auroral energy spectra // *J. Geophys. Res.* 1972. V 77. P 660.
22. Evans D.S. The observations of the near monoenergetic flux of auroral electrons // *J. Geophys. Res.* 1968. V 73. P 2315-2323.
23. Frank L.A., Ackerson K.L. Observations of charged particles precipitation into the auroral zone // *J. Geophys. Res.* 1971. V 76. P 3612.
24. Fritz H. // *Patersmanns geographische Mitteilungen*. 1874. V 20. P 347.
25. Golovchanskaya I.V., Ostapenko A.A., Kozelov B.V. Relationship between the highlatitude electric and magnetic turbulence and the Birkeland field-aligned currents // *J. Geophys. Res.* 2006. V 111.
26. Golovchanskaya I.V., Kozelov B.V., Sergienko T.I. et al. Scaling behavior of auroral luminosity variations observed by ALIS // *J. Geophys. Res.* 2008. V 113.
27. Gustavsson B. Tomographic inversion for ALIS noise and resolution // *J. Geophys. Res.* 1998. V 103. A11. P 26621-26632.
28. Hallinan T.J., Davis T.N., Webster H.F. Auroral spirals: a consequence of field-aligned currents // *Rep. UAG R-221. Geophys. Inst. Univ. of Alaska. Fairbanks*. 1972.
29. Hallinan T.J., Davis T.N. Small-scale auroral arc distortions // *Planet. Space Sci.* 1970. V 18. P 1735-1744.
30. Hallinan T.J., Stenback-Nielsen H.C., Deehr C.S. // *J. Geophys. Res.* 1985. V 90. P 8161-8175.
31. Hardy D.A., Gussenhoven M.S., Brautigam D. A statistical model of auroral ion precipitation // *J. Geophys. Res.* 1989. V 94. P 370.
32. Hardy D.A., Gussenhoven M.S., Holeman E. A statistical model of auroral electron precipitation // *J. Geophys. Res.* 1985. V 90. P 4229.
33. Helliwell R.A. *Whistlers and related ionospheric phenomena*. Stanford Uni. Press, Palo Alto, Calif, 1965.
34. Hultqvist B. *Physics of geomagnetic phenomena*. Eds. Matsushita, Campbell. Academic Press, 1967.
35. *International auroral atlas*. Ed. F. Jacka. Edinburgh, 1963. 23 p.
36. Jensen H.J. *Self-organized criticality*. Cambridge Uni. Press, 1998.

37. Kimball J., Hallinan T.J. A morphological study of black vortex streets // *J. Geophys. Res.* 1998. V 103. P 14683-14695.
38. Kimball J., Hallinan T.J. Observations of black auroral patches and of their relationship to other types of aurora // *J. Geophys. Res.* 1998. V 103. P 14671-14682.
39. Knudsen D.J., Donovan E.F., Cogger L.L. et al. Width and structure of mesoscale optical auroral arcs // *Geophys. Res. Lett.* 2001. V 28. N 4. P 705-708.
40. Kozelov B.V., Rypdal K. Spatial scaling of optical fluctuations during substorm-time aurora // *Ann. Geophys.* 2007. V 25. P 915-927.
41. Kozelov B.V., Golovchanskaya I.V. Scaling of electric field fluctuations associated with the aurora during northward IMF // *Geophys. Res. Lett.* 2006. V 33.
42. Kozelov B.V., Vjalkova N.Y. Search of temporal chaos in TV images of aurora // *Int. J. Geomagn. Aeron.* 2005. V 5.
43. Kozelov B.V., Uritsky V.M., Klimas A.J. Power law probability distributions of multiscale auroral dynamics from ground-based TV observations // *Geophys. Res. Lett.* 2004. V 31.
44. Kozelov B.V. Fractal approach to description of the auroral structure // *Ann. Geophys.* 2003. V 21. P 2011-2023.
45. Kozelov B.V., Golovchanskaya I.V., Mingalev O.V. Inverse cascade in the structure of substorm aurora and non-linear dynamics of field-aligned current filaments // *Ann. Geophys.* 2011. V 29.
46. Lui A.T.Y., Chapman S.C., Liou K. et al. Is the dynamic magnetosphere an avalanching system? // *Phys. Res. Lett.* 2000. V 27. N 7. P 911-914.
47. Lui A.T.Y. Multiscale phenomena in the near-Earth magnetosphere // *J. Atmosph. Solar-Terr. Phys.* 2002. V 64. P 125-143.
48. Maggs J.E., Davis T.N. Measurements of the thicknesses of auroral structures // *Planet. Space Sci.* 1968. V 15. P 205-209.
49. Mandelbrot B. *The fractal geometry of nature.* San-Francisco: Freeman, 1982.
50. Mandelbrot B.B. Multifractal measures, especially for the geophysicist // *PAGEOPH.* 1989. V 131. N 1-2. P 5-42.
51. Mende S.B. Far ultraviolet imaging from the IMAGE spacecraft // *Space Sci. Rev.* 2000. V 91. P 277.
52. Milovanov A.V., Zelenyi L.M. Nonequilibrium stationary states in the earth's magnetotail. Stochastic acceleration processes and nonthermal distribution functions // *Adv. Space Res.* 2002. V 30. P 2667-2674.
53. Oguti T. Rotational deformations and related drift motions of auroral arcs // *J. Geophys. Res.* 1974. V 79. P 3861-3865.
54. Oguti T. *Metamorphoses of aurora* // *Memoirs of National Institute of Polar Research. Ser. Aeronomy.* 1975. N 12. 101 p.
55. Oguti T. Similarity between global auroral deformations in DAPP photographs and small scale deformations observed by TV camera // *J. Atmosph. Solar-Terr. Phys.* 1975. V 37. N 11. P 1413-1418.
56. Oguti T. *TV observations of auroral arcs* // *Physics of auroral arc formation. Geophys. Monogr. Ser. Ed. S.-I. Akasofu, J.R. Kan. AGU, Washington, DC.* 1981. V 22. P 31-41.
57. Partamies N., Freeman M.P., Kauristie K. On the winding of auroral spirals.

- Interhemispheric observations and Hallinan's theory revisited // *J. Geophys. Res.* 2001. V 106. A12. P 28913-28924.
58. Partamies N., Kauristie K., Pulkkinen T.I. et al. Statistical study of auroral spirals // *J. Geophys. Res.* 2001. V 106. A8. P 15415-15428.
 59. Rearwin S. Rocket measurements of low-energy auroral electrons // *J. Geophys. Res.* 1971. V 76. P 4505-4517.
 60. Rees M.H. *Physics and chemistry of the upper atmosphere.* Ed. A.J. Dessler. Cambridge Uni. Press, UK, 1989. 304 p.
 61. Sergeev V.A., Yahnin A.G. Features of auroral bulge expansion // *Planet. Space Sci.* 1979. V 27. P 1429-1440.
 62. Sharp R.D., Carr D.L., Johnson R.G. Satellite observations of the average properties of auroral particle precipitations. Latitude variations // *J. Geophys. Res.* 1969. V 19. P 4618.
 63. Sharp R.D., Johnson R.G. Satellite measurements of auroral particle precipitation // *Earth's particles and fields.* New-York: Reinhold Co, 1967. P 113-125.
 64. Sharp W.E., Hays P.B. Low-energy auroral electrons // *J. Geophys. Res.* 1974. V 79. P 4319-4321.
 65. Steen Å. and Brändström U. ALIS - a multi-station ground-based imaging system at high latitudes // *STEP Int. Newsletter.* 1993. N 5.
 66. Störmer C. *The polar aurora* // Oxford: Clarendon Press, 1955. 403 p.
 67. Trondsen T.S., Cogger L.L. A survey of small-scale spatially periodic distortions of auroral forms // *J. Geophys. Res.* 1998. V 103. P 9405-9415.
 68. Trondsen T.S., Cogger L.L. High-resolution television observations of black aurora // *J. Geophys. Res.* 1997. V 102. P 363-378.
 69. Uritsky V., Klimas A., Vassiliadis D. Evaluation of spreading critical exponents from the spatiotemporal evolution of emission regions in the nighttime aurora // *Geophys. Res. Lett.* 2003.
 70. Uritsky V.M., Klimas A.J., Vassiliadis D. et al. Scale-free statistics of spatiotemporal auroral emissions as depicted by POLAR UVI images. Dynamic magnetosphere is an avalanching system // *J. Geophys. Res.* 2002. V 107. A12. P 1426.
 71. Vallance-Jones A., Creutzberg F., Gattinger R.L. et al. Auroral studies with a chain of meridian scanning photometers. 1. Observations of proton and electron aurora in magnetospheric substorms // *J. Geophys. Res.* 1982. V 87. P 4489.
 72. Webster H.F., Hallinan T.J. Instabilities in charge sheets and current sheets and their possible occurrence in the aurora // *Radio Sci.* 1973. V 8. N 5. P 475-482.
 73. Yahnin A.G., Despirak I.V., Lubchich A.A. et al. Relationship between substorm auroras and processes in the near-Earth magnetotail // *Space Sci. Reviews.* 2006. V 122. P 97-106.
 74. Zverev V.L., Starkov G.V., Feldstein Ya.I. Influences of the interplanetary magnetic field on the auroral dynamics // *Planet. Space Sci.* 1979. V 27 (5). P 665-667.

ФРАКТАЛЫ И МУЛЬТИФРАКТАЛЫ: ТРИ ИПОСТАСИ ТЕОРЕМЫ О НЕПОДВИЖНОЙ ТОЧКЕ

Макаренко Н.Г.

Главная астрономическая обсерватория РАН, Санкт-Петербург,
ng-makar@mail.ru

Основой предлагаемого текста послужили лекции автора, прочитанные на молодёжных школах, в том числе в Апатитах в октябре 2011 г. Ради краткости все доказательства опущены. Это дает читателю восхитительную возможность видеть, но не верить! Но даже в таком виде статья даёт хорошее введение в теорию фракталов и показывает богатые возможности её применения в естественных науках.

Не буду заморачивать тебя подробностями,
потому что ты можешь...
– Могу что?
– Можешь заморочиться.

Д. Адамс. Жизнь, Вселенная и Вообще.

«Все фигуры, которые я исследовал и назвал фракталами, в моем представлении обладали свойством быть нерегулярными, но самоподобными», – писал Б. Мандельброт, который в 1975 г. ввел термин фрактал (с лат. fractus – дробный). Процесс построения конструктивных фракталов, таких как множество Кантора или снежинка Коха, был предельно прост. Сперва выбиралась основная процедура-генератор, а затем итеративно, до бесконечности ее применяли к произвольному компактному. Конечно же, сами процедуры генерации фрактала, удаление части фигуры или её излом, напоминают скорее хирургию с элементами садизма, нежели приемы аналитики. То, что получалось в конце, и было фракталом – компактным глобально несвязным объектом, зачастую не имеющим даже тени. Он казался столь же неуместным в нашем уютном евклидовом мире с его регулярными структурами, как, скажем, крокодил Гена в Лебедином озере. Ситуация изменилась в 1981 г., когда Дж. Хатчинсон поместил пришельцев в их родную среду – пространство компактов. Именно здесь Система итеративных функций (СИФ) сжимающих отображений порождает фракталы простым и естественным путем, при котором ампутация отдельных фрагментов связанных множеств трансформируется в корректную форму непрерывного сжатия в подходящей метрике. При чтении, если начинает смущать терминология, следуйте простому правилу: никогда не жуйте пилюлю, которую вас заставляют проглотить. В конце текста помещён краткий список литературы, который не претендует на полноту.

Дробные размерности

Оставаясь на почве любой физической теории, мы не можем интерпретировать формулы, содержащие дробные показатели основных единиц.

В. Вильямс

История началась с попыток английского физика Ричардсона измерить длину побережья Британии. Располагая подробной топографической картой, он аппроксимировал побережье ломаной L_b , составленной из отдельных хорд длиной b , все вершины которой лежали на берегу. Он полагал, что существует предел $L_b \rightarrow L$ при $b \rightarrow 0$, как бывает для гладких кривых. Но оказалось, что с уменьшением b длина ломаной растёт до бесконечности по закону $L_b = \lambda b^{1-D}$, $D < 2$. Если на каждом звене b построить квадрат, то суммарная площадь квадратов равна $b^2 N = b^2 L_b / b = \lambda b^{2-D} \rightarrow 0$ при $b \rightarrow 0$, $D < 2$. Таким образом, береговая линия имеет бесконечную длину и порождает нулевую площадь! Первое, что приходит в голову, это сомнения в корректности такой аппроксимации. Классический пример привел Анри Лебег: возьмём равносторонний треугольник ABC и соединим середины трёх его сторон (рис. 1). Очевидно, $AB + AC = BC_1 + C_1A_1 + A_1B_1 + B_1C$. Продолжая разбиение, мы приближаем ломанную к стороне BC . Если считать последнюю пределом ломаной, получим $AB + AC = BC$. Разумеется, сторона BC не является пределом ломаной – она приближается к BC лишь по положению, но не по направлению. Всё дело – в степени гладкости. Длина кривой выражается интегралом, под знаком которого стоят производные от уравнения кривой, следовательно, гладкость кривой по меньшей мере C^1 .

Зубец пилы – функция $f(x) = (1 - 2|1/2 - x|)$, для которой отношение $[f(h) - f(0)]/h$ при $h \rightarrow 0$ стремится к двум разным пределам: к 1 при $h > 0$ или к -1 при $h < 0$. Пила не имеет производных в бесконечном числе вершин! Более общий случай, когда точки, в которых отсутствует производная, составляют почти всю область определения функции, приводит к ситуации,

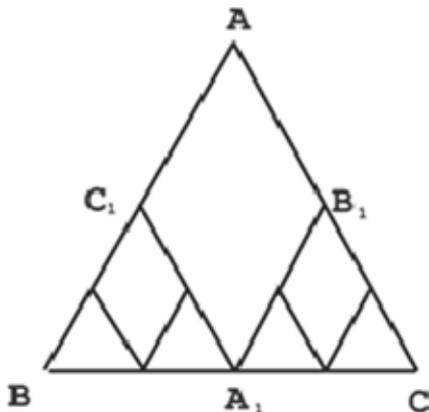


Рис. 1. Парадокс Лебега.

которая кажется неприемлемой в рамках гладкого анализа. «С омерзением и ужасом я отворачиваюсь от этой зловредной язвы – непрерывных функций, нигде не имеющих производных», – писал Эрмит Стилтесу в 1893 г. Существование таких функций не является тривиальным и с интуитивной точки зрения. Как заметил А. Пуанкаре, «надо быть очень сведущим, чтобы не считать очевидным, что каждая кривая имеет касательную: и в самом деле, если представить себе эту кривую и не-

которую прямую как две узкие полосы, то всегда можно расположить их так, что они могут иметь общую часть, не пересекаясь». Для описания этой ситуации формулу линейных приращений $\Delta y = \mu \Delta x + O(\Delta x^2)$ следует заменить на $\Delta y = \mu_H (\Delta x)^H$, где H – показатель Гёльдера, а μ и μ_H – обычная и гёльдеровская производные. Для гладких функций $H = 1$; при $H < 1$ вместо касательной имеется криволинейный конус $\Delta y \approx \Delta x^H$. Объекты, для которых $H > 1$, а показатель D в формуле Ричардсона строго больше единицы, обычно называют фракталами, хотя это определение не является строгим. Ясно, что D играет роль размерности, хотя и дробной. Напомним некоторые эпизоды из истории размерности.

В эпоху А. Пуанкаре произвольное гладкое многообразие называли непрерывностью; под его параметрической размерностью понималось минимальное число координат, необходимых для идентификации точки многообразия. Но Г. Кантор показал, что в рамках такого определения невозможно различить плоскость и линию. Действительно, пусть $x = (x_1, x_2)$ – точка квадрата $I = [0, 1] \times [0, 1]$. Её координаты $0 \leq x_1, x_2 \leq 1$ можно представить в виде бинарных дробей: $x_1 = 0, \alpha_1 \alpha_2 \dots$; $x_2 = 0, \beta_1 \beta_2 \dots$, где α_i, β_i – нули или единицы. Сопоставим паре разложений x_1, x_2 последовательность $z = 0, \alpha_1 \beta_1 \alpha_2 \beta_2 \dots$, наследующую лексикографический порядок оригиналов. Мы получили отображение $z: I \rightarrow [0, 1]$. Следовательно, существует способ параметризации точек плоскости только одной координатой – извилистой линией! Разумеется, это возможно лишь в том случае, если мы не связываем себя условием непрерывности обратного отображения. А. Пуанкаре заметил, что отказ от непрерывности трудно примирить с интуитивными логическими принципами. То, что было предложено им взамен, основано на остроумной концепции физической непрерывности – цепочки, в которой каждый элемент неотличим от соседнего, но оба конца цепи различимы. Размерность непрерывности вводится с помощью понятия купюры. Последняя образуется совокупностью элементов, изъятых из непрерывности. Если в результате такой операции непрерывность разделяется на две части, а сама купюра состоит лишь из конечного числа элементов, не образующих связного множества, то размерность непрерывности равна единице. Эти понятия легко переносятся на евклидовы геометрические объекты. Замкнутая кривая делится на две части двумя отмеченными точками. Сфера распадается на две половины сечением по замкнутой кривой. Пространство нельзя поделить точками или линиями, но можно – замкнутыми поверхностями. Таким образом, математическая непрерывность имеет n измерений, если её можно разбить на части, произведя в ней одно или несколько сечений, которые сами являются непрерывностями $n - 1$ измерения. Это рекуррентное определение размерности, которое предполагает, что объёмы – части пространства, поверхности – границы объёмов, линии – границы поверхностей, точки – границы линий. Размерность любого конечного или счётного множества точек есть

нуль. Размерность любого связного множества точек есть $d_i + 1$, если его можно разрезать на 2 несвязных куска, исключив как минимум d_i -мерное множество точек, т.е. сделав d_i -мерный разрез. Ясно, что топологическая размерность всегда целое число.

Размерность можно определить, опираясь на понятие покрытия и практические способы вычисления евклидовых мер – длин и площадей. Первым эту идею использовал, по-видимому, итальянский математик Никколо Фонтана Тарталья (1500-1557). Он заметил, что на три неколлинеарные точки плоскости можно натянуть треугольник, а четырёх некопланарным точкам в R^3 соответствует тетраэдр. Полученным выпуклым телам можно приписать ненулевую меру – площадь и объём, соответственно. Тарталья заключил, что пространство является n -мерным, если для его $n + 1$ точек общего положения существует полиэдр ненулевого объёма.

Бокс-размерность (ёмкость)

Будем говорить, что мера принадлежит классу полуаддитивных мер, если

$$\mu(A) \leq \sum \mu(A_i) \quad \left(\bigcup A_i = A \right), \quad (1)$$

Мы используем идею покрытия и одно чрезвычайно простое соображение: ёмкость или объём n -мерного тела легко оценить, взяв его характерный размер l в степени n . Так, площадь квадрата $\propto l^2$, объём куба $\propto l^3$ и т.д. Если n заранее неизвестно, мы просто перебираем различные степени. «Правильное» значение – это то, для которого выполняется условие полуаддитивности, дополненное требованием «устойчивости» истинного n : произвольные разбиения тела должны давать близкие величины суммарного объёма. Степенная зависимость меры от ε называется скейлингом. Пусть (X, d) – полное метрическое пространство с метрикой d и $\dim X = d_T$. Рассмотрим непустое компактное подмножество $F \in X$. Для $\varepsilon > 0$ построим замкнутый d_T -мерный шар $B(x, \varepsilon)$ с центром в точке $x \in X$. Подсчитаем наименьшее число $N(\varepsilon)$ замкнутых шаров радиуса ε , необходимых для покрытия множества F : $N(\varepsilon) =$ наименьшему целому m , такому, что $F \subset \bigcup_m B(x_n, \varepsilon)$ для всех точек $x_n \in X$. Тогда ёмкость можно определить как такое число d_c , при котором для $\varepsilon \rightarrow 0$ существует отличный от нуля предел $\lim \{ N(\varepsilon) \varepsilon^d \}$. В этом случае $N(\varepsilon) \propto \varepsilon^{-d}$. Заметим, что $d_c \leq d$ и не обязательно целое число! Таким образом, приходим к следующему определению. Пусть $N(\varepsilon)$ – наименьшее число множеств с диаметром не превышающим ε , необходимых для покрытия множества X . Тогда

$$\dim_B = -\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{\log N(\varepsilon)}{\log \varepsilon} \quad (2)$$

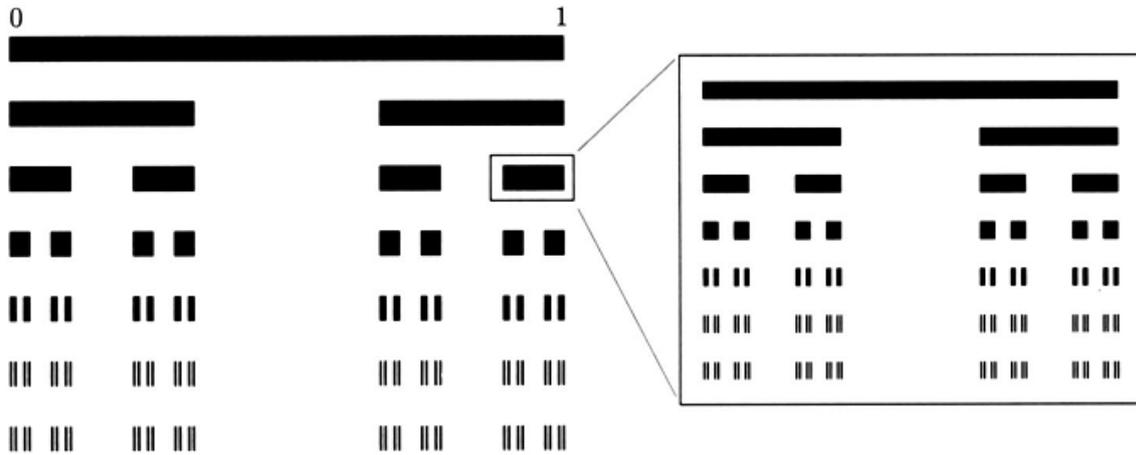


Рис. 2. Множество Кантора.

Пример. Множество Кантора. Пусть $F_0 = [0, 1]$. Выбросим из F_0 интервал $(1/3, 2/3)$, что останется обозначим F_1 . Затем выбросим из F_1 интервалы $(1/9, 2/9)$ и $(7/9, 8/9)$ и получим F_2 (рис. 2). Продолжая процесс, придем к убывающей последовательности замкнутых интервалов $\{F_n\}$. Множество $F = \bigcap F_n$ называют канторовым. Пусть S – множество «выброшенных» кусков отрезка $[0, 1]$ при построении F , т.е. $S = (1/3, 2/3) \cup (1/9, 2/9) \cup (7/9, 8/9) \cup \dots$. Тогда лебегова мера S равна сумме: $1/3 + 2 \times 1/9 + 4 \times 1/27 + \dots = 1$. Таким образом, при построении F мы выбросили всю длину отрезка! Запишем каждое из чисел $x \in [0, 1]$ в троичной системе: $x = a_1/3 + a_2/3^2 + \dots + a_n/3^n + \dots$, где $a_n = 0, 1$ или 2 . Легко убедиться, что F принадлежат только те x , которые

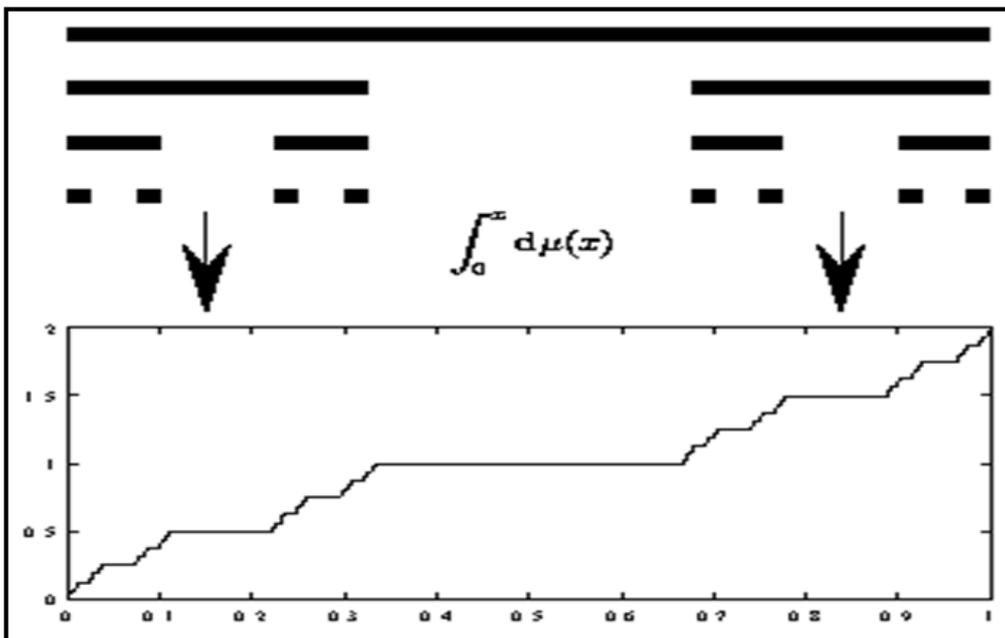


Рис. 3. Функция Кантора.

могут быть записаны хотя бы одним способом так, что в последовательности числителей $a_1, a_2, \dots, a_n \dots$ ни разу не встречается единица. Совокупность таких последовательностей имеет мощность континуума.

Вычислим ёмкость канторова множества. При k -ой итерации необходимо $N = 2^k$ боксов размером $\varepsilon = 3^{-k}$ для покрытия всех фрагментов. Поэтому $d_c = \ln 2 / \ln 3 \approx 0,63$, т.е. меньше, чем размерность исходного отрезка. Существует функциональный аналог множества Кантора – функция Кантора. Распределим равномерно на F единичную массу (меру) с плотностью μ . Тогда функция $F(x) = \int_0^x d\mu(x)$ описывает распределение меры на канторовом носителе. Она является непрерывной возрастающей функцией, которая, тем не менее, почти всюду горизонтальна! Её называют иногда «дьявольской лестницей» (рис. 3).

Мера и размерность Хаусдорфа

Понятие меры, вообще говоря, не связано с метрикой или топологией. Но хаусдорфова мера строится исходя из метрики. Тем не менее, она пригодна для пространств, которые даже локально не являются евклидовыми. Характерный размер произвольного множества A в метрическом пространстве (X, d) – это диаметр множества: $\text{diam } A = \sup d(x, y)$. Здесь верхняя грань берётся по всем $x, y \in A$. Выберем произвольное $\varepsilon > 0$ и назовем ε -покрытием множества A счётное покрытие этого множества замкнутыми шарами $\{B_i\}$ ($\text{diam } B_i < \varepsilon$). Образует крупнозернистую α -мерную меру для произвольного, не обязательно целого числа $\alpha > 0$:

$$l_\alpha(A, \varepsilon) = \inf \sum (\text{diam } B_i)^\alpha, \quad (3)$$

где нижняя грань берётся по всем ε -покрытиям. Когда ε убывает, \inf возрастает, или, во всяком случае, не убывает. Поэтому предел при $\varepsilon \rightarrow 0$, конечный или бесконечный, существует и называется α -мерной мерой Хаусдорфа для A :

$$l_\alpha(A) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} l_\alpha(A, \varepsilon). \quad (4)$$

Нетрудно убедиться, что функция l_α полуаддитивна:

$$l_\alpha\left(\bigcup_n A_n\right) \leq \sum l_\alpha(A_n). \quad (5)$$

Хаусдорфова размерность множества A характеризует поведение $l_\alpha(A)$ как функцию от α такую, что если $l_\alpha(A)$ конечна, то $l_\beta(A) = 0$ для любого $\beta > \alpha$. Иными словами, если при пробном подсчете «объёмов» мы превысили истинное значение размерности A , мера l_α сразу дает нуль. Если $\beta < \alpha$, то при $\varepsilon \rightarrow 0$ и $l_\beta(A) = \infty$. Поэтому существует «точка перехода», соответствующая α^* – конечному значению меры Хаусдорфа:

$$l_\alpha(A) = \infty, \forall \alpha < \alpha^* \text{ и } l_\alpha(A) = 0 \forall \alpha > \alpha^* \quad (6)$$

Это значение α^* и называется размерностью Хаусдорфа: $\alpha^* = \dim_H A$. Она однозначно определяется условиями

$$\dim_H A = \sup \{ \alpha \mid l_\alpha A = \infty \} = \inf \{ \alpha \mid l_\alpha A = 0 \}. \quad (7)$$

Рассмотрим простой пример – кривую C длины L , покрытие которой заменено равномерным разбиением множества на боксы одинакового размера ε . Очевидно, необходимое число боксов составляет L/ε и аналогом меры Хаусдорфа служит величина $l_\alpha(C, \varepsilon) = L\varepsilon^{\alpha-1}$. Ясно, что $l_\alpha(C, \varepsilon) \rightarrow \infty$ при $\varepsilon \rightarrow 0$, если $\alpha < 1$, и $l_\alpha(C, \varepsilon) \rightarrow 0$, если $\alpha > 1$. «Правильная» величина размерности $\alpha = 1$ соответствует конечной мере. Получить компьютерные оценки размерности Хаусдорфа невозможно: нельзя перебрать все покрытия. Именно это вынуждает нас при численных расчётах переходить к ёмкости, когда все шары данного покрытия одинаковы. В этом случае оптимальным будет конечное покрытие, которое содержит минимальное число слагаемых в выражении для меры. Следует заметить, однако, что d_H для некоторых относительно простых множеств может существенно отличаться от d_C .

Пример. Функция Вейерштрасса. Рассмотрим непрерывную функцию $f(x)$, которая удовлетворяет функциональному уравнению $f(ax) = abf(bx) + \cos x$ при $0 < a < 1$; $ab \geq 1$. С помощью итераций легко найти

$$\begin{aligned} f_0(x) &= \cos x, \\ f_1(x) &= a f_0(bx) + \cos x \\ f_2(x) &= a^2 \cos b^2 x + a \cos bx + \cos x, \\ &\dots\dots\dots \\ f_{n+1}(x) &= a f_n(bx) + \cos x. \end{aligned} \quad (8)$$

Поэтому $f(x) = \sum_{n=0}^{\infty} a^n \cos(b^n x)$ – это и есть функция Вейерштрасса. Ряд равномерно сходится в любом интервале, так что $f(x)$ всюду непрерывна. Если $ab > 1$, то ряд, полученный почленным дифференцированием суммы, расходится. Можно доказать, что при $ab > 1 + 3\pi/2$ для всех значений x функция $f(x)$ не имеет производной. Мандельброт указал, что функция Вейерштрасса фрактальна: её график – кривая, имеющая размерность больше единицы.

Фракталы как аттракторы Системы итеративных функций.

Пусть $X \equiv (X, d)$ – полное метрическое пространство. Функция $w: X \rightarrow X$ удовлетворяет условию Липшица, если существует такое число c , $0 < c < \infty$, что для всех $x_1, x_2 \in X$:

$$d(w(x_1), w(x_2)) \leq c d(x_1, x_2) \quad (9)$$

Минимальное значение C такое, что выполняется неравенство (9), называется постоянной Липшица $Lip w$. Частным случаем преобразования Липшица является преобразование подобия. Преобразование W называется преобразованием подобия, если существует число c , $0 < c < \infty$ такое, что для всех $x_1, x_2 \in X$ выполнено следующее равенство:

$$d(w(x_1), w(x_2)) = c d(x_1, x_2). \quad (10)$$

Группа преобразований подобия включает в себя не только аффинные преобразования, но также трансляции, повороты и отражения. Образ множества под действием преобразования подобия называют также подобием. Если константа Липшица меньше 1, то преобразование сближает точки. Преобразование $w: X \rightarrow X$ называется сжимающим отображением (или сжатием), если существует такое число c , $0 < c < 1$, что для всех $x_1, x_2 \in X$:

$$d(w(x_1), w(x_2)) \leq c d(x_1, x_2). \quad (11)$$

В этом случае постоянная Липшица называется коэффициентом сжатия преобразования. Сжимающие отображения называют также гиперболическими.

Пример. Легко убедиться в том, что вещественное дифференцируемое отображение $f(x)$, определенное на прямой R , есть отображение Липшица, если $|f'(x)| \leq c < \infty$ для всех $x \in R$. Если к тому же $c < 1$, то f есть сжимающее отображение. Например, $f(x) = 1/2 \cos x$ определяет сжатие на R^1 , так как $|f'(x)| = 1/2 |\sin x| \leq 1/2$. Более интересный пример – отображение $\cos x$ на отрезке $[0, \pi/2]$. Оно не является сжатием, так как это отображение Липшица с постоянной 1. Тем не менее, для любого $\alpha \in (0, \pi/2)$ это отображение является сжатием на отрезке $[0, \alpha]$.

Основные результаты теории сжимающих отображений связаны с неподвижными точками таких отображений. Точка a называется неподвижной точкой отображения $f(x)$, если:

$$f(a) = a \quad (12)$$

Принцип сжимающих отображений, Теорема о неподвижной точке (Банаха) Пусть (X, d) – полное метрическое пространство, и $w: X \rightarrow X$ – сжатие на X . Тогда существует $a \in X$, называемая неподвижной точкой w , такая, что $w(a) = a$. Более того, для любой точки $x \in X$ последовательность итераций w :

$$x, w(x), w^2(x) = w(w(x)), w^3(x) = w(w(w(x))) \quad (13)$$

сходится к a . Также, если $d(x, w(x)) \leq \varepsilon$, то $d(x, a) \leq \varepsilon/(1-c)$, где c – коэффициент сжатия w .

Описанный выше способ построения функции Вейерштрасса является частным случаем результатов де Рама, который в 1957 г. исследовал решения функционального уравнения:

$$F(\alpha f) = \left\{ \begin{array}{l} \alpha f(x) \\ \beta f(2x-1) \end{array} \right\} + g(x), \quad (14)$$

где $g(x)$ – заданная функция, а F – сжимающее отображение, определенное в пространстве ограниченных функций на интервале $[0, 1]$ и обладающее свойством $F(0) = 0$. Теперь обратимся к некоторым определениям. Существование единственного решения уравнения де Рама следует из теоремы Банаха о сжимающем отображении и того факта, что $f \rightarrow Ff + g$ – сжатие. Если положить

$$F_{\alpha, \beta} f(x) \equiv \begin{cases} \alpha f(x) & x \in [0, 1/2] \\ \beta f(2x-1) & x \in (1/2, 1], \end{cases} \quad (15)$$

то функция Вейерштрасса получается при $\alpha = \beta = a$, $g(x) = \cos \pi x$.

Идея построения произвольного фрактала с помощью системы сжимающих итераций была предложена Хатчинсоном. Оператор Хатчинсона определяет коллективное действие конечного набора отображений на множество. Результатом является объединение образов начального множества, полученных после применения набора отображений. Необходимым здесь является понятие действия отображения w на множество B :

$$w(B) = \{w(y), \forall y \in B\} \quad (16)$$

Системой итеративных функций (СИФ) $(X, \{f_i\})$, $i = 1, 2, \dots, k$ называют набор сжимающих отображений $\{f_i\} : d(f_i(x), f_i(y)) \leq s_i d(x, y)$ в полном метрическом пространстве (X, d) . Коэффициентом сжатия СИФ называют $s = \max \{s_i : i = \overline{1, k}\}$. Определим для (X, d) полное метрическое пространство «фракталов» $(H(X), h)$, где $H(X)$ – множество непустых компактных подмножеств X и h – метрика Хаусдорфа. Точнее, пусть $B(x, r)$ – замкнутый шар радиуса r с центром в точке x . Для произвольного множества $A \in X$ дилатацией A_r радиуса r множества A называется $\bigcup_{x \in A} B(x, r)$. Таким образом, дилатация множества A – это добавление к A всех точек, лежащих на расстоянии не более r от его границы. Пусть A, B – непустые компактные подмножества из X . Тогда расстояние (метрика) Хаусдорфа определяется как (рис. 4.)

$$h(A, B) = \inf \{r > 0 \mid A \subset B_r, B \subset A_r\} \quad (17)$$

Таким образом, это минимальное из двух чисел: первое получается расширением множества A до тех пор, пока его образ не поглотит B , второе – дилатацией B , пока она не поглотит A .

Для любого $B \in H(X)$ определим оператор Хатчинсона $T: H(X) \rightarrow H(X)$ как $T(B) = \bigcup_{i=1}^k f_i(B)$, где $T(B) = \{T(x) | x \in B\}$, и его композицию $T^{\circ n}$ порядка n : $T^{\circ 0}(B) = B$, $T^{\circ(i+1)}(B) = T^{\circ j}(T(B))$. Последовательность множеств, полученная в результате итерирования $T(B)$, т.е. $\{B, T(B), T^{\circ 2}(B), \dots, T^{\circ n}(B), \dots\}$, называется орбитой B для $(H(X), T)$. Пару $(H(X), T)$ можно рассматривать как детерминированную дискретную динамическую систему с пространством состояний $H(X)$ и преобразованием T .

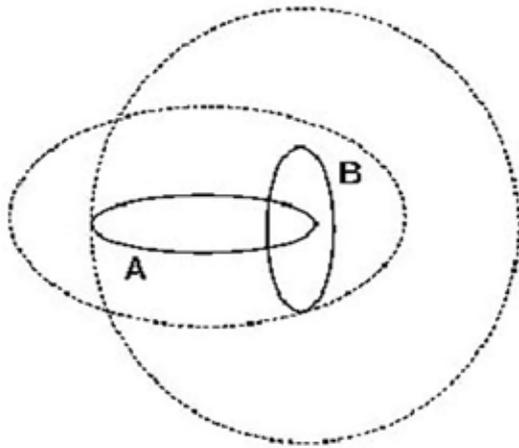
Согласно теореме Банаха, для любой начальной точки $B_0 \in H$ последовательность $\psi_1 = (0)$, $\psi_2 = (1) \equiv T^{\circ 2}(B_0), \dots$ сходится к единственной неподвижной точке $A \in H$, которая является решением уравнения $T(A) = A$. Очевидно, что

$$\lim_{n \rightarrow \infty} T^{\circ n}(B) = A. \quad (18)$$

Неподвижная точка A называется аттрактором СИФ, или фракталом.

Пример. Пусть $X = [0, 1]$,

$$f_2 = 1/3x + 2/3, f_1 = 1/3x, \quad (19)$$



Первая из функций сжимает единичный отрезок в 3 раза, вторая делает то же самое и сдвигает полученный образ на 2/3. Рассмотрим их объединение: $T = f_1 \cup f_2$. Последовательность итераций $T(X)$ при $n \rightarrow \infty$ очевидно приводит к канторову множеству $F = \lim T^{\circ n}[0, 1]$. Таким образом, фрактал всегда является предельным образом динамики сжатия.

Рис. 4. Определение метрики Хаусдорфа.

Если в примере с множеством Кантора (18) выбирать f_1 с вероятностью p_1 , а f_2 с вероятностью p_2 , то получим канторово множество в «чёрно-бело-серых» тонах, где более тёмным фрагментам соответствует область применения отображения с большей вероятностью. Цветовая гамма повторяется при переходе к более тонкому разрешению. Раскраска фрактала становится самоподобной – её обычно называют мультифрактальной мерой. Обычное канторово множество также можно рассматривать как «одноцветную» меру – «краску», нанесённую на отрезок в точках, принадлежащих F . Мультифрактал соответствует множеству одноцветных фракталов, окрашенных с разной, но масштабно согласованной интенсивностью. Его тоже можно получить как вариант теоремы Банаха но уже в пространстве мер.

Меры и системы итерированных функций с вероятностями

Можно ввести борелеву меру через динамику отображения $f: [0, 1] \rightarrow [0, 1]$. Орбитой f длины $n+1$ является последовательность точек $x_0, x_1, x_2, \dots, x_n$, где $x_n = f^{\circ n}(x_0) = f(f^{\circ(n-1)}(x_0))$. Пусть $\{I_i\}_{i=1}^N$, $I_i = [(i-1)/N, i/N)$ – разбиение единичного интервала. В результате итераций f некоторое число $n_i = I_i \cap \{x_0, x_1, \dots, x_n\}$ точек попадает в I_i . Если каждой итерации поставить в соответствие единицу времени, то n_i – время пребывания орбиты в I_i . Можно надеяться, что при «хороших» начальных значениях x_0 числа $p_i(n, x_0) = n_i / (n+1)$ не зависят от n и x_0 . В таком случае почти для всех орбит их можно считать вероятностной мерой μ_i для интервала I_i :

$$p_i(n, x_0) \approx \mu_i = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{|I_i \cap \{x_0, x_1, \dots, x_n\}|}{n}, \quad \sum_i \mu_i = 1 \quad (20)$$

Заметим, что точка $y = f(x)$ принадлежит некоторому объединению интервалов $U = I_{i_1} \cup I_{i_2} \cup \dots \cup I_{i_j}$ iff $x \in f^{-1}(U)$. Это означает, что число точек последовательности x_1, \dots, x_{n+1} , которые попали в U , в точности совпадает с числом точек из x_0, \dots, x_n , которые принадлежали $f^{-1}(U)$. Числа μ_i не должны зависеть от сдвига последовательности, так что выражение $\mu(U) = \mu(f^{-1}(U))$ констатирует инвариантность меры.

Пусть $m(x_i)$ – мера, определённая в точке x_i . Тогда интеграл $\int g d\nu$ от произвольной функции $g(x)$ по мере ν понимается как сумма

$$\int g d\nu = \sum_{x_i} g(x_i) m(x_i) \quad (21)$$

где ряд сходится в абсолютном смысле. Неформально выражаясь, интеграл $\int g d\nu$ понимается как «взвешенная сумма значений функции g , где взвешивание происходит на значения меры ν ».

Пусть $\{y_l\}$ значения функции $y = f(x_i)$; их может быть несколько, для каждой точки x_i . Тогда меру точек y_l естественно определить как меру их прообразов x_i :

$$m(y_l) = \sum_{x_i=f^{-1}(y_l)} m(x_i) \quad (22)$$

(выражение имеет смысл, если число точек $f^{-1}(y_l)$ не бесконечно).

Приведенные рассуждения помогают понять, как функция действует на меру. Символически это действие, называемое push forward map, записывают как $g \circ \nu = \nu(g^{-1})$, где правая часть является мерой точек x , которые отобразились в точки $y = g(x)$. Стоит отметить важные свойства мер:

$$\int g dw(\nu) = \int g \circ w d\nu \quad (23)$$

де $g \circ w$ – композиция функций, и

$$\int g d(p\nu) = p \int g d\nu \quad (24)$$

где p – любое положительное число. Теперь введем определение системы итерированных функций с вероятностями (Iterated Function System with Probabilities-IFSP).

Пусть (X, d) – метрическое пространство, $\{w_i\}$, $i = 1, \dots, N$ – IFS, и набор чисел $\{p_i\}$, $i = 1, \dots, N$ удовлетворяет условиям: $p_i \in [0, 1]$ и $\sum_{i=1}^N p_i = 1$. Тогда $\{w_i, p_i\}$, $i = 1, \dots, N$ называется IFSP. Пусть $\mathbf{P}(X)$ – пространство борелевых вероятностных мер на X . Для IFSP естественным обобщением оператора Хатчинсона является марковский оператор, действующий в этом пространстве. Пусть (X, d) – метрическое пространство, $\{w_i, p_i\}$, $i = 1, \dots, N$ – IFSP. Марковский оператор, связанный с такой IFSP, определяется выражением:

$$M : \mathbf{P}(X) \rightarrow \mathbf{P}(X) : \nu \rightarrow \sum_{i=1}^N p_i \circ \nu w_i^{-1} \quad (25)$$

Для любой непрерывной функции $f : X \rightarrow R$ справедливо выражение:

$$\begin{aligned} \int_X f d(M(\nu)) &= \sum_{i=1}^N p_i \int_X f d(\nu \circ w_i^{-1}) = \\ &= \sum_{i=1}^N p_i \int_{w_i(X)} f(x) d(\nu \circ w_i^{-1}) = \sum_{i=1}^N p_i \int_X f \circ w_i(x) d\nu. \end{aligned} \quad (26)$$

Заметим, что $\nu \circ w_i^{-1}$ – мера тех точек $x \in X$, которые генерируют образы $x \rightarrow w_i(x)$. Согласно (26) это можно записать как $\delta(x - w_i(x))$, что и приводит к замене $f(x) \rightarrow f \circ w_i(x)$. Мера ν называется самоподобной, если её можно представить как линейную взвешенную комбинацию её самой :

$$\nu = \sum_{i=1}^N p_i \nu \circ w_i^{-1} \quad (27)$$

Если X компактно, то в пространстве $\mathbf{P}(X)$ можно определить понятие расстояния между двумя мерами, называемое расстоянием Монжа-Канторовича:

$$\begin{aligned} d_{MK}(\nu_1, \nu_2) &= \\ &= \sup \left\{ \left| \int g d\nu_1 - \int g d\nu_2 \right|, g : X \rightarrow R, |g(x_1) - g(x_2)| \leq |x_1 - x_2|, \forall x_1, x_2 \in X \right\} \end{aligned} \quad (28)$$

Пример. Рассмотрим точки P и Q из R^2 . Пусть δ_P и δ_Q – меры массой 1, сконцентрированные в точках P и Q соответственно; таким образом, для $B \subseteq R^n$ $\delta_P(B) = 1$ если $P \in B$ и $\delta_P(B) = 0$ если $P \notin B$, и так же для δ_Q и Q . Тогда для любой функции g , удовлетворяющей условию определения метрики Монжа-Канторовича,

$$\left| \int g d\delta_P - \int g d\delta_Q \right| = |g(P) - g(Q)| \leq |P - Q| \quad (29)$$

т.е. $d_{MK}(\delta_P, \delta_Q) \leq |P - Q|$. С другой стороны, легко найти функцию f (например, линейную), для которой будет выполняться равенство $\left| \int f d\delta_P - \int f d\delta_Q \right| = |P - Q|$, откуда следует, что $d_{MK}(\delta_P, \delta_Q) = |P - Q|$, т.е. расстояние Монжа-Канторовича между мерами равно обычному расстоянию между точками P и Q . Отметим, что если X – метрическое, то $(\mathbf{P}(X), d_{MK})$, вообще говоря, не является полным. Если же X компактно, можно показать, что пара $(\mathbf{P}(X), d_{MK})$ – полное метрическое пространство, а марковский оператор M является сжатием в $(\mathbf{P}(X), d_{MK})$:

$$d_{MK}(M(\nu_1), M(\nu_2)) \leq c d_{MK}(\nu_1, \nu_2), c < 1 \quad (30)$$

Также справедлива фундаментальная теорема IFSP. Пусть $\{w_i, p_i\}$, $i = 1, \dots, N$ – IFSP. Тогда существует единственная борелева вероятностная мера $\mu \in \mathbf{P}(X)$, инвариантная относительно действия марковского оператора:

$$\mu(B) = M(\mu)(B) \equiv \sum_{i=1}^N p_i \mu \circ w_i^{-1}(B), B \in \mathbf{B}(X) \quad (31)$$

Для любой $\nu \in \mathbf{P}(X)$ последовательность итераций Марковского оператора $\nu, M(\nu), M^2(\nu), \dots, M^{oi}(\nu)$ сходится к μ в метрике Монжа-Канторовича d_{MK} :

$$M^{oi}(\nu) \rightarrow \mu, i \rightarrow \infty \quad (32)$$

Носителем инвариантной меры является аттрактор A соответствующей IFS $\{w\}$, $i = 1, \dots, N$:

$$spt \mu = A : A = W(A) \equiv \bigcup_{i=1}^N w_i(A). \quad (33)$$

Кроме того, для всех непрерывных функций $g : X \rightarrow R$

$$\int g(x) d\mu(x) = \sum_{i=1}^N p_i \int g \circ w_i(x) d\mu(x) \quad (34)$$

Приведем простейший пример IFSP, определённой на $[0,1]$. Она состоит из двух преобразований и их вероятностей:

$$w_1 = \frac{3}{4}x, w_2 = \frac{1}{4}x + \frac{3}{4}, p_1 = \frac{2}{3}, p_2 = 1 - p_1 = \frac{1}{3} \quad (35)$$

Первое преобразование сжимает $[0,1]$ с коэффициентом 0.75 и сдвигает образ влево, второе сжимает тот же отрезок в 4 раза и сдвигает образ вправо. Вероятности (или веса) p_1, p_2 «перевзвешивают» меру μ на отрезке $[0,1]$, распределяя ее на две части – $(2/3)\mu$ и $1/3\mu$, носителем первого образа будет $w_1([0,1])$, второго – $w_2([0,1])$. Преобразование носителя и перевзвешивание меры повторяются до бесконечности. Аттрактором в итоге является всё тот же отрезок $[0,1]$, а инвариантной мерой – так называемая биномиальная мера (рис. 5).

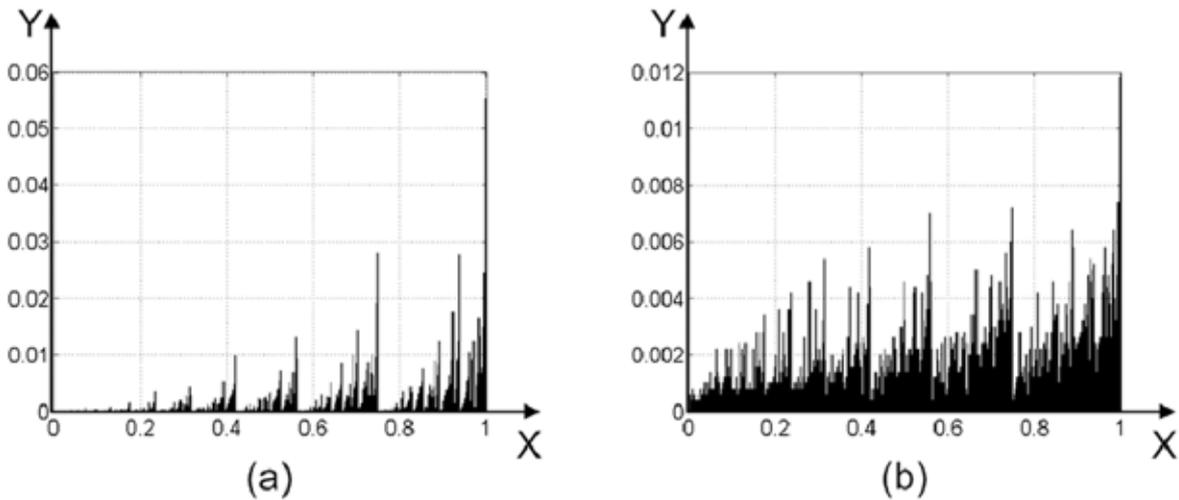


Рис. 5. Примеры биномиальных каскадов.

а) $w_1 = 3/4x, w_2 = 1/4x + 3/4, p_1 = p_2 = 1/2$

б) $w_1 = 3/4x, w_2 = 1/4x + 3/4, p_1 = 2/3, p_2 = 1/3$

Заметим, как и в случае с IFS, что IFSP определяет случайную дискретную динамическую систему $\langle X, w \rangle$ с динамикой

$$w(x) = \begin{cases} w_1(x) \text{ с вероятностью } p_1, \\ w_2(x) \text{ с вероятностью } p_2, \\ \dots \\ w_N(x) \text{ с вероятностью } p_N. \end{cases} \quad (37)$$

Такая система имеет глобальный компактный аттрактор и единственную инвариантную меру на аттракторе, которая определяется как вероятность посещения аттрактора. Поясним последнее понятие. Пусть x_0 – в некотором смысле типичная точка X , тогда орбита будет выглядеть как

$$o(x_0, i) = \{x_0, x_1 = w_{\sigma_1}(x_0), x_2 = w_{\sigma_2}(x_1), \dots, x_i = w_{\sigma_i}(x_{i-1})\} \quad (37)$$

где номера преобразований $1 \leq \sigma_i \leq N$ продуцируются некоторым стационарным процессом. Они могут быть независимыми относительно друг друга, или, например, каждый следующий номер может зависеть от предыдущего (марковский процесс). Для компакта $B \in \mathbf{H}(X)$ можно тогда определить меру B как

$$\mu(B) = \lim_{i \rightarrow \infty} \frac{N(i, B)}{i+1} \quad (38)$$

где величина $N(i, B)$ есть количество точек орбиты $o(x_0, i)$, которые попали в B . Таким образом, относительная частота посещения множества B конечной орбитой $o(x_0, i)$ служит хорошей аппроксимацией $\mu(B)$ при достаточно большом i .

Список литературы

1. Лучшей монографией по фракталам является, несомненно, книга [1]. Популярное введение в теорию и множество интересных деталей можно найти в [2, 3]. Книги [4, 5] содержат серьёзное введение в фрактальную геометрию. Статья [6] содержит приложения сжатий с вероятностями к прогнозу магнитных бурь.
2. Barnsley M.F. Fractals everywhere. New-York: Academic Press, 1988. 394 p.
3. Шредер М. Фракталы, хаос, степенные законы. Миниатюры из бесконечного рая. – Москва-Ижевск: РХД, 2001. – 527 с.
4. Макаренко Н.Г. Фракталы, аттракторы, нейронные сети и всё такое // Лекции по нейроинформатике. Ч. 2. Нейроинформатика. – М., 2002. – С. 121-169.
5. Falconer C. Fractal geometry: mathematical foundations and applications. – New-York: Wiley & Sons, 2003. – 337 p.
6. Falconer C. Techniques in fractal geometry. – New-York: Wiley & Sons, 1997. – 256 p.
7. Макаренко Н.Г., Каримова Л.М., Мухамеджанова С.А. и др. Система итеративных функций и марковский прогноз временных рядов // Изв. ВУЗов. Прикладная нелинейная динамика. 2006. Т. 14. № 6. С. 3-20.

МОЛОДЁЖНАЯ СЕКЦИЯ



КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ СТРУКТУРНЫХ ХАРАКТЕРИСТИК СЫПУЧИХ СМЕСЕЙ

Амосова О.Е.

*Институт геологии Коми НЦ УрО РАН, Сыктывкар,
kramosova@geo.komisc.ru*

Выполнено компьютерное моделирование сыпучих смесей частиц средней и мелкой фракций. Размеры крупных d_K и мелких d_M частиц – постоянные величины с отношением $d_K/d_M=12$, размер средних d_C частиц – величина переменная: отношение d_K/d_C изменялось от 2 до 6. Вычислены пористости модельных смесей, координационные числа частиц, доли частиц в каркасе и матриксе. Установлено, что самой плотной (пористость 26.302 %) является насыщенная смесь с $d_K/d_C=2$ и $d_C/d_M=6$. Все крупные частицы образцов трёхразмерных смесей принадлежат каркасу. Средние координационные числа частиц трёхразмерных насыщенных смесей в целом и их каркасов приближённо равны 6.

Применение компьютерного моделирования позволяет предсказывать структурные и ёмкостные свойства сыпучих смесей и терригенных осадков, исходя из их гранулометрических составов. Результаты компьютерного моделирования могут применяться в создании композиционных материалов с каркасом сыпучих смесей частиц, в химической технологии, структурной химии. Целью исследования было изучить зависимость ёмкостных и некоторых структурных характеристик (средних координационных чисел частиц в смеси, каждой фракции в отдельности, каркаса и матрикса, доли частиц различных фракций в каркасе и матриксе) компьютерным моделированием трёхразмерных насыщенных средней и мелкой фракциями частиц сыпучих смесей от гранулометрического состава. Формальные определения каркаса и матрикса, алгоритм определения принадлежности частиц смеси её каркасу или матриксу были даны нами ранее [1, 2]. Все перечисленные показатели важны для характеристики упаковки смеси. Механическая прочность сыпучей смеси в основном определяется жёстким каркасом: прочностью частиц и средним числом касаний (координационным числом). Наряду с обычным координационным числом мы исследуем каркасное координационное число – число контактов каркасной частицы с другими каркасными частицами. Для характеристики структуры смеси важна также гранулометрическая кривая частиц каркаса, а также гранулометрическая кривая частиц матрикса и координационное число матрикса – число контактов матриксной частицы с другими частицами матрикса.

Все эксперименты проводились с равными начальными условиями:
1) осаждение частиц проводилось в контейнер, имеющий форму прямоу-

гольного параллелепипеда одних и тех же размеров для всех смесей, 2) для вычисления характеристик из моделей смесей вырезался «образец» – прямоугольный параллелепипед (одинаковых размеров для всех смесей) с боковыми гранями, параллельными и перпендикулярными граням контейнера седиментации и горизонтальными верхней и нижней гранями (отступ от граней контейнера равен диаметру крупной частицы). Для каждой гранулометрической характеристики эксперимент проводился дважды. Координационные числа вычислялись сначала для всех частиц смеси. Затем для всех частиц смеси, центры которых расположены ниже горизонтальной плоскости $y=y_0v+2/3*d_K$, где $y=y_0v$ – уравнение верхней горизонтальной грани образца, d_K – диаметр крупных частиц, определялась их принадлежность каркасу или матриксу. После этого для всех частиц, чей центр принадлежит образцу, вычислялись средние, максимальные, минимальные координационные числа образца смеси в целом, каркаса, матрикса, каждой фракции в отдельности. Такое ограничение горизонтальной плоскостью было введено нами потому, что смесь можно полностью «разобрать», удаляя частицу за частицей, в порядке от поверхности смеси до дна контейнера седиментации. Под поверхностью смеси понимается совокупность частиц, имеющих только три точки опоры, все в нижней полусфере, и которые можно удалить из смеси, не перемещая при этом никаких частиц. Если смесь перевернуть на 180° в вертикальной плоскости и подпереть при этом поверхностные частицы, то жёсткий каркас смеси не претерпит изменений.

Для моделирования трёхразмерных насыщенных средней ($n/n_{нас}(d_C)=1$) и мелкой ($n/n_{нас}(d_M)=1$) фракциями смесей вычисляли n_1 – количество крупных d_K , n_2 – количество средних d_C , n_3 – количество мелких частиц, необходимое для заполнения контейнера определенного объема V_K , используя среднее значение пористости одноразмерной смеси, полученной нами ранее [1], следующим образом:

$$n_1 = V_K \cdot 0.58 / \left(\frac{4}{3} \pi \left(\frac{d_K}{2} \right)^3 \right), \quad n_2 = V_K \cdot 0.42 \cdot 0.58 / \left(\frac{4}{3} \pi \left(\frac{d_C}{2} \right)^3 \right) \cdot n/n_{нас}(d_C),$$

$$n_3 = V_K \cdot 0.42^2 \cdot 0.58 / \left(\frac{4}{3} \pi \left(\frac{d_M}{2} \right)^3 \right) \cdot n/n_{нас}(d_M)$$

или по долям объёмов частиц

$$V_1 = \frac{1}{1 + 0.42 \cdot n/n_{нас}(d_C) + 0.42^2 \cdot n/n_{нас}(d_M)},$$

$$V_2 = \frac{0.42 \cdot n/n_{нас}(d_C)}{1 + 0.42 \cdot n/n_{нас}(d_C) + 0.42^2 \cdot n/n_{нас}(d_M)},$$

$$V_3 = \frac{0.42^2 \cdot n/n_{нас}(d_M)}{1 + 0.42 \cdot n/n_{нас}(d_C) + 0.42^2 \cdot n/n_{нас}(d_M)},$$

где 0.42 – доля объёма пустот (пор) одноразмерной смеси, 0.58 – доля объёма пространства, занятого частицами одноразмерной смеси, – доля объёма крупных, – доля объёма средних, – доля объёма мелких частиц. Результаты моделирования приведены в табл. 1 и 2.

Пористость образца трёхразмерной насыщенной смеси увеличивается от 26.3 до 28.2 % с увеличением отношения d_K/d_C от 2 до 6, причём для $d_K/d_C = 4, 5, 6$ её значения совсем незначительно отличаются друг от друга (28.222 %, 28.192 %, 28.216 %). Для пористости каркаса образца это не характерно: с увеличением d_K/d_C она сначала убывает с 30.793 до 27.909 %, затем возрастает до 32.572 % и опять убывает до 30.651 %. Наименьшее значение пористости каркаса образца 27.909 % наблюдается при $d_K/d_C=3$, наибольшее 32.572 % при $d_K/d_C=4$. Разность между соответствующими пористостями образца в целом и каркаса образца изменяется от 1.224 до 4.491. Она увеличивается с уменьшением доли объёма каркаса в образце. Так, для смеси $d_K/d_C=3$ доля объёма частиц каркаса в образце равна 98.416 %, разность между пористостями образца в целом и каркаса образца минимальна – 1.224. Максимальное значение разности (4.491) наблюдалось для смеси $d_K/d_C=2$ с самой меньшей (93.928 %) долей объёма частиц каркаса в образце. Все крупные частицы образцов всех трёхразмерных смесей принадлежат каркасу образца. Доля средних частиц в каркасе образца от всех средних частиц образца велика – 95.3-99.5 %. Доля мелких частиц образца, принадлежащих каркасу, хотя и меньше, но тоже значительна – 52-88 %. Доля объёма частиц в каркасе образца варьирует от 94 до 98 %. Самый плотно упакованный каркас образца получен для смеси с $d_K/d_C=3$, он состоит из 98.4 % объёма частиц образца в целом.

При исследовании координационных чисел частиц трёхразмерных смесей установлено следующее. Координационное число частиц образца в целом незначительно увеличивается от 5.967 до 6.045 при увеличении отношения d_K/d_C от 2 до 5 и затем уменьшается до 6.017 для $d_K/d_C=6$. Координационные числа трёхразмерных смесей в целом и их каркасов варьирует около 6. Максимальное координационное число частиц трёхразмерной смеси ведёт себя неоднозначно: оно убывает при увеличении d_K/d_C с 2 до 4, затем возрастает. Аналогичная закономерность наблюдается для максимального координационного числа каркаса. Минимальные координационные числа смеси в целом и каркаса равны 3 и 4, соответственно. При увеличении отношения d_K/d_C от 2 до 6 строго уменьшается координационное число частиц матрикса с 4.436 до 1.822. Такая же зависимость наблюдается для максимального координационного числа матрикса: оно уменьшается с 79 до 12

Таблица 1. Ёмкостные и некоторые структурные свойства трёхразмерной смеси, насыщенной средней и мелкой фракциями:
 $d_k/d_m = 12$, $n/n_{\text{нас}}(d_c)=1$, $n/n_{\text{нас}}(d_m)=1$.

Показатели	Значения показателей при различном отношении d_k/d_c														
	2			3			4			5			6		
	I	II	\bar{x}	I	II	\bar{x}	I	II	\bar{x}	I	II	\bar{x}	I	II	\bar{x}
Пористость образца, %	26.177	26.427	26.302	26.649	26.720	26.685	28.167	28.276	28.222	28.076	28.307	28.192	27.820	28.611	28.216
Пористость каркаса образца, %	30.042	31.543	30.793	28.041	27.777	27.909	32.340	32.803	32.572	31.497	31.625	31.561	30.286	31.015	30.651
Доля d_k частиц в каркасе образца, % от Nd_k образца	100	100	100	100	100	100	100	100	100	100	100	100	100	100	100
Доля d_c частиц в каркасе образца, % от Nd_c образца	97.627	96.875	97.251	99.439	99.598	99.519	96.390	94.170	95.280	96.002	95.824	95.913	96.176	96.703	96.440
Доля d_m частиц в каркасе образца, % от Nd_m образца	71.155	62.435	66.795	85.922	89.584	87.753	52.889	51.452	52.171	65.178	63.613	64.396	75.293	76.106	75.700
Доля частиц каркаса в образце, % от $Nd_c + Nd_m$ образца	71.392	62.758	67.075	86.387	89.897	88.142	56.620	55.130	55.875	69.835	68.509	69.172	80.177	80.872	80.525
Доля объема каркаса в образце, % от $Vd_c + Vd_m$ образца	94.732	93.123	93.928	98.192	98.640	98.416	94.327	93.949	94.138	95.279	95.565	95.422	96.660	96.613	96.637

Примечания: d_k, d_c, d_m – диаметры частиц крупной, средней и мелкой фракции, соответственно, N_{dk}, N_{dc}, N_{dm} – числа, V_{dk}, V_{dc}, V_{dm} – суммарные объёмы, \bar{x} среднее значение.

Таблица 2. Координационные числа трёхразмерной смеси, насыщенной средней и мелкой фракциями:
 $d_K/d_M = 12$, $n/n_{\text{нас}}(d_C)=1$, $n/n_{\text{нас}}(d_M)=1$.

Варианты координационных чисел		Координационные числа при различных значениях отношения d_K/d_C																	
		2			3			4			5			6					
		I	II	\bar{x}	I	II	\bar{x}	I	II	\bar{x}	I	II	\bar{x}	I	II	\bar{x}			
Смесь в целом	максимальное	250	242		204	227		207	217		222	243		224	225				
	минимальное	3	3		3	3		3	3		3	3		3	3				
	среднее	5.959	5.975	5.967	6.032	6.024	6.028	6.018	6.035	6.027	6.032	6.057	6.045	6.034	6.0	6.017			
карас	максимальное	250	240		204	225		164	190		208	197		209	213				
	минимальное	4	4		4	4		4	4		4	4		4	4				
	среднее	5.933	5.935	5.934	6.030	6.019	6.025	6.022	6.062	6.042	6.044	6.067	6.056	6.036	6.0	6.018			
матрикс	максимальное	72	79		37	36		24	25		17	16		12	15				
	минимальное	0	0		0	0		0	0		0	0		0	0				
	среднее	4.412	4.460	4.436	3.205	3.032	3.119	3.049	3.146	3.098	2.353	2.432	2.393	1.815	1.829	1.822			
крупные	максимальное	250	242		204	227		207	217		222	243		224	225				
	минимальное	26	12		73	69		63	35		85	72		90	99				
	среднее	170.617	174.065	172.341	143.696	144.509	144.103	143.178	137.953	140.566	160.030	154.123	157.077	162.327	164.302	163.315			
средние	максимальное	88	85		46	48		28	28		23	21		16	17				
	минимальное	3	3		4	3		3	3		3	3		3	3				
	среднее	47.695	47.700	47.698	22.518	22.866	22.692	14.104	14.060	14.082	10.788	10.538	10.663	8.682	8.707	8.695			
мелкие	максимальное	9	10		9	9		9	9		8	9		9	9				
	минимальное	3	3		3	3		3	3		3	3		3	3				
	среднее	5.329	5.323	5.326	5.070	5.106	5.088	4.783	4.787	4.785	4.670	4.670	4.670	4.628	4.648	4.638			

при увеличении d_k/d_c . Это связано с тем, что матрикс содержит только средние и мелкие частицы, а с уменьшением отношения d_c/d_m с 6 до 2 отношение площадей поверхностей средних и мелких частиц $(d_c/d_m)^2$ тоже убывает, а значит и число контактов средней частицы с мелкими частицами уменьшается. Минимальное координационное число частиц матрикса равно 0, в матриксе трёхразмерной смеси есть изолированные частицы, которые контактируют только с частицами каркаса, т.е. лежат в порах, образованных частицами каркаса.

Поскольку трёхразмерные смеси состоят из фракций частиц трёх размеров, исследовались координационные числа частиц каждой фракции. Максимальные координационные числа крупных частиц и частиц смеси в целом совпадают. Среднее координационное число крупных частиц ведёт себя неоднозначно: сначала оно уменьшается от 172.341 при $d_k/d_c=2$ до 140.566 при $d_k/d_c=4$, затем возрастает до 163.315 при $d_k/d_c=6$. То же наблюдается для максимального координационного числа каркаса при $d_k/d_c=4$. Среднее координационное число средней фракции строго уменьшается от 47.698 до 8.695 при увеличении d_k/d_c . Максимальное координационное число средней фракции тоже строго уменьшается при увеличении d_k/d_c , чем меньше размер частиц средней фракции, тем меньше их координационное число. То же наблюдается для мелких частиц смеси.

В результате экспериментов установлено следующее. Самой плотной (пористость 26.302 %) получилась трёхразмерная насыщенная смесь с $d_k/d_c=2$ и $d_c/d_m=6$. Все крупные частицы образцов трёхразмерных смесей являются каркасными: 95-99.5 % средних частиц и 52-88 % мелких частиц трёхразмерной насыщенной смеси составляют каркас образца. Доля объёма каркаса в образце трёхразмерной насыщенной смеси больше 93 %. Координационные числа частиц трёхразмерных насыщенных смесей в целом и их каркасов приблизительно равны 6. Координационные числа средних и мелких фракций трёхразмерной насыщенной смеси уменьшаются с уменьшением размера средней фракции при постоянных значениях размеров частиц крупной и мелкой фракций. Разность между пористостями трёхразмерной насыщенной смеси и её каркаса – величина непостоянная при различных отношениях d_k/d_c . Она зависит от доли объёма каркаса в смеси: чем больше доля объёма каркаса, тем меньше разность.

Список литературы

1. Амосова О.Е. Компьютерное моделирование структуры и порового пространства терригенных осадков. Дисс. уч. ст. к.г.-м.н. Сыктывкар, Институт геологии Коми НЦ УрО РАН, 2000.
2. Ткачев Ю.А., Амосова О.Е. Терригенный осадок ... с изнанки // Вестник Института геологии Коми НЦ УрО РАН. 1999. № 2.

ЧИСЛЕННАЯ МОДЕЛЬ РАСПРОСТРАНЕНИЯ НИЗКОЧАСТОТНЫХ СИГНАЛОВ В ЗЕМНОЙ АТМОСФЕРЕ

Ахметов О.И., Мингалёв И.В., Мингалёв О.В.

Полярный геофизический институт КНЦ РАН, Апатиты, Oleg.appt@ Rambler.ru

В докладе представлена численная модель распространения электромагнитных волн длиной более 1000 км, вызванных разрядами молний, в атмосфере и под поверхность Земли. В модели учтены эффекты распространения, связанные с тензорной проводимостью ионосферы, и реальные геомагнитные условия, зависящие от места и времени.

Введение. Развитие численных методов и вычислительной техники позволяет создавать всё более сложные и масштабные модели и во многих областях науки (аэро- и гидродинамика, метеорология и т.д.) добиваться результатов, совершенно недостижимых аналитическими методами. Представленная в работе численная модель является одной из первых попыток применить численные методы в области распространения радиоволн в атмосфере Земли с учётом реальных особенностей подстилающей поверхности. Её необходимость для интерпретации результатов инструментальных измерений давно назрела.

Описание модели. Модель основана на численном решении уравнений Максвелла на регулярной пространственной сетке в сферических координатах. Область моделирования является сферическим слоем. Его нижняя граница находится на глубине 400 м ниже уровня океана, верхняя – на высоте 100 км над уровнем океана. Входные параметры – дата и место разряда молнии, а также длительность разряда, перетекающий заряд. Модель выдаёт трёхмерное распределение всех компонент электрического и магнитного полей в любой момент времени после разряда в области моделирования.

Проводимость среды считается тензорной на высотах более 60 км и скалярной на высотах менее 60 км и ниже уровня океана. Проводимость рассчитывалась по формулам [1, п. 4.4]. Необходимые для расчёта параметры атмосферы рассчитывались для выбранной даты и геомагнитных условий по эмпирическим моделям ионосферы IRI-2010 и нейтральной атмосферы NRLMSISE-2000. Проводимость океана принята равной 2 См, проводимость суши $2 \cdot 10^{-3}$ См. Диэлектрические проницаемости земли и океана равны, соответственно, 5 и 81.

Численное решение уравнений Максвелла осуществляется в служебной системе координат, северный полюс которой находится в точке разряда молнии, на равномерной сетке с шагами по широте $\frac{1}{2}^\circ$, по долготе 1° и по высоте 1 км в атмосфере и 40 м под поверхность Земли. Выбор такой системы координат обеспечивает сгущение сетки в месте разряда молнии и более информативен в исследованиях скорости распространения, вида и формы

волн. Один шаг по времени равен 10^{-6} сек. Граничные условия обеспечивают свободный уход волн из области моделирования. Начальное электромагнитное поле от разряда молнии задавалось по аналитической модели, разработанной авторами.

Выводы. Авторами создана модель, позволяющая рассчитывать трёхмерное распределение всех компонент электрического и магнитного низкочастотных полей в атмосфере Земли и под её поверхностью. Особенностью модели является то, что в ней учтены эффекты распространения, связанные с тензорной проводимостью ионосферы, и реальные геомагнитные условия, зависящие от места и времени.

Список литературы

1. Харгривс Дж.К. Верхняя атмосфера и солнечно-земные связи. Введение в физику околоземной космической среды. Л.: Гидрометеиздат, 1982. 351 с.

ОСОБЕННОСТИ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ АМИНОКИСЛОТ В СЛЮННЫХ КАМНЯХ ЧЕЛОВЕКА ПО ДАННЫМ КЛАСТЕРНОГО АНАЛИЗА

Бельская Л.В., Голованова О.А.

Омский государственный университет, LudaB2005@mail.ru

Слюнные камни (СК) – патогенные органоминеральные образования челюстно-лицевой сферы, формирующиеся из слюны чаще всего в поднижнечелюстной железе и её каналах [1]. Сложены они, как правило, из ритмично осаждённых слоёв органической и неорганической компонент вокруг центрального ядра. Образование слюнных камней может быть связано с нарушением оттока слюны или обмена какого-либо из её элементов (чаще кальциевого обмена), с воспалительными процессами в слюнных железах при значительном участии микроорганизмов, неправильным питанием, с состоянием среды проживания и т. д. [1]. Цель работы – изучение особенностей распределения аминокислот в составе слюнных камней человека.

Материал и методы. Материалом исследования служила коллекция слюнных камней (14 образцов) жителей Омского региона. Определение аминокислотного состава проводили методом высокоэффективной жидкостной хроматографии. С целью получения информации о составе слюнных камней использован метод инфракрасной спектроскопии. Математическая обработка данных проводилась с помощью статистического пакета STATISTICA 6.0 (StatSoft Inc. USA).

Результаты. По результатам проведенного хроматографического анализа в образцах слюнных камней установлено 15 аминокислот, определено их содержание (табл. 1).

Таблица 1. Среднее содержание аминокислот в слюнных камнях.

Аминокислота	Обозначение	Содержание, масс. % (n=11, t=2.23)
Аспарагиновая кислота	Asp	0.558±0.157
Глутаминовая кислота	Glu	1.167±0.376
Серин	Ser	0.602±0.167
Гистидин	His	0.340±0.194
Глицин	Gly	0.485±0.127
Треонин	Thr	0.281±0.070
Аргинин	Arg	0.564±0.243
Аланин	Ala	0.421±0.155
Тирозин	Tyr	0.552±0.289
Метионин	Met	0.126±0.115
Валин	Val	0.437±0.119
Фенилаланин	Phe	0.600±0.162
Изолейцин	Ile	0.311±0.084
Лейцин	Leu	0.502±0.116
Лизин	Lys	0.574±0.149

Качественный набор аминокислот одинаков для всех образцов слюнных камней. Но распределение аминокислот в их составе неоднородно, что подтверждается результатом кластерного анализа. Экспериментальный массив разбивается на два кластера, отличающихся по содержанию глутаминовой кислоты и серина (рис. 1). Анализ ИК-спектров подтверждает это (рис. 2). Видно, что в них присутствуют полосы поглощения, соответствующие ко-

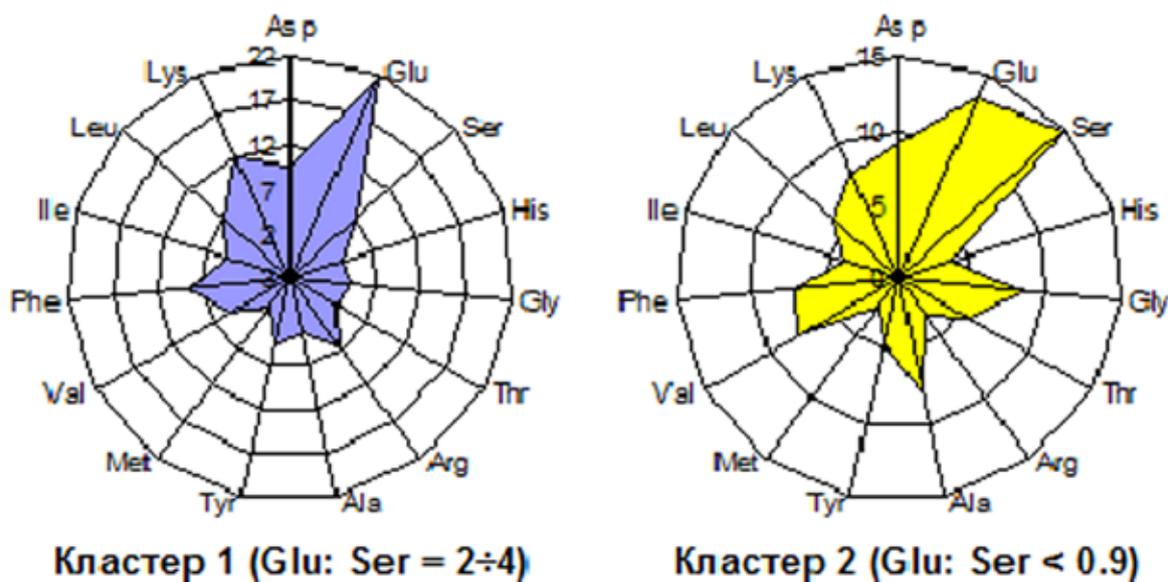


Рис. 1. Разбиение образцов слюнных камней на кластеры по относительному содержанию АК.

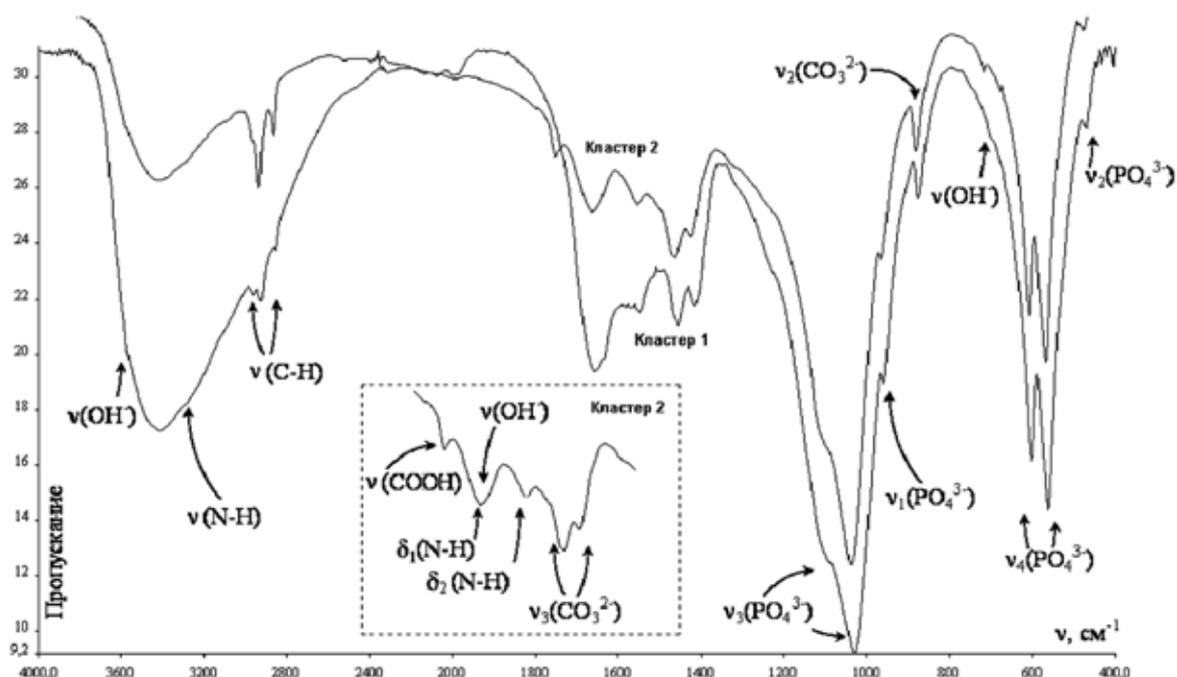


Рис. 2. ИК-спектры образцов слюнных камней.

лебаниям Р-О связей гидроксилатапата, что совпадает с данными РФА [1]. Полосы колебаний С-О связи ($1420, 1460 \text{ см}^{-1}$) говорят о замещении тетраэдров PO_4^{3-} карбонат-ионами (замещение В-типа). Полоса 1550 см^{-1} говорит о замещении групп ОН карбонат-ионами в каналах структуры гидроксилатапата (замещение А-типа). Соотношение карбонат-ионов, соответствующих этим двум типам замещений, для всех образцов равно 2:1. На спектрах всех образцов наблюдаются полосы поглощения группировок, характерных для молекул аминокислот: широкая полоса в области $3100\text{-}3600 \text{ см}^{-1}$ (максимум поглощения при 3200 см^{-1}) и колебания при 1650 см^{-1} включают перекрывающиеся полосы поглощения колебаний связей N-H в ионизированных аминогруппах кислот и деформационных колебаний О-Н связей сорбированной воды.

Отмечено различие ИК-спектров слюнных камней, принадлежащих разным кластерам (область $1400\text{-}1750 \text{ см}^{-1}$). Так, для кластера 1 характерна интенсивная полоса поглощения при 1650 см^{-1} и в области $3100\text{-}3600 \text{ см}^{-1}$, тогда как для кластера 2 отмечена полоса деформационных колебаний карбоксильной группы. Полоса поглощения $1610\text{-}1550 \text{ см}^{-1}$ в ИК-спектре подтверждает цвиттер-ионную структуру аминокислот, входящих в состав камней кластера 1 [2]. Для глутаминовой кислоты, содержание которой максимально в слюнных камнях кластера 1, характерна незначительная гидратация и ограниченное взаимодействие с водой. Малая доступность молекул воды к заряженным полярным группам аминокислот обусловлена насыщением связей COO^- и NH_3^+ за счет внутри- и межмолекулярных образований в их структуре [2]. Наличие в ИК-спектрах кластера 1 более интенсивных полос поглощения в интервале $3310\text{-}3265 \text{ см}^{-1}$ указывает на значительный

вклад межмолекулярных водородных связей [2]. Серин обладает высокой гидратационной способностью, а полоса поглощения 3240 см^{-1} указывает на ОН-группу в образовании водородных связей с молекулами воды. При этом для образцов слюнных камней кластера 2 характерны более интенсивные полосы поглощения карбонат-ионов.

При определении относительной связывающей способности аминокислот по отношению к основным фосфатным минералам кальция [3], входящим в слюнные камни человека, получены следующие диаграммы (рис. 3).

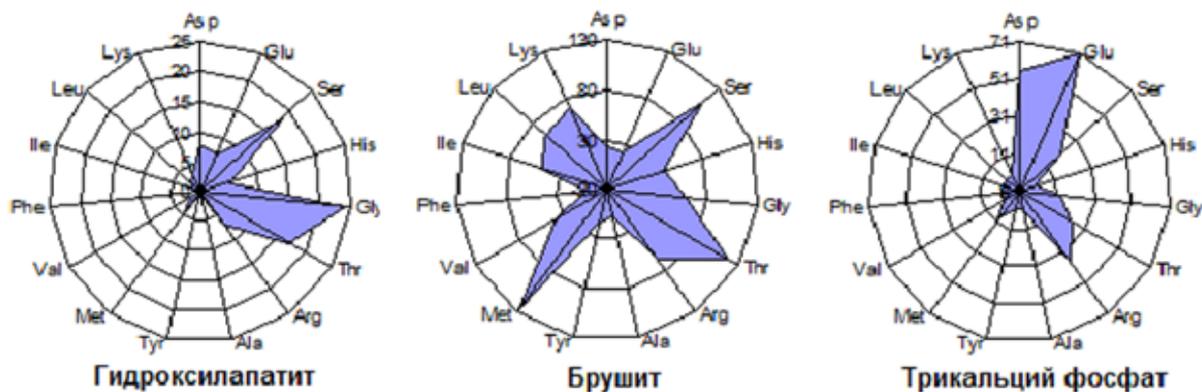


Рис. 3. Адсорбция АК на кальциевых минералах [3].

По ним рассчитаны соотношения адсорбированной глутаминовой кислоты и серина для брусита и гидроксилапатита ($\text{Glu: Ser} < 0.4$), а также для трикальций фосфата ($\text{Glu: Ser} > 3$). Этот факт позволяет предположить, что для образцов слюнных камней разных кластеров характерны различные условия образования (рН среды и соотношение концентраций основных минералообразующих ионов). Минеральный состав камней в процессе роста мог быть представлен различными фазами: трикальций фосфатом – для кластера 1, бруситом и гидроксилапатитом – для кластера 2. Поскольку трикальций фосфат и брусит являются метастабильными фазами, вероятно, в ходе созревания слюнного камня имел место переход в более стабильную фазу – гидроксилапатит.

Выводы. Можно предположить, что прекурсором слюнных камней кластера 1 был трикальций фосфат. В результате адсорбционного взаимодействия для образцов этого кластера характерен аминокислотный состав с существенным преобладанием глутаминовой кислоты (в 2-4 раза больше, чем серина). Для слюнных камней кластера 2 прекурсором был брусит, что определило аминокислотный набор с преобладанием серина.

Работа выполнена в рамках ФЦП «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России» на 2009-2013 гг., ГК № 16.740.11.0602.

Список литературы

1. Бельская Л.В., Голованова О.А. Зубные и слюнные камни. Омск: Изд-во Омского гос. ун-та, 2010. 132 с.
2. Черенкова Ю.А., Котова Д.Л., Крысанова Т.А. и др. Закономерности взаимодействия алифатических аминокислот с водой // Сорбционные и хроматографические процессы. 2008. Т. 8. № 2. С. 314-319.
3. Fleming D.E., Bronswijk W., Ryall R.L. A comparative study of the adsorption of amino acid on to calcium minerals found in renal calculi // Clinical Sci. 2001. N 101. P 159-168.

ПРИМЕНЕНИЕ МАТЕМАТИЧЕСКИХ МЕТОДОВ ПРИ АНАЛИЗЕ РОТОВОЙ ЖИДКОСТИ СПОРТСМЕНОВ

Бельская Л.В., Шукайло Е.С., Голованова О.А.

Омский государственный университет, LudaB2005@mail.ru

Кристаллизация, как переход вещества из газообразного, жидкого или твердого аморфного состояния в кристаллическое, распространена повсеместно. Её роль в природе, промышленности и быту неопределима: кристаллизация в природных системах приводит к образованию минералов, формирование кристаллической воды играет важную роль в атмосферных и почвенных явлениях, кристаллизационные процессы лежат в основе металлургии и т.д. В последние годы возрос интерес ученых из разных областей науки к изучению кристаллизации биологических жидкостей. Под ней понимают генетически обусловленный процесс, связанный с наличием в жидкостях органических и неорганических компонентов [2]. Ротовая жидкость образует кристаллические структуры в нативном состоянии и при добавлении кристаллообразующих соединений. Морфология этих структур обусловлена химическим составом ротовой жидкости [1]. Данные по её микрокристаллизации можно использовать для оценки общего состояния организма и, в частности, для его оценки до и после физической нагрузки. Целью работы было исследование состава ротовой жидкости спортсменов разных видов спорта (плавание, волейбол, футбол), изучение структурных особенностей её микрокристаллизации (МКС), определение состояния организма спортсменов после физических упражнений.

Материалы и методы. В эксперименте принимали участие волейболисты, футболисты и пловцы возрастной категории от 18 до 22 лет (13, 10 и 13 человек). Образцы ротовой жидкости собирали трижды: до и после нагрузки, рано утром после сна (вне нагрузки). Эксперимент с волейболистами повторяли дважды, с пловцами трижды с интервалом в 1 неделю. В образцах слю-

ны определяли биохимический состав [1] и устанавливали тип МКС. При изучении МКС использован метод открытой капли [1] и последующий анализ снимков в соответствии с существующей шкалой и критериями оценки типа МКС [1]. Математическая обработка данных проводилась с помощью статистического пакета STATISTICA 6.0 (StatSoft Inc. USA), а также методами дискриминантного и кластерного анализов с помощью статистического пакета STATGRAPHICS Plus 5.0.

Результаты. Анализ количественных характеристик слюны всех спортсменов выявил достоверные различия содержаний компонентов на разных этапах тренировки: до и после нагрузки, а также после восстановления (табл. 1). Установлено повышенное содержание Са во всех образцах (максимальное значение – у пловцов), которое в процессе тренировки уменьшается. Концентрация неорганического Р в ротовой жидкости волейболистов и пловцов ниже нормы, у футболистов – в её пределах. Значение этого параметра в ходе тренировки растёт, но у волейболистов и пловцов всё равно остаётся заниженным. Изменение концентрации ионов Са и Р оказывает влияние на коэффициент Са/Р, который заметно уменьшается после нагрузки во всех образцах. Общая концентрация белка занижена у всех спортсменов, но после нагрузки происходит её увеличение. Кислотность среды ротовой жидкости спортсменов соответствует норме. В ходе тренировки у волейболистов и пловцов она смещается в слабощелочную область, у футболистов происходит её подкисление.

Таблица 1. Показатели ротовой жидкости:
1 – пловцы, 2 – волейболисты, 3 – футболисты.

Показатель	<i>До нагрузки</i>		
	Группа 1	Группа 2	Группа 3
Са, ммоль/л	3.69±0.60	2.69±0.22	3.40±0.47
Р, ммоль/л	1.63±0.22	2.66±0.20	3.80±0.65
Са/Р	3.04±1.18	1.05±0.12	0.94±0.18
Белок, мг/л	0.22±0.01	0.35±0.02	0.43±0.08
рН	7.79±0.33	7.67±0.11	8.15±0.29
<i>После нагрузки</i>			
Са, ммоль/л	1.90±0.38	1.17±0.19	1.80±0.54
Р, ммоль/л	2.66±0.26	2.73±0.51	5.85±1.22
Са/Р	0.83±0.25	0.56±0.15	0.32±0.09
Белок, мг/л	0.35±0.01	0.51±0.02	0.57±0.13
рН	8.15±0.18	8.27±0.10	7.40±0.28
<i>Вне нагрузки</i>			
Са, ммоль/л	2.37±0.56	2.29±0.30	3.33±0.59
Р, ммоль/л	1.88±0.25	2.66±0.34	2.07±1.12
Са/Р	2.30±0.72	0.93±0.19	1.95±1.00
Белок, мг/л	0.21±0.01	0.36±0.02	0.42±0.16
рН	7.82±0.23	7.74±0.16	8.25±0.29

Результаты исследования основных параметров слюны, собранной утром на следующий день после тренировки, показали, что за это время происходит их восстановление до уровня, наблюдающегося перед тренировкой. Различия между показателями пловцов и волейболистов связаны, вероятно, с различием в интенсивности нагрузок. Методами кластерного и дискриминантного анализов установлено, что различия показателей на разных этапах тренировки достоверны (рис. 1).

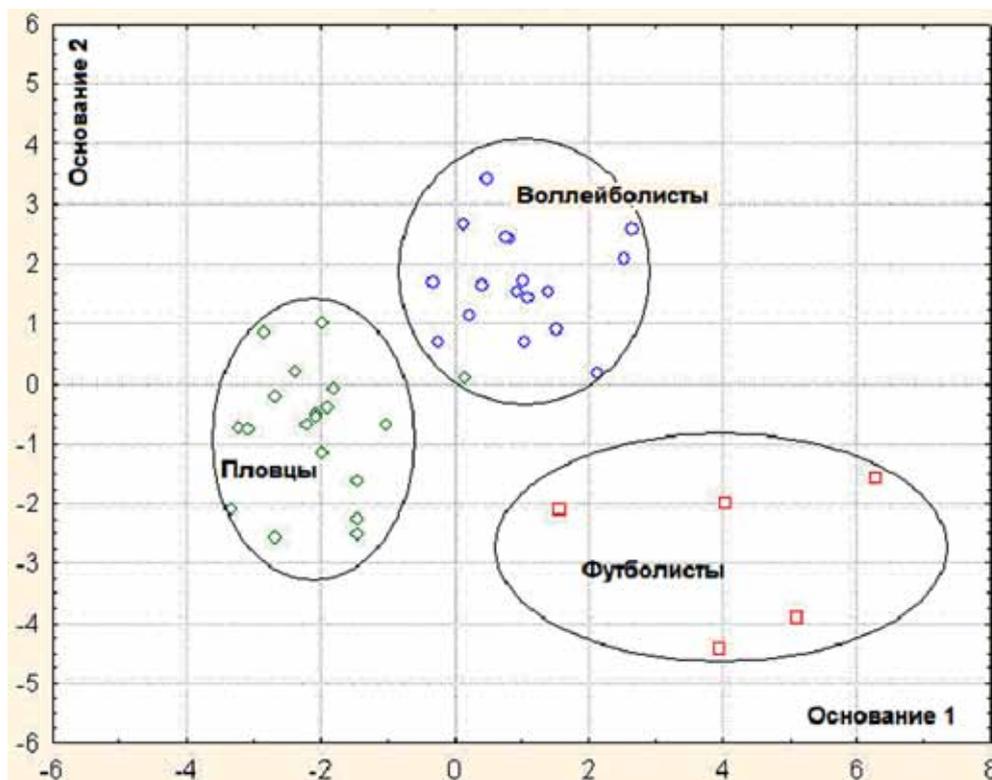


Рис. 1. Диаграмма рассеяния канонических значений по исследуемым группам.

Изменения содержания основных компонентов ротовой жидкости до и после физической нагрузки оказывают влияние на тип МКС. Анализ 225 образцов показал, что ни одна из кристаллограмм не соответствует максимальному значению 5 баллов. Только 20 проб оценены в 4 балла; 107 – в 3 балла; 97 – в 2 балла; 15 – в 1 балл, 6 – в 0 баллов. Таким образом, наиболее часто встречаются пробы в 2-3 балла, что характеризует нарушение структурных свойств слюны. Исследования МКС ротовой жидкости спортсменов разных видов спорта выявили схожую закономерность. После тренировки МКС в целом ухудшается. После нагрузки в большинстве случаев наблюдается распад кристаллов слюны, а после суточного восстановления происходит улучшение её кристаллизации. Распад кристаллов характеризует высокий уровень нагрузки и напряжения в организме, происходит нарушение электролитного состава слюны и, прежде всего, изменяется Са/Р-коэффициент, отвечающий за тип МКС. Улучшение кристаллизации показывает восстановление организма после физических упражнений (табл. 2, рис. 2).



Рис. 2. Изменение типа МКС в ходе тренировки.

Таблица 2. Изменение типа МКС в ходе тренировки.

Вид спорта	Средний балл		
	До нагрузки	После нагрузки	После восстановления
Плавание (117 проб)	3 (54%)	2 (46%)	3 (56%)
Волейбол (78 проб)	3 (50%)	2 (44%)	3 (71%)
Футбол (30 проб)	3 (50%)	2 (70%)	3 (60%)

При оценке фигур МКС с помощью методов математической статистики также наблюдаются достоверные различия показателей в разные периоды тренировки, что подтверждено данными дискриминантного анализа. Результаты хорошо согласуются с данными биохимических исследований. При сравнении МКС наилучшие результаты до тренировки отмечены у пловцов, после тренировки – у волейболистов, что может быть связано с различием в тренировочном процессе. В целом изменения имеют одинаковый характер. Отличия между показателями пловцов и волейболистов могут объясняться разной интенсивностью нагрузок.

Выводы. Можно утверждать, что существует связь состава и структурных свойств ротовой жидкости спортсмена с видом тренировочного процесса и степенью нагрузки на организм. Результаты подтверждают гипотезу о возможности оценки физического состояния человека по параметрам ротовой жидкости.

Работа выполнена в рамках ФЦП «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России» на 2009-2013 гг., ГК № 16.740.11.0602.

Список литературы

1. Бельская Л.В. Зубные и слюнные камни – химический состав, генетические особенности. Дисс. уч. ст. к.х.н. Омск, 2009. 158 с.
2. Мартусевич А.К. Кристаллографический анализ: общая характеристика // Вятский мед. вестник. 2002. № 3. С. 59-61.

МЕТОДЫ КОЛИЧЕСТВЕННОЙ БИОЛОГИИ ПРИ АНАЛИЗЕ ФЛОРЫ ПЕЧЁНОЧНИКОВ ЛАПЛАНДСКОГО ЗАПОВЕДНИКА

Боровичёв Е.А.

Полярно-альпийский ботанический сад-институт КНЦ РАН,
Институт проблем промышленной экологии Севера КНЦ РАН, Апатиты,
borovichyok@mail.ru

Представлены результаты сравнения видового богатства флор печёночников горных массивов Лапландского заповедника и видового состава местообитаний печёночников с использованием программного модуля GRAPHS. Для проведения эколого-субстратного анализа флоры печёночников введен коэффициент специфичности типа субстрата.

Материалом для настоящего сообщения послужили сборы печёночников в горных массивах в составе заповедника: Сальные тундры, Чуна-тундра, Мончегундра, Нявка-тундра в 2004-2011 гг. Флора печёночников Лапландского заповедника (ЛЗ) насчитывает 170 видов. Видовое богатство флор ЛЗ варьирует в зависимости от площади, фациального разнообразия и степени изученности.

Для выяснения места исследованных локальных флор горных массивов заповедника в ряду других флор области проведено ее сравнение с хорошо изученными гепатикофлорами Мурманской обл. (рис. 1), применен биометрический метод с использованием коэффициента сходства Серенсена-Чекановского (K_{sc}), который наиболее точно отражает связи между флорами [5]. Вычисление коэффициентов сходства и визуальное представление полученных результатов проводилось с помощью программного модуля GRAPHS [2]. Для определения сходства между группами объектов взят один из наиболее простых методов – среднего присоединения. Для определения расстояния между группами используется среднее арифметическое значений между всеми элементами этих групп [3]. Выбранные нами территории не в полной мере соответствуют предъявляемым требованиям к сравнению флор – сравнимы могут быть флоры, сопоставимые по степени изученности, площади и разнообразию экотопов [5]. Тем не менее, мы посчитали возможным провести их сравнительный анализ.

На уровне связи $K_{sc} = 70$ все флоры печеночников Мурманской обл. образуют общую группу, что отражает зональные флористические особенности территорий – положение в северо-таежной подзоне и горный характер местности. В целом все значения коэффициента высоки, что свидетельствует о близости сравниваемых флор и общем сходстве геоморфологических, геологических, климатических, фитоценологических условий их формирования и развития.

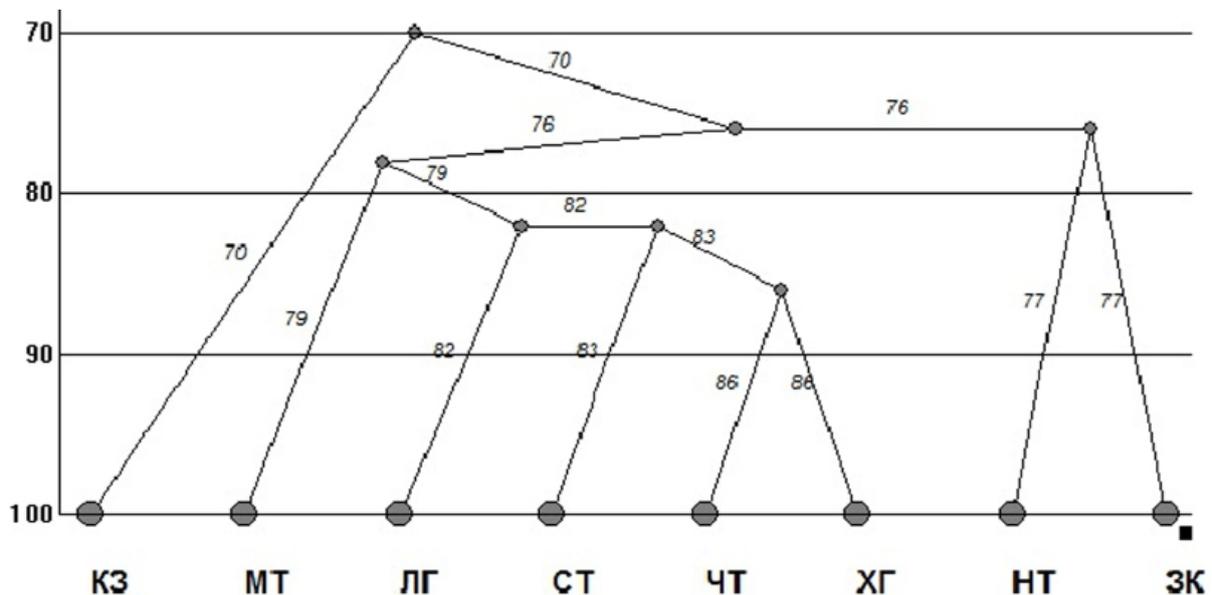


Рис. 1. Дендрограмма сходства некоторых гепатикофлор Мурманской обл. Коэффициент Серенсена-Чекановского, среднее расстояние. Обозначения сокращений сравниваемых флор как в тексте.

Обособление гепатикофлоры Кандалакшского заповедника (КЗ) – 116 видов, связано в первую очередь с небольшой площадью (90 км²) и равнинным характером территории островов и побережья Белого моря. Отделение на уровне связи $K_{sc} = 76$ блока флор печёночников Ньяк-тундры (НТ) – 108 видов и заказника Кутса (ЗК) – 125 видов, объясняется сложным расчленённым рельефом этих небольших территорий, площадь которых составляет 250 и 40 км², соответственно. Отделение флоры Монче-тундры (МТ) – 123 вида и площади 430 км² при повышении уровня связи до 79 объясняется присутствием аркто-монтанных кальцефильных видов. Гепатикофлоры Чуна-тундры (ЧТ) – 132 вида и Хибинских гор (ХГ) – 147 видов, отличающихся наибольшими высотами и площадями (600 и 1300 км²), разделяются на уровне $K_{sc} = 86$. В средней части дендрограммы сгруппировались горные локальные флоры с разнообразием более 130 видов. Хотя сюда попали флоры с меньшими показателями видового разнообразия, тем не менее, учитывая особенности геологического строения и фациальное богатство территорий, можно предполагать, что их флора насчитывает не менее 130 видов.

При описании различных характеристик флор в ботанике широко используются различные индексы. Для эколого-субстратного анализа флоры печёночников заповедника и специфичности субстрата введён коэффициент специфичности k (%): $k = (a/b) \times 100$, где a – количество специфических видов, найденных исключительно на данном типе субстратов; b – общее число

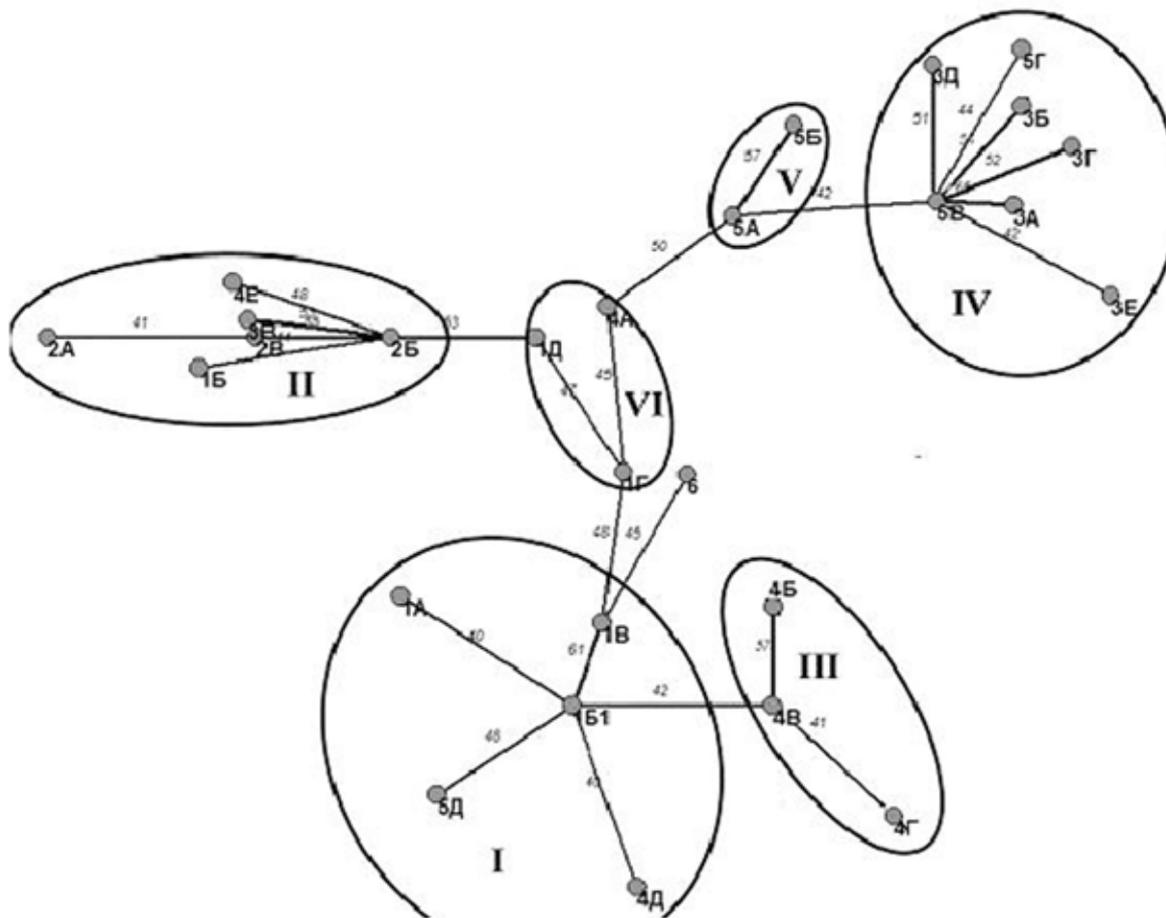


Рис. 2. Дендрит ОПФ, построенный по значениям коэффициента Жаккара.

видов, найденных на данном типе субстратов [1]. Степень избирательности видового состава печёночников для различных типов субстратов довольно низка. Максимальным коэффициентом специфичности характеризуется гниющая древесина (16.04), здесь встречаются подавляющее большинство специфичных видов. Несколько ниже этот показатель для скально-каменистых субстратов (10.78), мелкозёма (6.11) и почвы (6.02). Невысокие показатели специфичности этих субстратных групп связаны с тем, что многие виды не проявляют чётких предпочтений и способны переходить с камней на почву или мелкозём.

Другим важным аспектом изучения печеночников определенной территории является выявление изменения видового богатства местообитаний на градиенте экологических условий. Местообитания печеночников выделены в результате объединения соответствующих им микроместообитаний. Первые распределены по биотомам (растительным сообществам и группировкам, фрагментам и комплексам фитоценозов) и экотопам. Совокупность видов печеночников каждого биотопа мы рассматриваем в качестве парциальной флоры (ПФ) [4, 6]. Видовые списки ПФ, в свою очередь, с помощью программного модуля

GRAPHS сгруппировали в 27 объединённых парциальных флор (ОПФ). ОПФ, выделенные с помощью биометрического коэффициента Жаккара, объединены в группы ОПФ (рис. 2), где римскими цифрами обозначены: I – ОПФ биотопов лесного пояса в условиях сильного и среднего дренажа (78 видов); II – ОПФ заболоченных биотопов (91); III – ОПФ прибрежно-водных биотопов (92); IV – ОПФ горно-тундровых биотопов (94); V – ОПФ биотопов влажных скальных выходов (99); VI – ОПФ заболоченных еловых и елово-березовых лесов, пойменных лесов и ручьев (98). Основные направления варьирования парциальных флор печёночников, объединённых в группы – по степени увлажнения и особенностям эдафотопы.

В заключение следует отметить, что математические методы – всего лишь средство для того, чтобы теоретически обосновать и показать пути анализа биологических параметров. Основная проблема – их корректное использование, чтобы результат (число) был адекватен реальности и имел биологический смысл.

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке подпрограммы «Биоразнообразие» программы Президиума РАН «Биоразнообразие и динамика генофондов» и гранта Президента РФ для государственной поддержки молодых российских ученых (МК-3328.2011.4).

Список литературы

1. Жданов И.С. Лишайники Кандалакшского горного массива, Мурманская обл. Автореф. дис. канд. биол. наук. М.: МГУ, 2008. 24 с.
2. Новаковский А.Б. Возможности и принципы работы программного модуля GRAPS. Сыктывкар: Коми НЦ УрО РАН, 2004. 28 с.
3. Песенко Ю.А. Принципы и методы количественного анализа в фаунистических исследованиях. – М.: Наука, 1982. – 287 с.
4. Шеляг-Сосонко Ю.Р., Дидух Я.П. Системный подход к изучению флоры // Теоретические и методические проблемы сравнительной флористики. Матер. II совещ. по сравнительной флористике. Неринга, 1983 г. – Л.: Наука, 1987. – С. 28-30.
5. Шмидт В.М. Математические методы в ботанике. Л.: Изд-во ЛГУ, 1984. 287 с.
6. Юрцев Б.А., Камелин Р.В. Основные понятия и термины флористики. – Пермь: Изд-во Пермского государственного университета, 1991. – 80 с.

ПОДСЧЁТ ЗАПАСОВ НЕФТИ В ЮРСКИХ ОТЛОЖЕНИЯХ НИЖНЕВАРТОВСКОГО СВОДА

Гайсина Л.Г.

Российский государственный университет нефти и газа, Москва,
lily-gaisina@yandex.ru

Работа на тему «Подсчёт запасов нефти в юрских отложениях Нижневартовского свода» выполнена магистранткой 2 курса Российского государственного университета нефти и газа им. И.М. Губкина Гайсиной Л.Г. под руководством к.т.н. Курамшина Р.М. и показывает стандартный набор математических расчётов, выполняемых при характеристике нефтяных залежей.

Современная геология не может ограничиваться использованием только качественных сторон естественных явлений и процессов, а должна вычислять их количественные параметры, обеспечивая более высокий научный уровень исследования земных недр. Необходимость применения математических, в частности, статистических методов обобщения данных всё более усугубляется не только при прогнозировании, поиске и разведке, но и при проведении любых геологических работ, которые ранее ограничивались описательными приёмами. Использование математического моделирования прочно вошло в практику производственных геологических организаций в связи с возросшими требованиями промышленности к достоверности результатов геологоразведочных работ. Количественная оценка прогнозных ресурсов полезных ископаемых должна быть обоснована уже по данным геологических работ с уточнениями на каждой последующей стадий геологоразведочных работ. В настоящее время Нижневартовский район – это территория деятельности более 10 недропользователей, наиболее крупные из которых ОАО «Тюменская нефтяная компания», ОАО «Славнефть-Мегионнефтегаз» и др. [1].

Изучение геологического объекта сегодня требует построения геолого-математической модели с помощью специальных продуктов и функций *Excel*, предназначенных для вычисления выборочных характеристик. Прежде всего это функции, характеризующие центр распределения – среднее арифметическое, медиану, моду, среднее геометрическое [2]. Для определения оптимального числа групп (по коэффициентам нефтенасыщенности β и пористости m) использовалась формула Стрэйджерса: $n = 1 + 3.322 \lg N$, где n – число групп, N – число единиц совокупности. Для значений пористости и нефтенасыщенности юрских отложений по 26 залежам Нижневартовского свода количество групп составило: $n = 1 + 3.322 \lg N = 6$. Для характеристики разброса значений используют размах колебаний $R = X_{\max} - X_{\min}$, где X_{\max} – максимальное; X_{\min} – минимальное значение параметра. Например, для по-

ристости $R = 19 - 14.1 = 4.9$, для нефтенасыщенности $R = 0.74 - 0.48 = 0.26$. Шаг равного интервала вычисляется по формуле $h = R/n$. Для пористости он равен 0.82, для нефтенасыщенности 0.043. Большой разброс значений нефтенасыщенной эффективной толщины $h_{\text{нн}}$ и площади залежей F говорит о прогрессивно возрастающем распределении. Каждое следующее пороговое значение определяется по формуле $h_{i+1} = h_i + a$.

Функция СРЗНАЧ вычисляет среднее арифметическое для массива чисел:

$$\bar{x} = \frac{\sum_{i=1}^k x_i \cdot f_i}{\sum_{i=1}^k f_i}$$

Функция МЕДИАНА находит медиану для данной выборки.

$$Me = x_0 + i \cdot \frac{\frac{1}{2} \cdot \sum f_i - S_{Me-1}}{f_{Me}}$$

Функция МОДА вычисляет наиболее часто встречающееся значение в выборке.

$$Mi = x_0 + i \cdot \frac{(f_{Mi} - f_{Mi-1})}{(f_{Mi} - f_{Mi-1}) + (f_{Mi} - f_{Mi+1})}$$

Важной характеристикой массива чисел является разброс точек вокруг среднего значения. Для его измерения служат дисперсия и среднеквадратическое отклонение. Первой задачей обработки данных является вычисление числовых характеристик выборки. Для каждого столбца данных выводятся следующие характеристики: среднее, стандартная ошибка (среднего), медиана, мода, стандартное отклонение, дисперсия, асимметрия, эксцесс, интервал, минимум, максимум, сумма, наибольшее, наименьшее, уровень надежности. Следующая задача – построение диаграмм и графиков распределений, по которым выполняется анализ ситуации и принимается решение. Основные математические расчёты и построения рассмотрены ниже на примере коэффициента пористости.

Плотность распределения прод. пластов по коэф. пористости m					
m по керну, %	Кол-во пластов, f	Накопленные частоты	Середина интервала $K_{\text{пор}}^i$	$m_i \cdot f_i$	$(m)^{f_i}$
14,1-14,92	5	5	14,51	72,55	643186,7
14,92-15,74	5	10	15,33	76,65	846663,4
15,74-16,56	6	16	16,15	96,9	17743331
16,56-17,38	5	21	16,97	84,85	1407373
17,38-18,2	3	24	17,79	53,37	5630,252
18,2-19,02	2	26	18,61	37,22	346,3321
Итого	26			421,54	

Мода M_o	16,15
Медиана M_e	16,15
Средн. арифм. взв. m	16,213
Нижний квартиль $Q1$	15,166
Верхний квартиль $Q3$	17,134
Дециль $d1$	14,5264
Дециль $d9$	18,036
Средн. геом. взв.	16,166



Применение статистических параметров для определения запасов нефти

Параметры для подсчета запасов	F , m^2	$h_{нн}$, м	β	m	ρ , t/m^3	\square	Q , млн. т
Статистические параметры							
Мода M_o	34,9	5,3	0,6	16,15	0,85	0,7	10,7
Медиана M_e	41,53	7	0,58	16,15	0,85	0,7	16,2
Средняя арифм.	43,44	7,89	0,6	16,21	0,85	0,7	19,8
Средняя геом.	33,89	6,28	0,59	16,17	0,85	0,7	12,1

Список литературы

1. Гайсина Л.Г. Выявление литологических особенностей юрских отложений Нижневартовского свода с помощью статистических исследований для подсчета запасов // Материалы I Росс. нефтяного конгресса. Москва, РГУ нефти и газа, март 2011 г.
2. Курамшин Р.М. Особенности геологического строения и технологии разработки юрских отложений Нижневартовского свода. М.: Изд-во «Нефтеотдача», 2002. 110 с.

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ КРИСТАЛЛИЗАЦИИ ОКСАЛАТА КАЛЬЦИЯ

Голованова О.А.

Омский государственный университет, golovanoa2000@mail.ru

Сформулирована математическая модель кристаллизации дисперсной фазы оксалата кальция. Рассмотрены её свойства на основе нелинейного уравнения Фоккера-Планка. Представлены устойчивые методы численного решения нелинейной краевой задачи. Рассматривается кристаллизация, проходящая в условиях периодического наполнения и опорожнения почки.

Кристаллизация – один из важнейших процессов в природе. Дисперсная фаза может образовываться путем фазового перехода из любого неупорядоченного состояния: паров, растворов, расплавов и т.д. Кристаллизация всегда осуществляется в два этапа, независимо от того, идет ли она в газовой, жидкой или твердой фазе. Первый этап – возникновение субмикроскопического зародыша кристаллической фазы, способного к дальнейшему росту. Второй этап – дальнейший рост зародыша. Вероятность образования зародышей зависит от степени пересыщения (или переохлаждения). Если она незначительна, то вероятность зарождения новой фазы крайне мала и зарождение не происходит.

Анализ литературных и собственных экспериментальных данных показывает, что наиболее распространенными минералами почечных камней являются оксалаты, затем фосфаты, за которыми следуют ураты. Оксалаты встречаются в виде уэвеллита $\text{Ca}_2\text{C}_2\text{O}_4 \cdot \text{H}_2\text{O}$ и уэдделлита $\text{Ca}_2\text{C}_2\text{O}_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$. Уэвеллит преобладает. По причине широкого распространения оксалатов в почечных камнях не только жителей Санкт-Петербурга, но и Омского региона, Новосибирской области, Москвы, Берлина и Киргизской ССР [5], представляется наиболее интересным и перспективным изучение кинетики и механизма кристаллизации оксалата кальция.

Известно, что при кристаллизации оксалата кальция из сильно пересыщенных растворов выделяются микроскопические монокристаллы различной формы, нормально распределённые по размеру. Последнее согласуется с представлением об одновременном появлении центров кристаллизации и их флуктуативном росте в соответствии с уравнением Фоккера-Планка. Свидетельством, подтверждающим это, является оксалурия, т.е. выделение с мочой мельчайших кристаллов размером 3-10 мкм. Этот размер позволяет предположить, что образование происходит в дистальных отделах нефрона, поперечный размер которого составляет 100 мкм. Прямые оптические наблюдения срезов тканей почек и данные [4] свидетельствуют, что одной из позиций зарождения микроиндивидов являются каналы нефрона почки.

С током мочи новообразованные кристаллы перемещаются вдоль каналов, где могут задерживаться и образовывать скопления. Рост минеральных фаз в таком «кристаллизаторе» как почка определяется:

1. Коллоидным состоянием раствора и его высоким пересыщением, в 4-5 раз превышающем растворимость в нормальной моче. Удержание катионов и анионов в растворенном состоянии, посредством перевода их из ионных форм в комплексные соединения, лежит в основе механизма ингибирования роста минеральных фаз в мочевиной системе. Чаще всего ингибиторами камнеобразования выступают цитрат, пирофосфат, некоторые белки и магний [1];
 2. Дискретным характером поступления жидкости в почечную лоханку;
 3. Краткостью периода наполнения и опорожнения почечной лоханки.
- Максимально возможное выделение мочи почкой составляет 20 мл/мин., минимальное – 0.5 мл/мин. В среднем фаза наполнения лоханки мочой длится 10-15 сек., а опорожнение происходит за 2-3 сек. Пауза между опорожнениями составляет от 20 до 120 сек. [6].

На этом основании наиболее вероятной представляется гетерогенная нуклеация минеральных индивидов в почках, поскольку индукционный период, не превышающий двух минут, слишком мал для осуществления самопроизвольного (гомогенного) зарождения микрокристаллитов даже в высококонцентрированных средах. Фактором, принципиально важным для формирования почечного камня, следует признать возможность удержания «затравки» и прикрепления её к мягким тканям. Удаление микрокристаллов или органических ассоциатов из мочевого тракта с током жидкости делает разрастание конкремента невозможным. Теория «прикрепленной частицы» [8] на основании учёта скорости движения мочи, степени её пересыщения и анатомических особенностей почки констатирует крайне малую вероятность формирования в почке свободно перемещающихся камней, исходно не имевших мест прикрепления.

В этом исследовании мы ограничились рассмотрением пространственно-однородной нелинейной задачи кристаллизации в закрытой системе. При этом изучались нелинейные свойства уравнения Фоккера-Планка [2, 3, 7] при заданных соотношениях баланса массы. Предполагается, что кристаллизация возникает в дистальных отделах нефрона, имеющих ограниченный объём V , в момент времени $t = 0$ содержится однородно пересыщенный раствор оксалата кальция. Если концентрация C превышает растворимость частиц оксалата кальция, то происходит зарождение и рост частиц твёрдой дисперсной. При протекании кристаллизации часто наблюдается образование нескольких кристаллических и аморфной модификаций частиц дисперсной твёрдой фазы. Пренебрегая теплом химической реакции, примем, что в нефроне поддерживается постоянная температура раствора. Считаем, что перемешивание не приводит к раскалыванию и агрегированию.

Для описания кристаллизации использовалась математическая модель, основанная на функции φ распределения кристаллов по размеру L во времени t . Все макропараметры, такие как температура и концентрация, считаются постоянными во всём объёме раствора. Эволюция функции распределения описывается уравнением Фоккера-Планка [3]:

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} = -\frac{\partial(\varphi G)}{\partial L} + \frac{\partial}{\partial L} \left(p \frac{\partial(\varphi G)}{\partial L} \right) \quad (1)$$

Причем $L \geq L_0$, где L_0 – минимально возможный размер кристалла. Функция G является линейной скоростью роста грани кристалла, p – коэффициент флуктуации скорости роста. Определим пересыщение раствора ξ :

$$\xi(t) = \frac{C(t)}{C_\infty},$$

где $C(t)$ – концентрация, C_∞ – концентрация насыщенного раствора. Тогда

$$G = \beta(\xi^n - 1) \quad (2)$$

где β – кинетический коэффициент скорости роста, n – порядок реакции. Уравнение (1) должно быть дополнено краевым условием

$$\lim_{L \rightarrow \infty} \varphi(L, t) = 0 \quad (3)$$

которое означает отсутствие бесконечно больших кристаллов. Его можно заменить условием $\varphi(L_1, t) = 0$. На левом крае задается условие смешанного типа:

$$\varphi(L_0)G - p \frac{\partial(\varphi(L_0)G)}{\partial L} = \gamma(\xi^m - 1), \quad (4)$$

где γ – кинетический коэффициент, m – порядок реакции нуклеации. Систему уравнений необходимо дополнить начальным условием и уравнением баланса. Рассматривался процесс спонтанной нуклеации (в начальный момент времени в растворе отсутствуют кристаллы), что выражается формулой $\varphi(L, 0) = 0$.

Для проведения вычислительного эксперимента была написана программа в среде Borland C++ Builder. При рассмотрении процесса кристаллизации CaC_2O_4 в соответствии с данной моделью получено, что основная масса кристаллов образуется в течение промежутка времени 10^{-4} с. При этом происходит значительное уменьшение пересыщения ξ от 20 до 6. Далее наблюдается плавное снятие пересыщения при постоянном числе зародышей, что объясняется нульмерным ростом уже существующих кристаллов. Установлено, что увеличение среднего размера кристалла (рис. 1) пропорционально квадратному корню от числа итераций эксперимента.

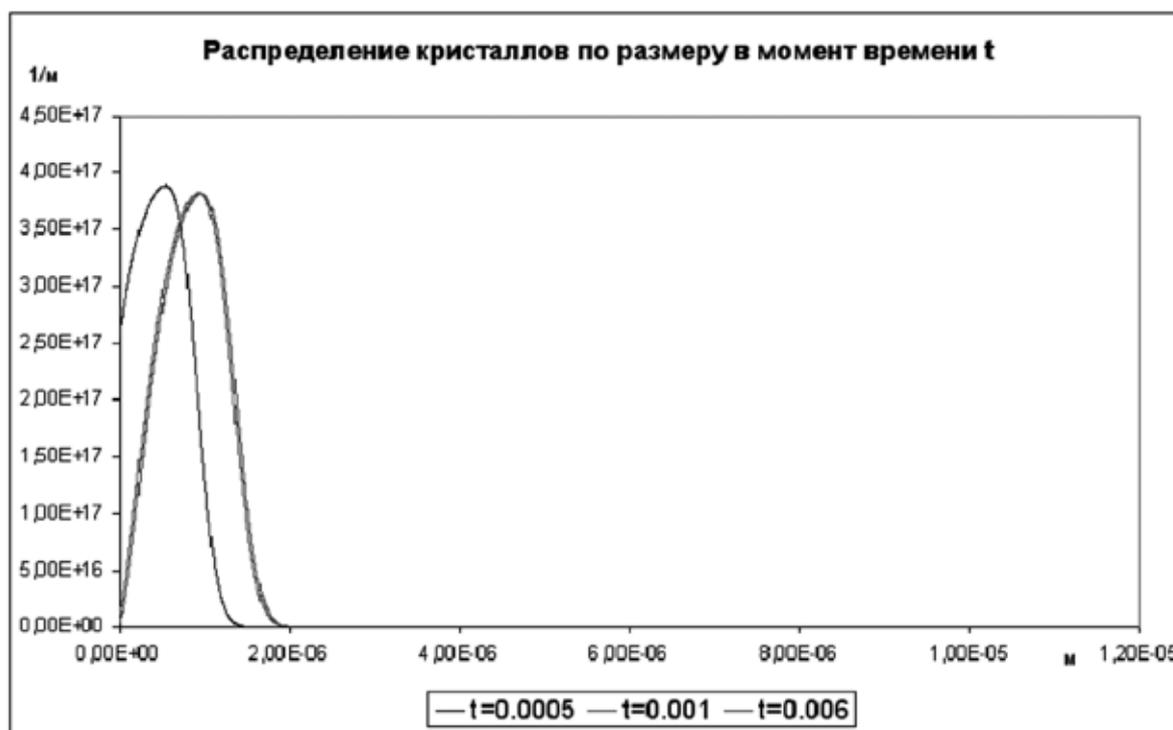


Рис. 1.

Таким образом, авторами рассмотрена модель кристаллизации, основанная на уравнении Фоккера-Планка для плотности распределения кристаллов. Численное решение системы уравнений позволяет сделать вывод о том, что она описывает процесс нуклеации. Изучение роста кристаллов с помощью модели затруднительно, поскольку основная часть растворённого вещества поглощается при нуклеации и рост кристаллов практически не наблюдается. В дальнейшем планируется рассмотрение моделей, описывающих роста кристаллов с учётом результатов о ходе нуклеации.

Работа выполнена в рамках ФЦП «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России» на 2009-2013 гг., ГК № 16.740.11.0602, при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований, грант № 10-05-00881-а.

Список литературы

1. Билобров В.М., Миронов О.Л. Биохимический состав и структура матрицы почечных камней. Донецк: Наукова думка, 1987. 125 с.
2. Бицадзе А.В. Уравнения математической физики. М.: Наука, 1976. 184 с.
3. Горбачевский А.Я. Численное исследование нелинейных моделей кристаллизации // Математическое моделирование. 1999. Т. 11. № 8. С. 23-31.
4. Колпаков И.С. Морфология и генезис мочевых камней. Дисс. уч. ст. канд. мед. наук. М., 1965. 200 с.
5. Пальчик Н.А., Голованова О.А., Качесова П.А. и др. Сравнительный анализ минерального состава мочевых камней пациентов Новосибирской и Омской областей // Урал. геол. журнал. 2002. № 4 (28). С. 191.

6. Пытель Ю.А., Борисов В.В., Симонов В.А. Физиология человека. Мочевые пути. М.: Наука, 1986. 250 с.
7. Самарский А.А. Теория разностных схем. М.: Наука, 1983. С. 41-42.
8. Finlayson B., Reid F. The expectation of free and fixed particles in urinary stone disease // Invest. 1978. N 15. P 442-448.

МАТЕМАТИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ ИЗУЧЕНИЯ МАГМАТИЗМА ТИХОГО ОКЕАНА

Голубева Э.Д.

Дальневосточный геологический институт ДВО РАН, Владивосток,
gol_ed@mail.ru

Обобщение геологической и петрогеохимической информации о магматизме базальтоидов Тихого океана по данным глубоководного бурения в рамках Международного проекта «Мировой океан» позволило выделить их формационно-геохимические типы и ассоциации. Исследование основано на использовании математических методов обработки информации: факторного, кластерного и др.

Математические методы обработки данных. Одним из этапов математической обработки данных является статистический анализ состава пород, позволяющий оценить структуру данных и выявить аномальные пробы, для которых отклонения от средних содержаний превышают удвоенное стандартное отклонение. Методы численной таксономии и кластерного анализа применялись для автоматического разделения изучаемой выборки на группы (таксоны или кластеры) [1, 3]. Факторный анализ представляет собой математический метод описания системы данных с помощью комплексных параметров – факторов, являющихся линейными комбинациями исследуемых признаков. Матрица данных, состоящая из признаков (строк) и объектов (столбцов), рассчитывается для элементов (R-анализ) и проб (Q-анализ). Согласование методов анализа проводится в результате расчёта матрицы данных в одинаковых единицах факторных нагрузок на признаки и пробы в долях изменчивости системы [5].

Изучение магматизма Тихого океана. В рамках Государственной программы (проекты «Литос» и «Глубинные геосферы») из Скриппсовского института океанографии получены коллекции кернов глубоководного бурения судна «Гломар Челленджер», представленные 64 скважинами и более чем 650 образцами. Проекты курировали акад. Ю.М. Пушаровский и проф. И.Н. Говоров. Автор проводил исследования в качестве ответственного исполнителя проектов.

Статистический анализ данных методами таксономии и кластерного анализа позволяет делить выборки на группы (таксоны или кластеры). Важным преимуществом метода согласования различных модификаций факторного анализа является возможность одновременного графического изображения значений факторных параметров как для переменных, так и для объектов, что облегчает интерпретацию расчётов [4].

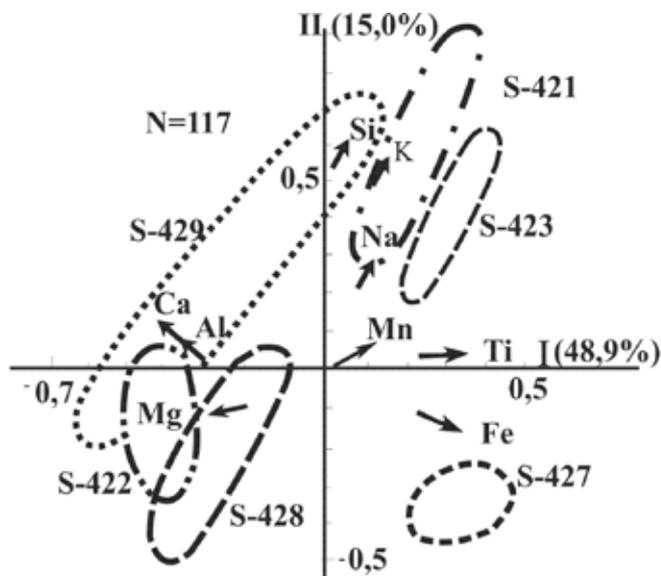


Рис. 1. Факторная диаграмма скважин бурения восточной зоны Тихого океана.

Координаты центра: $\text{SiO}_2 - 50.36$; $\text{TiO}_2 - 1.80$;
 $\text{Al}_2\text{O}_3 - 14.28$; $\text{FeO} - 10.26$; $\text{MgO} - 0.19$; $\text{MgO} - 7.19$;
 $\text{CaO} - 11.28$; $\text{Na}_2\text{O} - 2.69$; $\text{K}_2\text{O} - 0.24$; $\text{P}_2\text{O}_5 - 0.19$.

вариаций состава пород. Так, базальты скв. 421 и 423 ВТП в сравнении с базальтами скв. 422 и 428 характеризуются повышенными концентрациями Fe, Ti, K и Na. Область фигуративных точек, соответствующая скв. 427, изометрична и занимает обособленное положение на диаграмме в зоне суммарно высоких Fe и Ti. Наибольшие вариации состава пород характерны для базальтов скв.429.

В целом, мегаструктура Тихого океана (Пацифики) состоит из двух неравноценных по площади структур: (1) полукольцевого пояса срединно-океанического хребта позднемиоценового-плейстоценового возраста, пролегающего по восточной и южной окраинам океана, сложенного толеитами MOR (Неопацифики) и (2) глобального сегмента центральной и западной частей океана (Палеопацифики), состоящей из множества провинций. На дне океана выделено 66 геоструктур [2]. Петрологические провинции представлены морфотектоническими областями со специфичными ассоциациями базальтов (табл. 1), связанных общностью происхождения и времени формирования [4].

Так, на рис. 1 представлена факторная диаграмма для базальтов скв. 420-429 Восточно-Тихоокеанского поднятия (ВТП), возраст которых 4.3-1.2 млн. лет. Выборка ($n=131$) разделяется на таксоны: наиболее распространены толеиты ($n=53$) с повышенными Fe и Ti, менее всего ($n=10$) – нормальные магнезиальные толеиты MOR (middle ocean ridge) нормального N-типа. Тренды вариации состава базальтов ВТП – анортозитовый (I фактор), обусловленный вариацией Mg, Ca и Al и лейкокатовый (II фактор) – вариацией – Fe, Ti и Mn. Области фигуративных точек состава базальтов из скважин различаются направлением трендов

Таблица 1. Химический состав базальтов скважин глубоководного бурения ВТОП

	1(10)	2(53)	3(36)	4(18)	5(28)	6(13)	7(42)	8 (20)
SiO ₂	49.47	50.43	50.51	49.89	48.99	49.53	50.08	49.46
TiO ₂	1.34	1.53	1.99	2.47	1.92	0.89	1.32	1.23
Al ₂ O ₃	15.63	14.53	13.76	13.37	14.00	16.17	14.56	14.68
Fe ₂ O ₃	2.84	2.62	4.24	3.11	3.76	9.29	11.18	11.67
FeO	5.96	7.28	7.22	9.69	7.57			
MnO	0.18	0.19	0.19	0.20	0.20	0.15	0.17	0.17
MgO	8.13	7.59	6.80	6.54	7.00	8.65	7.54	6.86
CaO	11.82	11.74	10.93	10.10	11.05	13.16	11.90	12.13
Na ₂ O	2.68	2.60	2.72	2.73	2.97	2.07	2.42	2.19
K ₂ O	0.18	0.17	0.37	0.18	0.22	0.04	0.10	0.61
P ₂ O ₅	0.14	0.17	0.23	0.25	0.21	0.09	0.12	0.12
П.пп.	0.94	0.63	0.87	0.61	1.86	0.69	0.30	0.78
<i>Сумма</i>	<i>99.31</i>	<i>99.48</i>	<i>99.83</i>	<i>99.14</i>	<i>99.75</i>	<i>100.73</i>	<i>99.69</i>	<i>99.18</i>
f	37.0	41.6	47.7	51.7	46.7	35.2	42.8	46.4
Rb	1.1	1.7	3.5	1.2	4.1	2.3	2.5	17
Sr	166	138	124	121	134	80	85	92
Ba	33	15	19	26	18			
Zr	97	104	149	182	134	54	80	77
Ni	127	73	67	61	92	119	81	78
Cr	352	71	173	114	206	418	205	263
[La/Sm] _n	0.58	0.73	0.77	0.75	0.54	0.66	0.65	0.69

Примечание: 1-4 – базальты скв. 421, 422, 423, 427, 428, 429; 1, 2 – толеиты MOR, N-тип, 3 – калиевые ферротолеиты, 4 – ферротолеиты MOR; 5 – ферротолеиты MOR, Na-тип; 6-8 – скв. 597: 6 – толеиты MOR D-тип, 7 – толеиты MOR Na-тип, 8 – калиевые ферротолеиты MOR. Средние содержания рассчитаны по опубликованным данным [Init.Repts, v. 54, v. 92; v.142] и материалам автора (скв. 319А, 427, 428).

Заключение. Таким образом, в результате изучения магматизма Тихого океана с применением математических методов выделены разные типы базальтов: калиевые ферротолеиты и натриевые толеиты. Появление каждого из них является индикатором конкретной геодинамической обстановки: первого – склонов срединно-океанических поднятий, где предполагается кристаллизационная дифференциация нормальных магнотолеитовых магм с накоплением Fe, Ti, K, Ba и лёгких РЗЭ в очагах, мигрирующих в стороны от осей спрединговых зон [4], и второго – участков выклинивания рифтовых зон под покровами континентальной коры. Подавляющая часть главной (первичной) геоструктуры ложа Тихого океана сложена примитивными толеитовыми базальтами срединно-океанических хребтов (MOR) и примитивными базальтами плит (PIP).

Продолжение таблицы 1.

	7(28)	8(4)	9(13)	10(42)	11(20)	12(7)
SiO ₂	48.99	47.65	49.53	50.08	49.46	50.07
TiO ₂	1.92	2.00	0.89	1.32	1.23	1.56
Al ₂ O ₃	14.00	13.03	16.17	14.56	14.68	13.62
Fe ₂ O ₃	3.76	7.08	9.29	11.18	11.67	13.18
FeO	7.57	6.21				
MnO	0.20	0.23	0.15	0.17	0.17	0.20
MgO	7.00	6.69	8.65	7.54	6.86	6.99
CaO	11.05	10.64	13.16	11.90	12.13	11.00
Na ₂ O	2.97	3.04	2.07	2.42	2.19	2.61
K ₂ O	0.22	0.57	0.04	0.10	0.61	0.14
P ₂ O ₅	0.21	0.36	0.09	0.12	0.12	0.14
П.п.п.	1.86	1.88	0.69	0.30	0.78	0.19
<i>Сумма</i>	<i>99.75</i>	<i>99.38</i>	<i>100.73</i>	<i>99.69</i>	<i>99.18</i>	<i>99.70</i>
f	46.7	51.3	35.2	42.8	46.4	48.8
Rb	4.1	15	2.3	2.5	17	3.6
Sr	134	155	80	85	92	84
Ba	18	21				
Zr	134	123	54	80	77	90
Ni	92	74	119	81	78	55
Cr	206	136	418	205	263	99
[La/Sm] _n	0.54	0.56	0.66	0.65	0.69	0.78

Примечание: 1-4 – базальты скв. 421, 422, 423, 427, 428, 429; 1, 2 – толеиты MOR, N-тип, 3 – калиевые ферротолеиты, 4 – ферротолеиты MOR; 5 – скв. 864-А; ферротолеиты MOR, N-тип; 6-8 – скв. 319А: 6 – толеиты MOR N-тип, 7 – ферротолеиты MOR, Na-тип, 8 – калиевые ферротолеиты MOR; 9-11 – скв. 597: 9 – толеиты MOR D-тип, 10 – толеиты MOR N-тип, 11 – калиевые ферротолеиты MOR, 12 – ферротолеиты MOR. Средние содержания рассчитаны по опубликованным данным [Init. Repts, v. 54, v. 92; v. 142, 1992] и материалам автора (скв. 319 А, 427, 428).

Список литературы

1. Говоров И.Н., Голубева Э.Д. Петрологические провинции Тихого океана: проект «Литос» // М.: Наука, 1990. С. 195-208.
2. Головинский В.И. Тектоника Тихого океана. М.: Недра, 1985. 199 с.
3. Голубева Э.Д. Эволюция магматизма Тихого океана // Владивосток: Дальнаука, 2009. 132 с.
4. Петрологические провинции Тихого океана // Говоров И.Н., Голубева Э.Д., Пущин И.К. и др. М.: Наука, 1996. 444 с.
5. Родионов Д.А., Коган Р.И. и др. Справочник по математическим методам в геологии. М.: Недра, 1987. 335 с.

ОРГАНИЧЕСКОЕ ВЕЩЕСТВО В ВОДНОЙ СРЕДЕ: МОДЕЛИРОВАНИЕ КИНЕТИКИ БИОДЕСТРУКЦИИ

Губернаторова Т.Н.

Институт водных проблем РАН, Москва, tatiana.ivp.ran@gmail.com

Рассмотрено современное состояние исследований деструкции многокомпонентного органического вещества (ОВ) в водной среде. Анализ механизмов и кинетики деструкции дан на примере лигнина. Разработана математическая модель кинетики деструкции этого класса веществ в водной среде, учитывающая фрактальную структуру макромолекул и их распределённость по размерам и реакционной способности. Полученные результаты показывают, что кинетика деструкции ОВ нелинейна, и при определенных условиях снижение концентрации ОВ описывается степенной зависимостью.

Биодеструкция ОВ занимает ведущее место среди факторов, регулирующих темп самоочищения водной среды и влияющих через качество вод на благополучие водных экосистем, их биоразнообразие и доступность для человека. Органическое вещество непрерывно распределено по реактивностям от лабильных фракций с временем распада порядка часов или суток до стойких, например, лигнинов и гумусовых веществ, распадающихся за время от нескольких до многих тысяч лет, вплоть до высококонденсированных керогенов с временем распада порядка сотен тысяч и миллионов лет. Время распада существенно зависит от природы молекул, их структуры и размеров. Стойкое органическое вещество состоит, как правило, из крупных макромолекул разных размеров, образованных из мономерных единиц в результате полимеризации или поликонденсации и обладающих хаотической дендроидной или поперечно сшитой структурой. Типичные вещества такого рода – гидрофильные лигнины и гумусовые вещества. Остро стоит проблема техногенного загрязнения гидросферы органическими отходами производств, которые трудно подвергаются деструкции. Прежде всего это относится к целлюлозно-бумажной промышленности с многотоннажными лигнинсодержащими отходами, загрязняющими гидросферу, литосферу и приземные слои атмосферы. Наряду с экологическими проблемами, деструкция органического вещества играет важную роль в планетарном цикле углерода, который протекает в значительной части в Мировом океане и определяет параметры климата и состояние биосферы.

Ввиду многообразия органических веществ в водной среде, изучение деструкции целесообразно проводить на примере типичного представителя широкого класса соединений. Таковым является лигнин, который считается эталоном неупорядоченного биополимера. В монографии [1] представлено современное состояние исследований деструкции многокомпонентного

органического вещества в водной среде. В данной работе рассматривается современное состояние проблемы. Анализируется роль деструкции многокомпонентного органического вещества в самоочищении водной среды. Обосновывается выбор лигнина в качестве эталонного представителя широко распространенного класса природных и техногенных органических веществ – биополимеров с хаотической структурой. Разрабатывается методология исследований, обосновывающая трёхуровневую иерархическую схему достижения цели, включающую механизмы деструкции (микроуровень), кинетику процесса (мезоуровень) и общую скорость минерализации ОВ (макроуровень).

На обширном литературном материале проводится анализ современных представлений о структуре лигнина, анализируется статистика связей и функциональных групп; выявляются доминирующие связи и группы; оцениваются массы и размеры макромолекул лигнина и особенности молекулярно-массового распределения; описываются характеристики фрактальной структуры макромолекул. В итоге сформулированы основные закономерности строения лигнина, определяющие кинетику его деструкции, которые используются в дальнейшем для разработки модели этого процесса. Анализируются механизмы ферментативной деструкции лигнина (рис. 1). Описываются основные группы микроорганизмов-деструкторов лигнина и их ферментные системы. Проводится анализ биохимических механизмов

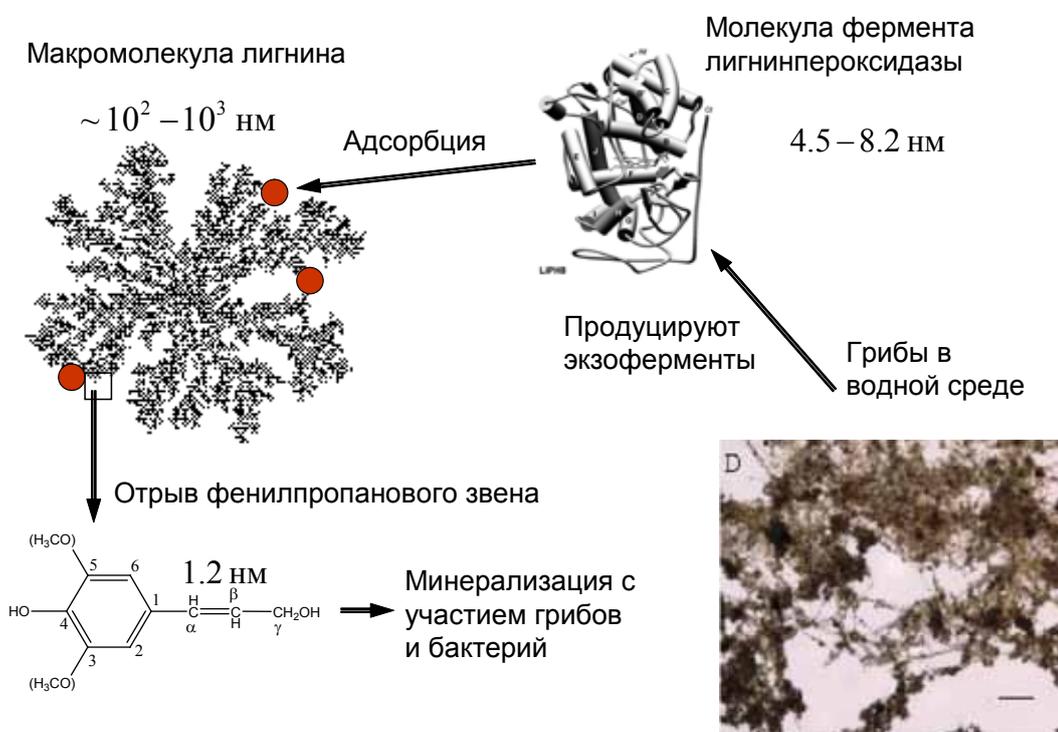


Рис. 1. Цикл деструкции макромолекул лигнина.

действия основных лигнинразрушающих ферментов: лигнинпероксидазы, марганецпероксидазы, гибридной пероксидазы, лакказы. Оцениваются типичные размеры молекул ферментов и особенности молекулярно-массового распределения. Анализируется специфичность действия ферментов, а также роль кислорода в их функционировании. Рассматриваются структурные изменения при деструкции лигнина. Проведенный анализ позволил сформулировать основные закономерности деструкции лигнина с целью их использования для построения модели процесса.

Разработана модель кинетики деструкции лигнина, основанная на результатах анализа его структуры и механизмов деструкции. Сформулированы постулаты модели, составляющие основу описания кинетики деструкции лигнина. Дано детальное обоснование постулатов на основе сведений о строении лигнина и механизмах его деструкции. Подробно описана процедура построения модели. Проведен анализ построенной нелинейной модели. Изучены разные режимы деструкции лигнина, отвечающие моно- и полидисперсному составу макромолекул. Исследована асимптотическая стадия кинетики деструкции и определён закон снижения концентрации органического углерода со временем. Рассмотрено влияние на кинетику фрактальной структуры макромолекул и типа их начального молекулярно-массового распределения. Определён спектр реактивности макромолекул лигнина и спектр их времен распада. Проанализированы экспериментальные данные, на примере которых рассматриваются особенности применения теоретических соотношений.

Цель исследований, результаты которых изложены в монографии, состояла в решении актуальной проблемы самоочищения водной среды – выявлении закономерностей деструкции многокомпонентного ОВ. В качестве типичного представителя широкого класса ОВ с хаотической структурой макромолекул рассмотрен лигнин, который является продуктом разрушения древесины и поступает в воду вместе с продуктами его трансформации, включая гумусовые вещества.

Разработанная математическая модель кинетики биодеструкции лигнина учитывает закономерности строения данного класса веществ и механизмы их деструкции. Анализ построенной нелинейной модели показывает наличие степенной кинетики деструкции. Изучены важные частные случаи моно- и полидисперсного состава макромолекул лигнина. Степенная кинетика деструкции определяется не только фрактальной структурой макромолекул, но и типом их начального распределения по размерам. Последнее формируется в водной среде при участии коагуляционных механизмов, которые приводят к появлению степенного хвоста распределения. Определён спектр времён распада макромолекул лигнина, распределённых по размеру.

Проведен анализ литературных данных по кинетике деструкции органического вещества в морских донных отложениях и лабораторных экс-

периментах. Данные охватывают временной интервал от нескольких часов до миллиона лет и показывают, что концентрация убывает со временем по степенному закону с показателем степени 0.14. Для морских седиментов по литературным данным выявлены два интервала изменения показателя степени: 0.14-0.28 и 0.8-1.1. Рассмотрена кинетика деструкции технического лигнина, присутствующего в сточных водах предприятий целлюлозно-бумажной промышленности. Показатель степени в этом случае равен 0.4-0.5 при деструкции в толще воды и 1-2 при деструкции в воде в присутствии донных отложений.

Развитый в работе теоретический подход позволил установить вид зависимости $c(t)$ концентрации органического углерода от времени в процессе деструкции. Её точный аналитический вид получен для монодисперсного начального распределения макромолекул по размерам. Для произвольного начального распределения, сформированного при участии коагуляционных механизмов, показано, что асимптотика зависимости $c(t)$ на больших временах (когда распадается стойкая фракция) имеет степенной вид. Указана зависимость параметров кинетики от характеристик структуры макромолекул (через фрактальные размерности объёма и поверхности), от прочности связей (через кинетический коэффициент k_1) и параметров начального распределения (начальной концентрации макромолекул, их среднего размера, индекса убывания распределения при коагуляционном формировании макромолекул). Показано, как показатель степени в степенном законе распада зависит от фрактального индекса макромолекулы (отношения фрактальных размерностей поверхности и объёма) и от индекса убывания степенного хвоста начального распределения. Определены интервалы изменения показателей. Построенные теоретические соотношения позволяют интерпретировать эмпирические данные по кинетике деструкции органического вещества. Установленный степенной закон распада говорит о том, что деструкция многокомпонентного ОВ в водной среде протекает намного дольше, чем принято считать на основе оценок по линейным моделям, риск накопления органических токсикантов в водных объектах более высок и, в связи с этим, необходим пересмотр методики расчёта предельно допустимых сбросов.

Список литературы

1. Долгоносков Б.М., Губернаторова Т.Н. Механизмы и кинетика деструкции органического вещества в водной среде. М.: КРАСАНД / URSS, 2011. 208 с.

ПРИЧИННО-СЛЕДСТВЕННЫЕ СВЯЗИ МЕЖДУ СОЛНЕЧНОЙ АКТИВНОСТЬЮ И МЕТЕОРОЛОГИЧЕСКИМИ ПАРАМЕТРАМИ

Дёмин В.И.

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

С помощью оценки причинности по Грейнджеру показано отсутствие взаимной связи между вариациями среднегодовых чисел Вольфа и годовых значений числа элементарных синоптических процессов, что свидетельствует о низкой роли солнечной активности в общей изменчивости атмосферных макропроцессов во внетропической зоне Северного полушария.

Несмотря на то, что большое число исследователей убеждено в статистической достоверности данных о воздействии солнечной активности (СА) на погоду и климат и на протяжении десятилетий предъявляет доказательства этого, единого мнения по этой проблеме нет. Более того, ряд специалистов высказывает сомнения в существовании заметного отклика СА в динамике тропосферы. Но негласно существующая практика публикаций «позитивных» результатов привела к тому, что «сборники статей и журналов полны материалов, где солнечно-погодные связи ярко проявляются, а обширный материал отрицательных результатов остаётся в тени. Это создает неправильное впечатление, что здесь всё благополучно и связи наблюдаются всегда и надежно. Известный американский ученый Вилкоккс даже предложил созывать специальные конференции с докладами тех, кто не обнаружил корреляции метеопараметров с солнечной активностью, чтобы компенсировать оптимистический эффект от обычных конференций» [1].

Действительно, кажущаяся очевидность влияния Солнца сталкивается с принципиальными трудностями. Во-первых, неизвестны механизмы, благодаря которым осуществляется такое взаимодействие. Во-вторых, часто вызывает сомнение надежность методов исследования, используемых в данной области, и получаемых результатов. Так, часто заключение делается по весьма коротким выборкам вплоть до рассмотрения единственного (!) события. В то же время, прямое сопоставление индексов солнечной активности и метеорологических данных на длинных рядах часто не обнаруживает отклика тропосферы на изменения солнечной активности [2]. Другая проблема – реакция атмосферы на одно и то же явление может быть неоднозначной в зависимости от её исходного состояния. Допускается, что воздействие СА носит триггерный характер: срабатывает только как спусковой крючок к уже некоторому подготовленному другими факторами переходу в атмосфере. Если эта гипотеза верна, то поиск прямых корреляций между СА и динамикой тропосферы можно может оказаться нерациональным и даже тщетным. В этом случае целесообразнее установить факт причинно-следственной связи между изменениями в тропосфере и некоторым проявлением СА.

Возможный подход к решению проблемы – использование «причинного теста» К. Грейнджера [6, 7]. Отметим, что причинность по Грейнджеру не аналогична общему пониманию причинности. Это – определение, что чему

предшествует и прогнозирование одной переменной по другой. В основу теста положены два тезиса. 1) Причина происходит до следствия. 2) Причина содержит уникальную информацию о следствии, которая не содержится в других переменных, т.е. причинная переменная должна иметь предсказательную силу после того, как другие данные были использованы для прогноза. Чтобы определить, является ли переменная X причиной Y , следует выяснить, какую часть дисперсии текущего значения Y можно объяснить прошлыми значениями самой Y , и может ли добавление прошлых значений Y улучшить это объяснение. Переменную X называют причиной Y , если X помогает в предсказании Y с точки зрения уменьшения дисперсии. Рассмотрим причинность по Грейнджеру для двух переменных.

$$x_t = \sum_{j=1}^p a_j x_{t-j} + \sum_{j=1}^p b_j y_{t-j} + v_t,$$

$$y_t = \sum_{j=1}^p c_j x_{t-j} + \sum_{j=1}^p d_j y_{t-j} + w_t$$

Отсутствие причинной связи от X к Y означает, что $c_j=0$ при $j=1, \dots, p$, т.е. прошлые значения X не влияют на Y . Отсутствие причинной связи от Y к X означает, что $b_j=0$, $j=1, \dots, p$.

Техническая реализация теста Грейнджера состоит в построении авторегрессионных моделей для рядов X , Y , их совместной АР-модели и сравнении ошибок индивидуальных ($\sigma_{x/x}^2$, $\sigma_{y/y}^2$) и совместной моделей ($\sigma_{y/x}^2$, $\sigma_{x/y}^2$). Относительное улучшение прогноза с использованием значений второй переменной

$$P_{yx} = \frac{\sigma_{x/x}^2 - \sigma_{x/y}^2}{\Omega_x^2} \quad \text{и} \quad P_{xy} = \frac{\sigma_{y/y}^2 - \sigma_{y/x}^2}{\Omega_y^2},$$

где Ω_x и Ω_y – дисперсии процессов X и Y . О причинности по Грейнджеру говорят в том случае, когда есть статистически значимое отличие P_{xy} или P_{yx} от нуля. Проверка проводится с использованием F -теста (Фишера) с учетом того, что для статистически несвязанных процессов:

$$S = \frac{(\sigma_{y/y}^2 - \sigma_{y/x}^2)}{\sigma_{y/x}^2} \cdot \frac{(N - 2p - 1)}{p} \sim F_{p, N-2p-1},$$

где N – длина ряда. По мнению К. Грейнджера, если тест даёт положительный результат при сопоставлении двух рядов наблюдений, то существует вероятность (но не доказательство!) наличия причинно-следственной связи между ними. В случае отрицательного результата следует уверенно утверждать отсутствие взаимосвязи между наблюдаемыми переменными.

Выше говорилось, что реакция атмосферы на СА может быть неоднозначной, что и объясняет диаметрально противоположные выводы различных исследователей. Автор предлагается искать не ответ на вопрос, какие конкретные циркуляционные процессы появятся после того или иного собы-

тия СА [4], а ограничиться нахождением факта последующей перестройки атмосферной циркуляции. В качестве показателя такой перестройки рассмотрим смену элементарного синоптического процесса (ЭСП), под которым понимается период, когда в тропосфере сохраняется общая картина барического поля и направления основных воздушных течений. Продолжительность ЭСП меняется от 2 до 6-8 дней, а переход от одного ЭСП к другому – резкая перестройка атмосферной циркуляции. Таким образом, среднегодовое (среднесезонное или среднемесячное) число ЭСП является количественным показателем изменчивости атмосферных процессов во внетропической зоне Северного полушария.

Технология выделения ЭСП по картам приземного анализа и барической топографии подробно рассматривается в специальных изданиях [5]. Трудности диагностики ЭСП компенсируются его более значимым показателем изменчивости атмосферной циркуляции по сравнению с различными индексами циркуляции (NAO, AO, ENSO, SCA и др.). Последние получают упрощенным способом. Так, NAO определяется как нормированная разность давлений всего в двух точках, одна из которых расположена на Азорских о-вах, вторая – в Исландии. Указанные индексы более понятны для метеорологов, потому и получили широкое распространение, хотя являются весьма формальными.

Рабочая гипотеза: если СА (здесь в качестве показателя использованы числа Вольфа) приводит к изменению крупномасштабной циркуляции тропосферы, то её многолетние вариации непременно отразятся на годовом числе ЭСП в сторону увеличения или уменьшения. При этом нам важен лишь факт того, что изменениям числа ЭСП предшествуют изменения СА. Вариации чисел Вольфа и ЭСП с 1891 по 2010 гг. даны на рис. 1. Заметим, что до 1950-ых гг. наблюдался рост СА и ЭСП, в последующие десятилетия – их уменьшение. Благодаря этому между рядами имеется значимая корреляция. При анализе задач такого рода характерны низкие коэффициенты корреляции [3]. Наиболее вероятно, что это – совпадение фаз двух долговременных циклов в случайных рядах. Тем более, что 11-летний цикл солнечной активности (единственный, установленный статистически достоверно) в вариациях числа ЭСП никак не проявляется. Для проверки предположения применим тест Грейнджера. Для удаления трендов воспользуемся методом первых разностей. Этого достаточно для получения стационарных рядов – необходимое условие для теста Грейнджера. Использование других методов приведения к стационарности требует задания некой физической модели и представлений о характере её долговременных вариаций, что не всегда возможно. Численная реализация теста по Грейнджеру возможна в программной среде R, предназначенной для статистической обработки данных b. Открытый код доступен по адресам [<http://hosho.ees.hokudai.ac.jp/~kubo/Rdoc/library/lmtest/html/grangertest.html>; <http://rss.acs.unt.edu/Rdoc/library/MSBVAR/html/granger.test.html>], а также в специализированных коммерческих пакетах SAS, STATA, EViews.

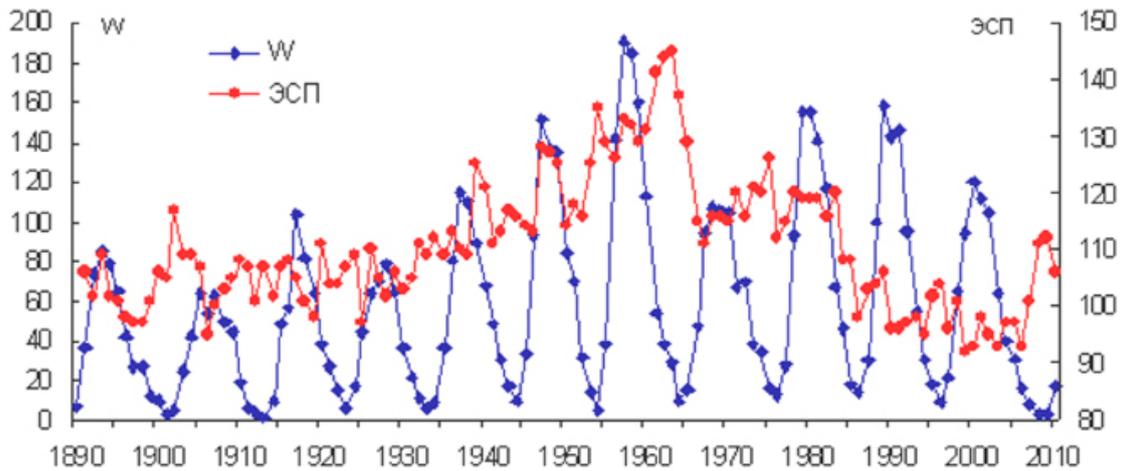


Рис. 1. Многолетняя динамика среднегодового числа Вольфа и числа ЭСП.

Нулевые гипотезы: «числа Вольфа не влияют на число ЭСП» ($W \rightarrow \text{ЭСП}$), «число ЭСП не влияет на значение числа Вольфа» ($\text{ЭСП} \rightarrow W$). Результаты оценки даны в табл. 1. Для отклонения нулевой гипотезы на 5%-ном уровне значимости необходимо, чтобы р-значение для соответствующей пары показателей было менее 0.05. Заключение: 1) сохраняем гипотезу об отсутствии влияния среднегодовых чисел Вольфа на годовое число ЭСП; 2) сохраняем гипотезу о том, что годовое число ЭСП не влияет на среднегодовое значение числа Вольфа. Таким образом, тест Грейнджера не показывает, что вариации чисел Вольфа, служащих важнейшим показателем солнечной активности, влияют на крупномасштабную перестройку тропосферной циркуляции. Но заметим, что отрицательный результат не исключает мезомасштабных проявлений СА, например, в виде локальных гроз и т.п.

Таблица 1. Вероятности р для F-статистики и разных временных лагов для гипотез $W \rightarrow \text{ЭСП}$, $\text{ЭСП} \rightarrow W$.

Лег	р	
	$W \rightarrow \text{ЭСП}$	$\text{ЭСП} \rightarrow W$
1	0.8484	0.3826
2	0.7018	0.4689
3	0.8697	0.3171
4	0.9628	0.5307
5	0.6975	0.5329
6	0.7062	0.7793
7	0.5023	0.8648
8	0.5644	0.9107
9	0.6214	0.7607
10	0.7342	0.4899

Возвращаясь к вопросу о целесообразности привлечения теста Грейнджера как дополнительного инструмента к традиционному корреляционному анализу, рассмотрим пример с искусственными рядами (рис. 2а). После добавления шума они же даны на рис. 2б. Корреляция между рядами статистически значима. Но можно ли сказать, что ряд Б является следствием А? На рис. 1а видно, что явление Б1 наступает за А1, явления Б2 и А2 проис-

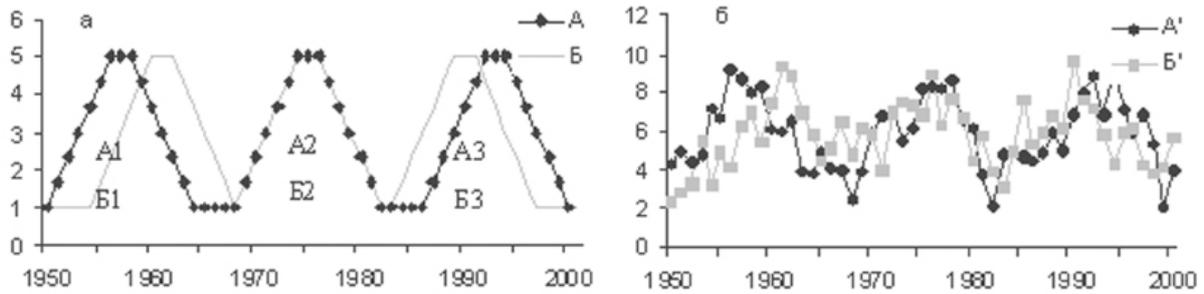


Рис. 2. Искусственные ряды A и B (а), они же после наложения шума (б).

ходят синхронно, а $B3$ происходит до $A3$. Но в зашумленном сигнале этого можно не увидеть, а использование одного корреляционного анализа может привести к ошибочному заключению. В то же время, тест Грейнджера может показать отсутствие связи. Приведенный пример не является надуманным. Ряды, напоминающие рис. 2б, часто встречаются в геофизике. Сопоставляя их, приходят к выводам, что в некоторый период времени корреляция между явлениями положительна, в другой – отрицательна, в третий – отсутствовала. Это явление получило специальное название – «изменение знака и нарушение корреляций» [3].

Сообщается, что ряд глобальной температуры в 1959-2004 гг. после удаления тренда хорошо коррелирует с вариациями солнечной постоянной TSI (рис. 3) [8]. Это подтверждается корреляционным анализом. Но тест Грейнджера дает отрицательный результат (табл. 2). Это позволяет предположить, что корреляция появилась именно за счёт короткой выборки 1959-2004 гг. Если же удлинить ряд на 15-20 лет (привлечь данные до 1959 г. и 2005-2010 гг.), корреляция пропадает. В этой связи интересен вопрос: почему авторы [8] ограничились периодом 1959-2004 гг.? По их мнению, в 1959 г. создана современная сеть аэрологического зондирования. Но в таком подхо-

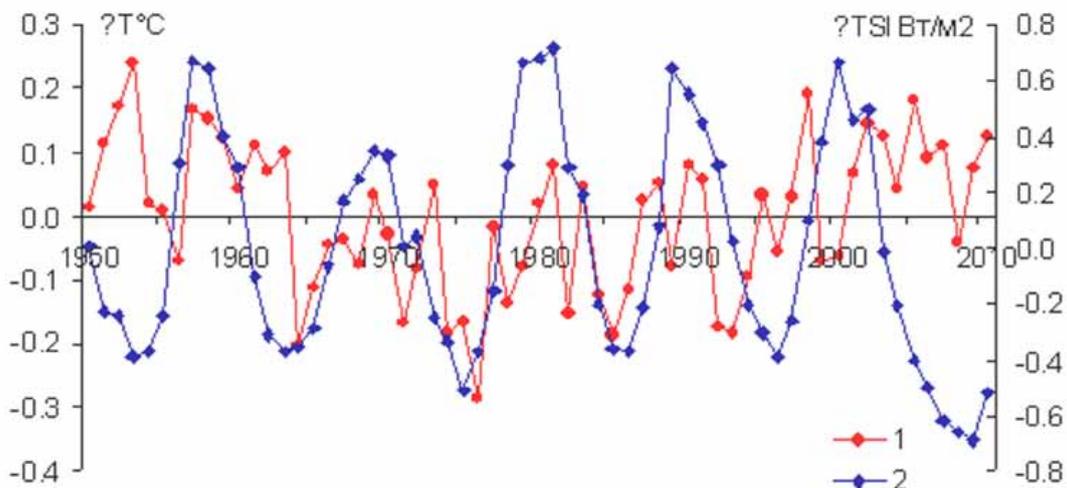


Рис. 3. Отклонения среднегодовой приземной температуры $\Delta T^{\circ}\text{C}$ и солнечной постоянной ΔTSI от их трендов.

де есть лукавство: данные радиозондов никогда и нигде не используются для оценок приземной температуры (именно её используют авторы) в силу ряда причин: точность аэрологических датчиков температуры во много раз ниже точности приборов, которые используются на сети стационарных станций; датчик обладает тепловой инерцией, а зонд быстро покидает пределы приземного слоя (отсчёт температуры на метеостанциях на высоте 2 м); небольшое число выпусков зонда в сутки (1-4) и др. Более правдоподобно, что в [8] намеренно взят фрагмент, подтверждающий точку зрения авторов.

Таблица 2. Значения вероятности p для F-статистики и разных временных лагов для гипотез $\Delta TSI \rightarrow \Delta T$ и $\Delta T \rightarrow \Delta TSI$.

Лag	p	
	$\Delta TSI \rightarrow \Delta T$	$\Delta T \rightarrow \Delta TSI$
1	0.1898	0.7662
2	0.4223	0.8931
3	0.6203	0.6599
4	0.5117	0.8178
5	0.5163	0.7329

Даже значимая корреляция между случайными величинами на ограниченной по длине выборке не гарантирует, что связь имеет причинно-следственный характер или что корреляция сохранится для большей выборки. С другой стороны, отсутствие корреляции между двумя величинами не означает, что между ними нет никакой связи. Так, между относительной влажностью воздуха и его температурой нет корреляции (100% влажности может быть при -20 , 0 и $+20$ C), но физическая связь несомненна. Причинный анализ по Грейнджеру в таких случаях может оказаться полезным вспомогательным инструментом, позволяющим ограничить область поиска за счёт исключения переменных, не прошедших тест.

Список литературы

1. Авдюшин С.И., Данилов А.Д. Рассказ о космической погоде. – СПб.: Гидрометеоиздат, 1993. 160 с.
2. Авдюшин С.И., Данилов А.Д. Солнце, погода, климат: сегодняшний взгляд на проблему // Геомагнетизм и аэрономия. 2000. Т. 40. № 5. С. 3-14.
3. Герман Дж.Р., Гольдберг Р.А. Солнце погода и климат. – Л.: Гидрометеоиздат, 1981. 320 с.
4. Гирс А.А. Макроциркуляционный метод долгосрочных метеорологических прогнозов. Л.: Гидрометеоиздат, 1974. 488 с.
5. Дулетова Т.А. Основы синоптического метода долгосрочных прогнозов погоды. М.-Л.: Гидрометеоиздат., 1940. 368 с.
6. Handbook of time series analysis recent theoretical developments and applications. Ed. B. Schelter et al. Wiley-VCH, 2006. 514 p.
7. Granger C.W.J. Investigating causal relations by econometric models and cross-spectral methods // Econometrica. 1969. V 37. P 424-438.
8. Camp D., Ka Kit Tung. Surface warming by the solar cycle as revealed by the composite mean difference projection // GRL. 2007. V 34. L14703. doi:10.1029/2007GL030207.

**РАСПАРАЛЛЕЛИВАЕМЫЙ АЛГОРИТМ ЧИСЛЕННОГО
РЕШЕНИЯ ДВУМЕРНОЙ ПЕРИОДИЧЕСКОЙ
КРАЕВОЙ ЗАДАЧИ ДЛЯ УРАВНЕНИЯ ПУАССОНА
МЕТОДОМ БЫСТРОГО ПРЕОБРАЗОВАНИЯ ФУРЬЕ**

Мельник М.Н., Мингалёв О.В.

Полярный геофизический институт КНЦ РАН, Апатиты,
melnik@pgia.ru, mingalev_o@pgia.ru.

В работе рассмотрен алгоритм и программа численного решения 2D периодической краевой задачи для уравнения Пуассона в прямоугольнике, основанные на методе быстрого преобразования Фурье. Алгоритм допускает простую параллельную реализацию, что позволяет использовать программу в вычислениях на суперкомпьютерах. По точности и вычислительным затратам она не уступает аналогичной подпрограмме из библиотеки IMSL, но имеет интерфейс, более удобный для моделирования.

Введение. В ходе численного моделирования различных физических задач, в частности, в физике плазмы, возникает проблема численного решения двух- и трёхмерного уравнения Пуассона в прямоугольной области с периодическими граничными условиями. При этом в связи с необходимостью использования суперкомпьютеров, помимо традиционных точности, экономичности и универсальности, алгоритм должен допускать параллельный вариант, который позволит использовать его на одном узле суперкомпьютера или на видеокарте. В математической библиотеке IMSL имеются подпрограммы, которые численно решают такие задачи. Но они работают только в последовательном варианте и, во-вторых, библиотека IMSL является коммерческим продуктом и, как правило, на отечественных суперкомпьютерах не установлена. В параллельном варианте, по сравнению с последовательным, играет роль интенсивность обмена данными между параллельными нитями, а также сложность алгоритма. Поэтому для него наиболее оптимальными представляются два точных (или прямых) метода: быстрого преобразования Фурье (далее БПФ) и блочной циклической редукции [2-4].

В этой работе мы рассмотрим вариант БПФ в случае аппроксимации 4-го порядка точности двумерной периодической задачи для уравнения Пуассона в прямоугольнике, который допускает простую параллельную реализацию. В методической литературе по численным методам он не описан [5].

Непрерывная задача, её собственные функции и решение методом Фурье. Рассмотрим 2-мерную периодическую краевую задачу для уравнения Пуассона в прямоугольнике $\Pi = (0; L_x) \times (0; L_y)$:

$$\left. \begin{aligned} \Delta u(x, y) = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = f(x, y), \quad \bar{x} = (x, y) \in \Pi = (0; L_x) \times (0; L_y) \\ u|_{x=0} \equiv u|_{x=L_x}; \quad u|_{y=0} \equiv u|_{y=L_y} \end{aligned} \right\} \quad (1)$$

(где $f(x, y)$ — заданная на Π периодическая функция — правая часть), и кратко отметим основные моменты в решении этой задачи методом разделения переменных Фурье. Для этого используются собственные числа и функции 1-мерной периодической задачи

$$V''(x) = \lambda V(x), \quad x \in (0; L), \quad V(0) = V(L) \quad (2)$$

которые удобно обозначить следующим образом:

$$\left. \begin{aligned} \lambda[2s] = -(2\pi s/L)^2, \quad V[2s](x) = \cos(2\pi s x/L), \quad s = 0, 1, 2, \dots \quad (s \in \mathbf{Z}_+) \\ \lambda[2s-1] = -(\pi s/L)^2, \quad V[2s-1](x) = \sin(\pi s x/L), \quad s = 1, 2, \dots \quad (s \in \mathbf{N}) \end{aligned} \right\} \quad (3)$$

Собственные числа $\lambda[0] = 0$ и $\lambda[4s-3] = -(\pi(2s-1)/L)^2$ являются однократными с собственными функциями $V[0](x) \equiv 1$ и $V[4s-3](x) = \sin(\pi(2s-1)x/L)$, где $s \in \mathbf{N}$. Остальные собственные числа двукратные: $\lambda[2s] = \lambda[4s-1] = -(2\pi s/L)^2$, им соответствует пара ортогональных в пространстве $L_2(0; L)$ собственных функций $V[2s](x) = \cos(2\pi s x/L)$ и $V[4s-1](x) = \sin(2\pi s x/L)$. Собственные числа и функции двумерной периодической задачи

$$\left. \begin{aligned} \Delta W(x, y) = \frac{\partial^2 W}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 W}{\partial y^2} = \lambda \cdot W(x, y), \quad \bar{x} = (x, y) \in \Pi = (0; L_x) \times (0; L_y) \\ W|_{x=0} \equiv W|_{x=L_x}; \quad W|_{y=0} \equiv W|_{y=L_y} \end{aligned} \right\} \quad (4)$$

выражаются через собственные числа и функции (3) одномерной задачи (2) следующим образом. Обозначим собственные числа и функции соответствующих одномерных задач вида (2) по переменным x и y следующим образом:

$$\left. \begin{aligned} \lambda_x[2p_x] = -(2\pi p_x/L_x)^2; \quad V_x[2p_x](x) = \cos(2\pi p_x x/L_x), \quad p_x = 0, 1, 2, \dots \\ \lambda_x[2p_x-1] = -(\pi p_x/L_x)^2; \quad V_x[2p_x-1](x) = \sin(\pi p_x x/L_x), \quad p_x = 1, 2, \dots \\ \lambda_y[2p_y] = -(2\pi p_y/L_y)^2; \quad V_y[2p_y](y) = \cos(2\pi p_y y/L_y), \quad p_y = 0, 1, 2, \dots \\ \lambda_y[2p_y-1] = -(\pi p_y/L_y)^2; \quad V_y[2p_y-1](y) = \sin(\pi p_y y/L_y), \quad p_y = 1, 2, \dots \end{aligned} \right\} \quad (5)$$

Введём двумерный мультииндекс $\vec{p} = (p_x; p_y) \in \mathbf{Z}_+^2$. Тогда собственные числа и функции задачи (4) определяются формулами

$$\left. \begin{aligned} \lambda[\vec{p}] = \lambda_x[p_x] + \lambda_y[p_y], \\ W[\vec{p}](\bar{x}) = W[p_x, p_y](x, y) = V_x[p_x](x) \cdot V_y[p_y](y) \end{aligned} \right\} \quad (6)$$

Среди собственных чисел $\lambda[\vec{p}]$ имеются простые, двукратные и четырехкратные. Это отличает периодическую задачу (1) от задач Дирихле и Неймана для уравнения Пуассона в прямоугольнике. Для норм собственных функций в пространстве $L_2(\Pi)$ верны равенства:

$$\|W[\vec{0}]\|^2 = L_x L_y, \|W[0; p_y]\|^2 = \|W[p_x; 0]\|^2 = \frac{L_x L_y}{2}, \|W[\vec{p}]\|^2 = \frac{L_x L_y}{4} \text{ при } p_x, p_y \in \mathbf{N}.$$

Обозначим $F[\vec{p}]$ коэффициенты Фурье правой части $f(\vec{x})$ уравнения Пуассона по определяемой формулами (5) и (6) ортогональной системе собственных функций $\{W[\vec{p}](\vec{x})\}$ задачи (4) в пространстве $L_2(\Pi)$. Коэффициенты $F[\vec{p}]$ определяются формулой:

$$F[\vec{p}] = \frac{(f; W[\vec{p}])_{L_2(\Pi)}}{\|W[\vec{p}]\|_{L_2(\Pi)}^2} = \int_{\Pi} f(\vec{x}) W[\vec{p}](\vec{x}) dx dy \Big/ \int_{\Pi} |W[\vec{p}](\vec{x})|^2 dx dy \quad (7)$$

Условие разрешимости задачи (1) аналогично таковому для задачи Неймана и состоит в ортогональности правой части $f(\vec{x})$ первой собственной функции $W[\vec{0}](\vec{x}) \equiv 1$ в пространстве $L_2(\Pi)$:

$$\dot{u}[\vec{0}] = \frac{1}{L_x L_y} \int_{\Pi} (-) = 0.$$

Алгоритм решения задачи (1) методом Фурье состоит из следующих шагов:

1) находим коэффициенты Фурье $F[\vec{p}]$ правой части по определяемой формулами (5) и (6) системе собственных функций $\{W[\vec{p}](\vec{x})\}$ задачи (4) в пространстве $L_2(\Pi)$ по формуле (7);

2) находим коэффициенты Фурье $U[\vec{p}]$ решения $u(\vec{x})$; для удобства считаем $U[\vec{0}] = 0$, а при $\|\vec{p}\| = p_x + p_y \geq 1$ находим их по формуле $U[\vec{p}] = F[\vec{p}]/\lambda[\vec{p}]$ (8);

3) находим решение $u(\vec{x})$ задачи (1) как сумму ряда Фурье

$$\dot{u}(\vec{x}) = \sum_{p_x=0}^{+\infty} \sum_{p_y=0}^{+\infty} [-] \cdot [-](^-) \quad (9)$$

Изложенная схема метода Фурье для исходной задачи (1), основанная на формулах (5-9), полностью сохраняется и для дискретного аналога.

Дискретная задача и её решение методом Фурье. Прежде чем рассматривать дискретный аналог задачи (1), рассмотрим дискретный аналог задачи (2), т. е. одномерную дискретную периодическую задачу на собственные числа и векторы.

Рассмотрим на отрезке $[0; L]$ сетку $x_k = k \cdot h$, $k = 0, 1, \dots, N$, где $h = L/N$ — шаг сетки. С учётом условия периодичности $V(0) = V(L)$ функция $V(x)$ переходит в N -мерный сеточный вектор $\vec{V}_h \in \mathbf{R}^N$ с координатами $V_h(k) = V(x_k)$ $\dot{u} \dot{u} \dot{x} = \dots N -$. В случае конечно-разностной аппроксима-

ции 2-го порядка точности оператор 2-й производной заменяется оператором $\hat{\delta}^2$ [2-4]:

$$V''(x_k) \rightarrow \frac{1}{h^2} \hat{\delta}^2 V_h(k) = \frac{1}{h^2} (V_h(k+1) - 2V_h(k) + V_h(k-1)) \quad (10)$$

При этом одномерная периодическая задача (2) на собственные числа и функции принимает вид задачи на собственные числа и векторы для оператора $\hat{\delta}^2$ (симметричной матрицы размера $N \times N$):

$$\hat{\delta}^2 V_h(k) = \lambda \cdot V_h(k), \quad k = 0, 1, \dots, N-1 \quad (11)$$

где $V_h(k)$ определяется при всех $k \in \mathbb{Z}$ из условия периодичности: $V_h(k \pm N) = V_h(k)$. В матричной форме задача (11) может быть записана как $\bar{\mathbb{A}} \bar{V}_h = \lambda \cdot \bar{V}_h$, где соответствующая оператору $\hat{\delta}^2$ матрица $\bar{\mathbb{A}}$ размера $N \times N$ имеет вид:

$$\bar{\mathbb{A}} = \begin{bmatrix} -2 & 1 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & -2 & 1 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -2 & 1 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \dots & \dots \\ \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 1 & -2 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 1 & -2 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 1 & -2 \end{bmatrix}$$

Рассмотрим используемый на практике случай чётного $N = 2 \cdot m$, когда матрица $\bar{\mathbb{A}}$ имеет $(m+1)$ различных собственных чисел

$$\lambda[s] = -2(1 + \cos(2\pi s/N)) = -2(1 + \cos(\pi s/m)), \quad s = 0, 1, \dots, m, \quad (12)$$

из которых $\lambda_{\min} = \lambda[0] = -4$ и $\lambda_{\max} = \lambda[m] = 0$ однократны, остальные $(m-1)$ чисел $\lambda[s]$ при $s = 1, \dots, m-1$ являются двукратными. Учитывая, что при $s = 0, 1, \dots, N$ верно $\lambda[N-s] = \lambda[s]$, собственные векторы $\vec{V}[s] \in \mathbf{R}^N$ матрицы $\bar{\mathbb{A}}$ (и оператора $\hat{\delta}^2$) удобно занумеровать так:

$$\bar{\mathbb{A}} \vec{V}[s] = \lambda[s] \cdot \vec{V}[s], \quad s = 0, 1, \dots, N-1.$$

При этом их координаты $V[s](k)$, $k = 0, 1, \dots, N-1$ определяются формулами

$$\left. \begin{aligned} V[s](k) &= \cos(\pi sk/m) \quad \text{при } s = 0, 1, \dots, m, \\ V[s](k) &= \sin(\pi sk/m) \quad \text{при } s = m+1, \dots, N-1 \end{aligned} \right\} \quad (13)$$

Отметим равенства для евклидовых норм (модулей) собственных векторов:

$$|\vec{v}[0]|^2 = |\vec{v}[m]|^2 = N, \quad |\vec{v}[s]|^2 = N/2 \quad \text{при } s = 1, \dots, m-1, m+1, \dots, N-1.$$

Рассмотрим дискретный аналог задачи (1) в случае конечно-разностной аппроксимации 4-го порядка точности [2, 4]. Пусть $L_x = h \cdot N_x$, $L_y = h \cdot N_y$, причём $N_x = 2 \cdot m_x$ и $N_y = 2 \cdot m_y$ — чётные. Обозначим $\vec{k} = (k_x, k_y) \in (0, 1, \dots, N_x) \times (0, 1, \dots, N_y)$ мультииндекс узлов сетки, $\vec{x}[\vec{k}] = h \cdot \vec{k}$ — узлы сетки в $\Pi = (0; L_x) \times (0; L_y)$, $U_h(\vec{k}) = u(\vec{x}[\vec{k}])$ и $f_h(\vec{k}) = f(\vec{x}[\vec{k}])$ — массивы значений решения и правой части в узлах сетки, которые можно продолжить для $\forall \vec{k} \in Z^2$ в силу периодичности

$$U_h(k_x \pm N_x, k_y \pm N_y) = U_h(k_x, k_y).$$

$U_h(\vec{k})$ и $f_h(\vec{k})$ удобно рассматривать как заданные при $\vec{k} \in (0, 1, \dots, N_x - 1) \times (0, 1, \dots, N_y - 1)$ компоненты матриц \mathbb{U}_h и \mathbb{f}_h размера $N_x \times N_y$. Обозначим $\vec{e}_x = (\text{ùùù})$, $\vec{e}_y = (\text{ùùù})$ единичные векторы базиса, $\hat{\delta}_x^2$ и $\hat{\delta}_y^2$ — конечно-разностные аппроксимации 2-го порядка точности для операторов $\frac{\partial^2}{\partial x^2}$ и $\frac{\partial^2}{\partial y^2}$, аналогичные (10):

$$\frac{\partial^2 u(\vec{x}(\vec{k}))}{\partial x^2} \rightarrow \frac{1}{h^2} \hat{\delta}_x^2 U_h(\vec{k}) = \frac{1}{h^2} (U_h(\vec{k} + \vec{e}_x) - 2U_h(\vec{k}) + U_h(\vec{k} - \vec{e}_x))$$

$$\frac{\partial^2 u(\vec{x}(\vec{k}))}{\partial y^2} \rightarrow \frac{1}{h^2} \hat{\delta}_y^2 U_h(\vec{k}) = \frac{1}{h^2} (U_h(\vec{k} + \vec{e}_y) - 2U_h(\vec{k}) + U_h(\vec{k} - \vec{e}_y))$$

В случае конечно-разностной аппроксимации уравнения Пуассона с 4-м порядком точности [2, 4] оно переходит в дискретное:

$$\frac{1}{h^2} \left(\hat{\delta}_x^2 + \hat{\delta}_y^2 + \frac{1}{6} \hat{\delta}_x^2 \hat{\delta}_y^2 \right) U_h(\vec{k}) = f_h(\vec{k}) + \frac{1}{12} \left(\hat{\delta}_x^2 + \hat{\delta}_y^2 \right) f_h(\vec{k}) \quad (14)$$

Рассмотрим вспомогательную задачу на собственные числа и векторы стоящего в левой части уравнения (14) оператора, который действует в $N_x \cdot N_y$ -мерном линейном пространстве матриц размера $(N_x \times N_y)$ с компонентами $\left[W(k_x, k_y) \right]_{\substack{k_x=0,1,\dots,N_x-1 \\ k_y=0,1,\dots,N_y-1}}$, периодически продолженных по \vec{k} :

$$\left(\hat{\delta}_x^2 + \hat{\delta}_y^2 + \frac{1}{6} \hat{\delta}_x^2 \hat{\delta}_y^2 \right) W(\vec{k}) = \epsilon \cdot W(\vec{k}) \quad (15)$$

Выразим её решение через решение (12), (13) одномерной дискретной периодической задачи (11), которое даёт собственные числа и векторы операторов $\hat{\delta}_x^2$ и $\hat{\delta}_y^2$. Пусть $\vec{p} = (p_x; p_y)$ — 2-мерный мультииндекс, где

$p_x = 0, 1, \dots, N_x - 1$, $p_y = 0, 1, \dots, N_y - 1$. Собственные числа оператора (15) можно представить в виде

$$\lambda[\vec{p}] = \lambda_x[p_x] + \lambda_y[p_y] + \frac{1}{6} \lambda_x[p_x] \cdot \lambda_y[p_y], \quad (16)$$

где аналогично (12)

$$\left. \begin{aligned} \lambda_x[p_x] &= -2 \left(1 + \cos(\pi p_x / m_x) \right), \quad p_x = 0, 1, \dots, N_x - 1, \\ \lambda_y[p_y] &= -2 \left(1 + \cos(\pi p_y / m_y) \right), \quad p_y = 0, 1, \dots, N_y - 1 \end{aligned} \right\} \quad (17)$$

Взаимно ортогональные собственные векторы оператора (15) образуют базис в указанном $N_x \cdot N_y$ -мерном линейном пространстве периодических матриц и могут быть представлены в виде диады (тензорного произведения) собственных векторов операторов $\hat{\delta}_x^2$ и $\hat{\delta}_y^2$:

$$\vec{W}[\vec{p}] = \vec{V}_x[p_x] \otimes \vec{V}_y[p_y] = \vec{V}_x[p_x] \cdot (\vec{V}_y[p_y])^T,$$

что в координатной записи соответствует формуле

$$W[p_x, p_y](k_x; k_y) = V_x[p_x](k_x) \cdot V_y[p_y](k_y) \quad (18)$$

где собственные векторы $\vec{V}_x[p_x] \in \mathbf{R}^{N_x}$ и $\vec{V}_y[p_y] \in \mathbf{R}^{N_y}$ операторов $\hat{\delta}_x^2$ и $\hat{\delta}_y^2$ определяются, согласно (13), следующими формулами для координат:

$$\left. \begin{aligned} V_x[p_x](k_x) &= \cos(\pi p_x k_x / m_x) \quad \text{при} \quad p_x = 0, 1, \dots, m_x, \\ V_x[p_x](k_x) &= \sin(\pi p_x k_x / m_x) \quad \text{при} \quad p_x = m_x + 1, \dots, N_x - 1 \end{aligned} \right\} \quad (19)$$

для $k_x = 0, 1, \dots, N_x - 1$ и

$$\left. \begin{aligned} V_y[p_y](k_y) &= \cos(\pi p_y k_y / m_y) \quad \text{при} \quad p_y = 0, 1, \dots, m_y, \\ V_y[p_y](k_y) &= \sin(\pi p_y k_y / m_y) \quad \text{при} \quad p_y = m_y + 1, \dots, N_y - 1 \end{aligned} \right\} \quad (20)$$

для $k_y = 0, 1, \dots, N_y - 1$.

Рассмотрим численное решение (14) в периодическом случае. Наиболее важный шаг – нахождение коэффициентов Фурье $F[\vec{p}]$ массива значений на сетке правой части уравнения Пуассона $\mathcal{F}_h = \{f_h(\vec{k})\}$ в базисе (18) собственных векторов $\{\vec{W}[\vec{p}]\}$ (где $p_x = 0, 1, \dots, N_x - 1$, $p_y = 0, 1, \dots, N_y - 1$) оператора (15), которые аналогично (7) определяются по формуле:

$$F[\vec{p}] = \left(\mathcal{F}_h; \vec{W}[\vec{p}] \right)_h / \left(\vec{W}[\vec{p}]; \vec{W}[\vec{p}] \right)_h \quad (21)$$

Скалярное произведение $(\vec{U}; \vec{V})_h$ в $N_x \cdot N_y$ -мерном пространстве матриц $(N_x \times N_y)$ определяется формулой

$$\left(\bar{U}; \bar{V}\right)_h = \sum_{k_x=0}^{N_x-1} \sum_{k_y=0}^{N_y-1} U(k_x, k_y) \cdot V(k_x, k_y)$$

Для норм собственных векторов (18) верны равенства $\|\bar{W}[\bar{0}]\|^2 = N_x N_y$ и $\|\bar{W}[0; p_y]\|^2 = \|\bar{W}[p_x; 0]\|^2 = \frac{N_x N_y}{2}$, $\|\bar{W}[\bar{p}]\|^2 = \frac{N_x N_y}{4}$ при $p_x = 1, \dots, N_x - 1$, $p_y = 1, \dots, N_y - 1$. Тогда правая часть $\Phi_h(\vec{k}) = f_h(\vec{k}) + \frac{4}{12}(\hat{\delta}_x^2 + \hat{\delta}_y^2)f_h(\vec{k})$ уравнения (14) в базисе (18) собственных векторов $\{\bar{W}[\bar{p}]\}$ оператора (15) будет иметь координаты

$$\Phi[\bar{p}] = \left(1 + \frac{1}{12}(\lambda_x[p_x] + \lambda_y[p_y])\right) \cdot F[\bar{p}].$$

Условие разрешимости уравнения (14) полностью аналогично исходной задаче (1):

$$F \text{ùùù} = \sum_{k_x=0}^{N_x-1} \sum_{k_y=0}^{N_y-1} f_h(k_x, k_y) =$$

Аналогично (8), координаты $U[\bar{p}]$ решения уравнения (14) в базисе (18) собственных векторов (матриц) $\{\bar{W}[\bar{p}]\}$ оператора (15) при $\|\bar{p}\| = p_x + p_y \geq 1$ определяются формулой

$$U[\bar{p}] = \frac{h^2 \Phi[\bar{p}]}{\lambda[\bar{p}]} = \frac{h^2 \left(1 + \frac{1}{12}(\lambda_x[p_x] + \lambda_y[p_y])\right) \cdot F[\bar{p}]}{\lambda_x[p_x] + \lambda_y[p_y] + \frac{1}{6}\lambda_x[p_x] \cdot \lambda_y[p_y]} \quad (22)$$

а координату $U[\bar{0}]$ удобно считать равной нулю. Тогда сеточные компоненты решения уравнения (14) аналогично (9) определяется формулой

$$\text{ùùù}(\vec{r}) = \sum_{p_x=0}^{N_x-1} \sum_{p_y=0}^{N_y-1} [\vec{r}] \cdot [\vec{r}]^{-1} \quad (23)$$

Формулы (16-23) позволяют построить алгоритм решения дискретного аналога задачи (1) — уравнения (14) в периодическом случае.

Основные детали численного метода и результаты тестирования.

Для численного решения задачи (1) нужно последовательно выполнить шаги:

- 1) по формулам (17) найти собственные числа операторов $\hat{\delta}_x^2$ и $\hat{\delta}_y^2$;
- 2) по формуле (21) для массива значений на сетке правой части уравнения Пуассона $f_h = \{f_h(\vec{k})\}$ найти его координаты (коэффициенты Фурье) в базисе (18) собственных векторов $\{\bar{W}[\bar{p}]\}$ оператора (15) при помощи двумерного быстрого преобразования Фурье;
- 3) по формулам (22) и (17) найти коэффициенты Фурье $U[\bar{p}]$ численного решения;

4) найти численное решение по формуле (23) при помощи 2-мерного обратного быстрого преобразования Фурье.

Наиболее важными являются шаги 2 и 4. Прямое и обратное двумерные БФП матрицы выполняются применением соответствующего одномерного БФП сначала к строкам (столбцам) исходной матрицы, затем к столбцам (строкам) полученной матрицы. На обоих этапах применения одномерного БФП процесс очевидным образом распараллеливается, когда каждая нить обрабатывает свою группу строк (столбцов). При этом обмен данными между нитями отсутствует. Таким образом, основой алгоритма являются процедуры одномерного прямого и обратного БФП.

Мы создали программу на языке FORTRAN 95, которая реализует описанный выше алгоритм численного решения задачи (1) в случае, наиболее удобном для применения одномерного БФП: $N_x = 2^{q_x}$, $N_y = 2^{q_y}$, где $q_x, q_y \in \mathbf{N}$. Имеется как последовательный, так и распараллеленный при помощи системы Open MP варианты программы, причем оба с одинарной и двойной точностью. Параллельный вариант становится заметно эффективнее последовательного при числе шагов сетки начиная с $N_x \cdot N_y \sim 2^{20}$, когда затраты времени на организацию параллельных потоков становятся меньше времени счёта.

Программа проверялась на точно решаемых задачах вида (1), а также сравнивалась с подпрограммами библиотеки IMSL, которые предназначены для численного решения двумерных краевых задач для уравнений Пуассона и Гельмгольца в прямоугольнике, а также используют метод БФП. Сравнение проводилось в случае одинарной точности с подпрограммой FPS2H, в случае двойной точности – с подпрограммой DFPS2H. Описание подпрограмм дано в [1]. Сравнивались время счёта и относительная сеточная погрешность численного решения $U_h(\vec{k})$, определяемая по формуле

$$\varepsilon_h = \left\| U_h(\vec{k}) - u(\vec{x}[\vec{k}]) \right\|_h / \left\| u(\vec{x}[\vec{k}]) \right\|_h,$$

где $u(\vec{x}[\vec{k}])$ – точные решения в узлах сетки, с сеточной нормой $\left\| U_h(\vec{k}) \right\|_h = \max_{\vec{k}} \left\{ \left\| U_h(\vec{k}) \right\| \right\}$. Время счёта нашей программы в последовательном варианте и подпрограмм библиотеки IMSL практически совпали.

Если правая часть уравнения Пуассона $f(x, y)$ меняется на сетке достаточно плавно, то в случае одинарной точности наша программа и подпрограмма FPS2H библиотеки IMSL воспроизводят точное решение с одинаковой точностью $\varepsilon_h \sim 10^{-6}$. В случае двойной точности наша программа даёт в несколько раз, до порядка, лучшую точность $\varepsilon_h \sim 10^{-15}$ по сравнению с подпрограммой DFPS2H библиотеки IMSL, для которой $\varepsilon_h \sim 10^{-14}$. По мере огрубления сетки точность численного решения снижается. При этом в случае обычной точности наша программа и подпрограмма FPS2H библиотеки

IMSL дают одинаковую точность, в случае двойной точности наша программа продолжает давать примерно на порядок лучшую точность. Когда пространственный масштаб осцилляций правой части уравнения Пуассона приближается к $4h$, точность численного решения для подпрограмм библиотеки IMSL приближается к $\varepsilon_h \approx 0.2 = 20\%$, нашей программы – к $\varepsilon_h \approx 0.1 = 10\%$. Таким образом, для минимально приемлемой точности численного решения не хуже $\varepsilon_h \sim 0.01 = 1\%$ пространственный масштаб осцилляций правой части уравнения Пуассона должен быть не менее чем $10h$.

Выводы. Разработана программа численного решения двумерной периодической краевой задачи для уравнения Пуассона в прямоугольнике методом БПФ. По точности и вычислительным затратам она не уступает аналогичной подпрограмме библиотеки IMSL, но имеет существенно более удобный для моделирования интерфейс. В нашей программе задаются только значения правой части уравнения Пуассона на сетке в прямоугольнике, в то время как для подпрограммы библиотеки IMSL нужно написать процедуру вычисления правой части в произвольной точке из некоторой окрестности рассматриваемого прямоугольника. Кроме того, у нашей программы имеется параллельный вариант, тогда как подпрограммы библиотеки IMSL работают только последовательно. Библиотека IMSL является коммерческим продуктом и, как правило, на отечественных суперкомпьютерах не установлена. Обобщение алгоритма на трёхмерный случай очевидно. При этом возможность распараллеливания алгоритма в трёхмерном случае играет важную роль. Таким образом, разработка оригинальной программы даёт возможность численного моделирования широкого круга явлений из области физики плазмы и космической физики на отечественных суперкомпьютерах.

Список литературы

1. Бартенев О.В. Фортран для профессионалов. Математическая библиотека IMSL. Ч. 3. М.: Диалог – МИФИ, 2001.
2. Бахвалов Н.С., Жидков Н.А., Кобельков Г.Б. Численные методы. М.: Бином, 2004.
3. Деммель Дж. Вычислительная линейная алгебра. Теория и приложения. М.: Мир, 2001.
4. Самарский А.А., Николаев Е.С. Методы решения сеточных уравнений. М.: Наука, 1978.
5. Boisvert R. A 4th order accurate fast direct method for the Helmholtz equation. Elliptic problem solvers II. Orlando, Florida: Academic Press, 1984. P 35-44.

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ОБЩЕЙ ЦИРКУЛЯЦИИ АТМОСФЕРЫ ВЕНЕРЫ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ РЕГУЛЯРНОЙ И НЕРЕГУЛЯРНОЙ ПРОСТРАНСТВЕННЫХ СЕТОК

Орлов К.Г.¹, Мингалёв И.В.¹, Родин А.В.^{2,3}

¹ Полярный геофизический институт КНЦ РАН, Апатиты, mingalev_i@pgia.ru

² Московский физико-технический институт, Москва,
alexander.rodin@phystech.edu

³ Институт космических исследований РАН, Москва

Механизмы формирования общей циркуляции атмосферы Венеры исследованы при помощи численного моделирования в рамках полной системы уравнений газовой динамики с использованием релаксационного приближения для расчета нагрева-охлаждения атмосферы за счёт поглощения-испускания электромагнитного излучения. Показано, что при достаточно больших скоростях нагрева атмосферы излучением на дневной стороне и достаточно больших скоростях выхолаживания на ночной стороне на высотах 40-70 км развивается термический прилив, энергия и импульс которого передаётся зональной суперротации атмосферы. В результате взаимодействия суперротации и меридионального переноса воздушной массы через полярную область с дневной стороны планеты на ночную на высотах 40-70 км формируются приполюсные вихри вблизи утреннего терминатора.

Введение. Венера – вторая после Меркурия ближайшая к Солнцу планета, её среднее гелиоцентрическое расстояние 0.72 а. е. Продолжительность тропического года 222.65 земных сут., продолжительность года 224.70 земных сут. Собственное вращение Венеры крайне медленное и противоположно вращению Земли. Сидерический период Венеры 243.01 земных сут. Твёрдое тело планеты по характеристикам очень близко к Земле. Масса Венеры составляет 0.81 массы Земли, радиус 6051 км (у Земли средний радиус на экваторе 6378 км), ускорение свободного падения на поверхности 8.87 м/с². Наклонение к плоскости эклиптики 2.6 град.

Численное моделирование динамики планетных атмосфер применяется для исследований в течение 30 лет. До недавнего времени все модели общей циркуляции атмосферы Венеры [3-6] были основаны на решении системы уравнений геофизической гидродинамики. Вывод системы [2] проводится в предположении, что характерные масштабы, на которых меняется гидродинамическая скорость, по вертикали составляет 10 км, по горизонту 1000 км. В этой системе уравнение для вертикальной компоненты скорости заменено уравнением гидростатики. Наблюдения показали, что в атмосфере Венеры существуют области (напр., вихри в полярных областях), где характерные масштабы, на которых меняется гидродинамическая скорость, существенно

меньше, чем необходимо для применимости системы уравнений геофизической гидродинамики. Также на Венере наблюдается сильная суперротация атмосферы (зональная компонента ветра направлена в сторону вращения планеты) в интервале высот 40-70 км и большие скорости ветра выше 80 км. Эти особенности циркуляции атмосферы Венеры до сих пор не удалось получить при численном моделировании с использованием гидростатических моделей [3-6]. В частности, не удалось получить вихри в полярных областях, а суперротацию удалось получить только в узком диапазоне высот [5].

Для моделирования на более высоком, чем прежде, уровне авторами создана модель общей циркуляции атмосферы Венеры [1], основанная на численном решении полной системы уравнений движения вязкого сжимаемого газа без каких-либо упрощений на пространственной сетке с высоким разрешением по высоте (200 м). В работе использовался упрощённый способ расчёта нагрева-охлаждения атмосферы за счёт поглощения-испускания электромагнитного излучения (так называемое релаксационное приближение) и исследовалась связь суперротации и термического прилива, а также общие закономерности циркуляции атмосферы Венеры. Использование упрощённого способа расчёта нагрева-охлаждения связано с тем, что для создания достаточно точной модели переноса излучения в атмосфере Венеры необходимо решить ряд важных задач, в частности, изучить спектральный состав и потоки теплового излучения ниже уровня основного облачного слоя. В то же время использование упрощённого расчёта нагрева-охлаждения атмосферы позволяет исследовать ряд важных закономерностей циркуляции атмосферы, в том числе связь суперротации и термического прилива.

Описание модели. В модели атмосферный газ рассматривается как смесь газов, состав которой не меняется в пространстве и во времени. В данном варианте модели динамика аэрозолей не рассматривается, но может быть включена в неё. Модель основана на численном решении системы уравнений динамики вязкого сжимаемого газа, без каких-либо упрощений. Поверхность Венеры считалась сферической, но можно учесть рельеф. Область моделирования простирается от поверхности до высоты 100 км. Существуют два варианта модели, различающиеся по типу пространственной сетки. В первом используется равномерная сетка в сферических координатах. Шаги сетки по долготе и широте одинаковы. На полюсах узлов сетки нет. Ближайшие к полюсам узлы сетки отстоят от них по широте на половину шага. В данной работе сетка имела 128 узлов по долготе и 64 по широте (шаг 45/16 град.). Во втором варианте используется нерегулярная пространственная сетка в околопланетном пространстве, построенная с использованием треугольной сетки на поверхности сферы. В обоих вариантах сетка по высоте равномерная с шагом 250 м.

Для численного решения системы в первом варианте использована явная гибридная монотонная схема на регулярной сетке, имеющая второй по-

рядок точности по пространству и времени. Во втором использовалась явная гибридная монотонная схема на нерегулярной сетке. Результаты в обоих случаях очень близки. Авторами разработан комплекс программ, позволяющий проводить расчёты на центральных многоядерных процессорах (CPU) и графических ускорителях фирмы Nvidia (GPU). На CPU и GPU было создано по два варианта модели – на регулярной и нерегулярной пространственных сетках. Для создания программ на CPU использован компилятор Fortran Intel. Для распараллеливания вычислений на многоядерных CPU использована технология программирования OpenMP. Для создания программ на GPU использован компилятор Fortran Portland Group и технология параллельного программирования Cuda.

Результаты моделирования. Выполнено моделирование установления общей циркуляции атмосферы Венеры на время более 14000 час. физического времени. Через 2800 час. после начала моделирования (примерно солнечные сутки на Венере) качественная картина циркуляции перестаёт меняться и имеет следующие особенности. На высотах 20-80 км заметно усиливается направленный на запад (в сторону вращения) зональный ветер, причём на дневной стороне зональный поток расширяется, достигая максимальной ширины в районе вечернего терминатора. На ночной стороне зональный поток сужается и имеет наименьшую ширину в районе утреннего терминатора. Максимальной величины зональная компонента ветра для каждой высоты из интервала 20-80 км достигает в широтном интервале 30-75 град. в каждом полушарии. В районе экватора величина зональной компоненты ветра в 2-3 раза меньше максимальных значений. На высотах 40-80 км вблизи утреннего терминатора

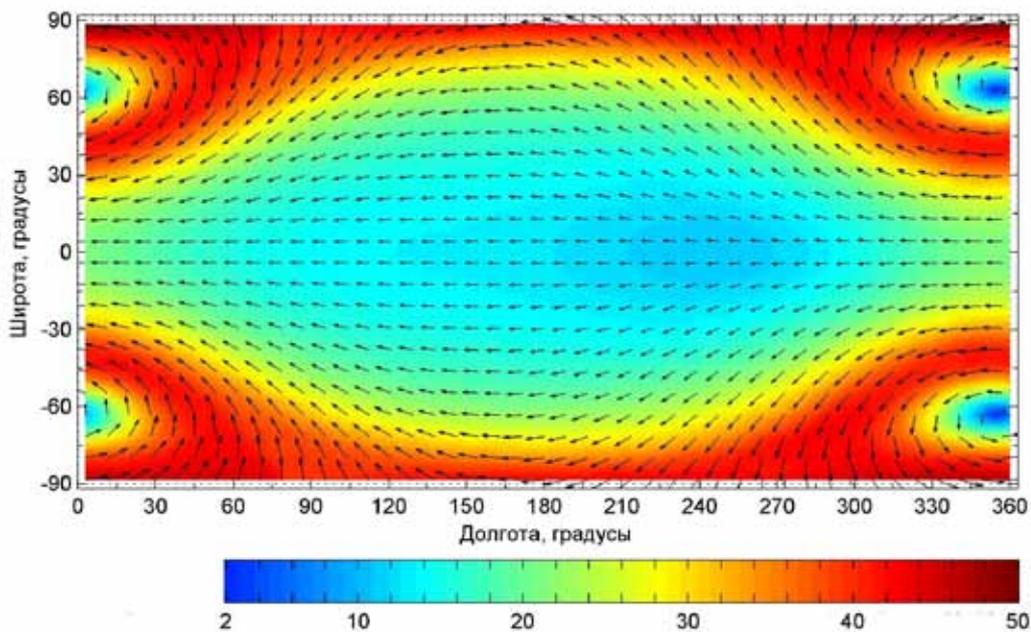


Рис. 1. Распределение горизонтальной составляющей ветра (м/с) на высоте 70 км через 3340 час. после начала моделирования.

образуются приполюсные вихри. На этих же высотах на дневной стороне заметен термический прилив.

На рис. 1-3 показана циркуляция атмосферы Венеры через 3340 час. после начала моделирования. В этот момент подсолнечная точка находилась на экваторе на долготе 249° , вечерний терминатор – на долготе 159° , утренний терминатор – на долготе 339° , полуночный меридиан – на долготе 69° . На рис. 1 дано распределение горизонтальной компоненты ветра на высоте 70 км. Стрелки указывают направление горизонтальной составляющей ветра, их длина и цвет указывают её абсолютную величину. Видно, что на высоте 70 км горизонтальный ветер зависит от долготы и широты, его зональная компонента направлена на запад везде, кроме района приполюсных вихрей. На дневной стороне зональный поток расширяется, достигая максимума при долготе 170° . На ночной стороне он сужается, ширина потока минимальна при долготе 350° . На этой долготе вблизи полюсов на широтах -70° и $+70^\circ$ расположены центры вихрей. На этой же долготе достигаются максимальные значения зональной компоненты ветра 48 м/с в широтном интервале $30-60^\circ$ град. в каждом полушарии.

На рис. 2 приведено распределение вертикальной компоненты ветра на высоте 60 км. Видно, что в интервале долгот $180-330^\circ$ (утренняя часть дневной стороны) и в интервале широт от -50° до 50° , где расширяется зональный поток, вертикальная компонента ветра направлена вверх, а вне этой области – вниз. Таким образом, имеет место термический прилив – подъём атмосферного газа на дневной стороне из-за нагрева атмосферы и его опускание на ночной стороне и в районе полюсов из-за охлаждения атмосферы.

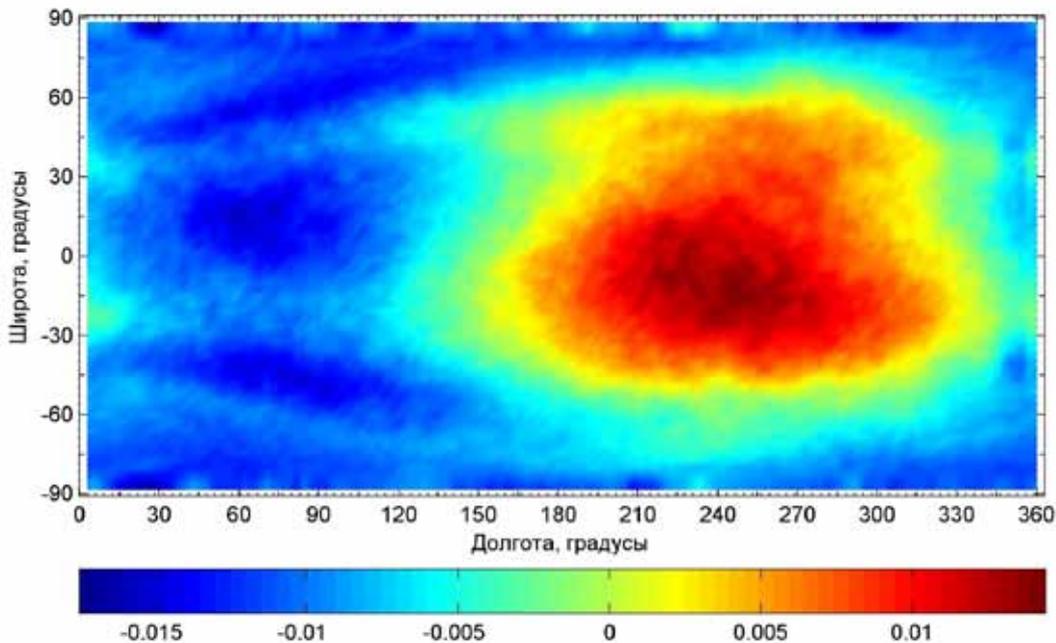


Рис. 2. Распределение вертикальной составляющей ветра (м/с) на высоте 60 км через 3340 час. после начала моделирования.

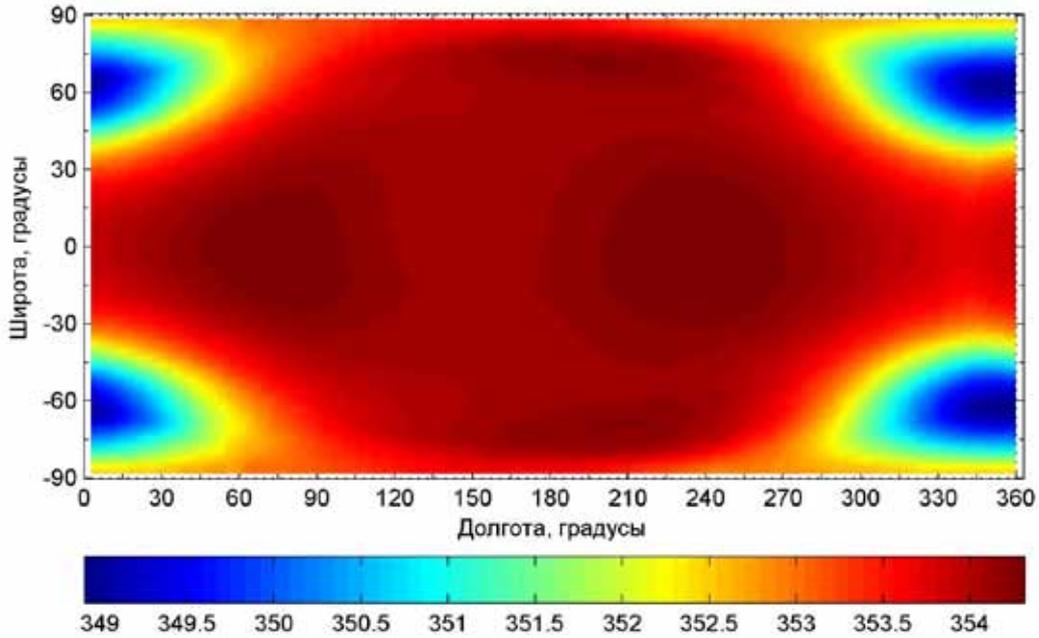


Рис. 3. Распределение температуры (K) на высоте 50 км через 3340 час. после начала моделирования.

На рис. 3 приведено распределение температуры на высоте 50 км. Видно, что её максимальный перепад составляет примерно 5.5 K. Максимальные значения достигаются в экваториальной области на дневной стороне, минимальные – в областях, где находятся центры приполюсных вихрей. Согласно наблюдениям, максимальный перепад температуры высоте 50 км составляет 20-25 K. Таким образом, использованный в работе способ расчёта нагрева атмосферы в релаксационном приближении даёт заниженный максимальный перепад температуры.

Заключение. Из полученных результатов следует, что для каждого варианта нагрева существует квазистационарная картина циркуляции, которая перемещается вместе с подсолнечной точкой. Время установления циркуляции зависит от начальных условий и может составлять несколько венерианских солнечных суток. Суперротация в атмосфере Венеры должна иметь место в большом интервале высот, как минимум 30-70 км. Здесь направленный на запад (в сторону вращения планеты) зональный поток на дневной стороне расширяется, достигая максимума в районе вечернего терминатора. На ночной стороне поток сужается и имеет наименьшую ширину в районе утреннего терминатора, где должны быть приполюсные вихри, образующиеся из-за взаимодействия суперротации и меридионального переноса через полярные области с дневной стороны на ночную. Максимальная скорость суперротации должна достигаться в районе утреннего терминатора между приполюсными вихрями. Кроме того, на высотах, где имеет место суперротация, есть и термический прилив – подъём атмосферного газа на дневной стороне из-за нагрева атмосферы и его опускание на ночной стороне и в

районе полюсов из-за охлаждения атмосферы. Термический прилив в атмосфере Венеры и суперротация неразрывно связаны.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, гранты 10-01-00451 и 10-02-01260.

Список литературы

1. Мингалёв И.В., Родин А.В., Орлов К.Г. Негидростатическая модель общей циркуляции атмосферы Венеры // *Астрономический вестник*. 2012. В печати.
2. Монин А.С. Теоретические основы геофизической гидродинамики. Л.: Гидрометеоиздат, 1988. 423 с.
3. Hollingsworth J.L., Young R.E., Schubert G. et al. A simple-physics global circulation model for Venus: sensitivity assessments of atmospheric superrotation // *Geophys. Res. Lett.* 2007. V 34.
4. Kido A., Wakata Y. Multiple equilibrium states appear in a Venus-like atmospheric general circulation model // *J. Met. Soc. Japan*. 2008. V 86. P 969-979.
5. Lebonnois S., Hourdin F., Eymet V. et al. Superrotation of Venus atmosphere analysed with a full general circulation model // *J. Geophys. Res.* 2010. V 115.
6. Lee C. Modelling of the atmosphere of Venus. PhD thesis. University of Oxford. 2006.

АВТОМАТИЗАЦИЯ РАСЧЁТОВ КИНЕТИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ ПРИ ПЕРЕРАБОТКЕ СИЛИКАТНОГО СЫРЬЯ ФТОРИДНЫМ МЕТОДОМ

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

Институт геологии и природопользования ДВО РАН, Благовещенск,
pushkin@ascnet.ru

Создана программа для расчёта кинетических характеристик (порядков реакции, констант скорости и энергии активации) стандартными средствами офисного приложения Microsoft Access. Она использована для расчётов параметров физико-химических процессов при переработке силикатного сырья Верхнего Приамурья.

В [1] дана программа для расчёта термодинамических равновесий физико-химических процессов, возникающих в процессе переработки силикатного сырья. Она позволяла провести расчёт теплового эффекта реакции, решить вопрос о её направлении и температуре, при которой реакция начинается. Но актуальным является и вопрос о кинетических параметрах процесса, к которым относятся константы скорости и энергия активации. В этой работе описывается программа для расчёта порядка реакции, констант скорости и энергии активации. Программа создана средствами стандартного

офисного приложения Microsoft Access [2]. Исходными данными были параметры экспериментальных кинетических кривых (зависимостей концентрации исследуемого вещества от времени) для нескольких температур. Расчёт проводился в предположении о соответствии кинетических кривых степенному закону: $c = c_0 \cdot t^m$ (1), где c и c_0 – текущая и начальная концентрации, t – время, m – порядок реакции. Последний определяется логарифмическим методом [3]. Согласно ему, логарифмируя правую и левую части, найдём m :

$$m = \log(c / c_0) / \log t \quad (2)$$

По массиву данных методом наименьших квадратов строим линейную регрессию. В уравнении $y = ax + b$ заменяем $y \rightarrow \log(c/c_0)$, $x \rightarrow \log(t)$. Порядок реакции m представляет собой коэффициент a , вычисляемый по формуле:

$$m = \frac{n \cdot \sum(\log(t_i) \log(c_i)) - (\sum \log(c_i))(\sum \log(t_i))}{n \cdot \sum(\log(t_i))^2 - (\sum \log(t_i))^2} \quad (3)$$

где t_i – времена, c_i – концентрация в момент времени t_i , n – число отсчётов времени. Скорость реакции w_T при каждой температуре T рассчитываем по формуле: $w_T = c_{max} / t_{max}$ (4), где c_{max} – максимальная (теоретически) концентрация, t_{max} – время, за которое она достигнута при температуре T . Константы скорости k_T вычисляются по формуле $k_T = w_T / c_{max}^m$ (мин⁻¹) (5). Кроме того, рассчитываем энергию активации [4]: $E_A = 8.31 \ln(k_{T_2} / k_{T_1}) / (1/T_1 - 1/T_2)$ (кДж/моль) (6).

Программа содержит 15 объектов: 3 таблицы, 1 запрос, 4 формы, 1 отчет и 6 макросов. Основным объектом является форма *Кинетические характеристики* (рис. 1). Она составлена на основе *Запроса1*, в который отображены

Время	C1	C2	C3	C4	C5	T1	T2	T3	T4	T5
2.1	2.1	5.5	14	34	100	300	350	450	500	0
3.0	3.9	29	81	96	0	300	350	450	500	0
4.5	5.5	34	95	100	0	300	350	450	500	0
6.0	6.5	38	100	100	0	300	350	450	500	0

Температура, T: 300, 350, 450, 500
 Порядок реакции: 0.828874009, 0.736010831, 0.445412850, 0.286432264
 Скорость реакции: 0.11, 0.63, 1.67, 2.22
 Константа скорости: 0.082905347, 0.272071211, 0.769413402, 1.313992013
 Энергия активации: 7503.231322

Рис. 1. Форма *Кинетические характеристики*.

Код	Время	C1	C2	C3	C4	C5
1	0	0	0	0	0	0
2	15	2.1	14	55	68	0
3	30	2.9	26	81	96	0
4	45	5.5	34	95	100	0
5	60	6.5	38	100	100	0
[N]	0	0	0	0		0

Ввод температуры

Рис. 2. Форма *Ввод данных*.

Окно свойств	
Возможен выбор: Форма	
Форма	
Макет	Данные
События	Другие
Все	
Источник записей	Запрос1
Подпись	Кинетические характеристики
Всплывающее окно	Нет
Модальное окно	Нет
Отобразить на веб-узле SharePoint	Как в таблице
Режим по умолчанию	Ленточные формы
Режим формы	Да
Режим таблицы	Нет
Режим сводной таблицы	Нет
Режим сводной диаграммы	Нет
Разрешить режим макета	Да
Рисунок	(отсутствует)
Мозаичное заполнение	Нет
Выравнивание рисунка	По центру
Тип рисунка	Внедренный
Масштабы рисунка	Обрезать
Ширина	31,476см
Выравнивание по центру	Да
Автоматический размер	Да
По размеру экрана	Да
Тип границы	Изменяемая
Область выделения	Да
Кнопки перехода	Да
Заголовок перехода	
Разделительные линии	Нет
Полосы прокрутки	Все
Кнопка оконного меню	Да
Кнопка закрытия	Да
Кнопки размеров окна	Все
Допускается перемещение	Нет
Размер разделенной формы	Авто
Ориентация разделенной формы	Таблица сверху
Линия разделения в разделенной форме	Да
Таблица разделенной формы	Разрешить изменения
Печать разделенной формы	Только форма
Сохранение положения линии разделения	Да
Развернутая подтаблица	Нет
Высота подтаблицы	0см
Число делений по X	10
Число делений по Y	10
Формат для печати	Нет
Ориентация	Слева направо
Тип набора записей	Динамический набор
Загрузить значения по умолчанию	Да
Фильтр	
Фильтр при загрузке	Нет
Порядок сортировки	
Сортировка при загрузке	Да
Ввод данных	Нет
Разрешить добавление	Да
Разрешить удаление	Да
Разрешить изменение	Да
Применение фильтров	Да
Текущая запись	
Загрузка	
Нажатие кнопки	
После обновления	
До обновления	
До вставки	

Рис. 1а. Окно свойств Кинетические характеристики.

До подтверждения Del	
Удаление	
После подтверждения Del	
Внесены изменения	
Получение фокуса	
Потеря фокуса	
Двойное нажатие кнопки	
Кнопка вниз	
Кнопка вверх	
Перемещение указателя	
Клавиша вверх	
Клавиша вниз	
Нажатие клавиши	
Отмена	
Открытие	
Закрытие	
Изменение размера	
Включение	
Отключение	
Выгрузка	
Ошибка	
Колесико мыши	
Фильтрация	
Применение фильтра	
Таймер	
Интервал таймера	0
Изменение выбора фрагмента	
До отображения	
После конечного отображения	
После отображения	
До разметки	
Соединение	
Отсоединение	
До запроса	
Запрос	
Изменение данных	
Изменение набора данных	
Выполнение команды	
До выполнения команды	
Включение команды	
Проверка команды	
Изменение представления	
Изменение сводной таблицы	
До экранной подсказки	
Цикл табуляции	Все записи
Блокировка записей	Отсутствует
Имя ленты	
Панель инструментов	
Контекстные меню	Да
Строка меню	
Контекстное меню	
Файл справки	
Идентификатор справки	0
Наличие модуля	Нет
Использовать размер бумаги по умолчанию	Нет
Для лазерного принтера	Да
Дополнительные сведения	
Источник палитры	(Стандартный)
Перехват нажатия клавиш	Нет

Рис. 1а. Окно свойств *Кинетические характеристики*.

поля из трёх таблиц (*Входные*, *Температура* и *Время реакции*). В заголовках формы содержатся заголовки отсчётов времени и концентраций, а также кнопка *Ввод*. В области данных – исходные данные: столбец отсчётов времени, 5 столбцов концентраций, 5 столбцов температур и столбец числа отсчётов времени. В примечаниях формы находятся вычисляемые поля: строка температур, строка порядков реакции, строка скоростей реакции, а также строки констант скорости и энергии активации. Окно свойств формы, вызываемое кнопкой *Свойства* в контекстном меню, дано на рис. 1а.

The image shows two side-by-side screenshots of software forms. The left form, titled 'Температура', has a header with columns T1, T2, T3, T4, T5, and n. Below the header are input fields with values 300, 350, 450, 500, 0, and 4. The right form, titled 'Время реакции', has a header with columns Время1, Время2, Время3, Время4, and Время5. Below the header are input fields with values 60, 60, 60, and 45. Both forms have a 'Время реакции' button at the bottom.

Рис. 3. Форма *Температура*.

Рис. 4. Форма *Время реакции*.

The image shows two screenshots related to a report macro. The left screenshot shows the 'Отчет' macro editor in 'Конструктор' (Constructor) mode. It has a table with columns: Микрокоманда, Аргументы, and Примечание. The table contains two rows: 'ОткрытьОтчет' with arguments 'Отчет1; Просмотр; ; Обычно' and 'Закрыть' with arguments 'Отчет; Отчет1; Подзагла'. Below the table is a section for 'Аргументы макрокоманды' with fields for 'Имя отчета', 'Режим', 'Имя фильтра', 'Условие отбора', and 'Режим окна'. The right screenshot shows a preview of the 'Отчет1' report, which displays a table with columns 'Порядок' and 'Скорость' and a section for 'Данные вычисления'.

Рис. 5. Макрос *Отчёт* в режиме *Конструктор*.

Рис. 6. Отчёт *Отчёт1*.

При нажатии кнопки *Ввод* запускается макрос *Ввод данных*. Он содержит три команды: закрыть форму *Кинетические характеристики*, открыть *Ввод данных* и записать *Ввод данных*. Этот макрос раскрывает форму *Ввод данных* (рис. 2), в которую с клавиатуры вводятся данные об отсчётах време-

ни и концентрациях. Форма составлена на основе таблицы *Входные*. После заполнения полей нажатием кнопки *Ввод температур* запускается макрос *Температура*. Он содержит три команды: закрыть форму *Ввод данных*, открыть *Температура* и записать *Температура*. Этот макрос раскрывает форму *Температура* (рис. 3). Она составлена на основе таблицы *Температура*. В неё с клавиатуры заносятся данные о температурах. Нажатием кнопки *Время реакции* запускается макрос *Время реакции*. Он содержит три команды: закрыть форму *Температура*, открыть *Время реакции* и записать *Время реакции*. В поля ввода формы (рис. 4) вводятся данные о продолжительности реакции при каждой из температур.

Нажатием кнопки *Вычислить* запускается макрос *Вычислить*, который содержит четыре команды: закрыть *Время реакции*, открыть *Запрос1*, закрыть *Запрос1* и открыть *Кинетические характеристики*. Макрос раскрывает форму *Кинетические характеристики* и производит вычисления. Нажатием кнопки *Вывод* запускается макрос *Отчет* (рис. 5), который содержит две команды: открыть *Отчёт1*, закрыть *Кинетические характеристики*, раскрывает *Отчет1* (рис. 6) и закрывает *Кинетические характеристики*. На экране находится *Отчёт1*, в котором выведены расчётные значения порядков реакции, скоростей реакции и констант скорости для каждой температуры. Кроме того, в отчете выводится расчётное значение энергии активации. Далее отчет может быть распечатан или экспортирован и отформатирован в Word.

Список литературы

1. Пушкин А.А., Римкевич В.С., Маловицкий Ю.Н. и др. Автоматизация расчётов термодинамических равновесий в процессе переработки алюмосиликатного сырья по фторидной технологии // Тр. V Всерос. научн. школы. «Математические исследования в естественных науках». Апатиты, 12-14 окт. 2009 г. – Апатиты: Изд-во К & М, 2009. – С. 225-228.
2. Днепров А. Видеосамоучитель. Microsoft Access 2007. – СПб.: Питер, 2008. – 240 с.
3. Стромберг А.Г., Семченко Д.П. Физическая химия. – М.: Высшая школа, 1999. – 528 с.
4. Киреев В.А. Краткий курс физической химии. – М.: Химия, 1969. – 620 с.

АВТОМАТИЗАЦИЯ ПОИСКА РЕДКИХ СОБЫТИЙ В ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫХ РЯДАХ НА ПРИМЕРЕ ОТБОРА ВСПЛЕСКОВ Q-ТИПА МЕТОДАМИ ТЕОРИИ РАСПОЗНАВАНИЯ ОБРАЗОВ

Пчёлкин В.В.

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

В работе рассмотрены методы автоматизации поиска всплесков Q-типа в результатах измерения шумового электромагнитного поля КНЧ диапазона. На основе существующих определений Q-всплеска предложены различные списки дескрипторов и в рамках дивизимного монотетического подхода выполнена классификация исходных токсонимических единиц. Обсуждён вопрос об информативности признаков и критерии оконтуривания. Приведены результаты тестирования алгоритма на экспериментальном материале, подтверждающие резонансный характер событий.

Введение. Пример всплеска Q-типа показан на рис. 1. Событие имеет вид затухающего колебания, т.е. характеризуется квазипериодичностью и квазиэкспоненциальным уменьшением амплитуды во времени. Такие волновые формы впервые были описаны в [8] и в дальнейшем выделялись многими исследователями [1-3, 5-7]. Важность автоматизированного отбора подобных редких событий связана с тем, что они позволяют оценить добротность глобального резонатора способом, альтернативным к методам Фурье-анализа— через оценку коэффициента затухания по спаду амплитуды сигнала [4].

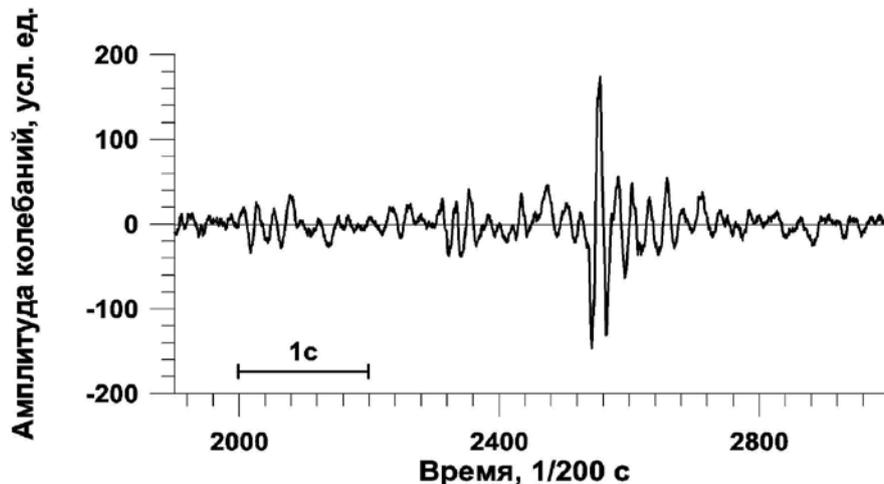


Рис. 1. Пример осциллограммы, содержащий всплеск Q-типа.

Экспериментальные данные. Исходным материалом для анализа были оцифрованные (частота квантования 200 Гц) измерения горизонтальной компоненты магнитного поля, проводимые на магнитной обсерватории Ловозеро. Методами цифровой фильтрации выделялась полоса 6-15 Гц. Ана-

лизом динамических спектров и амплитудных распределений исключались записи, сопровождавшиеся техногенными помехами и магнитосферными возмущениями.

Предлагаемые пространства признаков. Изучение литературы показало, что существующие критерии отбора всплесков Q-типа носят скорее характер качественный, морфологический, нежели количественный и сводятся к следующим признакам: квазипериодичность, превышение определенного порога амплитуды колебаний, закономерное (квазиэкспоненциальное) уменьшение амплитуды. В качестве объектов классификации рассматривались выбранные фрагменты оцифрованных осциллограмм фиксированной длины с максимальным значением модуля сигнала на фиксированном месте. Для классификации автором использован дивизимный монотетический подход. В соответствии с существующими определениями Q-всплесков, предложены два варианта списка дескрипторов.

Вариант I. 1) Признак превышения амплитуды рассчитывался по максимальному значению модуля измеряемой величины в i -м анализируемом фрагменте): $b_{1,i} = \max(a_{i,j})$, где i – номер фрагмента исходного ряда, j – номер измерения в оцифровке фрагмента;

2) Показатель периодичности (рассчитывался как отношение максимальной и минимальной длительностей среди всех j -х интервалов знакопостоянства измеряемой величины в анализируемом i -м фрагменте; значение больше или равно единице; близость к единице говорит о высокой упорядоченности смены знака измеряемой величины):

$$b_{2,i} = \frac{\max T_{i,j}}{\min T_{i,j}}, \quad j - \text{номер интервала знакопостоянства во фрагменте,}$$

3) Показатель закономерности спада амплитуды (рассчитывался как отношение максимального и минимального во фрагменте отношения средних значений модулей измеряемой величины в соседних интервалах знакопостоянства; близость к единице говорит о закономерности спада амплитуды и наоборот):

$$b_{3,i} = \frac{\max(\text{mean}|a_{i,j}| / \text{mean}|a_{i,j+1}|)}{\min(\text{mean}|a_{i,j}| / \text{mean}|a_{i,j+1}|)}$$

4) Признак частоты (рассчитывался по средней длительности интервалов знакопостоянства в i -м фрагменте):

$b_{4,i} = \frac{1}{2 * \text{mean}(T_{i,j})}$, где j – номер интервала знакопостоянства в данном фрагменте.

5) Признак степени затухания $b_{5,i}$ (рассчитывался как показатель экспоненты, наиболее хорошо – с точки зрения минимальности квадратов невязок – описывающей спад амплитуды сигнала в i -м фрагменте). Он соответству-

ет коэффициенту затухания в случае, если фрагмент является Q-всплеском. Формально может быть пересчитан в признак добротности.

Вариант II. 1) Признак превышения амплитуды (см. выше).

2) Признак отклонения от «идеального» всплеска на 1-й резонансной частоте. Он характеризует отклонение формы фрагмента (оцифрованного с частотой калибровки) от формы «идеального» нормированного всплеска на частоте первого шумановского резонанса: $a = a_0 * \sin(\omega t) * e^{-\beta t}$. Отклонение рассчитывалось в евклидовой метрике: $b_{2,j} = \sum_j \sqrt{(a_{ид.,j} - a_{i,j})^2}$.

3) Признак отклонения от «идеального» всплеска на 2-й резонансной частоте (рассчитан аналогично предыдущему).

Обсуждение результатов. Автор не ставил перед собой задачу строгой морфологической классификации фрагментов оцифрованных записей магнитометров в полном объёме. Нас интересовало выделение вполне определенных групп событий. Поэтому данный раздел не содержит описания морфологии всех получившихся классов. В нём рассмотрены вопросы информативности выбранных признаков, устойчивости выделяемых классов Q-всплесков, а также проблема оконтуривания.

Информативность признаков. Подтверждение резонансного характера всплесков Q-типа. Применение одного признака (например, квазипериодичности или амплитуды) при любых заданных градационных значениях не выделяет всплески Q-типа. Например, в выборке превышений их было не более 10 %. В выборке квазипериодических фрагментов – не более 3 % (рис. 2). Применение двух этих признаков оказывалось более эффективным (см. ниже).

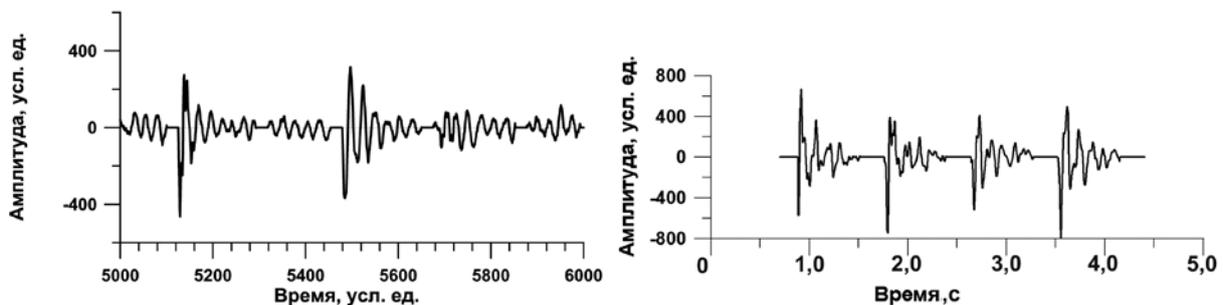


Рис. 2. Результаты отбора. Слева – по признаку квазипериодичности: есть фрагменты, не являющиеся всплесками Q-типа. Справа – по двум признакам – квазипериодичности и превышения.

На рис. 3 а-в показаны результаты отбора по двум признакам – превышения и квазипериодичности на плоскости «добротность-частота» при последовательном ужесточении порогов отбора. Добротность фрагмента рассчитана по степени затухания. Как видно, фрагменты уверенно объединяются

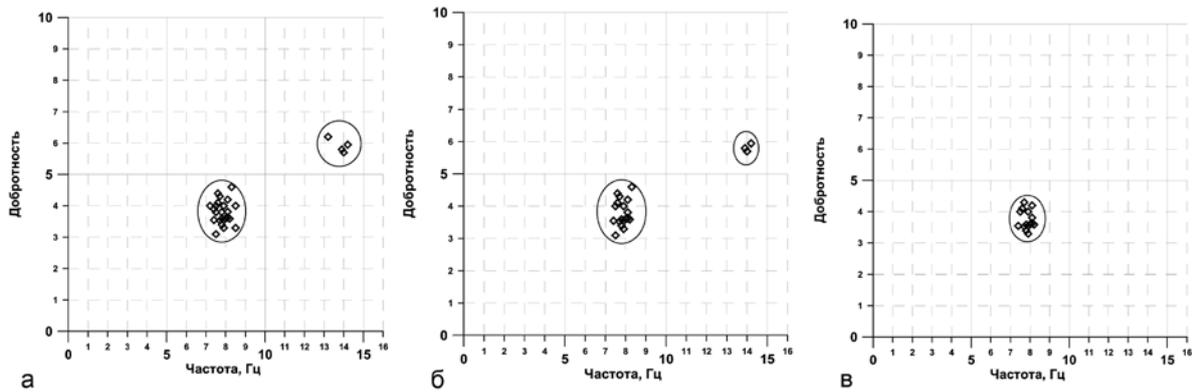


Рис. 3. Кластеры всплесков Q -типа. Слева направо: а-в.

в два кластера, соответствующие первому и второму шумановскому резонансам. Очевидно, применение для данной выборки стандартных процедур кластеризации – метода ближнего соседа или k -средних в соответствующей метрике – даст те же классы.

Усиление жёсткости отбора по признакам превышения амплитуды и квазипериодичности приводит к тому, что кластер, соответствующий 2-му резонансу, исчезает (рис. 3в). Этот важный результат подтверждает предположение о резонансном характере всплесков Q -типа и их связи с двумя первыми шумановскими модами колебаний. Число признаков при отборе можно уменьшить до двух.

Критерий оконтуривания. Устойчивость классификации. Количественного критерия оконтуривания, как и критерия объективности разбиения на классы, не существует. Разные методы классификации и кластеризации могут выделять разные классы. Между тем, в ситуациях, когда по отобранному материалу проводятся количественные оценки, эти вопросы чрезвычайно важны. Произвол в отборе событий отразится на результатах оценок.

Косвенным доказательством объективности классификаций является совпадение классов при разных методах. В нашем случае выборка (длительность экспериментальных рядов – от нескольких часов до суток) составляла от нескольких тысяч до десятков тысяч фрагментов. Число отобранных Q -всплесков – от единиц до ста (т.е. порядка 0.1 % исходного ряда и менее). Совпадение состава классов всплесков Q -типа при различных классификациях в разных пространствах признаков достигало 85-95 %.

Вопрос о критерии оконтуривания гораздо сложнее. Мы решали его на основе сопоставления роста дисперсии оценок добротности при ослаблении критериев отбора с величиной дисперсии оценок добротности по ярко выраженным Q -всплескам (которые, по мнению экспертов, являются безусловными событиями этого типа). Анализ роста дисперсии оценок добротности с изменением порогового значения амплитуды показал, что пороговое значение признака превышения можно понизить. Это увеличивает число от-

бираемых всплесков, делая их регулярным материалом для оценок свойств резонатора «Земля-ионосфера». Величина максимума во фрагменте оказалась не столь критичным параметром, как предполагалось. Более важна «правильная» форма всплесков. Подчеркнем, что в отбираемых фрагментах амплитуда превышала средние уровни фонового шума более чем в 15 раз.

Выводы. 1) Показана возможность создания эффективных (решающих задачу в отведённое время с заданным качеством) алгоритмов автоматизированного отбора Q-типа в результатах измерений шумового магнитного поля КНЧ-диапазона.

2) Автоматизированный отбор всплесков Q-типа показал, что они встречаются чаще, чем считалось (несколько событий в час) и могут служить регулярным материалом для оценок свойств глобального резонатора «Земля-ионосфера».

3) Анализ классификаций экспериментальных рядов показал, что всплески Q-типа образуют в плоскости «частота-добротность» устойчивый, хорошо выделенный (в смысле расстояний между объектами внутри класса и расстояниями до объектов, не вошедших в него) класс явлений.

2) Совпадение частоты объектов данного класса с частотой первой шумановской моды доказывает резонансный характер всплесков этого типа. Высокая степень совпадения выделяемых классов Q-всплесков говорит об объективности применяемых классификаций.

Список литературы

1. Александров М.С. Флуктуации электромагнитного поля Земли в диапазоне СНЧ. М.: Наука, 1972. 100 с.
2. Блиох П.В., Николаенко А.С., Филиппов Ю.В. Глобальные электромагнитные резонансы в полости земля-ионосфера. Киев: Наукова думка, 1977.
3. Крылов С.М., Владимиров Н.П. Некоторые характеристики электромагнитных резонансов полости Земля-ионосфера // Геомагнитные исследования. 1967. № 9. С. 80-88.
4. Пчёлкин В.В., Белоглазов М.И., Васильев А.Н. и др. Всплески Q-типа в магнитных колебаниях КНЧ диапазона как явление, отражающее свойства глобального резонатора Земля-ионосфера // Геомагнетизм и аэрномия. 2010. Т. 50. № 5. С. 1-9.
5. Lones D.L., Kemp D.T. The nature and average magnitude of the sources of transient excitation of Schumann resonances // JATP. 1971. V 33. P 557-566.
6. Ogawa T., Kozai K., Kawamoto H. et al. Huzita-Schumann resonances observed with a balloon in the stratosphere // JATP. 1979. V 41. P 135-142.
7. Ogawa T., Tanaka Y., Fraser-Smith A.C. et al. Worldwide simultaneity of a Q-type ELF burst in the Schumann resonance frequency range // J. Geomagnetism and Geoelectricity. 1967. V 19. N 4. P 377-384.
8. Ogawa T., Tanaka Y., Miura T. et al. Observations of natural ELF and VLF electromagnetic noises by using ball antennas // J. of Geomagnetism and Geoelectricity. 1966. V 18. N 4. P 443-454.

ФОРМУЛЫ ИЗ РАЗНЫХ СИМВОЛОВ

Смирнова Н.Л.

Московский государственный университет, snl194@mail.ru

Единство организации систем предопределяет использование в разных науках одних и тех же формул. Они состоят из качественных составляющих символов – верхних и нижних букв и индексов. Выделено 127 формул из 1-7 букв. Частота встречаемости 1-7-арных формул равна 7, 21, 35, 35, 21, 6, 1. Частота встречаемости формул из 1-7 букв равна 1, 2, 4, 8, 16, 32, 64. Установлена степень идентичности 1-7-арных формул. Показано, что с увеличением арности возрастает степень идентичности формул.

Формулы из символов (букв) используются во всех науках. Так, слои плотнейших упаковок в кристаллических структурах обозначаются a, b, c [1]. В химии соединение состава 1:1 обозначается ab, состава 1:1:1 – abc и др. В геологии буквами обозначаются последовательности пород, осадков и т.д. В физике для всех законов использованы буквы. Например, в СИ используются: L – длина, M – масса, T – время, I – электрический ток, Θ – температура, J – сила света, N – количество вещества и др.

Буквы отображают качественные составляющие элементов, объектов. При описании полигональных сеток буквами обозначаются разные многоугольники. Они могут примыкать к вершинам многоугольников или их рёбрам. Примыкающие многоугольники могут быть одинаковыми и разными. Авторам просчитаны числа разных многоугольников, примыкающих к вершинам и рёбрам [2]. Рассмотрены системы полигональных сеток внешних форм кристаллов, геологических сетчатых карт, географических карт административных делений, железных дорог, сетчатых поверхностей организмов, сечений кораллов, сетчатых поверхностей сплавов, сеток в кристаллических структурах и т.д. Установлено, что число разных n-гонов, примыкающих к вершине, равно 1-4. Среди множества рассмотренных вершин нашлось единственное исключение с числом примыкающих n-гонов, равным 5. Найдено, что число разных n-гонов, примыкающих к рёбрам n-гона, равно 1-7. Не выявлено ни одного случая примыкания 8 разных n-гонов. Таким образом, максимальное число исходных букв, из которых образуются формулы качественных составов примыкания, равно 7.

Формулы могут быть 1-арные, 2-арные, ..., 7-арные. Рассмотрим их. *1-арные:* a; b; c; d; e; f; g. *2-арные:* ab; ac, bc; ad, bd, cd; ae, be, ce, de; af, bf, cf, df, ef; ag, bg, cg, dg, eg, fg. *3-арные:* abc; abd, acd, bcd; abe, ace, ade, bde, bce, cde; abf, acf, bcf, adf, bdf, cdf, aef, bef, cef, def; abg, acg, bcg, adg, bdg, cdg, aeg, beg, ceg, deg, afg, bfg, cfg, dfg, efg. *4-арные:* abcd; abce, abde, acde, bcde; abcf, abdf, acdf, bcdf, abef, acef, adef, bdef, bcef, cdef; abcg, abdg, acdg, bcdg, bceg, abeg, aceg, adeg, bdeg, cdeg, abfg, acfg, bcfg, adfg, bdfg, cdfg, aefg, befg, cefg, defg. *5-арные:* abcde; abcdf, abcef, abdef, acdef, bcdef; abcdg, abceg, abdeg, acdeg, bcdeg, abcfg, abdfg, acdfg, bcdfg, abefg, acefg, adefg, bdefg, bcefg, cde-

fg. 6-арные: abcdef; abcdeg, abcefg, abdefg, acdefg, bcdefg. 7-арные: abcdefg. Определена частота встречаемости формул в зависимости от числа букв М и арности формул N (табл.).

Частота встречаемости формул

M \ N	1	2	3	4	5	6	7	
1	1	1	1	1	1	1	1	7
2		1	2	3	4	5	6	21
3			1	3	6	10	15	35
4				1	4	10	20	35
5					1	5	15	21
6						1	6	7
7							1	1
	1	2	4	8	16	32	64	$\Sigma = 127$

Как видно, формулы примыкания n-гонов к вершинам описываются 15 формулами первых четырёх столбцов. Исходных букв 4, а производных из двух, трёх и четырёх букв 11. Для исходных 7 букв возможно всё множество из 127 формул, но большая их часть 6-арные (32) и 7-арные (64). На остальные 1-5-арные формулы приходится всего 31 формула. Все формулы множества различны, но могут быть частично идентичны. Рассмотрим степень идентичности. Так, ab и cd имеют степень идентичности 0 %, ab и ac – 50 %. Приводим степень идентичности для формул 1-7-арности. Арность 1 – 0 (%); арность 2 – 0, 50; арность 3 – 0, 33, 66; арность 4 – 25, 50, 75, арность 5 – 40, 60, 80; арность 6 – 83; арность 7 – 100 (т.к. эта формула самождественна). Таким образом, у 6,7-арных формул минимальная степень идентичности превышает 80 %. Объекты, характеризующиеся этими формулами, настолько сходны между собой, что могут вести себя как одинаковые. Вероятно, такие системы могут становиться неустойчивыми.

В периодической системе химических элементов Менделеева 7 рядов. Последний из них не окончен именно в связи с неустойчивостью. Возможно, поэтому в шестом ряду таблицы больше половины редкоземельных элементов не существуют как видообразующие, а присутствуют в минералах как изоморфные примеси. Поэтому среди редкоземельных элементов чрезвычайно распространён изоморфизм. Седьмой ряд таблицы почти полностью состоит из малоустойчивых элементов.

Согласно принципу достаточного основания следует выделять минимальное число сущностей (составляющих). Ранее нами установлены две области существования из составляющих 1-4 и 1-7. Для них выше составлены формулы из разных символов. Предложено определять степень их идентичности, что может быть использовано в разных естественных науках.

Список литературы

1. Белов Н.В. Структура ионных кристаллов и металлических фаз. М.: Наука, 1947.
2. Смирнова Н.Л. Сухой остаток. Режим доступа: <http://www.minsoc.ru/2010-1-207-0>.

ПРЕДЕЛЬНЫЕ ГРУППЫ СИММЕТРИИ В ЖИВОЙ ПРИРОДЕ

Степенщиков Д.Г.

Геологический институт КНЦ РАН, Апатиты, dm706390@mail.ru

В статье рассмотрено применение предельных групп симметрии Кюри для описания внешней симметрии живых объектов, которая приобретает-ся под влиянием определённых условий среды. Предложены основные виды максимально возможной симметрии в зависимости от определённой среды обитания организмов.

Для описания внешней симметрии кристаллов, под которой понимается закономерность их огранки, используются 32 точечные (оставляющие при преобразованиях неподвижной хотя бы одну точку) группы симметрии. По совокупности элементов симметрии и их взаимному расположению группы можно объединить в упорядоченные классы. Упорядоченность класса задается тем, что одна из осей симметрии увеличивает свой порядок. Предполагая существование осей 5, 7, 8 и т.д. порядков, невозможных на кристаллах, рассмотрим предельный случай, когда порядок выделенной оси устремляется к бесконечности ∞ . Группа, полученная таким образом в рамках каждого класса, называется предельной (рис. 1).

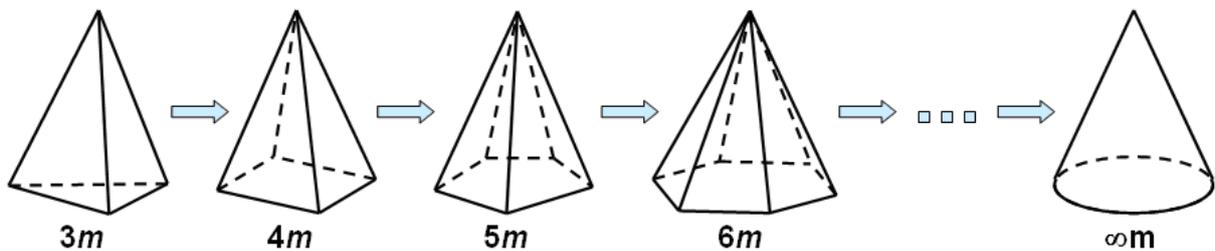


Рис. 1. Пирамиды, иллюстрирующие упорядоченный класс групп симметрии с предельной группой симметрии ∞m (конус).

Всего существует 7 предельных точечных групп симметрии, три из которых с учётом направления вращения оси симметрии ∞ дают ещё три зеркально-симметричные группы. Для их наглядного представления используются геометрические тела: конус, шар и цилиндр, обладающие в отдельных случаях некоторыми динамическими характеристиками (рис. 2).

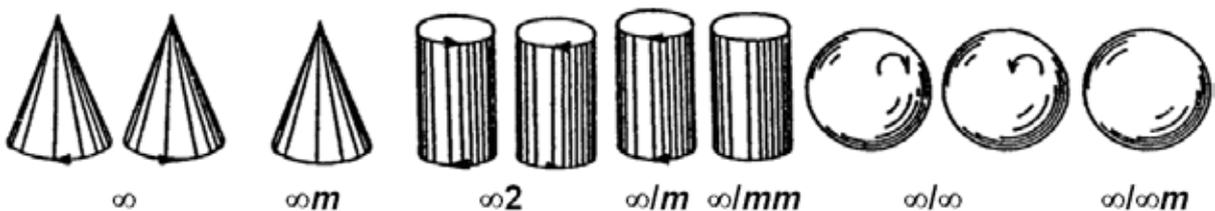


Рис. 2. Предельные группы симметрии.

Предельные группы были выведены П. Кюри для описания симметрии физических явлений в кристаллах [4]. Но ими можно описать любые физические явления в природе. Так, поле тяготения на плоском участке земной поверхности можно описать симметрией неподвижного конуса ∞t , т.к. оно не меняется при поворотах вокруг любого вектора силы тяжести, но при этом отлично в направлениях «верх-низ». Симметрия неподвижного цилиндра ∞/m характерна для параллельно-слоистых сред, изотропных в каждом слое, но отличных в перпендикулярных к слоям направлениях. Симметрией шара $\infty/\infty t$ описывают изотропные среды, например, распределение давления в жидкости (рис. 3).

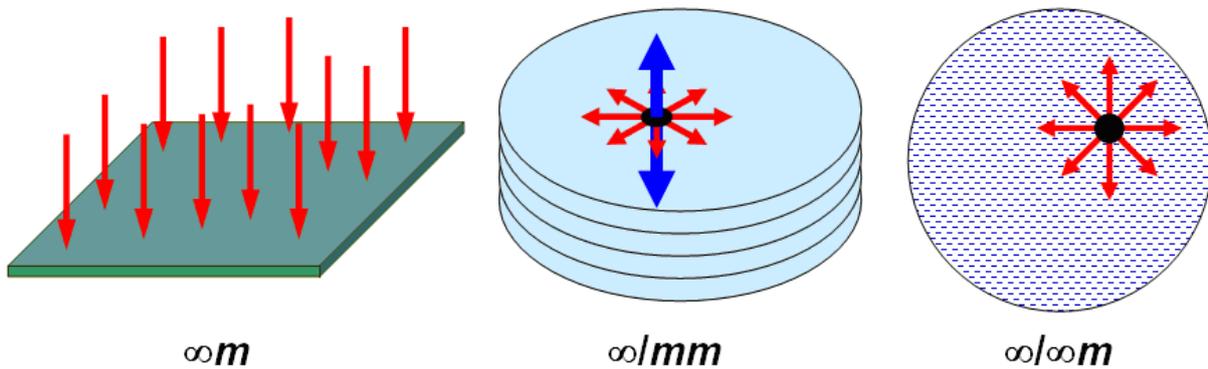


Рис. 3. Примеры сред, описываемых предельными группами симметрии.

Примем во внимание, что в природе одновременно присутствуют несколько физических явлений, и каждое описывается своей предельной группой симметрии. Совокупность этих явлений характеризуется пересечением их предельных групп. Так, среда, в которой присутствует поле тяготения и непараллельное к нему направленное воздействие (поток воды или солнечный свет) характеризуется одной плоскостью симметрии t , общей для обеих предельных групп ∞t (рис. 4). Физические явления характеризуются

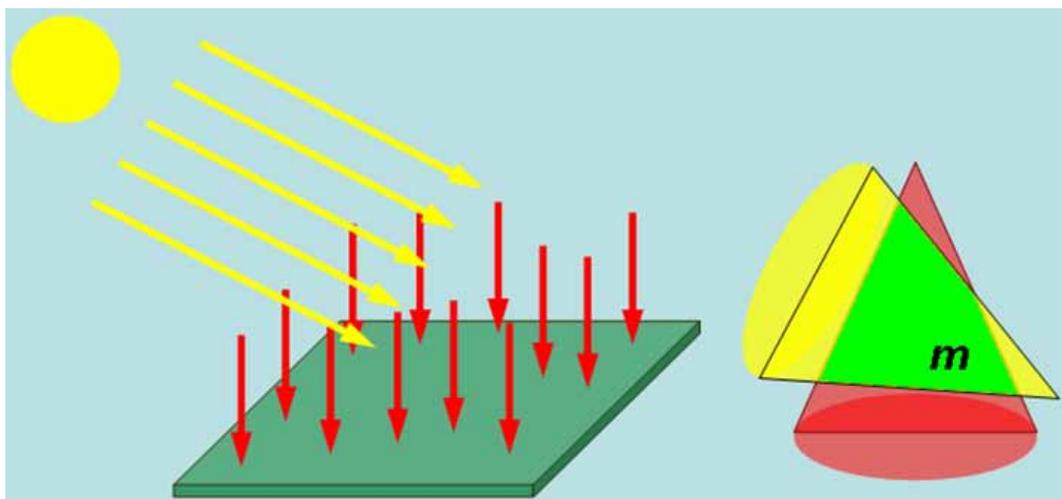


Рис. 4. Пример суперпозиции двух предельных групп ∞t . Итоговая симметрия среды – плоскость t (зелёное).

степенью воздействия и могут учитываться при получении общей симметрии среды или отбрасываться как слабые и несущественные.

Симметрия среды отражается на внешней симметрии живых существ. И.И. Шафрановским сформулировано правило: «Всё, что растёт или движется по вертикали, т. е. вверх или вниз относительно земной поверхности, имеет симметрию типа $L_n P$ или соответствующих подгрупп $L_n, P, -$. Всё то, что растёт и движется горизонтально или косо по отношению к земной поверхности, характеризуется симметрией P или $-$ » [3]. В этом правиле заключены два аспекта: во-первых, симметрия живых существ характеризуется двумя основными видами симметрии: аксиальной ($L_n P$) и билатеральной (P). Во-вторых, правило не исключает наличия у всего, «что растёт или движется» симметрии более низкого порядка, вплоть до асимметричного вида ($-$), что свидетельствует о дополнительных факторах, понижающих один из двух основных видов симметрии. Известный пример – различие в размере правой и левой клешней у манящего краба, вызванное их различной специализацией. Строго говоря, все природные объекты асимметричны; о симметрии можно говорить, допуская неточность измерений сопоставляемых частей объекта. Подробное разнообразие симметрии в живой природе рассмотрено В.Н. Беклемишевым [1] и отмечено нами [2].

Первая особенность позволяет определить максимально возможную симметрию живого объекта, исходя из окружающих его условий, к которым обычно относят гравитацию и направленное движение самого объекта. Мы предлагаем учесть также действие различных сил в жидкостях и влияние границы раздела сред. Обратимся к схеме на рис. 5.

Случай 1 соответствует симметрии шара $\infty/\infty t$. Этот вывод делается на основании того, что действие силы тяжести почти полностью компенсируется действием силы Архимеда при отсутствии чётко выраженного направ-

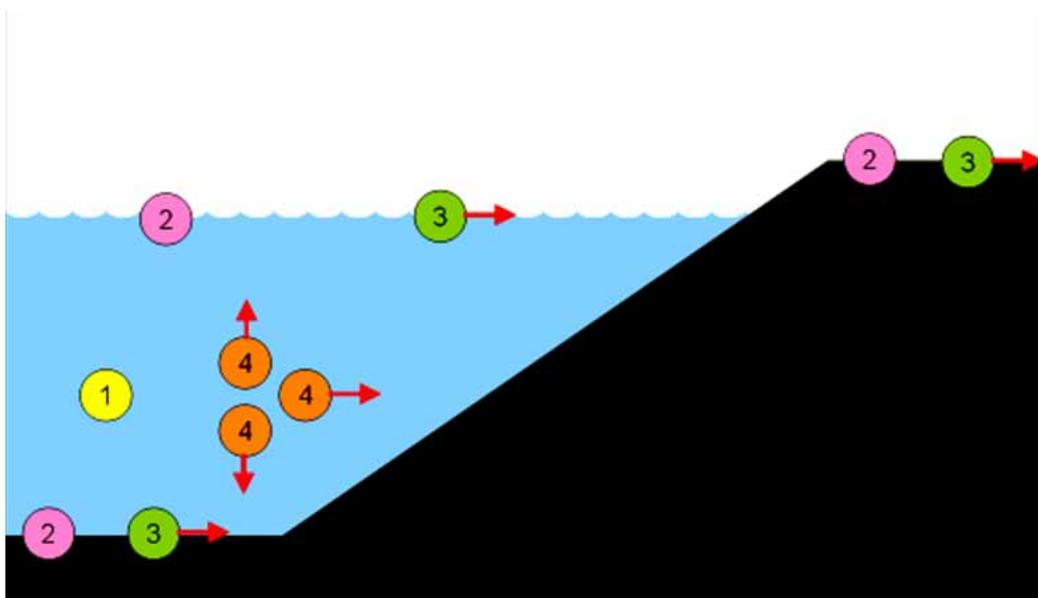


Рис. 5. Максимально возможные симметрии в природе: 1 – симметрия $\infty/\infty t$, 2 и 4 – симметрия ∞t , 3 – симметрия t .

ленного движения объекта (что не исключает его хаотического движения по типу броуновского). Живые организмы в этом случае находятся во взвешенном состоянии и испытывают одинаковое влияние среды со всех сторон. Для микроорганизмов дополнительный вклад в изотропность среды вносит субъективно более высокая вязкость воды.

Случай 2 возникает на границе раздела двух сред при отсутствии направленного движения (сидячие, хаотически ползающие или плавающие организмы). Предельная группа симметрии ∞m (конус) возникает не только из-за направленного действия силы тяжести (границы «вода-земля» и «воздух-земля»), но и из-за различия сред в направлении «верх-низ», даже в условиях гипогравитации (случай «вода-воздух»). Это вторая из основных симметрий в живой природе (аксиальная).

В случае 3 направленное движение объекта приводит к понижению его симметрии до билатеральной m , являющейся следствием пересечения групп ∞m (рис. 4). Это вторая основная симметрия, характерная для активных организмов, живущих на границе раздела двух сред.

Случай 4 аналогичен второму, но симметрия ∞m возникает не из-за действия гравитации, а в результате направленного движения самого организма. Она характерна для активно передвигающихся животных в водной среде, где сила тяжести незначительна.

Второе следствие отвергает возражения противников описания внешней симметрии живых объектов влиянием симметрии среды. С одной стороны, понижение одного из двух основных видов симметрии вплоть до асимметричного не противоречит общему правилу и объясняется действующими дополнительными факторами. С другой стороны, понятие «среды» может восприниматься узко, как «окружающее пространство со всеми его условиями». Среда может создаваться движением самого существа (сравним неподвижный объект в потоке воды и объект, движущийся в стоячей воде). Многие инфузории передвигаются, «ввинчиваясь» в водную толщу, т.е. создают вокруг себя среду с предельной группой симметрии ∞ (вращающийся конус). Форма их тела описывается группой симметрии L_n , т.е. одной осью симметрии порядка n .

Полный учёт факторов, объединяемых понятием «среда», приводит к выводу об асимметрии объекта. Такая строгость не сводится к значимым заключениям. Проще утвердить разнообразие внешних форм животных и растений, чем найти для них закономерности, вызванные общими причинами. Знание симметрии среды как суперпозиции предельных групп симметрии, описывающих каждый значимый фактор, позволяет сделать некоторый вывод о внешней симметрии организмов, обитающих в данной среде. Несоответствие может определяться неучтёнными факторами.

Список литературы

1. Беклемишев В.Н. Основы сравнительной анатомии беспозвоночных. Т. 1 Проморфология. М.: Наука, 1964. 432 с.

2. Тимофеева М.Г., Степенщиков Д.Г. Симметрия пелагических рыб на примере тунца обыкновенного *Thunnus thunnus* // Тр. VI Всерос. научн. школы «Математические исследования в естественных науках». Апатиты, 24-27 окт. 2010 г. / Ред. Ю.Л. Войтеховский. Апатиты: Изд-во К & М, 2010. С. 132-140.
3. Шафрановский И.И. Лекции по кристалломорфологии. М.: Высшая школа, 1968. 174 с.
4. Шубников А.В. О работах Пьера Кюри в области симметрии // Успехи физ. наук. 1956. Вып. 4. С. 591-602.

О РАЗЛИЧНЫХ ХАРАКТЕРИСТИКАХ НЕПЕРИОДИЧНОСТИ РАЗБИЕНИЙ

Шутов А.В.

Владимирский государственный гуманитарный университет, a1981@mail.ru

Изучение непериодических разбиений представляет собой сравнительно молодую область математики, уже нашедшую приложения в кристаллографии и физике твердого тела, а также потенциально полезную для петрографии. В работе представлены различные характеристики, позволяющие измерить степень непериодичности разбиений. Обсуждается ряд нерешенных задач о непериодических разбиениях.

С точки зрения математики значение квазипериодических разбиений обусловлено большим количеством красивых и содержательных теорем, а также важными приложениями в геометрии, комбинаторике, теории чисел, теории динамических систем и других областях. Но большинство исследований посвящено изучению конкретных непериодических разбиений (обычно квазипериодических) или узких классов разбиений. Поэтому общая теория непериодических разбиений ещё далека от завершения.

С точки зрения кристаллографии и физики твёрдого тела интерес к непериодическим разбиениям обусловлен, в первую очередь, появлением ряда реальных структур, описываемых такими разбиениями (квазикристаллы, модулированные кристаллы). Но потенциал теории непериодических разбиений (а также упаковок) в кристаллографии далеко не исчерпан. Периодичность кристаллической структуры, как ни парадоксально, до сих пор не получила строгого математического обоснования. Обычно периодичность кристалла объясняется из принципа плотной упаковки или стремления к минимуму энергии. Но в обоих случаях не доказано, что из этого следует периодичность. Известны примеры 3D невыпуклых тел, плотнейшие упаковки которых непериодические. Дальнейшее исследование непериодических

разбиений может привести к новым аргументам, позволяющим обосновать распространённость периодических, т.е. кристаллических структур. Кроме того, оно может служить стимулом к синтезу новых классов веществ с непериодической структурой. Изучение непериодических разбиений может быть полезно и для *петрографии*. Любая горная порода может быть рассмотрена как разбиение (тайлы которого есть зёрна горной породы). Оно непериодическое (видимо, очень сильно непериодическое) и может содержать сколь угодно мелкие тайлы.

Цель работы – обсуждение различных характеристик, позволяющих измерить степень непериодичности разбиения. Большинство характеристик будет обсуждаться на трёх примерах: периодических, квазипериодических и полностью случайных разбиениях. В основе большинства характеристик лежит понятие *n-короны* тайла $C_n(X)$ [13]. *n-корона* тайла X является множеством тайлов разбиения, находящихся на расстоянии не более n от тайла X в естественной метрике разбиения. Вообще говоря, для разбиения может существовать несколько естественных метрик, порождаемых аксиоматически определяемыми отношениями соседства [9].

В качестве первой характеристики непериодичности разбиений можно рассмотреть *форму послойного роста* [8, 9]. Под формой роста разбиения

понимается предел $\gamma = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{C_n(X) \setminus C_{n-1}(X)}{n}$. Доказано, что периодические

разбиения имеют многоугольную (многогранную) форму роста [5]. Аналогичный эффект обнаружен (и в ряде случаев доказан) для некоторых плоских квазипериодических разбиений [3, 18, 19]. Для одного из случайных разбиений плоскости удаётся показать, что наряду с линейными, возникают и нелинейные участки формы роста (предположительно эллиптические) [4]. Таким образом, наличие многоугольной формы роста может говорить о некоторой степени порядка в разбиении.

С послойным ростом также связана такая характеристика, как *распределение геодезических* [1] в разбиении. Если зафиксировать какой-либо тайл разбиения, то в случайном разбиении распределение числа геодезических, ведущих из него в тайлы, находящиеся на расстоянии n , будет стремиться к равномерному при $n \rightarrow \infty$. Но для периодических разбиений анализ теоремы о форме роста позволяет показать, что всё разбиение распадается на конечное число секторов, в каждом из которых предельное распределение будет близко к биномиальному. Видимо, аналогичная ситуация имеет место в квазипериодическом случае. Вопрос о существовании других предельных распределений остается открытым.

Еще одной важной характеристикой разбиения является его *функция сложности* $p(n)$, т.е. число неэквивалентных корон радиуса n . Обычно рассматривается эквивалентность с точностью до параллельного переноса.

В периодическом случае $p(n) = \text{const}$ для $n \geq n_0$. Для ряда квазипериодических разбиений плоскости (обобщённое разбиение Розы, разбиения Ито-Оцуки) имеет место асимптотика $p(n) \sim cn^2$ [6], [19]. Вероятно, аналогичный результат справедлив и для разбиений Пенроуза [2]. Кроме того, хорошо известна гипотеза, что из достаточно малой функции сложности следует существование определенного числа независимых трансляций в группе симметрий разбиения [16]. Случайные разбиения имеют экспоненциально растущую или бесконечную функцию сложности. Таким образом, чем меньше порядок роста функции сложности, тем более упорядоченным является разбиение.

Ряд авторов при рассмотрении функции сложности рассматривают не n -короны, а круги радиуса n [14] (в евклидовой метрике) или прямоугольники размера $m \times n$ [11]. Такое разбиение не дает принципиально новых явлений, так все получаемые функции сложности асимптотически эквивалентны. Можно рассматривать и классы эквивалентности n -корон относительно группы движений, а не группы трансляций. В большинстве случаев это не дает новых явлений и приводит к усложнению ситуации, но имеется ряд исключений. Наиболее яркое из них – самоподобное разбиение, «pinwheel tiling», содержащее бесконечное число трансляционно неэквивалентных 1-корон [17]. Задача о том, какие порядки роста может иметь функция сложности разбиения, далека от решения. Многочисленные примеры одномерных разбиений с различными функциями сложности есть в работах [7, 12]. В многомерном случае для построения примеров с различными порядками роста функции сложности используют прямые произведения одномерных разбиений.

С функцией сложности тесно связан форсинг разбиения [6, 10]. Для тайла X определим его функцию форсинга $f(n, X)$ как наибольшее число n такое, что из совпадения корон $C_n(X) = C_n(Y)$ следует совпадение корон $C_{n+m}(X) = C_{n+m}(Y)$ для всех тайлов Y . Можно также определить максимальный $mf(n) = \max_X f(n, X)$ и средний $\bar{f}(n) = \sum_{C_n(X)} \nu(C_n(X)) f(n, X)$ форсинг. Здесь $\nu[C_n(X)]$ – частота появления соответствующей n -короны в разбиении). Периодические разбиения имеют бесконечный форсинг, а форсинг случайного разбиения ограничен константой. Чем больший порядок роста имеет функция форсинга, тем более упорядоченным является разбиение. Но даже для квазипериодических разбиений точное описание функции форсинга неизвестно.

С n -короны разбиения можно связать еще ряд функций, не получивших пока общепринятых названий. В частности, определим $\Delta(n, X)$ как наименьшее $m > n$ такое, что корона $C_m(X)$ содержит тайл Z (отличный от X) такой, что $C_n(X) = C_n(Z)$. Через $m(n)$ и $M(n)$ обозначим минимум и максимум величины $\Delta(n, X)$ по всем тайлам разбиения. Величины, аналогичные $m(n)$ и $M(n)$ (с заменой n -корон на шары в евклидовой метрике) рассматривались в [14]. В периодическом случае функции $m(n)$ и $M(n)$ ограничены константой.

В квазипериодических разбиениях функция $M(n)$ растёт линейно (это часто считается определением квазипериодического разбиения). В случайных разбиениях $M(n)$ растёт как минимум экспоненциально. Таким образом, чем больше порядок роста функций $m(n)$ и $M(n)$, тем более неперриодическим является разбиение. При ряде естественных предположений на разбиение (существование предельной формы роста и равномерность распределения локальных кластеров) рассматриваемые величины связаны с функцией сложности разбиения неравенствами $c_1(m(n))^d \leq p(n) \leq c_2(M(n))^d$. Здесь константы c_1 и c_2 зависят от разбиения, а d – размерность объемлющего пространства. Вопрос о возможных порядках роста функций $m(n)$ и $M(n)$ открыт.

В качестве последней характеристики неперриодичности разбиения рассмотрим его *дифракционный спектр*. Определение дифракции от неперриодического разбиения представляет собой нетривиальную задачу. Во-первых, обычно дифракция определяется не для разбиений, а для точечных систем. Существует несколько способов связать точечную систему с разбиением. Простейшими из них являются рассмотрение множества вершин разбиения, а также сопоставление каждому тайлу какой-либо внутренней точки. Качественное поведение дифракционной картины не зависит от выбора перехода от разбиения к системе точек. Во-вторых, ряды Фурье, используемые в стандартном определении дифракции, для неперриодических точечных систем могут быть расходящимися. Для решения этой проблемы обычно используют альтернативное определение дифракционного спектра, основанное на использовании преобразования Фурье обобщённых функций [15]. Периодические структуры имеют точечный спектр, а множество брэгговских пиков дискретно, т.е. образует систему Делоне. Случайные структуры имеют непрерывный спектр. Также известно, что квазипериодические структуры имеют точечный спектр, но множество его пиков всюду плотно, т.е. в окрестности любой точки имеется дифракционный пик.

Проблема связи наличия точечного дифракционного спектра с дальним порядком разбиения далека от решения. Наиболее известные примеры неперриодических структур с точечными дифракционными спектрами – модельные множества. Они обладают дальним порядком, а большинство рассмотренных функций для них растёт полиномиально. Но любое подмножество модельного множества также имеет точечный дифракционный спектр. По-видимому, такие подмножества могут быть существенно менее упорядоченными. Более того, в последние годы найдены множества с точечным дифракционным спектром, не являющиеся подмножествами модельных множеств. Таким образом, не доказано, что из наличия точечного дифракционного спектра следует дальний порядок разбиения. Более того, неизвестны аргументы, позволяющие утверждать, что из отсутствия точечного дифракционного спектра вытекает отсутствие дальнего порядка разбиения.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, грант № 11-01-00578а.

Список литературы

1. Войтеховский Ю.Л. Горная порода как пространство // Доклад на VI Всерос. научн. школе «Математические исследования в естественных науках». Апатиты, 2010.
2. Долбилин Н.П. Устное сообщение.
3. Журавлев В.Г., Малеев А.В. Послойный рост квазипериодического разбиения Розы // Кристаллография. 2007. Т. 52. С. 204-210.
4. Журавлев В.Г., Малеев А.В., Рау В.Г. и др. Рост случайных графов и упаковок // Кристаллография. 2002. Т. 47. С. 976-981.
5. Журавлев В.Г. Самоподобный рост периодических разбиений и графов // Алгебра и анализ. 2001. Т. 13. С. 69-92.
6. Журавлев В.Г., Малеев А.В. Функция сложности и форсинг в двумерном квазипериодическом разбиении Розы // Кристаллография. 2007. Т. 52. С. 610-616.
7. Мучник А.А., Притыкин Ю.Л., Семенов А.Л. Последовательности, близкие к периодическим // Успехи матем. наук. 2009. Т. 5 (64). С. 21-96.
8. Рау В.Г., Журавлев В.Г., Рау Т.Ф. и др. Морфогенезис кристаллических структур в методе дискретного моделирования упаковок // Кристаллография. 2002. Т. 47. С. 793-796.
9. Шутов А.В., Малеев А.В., Журавлев В.Г. Модель послойного роста разбиений и графов // Тр. V Всерос. научн. школы “Математические исследования в естественных науках”. Апатиты: Изд-во К & М, 2009. С. 126-130.
10. Шутов А.В. Последовательности Штурма: графы Розы и форсинг // Чебышевский сборник. 2007. Т. 8. Вып. 2. С. 128-139.
11. Berthe V., Vuillon L. Tiling and rotations on the torus: a 2D generalization of Sturmian sequences // Discrete math. 2000. V 223. P 27-53.
12. Ferenczi S. Complexity of sequences and dynamical systems // Discrete math. 1999. V 206. P 145-154.
13. Dolbilin N.P., Schattschneider D. The local theorem for tilings // Quasicrystals and discrete geometry. Ed. J. Patera. Providence: Amer. Math. Soc., 1998. P 193-200.
14. Lagarias J.C., Pleasants P.A.B. Local complexity of Delone sets and cristallinity. 2002. N 4 (45). P 634-652.
15. Moody R.V. Long-range order and diffraction // Proc. Conf. on groups and Lie algebras. Ed. Ken-Ichi Shinoda. Sophia Kokyuroku in Mathematics. 2006. V 46.
16. Pleasants P.A.B. Designers quasicrystals: cut-and-project sets with pre-assigned properties // Directions in Math. Quasicrystals. Eds. M. Baake, R. Moody. Providence: AMS, 2000. P 93-138.
17. Radin C. The pinwheel tilings of the plane // Annals of math. V 194. P 661-702.
18. Shutov A.V., Maleev A.V., Zhuravlev V.G. Complex quasiperiodic self-similar tilings: their parameterization, boundaries, complexity, growth and symmetry // Acta Cryst. 2010. A66. P 427-437.
19. Shutov A.V., Maleev A.V. Quasiperiodic plane tilings based on stepped sur-faces // Acta Cryst. 2008. A64. P 376-382.

ПРИМЕНЕНИЕ СТАТИСТИЧЕСКИХ МЕТОДОВ ПРИ ИССЛЕДОВАНИИ ДОННЫХ ОТЛОЖЕНИЙ

Югай В.С., Даувальтер В.А.

Институт проблем промышленной экологии Севера КНЦ РАН, Апатиты,
555samuray555@mail.ru

Исследованы концентрации тяжёлых металлов (ТМ) и гранулометрический состав донных отложений (ДО) водоёмов, входящих в озёрно-речную систему р. Белой (оз. Б. Вудъявр, губа Белая оз. Имандра). Выполнена статистическая обработка полученных данных.

Введение. Существует ряд работ, посвящённых характеристике ДО озёрно-речной системы р. Белой [4, 6]. В нашей работе сведения о химическом составе дополнены результатами гранулометрического анализа и статистической обработкой данных.

Объекты исследования. В качестве объекта исследования была выбрана система р. Белой, которую можно разделить на 2 части: первая (оз. М. Вудъявр) не испытывает прямого антропогенного воздействия; другая (оз. Б. Вудъявр, губа Белая оз. Имандра) длительное время была подвержена антропогенному воздействию со стороны горнодобывающей промышленности. Именно она представляет интерес с точки зрения изучения особенностей осадконакопления в условиях влияния сточных рудничных вод.

Оз. Б. Вудъявр располагается в южной части Хибинского горного массива. Оно является самым крупным внутренним водоёмом Хибин [4]. В озеро впадают реки Саамская, Юкспорйок и Вудъяврйок [4]. Губа Белая оз. Имандра является зоной влияния сточных вод апатит-нефелинового производства. Некоторое время в неё поступали неочищенные сточные воды обогатительной фабрики. Позже в губе был сооружён отстойник-накопитель, который задерживал крупную фракцию апатит-нефелиновых отходов. В губу впадает р. Белая, вытекающая из оз. Б. Вудъявр [6].

Отбор проб на оз. Б. Вудъявр выполнен на трёх станциях: 1 – зона стока из озера, глубина 20 м; 2 – зона смешения чистых и загрязнённых промышленностью вод, глубина 10 м; 3 – глубина 13 м. ДО, отобранные в точке 3, наиболее ярко отражают воздействие горной промышленности, т.к. эта станция отбора располагается рядом с дамбой – местом поступления в озеро загрязнённых вод. Отбор пробы в губе Белой оз. Имандра выполнен недалеко от впадения в губу р. Белой.

Методы исследования. Пробы отобраны 7.07.2010 на оз. Б. Вудъявр дночерпателем системы Экмана (площадь захвата грунта 250 см²). Пробы из губы Белой взяты отборником колонок ДО открытого гравитационного типа с автоматически закрывающейся диафрагмой. Далее колонки ДО разделены

на 3 слоя (исследовались 2 верхних слоя). Концентрации элементов определялись в вытяжке концентрированной азотной кислотой. Гранулометрический состав определён методом Качинского [3]. Содержание органического вещества определяли косвенно по потерям при прокаливании (ппп, %) образцов.

Для определения возможности применения методов статистической обработки, данные предварительно были проверены на принадлежность одной генеральной совокупности. Для этого применён метод вычисления максимального относительного отклонения [7]. В качестве параметра использован средний диаметр частиц [5], который вычислен в соответствии с [8]. С 95 %-ной доверительной вероятностью исследуемые ДО принадлежат одной генеральной совокупности. Затем данные были подвергнуты корреляционному и кластерному анализам, а также изучены методом главных компонент. Статистическая обработка проведена с помощью программ Microsoft Excel и Statistica 6.0.

Результаты. Корреляционным анализом у Cu и Fe обнаружена отрицательная корреляционная связь с содержанием частиц 0.005-0.01, 0.01-0.05, 0.05-0.25, 0.25-0.5 мм ДО и положительная связь с частицами малого размера 0.001-0.005 мм (0.74 и 0.69), что говорит о преобладании этих элементов в соответствующей фракции [5]. Схожие результаты получены для количества органического вещества (0.82). Также обнаружена корреляционная связь Cu и Fe с содержанием органического вещества, что говорит о их совместном накоплении (0.98 и 0.80). Обнаружена положительная корреляционная связь Zn и Cr друг с другом (1.00), а так же их с содержанием частиц малого размера (фракции 0.001-0.005 и 0.005-0.01, Zn: 0.73 и 0.74, Cr: 0.72 и 0.79), что говорит о преобладании этих элементов в составе фракций. Положительная корреляционная связь Ni, Co, Al, Sr, K и Na с содержанием фракции 0.01-0.05 мм (0.74, 0.84, 0.74, 0.88, 0.82 и 0.86) указывает на преобладание этих элементов в составе частиц соответствующего размера. Упомянутые элементы попадают в систему р. Белой главным образом со сточными водами предприятий горнодобывающей промышленности. Обнаружена связь Hg и As с органическим веществом (0.76 и 0.79).

По результатам кластерного анализа (рис. 1) можно выделить несколько групп показателей. Первую группу составляют показатели содержания органического вещества, глубина отбора проб, содержание частиц 0.001-0.005 мм, концентраций Cu, Fe, Hg, As, Mn. Другую группу составляют показатели концентраций Ni, Co, Al, Sr, K, Na и содержание частиц 0.01-0.05 мм. Такие же связи отмечены ранее при изучении коэффициентов корреляции. Показатель содержания частиц размером 0.25-0.5 мм не связаны с другими показателями, что может объясняться небольшой ролью частиц этого размера в накоплении ТМ ввиду низкой удельной поверхности.

Метод главных компонент (рис. 1) выявил, что группа показателей (содержание Fe, Mn, ппп, содержание частиц 0.001-0.005 мм) отражает воздействие эвтрофирования или какого-то другого процесса, связанного с нако-

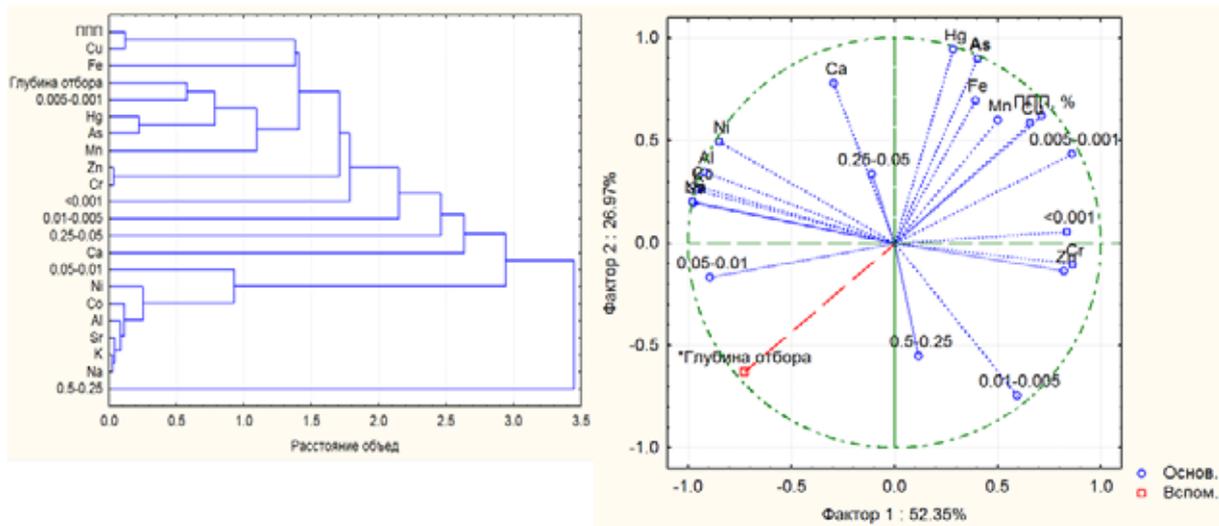


Рис. 1. Слева: результаты иерархической классификации данных, в качестве способа объединения использован метод одиночной связи, в качестве меры близости применён квадрат евклидова расстояния; справа: результаты анализа методом главных компонент.

плением органического вещества. При этом может наблюдаться повышение концентраций Fe и Mn в верхних слоях ДО [2], а также рост содержания органического вещества. Его частицы, судя по всему, имеют малые размеры (0.001-0.005 мм). Hg и As, скорее всего, связаны не столько с загрязнением предприятиями горнодобывающей промышленности, сколько с глобальным загрязнением этими элементами [1]. Видимо, в их накоплении принимает участие органическое вещество, что подтверждается результатами корреляционного анализа.

Можно предположить наличие связи при аккумуляции Zn и Cr с частицами малого размера (главным образом < 0.001 мм). Сонаправленность на графике Ni, Co, Al, Sr, Na, K и количества частиц размером 0.01-0.05 мм может указывать на преимущественное содержание элементов в частицах такого размера, что упоминалось ранее при рассмотрении результатов других типов статистической обработки данных. В то же время, два этих процесса антагонистичны, возможно, из-за размера связующих частиц. Логично предположить, что увеличение содержания частиц среднего размера приводит к уменьшению доли содержания частиц малого размера и снижению концентраций связанных с ними элементов. Согласно методу главных компонент, частицы размером 0.25-0.5 и 0.05-0.25 мм не имеют большого значения в накоплении ТМ, что было отмечено по результатам кластерного анализа для частиц 0.25-0.5 мм.

Выводы. В результате статистической обработки результатов химического и гранулометрического анализов обнаружено, что главные загрязняющие вещества оз. Б. Вудъявр и губы Белой связаны с частицами размера 0.01-0.05 мм. Частицы меньшего размера ($< 0.001-0.005$ мм) предположи-

тельно являются носителями Zn, Cr, As, Hg. Частицы большого размера не оказывают серьёзного влияния на концентрации элементов в ДО. Тема требует дальнейшего рассмотрения и проверки результатов применения статистических методов анализа на практике.

Список литературы

1. Даувальтер В.А. Халькофильные элементы (Hg, Cd, Pb, As) в донных отложениях водных объектов водосбора Белого моря в пределах Кольского -ова // Геохимия. 2006. № 2. С. 237-240.
2. Даувальтер В.А. Химический состав донных отложений пресноводных водоемов Европейской субарктики как показатель состояния водных ресурсов // Природопользование в Евро-Арктическом регионе: опыт XX века, перспективы и последствия / Ред. акад. В.Т. Калинин. Апатиты: Изд-во КНЦ РАН, 2001. С. 192-201
3. Качинский Н.А. Механический и микроагрегатный состав почвы, методы его изучения. Москва: Изд-во АН СССР, 1985. 192 с.
4. Кашулин Н.А., Денисов Д.Б., Сандимиров С.С. и др. Антропогенные изменения водных экосистем Хибинского горного массива, Мурманская обл. Т. 1. Апатиты: Изд-во КНЦ РАН, 2008. 250 с.
5. Каюгин А.А., Черкасова О.Р., Шигабаева Г.Н., Возможности корреляционного анализа при оценке факторов формирования химического состава донных отложений // Вестник ТюмГУ. 2007. № 3. С. 119-124.
6. Моисеенко Т.И., Даувальтер В.А., Лукин А.А. и др. Антропогенные модификации экосистемы оз. Имандра. М.: Наука, 2002. 403 с.
7. Основы научных исследований: методическое указание для выполнения практического задания «Статистическая обработка данных». Хабаровск, 2006. 24 с.
8. Теории и методы физики почв. Ред. Е.В. Шеин, Л.О. Карпачевский. М.: Гриф и К, 2007. 616 с.

МАТРИЧНЫЙ АЛГОРИТМ ПРОВЕРКИ РЕАЛИЗУЕМОСТИ ГРАННОГО СИМВОЛА

Ярыгин О.Н.

Тольяттинский государственный университет, onyx2602@rambler.ru

В статье дано описание алгоритма проверки реализуемости числового кортежа в качестве гранного символа полиэдра. Алгоритм основан на матричном представлении графа полиэдра, что упрощает его компьютерную реализацию. Рассмотрены примеры, показывающие эффективность алгоритма.

При описании множества полиэдров заданного эйлерова класса с помощью систем диофантовых уравнений удаётся выявить все наборы чисел, потенциально могущие быть гранными символами простых полиэдров.

При этом часть из них таковыми не является, что можно показать геометрически [1]. Для компьютерного различения реализуемых и нереализуемых наборов требуется численный алгоритм, позволяющий определить, является ли набор чисел гранным символом некоторого полиэдра, принадлежащего к заданному эйлерову классу.

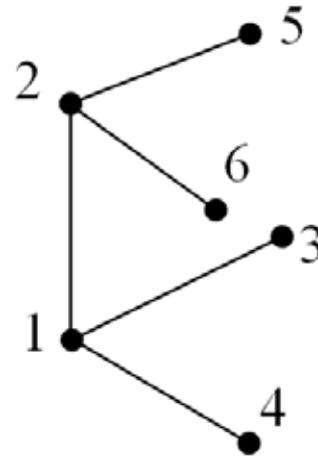
Укрупнённое описание алгоритма. Ш1. По гранному символу $\{f_1, f_2, \dots, f_M\}$ вычислить эйлеров класс простого полиэдра (V, E, F) . Ш2. Построить матрицу смежности, удовлетворяющую заданному эйлерову классу. Ш3. Если матрица смежности построена, то гранный символ реализуем, иначе – не реализуем. FIN.

Примеры. Построим матрицу смежности для полиэдра с гранным символом $\{06\}$, т.е. для куба.

Ш1. $F = 6 = 0 + 6$, $E = 12 = 3*6 - 6$, $V = 8 = 2*6 - 4$.

Ш2.

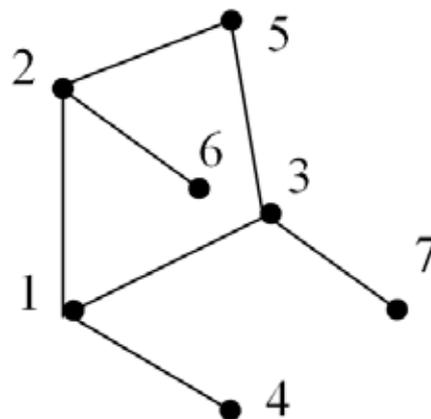
	1	2	3	4	5	6	7	8
1	0	1	1	1	0	0	0	0
2	1	0	0	0	1	1	0	0
3	1	0	0	0	1			
4	1	0	0	0				
5	0	1			0			
6	0	1				0		
7	0	0					0	
8	0	0						0



Номер 1 получает произвольная вершина. Три единицы в 1-й строке означают нумерацию соседних с v_1 вершин v_2, v_3, v_4 . Остальные равны 0, т.к. степени вершин равны 3. 1-й столбец симметричен 1-й строке. 2-я вершина не должна образовывать цикла, т.е. не должна быть смежной с 3-й и 4-й, но может быть смежной с 5-й и 6-й. Остальные во 2-й строке равны 0.

Задание $(3,5) = 1$ создает цикл 4-го порядка $\langle 1, 3, 5, 2, 1 \rangle$ (первый из 6 допустимых).

	1	2	3	4	5	6	7	8
1	0	1	1	1	0	0	0	0
2	1	0	0	0	1	1	0	0
3	1	0	0	0	1	0	1	0
4	1	0	0	0	1			
5	0	1		1	0			
6	0	1	0			0		
7	0	0	1				0	
8	0	0	0					0

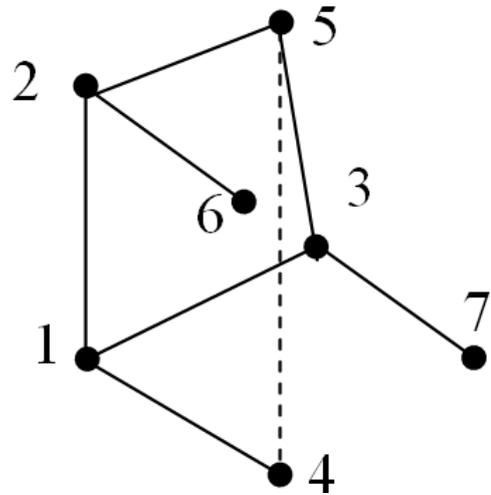


Задание $(3, 6) = 1$ создаст цикл 3-го порядка, что недопустимо. Следовательно, $(3, 6) = 0$. (Вообще говоря, вариант $(3, 6) = 1$ тоже должен быть просчитан, т.к. возникающий цикл может оказаться не гранью, а сечением конструируемого полиэдра.)

Следующее максимальное непротиворечивое значение $(3, 7) = 1$. Следовательно, $(3, 8) = 0$.

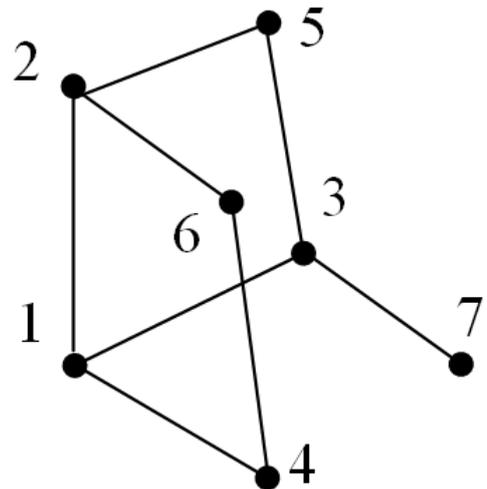
Задание $(4, 5) = 1$ создаст цикл 4-го порядка $\langle 1, 4, 5, 2, 1 \rangle$. Но у этого цикла есть 2 общих ребра с уже построенным циклом $\langle 1, 4, 5, 2, 1 \rangle$ (ребра 1-4 и 4-5), что недопустимо.

	1	2	3	4	5	6	7	8
1	0	1	1	1	0	0	0	0
2	1	0	0	0	1	1	0	0
3	1	0	0	0	1	0	1	0
4	1	0	0	0	1			
5	0	1	1	1	0			
6	0	1	0			0		
7	0	0	1				0	
8	0	0	0					0



Следовательно, $(4, 5) = 0$.

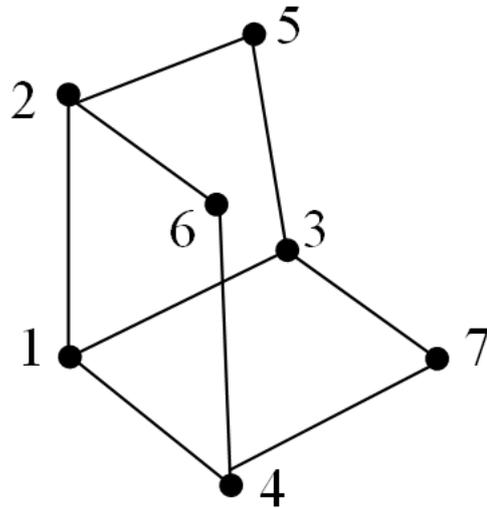
	1	2	3	4	5	6	7	8
1	0	1	1	1	0	0	0	0
2	1	0	0	0	1	1	0	0
3	1	0	0	0	1	0	1	0
4	1	0	0	0	0	1	1	
5	0	1	1	0	0			
6	0	1	0	1		0		
7	0	0	1	1			0	
8	0	0	0					0



Задание $(4, 6) = 1$ создаст цикл 4-го порядка $\langle 1, 4, 6, 2, 1 \rangle$. Он имеет 1 общее ребро с уже построенным циклом, что допустимо.

Задание $(4, 7) = 1$ создаст цикл 4-го порядка $\langle 1, 4, 7, 3, 1 \rangle$.

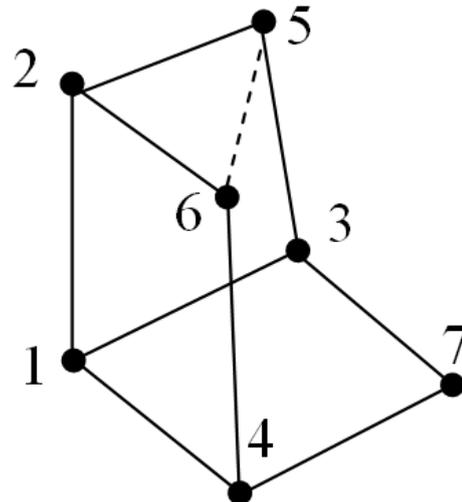
	1	2	3	4	5	6	7	8
1	0	1	1	1	0	0	0	0
2	1	0	0	0	1	1	0	0
3	1	0	0	0	1	0	1	0
4	1	0	0	0	0	1	1	0
5	0	1	1	0	0			
6	0	1	0	1		0		
7	0	0	1	1			0	
8	0	0	0	0				0



Этот цикл имеет по 1 общему ребру с уже построенными циклами и является третьим, что допустимо. Следовательно, $(4, 8) = 0$.

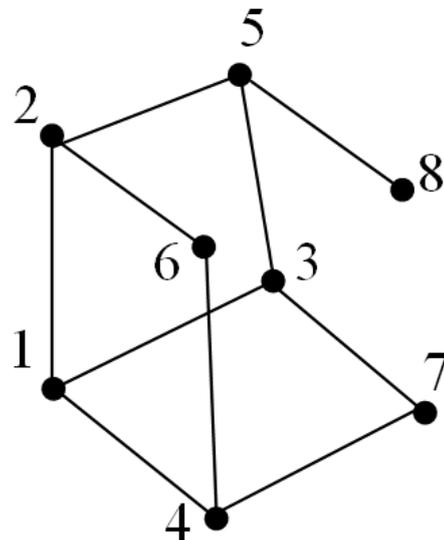
Задание $(5, 6) = 1$ создаст цикл 3-го порядка $\langle 2, 5, 6, 2 \rangle$, что допустимо.

	1	2	3	4	5	6	7	8
1	0	1	1	1	0	0	0	0
2	1	0	0	0	1	1	0	0
3	1	0	0	0	1	0	1	0
4	1	0	0	0	0	1	1	0
5	0	1	1	0	0	1		
6	0	1	0	1	1	0		
7	0	0	1	1			0	
8	0	0	0	0				0



Следовательно, $(5, 6) = 0$.

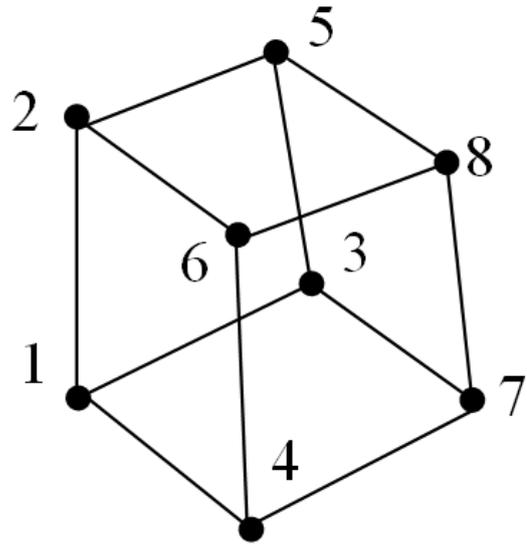
	1	2	3	4	5	6	7	8
1	0	1	1	1	0	0	0	0
2	1	0	0	0	1	1	0	0
3	1	0	0	0	1	0	1	0
4	1	0	0	0	0	1	1	0
5	0	1	1	0	0	0	0	1
6	0	1	0	1	0	0		
7	0	0	1	1	0		0	
8	0	0	0	0	1			0



Аналогично, $(5, 7) = 0$ из-за недопустимости цикла 3-го порядка $\langle 3, 5, 7, 3 \rangle$.

Следовательно, $(5, 8) = 1$.

	1	2	3	4	5	6	7	8
1	0	1	1	1	0	0	0	0
2	1	0	0	0	1	1	0	0
3	1	0	0	0	1	0	1	0
4	1	0	0	0	0	1	1	0
5	0	1	1	0	0	0	0	1
6	0	1	0	1	0	0	0	1
7	0	0	1	1	0	0	0	1
8	0	0	0	0	1	1	1	0



Отметим, что все присваивания значений производятся только на основе анализа матрицы и списка полученных циклов, а графическое представление лишь иллюстрирует результат. Ввиду того, что степень вершин 6, 7, 8 должна равняться 3, получаем $(8, 6) = (6, 8) = 1$, $(8, 7) = (7, 8) = 1$ и, следовательно, $(6, 7) = (7, 6) = 0$. В результате возникают новые циклы 4-го и более высоких порядков. Но допустимыми в совокупности, т.е.: а) имеющими не более одного общего ребра с уже построенными циклами 4-го порядка, б) имеющими 4-й порядок, с) являющихся простыми циклами, т.е. не содержащими подциклов, оказываются ровно 6 циклов 4-го порядка.

ШЗ. Гранный символ $\{06\}$ – реализуемый. Таким образом, конструктивно показана реализуемость гранного символа $\{06\}$. Проверка гранного символа $\{141\}$ показывает, что построение матрицы смежности для $\{141\}$ приводит к противоречиям по всем ветвям алгоритма. (Отметим, что при обнаружении допустимого цикла требуется проверка, является представляемый многоугольник гранью или сечением. Это может быть определено лишь по всей совокупности полученных допустимых циклов с помощью алгоритма, предложенного в [2, 3]. В более сложных случаях алгоритм может усложниться, хотя укрупнённое описание, данное в начале статьи, не изменится.) Такой алгоритм с возвратом позволяет определить реализуемость заданного гранного символа без геометрических построений. Но он требует наличия алгоритма выявления циклов по матрице смежности, совместимости полученного цикла с набором построенных ранее циклов (наличие не более одного общего ребра, соответствие гранному символу по числу вершин), а также механизма возврата при наличии непредопределённого выбора значений элементов матрицы смежности. Такой алгоритм допускает компьютерную реализацию.

Список литературы

1. Степенчиков Д.Г. Вывод комбинаторных типов многогранников // Тр. V Всерос. научн. школы. «Математические исследования в естественных науках». Апатиты, 12-14 окт. 2009 г. – Апатиты: Изд-во К & М, 2009. – С. 105-115.
2. Ярыгин О.Н. Алгоритм определения планарности графа по матрице смежности // Тр. III Всерос. научн. школы «Математические исследования в кристаллографии, минералогии и петрографии». Апатиты, 22-23 окт. 2007 г. – Апатиты: Изд-во К & М, 2007. – С. 86-93.
3. Ярыгин А.Н., Ярыгин О.Н., Каверин С.В. и др. Лекции и задачи по дискретной математике: алгоритмический подход. – М.: Изд-во МГУ ПП, 2011. – 288 с.

О СТРУКТУРЕ МНОЖЕСТВА ПОЛИЭДРОВ

Ярыгин О.Н.

Тольяттинский государственный университет, onyx2602@rambler.ru

В статье рассмотрено распределение в пространстве векторов, задаваемых координатами V , E , F – чисел вершин, рёбер и граней для выпуклых многогранников.

Теорема Эйлера, связывающая числа вершин, рёбер и граней выпуклых полиэдров: $V - E + F = 2$ – задаёт некоторую плоскость в пространстве с координатами V , E , F (рис. 1).

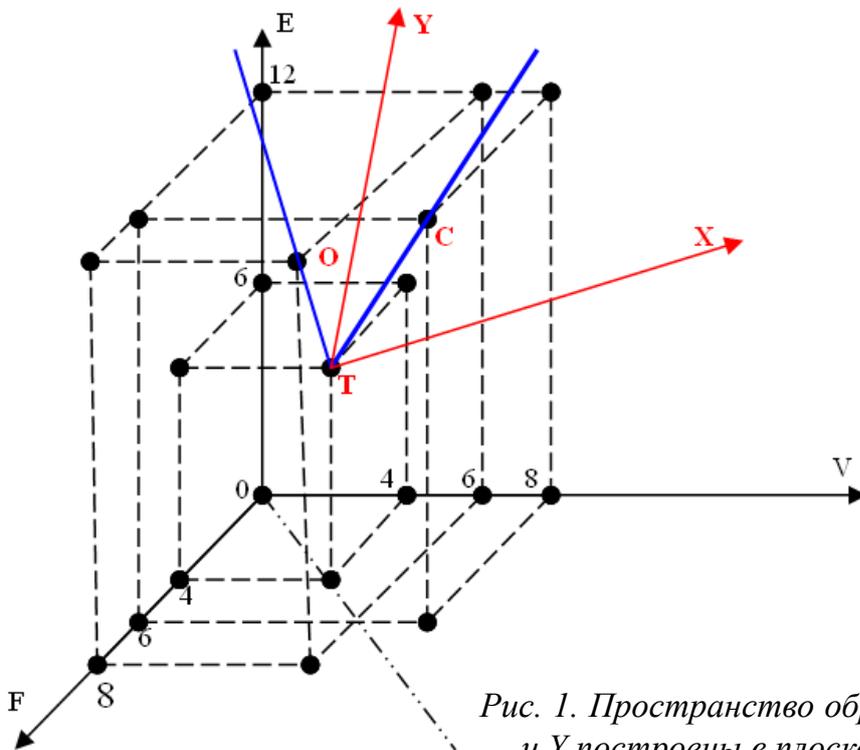


Рис. 1. Пространство образов полиэдров. Оси X и Y построены в плоскости точек O , C и T .

Точке T с VEF-координатами $(4, 6, 4)$ соответствует тетраэдр, точке $C = (8, 12, 6)$ – куб, точке $O = (6, 12, 8)$ – октаэдр. VEF-координаты не позволяют однозначно идентифицировать полиэдр. Так, в точку $(8, 12, 6)$ кроме куба с гранным символом $\{06\}$ отобразится клин с символом $\{222\}$, а в точку $(6, 12, 8)$ кроме октаэдра с гранным символом $\{8\}$ отобразится полиэдр, также имеющий символ $\{8\}$, но с иной симметрией [1]. Итак, для идентификации оказывается недостаточно даже комплекса $\langle \text{эйлеров класс (VEF-координаты)} \rangle \oplus \langle \text{гранный символ} \rangle$ (рис. 2).

Следующим различительным признаком может быть тип симметрии. В трёхмерном пространстве все точки-отображения полиэдров располагаются в плоскости, задаваемой точками T, O, C . В ней можно ввести координаты с началом в точке T , осью Tx , параллельной плоскости OVF , и осью Ty в вертикальной плоскости. Тогда $X = (V - F)/\sqrt{2}$, $Y = (V + F - 8)/\sqrt{2/3}$. Точками, симметричными относительно OY , отображаются двойственные полиэдры. Точки, расположенные на огибающей $Y = 3X$, отображают все простые полиэдры. Действительно, равенство $Y = 3X$ эквивалентно $V + F - 8 = 3(V - F)$, т.е. эквивалентно равенству $2F - 4 = V$, что с учетом соотношения Эйлера равносильно $2E = 3V$, т.е. каждой вершине инцидентны ровно 3 ребра.

Точки, расположенные на прямых, параллельных $Y = X$, отображают полиэдры с заданным числом граней F . На линиях $F = 9$ и $F = 10$ изображены только полиэдры, представленные в [1]. Но существование остальных 10- и 9-эдров, которым соответствуют точки, удовлетворяющие неравенствам $-3X \leq Y \leq 3X$, вполне очевидно. Они эквивалентны неравенствам $\frac{V}{2} + 2 \leq F \leq 2V - 4$. Вызывает интерес исследование «весов» точек построенного пространства, определяемых числом полиэдров, соответствующих данной точке.

Полиэдр с большим числом граней и вершин получается из «меньшего» с помощью некоторого набора операций, например, «фёдоровских» α , β и γ . Как показано Е.С. Федоровым, все простые полиэдры могут быть получены из тетраэдра за счёт их последовательного применения. При этом:

– α создаёт одну треугольную грань за счёт отсечения плоскостью вершины и частей рёбер, инцидентных этой вершине, в результате: $V \rightarrow V+2$, $F \rightarrow F+1$, $E \rightarrow E+3$;

– β создаёт одну 4-угольную грань за счёт отсечения плоскостью двух вершин, соединяющего их ребра и частей остальных инцидентных им рёбер, в результате: $V \rightarrow V+2$, $F \rightarrow F+1$, $E \rightarrow E+3$;

– γ создаёт одну 5-угольную грань за счёт отсечения плоскостью 3 вершин, двух целых рёбер, соединяющих две из отсекаемых вершин, и частей остальных инцидентных им рёбер, в результате: $V \rightarrow V+2$, $F \rightarrow F+1$, $E \rightarrow E+3$.

Как видим при всех фёдоровских операциях α , β и γ эйлеров класс изме-

няется одинаково. При этом «координатные» переменные изменяются так: $V-F \rightarrow V-F+1$, $V+F-8 \rightarrow (V+F-8)+3$. Это показывает, почему соответствующие простым полиэдрам точки располагаются на одной прямой.

Возможные полиэдры

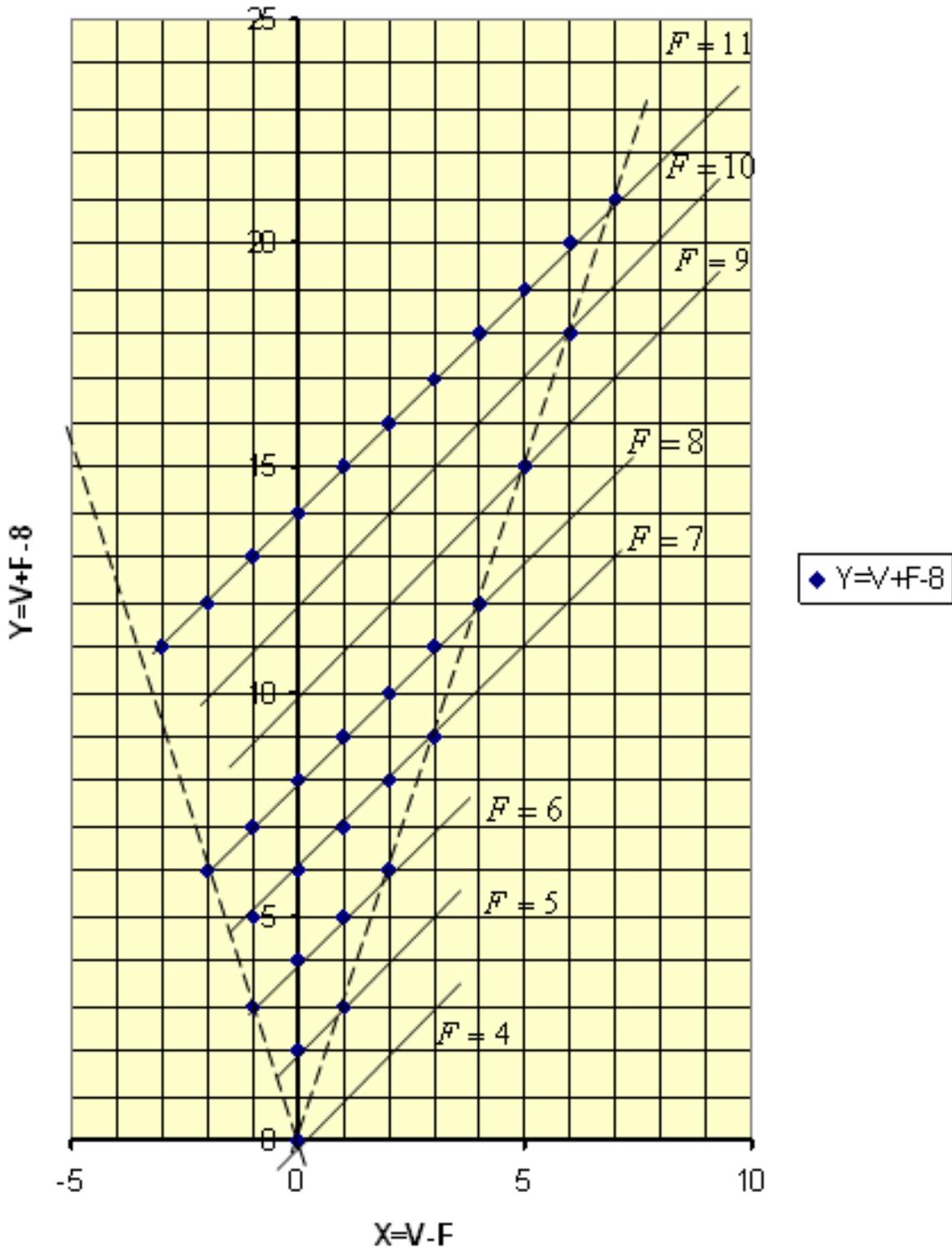


Рис. 2. Расположение точек, соответствующих эйлеровым классам, на плоскости $V - E + F = 2$.

Список литературы

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

УРАВНЕНИЕ ЭБЕРГАРДТА И ДРУГИЕ ДИОФАНТОВЫ УРАВНЕНИЯ ПОЛИЭДРОВ

Ярыгин О.Н.

Тольяттинский государственный университет, onyx2602@rambler.ru

В статье сделана попытка определения числа простых полиэдров заданного эйлерова класса на основании числа решений диофантова уравнения Эбергардта, задающего все потенциальные гранные символы.

Уравнение Эбергардта связывает для простого полиэдра числа граней i -го порядка f_i , $M \geq i \geq 3$, где M – порядок «максимальной» грани [3]:

$$3f_3 + 2f_4 + f_5 = 12 + f_7 + 2f_8 + \dots + (M-6)f_M$$

Числа f_i задают гранный символ полиэдра $\{f_3 f_4 f_5 \dots f_M\}$. Из этого уравнения следует, например, что если простой полиэдр имеет только 5-угольные грани, то их будет ровно 12 (пентадодекаэдр), а также то, что не существует простого полиэдра, имеющего только 6-угольные грани. Рассмотрим $P(V, E, F) = P(8, 12, 6)$. По теореме о максимальной грани $M = F - 1$ при $V > F$ [2, 3]. Следовательно, $M = 5$ и гранный символ полиэдра имеет вид $\{f_3 f_4 f_5\}$. Тогда $f_3 + f_4 + f_5 = F = 6$ (1) и $3f_3 + 4f_4 + 5f_5 = 2E = 24$ (2). Если из первого равенства, умноженного на 6, вычесть второе, то получим уравнение Эбергардта для полиэдра с гранным символом $\{f_3 f_4 f_5\}$. Таким образом, оно следует из (1) и (2) (но не наоборот!) и не дает оснований для различения полиэдров при заданных (V, E, F) -конфигурации и гранном символе. Система (1)-(2) при ограничениях $f_i \geq 0$ имеет следующие решения, удовлетворяющие уравнению Эбергардта, $(f_3, f_4, f_5) : (0, 6, 0), (1, 4, 1), (2, 2, 2), (3, 0, 3)$. Полиэдры $\{06\}$ и $\{222\}$ дают куб и пятиугольный клин.

Попытка найти полиэдры $\{141\}$ и $\{303\}$ в [1] показывает, что таковых не существует. Действительно, построим проекцию Шлегеля для полиэдра $\{141\}$, начав с 5-угольника. Внутри него должно располагаться 3 вершины. Из каждой из 5 вершин выходит внутрь 5-угольника ровно по 1 ребру, всего $5 > 3$. Значит, по крайней мере, в одной из внутренних вершин соединятся два ребра, вышедшие из вершин 5-угольника. Таким образом, либо (а) образуется проекция треугольной грани, которая должна быть единственной, либо (б) 4-угольник, внутри которого остаётся потенциальная вершина.

Но для этой вершины остается только одно возможное соединение, что ограничивает её степень числом 2, а это недопустимо для проекции полиэдра. В случае (а) одна из «свободных» вершин должна совпасть с вершиной А, чтобы общее число внутренних вершин стало равным 3, при этом не должно образоваться треугольников. Это может быть выполнено единственным образом (с). В результате, все вершины, кроме «свободных», имеют степень 3, а «свободные» – степень 1. Они могут быть соединены только друг с другом, получив при этом степень 2, вариант (d), что также недопустимо (рис. 1).

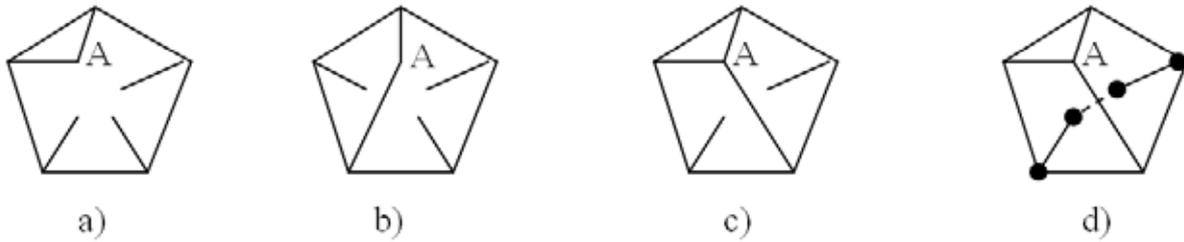


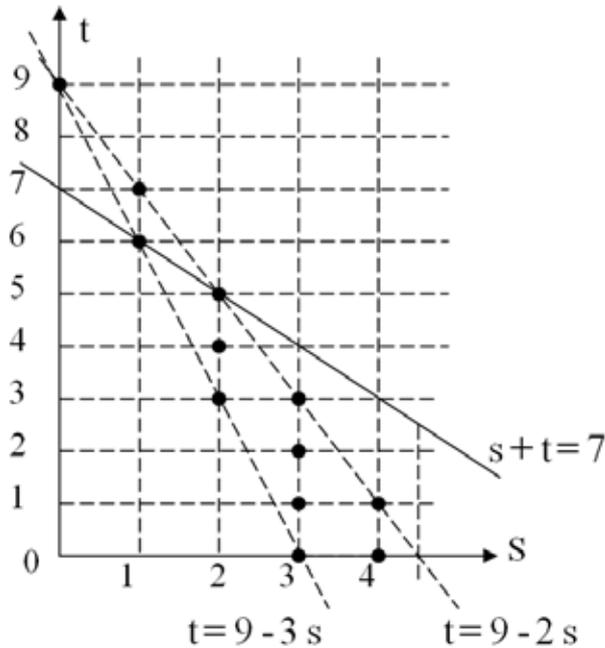
Рис. 1.

Аналогично может быть показана невозможность построения полиэдра с гранным символом $\{303\}$. Как отмечено в [2], «к сожалению, формул, позволяющих сократить разнообразие потенциально возможных гранных наборов γ -эдров, исключив заведомо нереализуемые, пока не существует». Частично сожаления автора могут быть утешены указанной выше теоремой о максимальной грани полиэдра [3], задающей наибольший индекс в правой части диофантова уравнения Эбергардта. Действительно, для простых полиэдров $V \geq F$ и, следовательно, $M = F - 1$. Но этого недостаточно для существенного упрощения вычислений числа полиэдров заданного вида, например, простых полиэдров эйлера класса (V, E, F) .

Применим методы решения диофантовых уравнений для нахождения возможных гранных символов полиэдров. Рассмотрим простые 6-эдры ($F = 6$). Из условия простоты ($3V = 2E$) и теоремы Эйлера следует, что $V = 2F - 4 = 8$, $E = 3F - 6 = 12$, $M = F - 1 = 5$. Гранный символ простого 6-эдра имеет вид $\{f_3 f_4 f_5\}$. Для элементов гранного символа справедлива система линейных диофантовых уравнений для трёх переменных (1)-(2) с ограничениями $f_i \geq 0$, $i = 3, 4, 5$. Из (1)-(2) получается редуцированное линейное уравнение $f_4 + 2f_5 = 6$ (3), имеющее общее решение $f_4 = 2t, f_5 = 3 - t, t \in \mathbb{Z}$. Для удовлетворения (1) требуется $f_3 = 3 - t, t \in \mathbb{Z}$. Из ограничений на решения получаются ограничения на параметр: $0 \leq t \leq 3$. Таким образом, все решения системы задаются таблицей

t	$f_3=3-t$	$f_4=2t$	$f_5=3-t$	Реализуемость
0	3	0	3	+
1	2	2	2	+
2	1	4	1	-
3	0	6	0	-

Задача усложняется для полиэдров с большим количеством граней. Для 7-эдра получим: $V = 2F - 4 = 10$, $E = 3F - 6 = 15$, $M = F - 1 = 6$. Гранный символ простого 6-эдра имеет вид $\{f_3 f_4 f_5 f_6\}$, система уравнений: $f_3 + f_4 + f_5 + f_6 = 7$ (4), $3f_3 + 4f_4 + 5f_5 + 6f_6 = 30$ (5). Общее решение системы описывается двумя целочисленными параметрами: $f_3 = 7 - s - t$, $f_4 = t$, $f_5 = -(9 - t) + 3s$, $f_6 = (9 - t) - 2s$. Ограничения на параметры: $s + t \leq 7$, $0 \leq t$, $9 - 3s \leq t$, $t \leq 9 - 2s$. Представим множество решений графически.



Узлы целочисленной решётки, попадающие в четырехугольник, образованный линиями ограничений, соответствуют решениям системы диофантовых уравнений (4)-(5). Ограничениям удовлетворяют 10 из 12 решений системы, представленных в таблице. Из них два не удовлетворяют ограничениям. Из оставшихся 10 решений только пять реализуемы в виде полиэдров [1].

К сожалению, не удаётся найти численного критерия, различающего по гранному символу реализуемые и нереализуемые наборы.

	s	t	f3	f4	f5	f6	Реализуемость
1	0	9	-2	9	0	0	
2	1	7	-1	7	1	0	
3	1	6	0	6	0	1	-
4	2	5	0	5	2	0	+
5	2	4	1	4	1	1	-
6	2	3	2	3	0	2	+
7	3	3	1	3	3	0	+
8	3	2	2	2	2	1	+
9	3	1	3	1	1	2	-
10	3	0	4	0	0	3	-
11	4	1	2	1	4	0	-
12	4	0	3	0	3	1	+

Но общим оказывается свойство, состоящее в том, что реализуемыми являются ровно половина решений системы диофантовых уравнений для гранного символа полиэдра. Проверим это на 8-эдрах: $V = 12$, $E = 18$, $M = 7$. Гранный символ простого 6-эдра имеет вид $\{f_3 f_4 f_5 f_6\}$, система уравнений: $f_3 + f_4 + f_5 + f_6 + f_7 = 8$ (6), $3f_3 + 4f_4 + 5f_5 + 6f_6 + 7f_7 = 36$ (7). Получаем редуцированное уравнение, вычитая из (7) утроенное (6): $f_4 + 2f_5 + 3f_6 + 4f_7 = 12$ (8). Подстановка $f_4 = x$, $2f_5 + 3f_6 + 4f_7 = y$ приводит к уравнению $x + y = 12$ с общим

решением $x = t, y = 12 - t, t \in \mathbb{Z}$. Получаем уравнение $2f_5 + 3f_6 + 4f_7 = 12 - t$ с взаимно простыми коэффициентами. Подстановка $f_5 = p, 2f_5 + 3f_6 + 4f_7 = q$, приводит к уравнению $2p + q = 12 - t$ с частным решением $p_0 = 0, q_0 = 12 - t$ и общим решением $p = s, q = 12 - t - 2s$, где $t, s \in \mathbb{Z}$. Получаем уравнение $3f_6 + 4f_7 = 12 - t - 2s$ с взаимно простыми коэффициентами. Подстановка $f_6 = m, f_7 = n$ приводит к уравнению $3m + 4n = 12 - t - 2s$ с частным решением $m_0 = -(12 - t - 2s), n_0 = (12 - t - 2s)$ и общим решением $m = -(12 - t - 2s) + 4r, n = (12 - t - 2s) - 3r$, где $t, s, r \in \mathbb{Z}$.

Выполнив обратные подстановки, получаем общее решение уравнения: $f_4 = t, f_5 = s, f_6 = -(12 - t - 2s) + 4r, f_7 = (12 - t - 2s) - 3r$, где $t, s, r \in \mathbb{Z}$. После этого остается получить f_3 из (6): $f_3 = 8 - t - s - r$. Общее решение системы описывается двумя целочисленными параметрами: $f_3 = 8 - s - t - r, f_4 = t, f_5 = s, f_6 = -(12 - t - 2s) + 4r, f_7 = (12 - t - 2s) - 3r$. Ограничения на параметры: $s + t + r \leq 8, 0 \leq t, 0 \leq s, 0 \leq -(12 - t - 2s) + 4r, 0 \leq (12 - t - 2s) - 3r$. Из двух последних ограничений следует, что $r \geq 0$. Такое общее решение имеет 27 частных, а реализуемыми оказываются 13 из них: (24002), (31211), (23111), (22301), (40040), (31130), (22220), (14120), (06020), (21410), (13310), (20600), (04400).

Проверка для 9-эдра дает результат, подтверждающий модифицированную гипотезу, но для 10-эдров гипотеза не подтверждается, т.к. число решений равно 157, а число реализуемых граничных символов – 85 [1]. Интересное наблюдение состоит в том, что число неотрицательных наборов (s, t, r) , удовлетворяющих первым трём ограничениям, равно C_{10}^7 , т.е. C_{2F-4}^M , что представляет собой симплексное число, где $2F-4$ есть число вершин полиэдра, а M – порядок максимальной грани. Вычислимо, но пока необъяснимо!

Количество	(4,4)	(5,6)	(6,8)	(7,10)	(8,12)	(9,14)	(10,16)	(11,18)
Реализуемых гран. символов	1	1	2	5	13	33	85	199
Решений системы			2	10	27	66	157	

В общем случае множество решений для граничного символа простого F -эдра, т.е. при $M = F - 1$, задаётся равенствами:

$$\begin{aligned}
 f_3 &= F - t_1 - t_2 - \dots - t_{M-4}, f_4 = t_1, f_5 = t_2, \dots, f_{M-2} = t_{M-5}, \\
 f_{M-1} &= - [3F-12 - t_1 - 2t_2 - \dots - (M-5)t_{M-5}] + (M-3) t_{M-4}, \\
 f_M &= [3F-12 - t_1 - 2t_2 - \dots - (M-5)t_{M-5}] - (M-4) t_{M-4},
 \end{aligned}$$

Аналогично получают и ограничения:

$$\begin{aligned}
 t_1 - t_2 - \dots - t_{M-4} &\leq F, t_i \geq 0, \quad 1 \leq i \leq M-4, \\
 [3F-12 - t_1 - 2t_2 - \dots - (M-5)t_{M-5}] - (M-3) t_{M-4} &\leq 0, \\
 [3F-12 - t_1 - 2t_2 - \dots - (M-5)t_{M-5}] - (M-4) t_{M-4} &\geq 0.
 \end{aligned}$$

Возникает гипотеза о том, что вычисление числа решений системы уравнений позволит определить число реализуемых полиэдров как половину от общего числа решений. Отметим, что многие гранные символы допускают по несколько реализаций в виде различных простых полиэдров с одинаковым гранным символом (одного эйлерова класса). В общем число реализаций такие варианты входят одним пунктом. Так, для 9-эдров существует 66 допустимых решений системы диофантовых уравнений, при этом в [1] представлено ровно 33 реализуемых гранных символа простых 9-эдров. Дальнейшая проверка заслуживает внимания и, возможно, приведёт к уточнению гипотезы. Например, для 8-эдров существует 27 допустимых решений и лишь 13 из них – реализуемые, т.е. целая часть от половины при нечётном числе решений.

В [4] даны не только числа триангуляций с заданным количеством вершин n , которые равны количеству простых n -гранников, но и числа различных последовательностей степеней вершин, соответствующих этим триангуляциям. А каждое из этих чисел как раз и равно количеству реализуемых решений рассмотренной выше системы диофантовых уравнений для заданного n -гранника. Сравнение таблицы Дилленкурта и получаемых чисел решений системы подтверждает правильность рассматриваемого подхода и позволяет получать некоторую оценку снизу для числа реализуемых гранных символов в виде целой части от половины числа решений.

Список литературы

1. Войтеховский Ю.Л. Грануломорфология: приводимые 4- ... 8-эдры, простые 9- и 10-эдры. – Апатиты: Изд-во КНЦ РАН, 1999. – 62 с.
2. Степенщиков Д.Г. Вывод комбинаторных типов многогранников // Тр. V Всерос. научн. школы. «Математические исследования в естественных науках». Апатиты, 12-14 окт. 2009 г. – Апатиты: Изд-во К & М, 2009. – С. 105-115.
3. Ярыгин А.Н., Ярыгин О.Н., Каверин С.В. и др. Лекции и задачи по дискретной математике: алгоритмический подход. – М.: Изд-во МГУ ПП, 2011. – 288с.
4. Dillencourt M.B. Polyhedra of small order and their hamiltonian properties // J. Comb. Theory. Ser. B. 1996. V 66. N 1. 37 p. <http://citeseerx.ist.psu.edu/viewdoc/summary?doi=10.1.1.144.8936>

Фоторепортаж























*Труды VII Всероссийской (с международным участием) научной школы
“Математические исследования в естественных науках”, посвящённой
300-летию со дня рождения М.В. Ломоносова*

Апатиты, 3-6 октября 2011 г.

Отпечатано в ЗАО “КЭМ”

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

Тираж 100 экз.

