

УДК 550.4(541.1+543)

ФОРМИРОВАНИЕ СОСТАВА ПРИРОДНЫХ ОБЪЕКТОВ

© 2004 г. В. М. Степанов, И. А. Супрунова

Представлено академиком Г.Г. Девятыми 29.05.2003 г.

Поступило 11.07.2003 г.

Примесный (элементный) состав многих объектов окружающей среды к настоящему времени изучен достаточно хорошо. Концентрации элементов приведены в литературе для самых разнообразных объектов – от космо- и геохимических до биологических [1–3].

Отметим существенную особенность представления соответствующего материала: даже в феноменологических моделях отсутствуют последовательные трактовки механизмов происхождения массивов величин концентраций, возможное наличие связей между составами различных природных объектов и т.п.

В данной работе предлагается статистическая модель формирования примесного состава природных объектов. Механизм изменения величин концентраций примесей определяется многочисленными случайными, ступенчатыми энергетическими воздействиями. Эволюция состава на атомно-молекулярном уровне происходит под влиянием естественно возникающих градиентов химического потенциала. Исходя из известных термодинамических зависимостей, определяющих связь химического потенциала с концентрацией примеси, имеем картину ступенчатого изменения величины $X = -\lg x$, где x – безразмерная концентрация примесей, выраженная, например, в мольных долях (см. детали в [4, 5]). Конкретными природными процессами, отвечающими описанному механизму, являются контакты различных фаз основного вещества при конденсации, плавлении, испарении, возгонке. Это могут быть процессы растворения, экстракции, адсорбции, химические реакции и тому подобные явления, перераспределяющие примеси при трансформации рассматриваемого объекта. С математической точки зрения для величины X реализуется так называемая цепь Маркова [6]. Результат процесса – изменение первоначальной (в общем случае произвольной) дифференциальной функции распределения $\rho(x)$ до нормального (гауссовского) вида. При изменении состава объектов одного класса в каком-либо

природном процессе естественно считать соответствующую цепь Маркова однородной, т.е. определяемой одним масштабом изменения величин концентраций [4, 6].

Конкретное осуществление стохастического процесса, определенного рассматриваемой моделью, описывается методом Монте-Карло (см., например, [4]). При изменениях объекта формируемые в цепи случайные значения величин X принимаются всегда в случае отсутствия целенаправленного (детерминированного) формирования его состава. Конкретным примером такого случайного процесса служат рассмотренные да-

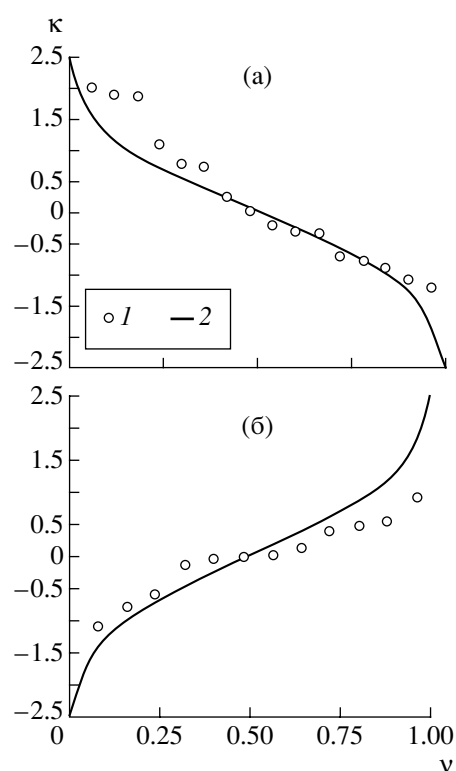


Рис. 1. Порядковые ряды величины безразмерного критерия Пирсона: а – космо- и геохимические объекты ($\mu = 0.38$, $\sigma = 0.25$); б – биологические объекты ($\mu = 0.55$, $\sigma = 0.5$). 1 – экспериментальные данные, 2 – зависимость для строгой модели.

Таблица 1. Порядковый ряд величин критерия Пирсона для дифференциальных функций распределения примесного состава объектов окружающей среды

№ п.п.	Космо- и геохимические объекты	χ^2	№ п.п.	Биологические объекты	χ^2
1	Каменные метеориты	5.32	1	Растения (зола)	0.08
2	Атмосфера Солнца	5.16	2	Грибы	0.93
3	Железные метеориты	5.12	3	Многоядерные водоросли	1.52
4	Глина	3.94	4	Ракообразные	3.00
5	Литосфера	3.43	5	Печень млекопитающих	3.23
6	Песчаники	3.37	6	Кровь человека	3.30
7	Солнечная система	2.66	7	Мхи	3.43
8	Марс	2.31	8	Моллюски	3.72
9	Луна	1.98	9	Покрытосеменные растения	4.47
10	Поверхностные воды	1.81	10	Мускулы млекопитающих	4.73
11	Земная кора	1.77	11	Кости человека	4.97
12	Сланцы	1.25	12	Мозг человека	6.04
13	Морская вода	1.10			
14	Изверженные породы	0.93			
15	Гранит	0.66			
16	Карбонатные породы	0.49			

лее неорганические (космо- и геохимические) объекты. В биологических объектах формирование состава носит иной характер. Величины концентраций будут стремиться к некоторому упорядоченному распределению, определяемому заданным типом функционирования системы. Можно принять его в определенном смысле противоположным предыдущему. В принятом приближении реализуется та же цепь, но в обратном порядке – от упорядоченного к стохастическому распределению по уже рассмотренному алгоритму. Подчеркнем, что речь идет об упорядочении в “пространстве” дифференциальных функций распределения $\rho(x)$.

Для примесного состава, изменяющегося вдоль однородной цепи Маркова, “объекты” – функции $\rho(x)$ по функциональному виду приближаются к функции нормального распределения. Величиной, определяющей стохастичность процесса, выберем относительный критерий Пирсона [4, 6]:

$$\chi_{\text{отн}}^2 = \frac{\chi^2}{\chi_{\text{табл}}^2},$$

где $\chi_{\text{табл}}^2$ – табличное значение критерия. Для обычного уровня значимости 0.95 и для построенных экспериментальных гистограмм с числом степеней свободы, равным 3, $\chi_{\text{табл}}^2 = 5.99$. Расчетные значения критерия χ^2 приведены в табл. 1. Данные по составу указанных объектов взяты из [1–3, 7, 8].

Тип изучаемого объекта определяется заданием основного вещества (веществ), примесный состав – концентрациями остальных его составляющих элементов. Такое классификационное разделение элементов не вызывает затруднений в силу больших различий в величинах концентраций. Для представленных в табл. 1 объектов неорганической природы основные компоненты – это Н, Не для Солнечной системы и атмосферы Солнца, Н, О для водных сред, Si, О для остальных. В органических объектах – это С, О, Н.

Для космо- и геохимических объектов, прошедших наиболее длинный путь формирования состава (большое число шагов в цепи Маркова), должна наблюдаться в соответствии с рассматриваемой моделью тенденция $\chi_{\text{отн}}^2 \rightarrow 0$. Для биологических объектов, долго “строющих” свой примесный состав, критерий $\chi_{\text{отн}}^2$ должен возрастать от малых до достаточно больших величин, соответствующих отказу от гипотезы нормального распределения примесей по величинам концентраций.

Приведем результаты в безразмерных координатах, удобных для сравнения с видом кривой порядковой статистики объектов, состав которых формируется строго по предположенной модели. Для нормальной функции распределения, по которому должны быть распределены величины χ^2 (это утверждение в согласии с центральной предельной теоремой математической статистики более строго, чем распределение величины X [6]), со-

ответствующее интегральное распределение (т.е. порядковый ряд) имеет S-образный вид. В соответствии с развитыми соображениями можно записать:

$$v = \frac{n}{N} =$$

$$= \begin{cases} 1 - \Phi(\kappa) & \text{для неорганических объектов,} \\ \Phi(\kappa) & \text{для органических объектов,} \end{cases} \quad (1)$$

где $\Phi(\kappa) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\kappa} \exp\left(-\frac{t^2}{2}\right) dt$ – интеграл ошибок

[9], $\kappa = \frac{\chi_{\text{отн}}^2 - \mu}{\sigma}$, n – номер объекта в порядковом ряду, N – общее число данных, μ , σ – среднее значение и стандартное отклонение величины κ .

Приведенные в табл. 1 порядковые ряды качественно отвечают представлению о хронологии в формировании рассмотренных объектов окружающей среды. Из рис. 1 видно, что наблюдается хорошее согласие экспериментальных данных со

строгой зависимостью, отвечающей предложенной выше стохастической модели с марковским механизмом формирования примесного состава рассмотренных объектов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Кист А. А. Феноменология биогеохимии и бионеорганической химии. Ташкент: Фан, 1987. 236 с.
2. Справочник химика. М.: Химия, 1964. Т. 2. 935 с.
3. Эмсли Дж. Элементы. М.: Мир, 1993. 255 с.
4. Степанов В.М., Супрунова И.А., Колесников А.Н. // Уч. зап. ВВОМСА. 2002. В. 11. С. 25–31.
5. Степанов В.М. // Высокочистые вещества. 1993. № 3. С. 123–133.
6. Феллер В. Введение в теорию вероятностей и ее приложения. М.: Изд-во иностр. лит., 1952. 350 с.
7. Полевой В.В. Физиология растений. М.: Высш. шк., 1989. 464 с.
8. Марри Р., Греннер Д., Мейес П., Родуэлл В. Биохимия человека. М.: Мир, 1993. 372 с.
9. Янке Е., Эмде Ф., Лёш Ф. Специальные функции. Формулы, графики, таблицы. М.: Наука, 1964. 342 с.