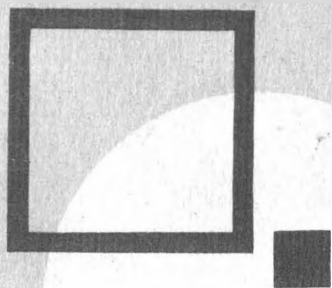


Л.А. ВЕРХОВСКАЯ
Е.П. СОРОКИНА

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ГЕОХИМИЧЕСКОГО ПОЛЯ В ПОИСКОВЫХ ЦЕЛЯХ



Л. А. ВЕРХОВСКАЯ,
Е. П. СОРОКИНА

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ГЕОХИМИЧЕСКОГО ПОЛЯ В ПОИСКОВЫХ ЦЕЛЯХ



МОСКВА «НЕДРА» 1981

Верховская Л. А., Сорокина Е. П. Математическое моделирование геохимического поля в поисковых целях. М., Недра, 1981, 186 с.

Приведены основные понятия геохимии, имеющие значение для математического моделирования геохимического поля при решении поисковых задач. Рассмотрены модели пространственной изменчивости геологических признаков и их применение к геохимическому полю. Описан опыт моделирования геохимических полей в поисковых целях. Особое внимание уделено анализу многомерного случайного скалярного поля, являющегося наилучшей моделью для решения поисковых задач по геохимическим данным.

Книга рассчитана на геологов и других специалистов, занимающихся геохимическими поисками с применением математических методов.

Табл. 5, ил. 27, список лит. — 197 назв.

Рецензент д-р геол.-мин. наук *Д. А. Родионов* (ВИЭМС)

ПРЕДИСЛОВИЕ

Книга посвящена вопросам разработки математических алгоритмов описания околорудных ореолов, необходимость в которых возникает при обработке геохимической информации на ЭВМ в процессе поисков месторождений рудных полезных ископаемых.

Для того чтобы выработать требования к алгоритмам первичной обработки геохимической информации для описания объектов поиска, была проанализирована методология связи математических моделей с геологическими, исследованы формы обобщения описаний околорудного пространства при геологическом моделировании, выдвинута, как наилучшая, модель геохимического поля (глава I) и выбрана математическая модель, наиболее точно представляющая геохимическое поле (глава II).

При выборе математической модели авторы руководствовались тем, что цель описания околорудного пространства по данным геохимического опробования заключается в извлечении геологической информации (о положении в пространстве, размерах и типе рудных тел) из геохимических данных. Опираясь на известную понятийную модель зонального строения околорудного пространства, были рассмотрены вопросы математического определения (глава III) и анализа (главы IV и V) многомерного скалярного поля — функции пространственных координат. При этом считалось, что детерминированная составляющая поля отображает зональное строение пространства (по математической терминологии, описывает пространственные закономерности многомерного поля), а флуктуационная составляющая — погрешности опробования, анализа содержаний химических элементов и неточности соответствия модели реальному описываемому объекту.

В отличие от обзорной работы Н. Н. Боровко (1971), излагающей различные возможные методы математического анализа пространственных геологических закономерностей, авторы попытались выделить среди них те, которые позволяют анализировать геохимическое поле на предмет его зонального строения.

В главе VI сформулированы выведенные требования к алгоритмам описания «эталонов» околорудных ореолов при решении поисковых задач, приведена принципиальная блок-схема алгоритма обработки геохимической информации, реализованного авторами на ЭВМ.

Предисловие, введение, раздел 1 главы I, глава II и заключение написаны авторами совместно. Главы III, IV, V и основная часть главы VI написаны Л. А. Верховской. Разделы 2, 3, 4 главы I и часть раздела 3 главы VI (примеры 3 и 4) написаны Е. П. Сорокиной.

Авторы выражают глубокую благодарность А. Г. Жабину, М. А. Зубову, Э. Ф. Жбанову, М. И. Шебалину, Г. М. Мейтуву, Т. А. Ивановой за любезно предоставленные материалы для методических разработок и В. Н. Бондаренко за содействие и помощь при написании книги.

ОБОЗНАЧЕНИЯ, ПРИМЕНЯЕМЫЕ В ФОРМУЛАХ

- R^v — пространство задания геохимического поля ($v=1, 2, 3$);
 Z — координаты точки пространства R^v ; $Z=(z_1, \dots, z_v)$;
 V — подпространство в R^v ;
 $L-v$ — мерный объем подпространства V (длина в R^1 , площадь в R^2 , объем в R^3);
 $\xi(Z)$ — измеренное геохимическое поле;
 $\bar{C}(Z)$ — детерминированная составляющая поля;
 $\gamma(Z)$ — аддитивный шум;
 $\psi(Z)$ — мультипликативный шум;
 $\mu(Z)$ — математическое ожидание поля;
 $\xi^0(Z)$ — центрированное поле;
 $\vec{\varphi}(Z)$ — векторное поле;
 $K(Z)$ — корреляционная функция матричнозначная;
 $k_{ij}(Z)$ — корреляционная функция (взаимная) i -го и j -го признаков (элементов);
 D_i — дисперсия i -го признака (элемента), $D_i=\sigma_i^2$;
 $S(\omega)$ — спектральная плотность матричнозначная;
 $s(\omega)$ — спектральная плотность одномерная;
 $H(Z)$ — структурная функция матричнозначная;
 $h(Z)$ — структурная функция одномерная;
 $\|K\|$ — детерминант (определитель) матрицы K ;
 K^T, μ^T — транспонированные матрица, вектор;
 P — вероятность;
 $p(x)$ — плотность распределения вероятностей;
 $M[x]$ — знак операции определения математического ожидания случайной величины x ;
 $D[x]$ — знак операции определения дисперсии случайной величины x ;
 $\bar{x}$ — среднее значение случайной величины;
 $\hat{\alpha}$ — оценка параметра α ;
 V — коэффициент вариации;
 d — метрика (расстояние) в функциональном пространстве;
 r — расстояние (евклидово) между двумя точками Z_1 и Z_2 в R^v
 $r=\|Z_1-Z_2\|=\sqrt{(z_{11}-z_{21})^2+\dots+(z_{1v}-z_{2v})^2}$;
 $\operatorname{sgn} X$ — знак (+ или -) величины X ;
 $\operatorname{Re}(X)$ — действительная часть комплексного числа X ;
 δ_k^m — символ Кронекера; $\delta_k^m=\begin{cases} 1, & \text{если } k=m \\ 0, & \text{если } k \neq m \end{cases}$
 $\delta(x)$ — δ — функция; $\delta(x)=\begin{cases} \infty, & \text{если } x=0 \\ 0, & \text{если } x \neq 0 \end{cases}$
 $0(e)$ — бесконечно малая величина порядка e ;
 $N(x; \mu, K)$ — кривая (поверхность) Гаусса с параметрами μ и K ;
 $a \in A$ — элемент a входит в множество A ;
 $b \notin A$ — элемент b не входит в множество A ;
 $B \subset A$ — множество A включает в себя множество B ;
 $\emptyset$ — пустое множество;
 $A \cup B$ — сложение множеств A и B (элемент множества $A \cup B$ входит или в множество A , или в множество B);
 $A \cap B$ — пересечение множеств A и B (элемент множества $A \cap B$ входит и в множество A , и в множество B);
 $A \setminus B$ — исключение множества B из множества A (элемент множества $A \setminus B$ входит в множество A , но не входит в множество B).

ВВЕДЕНИЕ

Поиски рудных месторождений по геохимическим данным становятся все более сложными. Переход от поисков открытых и неглубоко залегающих рудных тел к поискам скрытого оруденения предъявляет повышенные требования к критериям выявления и интерпретации геохимических аномалий. Выделение таких критериев необходимо почти на всех стадиях геолого-разведочных работ от геологической съемки до поисков в условиях горного отвода.

Определение перспективности исследуемой территории геолог проводит с помощью сформулированных в его сознании «эталонов» околорудного пространства — системы поисковых предпосылок и признаков, элементов-индикаторов оруденения, понятия зональности и комплексности околорудных ореолов и т. п. Усложнение поисковых задач приводит к увеличению числа анализируемых признаков, к необходимости учета различного рода взаимосвязей этих признаков, пространственных закономерностей их распределения. Все это влечет за собой использование ЭВМ и, следовательно, формализуемых (математических) методов описания ореольного пространства и определение перспективности изучаемого геологического объекта.

Математическое решение задач поиска на любой стадии геологоразведочных работ (в пределах выбранной для исследования территории) требует предварительного выяснения двух принципиальных вопросов:

- 1) по какой совокупности признаков и в какой форме описывать исследуемый объект,

- 2) по какому правилу оценивать перспективность исследуемого объекта или участков, а также определять надежность таких оценок.

Математическое решение задач оценки перспективности изучаемого объекта при наличии эталонов месторождений, описанных заданным набором признаков, может опираться на достаточно хорошо разработанные в математике статистические методы классификации. Суть методов сводится к вычислению степени различия между изучаемым объектом и каждым эталоном из имеющегося набора («библиотеки») описаний месторождений различных типов по заданному перечню признаков. Минимальное различие между исследуемым объектом и одним из эталонов дает возможность утверждать о «подобии» изучаемой территории по заданному набору признаков околорудному пространству определенного типа оруденения. В зависимости от величины порогового различия, априорных вероятностей появления в регионе тех или иных типов орудене-

ния и «стоимостей» ошибок классификации принимается решение об отнесении исследуемой территории к классу перспективных на выделенный тип оруденения (определяемый «ближайшим» эталоном) либо к классу неперспективных или неопознанных. При любом объеме априорной информации правило принятия решения формируется таким образом, что оно оптимально (т. е. является наилучшим) при заданном наборе исходных признаков. Возможности приложения статистической теории принятия решений в условиях неопределенности (при неполной априорной информации в «библиотеке» эталонов) к построению прогнозных оценок подробно исследованы А. А. Бугайцом, Л. Н. Дуденко (1976).

Однако применение оптимальных методов классификации на этапе оценивания перспективности геологических объектов не означает, что достигнуты предельные возможности при построении надежных прогнозных оценок, так как заданного набора признаков может быть недостаточно для такого построения.

Именно попытке найти правила наиболее информативного математического описания ореольного пространства месторождений и посвящена книга. Ответ на вопрос авторы искали в построении математических моделей, наиболее точно (по возможности гомоморфно) отображающих те понятийные (геологические) аспекты, на основе которых строится прогноз по геохимическим данным. Формализовать этот этап пока не удалось. Предлагаемое нами правило выбора способа описания околорудного пространства по геохимическим данным сформулировано в виде перечня требований, которым должны удовлетворять алгоритмы, реализующие работу этапа выбора признаков описания и формы представления этого описания.

Глава 1. ПРИНЦИПЫ КОНСТРУИРОВАНИЯ ПОНЯТИЙНОЙ МОДЕЛИ ГЕОХИМИЧЕСКОГО ПОЛЯ

Получение общегеологической информации о морфологических особенностях строения околорудного пространства по геохимическим данным представляет собой обязательный этап исследований при построении поисковых критериев и является непростой задачей. Геохимическое поле — это модель исследуемых участков земной коры на атомном уровне. Существующая взаимосвязь форм организации материи на различных уровнях предопределяет принципиальную возможность извлечения информации о молекулярных, агрегатных, породных и еще более сложных структурах из информации о распределении атомов в исследуемом пространстве.

Для выявления пространственных закономерностей распределения концентраций химических элементов и других информативных признаков оруденения наиболее целесообразно привлечение методов математического исследования многомерного скалярного поля. Эти методы в настоящее время успешно используются для решения прикладных задач, в том числе в науках о Земле. Применение соответствующего математического аппарата позволяет дать наиболее полное описание явлений, имеющих непрерывное распространение в пространстве.

Такой подход к вопросу требует предварительного рассмотрения некоторых общих вопросов методологии моделирования, а также особенностей моделирования в естественных науках с целью определения места математических моделей в геологии и выявления их специфических особенностей.

1. МОДЕЛИРОВАНИЕ КАК МЕТОД ИССЛЕДОВАНИЯ

В советской философской литературе последнего десятилетия (Морозов, 1969; Веников, 1964; Уемов, 1971) определение модели формулируется следующим образом. Под моделью понимается объект любой природы, который способен замещать исследуемый объект так, что изучение модели дает новую информацию об исследуемом объекте. Моделированием называется построение (или выбор) и изучение моделей с целью получения новых значений об исследуемых объектах. В общем случае все формы познавательной деятельности могут рассматриваться в определенном смысле как моделирование. В частности, все теории в конечном счете создаются для отражения

объективной реальности и в этом смысле являются моделями более или менее широкого круга действительности*.

Исследователи часто идут различными путями при моделировании одних и тех же объектов и явлений в силу различного опыта и различных задач исследования. По-видимому, невозможно построить «абсолютный» (общий), неизменяемый критерий для оценки целесообразности проведения того или иного моделирования (Абрамович, Груза, 1972). При решении конкретных практических задач следует разрабатывать «относительные» и «временные» критерии сравнения различных моделей.

Первым этапом любого моделирования является построение модели-представления. Любой материальный объект как объект исследования прежде всего преобразуется в представлении исследователя в некий идеализированный объект-заменитель. В геологии теоретик имеет дело не с объектами — фрагментами литосферы, а лишь с их аналитическими, графическими или словесными моделями — картами, схемами, таблицами, словесным описанием (Жуков, 1978).

Более высокой степенью обобщения характеризуются понятийные модели. Любое понятие является мысленным обобщением предметов соответствующих типов. При этом между объемом и содержанием понятия имеется закон обратного соотношения: чем больше объем понятия, тем меньше его содержание, и наоборот (Шарапов, 1977).

В геологии понятийными моделями называют такие гносеологические конструкции, в которых в качестве элементов и свойств выступают геологические понятия (минералы, породы, трещиноватость и т. п.), а отношения строятся на обычном разговорном языке.

В качестве отношений могут использоваться отношения порядка (выше — ниже, раньше — позже, сильнее — слабее и т. п.), отношения взаимосвязи (причинно-следственные, часто встречаемые, генетические и т. п.), отношения, задаваемые аксиоматикой или таблицами и др. Примеры понятийных моделей — рабочие геологические гипотезы, схемы последовательности минералообразования, процессов метасоматоза и т. п.

Математические модели — это абстрактные аналоги понятийных моделей, где элементы и свойства заменены математическими категориями — переменными, константами, параметрами. В математических моделях закономерные отношения конструируются с помощью функциональных связей между переменными (детерминированные модели), а часто встречаемые отношения — с помощью статистических связей (статистические модели).

* В приведенном определении моделирования имеется в виду методика исследования.

С точки зрения науки моделирование может иметь своей целью понимание, предсказание или контроль. В геологии это главным образом понимание (объяснение) и предсказание (прогноз) (Харбух, Бонэм-Картер, 1974).

Уже на первых этапах моделирования принципиально важным оказывается вопрос о выборе теоретического или эмпирического подхода. Таким образом, на уровне понятийных моделей представляется наиболее существенным разделение моделей на теоретические и описательные (эмпирические).

Теоретические модели строятся на основании синтеза обобщенных представлений об отдельных процессах и явлениях, основываясь на фундаментальных законах, описывающих поведение вещества и энергии. Для первоначального их вывода не требуется данных о наблюдениях над конкретным объектом.

Эмпирической называется модель конкретного объекта, построенная на материале наблюдений над ним. Она остается заведомо верной лишь в пределах опытных данных, используемых для ее построения. Применение ее для прогнозирования возможно лишь для объектов, абсолютно тождественных объекту, на материалах наблюдения которого была построена эмпирическая модель. Построение эмпирических моделей возможно при отсутствии точных представлений о строении объекта и внутреннем механизме связей в нем. По этой причине они играют большую роль (когда нет научной теории), обеспечивая временный, хотя и неточный, прогноз и способствуя накоплению данных для формирования и подтверждения теорий (Беляев, 1978, с. 8).

Наличие развитой теории, как системы законов, является показателем развития данной области знаний. Основная практическая ценность теоретической системы — возможность проведения экстраполяционных процедур, а также эффективность выбора объектов познания. На современном этапе развития наук о Земле почти все имеющиеся объяснения опираются на априорные, т. е. теоретические модели.

При создании своей теории в любой науке неизбежно заимствование опыта других наук, в первую очередь фундаментальных — физики и химии. Однако использование в геологии теоретических моделей процессов требует их существенной трансформации, извлечения из них таких характеристик и зависимостей между ними, которые учитывают потребность и специфику геологии (Груза, 1977, с. 161).

Использование опыта фундаментальных наук позволяет в ряде случаев конструировать модели природных явлений на математическом языке. Математика, как метод построения и анализа абстрактных моделей, в которых отношения взяты в отвлечении от конкретных форм проявления свойств реальных объектов, может рассматриваться как арсенал уже разработанных конструкций — потенциальных моделей для объектов

различной природы. Естественным является стремление исследователя найти точную модель интересующего его явления среди разработанных методов, которые обеспечивают строгую (формальную) формулировку цели исследования, отсутствие логических ошибок и, следовательно, однозначность получаемого знания об исследуемом объекте.

Возможность применения математики при решении геологических задач определяется в каждом отдельном случае возможностью наиболее точного представления исследуемых черт объекта (элементов, свойств, отношений) в форме математических категорий.

К сожалению, математика не располагает в настоящее время аппаратом, адекватно описывающим свойства большинства сложных геологических, биологических, психологических, социальных объектов. Принципиальную возможность их математического моделирования открывает применение системного подхода, который позволяет представить любое разнообразие природной реальности как упорядоченное единство (систему).

Понятия «модель» и «система» тесно связаны между собой, но не тождественны. Системой является не всякая модель, а лишь формализованная, четко определяемая, создаваемая по определенным правилам познавательная конструкция (Жуков, 1978).

Конструирование системы есть сознательная замена сложного бесконечномерного объекта реальности его абстрактной моделью. Такой объект-заместитель рассматривается как комплекс элементов, взаимосвязанных друг с другом и образующих целостное единство.

Целостное единство понимается в двух аспектах. Во-первых, система не сводится к простой совокупности элементов, и определяющие свойства целого не выводятся из свойств составляющих систему элементов. Во-вторых, система ограничивается в пространстве тем, что взаимодействует с внешним миром как целое.

Определяющими характеристиками системы является субстрат (перечень элементов), свойства (внешние проявления системы, с помощью которых исследователи получают знания об объекте) и связи, соединяющие элементы и свойства в одно целое.

Под структурой понимается обобщенная характеристика системы, фиксирующая выделяемый комплекс элементов и отношения связи между ними, определяющие упорядоченность, организацию системы, а также влияющие на формы ее проявления в окружающей среде как целого.

Каждый объект обладает бесконечным количеством свойств; при моделировании исследователь отбирает существенные, необходимые для решения задачи. В этом смысле конструирова-

ние системы представляет собой форму научной идеализации, упрощения.

Формы проявления системы как целого позволяют разделить системы на статические (не зависящие от времени) и динамические, при исследовании которых рассматривается поведение их во времени.

Модели, конструируемые из особых элементов и позволяющие провести исследование форм проявления объекта как целого, будем называть феноменологическими моделями (Ольшевский, 1973). Феноменологические модели процессов обычно называют функциональными моделями.

Феноменологические модели имеет смысл строить в тех случаях, когда структура исследуемого объекта или не известна, или слишком сложна. При этом элементы феноменологической модели обычно достаточно просты и хорошо изучены, что позволяет учесть априорную информацию и гипотезы об исследуемых чертах реального объекта.

2. ОСОБЕННОСТИ МОДЕЛИРОВАНИЯ В ГЕОЛОГИИ

Применение системного подхода в науках о Земле привело к созданию понятия «геосистема». Геосистемы являются составными и взаимосвязанными частями глобальной системы Земли со всеми оболочками (Беляев, 1978). Геосистемы могут охватывать большее или меньшее число компонентов. В процессе конкретных исследований особое значение приходится иногда придавать функциональной характеристике геосистемы, ограничиваясь рассмотрением какого-либо процесса или группы процессов (Арманд, 1975).

Большинство геосистем относится к разряду плохо организованных (диффузных) систем, в которых невозможно полностью разграничить действия процессов различной физической природы (Налимов, 1971). Огромное число факторов, влияющих на ход процессов в диффузной системе, и невозможность учесть все действующие факторы не позволяют использовать при исследовании подобных систем традиционный путь классического эксперимента*.

При решении такого рода задач одним из ведущих инструментов математического моделирования диффузных систем становится математическая статистика. Наиболее перспективным для большинства геологических дисциплин следует признать статистическое феноменологическое моделирование.

В зависимости от целей и задач геологических исследований объектами моделирования могут быть: 1) отдельные участ-

* Под классическим экспериментом подразумевается исследование функциональных зависимостей между отдельными факторами при искусственной стабилизации всех остальных.

ки земных недр; 2) процесс геологоразведочных работ; 3) геологические процессы, происходящие в недрах земной коры (Каждан, 1974).

В задачах поисков месторождений полезных ископаемых объектом исследований обычно является участок земных недр (и прилегающих к нему частей ландшафтной сферы). Само исследование заключается в описании пространственной изменчивости геологических признаков в пределах этого участка, а результат — в оконтуривании перспективных областей и их оценке. Процедуру моделирования участка можно подразделить на следующие этапы:

1) определение объекта моделирования в земном пространстве и выбор признаков — компонентов геосистемы;

2) выбор пути моделирования. Подбор математической модели;

3) математическое исследование на основании выбранной модели;

4) интерпретация результатов — выделение и описание перспективной области.

Ниже рассматриваются некоторые общие вопросы конструирования понятийной модели (пп. 1 и 2). Вопросы математического исследования объекта и интерпретации результатов (пп. 3 и 4) будут освещены в последующих главах книги.

Определение объекта моделирования

При современных возможностях геологической науки сфера ее непосредственных экспериментальных исследований ограничена пределами так называемой «геологической оболочки» (Круть, 1973, 1978). Верхняя граница последней совпадает с верхней границей атмосферы, нижняя выходит за пределы земной коры — в верхнюю мантию. При моделировании обычно геологическая оболочка, включая в ее составе вещества в твердом, жидком и газообразном состояниях, обычно рассматривается как сплошная среда (Девдариани, 1968).

Характерной особенностью геологической оболочки является неравномерность распределения вещества и разнообразие составляющих ее элементов. Это позволяет представить пространство геологической оболочки в виде совокупности индивидуализированных объектов, отделенных друг от друга геологическими границами.

Весьма существенным для моделирования является вопрос о соотношении дискретности к континуальности (непрерывности) изучаемых объектов.

Категории дискретности и непрерывности отображают существенные свойства, формы существования материи и проявляются самым различным образом. Дискретность — во всякой раздельности, расчлененности, скачкообразности; непрерывность — в сомкнутости; преемственности, постепенности. Пред-

меты и явления обладают свойствами дискретности и свойствами непрерывности. Дискретность и непрерывность существуют только в единстве, но это не исключает возможности выдвижения на первый план одной из рассматриваемых категорий (Червяков, 1978).

Поскольку пространство геологической оболочки в большей своей части включает пространство так называемой географической (ландшафтной) оболочки (Калесник, 1970), или «ландшафтной сферы» (Арманд, 1975), то при геологическом моделировании имеет смысл опираться на представления, уже разработанные для моделей геосистем в ландшафтной сфере.

По представлениям Д. Л. Арманды (1975, с. 28) «Ландшафтная сфера континуальна, но содержит отдельные элементы дискретности». Выделение природно-территориальных комплексов (участков ландшафтной сферы, характеризующихся относительной внутренней однородностью) неизбежно носит субъективный характер, является волевым актом.

В геологии сторонники концепции «естественности» (И. В. Круть, В. И. Драгунов) исходят из представлений о специфичности и целостности геологических объектов, опираясь на определение В. И. Вернадского: «Естественное или природное тело — это всякое природное независимо от нас обособленное от других природных тел и явлений материальное или материально-энергетическое проявление» (Вернадский, 1965). Конкретизируя эти мысли, И. В. Круть (1973, 1978) предлагает называть природным телом любую материальную вещь (или ее фрагмент) с фиксированными пространственными и временными границами, а естественным телом лишь такое природное тело, которое имеет индивидуальную, видовую и родовую таксономическую определенность, специфический состав и структуру, свои пространственные и временные свойства и занимает особое «естественное место» на тех или иных уровнях организации природы. Уровни организации образуют строгую иерархическую систему, так что всякий уровень является и системой, и высшим классом определенной группы естественных тел. Таксономия геовещественных систем геологической оболочки (по И. В. Крутью, 1973, 1978) приведена ниже.

Уровни	Естественные тела
Геосферы первого порядка	Геовещественная сфера (геологическая оболочка)
Геосферы второго порядка	Эндогеосфера (литосфера и верхняя мантия) Экзогеосфера (ландшафтная оболочка)
Ассоциации минеральных масс (и организмов)	Геологические формации (ландшафты), парагенезы горных пород
Минеральные массы	Горные породы, руды, магмы и лавы, почвы, воды и др.
Природные химические соединения	Минералы (и живое вещество)

Представления о естественности природных тел и о наличии жесткой системы уровней организации в строении земного пространства встречают критику в методологической литературе (Еганов, 1971; Груза, 1977; Жуков, 1978 и др.). Однако оппоненты концепции естественности отрицают не реальность природных тел и их границ, а однозначность таксономической схемы И. В. Крутя, которую тем не менее признают привычной и во многом полезной. Нам представляется, что при разделении геологической оболочки для целей моделирования иерархия природных уровней организации, предложенная И. В. Крутем, может быть с успехом использована, так как она отражает опыт многих поколений геологов.

Структурные уровни выделяются и при классификации тел полезных ископаемых. Последовательность природных уровней строения скоплений полезных ископаемых по В. И. Смирнову (1969) и А. Б. Каждану (1974) показана ниже.

Уровень строения тел геологической оболочки	Уровень строения месторождений полезных ископаемых
Ассоциации минеральных масс (геологические формации) Минеральные массы (тела горных пород)	Рудные «поля» Тела полезных ископаемых. Морфологически обособленные участки полезных ископаемых. Локальные обособления полезных ископаемых. Минеральные агрегаты Минеральные зерна и кристаллы полезных ископаемых
Природные химические соединения (минералы)	

Таким образом, чтобы определить объект (участок) исследования в земном пространстве, следует: а) точно представлять его положение в системе геовещественных сфер (относится ли исследуемая область к литосфере или определенной сфере ландшафтной оболочки: почвенной толще, рыхлой подпочве и т. д.); б) представлять степень горизонтальной дифференциации участка на природные тела разного уровня (массивы горных пород — для литосферы; ландшафты — для ландшафтной оболочки). Другими словами, для поисков полезных ископаемых требуется предварительная информация о степени общей дифференциации территории — геологической или (и) ландшафтной. Только наличие такой информации позволяет выбрать при конструировании модели геосистемы признаки, наиболее информативные для поставленной цели.

Отправным моментом в построении модели геосистемы является выбор конечного числа существенных признаков из бесконечного числа возможных. В качестве признака геосистемы при решении поисковых задач обычно выступают вещественные свойства (собственные характеристики) объекта, определение которых дается на субстанциональном языке. В со-

ответствии с поставленной задачей основным предметом исследования является пространственная изменчивость существенных признаков.

Понятие «изменчивость» характеризует сложность строения объекта и выражает внутренние связи между значениями признака, относящимися к разным точкам пространства (Букринский, Коробченко, 1972). Именно в этом понятии реализуется связь между двумя определениями объекта — субстанциональным и пространственно-временным. При этом объектом моделирования является не фактически существующая в природе «абсолютная» изменчивость, а «наблюдаемая изменчивость», отражающая в той или иной степени методику и технику проведения замеров (Четвериков, 1968).

Наглядным изображением наблюдаемой изменчивости является карта — знаковая модель, сущность которой заключается в отображении различий от места к месту, выраженных в количественном или качественном виде. Геолого-математическое моделирование участков геологической оболочки неразрывно связано с составлением карт, которые используются как для представления конечных итогов, так и на промежуточных стадиях обработки. При выборе существенных признаков для моделирования преимущество отдается тем, которые имеют максимальную изменчивость, ибо они наиболее информативны для такой модели, как карта (Харвей, 1974).

Поскольку термин «изменчивость» вводится для описания неоднородности строения геологической оболочки, необходимо четко определить понятие «неоднородность».

Учитывая необходимость изучения неоднородности применительно к широкому классу задач, М. В. Рац (1973) предлагает использовать ее определение, принятое в физике: под однородностью объекта по признаку L понимается независимость признака L в пределах объекта от координат пространства. Ф. И. Козловский (1970) в этом определении подчеркивает то обстоятельство, что понятие «неоднородность» относится к объекту, рассматриваемому как множество составляющих его элементов и характеризующему путем сопоставления этих элементов. При употреблении названного понятия предполагаются выполнимыми следующие операции: 1) разделение объекта на сравнимые части; 2) определение (замеры) значений некоторого свойства для каждой из полученных частей; 3) сравнение частей между собой.

М. В. Рац (1973) для построения структурных моделей геологических объектов в прикладных целях разработал специальную классификацию «уровней неоднородности», которая по существу базируется на уровнях строения геологической оболочки, рассмотренных выше. Предлагается выделить пять уровней (порядков) неоднородности: а) неоднородность реальных кристаллов (IV уровня); б) неоднородность состава и структуры

горной породы (III); в) неоднородность пачки, ритма, слоя пород (переслаивание пород разного состава) (II); г) неоднородность массива пород (геологическое строение массива) (I); д) региональная изменчивость, обусловленная фациальными и формационными различиями (0-й уровень).

Каждый уровень в этой классификации характеризуется своим «элементом неоднородности» — простым, далее неделимым телом (это понятие аналогично «элементарному блоку» в схеме Л. И. Четверикова). В методических целях М. В. Рацем вводятся также понятия «определяющая область» и «элементарный объем». Определяющей областью эксперимента называется часть земной коры, в пределах которой локализируются процессы взаимодействия экспериментальной установки с веществом земной коры; во многих случаях определяющая область совпадает с пробой горной породы. Элементарный объем — это мысленно выделяемая в пределах определяющей области связанная подобласть, существенно меньшая, чем определяющая область, но сохраняющая все ее свойства (Л. И. Четвериков для той же цели ввел близкое по значению понятие «элементарный участок»).

Для учета масштабного эффекта при описании неоднородности геологических тел М. В. Рацем разработана классификация видов неоднородности по отношению размеров элементов неоднородности к определяющей области эксперимента. Выделяются три типа неоднородности, которые оказывают существенное воздействие на значения наблюдаемой изменчивости: 1) ультранеоднородность (неоднородность высшего порядка) с размерами элементов, на несколько порядков меньшими определяющей области; 2) микронеоднородность (эффективная неоднородность), размер элементов которой на один-два порядка меньше размера определяющей области; 3) макронеоднородность (неоднородность низшего порядка), размер элементов которой больше размеров области определения или примерно равен ему (Рац, 1973).

Примером ультранеоднородности являются дефекты кристаллической решетки монокристаллов по отношению к размеру образца горной породы. Ультранеоднородность не препятствует рассмотрению геологического поля как однородной среды; другими словами, в этом случае для поля можно предложить некую эквивалентную макроскопически однородную среду, обладающую в среднем теми же свойствами, что и реальное поле.

Микронеоднородность проявляется, например, в распределении минеральных агрегатов в образце горной породы. Для этого случая характерно небольшое число элементов неоднородности в определяющей области, что обуславливает неполное осреднение свойств в конкретной пробе и вносит элемент случайности в оценку изменчивости поля. Наличие микронеод-

нородности требует применения к изучаемому полю статистических методов анализа.

В качестве примера макронеоднородности можно привести слоистость толщи осадочных пород по отношению к образцу конкретной породы. Статистическая природа этой неоднородности часто вуалируется; она выступает как макроскопическая особенность структуры объекта. Свойства объектов,

обладающих такой неоднородностью, систематически меняются при переходе от одного элемента неоднородности к другому. При дискретной сети опробования макронеоднородности частично усиливают разброс результатов испытаний и частично определяют «закономерное» изменение свойств породы в пространстве. Приведенная классификация иллюстрируется диаграммой (рис. 1), по оси абсцисс которой откладывается линейный размер « u » элементов неоднородности, по оси ординат — линейный размер « v », определяющий области эксперимента. В верхней области ($v \gg u$) неоднородность статистически осредняется. Нижней области ($v \leq u$) соответствующие макроскопические неоднородные объекты: их свойства систематически меняются при переходе от одного эле-

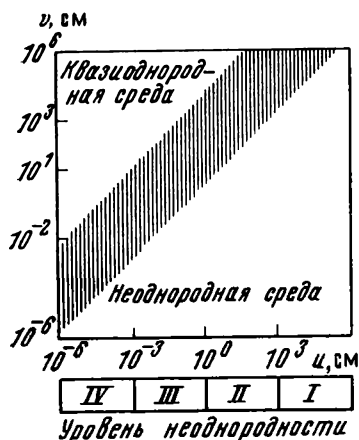


Рис. 1. Диаграмма неоднородности горных пород в массиве (по М. В. Рацу)

мента неоднородности к другому. Заштрихованное поле отвечает отношению $v > u$. При характерном в этом случае небольшом числе элементов неоднородности в определяющей области их свойства не осредняются в достаточной степени и объект отличается сильным разбросом свойств (Рац, 1973, с. 21).

Эта классификация типов неоднородности в соответствии с масштабом опробования дает ключ к определению двух типов изменчивости, выделение которых весьма важно для моделирования: 1) случайной, хаотической и 2) закономерной, пространственно коррелированной. Хаотическая изменчивость включает микро- и частично макронеоднородность; закономерная — целиком лежит в области макронеоднородности.

Следует рассмотреть также влияние шага опробования на картину наблюдаемой изменчивости. П. Л. Каллистов (1956) отметил, что при фиксированном размере элементов неоднородности закономерность в их размещении выявляется лишь в случаях, когда шаг опробования (среднее расстояние между пробами) меньше размеров элементов неоднородности. Таким образом, принятие «закономерной» или «случайной» модели неоднородности зависит от масштаба исследования. При фиксиро-

ванном шаге опробования можно выделить все те элементы макронеоднородности, размер которых больше принятого шага. Эти элементы макронеоднородности могут быть разделены по размерам.

Предложенные классификации типов неоднородности могут быть использованы при построении конструктивных моделей для описания структуры геосистем. Согласно М. В. Рацу, участок земной коры считают обладающим макроструктурой, когда он макронеоднороден по отношению к принятому размеру определенной области экспериментов. Элементы макронеоднородности образуют при этом систему, т. е. множество элементов, на котором заданы некоторые отношения, а совокупность этих отношений образует макроструктуру рассматриваемого участка. Под микро- или ультраструктурой подразумевается совокупность отношений, определенных соответственно на множестве элементов микро- или ультраонеоднородности. Массив горных пород макроскопически может быть как «структурным», так и «бесструктурным», однако он всегда будет обладать микро- и ультраструктурами.

Микро- и ультраструктуры практически могут описываться только на языке статистических моделей. Для макроструктур (когда система содержит небольшое количество элементов) возможны различные способы описания, в том числе индивидуализация каждого элемента (Рац, 1973, с. 23—25).

Как известно, понятию «закономерная изменчивость» в задачах геологического моделирования придается обычно генетический смысл. Закономерные изменения признаков в статистической модели интерпретируются как отображение, как «след» энергетических полей, определяющих процесс его образования (Вистелиус, 1963, а; Бондарик 1971). Для такой интерпретации, вообще говоря, необходимо исследование однородности или неоднородности, отражающих существенные свойства объекта независимо от способа или точности измерений. Это возможно в том случае, если размеры выделяемых элементов обусловлены природой величины, а не разрешающей способностью применяемых методов (Козловский, 1970).

Таким образом, моделирование пространственной изменчивости геологической оболочки предполагает введение (хотя бы априорное) представления о структуре рассматриваемого участка и о размерах структурных элементов разных уровней. При этом подразумевается возможность индивидуализации элементов хотя бы одного из структурных уровней в виде обособленных геологических объектов.

Индивидуализация объекта в геометрическом пространстве в геологии по традиции реализуется в понятии «геологическое тело». На интуитивном уровне геологическое тело определяется как связанная область, занятая объектом с определенными свой-

ствами, отличными от других соседних областей. Формальное же определение базируется на введенном ранее понятии «геологический признак». Геологическое тело определяется как область непрерывного развития геологического признака, а геологические границы — как поверхности, при переходе через которые значения признаков претерпевают разрыв (Геология и математика, 1967).

Приведенное определение связывает два аспекта геологического тела: вещественный (определяемый в признаковом пространстве) и геометрический (определяемый в геометрическом пространстве). Эта двойственность понятия, упомянутая в начале данного раздела, особо обсуждалась в работе Ю. А. Воронина и Э. А. Еганова (1974), где геологические тела определены как множества точек, заданных одновременно в признаковом и геометрическом пространствах. С учетом этого определения названные авторы дают классификацию геологических задач, подразделяемых на элементарные, простые и сложные.

Формализованное представление о строении геологических тел, как о ряде последовательных уровней, состоящих из комплекса условно однородных геологических элементов, дается в работе Л. И. Четверикова (1968). Автор вводит понятие «элементарный блок», обозначающее геологический элемент, который в процессе изучения рассматривается как простое геологическое тело, как бы лишенное структуры (на данном этапе изучения внутри тела нельзя выделить геологических элементов, из которых оно состоит).

Характеристика пространственной изменчивости участка геологической оболочки путем его элементаризации, разбиения на индивидуальные геологические тела, опирается на представления о дискретности геологической оболочки. При моделировании континуальности, непрерывности ее строения вводится представление о «геологическом поле» исследуемого признака. Поскольку это понятие является одной из основ математического описания пространственной изменчивости, следует остановиться на определении поля более подробно.

Основным свойством поля является возможность определения явления во всех точках исследуемой области. Используя опыт геофизиков, оперирующих с физическими полями (геоэлектрическим, гравитационным и др.), Г. К. Бондарик ввел в науку понятие о геологических полях показателей состава, состояния и свойств горных пород (Бондарик, 1971). Понятие «геологическое поле» чаще всего относится к геологическим признакам, имеющим сплошное распространение. При конструировании модели необходимо перейти к математическому представлению: поле — функция, определенная на некоторой области пространства.

Обычно геологическое поле задается в пределах геологического тела для характеристики его изменчивости. В связи с

этим существенным моментом является предварительная оценка участка с точки зрения принадлежности его геологическому телу определенного структурного уровня. Если в пределах участка на основании априорных представлений может быть выделено несколько геологических тел заданного уровня, то предварительно проводят их границы, а затем моделируют пространственную изменчивость внутри каждого из них. Часто эти тела выделяются по сумме признаков, не входящих в число моделируемых, но могущих быть так или иначе с ними связанными. Так, исследование изменчивости инженерно-геологических характеристик проводится в границах тел горных пород, а исследование характеристик состава почв — в границах элементарных ландшафтов.

Разделение поля на основании априорной информации упрощает задачу и в ряде случаев сокращает число необходимых операций. Однако не исключен и другой путь: проведение границ геологических тел на основании исследования изменчивости участка. Этот способ моделирования изменчивости используется в основном для тех задач, в которых не установлено априорных связей между изменчивостью признаков и границами визуально выделяемых природных тел. В таких случаях проведение границ в геологическом поле превращается в самостоятельную задачу.

Выбор пути моделирования

При описании пространственной изменчивости выбранной группы признаков в пределах участка может применяться довольно разнообразный математический аппарат. Подбор математической модели и подход к интерпретации данных во многом зависят от выбранного пути моделирования.

Нам представляется, что среди существующих многообразных подходов к моделированию пространственной изменчивости можно выделить два главных направления. Первый путь, динамический, основывается на априорных представлениях о механизме формирования исследуемого участка, т. е. предполагает прямое использование теоретических моделей. Второй, диагностический, путь позволяет представить модель изменчивости в виде некоторой конструкции, для которой привлечение гипотез о механизме образования объекта необязательно.

В основе динамического пути моделирования лежат генетические и исторические представления геологии о причинно-следственной зависимости вещественных свойств природных тел от энергетических факторов их формирования. А. Е. Ферсман (1934) образно выразил эту мысль, предлагая рассматривать каждое геологическое тело как продукт определенных химических реакций в определенных термодинамических условиях.

Считается, что в строении, составе и свойствах геологической оболочки отражается «память» — закодированная информация о процессах, происходивших в прошлом. Поэтому понятие «природный процесс» является фундаментальным, весьма важным для описания геосистем. Согласно определению Ф. Энгельса, процесс представляет собой универсальное взаимодействие, в котором причина и следствие постоянно меняются местами. Природный процесс может быть определен как перестройка материальной системы в результате цепи последовательных или сопряженных взаимодействий, как смена ряда состояний и приобретение новых свойств той материальной системой, в которой он протекает (Арманд, 1975, с. 33).

С понятием «процесс» неразрывно связано представление о механизме явления как системе взаимосвязанных факторов, способных выступать в роли рычагов действительного или мысленного управления ходом соответствующего процесса или (как минимум) предвидения его результата. Формализованные геологические механизмы должны опираться на законы физики, но не сводиться к ним (Жуков, 1978).

Зависимость вещественного состава геологических объектов от природных процессов давно сформулирована в геологии в виде группы понятийных моделей типа «процесс — результат». Этот подход состоит в выборе модели-гипотезы, которую исследователь считает наилучшей с точки зрения описания изучаемого явления (Крамбейн, Грейбилл, 1969). Подбор математических аналогов для таких моделей в форме, наиболее отвечающей их физической природе, определяется обычно как решение прямых задач геологии. Комплекс прямых задач с обоснованным решением составляет важный арсенал геолого-математического моделирования и является главной базой для генетической интерпретации вещественного состава геологических объектов. Конструирование моделей пространственной изменчивости на основе известных моделей геологических процессов относится к классу обратных задач геологии. При моделировании пространственной изменчивости используются особенности природных процессов, благодаря которым удается выявить в пространстве аналоги временных стадий исследуемого процесса.

Согласно классификации геологических задач Ю. А. Косыгина и В. А. Соловьева (1969), решение прямых задач следует отнести к кругу вопросов динамической геологии, а решение обратных задач — к исторической (ретроспективной) геологии. Таким образом, названный выше динамический путь моделирования использует задачи и методы этих областей геологии, отличительной особенностью которых является учет фактора времени — физического или геологического.

Диагностический путь моделирования использует методы статической геологии, целью которой считают предсказание со-

става и расположения геологических тел на основе известных связей без прямого учета фактора времени (Воронин, Еганов, 1974). Это достигается путем индивидуализации в пространстве на заключительном этапе моделирования объектов, обладающих заданным набором свойств. Априорная информация при этом способе моделирования должна быть представлена в виде определенной диагностической системы, отражающей устойчивые связи между природными объектами и их свойствами.

Таковы общие особенности конструирования модели пространственной изменчивости геологических тел на этапах, предшествующих математическому исследованию.

Сформулируем условия применения модели поля к исследованию геологических объектов.

1. Объектом моделирования должен быть участок геологической оболочки, который рассматривается как единое геологическое тело (или часть его) определенного структурного уровня. В результате исследования выявляется неоднородность строения этого тела по одному или нескольким признакам.

2. Признаки, используемые при моделировании, должны обладать следующими свойствами: а) возможностью определения в любой точке изучаемого объекта; б) территориальной изменчивостью, позволяющей графически представить пространственное распределение признака в виде карты.

3. Для корректной постановки задачи, выбора пути моделирования и интерпретации результатов необходимо располагать априорными представлениями (на уровне теорий или рабочих гипотез): а) о принципах дифференциации геологических тел на тела низшего порядка, т. е. об иерархии структурных уровней тел, выделяемых на основании выбранного комплекса признаков; б) о геологических процессах, обусловивших пространственную изменчивость признаков.

Степень точности и достоверности этих априорных представлений зависит от разработки теоретических основ в конкретной отрасли геологических наук.

3. ГЕОХИМИЧЕСКОЕ ПОЛЕ. ОСНОВНЫЕ ПОНЯТИЯ И ОПРЕДЕЛЕНИЯ

Признаки геохимического поля

Геохимическим полем называют такую разновидность геологических полей, где в качестве признаков рассматриваются показатели химического состава исследуемого объекта. Обычно химический состав представляется в виде совокупности содержаний химических элементов в исследуемой фазе земного вещества. Содержания химических элементов, выраженные в весовых процентах, и являются исходными количественными оценками признаков геохимического поля.

При моделировании кроме исходных оценок могут использоваться различные производные от них — нормированные показатели, суммарные характеристики, отношения содержаний и т. д.

В основе представлений о геохимическом поле лежит закон повсеместного распространения всех элементов периодической системы Менделеева в любом объеме земного вещества (так называемый закон Кларка — Вернадского, по Н. И. Сафронову). Наиболее точным и глубоким выражением этого закона до сих пор остается образное выражение В. И. Вернадского: «В песчинке или капле, как в микрокосмосе, отражен общий состав космоса».

В развитие этого закона Н.И. Сафроновым (1971) сформулировано понятие о «всеобщем геохимическом поле рассеяния элементов в земном пространстве». Согласно современным представлениям, главной причиной повсеместного распространения элементов является всеобщая самодиффузия элементов в космическое время в соответствии с основным законом термодинамики. Это позволяет говорить о гомогенности земного вещества в пределах геологической оболочки. Средний химический состав земной коры является важной планетарной константой, знание которой необходимо для понимания многих глобальных процессов (Ронов, Ярошевский, 1967).

Эмпирическим обобщением сведений о содержаниях элементов в геологической оболочке является система кларков.

Как известно, кларком называют среднее содержание элемента в рассматриваемой геосфере. Характерной геохимической особенностью земной коры является резко различная распространенность слагающих ее элементов (диапазон изменения кларков от десятков процентов (кислород) до долей (10^{-11}) процента). В основном кларки не зависят от химических свойств элементов, т. е. от строения электронных оболочек атомов, которые определяют эти свойства. В то же время отчетливо устанавливается связь кларков со строением атомного ядра: в земной коре преобладают элементы с легкими ядрами, содержащими четное число протонов (четные порядковые номера) и т. д.

В. И. Вернадским предложено было разделить элементы по их распространенности на декады, отвечающие порядковой величине их массовых концентраций. Эта классификация положена в основу деления элементов на главные или петрогенные (присутствуют в природных образованиях в количествах 1% и выше), второстепенные (десятые доли процента) и микроэлементы (распространенность не превышает 0,1%) (Беус и Григорян, 1975).

При характеристике геохимического поля большое значение имеет учет форм существования элементов.

В геохимии принято называть минеральным существование элемента в виде собственных минералов, т. е. в виде природных химических соединений. Безминеральным называют существование элемента в виде тех или иных примесей в минералах чуждого ему состава. Любой элемент встречается в литосфере в безминеральном виде, однако для одних элементов

Таблица 1

Геохимическая классификация элементов земной коры
(по Беусу и Григоряну, 1975)

Группы элементов по геохимическому сходству	Распространенность элементов в земной коре			
	главные	второстепенные	Микроэлементы	
			минералогенные	рассеянные
Оксифильные: литофильные	O, Si, Al, Fe, Mg, Ca, Na, K (Fe)	Mn, Ti, P, (C)	Li, Be, B, F, Sr, Ba, Y, TR, Zr, Nb, Ta, Sn, Cs, W, Th, U V, Cr, Co, Ni	Ga, Ge, Rb, Hf, Sc, (Ti), Ra
сидерофильные		—		—
Сульфидофильные (халькофильные)	—	—	S, Cu, Zn, As, Se, Mo, Ag, Sb, Fe, Hg, Pb, Bi	(Ga), (Ge), Cd, In, Re, Tl
Благородные	—	—	Pd, Os, Ir, Pt, Au	Ra, Rh
Гидрофильные	(O)	H	Cl, Br, I, (S)	
Атомофильные	(O)	C	He, N, Ne, Ar, Xe, Rn	

эта форма существования является основной, для других второстепенной (Сафронов, 1971).

В связи с этим А. А. Беусом предложено разделение химических элементов на минералогенные и рассеянные.

Поведение элементов в зависимости от их химических свойств нашло отражение в многочисленных геохимических классификациях. Наиболее известной является классификация В. М. Гольдшмидта, положенная в основу многих последующих схем. В табл. 1 приводится эта классификация с дополнениями и изменениями А. А. Беуса.

Современное состояние геохимического поля является лишь временной стадией длительных процессов перегруппировки элементов, совершаемой путем миграции. А. Е. Ферсман определял миграцию как комплекс процессов, ведущих к пространственному перемещению химического элемента, с изменением его содержания в данном участке, с накоплением или рассеянием в других участках. В развитие этого определения В. Л. Анохиным (1974) предложена следующая формулировка: миграция — это комплекс процессов перераспределения химических элементов (или их изотопов) в пространстве и во времени. Миграция элементов обусловлена их химическими свойствами, т. е. строением электронной оболочки атомов. В то же время законы миграции во многом (но не полностью) определяются кларками элементов. Особенно следует учитывать роль кларков при анализе гипергенных процессов. Эти положения отражены в основном геохимическом законе, законе Гольдшмидта, который на современном уровне развития науки формулируется следующим образом: кларки элементов в земной коре в основном зависят от строения их атомных ядер, а миграция — от строения электронных оболочек и ядра (Перельман, 1968).

Разделение элементов по величине кларков отражает их роль в миграционных процессах. Главные (и отчасти второстепенные) элементы, слагающие основную массу горных пород, являются своего рода геохимическими «диктаторами», определяя условия миграции других элементов (окислительно-восстановительные, щелочно-кислотные и др.). Роль микроэлементов в определении условий среды ничтожна. В качестве примера можно сравнить геохимическую роль натрия с его химическими аналогами — литием, рубидием, цезием.

Геохимическая картина Земли зависит как от внутренних свойств атомов и их ядер, так и от внешних — физических, химических, геологических, биологических — факторов. Сочетание внешних факторов создает так называемую геохимическую обстановку миграции, в которой протекают геохимические процессы.

Каждый процесс отвечает условиям, благоприятным для миграции определенной группы химических элементов. Элементы, ионы и соединения, миграция которых определяет главные геохимические особенности данного процесса, называют типоморфными. Типоморфными могут быть только главные элементы, обладающие высокими кларками, или редкие элементы, накапливающиеся в данной системе (например, медь в медных месторождениях).

Дифференциация геохимического поля. Рассеяние и концентрация

Под воздействием геохимических процессов происходит перераспределение химических элементов, приводящее к рассеянию или концентрации химического элемента в исследуемом объекте. Количественной мерой рассеяния элемента является его кларк. А. Е. Ферсман назвал рассеянным такое существование элемента в природе, при котором его содержания не превышают кларка. Концентрирование элементов в определенных участках земного пространства — явление, обратное рассеянию, приводящее в предельных случаях к формированию месторождений.

Понятия «рассеяние» и «концентрация» чаще всего применяются к микроэлементам, для которых отмечено различие форм существования, а также значительный контраст содержаний между обычным состоянием в земной коре и месторождениями. Поэтому Н. И. Сафронов (1971) представляет геохимическое поле литосферы как преимущественно безминеральное поле рассеяния многочисленной группы элементов внутри в основном минерального 8-элементного «остова», сложенного O, Si, Al, Fe, Ca, Na, K, Mg. Предлагается различать первично конституциональное (сингенетичное) и вторично наложенное (эпигенетичное) рассеяние элементов.

Сингенетичное рассеяние возникает в его носителе — породах, минералах одновременно с образованием последних и входит в состав носителя как его неотрывная составляющая. Эпигенетичное рассеяние возникает в носителе позже образования последнего в результате наложения под влиянием причин последующего порядка.

Таким образом, химический состав оболочки Земли наряду с качественным постоянством отличается количественной неоднородностью, выраженной в изменчивости содержаний химических элементов в разных участках поля. Рассмотрим проблему дифференциации геохимического поля в связи с геологическими границами.

Индивидуальность геологических тел низших уровней (минералов, горных пород и рудных тел, элементарных ландшафтов и их ярусов) определяется их вещественными признаками, среди которых одно из ведущих мест занимает химический состав.

Индивидуальность химического состава особенно ярко выражена у элементарных геологических тел — минералов, представляющих собой природные химические соединения, но проявляется и на уровне более сложных тел, которые являются закономерными минеральными ассоциациями. Отсюда следует, что границы естественных геологических тел во многом опреде-

ляют дифференциацию геохимического поля. Это положение можно сформулировать так: каждому естественному геологическому телу соответствует определенный участок геохимического поля, отличный по ряду признаков от других участков (соответствующих геологическим телам того же уровня). Это представление, выраженное в явной форме или интуитивно подразумеваемое, обычно лежит в основе количественных геохимических построений. Свидетельство тому — многочисленные исследования, посвященные геохимической характеристике минералов, горных пород, рудных месторождений, геологических формаций, геохимических ландшафтов и т. д. и разработка системы соответствующих количественных оценок.

Разделение геохимического поля в соответствии с геологическими границами отражает разнообразие условий формирования геологической оболочки в разных ее частях. Однако эта дифференциация не исчерпывается границами тел горных пород. Как известно, индивидуальность химического состава горной породы определяется по содержаниям петрогенных, т. е. главных элементов. Элементы-примеси, микроэлементы, для которых наиболее типичной формой существования является безминеральная, связаны с распределением главных элементов не однозначно. Законы количественного распределения микро- и макроэлементов в породе являются предметом изучения специальных отраслей науки: петрохимии и геохимии микроэлементов. Это различие петрохимического и геохимического подходов специально оговаривается и при создании моделей (Петров, 1971). Поскольку при решении поисковых задач исследуется в основном поведение микроэлементов, связанных с процессами рудообразования и способных к эпигенетичному рассеянию, нам следует уточнить вопрос о дифференциации геохимического поля геологической оболочки.

Для дальнейшего изложения введем условный термин «геохимическое тело» (ГХТ), означающий участок геологической оболочки, отличный от других участков по рассматриваемому комплексу геохимических признаков; например, по содержаниям некоторой группы микроэлементов. При этом мы воспользовались опытом Г. К. Бондарика (1971), который предложил при пространственном моделировании выделять «инженерно-геологические тела» на основании определенного набора инженерно-геологических признаков. В геохимической литературе нам не удалось обнаружить аналогичного термина, который обозначал бы это понятие для любой части геологической оболочки. Пожалуй, наиболее близко по смыслу понятие «геохимические системы», введенное А. Е. Ферсманом для обозначения геохимических явлений, связанных с геологическими процессами, и включающее одновременно геохимические ассоциации элементов и соответствующие им части пространства — провинции, области и т. д. (Ферсман, 1934, с. 102).

В современной геохимии представление о геохимических телах имеет терминологическую определенность на высоких иерархических уровнях, соответствующих геологическим формациям и их комплексам. Широко применяется термин «геохимическая провинция», относящийся к крупным структурным элементам земной коры, которые характеризуются общими чертами геологической эволюции, отраженными в специфике химического состава (Беус и Григорян, 1975; Левинсон, 1976). Для геохимических поисков представляет смысл выделение геохимических тел на уровне горных пород.

Для определения свойств геохимических тел используем понятие «геохимическая ассоциация», предложенное А. Е. Ферсманом в развитии идей В. И. Вернадского о парагенезисе элементов. По А. Е. Ферсману, геохимические ассоциации — это такие сообщества элементов, которые исторически и закономерно сложились на тех или иных участках земной коры и характеризуются качественно-количественными особенностями. В этом определении каждая геохимическая ассоциация связывается с конкретным природным телом: существование ассоциаций отражает дифференциацию геохимического поля, обусловленную природными факторами.

В настоящее время термин «геохимическая ассоциация» употребляется в литературе в самом широком смысле для обозначения групп элементов, участвующих в тех или иных процессах. Пространственный аспект понятия подчеркивается далеко не всегда. Б. И. Смирнов (1975) предлагает определить геохимическую ассоциацию как «группу сонаходящихся в конкретном геологическом объекте элементов или минералов, объединенных идентичностью геологической истории в период формирования объекта и в связи с этим характеризующихся сопряженностью и однонаправленностью изменения их содержаний».

Для целей моделирования это определение нуждается в уточнении и конкретизации. Поскольку геохимическая ассоциация выступает в качестве группы признаков, определяющих отличие химического состава одного природного тела от других, то в определение ее должны входить конкретные значения (или диапазоны значений) содержаний каждого элемента, а также отношения содержаний разных элементов.

Мы предлагаем назвать геохимической ассоциацией совокупность группы элементов, характеризующую специфические особенности элементарного геохимического тела (т. е. рассматриваемого в данном исследовании как однородное), отличающие его от других природных тел того же ранга. Количественная характеристика ассоциации включает: 1) интервалы значений содержаний каждого элемента, отражающие специфический уровень содержаний в период формирования тела или его эпигенетического преобразования; 2) устойчивые отношения между содержаниями элементов.

Парагенетической (типоморфной) геохимической ассоциацией будем называть группу элементов, характеризующую особенности состава природного тела, со сложной структурой и закономерной пространственной изменчивостью геохимических характеристик. Количественная оценка сложной ассоциации включает: 1) интервалы значений содержаний каждого элемента, входящего в ее состав; 2) оценки типа и силы связи между элементами; 3) способ разбиения сложной ассоциации на подсистемы — простые ассоциации сонахождения.

Представление о парагенетических ассоциациях вводится для характеристики объектов, обладающих генетическим единством, но сложным пространственным строением. При моделировании геохимического поля это понятие используется для определения комплекса признаков, имеющих закономерную пространственную изменчивость.

4. СВОЙСТВА ГЕОХИМИЧЕСКИХ ПОЛЕЙ, ИСПОЛЬЗУЕМЫЕ В ЗАДАЧАХ ЛИТОХИМИЧЕСКИХ ПОИСКОВ

В данном разделе рассматриваются существующие в геохимии представления о формировании и свойствах конкретных геохимических полей, исследуемых в процессе литохимических поисков рудных месторождений. При написании в качестве источников использованы фундаментальные отечественные работы последних лет, в которых теоретические основы геохимических поисков изложены на современном уровне (Гинзбург, 1957; Перельман, 1968; Сафронов, 1971; Беус, Григорян, 1975).

При литохимических поисках рудных месторождений объектом исследований является так называемая «гранитная оболочка» литосферы и примыкающие к ней части зоны гипергенеза, которые составляют нижние ярусы ландшафтной оболочки.

Для относительной оценки содержания элементов в природном объекте применяется понятие «кларк концентрации» — отношение содержания элемента в данном объекте к его кларку. Это понятие имеет большой смысл при поисках полезных ископаемых.

В зависимости от задач и масштаба исследований при определении степени рассеяния или концентрации вещества наряду с кларком геосферы используется понятие «региональный (местный) кларк».

При решении конкретных задач поисковой геохимии для количественной характеристики содержаний элементов в сравнении с кларком обычно используют понятия «фон» и «аномалия».

Понятие «геохимический фон» аналогично термину «нормальное сингенетичное рассеяние», по Н. И. Сафронову. Нормальное рассеяние отличается сохранением однообразно низ-

ких содержаний рассеянных элементов, а также видов и форм их существования во всех пределах рассматриваемого объекта. Локально выраженные знакопеременные градиенты содержаний элементов отсутствуют, кроме скачков на контакте различных сред. Могут наблюдаться региональные градиенты для отдельных элементов или их групп.

Сформированные в различной геохимической обстановке разные типы горных пород характеризуются специфическими геохимическими ассоциациями («типические ассоциации», по А. Е. Ферсману).

Концентрирование элементов в результате магматических, постмагматических, осадочных и метасоматических процессов приводит к формированию месторождений. В строении участков рудной минерализации можно выделить рудную и ореольную части. Для многих типов месторождений минеральные агрегаты рудных тел имеют четкие пространственные границы и соответствующие им ГХТ могут быть оконтурены по визуальным признакам. Обычно строение рудных тел характеризуется сложными сочетаниями рудных и сопутствующих им жильных минералов, соотношение между которыми колеблется в широких пределах. Важной особенностью геохимической структуры рудных тел является зональность распределения элементов. По В. И. Смирнову, порядок эндогенной зональности определяется масштабами ее проявления; существует зональность рудных поясов, рудных «полей» и локальная зональность рудных тел.

Первичные ореолы, т. е. участки околорудного пространства, обогащенные (или обедненные) определенным комплексом элементов в процессе рудообразования, всегда сингенетичны с рудными телами и представляют собой их естественное продолжение. По отношению к рудовмещающим породам они могут быть и сингенетичными (в магматических и осадочных месторождениях), и эпигенетичными (в постмагматических месторождениях). Первичные ореолы чаще всего не имеют четких пространственных границ с вмещающими породами, и оконтуривание их ГХТ в пространстве является важной задачей геохимических поисков.

Учение о геохимии первичных ореолов сформировалось в последние 10—15 лет в связи с работами Л. Н. Овчинникова, С. В. Григоряна, Е. М. Янишевского, И. И. Сафронова, А. П. Соловова, Э. Н. Баранова и др. За эти годы существование первичных ореолов доказано для всех типов коренных рудных месторождений: эндогенных (магматических, пегматитовых, карбонатитовых, скарновых, гидротермальных) и экзогенных (осадочных). Существование ореолов метаморфических месторождений допускается по аналогии. Однако закономерности строения и особенности формирования ореолов изучены главным образом для постмагматических — пегматитовых и гидротермальных месторождений.

Элементный состав ореолов, наследующий состав источника рудообразования, является многокомпонентным, качественно сходным для разных по составу и происхождению постмагматических месторождений.

По Н. И. Сафронову, в составе ореолов доказано присутствие всех 58 главных рудообразующих, металлических и металлоидных элементов, не считая обычных петрогенных. Специфика месторождений проявляется в количествах каждого элемента и в соотношениях их содержаний.

В методических рекомендациях («Геохимические методы при поисках эндогенных рудных месторождений», 1974) приводится перечень основных элементов-индикаторов постмагматических месторождений — Li, Rb, Ba, Sb, As, Hg, Cd, Ag, Pb, Zn, Au, Cu, Bi, Ni, Co, Mo, U; Sn, Be, W. Многие из них являются «сквозными», т. е. служат индикаторами различных по составу рудных месторождений.

Линейные размеры ореолов весьма различны и колеблются от долей метра до нескольких сотен метров. Это зависит от вмещающих пород и их состояния, от залегания рудных тел и путей образования ореолов. По существующим представлениям особенно больших размеров достигают инфильтрационные ореолы вдоль ослабленных зон; диффузионные ореолы в плотных породах имеют значительно меньшие размеры.

При определении геометрических размеров первичного ореола следует иметь в виду условный характер его внешней границы, которая при существующей методике определения зависит от чувствительности и точности анализа проб, от абсолютного уровня и степени постоянства местного геохимического фона. В связи с этим уместно говорить об «эффективных размерах» аномальных ГХТ — ширине, протяженности по простиранию и восстанию рудного тела (Соловов, 1966).

Строение ГХТ участка рудной минерализации характеризуется наличием явных градиентов концентраций, отражающих изменение содержаний элемента-индикатора от рудного тела к периферии ореола. Поэтому аномальные ГХТ, в отличие от фоновых, характеризуются не средним содержанием элемента, а его общим количеством в пределах различных сечений тела. Эта оценка определяет так называемую продуктивность аномалии. На практике величина продуктивности чаще всего выражается в линейных метропроцентах ($m\%$), характеризующих сечение ГХТ по разведочной линии. Показатель продуктивности $m\%$ вычисляемый за вычетом геохимического фона, характеризует количество элемента, привнесенное и отложенное в данном сечении аномалии в процессе эндогенного рудообразования (Соловов, 1966; «Инструкция...», 1965). По А. П. Соловову, анализ распределения показателя $m\%$ по глубине позволяет наиболее четко и объективно определить зональность данного участка рудной минерализации.

Зональность первичных ореолов, как и зональность рудных тел, определяется комплексом внутренних и внешних факторов миграции в рудном процессе. В пределах одного ГХТ зональность ореола в целом соответствует зональности рудного тела. Однако опыт показывает, что зональность геохимических ореолов по сравнению с рудными телами более универсальна и контрастна, что, по-видимому, определяется более стандартными условиями отложения вещества в околорудном пространстве. Это позволило выявить в строении ореолов ряд устойчивых закономерностей, применимых к широкому классу постмагматических месторождений.

Наиболее устойчивой и хорошо изученной характеристикой ореолов является осевая зональность, совпадающая с направлением движения рудообразующих растворов (в случае крутопадающих рудных тел ее называют вертикальной). Сравнительное изучение первичных ореолов гидротермальных месторождений разных типов показывает универсальный характер осевой зональности элементов. На основе обобщения результатов исследования большого числа гидротермальных месторождений получен следующий эмпирический ряд зональности: Ba—(Sb, As¹, Hg)—Cu¹—Cd—Ag—Pb—Zn—Sn—Au—Cu²—Bi—Ni—Co—Mo—U—(Sn², As²)—Be—W.

Двойственное положение некоторых элементов в зональном ряду обусловлено наличием нескольких минеральных форм их нахождения в ореолах, причем эти формы различным образом распределены в пространстве. В целом эмпирический ряд зональности соответствует теоретическим представлениям о миграционной способности металлов и термодинамической устойчивости их сульфидных комплексов. Это позволяет рассматривать приведенный ряд как закономерно обусловленный изменениями внутреннего равновесия рудообразующего раствора (Овчинников, Григорян, 1970; «Геохимические методы...», 1974).

Геохимические аномалии в литосфере могут быть связаны не только с участками рудной минерализации, но и с участками или зонами рассеянной минерализации (ЗРМ), в которых отсутствуют признаки концентрированного оруденения (минералы, содержащие рудные компоненты, рассеяны во всей массе породы и не обнаруживают тенденции к сгущению). Разбраковка ЗРМ от близких к ним по геохимической структуре надрудных геохимических ореолов рудных тел является одной из важных задач геохимических поисков. К числу критериев разбраковки относят наличие у ЗРМ в любом сечении постоянного и более широкого круга элементов-индикаторов, а также отсутствие в их строении контрастной осевой зональности («Геохимические методы...», 1974).

Аномалии в геохимическом поле зоны гипергенеза представлены прежде всего вторичными ореолами рудных месторождений. Для классификации ореолов существенное значение

имеет определение роли механической или солевой составляющей рассеяния в формировании ореола. Ореолы существенно механического и механического рассеяния сингенетичны по отношению к ореоловмещающей среде и тесно связаны с соответствующими типами рыхлых образований. Ореолы солевого рассеяния эпигенетичны по отношению к вмещающей среде и могут быть обнаружены в образованиях самого различного генезиса: в пологозалегающих толщах аллохтонного материала мощностью до нескольких десятков метров (Саэт, Несвижская, 1975), а также в трещиноватых и пористых разностях коренных пород.

Для солевых ореолов, сопровождающих зоны окисления сульфидных месторождений, характерна ясно выраженная горизонтальная и вертикальная минералого-геохимическая зональность, обусловленная физико-химическими свойствами форм миграции элементов-индикаторов. При этом зональность гипергенного перераспределения рудных элементов в условиях повышенных температур и давлений близка к зональности эндогенных ореолов сульфидных месторождений (Голева, 1972).

В почвах в зависимости от типа миграции рудного вещества формируются остаточные или наложенные солевые ореолы (последние чаще всего в гидроморфных почвах). При этом часто почвенные ореолы, особенно в верхних горизонтах, связаны с биогенными процессами. Элементами-индикаторами в ореолах почв и торфяников являются: Be, Co, Ni, Zn, Ge, As, Cd, Sn, Pb, V, Ti, Ag, Au, Ba, Mn, Mo, способные к накоплению в форме труднорастворимых органических кислот.

А. П. Соловов (1963) разработал классификацию вторичных ореолов, в основу которой положено их разделение на открытые, т. е. выходящие на дневную поверхность, и закрытые (погребенные), развитые на некоторой глубине от поверхности. В зависимости от характера вмещающей толщи и условий формирования вторичные ореолы делятся им на остаточные и наложенные. Среди открытых наложенных ореолов автор различает диффузионные и аккумулятивные, среди закрытых остаточных — выщелоченные и погребенные.

Перечисленные выше представления Н. И. Сафронова и А. П. Соловова должны быть положены в основу выделения аномальных ГХТ в зоне гипергенеза. Однако при этом следует учитывать тот факт, что вторичные ореолы являются сложными и в ряде случаев генетически неоднородными природными образованиями. На полигенетичность ореолов рассеяния впервые обратил внимание Ю. В. Шарков (1971), который предлагает выделять в пределах ГХТ ореолов рассеяния их структурные элементы, так называемые элементарные ореолы, каждый из которых заключен в генетически однородных континентальных отложениях или почвах. Такой подход требует совместного изучения ореолов и ореоловмещающей среды, т. е.

рыхлых отложений, что особенно важно для сингенетичных по отношению к этой среде ореолов существенно механического и механического рассеяния.

При анализе ГХТ остаточных вторичных ореолов следует учитывать, что они приближенно повторяют контуры соответствующих рудных тел и их первичных ореолов со смещениями и искажениями, обусловленными гипергенным рассеянием; при этом в плане размеры вторичных ореолов превышают размеры участков рудной минерализации (Соловов, 1963). В области склоновой денудации ореолы имеют вид шлейфов, вытянутых вниз по склонам. В сфере дальнего переноса образуются преимущественно линейные ореолы (потоки) рассеяния (Шарков, 1971). Все названные формы ореолов характеризуются явными градиентами концентраций рудных элементов.

В связи с этим применяемые количественные оценки вторичных ореолов в принципе аналогичны оценкам первичных ореолов. По А. П. Соловову (1963), параметрами вторичного литохимического ореола являются: его геометрические размеры (длина, ширина); максимальное содержание металла в сечении ореола по профилю (С) (в процентах); количество металла по профилю (М) (в метропроцентах) и количество металла в ореоле для слоя толщиной 1 м (в тоннах).

Выводы

Геолого-математическое моделирование участков земных недр и прилегающих к ним участков ландшафтной сферы обычно сводится к характеристике пространственной изменчивости геологических признаков. При конструировании модели определяющее значение имеет выбор и схематизация существенных признаков, а также выбор пути моделирования — «динамического» или «диагностического». Оба пути требуют учета большого объема априорной информации, связанной в первом случае с моделями процессов, во втором — с конструированием образов геологических тел разной степени сложности для построения и использования информационно-диагностической системы.

При моделировании пространственной изменчивости химического состава геологических объектов следует опираться на специальную понятийную модель «геохимического поля», при конструировании которой используются понятия «геохимическое тело» и «геохимическая ассоциация».

При всем разнообразии процессов геохимической миграции в них могут быть выделены общие особенности, позволяющие применять при математическом описании процессов известные аксиомы фундаментальных наук.

Глава II. МЕТОДЫ МАТЕМАТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ ГЕОХИМИЧЕСКОГО ПОЛЯ

1. ОСНОВНЫЕ ТИПЫ МАТЕМАТИЧЕСКИХ МОДЕЛЕЙ ПОЛЯ И ВОЗМОЖНОСТИ ИХ ПРИМЕНЕНИЯ В ЗАДАЧАХ ГЕОХИМИЧЕСКИХ ПОИСКОВ

Прежде чем выбрать модель геохимического поля, наиболее подходящую для решения задачи поиска рудных месторождений по геохимическим данным, сформулируем постановку этой задачи.

Объект исследования — приповерхностный участок земной коры и рыхлые отложения без явных признаков оруденения.

Цель исследования — оценка вероятности наличия оруденения на глубине с ориентировочным прогнозом типа масштаба и местоположения возможного оруденения.

Исходный экспериментальный материал — измеренные значения содержаний химических элементов в пробах, отобранных в фиксированных точках исследуемого объекта. Кроме геохимического материала можно считать известными типы пород в местах пробоотбора.

Априорная информация — геологические характеристики исследуемого объекта, которые могут быть прочитаны не посредственно с геологической карты и разрезов того масштаба, в котором ведется исследование. Информация о типе искомого оруденения и о наиболее вероятных структурно-морфологических особенностях оруденения имеется при опосредованном флангов известных месторождений. При более мелкомасштабных поисках информация о типах ожидаемых месторождений может иметься (в хорошо изученных районах) и может отсутствовать (в плохо изученных районах).

Уточним некоторые положения, фигурирующие в формулировке задачи.

Прежде всего под вероятностью наличия оруденения на глубине подразумевается степень возможности этого события. Привлечение теоретико-вероятностного аппарата для прогнозной оценки такой вероятности может быть оправдано выборочным методом опосредованного поиска территорий (Груза, 1977).

Следует заметить, что для количественной оценки вероятности прогноза в геологии пока не собрано достаточной информации. Необходимо проведение статистического обобщения по большому числу месторождений (например, одного генезиса). В геологии же редкие исследователи выходят за рамки описания особенностей какого-то конкретного месторождения. По

статистические обобщения не сделаны, вероятность наличия оруденения на глубине оценивается бинарно, т. е. исследуемый участок земной коры идентифицируется либо как перспективный, либо как бесперспективный на глубину. При этом правило идентификации опирается на выводы по изучению характера распределения элементов в околорудном пространстве, в отличие от такового в областях сингенетичного рассеяния элементов.

Прогноз типа, масштаба и местоположения возможного оруденения удастся сделать лишь в том случае, когда изучены зависимости распределения элементов от пространственных координат, когда выявлена однозначная связь между какой-то характеристикой (вычисляемой по наблюдаемым геохимическим данным) и типом оруденения, его масштабом, а также эрозийным срезом.

Представления, изложенные в главе I, позволяют рассматривать исследуемый объект как участок геохимического поля некоторого геологического тела (или нескольких тел), в котором наряду с фоновыми ассоциациями элементов могут быть зафиксированы аномальные ассоциации, рассматриваемые в качестве сигнала оруденения на глубине. Обычная форма представления исходных точек отбора проб — проекция их на некоторую плоскость сечения участка (план или разрез). Таким образом, экспериментальный материал может быть представлен как выборочная характеристика, своеобразный «каркас» скалярного поля изменчивости исследуемого набора содержаний элементов в координатах X , Y геометрического пространства.

Модель такого поля в геометрической интерпретации представляет собой некоторую умозрительную «поверхность», знаковым отображением которой является карта поля. Изучение таких поверхностей (согласно определению А. Робинсона, их часто называют «статистическими поверхностями») предполагает одновременное изображение их на карте (Червяков, 1978).

Математическое исследование скалярного поля может проводиться на основании различных моделей. Опираясь на методологические предпосылки геолого-математического моделирования (глава I), мы считаем наиболее перспективным использование класса феноменологических моделей. В связи с этим полезно рассмотреть здесь основные приемы феноменологического моделирования пространственно распределенных объектов.

Сущность феноменологического моделирования при описании процесса или пространственно распределенного объекта заключается в том, что поведение некоторого признака (во времени или в пространстве), слишком сложное для непосредственного описания, представляется через совокупность элементарных функций. При этом используемые элементарные функции и характер их взаимоотношений выбираются не произволь-

но, а так, чтобы модель позволила учесть априорную информацию и гипотетические представления об объекте и на их основании вычислить интересующие исследователя характеристики объекта. В отличие от формальных способов разложения функций в ряд (например, спектральное разложение — см. главу III, или аналитические аппроксимации — см. главу V), элементарные функции феноменологической модели должны отображать в некотором приближении природу формирования объекта. Эту сторону вопроса мы будем расшифровывать на ниже приводимых примерах, а сейчас перечислим возможные приемы описательного феноменологического моделирования, обобщив классификацию феноменологических моделей для случайных процессов В. В. Ольшевского (1973) на пространственные поля.

Параметрические модели аппроксимируют «поведение» признака $\xi(Z)$ в виде известной аналитической или случайной функции $f(Z; \theta)$, параметры θ которой требуют подбора или оценки по экспериментальным данным:

$$\xi(Z) = f(Z; \theta).$$

Типичными параметрическими моделями являются общеизвестные линейные уравнения регрессии. Например, зависимость абсолютных отметок (H) водонефтяного контакта от координат Z_1, Z_2 часто можно представить в виде линейной функции (Геометризация..., 1977, с. 284):

$$H(z_1, z_2) = \theta_1 z_1 + \theta_2 z_2 + \theta_3,$$

где $\theta_1, \theta_2, \theta_3$ — параметры, оцениваемые по данным бурения скважин. В данном случае линейная элементарная функция была выбрана в соответствии с априорными данными по региону о плоскостной форме контактов.

Канонические модели аппроксимируют «поведение» объекта $\xi(Z)$ в виде взвешенной суммы известных функций $\{f_i(Z)\}$. Подбору или оценке по экспериментальным данным подлежат в этом случае весовые коэффициенты $\{\theta_i\}$:

$$\xi(Z) = \sum_{i=1}^N \theta_i f_i(Z).$$

Функции $\{f_i(Z)\}$ в такого рода моделях называют базисными и выбирают их чаще всего ортогональными между собой.

В детерминированной модели весовые коэффициенты можно интерпретировать как параметры. В стохастической модели весовые коэффициенты — случайные величины, распределение вероятностей которых подлежит оценке по экспериментальным данным. В случае стохастической природы объекта сам факт моделирования случайного поля $\xi(Z)$ с помощью совокупности случайных величин $\{\theta_i\}$ является тем «упрощением», которое послужило причиной широкого и плодотворного применения канонических моделей при решении практических задач.

Примером канонической модели может служить модель факторного анализа, где элементарные функции $\{f_i(Z)\}$ вычисляются по априорным наблюдениям в виде линейных функций от исходных признаков. Успешно использовано такого рода разложение по «естественным составляющим» при представлении метеорологических полей («Естественные составляющие...», 1970).

Каноническая модель может быть представлена и в интегральной форме:

$$\xi(Z) = \int_{-\infty}^{\infty} \theta(Z') \cdot f(Z, Z') dZ'.$$

Конструктивные модели предполагают представление «поведения» некоторого признака (во времени или в пространстве) в виде заданной функции Q от более элементарных процессов или полей

$$\xi(Z) = Q[\{f_i(Z)\}], \quad i = 1, \dots, l,$$

где l — число элементарных функций, входящих в конструктивную модель. Наиболее распространенный вид конструктивной модели — мультипликативно-аддитивная форма представления исследуемого процесса или поля:

$$\xi(Z) = f_1(Z) f_2(Z) + f_3(Z) f_4(Z), \quad (\text{II.1})$$

где $f_i(Z)$ может быть и детерминированной и случайной функцией. Если $f_i(Z)$ предполагается детерминированной, то ее вид оценивается по экспериментальным данным. Если $f_i(Z)$ — случайная составляющая, то определяются по экспериментальным данным ее вероятностные характеристики.

Конструктивное моделирование геохимического поля будет подробно рассмотрено ниже.

Более сложными феноменологическими моделями являются дифференциальные модели типа:

$$\begin{aligned} \xi(Z) &= \sum_{i=1}^N \alpha_i \nabla^i f(Z), \\ f(Z) &= \sum_{k=1}^M \beta_k \nabla^k \xi(Z), \end{aligned}$$

где $\nabla^k = d^k/dZ^k$ — оператор дифференцирования по аргументу Z ; $f(Z)$ — известная аналитическая функция или случайная функция с известными характеристиками; $\{\alpha_i\}$ и $\{\beta_k\}$ — постоянные коэффициенты, подлежащие подбору или оцениванию по экспериментальным данным.

Дифференциальные модели часто не обладают той простотой, которая предопределяет использование феноменологических моделей. В геологии эти модели пока не применяются.

Для того чтобы построить эффективные для прогноза характеристики геохимического поля, необходимо прежде всего найти удачную форму описания его изменчивости и адекватное математическое отображение понятийной модели зональности. Поэтому мы прежде всего займемся конструктивными моделями описания поля.

Как говорилось выше, конструктивных моделей может быть построено бесконечное множество. Единственно правильной и единственно научной артикуляции не существует (Груза, 1977). Критерий конструирования модели диктуется целью исследования и возможностями экспериментатора в свете накопленного опыта практически познавательной деятельности.

Опыт математического моделирования геологических полей при поисках полезных ископаемых обобщен в работах Л. И. Четверикова (1968) и А. Б. Каждана (1974). Как указывалось в главе I, сущность математического описания наблюдаемой изменчивости сводится к выявлению и характеристике «закономерной» (координированной) и «случайной» составляющих этой изменчивости. Некоторая условность этих понятий и зависимость их от детальности исследования обсуждалась выше и наглядно показана на схеме (рис. 2), которая отражает изменения, происходящие в структуре наблюдаемой изменчивости признаков тел полезных ископаемых по мере развития поисково-разведочных работ.

Согласно А. Б. Каждану (1974), детальность каждого этапа изучения объекта определяется масштабом условно неделимого структурного элемента. Это достигается с помощью системы единичных наблюдений по разведочной сети; по мере сгущения сети представления о строении условно неделимого элемента все более уточняются, что позволяет перейти к следующему, более детальному этапу исследований. По мере накопления информации и детализации представлений о природе объекта более простая модель должна закономерно сменяться более сложной.

Анализ математических моделей условно неделимого структурного элемента не входит в задачу данной книги, поскольку его характеристики не связаны с описанием пространственной изменчивости объекта. Тем не менее здесь следует сказать несколько слов об этих моделях, как об одном из методов анализа геохимических выборок.

Геохимическая выборка, если она представительна, отражает статистические закономерности распределения содержаний исследуемого химического элемента в конкретном природном образовании. Простейшим, но весьма эффективным способом исследования геохимических выборок является анализ частотных распределений признака. При этом отмечается два различных подхода к распределениям по выборочным данным: 1) формальный подбор функции, удовлетворяющей требо-

ванию наилучшего сглаживания наблюдаемых распределений частот; 2) сравнение исследуемого распределения с теоретическим, отвечающим тому или иному типу природных явлений (Ткачев, Юдович, 1975).

Обычно исследование частотных распределений основывается на допущении о независимости измерений изучаемого при-

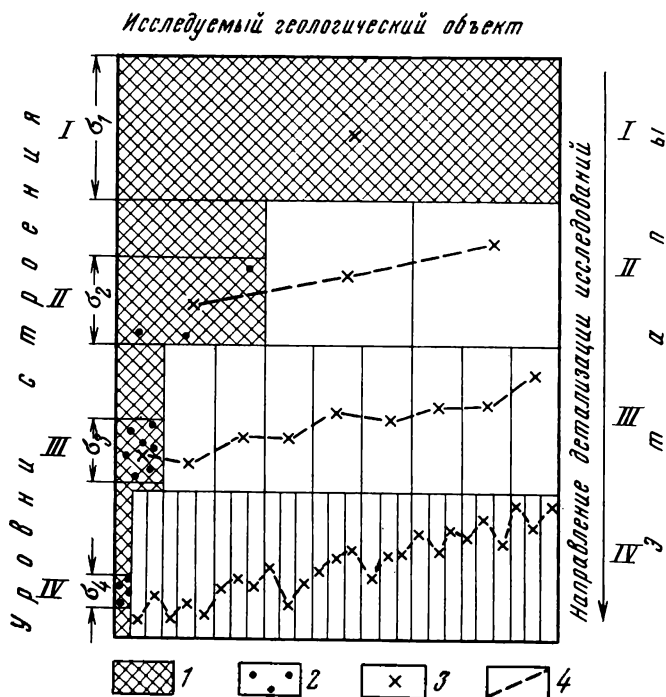


Рис. 2. Схема модели разведочного процесса (по А. Б. Каждану).

1 — условно неделимые структурные элементы; 2 — значения признака, наблюдаемые в его единичных замерах; 3 — средние значения признака по условно неделимым структурным элементам; 4 — график неслучайной изменчивости

знака. Однако геохимическое поле исследуемой территории физически однозначно определено и введение вероятностной модели для его описания имеет методические трудности. Кроме того, закономерности распределения вещества в околорудном пространстве обуславливают зависимость измерений поля в пространстве, благодаря чему можно говорить о случайном характере лишь отдельных составляющих в модели геохимического поля. Этот вопрос специально обсуждается в работе Ю. А. Ткачева и Я. Э. Юдовича (1975), где формируется следующее положение: проблема частотных распределений в геохимии неотделима от проблем геостатистики. Некоторые осо-

бенности геостатистического подхода будут рассмотрены ниже (см. главу V).

Таким образом, прямое использование модели случайной величины при анализе частотных распределений ограничивается рядом условий формирования выборки. Тем не менее изучение частотных распределений в геохимии распространено очень широко, поскольку оно является удобным приемом свертки информации и сравнения эмпирических распределений с эталонными. В частности, определение «порога» аномальности при геохимических поисках основывается на анализе частотного распределения геохимической выборки, характеризующей эталонный фоновый объект (Беус, Григорян, 1975).

В геохимии исследуются главным образом многомерные геохимические выборки. Д. А. Родионов (1968) предлагает рассматривать в качестве математической модели геологического объекта, охарактеризованного m признаками, многомерную случайную величину. Исследование многомерных выборок является основным методом выделения типоморфных геохимических ассоциаций. Так, И. Н. Голынкин (1972) предлагает использовать многомерные выборки для характеристики нормального геохимического баланса различных геологических образований. Под нормальным балансом понимается жесткая структура взаимосвязей элементов в системе, математической моделью которой является ковариационная матрица.

Переходя к математическим моделям пространственной изменчивости геохимического поля, следует упомянуть о первом опыте описания закономерной изменчивости полей полезных ископаемых — геометрической модели П. К. Соболевского. В основе этой модели, описанной ее автором в 1932 г., лежит представление о функциональных связях наблюдаемых геологических признаков с координатами пространства. Значение признака в каждой точке записывается как функция координат Z_1, Z_2, Z_3 . Если функция удовлетворяет условиям конечности, однозначности, непрерывности и плавности, то поле имеет слоистоструйчатую структуру, т. е. размещение каждого из его свойств может быть выражено системой не пересекающихся и не соприкасающихся друг с другом поверхностей. Изменчивость геологического поля интерпретируется П. К. Соболевским геометрически в виде топографической поверхности, которая в любом плоском сечении дает систему изолиний.

Достоинством этой модели является наглядное отображение пространственного размещения значений признака. Однако она полностью игнорирует случайную составляющую изменчивости поля.

Наличие случайной составляющей является свойством любого геохимического поля, но природа случайной изменчивости не всегда может быть объяснена однозначно. Обычным источ-

ником случайных изменений являются особенности отбора проб и погрешности аналитических определений. Кроме того, вероятностный характер «статистической поверхности» во многом предопределен динамизмом (нестационарностью) геохимических полей. «Образно говоря, статистическая поверхность «дышит», «живет». Отсюда «высоту» каждой точки можно определить только с некоторой долей вероятности» (Червяков, 1978, с. 18). Кроме того, существует тенденция связывать наличие случайной составляющей с самой спецификой геологических процессов. Так, согласно представлениям А. Б. Вистелиуса (1963), геологический процесс представляет собой динамическую систему, реагирующую в данной системе координат на окружающее путем приведения во взаимодействие различных случайных величин. Результаты процесса, генерируемые системой, представляют собой также случайную функцию, подлежащую математическому исследованию.

Введение онтологических обоснований случайной изменчивости встретило критику в методологической литературе (Груза, 1977). Поскольку единая точка зрения по этому вопросу отсутствует, вопрос о природе «закономерной» и «случайной» изменчивости следует решать исходя из априорных теоретических предпосылок и из материала конкретного исследования.

Понятийная модель, позволяющая подойти к количественному решению поисковой задачи, заключается в представлении зонального строения околорудного пространства (см. главу I).

Математическая модель, соответствующая понятийной модели зональности ореола, должна конструироваться в соответствии со следующими принципами:

1) данные геохимического опробования представляют собой **конечное** число измерений неоднородного геохимического поля, **обладающего** закономерной изменчивостью;

2) идентичность основных форм пространственного распределения химических элементов в околорудном пространстве месторождений одного генезиса позволяет поднять вопрос о статистическом моделировании геохимических полей и о возможности поиска инвариантов (т. е. количественных характеристик, «общих» для месторождений одного генезиса, а возможно, и для более широкого круга месторождений определенного типа);

3) трудности выявления не только инвариантов, но и форм организации ореола на одном месторождении говорят о «зашумленности» искомым характеристик. Это позволяет попытаться ввести в математическую модель исследуемого геохимического поля случайную составляющую.

Последнее не тривиально, так как заставляет говорить о единственной реализации случайного поля (одного месторождения), что математически не корректно. Корректность введения случайной составляющей может быть достигнута либо в рамках моделирования ореольного геохимического поля группы

месторождений одного генезиса, либо определенными допущениями и ограничениями относительно свойств случайной составляющей.

Для данных геохимического опробования по современным методикам наиболее приемлемыми представляются следующие допущения. Ошибки отбора, обработки и анализа (особенно спектрального) проб являются неотъемлемым источником случайной составляющей в измерениях геохимического поля, не зависящей от координат точки пробоотбора. При точечном опробовании может иметь место также случайная составляющая, обусловленная микронеоднородностями (см. главу I). При сплошном опробовании типа бороздового измеренное поле регуляризовано относительно истинного, так что случайная составляющая, обусловленная микронеоднородностями, может отсутствовать или быть очень малой по сравнению с погрешностями измерения. Таким образом, в ряде случаев можно говорить об изотропном поле случайной составляющей, обладающем свойством эргодичности. Тогда все измерения случайной составляющей можно интерпретировать как выборочные данные одной случайной величины.

В тех случаях, когда сформулированные допущения не имеют места, приходится опираться лишь на физическое (а не математическое) оправдание правомочности введения случайной составляющей в модель (Цветков, 1973).

Строго говоря, феноменологическое моделирование не предполагает точного (адекватного) отображения реальных элементов объекта в различных составляющих феноменологической модели. При адекватном отображении модель становится структурной. Для феноменологической модели достаточно гипотетического обоснования конструкции. Критерием полезности построенной модели выступает степень приближения к описанию «поведения» системы, а не ее структуры.

Так или иначе в задачах поиска месторождений под случайной составляющей геохимического поля можно понимать независимую от координат неинформативную для поиска составляющую поля, какой бы природы она ни была (Аронов, 1977, с. 73). Хотя, конечно, изотропное поле случайной составляющей — лишь частный случай возможных конструктивных моделей.

В общем случае для описания геохимического поля целесообразны следующие конструктивные модели:

а) аддитивная модель

$$\xi(Z) = C(Z) + \gamma(Z),$$

б) мультипликативная модель

$$\xi(Z) = C(Z) \psi(Z),$$

в) аддитивно-мультипликативная модель

$$\xi(Z) = [C(Z) + \delta(Z)] \psi(Z),$$

где $C(Z)$ — детерминированная составляющая, а $\gamma(Z)$, $\psi(Z)$, $\delta(Z)$ — случайные составляющие с различными вероятностными характеристиками.

Попытку объяснить непостоянство детерминированной составляющей как результат действия локальных процессов (например, процесса рудообразования в исследуемом участке земной коры) мы принимаем в качестве гипотезы при построении феноменологической модели. Удачная аппроксимация детерминированной составляющей в конструктивной модели обуславливает успешное решение поисковых задач.

Общий вид выбранной нами аддитивной модели конкретизируется в зависимости от намеченного пути моделирования. Как указывалось в главе I, при динамическом пути моделирования (предполагающем использование представлений о механизме формирования объекта) построение моделей проводится по принципу решения обратных задач. В связи с этим целесообразно рассмотреть различные математические модели геохимических процессов, относящиеся к классу прямых задач геохимии, решение которых существенно для выбора вида детерминированной составляющей в нашей конструктивной модели.

2. МАТЕМАТИЧЕСКОЕ ОПИСАНИЕ ГЕОХИМИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ ДЛЯ РЕШЕНИЯ ПРЯМЫХ ЗАДАЧ ГЕОХИМИИ

Как указывалось в главе I, геохимические процессы, функционирующие в верхней части геологической оболочки, имеют, несмотря на все разнообразие обстановок миграции, много общих черт. Это позволяет в ряде случаев описать множество сложных процессов как композицию ограниченного числа элементарных процессов, теоретическое обоснование которых может быть выведено из фундаментальных законов физики, химии и физической химии. Эти представления нашли свое отражение в обобщенной гидродинамической модели геосистемы (Беляев, 1978). Сущность модели состоит в представлении геологической оболочки и ее составных частей в виде гетерогенных дисперсных систем, состоящих из сплошных (дисперсионных) сред и включенных в них частиц — дисперсных фаз. Среда литосферы интерпретируется как медленно текущая в масштабах геологического времени «жидкость» со взвешенными частицами минерального характера.

Дисперсионная среда описывается уравнениями механики сплошных сред, термо- и электродинамики, а дисперсная фаза — кинематическими уравнениями для функций распределения частиц по параметрам, характеризующим их свойства. Все

вместе перечисленные уравнения образуют систему, описывающую состояние геосистемы.

В. Л. Анохин (1974) ввел представление о поле миграции химического элемента, которое описывается с помощью «миграционной функции». Для обоснования этой функции определяется «плотность распределения элемента в пространстве», которая характеризуется выражением:

$$q(z_1, z_2, z_3, t) = \frac{dM}{dV},$$

где M — общая масса элемента, распределенная в пространстве в некоторой области V

«Миграционной функцией» называется полная производная плотности распределения по времени:

$$\frac{d^2M}{dV dt} = \frac{dq}{dt} = \frac{\partial q}{\partial t} + U \text{grad } q = \Phi,$$

где U — вектор скорости, с которой переносится мигрирующий элемент.

Поле миграции обычно не является непрерывной функцией координат и состоит из множества обособленных единиц в широкой шкале масштабов. Поэтому миграционная функция может иметь разрывы и даже в некоторых точках неопределенна. Тогда следует разбить поле миграции на ряд ограниченных областей («структурных категорий»), в пределах каждой из которых можно выразить миграционную функцию в виде непрерывной и дифференцируемой. Это позволяет рассматривать функцию Φ как совокупность частных видов функций Φ_j , непрерывных в пределах каждой из выделенных структурных категорий.

Для решения прикладных задач поисковой геохимии наибольший интерес представляет исследование поля миграции элементов в рудообразующих гидротермальных растворах, а также в зоне гипергенеза. Эффективное решение этих задач связано с построением единой теории, охватывающей основные миграционные процессы — фильтрацию и диффузию и учитывающей процессы взаимодействия мигрирующих веществ с вмещающими породами и друг с другом — адсорбцию, ионный обмен и химические реакции. Таким образом, главную роль в прикладной геохимии играют гетерогенные процессы геохимической миграции, происходящие на границе раздела фаз или сопровождающиеся образованием новых фаз (Голубев, Гарибянц, 1968).

Теоретический анализ физико-химических процессов может выполняться в двух различных методологических планах: термодинамическом (равновесном) и кинетическом. Процессы, которые способны к обратимости и, следовательно, в своем течении стремятся к состоянию равновесия, можно исследовать в обоих планах, и обычно один аспект исследования дополняет другой. Их можно изучать, анализируя критерии равновесия.

которые определяют конечный результат процесса. С другой стороны, можно изучать скорость протекания тех же процессов в зависимости от разнообразных факторов. Это позволяет глубоко исследовать элементарные механизмы, управляющие ими (Анохин, 1974).

В отечественной геологической литературе представления о диффузионном и фильтрационном массообмене реагентов в породах впервые обсуждались Д. С. Коржинским, который ввел в геологию представления о системах с подвижными и инертными компонентами и о кинетическом и термодинамическом методе исследования метасоматических процессов.

В теории метасоматической зональности, развиваемой Д. С. Коржинским, используется термодинамический подход к анализу процессов. В основу теории положено допущение локального равновесия между поровым раствором и соприкасающимися с ним зернами минералов (Коржинский, 1969). При исследовании природных метасоматических растворов Д. С. Коржинским эмпирически установлена «дифференциальная подвижность» компонентов, т. е. весьма различная скорость их перемещения. Отсюда появилось предположение о роли фильтрационного эффекта, т. е. о различной скорости фильтрации разных компонентов при просачивании сложных водных растворов через систему пор горных пород.

Формула фильтрационного эффекта дана Б. В. Эршлером для фильтрации растворов неорганических солей через коллоидные фильтры:

$$dn_i = \varphi_i C_i dV, \quad (II.2)$$

где n_i — мольное количество компонента i , просочившегося вместе с объемом dV раствора через сечение фильтра; C_i — концентрация компонента i в растворе; φ_i — коэффициент фильтрационного эффекта, который может изменяться от нуля (вещество полностью задерживается фильтром) до единицы (вещество совершенно не задерживается фильтром).

Физико-химическая сторона фильтрационного эффекта весьма сложна и недостаточно выяснена. Наиболее простое объяснение — «эффект сита», т. е. задержка более крупных гидратированных ионов при фильтрации стенками пор. Но, вероятно, и в фильтрационном эффекте участвуют и более сложные процессы — адсорбция, образование двойного электрического слоя, электрокинетические явления.

Из формулы (II.2) следует, что коэффициент фильтрационного эффекта представляет относительную скорость фильтрации растворенного вещества

$$\varphi_i = \frac{U_i}{U_0},$$

где U — средняя скорость просачивания частиц растворителя; U_0 — средняя скорость просачивания растворенного вещества.

Таким образом, сущность фильтрационного эффекта заключается в том, что разные компоненты раствора имеют различную среднюю скорость просачивания в фильтре.

Фильтрационный эффект в потоке описывается следующим уравнением:

$$\frac{1}{U_0} \frac{\partial C_i}{\partial t} + \varphi_i \frac{\partial C_i}{\partial Z} + C_i \frac{\partial \varphi_i}{\partial Z} = 0, \quad (\text{II.3})$$

где Z — направление переноса.

Изложенный принцип имеет большое значение для количественного обоснования зонального строения рудных месторождений и их ореолов.

Первым опытом последовательного использования в геологии учения о скоростях химических реакций является известная работа В. С. Голубева и А. А. Гарибянца (1968), в которой излагается теория гетерогенных процессов миграции, основанная на кинетическом принципе.

В этой работе предложено общее решение задачи определения миграционной функции путем использования системы из уравнения материального баланса движущегося вещества и уравнения, описывающего взаимодействие вещества с вмещающими породами во времени. Последнее уравнение определяется физико-химическими законами взаимодействия вещества с вмещающими породами (сорбция, ионный обмен, химические реакции) и является уравнением кинетики соответствующего физико-химического процесса.

Перенос растворенного вещества обусловлен двумя различными механизмами: диффузией и общим движением потока со скоростью U . Совокупность процессов — конвективная диффузия вещества в растворе (газе).

После введения ряда упрощений, допустимых с физической точки зрения (рассматривается миграция одного вещества, пористая среда принимается однородной), уравнение материального баланса принимает следующий вид:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \frac{\partial q}{\partial t} + (\text{grad } U) C = D_p \nabla^2 C, \quad (\text{II.4})$$

где C — концентрация вещества в граммах на 1 см^3 пористой среды; q — число граммов вещества в составе неподвижной фазы (адсорбированного или полученного в результате реакции с породой); $\frac{\partial C}{\partial t}$ и $\frac{\partial q}{\partial t}$ — изменения количества вещества за 1 с в единице объема соответственно подвижной и неподвижной фаз; ∇ — оператор Лапласа в декартовых координатах:

$$\nabla^2 \equiv \frac{\partial^2}{\partial z_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial z_2^2} + \frac{\partial^2}{\partial z_3^2};$$

D_p — коэффициент диффузии в объеме раствора или газа.

Уравнение кинетики процессов физико-химического взаимодействия описывает во времени взаимодействие вещества со средой в фиксированной точке, т. е. дает выражение для величины $\frac{\partial q}{\partial t}$. В общем виде уравнение кинетики записывается следующим образом:

$$\frac{\partial q}{\partial t} = \varphi(C, q, K_i, U, D_p, D_T), \quad (\text{II.5})$$

где K_i — константы скоростей химических реакций раствора со средой ($i=1, 2, \dots$ — число реакций); D_T — коэффициент диффузии вещества в твердой породе.

Явный вид функции φ определяется для каждого из рассматриваемых процессов: сорбции, ионного обмена и химических реакций.

Методы решения системы уравнений (II.4) и (II.5) основываются на теории дифференциальных уравнений с частными производными. Вследствие сложности уравнения кинетики (II.5) простые аналитические решения задачи удастся найти лишь при рассмотрении отдельных случаев кинетики. В других случаях можно получить лишь относительно простые асимптотические решения (для моментов времени $t \rightarrow \infty$).

В частном случае диффузионной миграции вещества (при отсутствии фильтрации и взаимодействия вещества с породами, т. е. при $U=0$ и $q=0$) система уравнений (II.4) и (II.5) сводится к выражению второго закона Фика в декартовых координатах и записывается следующим образом:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D \nabla^2 C.$$

Решение этого уравнения для случая нестационарной диффузии основано на распределении Гаусса. Для случая, когда источник вещества может быть представлен в виде бесконечно тонкого слоя, решение принимает следующий вид:

$$C(Z, t) = \frac{Q}{2\sqrt{\pi Dt}} e^{-\frac{(Z_0 - Z)^2}{4Dt}}$$

где Q — исходное количество вещества в слое.

Распределение для случая, когда источник помещен в начало координат, показано на рис. 3 для разных моментов времени. Распределение симметрично относительно местоположения максимума концентраций, величина которого равна

$$C_{\max} = \frac{Q}{2\sqrt{\pi Dt}},$$

откуда видно, что $C_{\max}$ убывает со временем пропорционально $1/\sqrt{t}$.

На основе предложенной системы уравнений В. С. Голубевым и А. А. Гарибянцем разрабатывается теория формирования гидротермальных месторождений и их первичных ореолов.

В простейшем случае первичный геохимический ореол может быть представлен как зона измененных в результате взаимодействия с рудными растворами или газами пород, окружающих трещину, по которой осуществлялась фильтрация рудоносных растворов и газов.

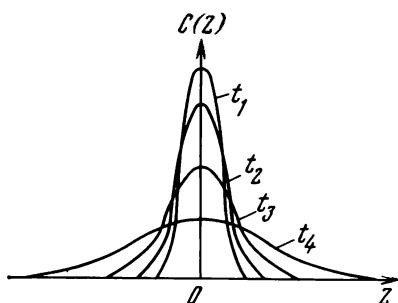


Рис. 3. Распределение концентраций в результате диффузии вещества из бесконечно тонкого слоя в неограниченное пространство (по В. С. Голубеву и А. А. Гарибянцу)

Требуется определить закон распределения концентраций растворов и образующегося в результате реакций вещества в объеме макротрещины и в окружающих породах в любой момент времени. Если пренебречь диффузией в микротрещинах, то уравнение материального баланса для сечения x трещин принимает вид:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + U \frac{\partial C}{\partial Z} + \frac{\partial q}{\partial t} - D_p \frac{\partial^2 C}{\partial Z^2} = 0.$$

Уравнение кинетики взаимодействия записывается по-разному для каждого из участвующих процессов. Так, уравнение кинетики сорбции и ионного обмена при одновременном учете внешней и внутренней диффузии имеет вид:

$$\frac{\partial q}{\partial t} = \chi [C - f(q)],$$

где χ — константа скорости процесса, зависящая от коэффициентов внешней (к стенкам макротрещины) и внутренней (в микротрещинах) диффузии и скорости потока U .

Наиболее общий случай представляет формирование первичных геохимических ореолов с участием химических реакций. Если пренебречь влиянием диффузии по сравнению с фильтрационным потоком, то уравнение материального баланса запишется в виде:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + U \frac{\partial C}{\partial Z} + \frac{\partial q}{\partial t} = 0.$$

Второе уравнение системы в этой задаче представлено уравнением кинетики химических реакций в различных условиях. Как известно, суммарная скорость гетерогенного процесса определяется скоростями отдельных стадий. При этом решающее влияние на процесс оказывает скорость наиболее медленной стадии. Процесс лежит в кинетической области, если

скорость химической реакции меньше, чем скорость диффузии. Процесс протекает в диффузионной области, если скорость диффузии меньше скорости химической реакции.

В кинетической области при решении задачи авторы опираются на следующее уравнение кинетики:

$$\frac{\partial q}{\partial t} = K' C (q_0 - q),$$

где K' — константа скорости реакции.

Распределение рудного вещества вдоль трещины описывается в этом случае уравнениями:

1) при малых концентрациях компонента в породе ($q_0 \ll C_0$)

$$q(Z, t) = q_0 \left[1 - e^{-K' C_0 \left(t - \frac{Z}{U} \right)} \right];$$

2) при больших концентрациях компонента в породе ($q \gg C_0$)

$$q(Z, t) = K' q_0 C_0 \left(t - \frac{Z}{U} \right) e^{-K' q_0 \frac{Z}{U}}$$

Если необратимая химическая реакция протекает в диффузионной области, то уравнение скорости реакции записывается следующим образом:

$$\frac{\partial q}{\partial t} = \gamma C,$$

где γ — кинетический коэффициент, зависящий от коэффициента диффузии, скорости потока и т. д.

Тогда распределение вещества в неподвижной фазе описывается формулой

$$q(Z, t) = \gamma C_0 t e^{\frac{\gamma Z}{U}} \quad (\text{II.6})$$

Графики распределения рудного вещества для некоторых из рассматриваемых случаев показаны на рис. 4.

Образование первичных геохимических ореолов практически осуществляется в процессе фильтрации минералообразующих растворов, представляющих весьма сложные смеси. Рассматривается случай, когда изотерма сорбции (ионного обмена) линейна и перенос каждого вещества в среде происходит независимо от других. Тогда получаем набор решений уравнения сорбции, отличающихся друг от друга величинами K_i — коэффициента адсорбции. При исследовании таких решений можно установить, что, начиная с некоторого момента времени, наблюдается дифференциальное течение компонентов раствора: каждое вещество будет двигаться со своей характерной скоростью U_i , равной

$$U_i = \frac{U}{1 + K_i} \quad (i = 1, \dots, n). \quad (\text{II.7})$$

Из уравнения (II.7) видно, что чем лучше сорбируется вещество, тем меньше скорость его движения по трещине. Это приводит к зональному распределению адсорбированных стенками макротрещины компонентов раствора.

Аналогичный набор решений может быть получен для случая, когда компоненты смеси вступают в химические реакции с веществом вмещающих пород. Таким образом, как сорбция,

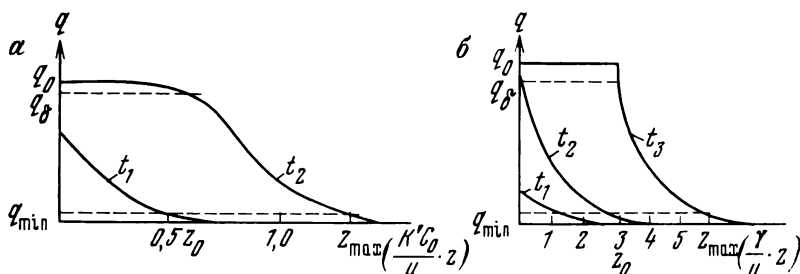


Рис. 4. Распределение рудного вещества при формировании первичного ореола с учетом химических реакций (по В. С. Голубеву и А. А. Гарибянцу). а — в кинетической области при $q_0 \gg C_0$; б — в диффузивной области

так и химические реакции могут быть причиной зонального распределения рудного вещества трещины. Полученные результаты теоретически подтверждают принцип дифференциальной подвижности элементов, сформулированный Д. С. Коржинским, и указывают на возможные причины так называемого «фильтрационного эффекта» [уравнение (II.3)].

Количественное рудообразование и формирование ореолов для решения прямых задач геохимии исследовалось также Р. И. Дубовым. В его работах рассматриваются теоретические аспекты формирования фильтрационных и диффузионных аномалий на основании подхода, близкого к описанному выше в работах В. С. Голубева и А. А. Гарибянца, но более схематично, без учета сорбции и обратимых реакций. Поэтому мы не останавливаемся здесь на решении прямых задач, сформулированных в обобщенной монографии Р. И. Дубова (1974) для первичных ореолов.

Из приведенных формул следует, что для того, чтобы охарактеризовать геохимический ореол, необходимо знать длительность времени рудообразования, константы равновесия и скоростей адсорбции, диффузии, химических реакций и т. п. Эти величины в отдельных случаях могут быть найдены экспериментально, однако такой путь трудоемок и для практики малоприменим. Поэтому для описания ореола целесообразно пользоваться различными размерными и безразмерными параметрами.

рами, которые могут быть найдены по нескольким концентрационным точкам ореола.

Обычно принимают, что распределение элементов в первичных ореолах подчиняется экспоненциальному закону. В качестве характеристики геологического существа процесса используют показатель миграционной способности элементов ($\frac{1}{\lambda}$), где λ — некоторый коэффициент в уравнении экспоненциальной зависимости, характеризующем содержание элемента C_z в точке опробования на расстоянии Z от некоторой условной плоскости с содержанием элемента C_0 (Соловов, 1966):

$$C_{(Z)} = C_0 e^{-\lambda Z} + C_{\text{ф.}}$$

С. В. Григорян предложил использовать эту зависимость для определения градиента концентрации элемента в ореоле, который интерпретируется как тангенс острого угла, образованный графиком распределения в полулогарифмическом масштабе (прямая линия) с осью абсцисс («Геохимические методы...», 1974).

Как показал опыт исследований последних лет, на практике функция $C_z = f(Z)$ часто отклоняется от указанной теоретической зависимости под влиянием литологии вмещающих пород и структурных особенностей рудного поля («Теоретические основы геохимических методов...», 1971).

В работе «Зональность гидротермальных месторождений...» (1970) предложен ряд более сложных теоретических моделей распределения элементов по направлению рудопроводящего канала и вкрест простирания рудного тела, а также моделей температурно-влажностных полей гидротермального процесса. При анализе распределения содержаний элементов вкрест простирания рудных тел выявлено значительное разнообразие типов такого распределения.

В целом ореолы имеют полосчатое строение, обусловленное наличием многочисленных зон повышенных концентраций, связанных с зонами повышенной проницаемости пород и контактами пород различного состава, т. е. неоднородностью поля миграции.

До сих пор речь шла о механизмах формирования первичных ореолов гидротермальных месторождений и о солевых ореолах рассеяния, поскольку существует обоснованное теоретическое объяснение соответствующих ореолообразующих процессов. Следует вкратце остановиться на математических моделях других типов ореолов.

Математическая модель формирования ореолов собственно минеральных месторождений приводится в работе Н. И. Сафронюк (1971). Образование ореола описывается как результат

падения в магме жидких и твердых рудообразующих частиц, скорость которых определяется формулой Стокса:

$$V = K \Delta d r^2,$$

где K — постоянный коэффициент, зависящий от вязкости; Δd — избыточная плотность падающей частицы относительно среды падения; r — радиус этой частицы.

За конечный период остывания магмы часть более мелких частиц не успеет осесть и создаст выше рудного тела своеобразное «облако». Распределение этих частиц по высоте над рудным телом определяется формулой Пэррена:

$$n_1 = n_0 \exp(-Kh),$$

где n_1 — число равновеликих частиц в единице объема на высоте h над слоем, обладающим плотностью частиц n_0 ; K — постоянный коэффициент.

При построении пространственной модели вторичного ореола следует учитывать все обстоятельства, указанные выше для модели первичного ореола (градиенты концентраций, зональность, неоднородность вмещающей среды). В целом модель вторичного ореола является более сложной, так как на факторы, связанные с рудообразованием, накладывается комплекс процессов рассеяния вещества.

Математические модели процессов гипергенного механического рассеяния (решение прямых задач) предложены А. П. Солововым, Р. И. Дубовым, В. В. Поликарпочкиным.

Широко известная модель А. П. Соловова описывает диффузионное рассеяние вещества в остаточном ореоле в идеализированных условиях однородной среды. Согласно этой модели, кривая содержаний C_z исходного металла в рыхлых породах подчиняется уравнению распределения концентраций в пространстве по нормальному закону. Применение такого уравнения позволяет рассчитать количество металла M в сечении рудного тела по следующей формуле:

$$M = \sqrt{2\pi} C_{\max} \sigma,$$

где $C_{\max}$ — максимальное содержание металла в ореоле, т. е. в точке профиля, соответствующей эпицентру залежи (Соловов, 1963; «Инструкция...», 1965). С применением местного поправочного коэффициента эту формулу можно использовать для расчета содержаний металла в однотипном ореоле.

Р. И. Дубов предлагает применять к диффузионному рассеянию в остаточном ореоле общую модель диффузионного процесса. Кроме того, этим автором предложено уравнение перераспределения вещества по функциям в рыхлом покрове и в потоке рассеяния (Дубов, 1974).

В. В. Поликарпочкин (1976) предложил математические модели формирования вторичных ореолов для разных типов

склонового смещения. По его представлениям, дефлюкционные ореолы имеют вид слоев, вытянутых от выходов рудных тел до подножия склонов; при этом глубина залегания ореола в рыхлых образованиях зависит от положения рудного тела на склоне. Конфигурация слоев рыхлых образований может быть определена на основе уравнения баланса самопроизвольно движущихся рыхлых масс. При описании дефлюкционного движения необходимо учитывать диффузионную составляющую процесса, т. е. речь должна идти о диффузионно-дефлюкционных ореолах рассеяния.

Обобщенный вывод из всех имеющихся результатов динамического моделирования процессов рудообразования, позволяющий строить решение обратных задач геохимии, сводится по сути дела к специфической аппроксимации ореолов в наблюдаемых геохимических полях экспоненциальными функциями, отображающими физическую сущность процессов образования этих полей (Дубов, 1974). Так, например, при аппроксимации диффузионной аномалии в сечении по направлению z выражением

$$\hat{C}_{\text{ан}}(Z) = \frac{k_d}{\sqrt{2\pi\hat{\sigma}_D}} \int_{-\infty}^{\infty} \hat{C}_0(W) \exp\left\{-\frac{(Z-W)^2}{2\hat{\sigma}_D^2}\right\} dW \quad (\text{II.8})$$

можно оценить распределение $\hat{C}_0(Z)$ концентраций в коренных породах до разрушения и диффузионного рассеяния рудного материала при различных оценках параметра диффузионного рассеяния $\hat{\sigma}_D$ (параметр k_d в (II.8) различен для разных химических элементов и оценивается экспериментально). Однако выбор оценки $\hat{\sigma}_D$ является достаточно сложным аспектом при решении обратных задач и требует дополнительной информации.

Естественно, что строгое решение имеют обратные задачи лишь в наипростейших случаях исследования одной аномалии определенной генерации.

3. КОНСТРУКТИВНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ГЕОХИМИЧЕСКОГО ПОЛЯ ДЛЯ ЦЕЛЕЙ ПОИСКОВ

Из приведенного выше обзора прямых задач прикладной геохимии следует, что наиболее простая аддитивная модель, прикладываемая для моделирования «поведения» в пространстве рудного элемента

$$\xi(Z) = f_1(Z) + f_2(Z) \quad (\text{II.9})$$

предполагает $f_1(Z)$ детерминированной функцией экспоненциального типа, а $f_2(Z)$ случайной функцией, обусловленной микронеоднородностями геохимического поля и ошибками наблюдений.

Выяснение характера детерминированной составляющей

представляется основной задачей при описании геохимического поля. Не повторяя сути полемики по поводу «естественных границ» (см. главу I), мы в дальнейшем будем иметь в виду две разновидности геохимического поля. Первая разновидность, — когда поведение детерминированной составляющей в пространстве целесообразно представлять плавно изменяющейся функцией. Вторая разновидность, — когда имеет смысл моделировать детерминированную составляющую ступенчатой функцией. Эти две основные разновидности конструктивных моделей являются математическими аналогами тех двух способов исследования (понятийного моделирования) изменчивости геохимического поля, о которых говорилось в главе I:

1) описание изменчивости как функции пространственных координат (непрерывная модель) и

2) элементаризация пространства путем оконтуривания квазиоднородных участков внутри геохимического поля (кусочно-однородная модель).

Выбор той или иной модели определяется как спецификой исследуемого поля (тектонической раздробленностью, характером границ между разновидностями пород, системами трещин и т. п.), так и требуемой точностью воспроизведения локальной неоднородности поля. Непрерывная модель более универсальна (она включает в себя вторую модель). Кусочно-однородная модель грубее, но с ее помощью легче решать многомерные задачи (что очень существенно для геохимии). Она позволяет дать математические формы разграничения поля на «элементарные объемы», понятийная модель которых представляется целесообразной.

Разграничение пространства на «элементарные объемы» можно проводить различными методами многомерного кластер-анализа, основные принципы которого описаны в главе V (см. табл. 4). Ореольное пространство, разделенное на «элементарные объемы» (в пределах каждого из которых проявлена своя ассоциация аномальных элементов), может исследоваться с помощью математического аппарата цепей Маркова (Ли и др., 1977).

Если пересекать ореольное пространство, например, сверху вниз по скважине, то в силу зонального строения околорудного пространства вероятность смены «элементарного объема» одной ассоциации на «элементарный объем» другой ассоциации будет различной для надрудных и подрудных зон. В математической модели таких пересечений цепями Маркова будут иметь место разные матрицы вероятностей перехода от одной ассоциации к другой для различных зон ореола, на чем и может строиться опознание последних при бурении новой скважины.

Методика использования аппарата цепей Маркова для такого рода задач может быть позаимствована из работы А. Б. Вистелиуса (1972), где посредством сравнения матриц вероятнос-

теи перехода от одного минерала к другому при сканировании прозрачного шлифа различаются неизменные граниты и графиты, затронутые различной степенью метасоматоза.

Что касается методов анализа конструктивной модели (II.9) в рамках описания непрерывного поля, то они плодотворно разрабатываются за последнее десятилетие в области исследования так называемых временных рядов (Андерсон, 1976; Хеннан, 1974; Бокс и Дженкинс, 1974).

Некоторые исследователи называют статистические модели с детерминированной составляющей «смешанными моделями». Мы не будем пользоваться последним термином на том основании, что общепринятое определение статистической модели требует присутствия в ней случайной величины или случайной функции наряду с возможным присутствием других компонент — констант, переменных, детерминированных функций, эвристических структур и т. п.

Наиболее общей математической моделью геохимического поля в свете сказанного является многомерное скалярное случайное поле. Некоторые определения математических понятий и построений, необходимые для дальнейшего конструирования математической модели геохимического поля, изложены в главе III.

Выводы

При конструировании математических моделей геохимического поля наиболее рационально использовать феноменологическое статистическое описание скалярного поля. Предлагается применять класс конструктивных феноменологических моделей аддитивного типа, включающих детерминированную и случайную составляющие. При выборе детерминированной составляющей следует опираться на теоретические модели, основанные на решении прямых задач геохимии. Анализ моделей геохимических процессов показал, что детерминированная составляющая конструктивной модели геохимического поля наиболее эффективно описывается экспоненциальной функцией.

Глава III. ОСНОВНЫЕ МАТЕМАТИЧЕСКИЕ ПОНЯТИЯ, СВЯЗАННЫЕ СО СКАЛЯРНЫМ СЛУЧАЙНЫМ ПОЛЕМ, И МЕТОДЫ ЕГО ОПИСАНИЯ

1. ОПРЕДЕЛЕНИЕ СЛУЧАЙНОГО ПОЛЯ

Исследование распределения концентраций химических элементов в околорудном пространстве мы будем вести с помощью математической модели, конструирующей геохимическое поле из детерминированной и случайной составляющих. Конструкция подобного рода является функцией нескольких переменных (координат), что требует введения понятия случайного поля.

Случайным полем в ν -мерном пространстве называется случайная функция $\xi(Z) = \xi(z_1, z_2, \dots, z_\nu)$ от точки $Z = (z_1, z_2, \dots, z_\nu)$ этого пространства (Яглом, 1952).

В приложении к задачам геохимических поисков нас будут интересовать поля концентраций химических элементов на площади ($\nu=2$): $\xi(Z) = \xi(z_1, z_2)$ и в трехмерном пространстве ($\nu=3$): $\xi(Z) = \xi(z_1, z_2, z_3)$.

В тех случаях, когда в точке Z определено несколько (m) скалярных случайных функций $\xi_j(Z)$, $j=1, \dots, m$, мы будем говорить о многомерном скалярном случайном поле (Яглом, 1952). Некоторые авторы используют в этом случае термин «векторное» поле (привлекая векторную конструкцию признакового пространства). Но мы оставим этот термин для полей, в которых определяемая функция $\xi(Z)$ задается не только значением, но и направлением в пространстве земных координат (например, магнитные поля, поля градиентов и др.).

Когда случайное поле $\xi(Z)$ задано в любой точке непрерывного пространства, расстояние в котором определяется по формуле

$$r(Z_1, Z_2) = \|Z_1 - Z_2\| = \sqrt{(z_{11} - z_{21})^2 + \dots + (z_{1\nu} - z_{2\nu})^2}, \quad (\text{III.1})$$

то говорят о случайном поле в ν -мерном евклидовом пространстве R^ν . При исследовании геохимического поля пространство земных координат в пределах месторождения можно моделировать с достаточно хорошим приближением в виде трехмерного евклидова пространства (с взаимно перпендикулярными тремя абсциссами z_1, z_2, z_3).

Практика измерения значений случайного поля в дискретных точках, равноудаленных друг от друга по направлениям всех координат z_i , $i=1, \dots, \nu$, породила теоретическое описание случайного поля, заданного на ν -мерной целочисленной решетке E^ν .

Задание случайного поля (в соответствии с основополагающей теоремой Колмогорова) эквивалентно заданию системы конечномерных распределений вероятностей $p_v(\cdot)$ таких, что

$$p_v(x_{z_1}, \dots, x_{z_n}) = P\{\xi(Z_1) = x_{z_1}, \dots, \xi(Z_n) = x_{z_n}\}, \quad (\text{III.2})$$

$$(x_j \in X; Z_j \in V)$$

где $V \subset R^v$ — конечное подмножество в пространстве R^v . P — вероятность, X — множество значений поля $\xi(Z)$.

Система распределений вероятностей $\{p_v(\cdot)\}$, сопоставленных всем конечным подмножествам $V \subset R^v$ и удовлетворяющих очевидным условиям согласованности (Добрушин, 1968, с. 201), называется распределением случайного поля.

Если распределение случайного поля $\xi(Z)$ задано на конечном множестве V при условии, что значения поля вне этого множества известны, то говорят об условном распределении.

$$q_{v, x(Z)}(x_{z_1}, \dots, x_{z_n}) = P\{\xi(Z_1) = x_{z_1}, \dots, \xi(Z_n) = x_{z_n} | \xi(Z)\}.$$

$$(Z \in R^v \setminus V) \quad (\text{III.3})$$

Условная вероятность понимается в соответствии с общей теорией условных вероятностей по Колмогорову, а последнее равенство — как равенство с вероятностью 1.

Условным распределением случайного поля $\xi(Z)$ называется система условных распределений вероятностей $\{q_{v, x(Z)}(\cdot)\}$, сопоставленных всем конечным подмножествам $V \subset R^v$ и всем функциям $x(Z)$, $Z \in R^v \setminus V$ со значениями X .

Возможность описания случайного поля при помощи условного распределения обсуждается в работах Р. Л. Добрушина (1968, 1970), Ю. А. Розанова (1967). Кардинальным вопросом данной проблемы является вопрос о существовании и единственности случайного поля с заданным условным распределением.

Для случайной функции $v=1$, когда она марковская и условные вероятности положительны, существует и притом единственная функция с заданным условным распределением.

Для случая, когда $v \geq 2$, результаты исследований выделили лишь ограниченный класс полей, которые можно задать условными распределениями. Для обеспечения единственности случайного поля с заданным условным распределением приходится накладывать ограничения на заданное условное распределение. Эти дополнительные ограничения означают по сути дела слабую зависимость распределений $q_{v, x(Z)}(\cdot)$ от условия $x(Z)$, $Z \in R^v \setminus V$, т. е. поле достаточно близко к совокупности независимых величин.

Например, вводится понятие d -марковского поля ($d > 0$ — целое число), для которого условие в (III.3) ограничивается

знанием значений поля лишь в подмножестве V_d точек из $E^v \setminus V$, отстоящих от точек из V расстоянием, не большим d :

$$q_{V, x(Z)}(\cdot) = q_{V, \tilde{x}(Z)}(\cdot), \\ (Z \in E^v \setminus V) \quad (Z \in V_d)$$

Для d -марковских случайных полей вопрос о существовании случайного поля с заданным условным распределением решается положительно.

Что же касается единственности случайного поля с заданным условным распределением, то для его обеспечения приходится накладывать более жесткое ограничение на условное распределение, сужающее даже класс d -марковских полей, а именно необходимо, чтоб при некотором $\alpha < 1$ и всех $Z \in E^v$ выполнялось неравенство

$$\sum \lambda_{Z, U} < \alpha, \quad (U \in E^v \setminus \{Z\})$$

где $\lambda_{Z, U}$ — расстояние по вариации между распределениями $p_Z(x)$ и $p_U(x)$, вычисляемое согласно следующим соотношениям:

$$\lambda[p(x), \tilde{p}(x)] = \frac{1}{2} \sum_{x \in X} |p(x) - \tilde{p}(x)| = \\ = \max_{A \subset X} \left| \sum_{x \in A} p(x) - \sum_{x \in A} \tilde{p}(x) \right|.$$

Для описания случайного поля существует аналог характеристической функции — характеристический функционал χ переменных (Обухов, 1954₂).

Случайное поле называется однородным в узком смысле, если распределения $p_V(\cdot)$ инвариантны относительно группы сдвигов в R^v , т. е. если для любого вектора r

$$p_V(x_{Z_1}, \dots, x_{Z_n}) = p_{V, r}(x_{Z_1+r}, \dots, x_{Z_n+r})$$

(Добрушин, 1968, Темпельман, 1973).

Случайное поле называется однородным в направлении некоторой оси или некоторой плоскости, если условие инвариантности выполняется только для подмножеств V , параллельных заданной оси или соответственно заданной плоскости.

Случайное поле называется однородным в широком смысле, если его математическое ожидание $\mu = M[\xi(Z)]$ является постоянным, а его корреляционная функция зависит только от разности координат точек Z_1 и Z_2 (Яглом, 1952; Темпельман, 1973), в которых она определяется:

$$K(Z_1, Z_2) = K(Z_1 - Z_2), \quad (\text{III.4})$$

где

$$K(Z_1, Z_2) = M \left[\overset{0}{\xi}(Z) \overset{0}{\xi}(Z) \right],$$

при этом $\overset{0}{\xi}(Z) = \xi(Z) - M[\xi(Z)]$ — есть центрированное случайное поле.

Понятие однородного случайного поля на прямой ($v=1$) совпадает, естественно, с понятием стационарного случайного процесса. Для вещественных гауссовских случайных полей понятия однородности в узком и в широком смыслах совпадают.

Если корреляционная функция случайного поля зависит лишь от евклидова расстояния r (III.1) между двумя точками

$$K(Z_1, Z_2) = K(|Z_1 - Z_2|) = K(r),$$

то случайное поле называется изотропным.

В общем случае корреляционная функция $K(Z_1, Z_2)$ m -мерного случайного поля определяется как математическое ожидание тензорного произведения (Рожков, 1975; Буймов, Решетников, 1976):

$$K(Z_1, Z_2) = M [\overset{0}{\xi}(Z_1) \times \overset{0}{\xi}(Z_2)].$$

Если представить себе совокупность значений m признаков случайного поля $\xi(Z)$ в n точках пространства E^n в виде матрицы $m \times n$, т. е. тензора валентности 2 с $m \times n$ компонентами, то $K(Z_1, Z_2)$ будет тензором валентности 4 с числом компонент $(m \times n)^2$ (Акивис и др., 1969, с. 58—66). Другими словами, для полного представления корреляционных связей m признаков в n точках земного пространства необходимо знать $(m \times n)^2$ коэффициентов корреляции:

$$k_{ij}(Z_l, Z_q) = M [\overset{0}{\xi}_i(Z_l) \overset{0}{\xi}_j(Z_q)], \quad i, j = 1, 2, \dots, m; \\ l, q = 1, 2, \dots, n.$$

В практических задачах обычно исследуют тот или иной «срез» тензора валентности 4, а именно: в задачах, связанных с исследованием взаимозависимостей m признаков в отвлечении от поведения этих зависимостей в пространстве, рассматривают ковариационные матрицы $K(Z_l, Z_q)$ при фиксированных значениях аргументов (координат). Для однородного поля, характеризующегося отсутствием коррелированности соседних точек в пространстве E^n (для непрерывного поля — сколь угодно близких точек в пространстве R^n), матрица $K(Z, Z)$ является исчерпывающей характеристикой корреляционных связей в исследуемом поле. Такого рода модель позволяет представить значения случайной составляющей поля в виде реализаций одной m -мерной случайной величины с ковариационной матрицей $K = K(Z, Z)$.

Другой «срез» тензора ковариаций случайного поля, предназначенный для исследования пространственных взаимосвязей в однородных и изотропных полях, представляет собой совокупность автокорреляционных и взаимных корреляционных функций m признаков, не зависящих от начальной точки измерения, т. е.

$$K(r) = K(Z, Z + r) = M [\overset{0}{\xi}(Z) \overset{0}{\xi}^T(Z + r)].$$

Такое представление называют еще матричнозначной корреляционной функцией:

$$K(Z, Z+r) = \begin{pmatrix} k_{11}(Z, Z+r) & \dots & k_{1m}(Z, Z+r) \\ \vdots & & \vdots \\ k_{im}(Z, Z+r) & \dots & k_{mm}(Z, Z+r) \end{pmatrix},$$

где $k_{ij}(Z, Z+r) = M[\xi_i^0(Z) \cdot \xi_j^0(Z+r)]$.

Однородное поле требует задания таких матричнозначных корреляционных функций по любым взаимно перпендикулярным направлениям в пространстве R^n . Изотропное поле задается одной матричнозначной функцией $K(r)$. Вообще говоря, понятие однородного в широком смысле и изотропного случайного поля в R^n допускает несколько многомерных обобщений (Яглом, 1952, 1957). Для наших задач наиболее подходящим является следующее определение скалярного поля: многомерное случайное поле $\xi(Z)$ называется однородным и изотропным, если математические ожидания всех его компонент $\mu_i (i=1, \dots, m)$ являются постоянными и все элементы-функции $k_{ij}(Z_1, Z_2)$ его корреляционной матрицы зависят только от расстояния между точками Z_1 и Z_2 :

$$\mu_i = \text{const},$$

$$k_{ij}(Z_1, Z_2) = k_{ij}(|Z_1 - Z_2|) = k_{ij}(r),$$

$$ij = 1, \dots, m.$$

Наглядное представление матричнозначной корреляционной функции $K(r)$ приведено на рис. 5. Следует заметить, что автокорреляционные функции $k_{ii}(r)$, $i=1, 2, \dots, m$ имеют максимум при $r=0$, равный дисперсии i -го признака. Взаимные же корреляционные функции $k_{ij}(r)$, $i \neq j$ могут иметь максимум при любом значении r , что означает наибольшую корреляционную связь соответственно i -го и j -го признаков в точках пространства R^n , отстоящих друг от друга на расстоянии $r_{(\text{макс. } k_{ij})}$. У изотропного поля $k_{ij}(r) = k_{ji}(r)$.

Вид автокорреляционных функций $k_{ii}(r)$, $i=1, 2, \dots, m$ несет важную информацию о характере центрированных случайных полей $\xi_i(Z)$. Наличие периодической составляющей в анализируемом центрированном поле предопределяет существование косинусоиды с тем же периодом в корреляционной функ-

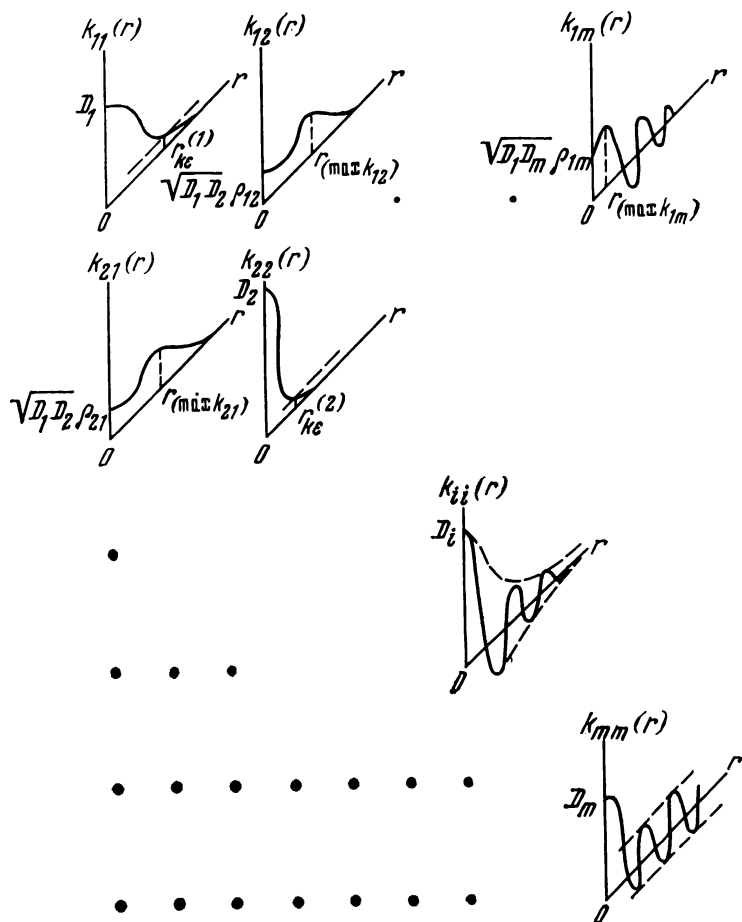


Рис. 5. Представление матричнозначной корреляционной функции изотропного поля

ции (например, $k_{mm}(r)$ на рис. 5). Затухающие колебания автокорреляционной функции говорят о квазигармонической составляющей в поле соответствующего признака (например, $k_{ii}(r)$ на рис. 5). Случайное поле без гармонических составляющих имеет обычно экспоненциальную автокорреляционную функцию.

Сравнение корреляционных связей удобнее вести по нормированным корреляционным функциям:

$$\rho_{ij}(r) = \frac{k_{ij}(r)}{\sqrt{k_{ii}(0)k_{jj}(0)}} = \frac{k_{ij}(r)}{\sqrt{D_i D_j}},$$

$$\rho_{ii}(0) = 1; \rho_{ii}(r) < 1 \text{ при } r > 0.$$

Одной из важнейших характеристик нормированной корреляционной функции является интервал корреляции. Чем шире интервал корреляции, тем на большем расстоянии в пространстве R^n взаимосвязаны в среднем значения поля.

Для интервала корреляции существует несколько различных определений (Мирский, 1972). Приведем некоторые из них, наиболее важные, на наш взгляд, для целей геохимического моделирования:

$$1) r_{\kappa 1}^{(i)} = \int_0^{\infty} \rho_{ii}(r) dr,$$

$$2) r_{\kappa 2}^{(i)} = \int_0^{\infty} [\rho_{ii}(r)]^2 dr, \quad (\text{III.5})$$

3) $r_{\kappa \epsilon}^{(i)}$ — интервал аргумента нормированной корреляционной функции, за пределами которого она пренебрежимо мала (с заданной точностью ϵ):

$$\begin{aligned} |\rho_{ii}(r)| &\geq \epsilon \text{ при } r \leq r_{\kappa \epsilon}^{(i)}, \\ |\rho_{ii}(r)| &< \epsilon \text{ при } r > r_{\kappa \epsilon}^{(i)}. \end{aligned} \quad (\text{III.6})$$

Например, на рис. 5 имеет место $r_{\kappa \epsilon}^{(1)} > r_{\kappa \epsilon}^{(2)}$.

В практических приложениях довольно часто ограничиваются рассмотрением первых двух моментов μ и K при анализе случайных полей, что эквивалентно аппроксимации неизвестного распределения вероятностей гауссовским. В более общем случае метод моментов в приложении к полям изложен у А. М. Обухова (1954₂).

Определение гауссовского распределения вероятностей в применении к однородному скалярному полю находим у А. М. Обухова (1954₂). Распределение вероятностей одномерного случайного поля $\xi_1(Z)$ в R^n называется гауссовским, если для любого конечного набора n точек из $V \subset R^n$ распределение случайного поля в этих точках описывается n -мерным законом Гаусса:

$$p_V(x_1, \dots, x_n) = p_V(X) = \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^n \|K\|}} \exp \left\{ -\frac{1}{2} \times \right.$$

$$\left. \times (X - \mu)^T K^{-1} (X - \mu) \right\},$$

где $X^T = (x_1, x_2, \dots, x_n)$ — вектор-строка значений измерений поля $\xi_1(Z)$ в точках $Z_1, Z_2, \dots, Z_n$;

$\mu^T = (\mu_1, \mu_2, \dots, \mu_n)$ — вектор-строка математического ожидания поля $\xi_1(Z)$ в точках $Z_1, Z_2, \dots, Z_n$;

$$K = \begin{pmatrix} k_{11} & & k_{1n} \\ & \ddots & \\ & & k_{nn} \end{pmatrix} — \text{корреляционная матрица } n \times n,$$

где $k_{hi} = M[(\xi_1(Z_h) - \mu_h)(\xi_1(Z_i) - \mu_i)]$; $\|K\|$ — определитель корреляционной матрицы K ; K^{-1} — матрица $n \times n$, обратная матрице K .

Какие же из разработанных статистических характеристик присущи выбранной нами модели геохимического поля?

Во-первых, случайное поле, моделирующее геохимическое поле, неоднородно хотя бы по математическому ожиданию ввиду присутствия детерминированной составляющей.

Во-вторых, если случайная составляющая геохимического поля представляет собой изотропное поле, то методически будет правильным считать детерминированную составляющую единственным информативным для поисковых целей параметром геохимического поля.

Если же случайная составляющая не изотропна, то, по-видимому, имеет смысл изучать и характер неоднородности корреляционных зависимостей в исследуемом поле.

Свойства детерминированной составляющей и способы ее выделения будут рассмотрены в главах IV и V. Здесь же мы подробнее остановимся на характеристиках случайных полей, с тем чтобы иметь возможность рационально описывать и опознавать их.

Современные методики пробоотбора дают не точечные измерения содержаний в геохимическом поле, а интегрированные результаты по области взятия пробы. Как известно (Пугачев, 1962, с. 240; Матерон, 1968, с. 80), такого рода процедура регулирует результаты измерений, но оставляет их в классе случайных функций (полей).

Возможно, что при гипотетическом точечном опробовании геохимического поля мы имели бы возможность анализировать распределение в пространстве химических элементов с точностью до размеров минеральных образований.

При интегративных способах пробоотбора мы имеем возможность анализировать только такие структуры поля, которые сравнимы по размерам с расстоянием между пробами в земном пространстве. Точные количественные соотношения между свойствами случайного поля и возможностями его дискретного измерения выводятся с помощью спектральной теории случайных полей.

2. ЭЛЕМЕНТЫ СПЕКТРАЛЬНОЙ ТЕОРИИ ОДНОРОДНОГО СЛУЧАЙНОГО ПОЛЯ

Очень часто функции имеют избыточность представления в области своих естественных аргументов (например, времени или пространственных координат). После применения к ним преобразования Фурье эти функции записываются в области частот с минимальной избыточностью. Так, например, для представления гармонического колебания в области волновых чисел необходимо лишь знание двух параметров для колебания определенной частоты — амплитуды и начальной фазы. Ниже мы приводим элементы обобщения спектральной теории на однородные случайные поля.

Любое однородное случайное поле в R^v допускает спектральное разложение (Яглом, 1952):

$$\xi(Z) = \int_{\Lambda^v} e^{i(\omega Z)} U(d\omega),$$

где $(\omega Z) = \omega_1 Z_1 + \dots + \omega_v Z_v$, — скалярное произведение v -мерных векторов Z из исходного пространства R^v и ω из пространства Λ^v волновых чисел;

$d\omega = (d\omega_1, \dots, d\omega_v)$, — элемент объема пространства Λ^v ;

$U(d\omega)$ — случайная функция v -мерного интервала $d\omega$, удовлетворяющая ряду условий (Яглом, 1952, стр. 67). Э. Хеннан (1974, с. 111) называет случайную функцию $U(d\omega)$ функцией с ортогональными приращениями.

Спектральное разложение может быть записано и в вещественной форме. Для наглядности приведем выражение для спектрального представления однородного случайного поля $\xi(z_1, z_2)$, заданного на плоскости ($v=2$) с координатными осями z_1 и z_2 :

$$\begin{aligned} \xi(z_1, z_2) = & \int_0^\infty \int_0^\infty [U_c(d\omega_1, d\omega_2) \cos(\omega_1 z_1 + \omega_2 z_2) + \\ & + U_s(d\omega_1, d\omega_2) \sin(\omega_1 z_1 + \omega_2 z_2)]. \end{aligned}$$

В данном случае каждое волновое число (ω_1, ω_2) из двумерного пространства Λ^2 характеризуется амплитудой

$$A = \sqrt{U_c^2(d\omega_1, d\omega_2) + U_s^2(d\omega_1, d\omega_2)}$$

и начальной фазой

$$\varphi = \arctg \frac{U_s(d\omega_1, d\omega_2)}{U_c(d\omega_1, d\omega_2)}.$$

Особенность спектрального представления случайных функций и полей по сравнению с таковым для детерминированных функций и полей состоит в том, что амплитуды A и начальные фазы φ всех волновых чисел — случайные величины.

Корреляционная функция однородного случайного поля также имеет спектральное представление

$$K(r) = \int_{\Lambda^v} e^{i(\omega r)} dF(\omega),$$

где $F(\omega) = F(\omega_1, \dots, \omega_v)$ — неубывающая функция, называемая спектральной функцией или спектральной мерой поля $\xi(Z)$.

Спектральная функция является уже неслучайной характеристикой поля, так как $dF(\omega) = M[U(d\omega) \cdot U^T(d\omega)]$, где M — знак математического ожидания.

В том случае, когда корреляционная функция $K(r)$ достаточно быстро убывает при $r \rightarrow \infty$, спектральное разложение корреляционной функции можно выразить через спектральную плотность

$$S(\omega) = S(\omega_1, \dots, \omega_v) = \frac{\partial^v}{\partial \omega_1 \dots \partial \omega_v} F(\omega),$$

а именно:

$$K(r) = \int_{\Lambda^v} e^{i(\omega r)} S(\omega) d\omega.$$

Спектральная плотность $S(\omega)$ связана с корреляционной функцией посредством формулы обращения v -мерных интегралов Фурье:

$$S(\omega) = \frac{1}{(2\pi)^v} \int_{R^v} e^{-i(\omega r)} K(r) dr. \quad (\text{III.7})$$

Полный интеграл от спектральной плотности равен дисперсии соответствующего случайного поля $\xi(Z)$:

$$K(0) = D_\xi = \int_{\Lambda^v} S(\omega) d\omega = \int_{\Lambda^v} dF(\omega) < +\infty.$$

Из теории случайных функций известно, что чем шире интервал автокорреляции r_k , тем более узкую полосу частот занимает спектральная плотность, и наоборот. Например, абстрактная модель так называемого «белого шума» с некоррелированными соседними значениями случайной функции ($r_k \rightarrow 0$) имеет бесконечно широкий спектр и соответственно бесконечно большую дисперсию.

Ширина спектра Δ_ω , т. е. область частот, в пределах которой спектральная плотность значимо отлична от нуля, является очень важной характеристикой случайной функции:

$$\Delta_\omega = \frac{1}{S(0)} \int_{\Lambda^v} S(\omega) d\omega.$$

Так, задача измерения случайной функции в дискретных точках без потери информации решена именно в терминах спектральной теории. Решение этой проблемы, известной как теорема В. А. Котельникова, состоит в следующем (Котельников,

1956). Если случайную функцию $\xi(Z)$, заданную реализацией $\{\xi_i\}$, ($i=1, 2, \dots$), на бесконечном интервале значений аргумента z со спектральной плотностью, равной нулю за пределами полосы частот $\Delta\omega$, измерять в точках через равные интервалы $\frac{1}{2\Delta\omega}$, то этих измерений $\xi_i (i=1, 2, \dots)$ достаточно, чтобы восстановить полностью без потери информации исследуемую функцию в любой точке z пространства R^1 :

$$\hat{\xi}(z) = \sum_{i=-\infty}^{\infty} \xi_i \frac{\sin \pi (2\Delta\omega z - i)}{\pi (2\Delta\omega z - i)}. \quad (\text{III.8})$$

Если проводить измерения чаще, то будет иметь место избыток информации, т. е. невозможно увеличение точности восстановления случайной функции по измерениям только ее значений. Если же проводить измерения реже, чем через интервал $\frac{1}{2\Delta\omega}$, то будет иметь место потеря информации о поведении исследуемой случайной функции.

Обобщение теоремы Котельникова на случайное поле, заданное на плоскости (Z_1, Z_2) , приводят, например, Р. Дуда и П. Харт (1976, с. 326):

$$\hat{\xi}(z_1, z_2) = \sum_{i=-\infty}^{\infty} \sum_{j=-\infty}^{\infty} \xi_{ij} \frac{\sin \pi (2\Delta\omega_1 z_1 - i)}{\pi (2\Delta\omega_1 z_1 - i)} \frac{\sin \pi (2\Delta\omega_2 z_2 - j)}{\pi (2\Delta\omega_2 z_2 - j)},$$

где ξ_{ij} — измерения поля в узлах целочисленной решетки с шагом $\frac{1}{2\Delta\omega_1}$ по оси z_1 и шагом $\frac{1}{2\Delta\omega_2}$ по оси z_2 .

Для изотропного случайного поля интегрирование по угловым переменным в (III. 7) можно провести явно, если перейти к полярным (сферическим) координатам:

$$\begin{aligned} (z_1, \dots, z_n) &= (r, \theta_1, \dots, \theta_{n-2}, \varphi), \\ (\omega_1, \dots, \omega_n) &= (\Omega, \lambda_1, \dots, \lambda_{n-1}). \end{aligned} \quad (\text{III.9})$$

В полярных координатах спектральное представление корреляционной функции будет иметь следующий вид:

$$K(r) = \int_0^{\infty} Y_r(\Omega r) d\Phi(\Omega), \quad (\text{III.10})$$

где

$$Y_r(\Omega r) = 2^{\frac{\nu-2}{2}} \Gamma\left(\frac{\nu}{2}\right) \cdot I_{\frac{\nu-2}{2}}(\Omega r) \cdot (\Omega r)^{\frac{2-\nu}{2}}$$

$\Gamma(\cdot)$ — гамма-функция; $I_l(\cdot)$ — функция Бесселя l -го порядка.

Соотношение между спектральными функциями $F(\omega)$ и $\Phi(\Omega)$ в различных системах координат можно найти у А. М. Яглома (1957) и у Ю. Д. Попова, М. И. Ядренко (1969).

Для многомерного скалярного изотропного случайного поля имеем:

$$k_{ij}(r) = \int_0^{\infty} Y_{ij}(\Omega r) d\Phi_{ij}(\Omega), \quad i, j = 1, \dots, m.$$

Для изотропного случайного поля на плоскости ($\nu=2$) и в трехмерном пространстве ($\nu=3$) спектральное представление корреляционной функции (III, 10) приобретает соответственно следующий вид:

$$K(r) = \int_0^{\infty} I_0(\Omega r) d\Phi(\Omega),$$

$$K(r) = \int_0^{\infty} \frac{\sin \Omega r}{\Omega r} d\Phi(\Omega).$$

Корреляционная функция $K(r)$ изотропного поля, заданного на ν -мерном пространстве R^ν ($\nu \geq 3$), дифференцируема l раз, где l равно целой части величины $\frac{\nu-1}{2}$. Корреляционная функция случайного поля марковского типа дифференцируема при $r > 0$. Дифференцируемость корреляционных функций означает, что поле имеет ограниченную ширину Δ_ω спектра $F(d\omega)$ (Ядренко, 1960).

Если $\xi(Z)$ — непрерывное гауссовское изотропное поле марковского типа с нулевым математическим ожиданием, то его нормированная корреляционная функция равна (Ядренко, 1960)

$$\rho(r) = 2^{\frac{\nu-2}{2}} \Gamma\left(\frac{\nu}{2}\right) \frac{I_{\frac{\nu-2}{2}}(\Omega r)}{(\Omega r)^{\frac{2-\nu}{2}}}$$

В частности, корреляционная функция гауссовского изотропного поля марковского типа на плоскости ($\nu=2$) равна

$$\rho(r) = I_0(\Omega r), \quad (\text{III.11})$$

и в трехмерном пространстве ($\nu=3$)

$$\rho(r) = \frac{\sin \Omega r}{\Omega r} = \frac{\sin \pi ar}{\pi ar}. \quad (\text{III.12})$$

Графики этих функций приведены соответственно на рис. 6 и 7.

На основе спектральных представлений можно получить оценку абсолютного минимума корреляционной функции (Обухов, 1954). Так, например, для изотропного скалярного поля на плоскости ($\nu=2$) имеем

$$\rho(r) = \frac{k(r)}{k(0)} > -0,40275$$

что определяется минимумом функции Бесселя $I_0(y)$ при $y > 0$ (см. формулу (III. 11)).

Для практики очень важно понятие «эргодичности случайного поля», формулирующееся в виде эргодической теоремы. Для стационарной случайной функции эргодическая теорема заключается в следующем (Пугачев, 1962). Для того чтобы среднее значение случайной функции по ограниченной области L имело пределом в среднем квадратическом математическое ожидание μ случайной функции (при условии, что $\mu = \text{const}$),

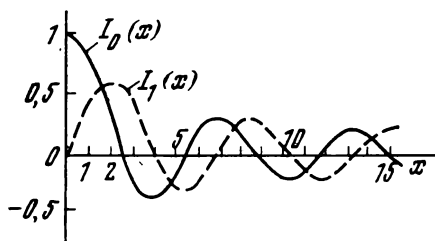


Рис. 6. Функции Бесселя нулевого и первого порядков (по Е. Янке и др.)

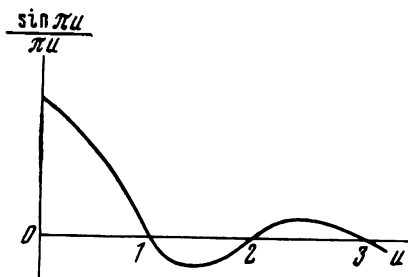


Рис. 7. Функция $\frac{\sin \pi u}{\pi u}$ (по А. М. Зазедному)

корреляционная функция $k(t_1, t_2)$ должна удовлетворять следующему соотношению:

$$\lim_{L \rightarrow \infty} \frac{1}{L^2} \int_L \int_L k(t_1, t_2) dt_1 dt_2 = 0.$$

Для выполнения последнего достаточно, чтобы корреляционная функция стационарного процесса $k(t_2 - t_1)$ стремилась к нулю при неограниченном увеличении разности $|t_2 - t_1|$.

По иному сформулировал эргодическую теорему У. Гренандер (1961): гауссовский стационарный процесс эргодичен тогда и только тогда, когда его спектральная мера $F(d\omega)$ непрерывна. А. А. Темпельман (1973) нашел обобщение результата Гренандера для гауссовских полей.

В заключение заметим, что спектральное представление является частным случаем так называемых канонических разложений или, что одно и то же, разложений по системе ортонормированных функций, называемых базисом. В спектральном анализе системой базисных ортонормированных функций является система синусов и косинусов кратных аргументов (базис тригонометрических функций). Тригонометрические функции инвариантны к циклическим сдвигам, и поэтому преобразование Фурье оказалось очень мощным инструментом исследования периодических сигналов (например, в теории связи, при изучении космических излучений и т. п.).

В тех случаях, когда исследуемая функция (поле) задается на конечном интервале аргументов, оценки спектральной плот-

ности получают посредством различных искусственных приемов. Наиболее распространенный прием — периодизация заданной функции, т. е. точное повторение ее при $Z \rightarrow \infty$. Строго говоря, базис тригонометрических функций в этом случае не является адекватным средством анализа случайного поля.

Для анализа низкочастотных процессов и полей, задаваемых на конечных участках пространства R^n , более подходящими, по-видимому, являются базисные системы кусочно-постоянных функций — системы функций Хаара, Уолша и их разновидности (Мановцев, 1973). Ввиду того, что между преобразованиями Фурье и Уолша существует однозначная связь («Быстрые алгоритмы...», 1976), мы не будем более подробно останавливаться на характеристиках базисов Уолша и Хаара. Можно лишь заметить, что последние более удобны при ведении расчетов на ЭВМ. Так, быстроедействие преобразования Уолша на порядок выше, чем у преобразования Фурье, что дает возможность увеличивать скорость получения на ЭВМ оценок спектральных характеристик случайных процессов и полей.

Пример использования разложения Уолша—Адамара для выделения детерминированной составляющей геологического поля на плоскости ($v=2$) находим у А. А. Бугайца, Г. К. Дворниченко (1977).

8. СЛУЧАЙНОЕ ПОЛЕ С ОДНОРОДНЫМИ ПРИРАЩЕНИЯМИ

В ряде ситуаций бывает удобнее вести исследование не самого случайного поля, а так называемого поля приращений. Удобства такого перехода обусловлены свойствами поля приращений, основные из которых заключаются в следующем. Во-первых, поле приращений определяется с точностью до константы, поэтому его исследование эквивалентно исключению из рассмотрения среднего уровня поля. Последнее бывает необходимо при сопоставлении материалов анализов различных лабораторий или материалов, собранных в разное время и по различным методикам. Во-вторых, дисперсия поля приращений часто остается конечной даже в тех случаях, когда дисперсия исходного поля имеет тенденцию расти при расширении поля. Ситуация подобного рода продемонстрирована Ж. Матероном (1968, с. 72) на примере исследования содержания золота на месторождении Витватерсранда. В-третьих, градиент поля с однородными приращениями является изотропным векторным полем, описываемым более просто, чем в общем случае. Итак, введем еще одно понятие, полезное при анализе скалярных полей и их градиентов, — понятие поля приращений для любого случайного поля $\xi(Z)$. Случайное поле $\xi(Z)$, определенное с точностью до аддитивной константы, можно рассматривать как случайное поле

$$\eta_r(Z) = \xi(Z) - \xi(Z - r)$$

при любых $Z, r \in R^n$

Поле приращений $\eta_r(Z)$ подчиняется следующему правилу сложения полей:

$$\eta_{r_1+r_2}(Z) = \eta_{r_1}(Z) + \eta_{r_2}(Z - r_1).$$

Однородное случайное поле $\xi(Z)$, определенное с точностью до константы, будет называться полем с однородными приращениями, если следующие характеристики поля

$$M[\eta_r(Z)] = \mu_r,$$

$$M[(\eta_{r_1}(Z+r) - \mu_{r_1}) \cdot (\eta_{r_2}(Z) - \mu_{r_2})^T] = H(r, r_1, r_2)$$

не зависят от Z при всех $Z, r, r_1, r_2 \in R^v$

Моменты μ_r и $H(r, r_1, r_2)$ являются математическим ожиданием и корреляционной функцией поля $\eta_r(Z)$; иначе их еще называют средним значением приращения поля $\xi(Z)$ и соответственно структурной функцией поля $\xi(Z)$.

В случае вещественного поля $\eta_r(Z)$ структурная функция может быть выражена через более простую функцию одной переменной

$$M[|\eta_r(Z)|^2] = H(0; r, r) = H(r).$$

Для многомерного поля структурная функция $H(r)$ является так же матричнозначной, как и корреляционная функция $K(r)$ (см. рис. 5). Элементарные функции $h(r)$ и $k(r)$ одномерного поля связаны между собой следующими соотношениями (Обухов, 1954₁):

$$\begin{aligned} h(r) &= 2[k(0) - k(r)], \\ k(r) &= \frac{1}{2}[h(\infty) - h(r)]. \end{aligned} \quad (\text{III.13})$$

Приблизительный характер этих функций показан на рис. 8.

Для изотропного случайного поля с однородными приращениями среднее значение приращений μ_r тождественно равно нулю, а структурная функция представима в полярных координатах (III. 9) следующим образом:

$$H(r) = \int_0^\infty [1 + Y_s(\Omega r)] d\Phi(\Omega) + br^2,$$

где b — произвольная неотрицательная константа.

Впервые метод структурных функций был предложен А. Н. Колмогоровым (1941) в теории локально изотропной турбулентности и оказался чрезвычайно плодотворным. Основные положения корреляционной теории локально однородного поля можно найти и у А. М. Яглома (1957).

Геостатистика Ж. Матерона (1968), одна из лучших математических моделей в геологических дисциплинах, построена на основе теории полей приращений и их структурных функций. Некоторые прикладные аспекты геостатистики будут рассмотрены в главе IV. Здесь мы коснемся еще одного подхода к описанию приращений поля по различным направлениям в пространстве R^n — определения и вычисления градиентов исследуемого случайного поля.

Прежде всего необходимо уточнить понятия «непрерывности» и «дифференцируемости» случайного поля. Обобщим подобного рода определения, известные в теории случайных функций.

Случайное поле $\xi(Z)$ называется непрерывным в точке $Z_0 = (z_{01}, \dots, z_{0v})$, если

$$\lim_{|Z - Z_0| \rightarrow 0} M[(\xi(Z) - \xi(Z_0))^2] = 0.$$

Необходимым и достаточным условием непрерывности случайного поля (однородного в широком смысле) является непрерывность его корреляционной функции $K(r)$, в том числе при $r=0$.

Случайное поле $\xi(Z)$ называется дифференцируемым по Z_i в точке $Z = (z_1, \dots, z_v)$ и имеющим частную производную

$\frac{\partial \xi(Z)}{\partial z_i}$, $(i=1, 2, \dots, v)$, если

$$\lim_{\Delta z_i \rightarrow 0} M \left[\left(\frac{\xi(z_1, \dots, z_i + \Delta z_i, \dots, z_v) - \xi(z_1, \dots, z_i, \dots, z_v)}{\Delta z_i} - \frac{\partial \xi(z_1, \dots, z_i, \dots, z_v)}{\partial z_i} \right)^2 \right] = 0.$$

Необходимым и достаточным условием выполнения приведенного соотношения для изотропных полей является существование двух производных корреляционной функции в точке $r=0$, причем

$$M \left[-\frac{\partial}{\partial z_i} \xi(Z+r) \cdot \frac{\partial}{\partial z_i} \xi(Z) \right] = -\frac{\partial^2}{\partial z_i^2} K(r),$$

где $r_i = |(Z+r)_i - z_i|$.

Последнее условие говорит о том, что для случайных полей, дифференцируемых один раз, корреляционные функции должны характеризоваться параболическим поведением в точке $r=0$ (Матерон, 1968, с. 78).

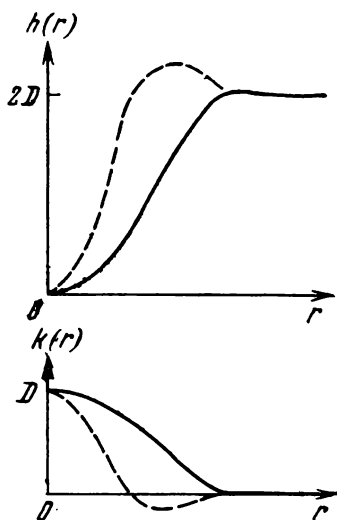


Рис. 8. Соотношения между корреляционной функцией $k(r)$ и структурной функцией $h(r)$

Производная случайного поля в некотором направлении i может быть записана в виде

$$\frac{d\xi}{dl} = \cos \alpha_1 \frac{d\xi}{dz_1} + \dots + \cos \alpha_v \frac{d\xi}{dz_v}, \quad (\text{III.14})$$

где $\alpha_1, \dots, \alpha_v$ — углы между заданным направлением и положительным направлением соответствующих координатных осей $z_1, \dots, z_v$.

Выборочные функции гауссовского поля с вероятностью единица любое число раз дифференцируемы и удовлетворяют уравнению

$$\sum_{i=1}^v \frac{\partial^2}{\partial z_i^2} \xi(z_1, \dots, z_v) + C^2 \xi(z_1, \dots, z_v) = 0.$$

Обозначим в общем случае частную производную случайного поля $\xi(Z)$ через $\xi^{(h_1 \dots h_v)}(Z)$, так что

$$\xi^{(h_1, \dots, h_v)}(Z) = \frac{\partial^H \xi(Z)}{\partial z_1^{h_1} \dots \partial z_v^{h_v}}; \quad H = h_1 + \dots + h_v.$$

Частная производная однородного случайного поля (а также поля с однородными приращениями) является при любых $h_1, \dots, h_v$ однородным случайным полем (Яглом, 1957), если

$$\int_{\lambda^v} \omega_1^{2h_1} \dots \omega_v^{2h_v} F(d\omega) < \infty.$$

При этом спектральная функция $F^{(h_1 \dots h_v)}(\omega)$ и спектральная случайная мера $U^{(h_1 \dots h_v)}(\omega)$ частной производной $\xi^{(h_1 \dots h_v)}(Z)$ связаны с соответствующими мерами $F(\omega)$ и $U(\omega)$ исходного поля $\xi(Z)$ следующими соотношениями:

$$F^{(h_1 \dots h_v)}(\omega) = \int_{\lambda^v} \omega_1^{2h_1} \dots \omega_v^{2h_v} F(d\omega),$$

$$U^{(h_1 \dots h_v)}(\omega) = \int_{\lambda^v} \omega_1^{2h_1} \dots \omega_v^{2h_v} U(d\omega).$$

Векторное поле, заданное на R^v , в каждой точке Z которого составляющие вектора определяются первыми частными производными поля $\xi(Z)$ по соответствующим координатам z_i ($i=1, \dots, v$) пространства R^v , называется градиентом скалярного поля $\xi(Z)$:

$$\overrightarrow{\text{grad}} \xi(Z) = \left(\frac{\partial \xi(Z)}{\partial z_1} \vec{z}_1, \dots, \frac{\partial \xi(Z)}{\partial z_v} \vec{z}_v \right). \quad (\text{III.15})$$

Градиент изотропного скалярного поля с однородными приращениями является изотропным векторным полем.

Для однородного изотропного векторного случайного поля $\overrightarrow{\psi}(Z)$ в R^v математическое ожидание всегда тождественно равно нулю, а корреляционные связи представимы в виде матрицы

В порядке $\nu \times \nu$, для которой все составляющие B_{ij} можно выразить через две — продольную и поперечную — корреляционные функции.

Продольная корреляционная функция B_L вычисляется вдоль любого заданного направления L , т. е.

$$B_L(r) = M[\psi_L(Z+r)\psi_L^T(Z)],$$

где $\psi_L(\vec{Z})$ — проекция вектора $\vec{\psi}(\vec{Z})$ на направление L .

Поперечная корреляционная функция $B_{\perp L}$ вычисляется как

$$B_{\perp L}(r) = M[\psi_{\perp L}(Z+r)\psi_{\perp L}^T(Z)],$$

где $\psi_{\perp L}(Z)$ — проекция того же вектора $\vec{\psi}(\vec{Z})$ на некоторое направление в R^3 , перпендикулярное направлению L .

Тогда

$$B_{ij}(r) = [B_L(r) - B_{\perp L}(r)] \frac{r_i r_j}{r} + B_{\perp L}(r) \delta_{ij}, \quad (i, j = 1, \dots, \nu).$$

Изотропное векторное случайное поле будет потенциальным (т. е. будет являться градиентом некоторого скалярного, строго говоря, изотропного случайного поля с однородными приращениями), если выполняется условие (Обухов, 1954)

$$B_L(r) = \frac{d}{dr} [r B_{\perp L}(r)].$$

А. М. Яглом (1957) приводит условие потенциальности векторного поля в терминах спектров.

Введем следующие обозначения для потенциального векторного поля, заданного на трехмерном пространстве R^3 с координатными осями z_1, z_2, z_3 :

$$\overrightarrow{\text{grad}} \xi(Z) = \nabla \xi(Z) = (\nabla_{z_1}(Z), \nabla_{z_2}(Z), \nabla_{z_3}(Z)), \quad (\text{III.16})$$

$B_L(r) = B_{z_1}(r)$ и $B_{\perp L}(r) = B_{\perp z_1}(r)$ для определенности в обозначениях. Тогда продольная $B_{z_1}(r)$ и поперечная $B_{\perp z_1}(r)$ корреляционные функции потенциального векторного поля $\overrightarrow{\text{grad}} \xi(Z)$ будут связаны с корреляционной функцией $K(r)$ исследуемого скалярного поля $\xi(Z)$ следующими соотношениями (Обухов, 1954):

$$B_{z_1}(r) = M[\nabla_{z_1}(z_1) \nabla_{z_1}^T(z_1 \pm r)] = -\frac{d^2}{dr^2} K(r), \quad (\text{III.17})$$

$$\begin{aligned} B_{\perp z_1}(r) &= M[\nabla_{z_2}(z_1) \nabla_{z_2}^T(z_1 \pm r)] = M[\nabla_{z_2}(z_1) \nabla_{z_2}(z_1 \pm r)] = \\ &= -\frac{1}{r} \frac{d}{dr} K(r), \end{aligned}$$

причем

$$\begin{aligned} M[\nabla_{z_1}(z_1) \nabla_{z_2}^T(z_1 \pm r)] &= M[\nabla_{z_1}(z_1) \nabla_{z_2}^T(z_1 \pm r)] = \\ &= M[\nabla_{z_2}(z_1) \nabla_{z_2}^T(z_1 \pm r)] = 0. \end{aligned}$$

В выражении (III. 17) замечаем отображение известного положения, что корреляционная функция производной случайного поля равна второй производной его корреляционной функции (Пугачев, 1962, с. 234).

Выводы.

Скалярное поле, заданное на плоскости или в трехмерном пространстве, является разновидностью функций нескольких аргументов. Аппарат описания изотропных случайных полей является обобщением теории стационарных процессов. В математическом отношении эти обобщения не представляют собой сложности. Однако практическое использование математического аппарата для многомерных полей, требующее оперирования с тензорами и матричнозначными функциями, вызывает необходимость решения вопроса о наиболее наглядном и удобном представлении характеристик поля.

Если учесть, что наиболее точной математической моделью для данных геохимического опробования является неоднородное поле, то теория однородных случайных полей (описанная сжато в данной главе) представляется тем основным «кирпичиком», который может помочь заложить фундамент теоретических исследований геохимического поля.

Глава IV. СТАТИСТИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ ИЗУЧЕНИЯ ГЕОХИМИЧЕСКОГО ПОЛЯ

1. СТАТИСТИЧЕСКИЕ ОЦЕНКИ ПЛОТНОСТИ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ВЕРОЯТНОСТЕЙ ЗНАЧЕНИЙ НЕОДНОРОДНОГО СЛУЧАЙНОГО ПОЛЯ

Практика анализа случайных полей требует умения оценивать распределение вероятностей значений поля по экспериментальным данным. Непосредственная оценка плотности распределения типа (III. 2) или (III. 3) представляет собой огромную трудность. Первая сложность — методическая. Как наиболее наглядно представить плотность вероятностей значений многомерного поля в v -мерном пространстве? Даже одномерная случайная функция ($m=1, v=1$), определяемая в n точках, требует построения в общем случае n -мерного закона распределения. Вторая сложность — в практическом воплощении. Оценки закона распределения типа (III. 2) и (III. 3) без дополнительной априорной информации требуют огромного объема экспериментального материала.

Вопрос максимально упрощается для изотропного поля, если корреляционная функция поля близка к δ -функции. В этом случае, согласно эргодической теореме, все имеющиеся измерения поля (в различных точках пространства R^v) можно считать независимыми выборочными данными одной случайной величины (одномерной или многомерной).

В первом приближении данные измерения неоднородного поля можно рассматривать как выборку из смешанной совокупности с полимодальной плотностью распределения. Наиболее подходящими алгоритмами оценки плотности распределения в таких случаях представляются методы непараметрической оценки.

Алгоритмы непараметрической оценки плотности вероятностей основываются на том, что вероятность P попадания значения измеренной характеристики поля в область («окно») ΔX равна

$$P_{\Delta X} = \int_{\Delta X} p(x) dx,$$

где $p(x)$ — искомая плотность распределения вероятностей.

Таким образом, набор оценок $\hat{P}_{\Delta X}$ по всем возможным непесекающимся областям ΔX значений случайной величины, известный под названием гистограммы, представляет собой усредненную по интервалам плотность вероятностей. Идея непараметрической оценки плотности распределения достаточно про-

ста, хотя доказательство сходимости такой оценки довольно сложно.

Методы непараметрической оценки плотности распределения разработаны и для многомерных случайных величин. Очень часто вводят различные «функции окна», позволяющие по-разному взвешивать экспериментальные данные, попадающие в «окно» (Parsen, 1962). Пользуются также аппроксимациями «функции окна» конечным рядом (Дуда, Харт, 1967, с. 119).

Мы приведем здесь очень удобную форму вычисления непараметрической плотности распределения m -мерной и одномерной случайных величин ξ по n выборочным значениям $\xi_1^*, \dots, \xi_n^*$, использующую кривую Гаусса в качестве «функции окна» (Добровидов, 1971):

$$p(x_i, x_n) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \frac{n^{\frac{m}{2} + \omega}}{a_i^m \sqrt{(2\pi)^m}} \times \\ \times \exp \left\{ -\frac{n^{\frac{2}{2} + \omega}}{2a_i^2} \sum_{j=1}^m (x_j - \xi_{ji}^*)^2 \right\}, \\ p(x) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \frac{n^{\frac{1}{2} + \omega}}{a \sqrt{2\pi}} \exp \left\{ -\frac{n^{\frac{2}{2} + \omega}}{2a^2} (x - \xi_i^*)^2 \right\}, \quad (\text{IV.1})$$

где $\omega > 0$ (например, $\omega = 1$); m — размерность поля; $a_i^2 \approx \hat{D}_i(\xi)$ — оценка дисперсии i -го признака.

Огромное достоинство непараметрических оценок — их гибкость, дающая возможность оценить сколь угодно сложную полимодальную кривую плотности. Последнее очень важно при исследовании неоднородных выборок, например, методами группирования. Как известно (Цыпкин, 1970), любое построение алгоритма разделения неоднородной выборки на субоднородные подсовокупности опирается на явную или неявную оценку плотности распределения вероятностей. Подробнее о методах группирования (кластер-анализа) см. в главе V.

Коснемся также вопроса о возможности параметрических оценок плотности распределения значений геохимического поля. Параметрическая оценка подразумевает всегда наличие гипотезы об аналитическом виде оцениваемой плотности (например, нормальное, логнормальное или любое другое известное распределение вероятностей). Оценке в данном случае подлежат параметры гипотетического распределения — математическое ожидание, дисперсия, коэффициенты корреляции асимметрии, эксцесса и т. п. Помимо получения оценок, подразумевается также проверка выдвинутой гипотезы о виде распределения. Проверка нескольких гипотез позволяет выбрать закон распределения, наиболее правдоподобный для исследуемых экспериментальных данных.

Знакомым с математической статистикой хорошо известно, что факт принятия той или иной гипотезы о законе распределения не означает ее теоретической истинности. К тому же критерий согласия может оказаться выполненным для нескольких гипотетических распределений.

Для большинства экспериментальных материалов, достаточно симметрично распределенных вокруг своего среднего значения, выполняются критерии согласия с симметричными унимодальными законами распределения, в том числе и с нормальным. Принятие исследователем в данном случае гипотезы о нормальном распределении вероятностей вполне оправдано в силу универсальности последнего.

Универсальность нормального распределения вероятностей обусловлена тем, что большинство встречающихся в природе случайных величин представляют собой результат сложения проявлений большого количества независимых весьма малых случайных величин. Согласно теореме Ляпунова (Пугачев, 1962, с. 159), сумма случайных величин, дисперсии которых весьма малы по сравнению с дисперсией суммы, имеет нормальное распределение вероятностей своих значений.

Второй, методический, аспект универсальности нормального распределения заключается в том, что исследование в рамках корреляционной теории (т. е. ограничивающиеся оценками первых двух важнейших моментов распределения — математического ожидания и корреляционных связей) эквивалентны принятию гипотезы о нормальном распределении для исследуемого статистического материала. Для нормального распределения первые два момента являются достаточными статистиками.

Что касается экспериментальных материалов с асимметричным распределением вероятностей относительно среднего значения, то наиболее обоснованными для ряда геологических материалов являются логнормальный и полимодальный законы распределения.

Логнормальный закон вероятностей имеет теоретическое обоснование для трех ситуаций, важных в геологии. Во-первых, как показал А. Н. Колмогоров, логнормальному закону подчинено распределение размеров частиц пород при их дроблении (Гнеденко, 1961, с. 194). Опираясь на этот результат, геологи аппроксимируют распределение вероятностей размеров частиц осадочных пород логнормальным законом (Крамбейн, Грейбилл, 1969, с. 82). Во-вторых, логнормальный закон распределения вероятностей проявляется для таких случайных величин, для которых прирост в любой момент становления был пропорционален количеству, накопленному к тому моменту. Как отметил Д. А. Родионов (1964), случайная величина с логнормальным распределением служит адекватной моделью для содержаний преобладающего вещества в одном минерале. В-третьих, логнормальный закон целесообразно применять при описании распределения

вероятностей значений погрешностей измерения концентраций при спектральном анализе.

В общем случае к положительным результатам проверки гипотезы о логнормальном распределении следует относиться осторожно. Критерий согласия удовлетворяется для довольно широкого круга левоасимметричных распределений, типичных также и для неоднородных выборок. Плотность распределения смешанных совокупностей правильнее представлять в виде полимодальных законов. Оценка полимодальных плотностей может быть легко получена посредством рассмотренных выше непараметрических статистик типа (IV. 1).

Кроме того, полимодальный закон распределения можно интерпретировать как взвешенную сумму унимодальных законов, каждый из которых несет информацию о вероятностных свойствах некоторой подсовокупности данных, присутствующей в смеси, представленной экспериментальным материалом:

$$p(x) = \sum_{i=1}^l \alpha_i p_i(x), \quad (\text{IV. 2})$$

где

$$\sum_{i=1}^l \alpha_i \int_{-\infty}^{\infty} p_i(x) dx = 1.$$

Если задаться аналитическим видом элементарных одномодальных плотностей $p_i(x)$, например нормальным в силу его универсальности, то формула (IV. 2) принимает более конкретный вид:

$$p(x) = \sum_{i=1}^l \alpha_i N(x; \mu_i, K_i), \quad (\text{IV. 3})$$

где $N(x, \mu, K)$ — аналитический вид кривой Гаусса с параметрами μ и K .

Закон (IV. 3) получил в литературе название полигауссовского. Оценка закона (IV. 3) по экспериментальным материалам сводится к оценке параметров $\{\alpha_i, \mu_i, K_i\}$, $i=1, 2 \dots, l$, а также числа слагаемых l .

За последние годы модель полигауссовского распределения вероятностей успешно используется для решения различного рода задач.

В поисковой геохимии модель полимодального распределения представляется наиболее адекватной для значений содержания химического элемента в породе. Интерпретация отдельных составляющих в модели (IV. 3) зависит от характера обрабатываемого материала. При моделировании закона распределения результатов литохимической съемки естественно предполагать, как мы уже отмечали (Верховская, Конюхова, 1971), что подсовокупность с наибольшим весом α_i представляет фоновое син-

генетичное рассеяние элемента. Рассматриваемая модель позволяет довольно часто оценить минимально аномальное содержание элемента по материалу геохимического опробования без отбора специальных фоновых выборок (рис. 9).

В тех случаях, когда опробование ведется по заведомо ореольному пространству (например, при опробовании горных вы-

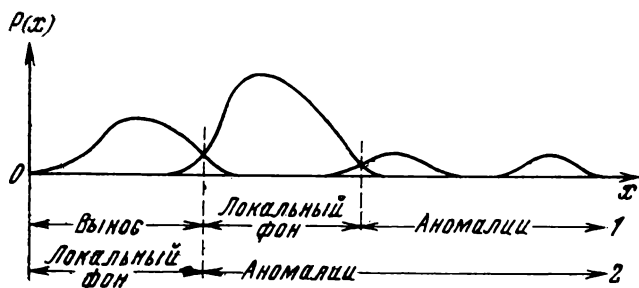


Рис. 9. Интерпретация полигауссовского распределения вероятностей содержаний по результатам геохимического опробования.

1 — при литогеохимической съемке, при опробовании керна поисково-оценочных скважин; 2 — при опробовании горных выработок в пределах месторождения

работок на известных месторождениях), подсовокупность с максимальным весом α_i , естественно, отражает преобладающие в выборке ореольные концентрации.

2. ОСНОВЫ ТЕОРИИ ЛИНЕЙНОЙ ФИЛЬТРАЦИИ

В практике исследования случайного поля обычно известен лишь ограниченный объем измерений этого поля в какой-то области V пространства R^n или в n дискретных точках (V_n) того же пространства. Какая бы ни стояла перед исследователем задача, она может быть решена только в плане построения некоторой (оптимальной для каждой задачи) функции Q от экспериментальных данных

$$\varphi = Q [\{\xi(Z_i)\}, Z_i \in V].$$

В классе линейных преобразований экспериментальных данных функции Q имеют следующий вид для непрерывного и дискретного случаев соответственно:

$$\begin{aligned} \varphi(Z) &= \int_V \xi(Z') g(Z, Z') dZ', \\ \varphi(Z) &= \sum_{i=1}^n \xi(Z_i) g(Z, Z_i). \end{aligned} \quad (\text{IV.4})$$

Всякое решение задачи, сводящееся к построению оценок типа (IV. 4), является линейной фильтрацией поля $\xi(Z)$, а функции $g(\cdot)$ называются весовыми функциями. В свете спектральной

теории случайного поля можно сказать, что фильтр, выполняющий преобразование (IV. 4), пропускает различные составляющие спектра неодинаково, что позволяет выделять из случайного поля полосу наиболее низкочастотных изменений или, наоборот, самые высокочастотные флуктуации.

Фильтрация, уменьшающая интенсивность высоких частот, называется во многих прикладных науках сглаживанием. Примером простейшего сглаживающего фильтра по n дискретным экспериментальным данным является система вычисления скользящего среднего

$$\bar{\xi}(Z) = \frac{1}{N} \sum_{Z_i \in V_N} \xi(Z_i),$$

где V_N — область вокруг точки Z , включающая N точек измерения поля.

В данном случае весовая функция фильтра является ступенчатой:

$$g(Z, Z_i) = \begin{cases} \frac{1}{N}, & \text{если } Z_i \in V_N, \\ 0, & \text{если } Z_i \notin V_N. \end{cases}$$

В общем случае теория линейной фильтрации позволяет находить оптимальные весовые функции в соответствии с выбранным критерием качества фильтрации. Чаще всего пользуются критерием минимума среднеквадратической погрешности фильтрации в точках измерения поля.

Статистическая фильтрация с пропуском высокочастотных флуктуаций может быть реализована путем вычитания сглаженного поля из исходного поля. Сглаживание, осуществляющее оценку математического ожидания поля, является лишь примером того, что линейная оценка любого параметра поля по ограниченному числу экспериментальных данных сводится к схеме фильтрации (IV.4).

В терминах фильтрации записывается и решение задачи восстановления значений случайного поля в любой точке пространства R^n по измерениям этого поля в точках $Z_1, \dots, Z_n, (V_n)$:

$$\hat{\xi}(Z) = \sum_{i=1}^n \xi(Z_i) g(Z, Z_i). \quad (\text{IV.5})$$

В зависимости от того, какое взаимное расположение имеют точки области измерения V_n и точка Z , в которой оценивается значение поля, различают задачи интерполяции ($Z \in V_n$), задачи экстраполяции ($Z \notin V_n$) и задачи предсказания (экстраполяция по временной координате вперед).

Принципиальная возможность восстановления значений функции по конечному количеству ее измерений при ограниченном спектре этой функции доказана в ставших классическими

трудах Котельникова и Шеннона (теорема квантования). Теорема Котельникова приведена нами в главе III (раздел 2). В терминах теории фильтрации формула (III. 8) является формулой восстановления поля в любых точках пространства R^1 , причем оптимальной весовой функцией является, как доказал В. А. Котельников (1956), функция

$$g(z, z_l) = \frac{\sin \pi (2 \Delta_\omega z - l)}{\pi (2 \Delta_\omega z - l)},$$

график которой приведен на рис. 7.

В работе D. P. Petersen, D. Middleton (1962) дано обобщение теоремы квантования для неслучайного поля в ν -мерном евклидовом пространстве.

В работах этих же авторов (1964, 1965) решена задача восстановления значений случайного поля в любой точке ν -мерного пространства по n измерениям, произвольно расположенным в R^ν . Считается известной корреляционная функция $k(Z_1, Z_2)$ поля $\xi(Z)$. Из условия минимума среднеквадратической погрешности восстановления получается система n уравнений относительно искомым оптимальных весовых коэффициентов $g(Z, Z_i)$, $i=1, 2, \dots, n$ в (IV. 5):

$$k(Z, Z_l) = \sum_{i=1}^n k(Z_i, Z_l) \cdot g(Z, Z_i), \quad l=1, \dots, n. \quad (\text{IV. 6})$$

В тех случаях, когда существует возможность измерения в фиксированном ряде точек $\{Z_i\}$ пространства R^ν не только значений; поля $\xi(Z_i)$, но и градиентов поля $\nabla \xi(Z_i)$, восстановление поля осуществляется более точно (определение градиента поля и обозначения см. в формулах (III. 15) и (III. 16). Формула восстановления поля, вместо (IV. 5), становится следующей:

$$\begin{aligned} \hat{\xi}(Z) &= \sum_{i=1}^n [\xi(Z_i) \cdot g(Z, Z_i) + \nabla \xi(Z_i) \cdot g_\nabla(Z, Z_i)] = \\ &= \sum_{i=1}^n \left[\xi(Z_i) \cdot g(Z, Z_i) + \sum_{s=1}^{\nu} \frac{\partial \xi(Z)}{\partial Z_s} \Big|_{Z=Z_i} \cdot g_{\nabla s}(Z, Z_i) \right], \end{aligned}$$

где $g(Z, Z_i)$ и $\{g_{\nabla s}(Z, Z_i), s=1, 2, \dots, \nu\}$ — искомые весовые функции.

Условие минимума среднеквадратической погрешности реконструкции однородного поля в n точках дает следующую систему уравнений, аналогичную формуле (IV. 6), для определения весовых функций:

$$k(Z - Z_l) = \sum_{i=1}^n \left[k(Z_i - Z_l) \cdot g(Z, Z_i) - \right.$$

$$\begin{aligned}
& - \sum_{s=1}^v \left. \frac{\partial k(Z_* - Z)}{\partial Z_s} \right|_{\substack{Z = Z_l \\ Z_* = Z_l}} g_{\nabla_s}(Z, Z_l) \Bigg], \quad l = 1, \dots, n \\
& \frac{\partial k(Z - Z_*)}{\partial z_s} \Big|_{Z_* = Z_l} = \sum_{i=1}^n \left[\left. \frac{\partial k(Z - Z_*)}{\partial z_s} \right|_{\substack{Z = Z_i \\ Z_* = Z_l}} \cdot g(Z, Z_i) + \right. \\
& \left. + g_{\nabla_s}(Z, Z_i) \sum_{p=1}^v \left. \frac{\partial^2 k(Z - Z_*)}{\partial z_s \partial z_p} \right|_{\substack{Z = Z_i \\ Z_* = Z_l}} \right], \quad l = 1, \dots, n; \quad s = 1,
\end{aligned}$$

Как мы уже упоминали при рассмотрении теоремы Котельникова, задача выбора рациональной системы измерений поля (в геологии — системы опробования) имеет решение при ограниченном спектре исследуемого поля.

В качестве примера приведем окончательное решение для задачи восстановления изотропного случайного поля на плоскости, у которого спектр отличен от нуля лишь для частот, меньших $2\pi B$ (т. е. $\Omega = \sqrt{\omega_1^2 + \omega_2^2} < 2\pi B$ в плоскости Λ^2 волновых чисел). Эффективной сетью опробования на R^2 в этом случае является сеть 60° ромбической триангуляции со стороной $\frac{1}{BV\sqrt{3}}$ (рис. 10).

Для восстановления такого поля в любой точке Z пространства R^2 с помощью соотношения (IV.5) наилучшая весовая функция имеет вид:

$$g(Z, Z_l) = \frac{2Z \left(\cos \frac{2\pi B}{V\sqrt{3}} Z \right) (\cos 2\pi B Z_l - 1) - 2\sqrt{3} Z_l \left(\sin \frac{2\pi B}{V\sqrt{3}} Z \right) (\sin 2\pi B Z_l)}{(2\pi B)^2 Z (Z^2 - 3Z_l^2)}.$$

Если исследуемое поле $\xi(Z)$ можно представить в виде суммы детерминированной составляющей — сигнала $C(Z)$ и флуктуирующей составляющей — шума $\gamma(Z)$

$$\xi(Z) = C(Z) + \gamma(Z),$$

то для восстановления сигнала $C(Z)$ в любой точке пространства

$$\hat{C}(Z) = \sum_{i=1}^n \xi(Z_i) \cdot g(Z, Z_i)$$

весовая функция $g(Z, Z_i)$ должна определяться из следующей системы n уравнений:

$$k_{\xi\xi}(Z, Z_l) = \sum_{i=1}^n k_{\xi\xi}(Z_i, Z_l) \cdot g(Z, Z_i), \quad l = 1, \dots, n, \quad (\text{IV.7})$$

где $k_{\xi\zeta}$ и $k_{\xi\xi}$ — соответственно перекрестная корреляция «наблюдение-сигнал» и автокорреляция наблюдений. Они должны быть известны.

Когда число точек измерения n велико, системы уравнений (IV. 6), (IV. 7) не могут быть решены непосредственно обращением матрицы. В таком случае для решения указанных систем

уравнений известны два метода. Первый метод основан на предположении, что весовые функции позволяют представление в виде $g(Z, Z_i) = g(Z - Z_i)$. Тогда можно воспользоваться методикой, приведенной в работе D. P. Petersen, D. Middleton (1965). Второй метод, приемлемый только для однородных полей, основан на представлении пространства R^v в виде совокупности элементарных ячеек (в небольшом количестве N), равномерно расположенных в пространстве R^v . Тогда возможен переход к более простой и меньшей по размерности (N вместо n) системе уравнений.

В тех случаях, когда решение системы уравнений (IV. 7) вызывает затруднения, можно воспользоваться алгоритмом статистической интерполяции (Каримов, Некрасов, 1975), в котором в качестве весовых функций используются автокорреляционные функции сигнала $k_{cc}(r)$ и шума $k_{\tau\tau}(r)$:

$$\hat{\xi}(z) = \xi(z_1) \cdot g(z, z_1) + \xi(z_2) \cdot g(z, z_2),$$

где $z_1 < z < z_2$,

$$g(z, z_1) = k_{cc}(z - z_1) \cdot A - k_{cc}(z_2 - z) \cdot B,$$

$$g(z, z_2) = k_{cc}(z_2 - z) \cdot A - k_{cc}(z - z_1) \cdot B,$$

$$A = \frac{k_{cc}(0) - k_{\tau\tau}(0)}{[k_{cc}(0) + k_{\tau\tau}(0)]^2 - [k_{cc}(z_2 - z_1) + k_{\tau\tau}(z_2 - z_1)]^2},$$

$$B = \frac{k_{cc}(z_2 - z_1) + k_{\tau\tau}(z_2 - z_1)}{[k_{cc}(0) + k_{\tau\tau}(0)]^2 - [k_{cc}(z_2 - z_1) + k_{\tau\tau}(z_2 - z_1)]^2}.$$

Одно из практических приложений операции линейной фильтрации находим в геостатистике Ж. Матерона (1968), где она фигурирует под названием крайгинг. Здесь фильтрация выполняет функции сглаживания с весовыми коэффициентами, пропорциональными удалению точки измерения от центральной точки в рудном блоке, для которого вычисляется среднее содержание

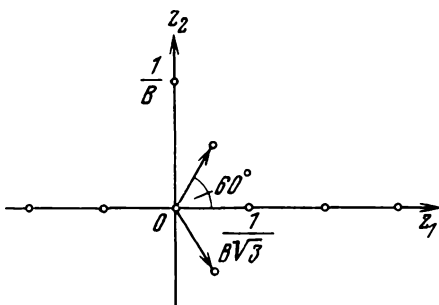


Рис. 10. Схема оптимального опробования случайного поля с ограниченным спектром вида $\Omega < 2\pi B$ (по D. P. Petersen)

полезного компонента. Подсчет среднего содержания ведется в алгоритме крайгинга по формуле (IV.5) для центральной точки Z подсчетного блока (Матерон, 1968, с. 138). В связи с тем, что при моделировании содержаний полезного компонента в руде принята схема случайного поля с однородными приращениями, весовые коэффициенты $g(Z, Z_i)$, $i=1, 2 \dots, n$ определяются по системе уравнений, аналогичной (IV.6), но выраженной через структурные функции $h(Z-Z_i)$ (III.13):

$$h(Z-Z_i) = \sum_{i=1}^n h(Z_i-Z_i) \cdot g(Z, Z_i), \quad i=1, 2, \dots, n,$$

где n — число точек измерения содержаний в пределах блока.

Как справедливо замечено А. М. Марголиным в послесловии к книге Ж. Матерона (1968), операция крайгинга дает более правильные оценки средним содержаниям компонента в блоке, чем среднеарифметическое значение, так как сглаживание осуществляет в принципе учет ураганных проб и других неоднородностей поля.

3. СТАТИСТИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ ВЫДЕЛЕНИЯ ДЕТЕРМИНИРОВАННОЙ СОСТАВЛЯЮЩЕЙ ГЕОХИМИЧЕСКОГО ПОЛЯ

В тех случаях, когда априорно можно предположить, что детерминированная составляющая $C(Z)$ геохимического поля входит в наблюдаемое поле $\xi(Z)$ аддитивно, т. е.

$$\xi(Z) = C(Z) + \gamma(Z), \quad (IV.8)$$

то ее можно отождествлять с математическим ожиданием $\mu_\xi(Z)$ исследуемых данных $\xi(Z)$. Флуктуационная составляющая $\gamma(Z)$ в этом случае моделируется центрированными значениями наблюдаемого поля $\xi(Z) = \xi(Z) - \mu_\xi(Z)$, имеющими нулевое математическое ожидание и ту же корреляционную функцию $K(Z)$, что и исходное поле $\xi(Z)$ (в силу определения корреляционной функции — см. формулу (III. 4)).

Модель (IV. 8) представляется хорошей для результатов химического анализа бороздовых проб, типичных для разведочных данных. В этом случае детерминированная составляющая $C(Z)$ представляет достаточно регуляризованное геохимическое поле, так что флуктуационная составляющая $\gamma(Z)$ отображает лишь ошибки анализа и может считаться изотропным полем с независимыми значениями в сколь угодно близких точках Z_1 и Z_2 .

Использование результатов спектрального анализа бороздовых проб (например, по керну скважин) требует учета мультипликативного характера погрешностей анализа ψ :

$$\xi(Z) = C(Z) \psi(Z). \quad (IV.9)$$

К анализу мультипликативной модели (IV.9) можно подойти двояко. С одной стороны, можно перейти к аддитивной модели логарифмов содержаний

$$\ln \xi(Z) = \ln C(Z) + \ln \psi(Z).$$

В этом случае можно предположить флуктуационную составляющую $\ln \psi(Z)$ изотропным полем (рис. 11).

Другой подход использует эквивалентность записей (IV. 8) и (IV. 9) при следующем соотношении составляющих:

$$\psi(Z) = 1 + \frac{\gamma(Z)}{C(Z)} \quad \text{или} \quad \gamma(Z) = C(Z) [\psi(Z) - 1].$$

При таком подходе флуктуационную составляющую $\gamma(Z)$ в аддитивной модели нельзя считать изотропным полем. Шумовое поле $\gamma(Z)$ неоднородно по дисперсии и, в более общих случаях, по корреляционной функции.

Второй подход позволяет разделить составляющие $C(Z)$ и $\psi(Z)$ мультипликативной модели (IV. 9) за три операции (выделение детерминированной составляющей, центрирование и нормирование), в то время как первый подход (через логарифмы) — за пять операций (логарифмирование, выделение детерминированной составляющей, центрирование и две операции потенцирования).

Если используются спектральные анализы результатов точечного опробования, то необходимо учесть и возможность существования аддитивной флуктуационной составляющей $\delta(Z)$ в действительном (не искаженном измерениями) геохимическом поле;

$$\xi(Z) = [C(Z) + \delta(Z)] \psi(Z). \quad (\text{IV.10})$$

Приведение этой модели к аддитивной (IV.8) получается при

$$\gamma(Z) = \delta(Z) + \eta(Z) + \frac{\delta(Z) \cdot \eta(Z)}{C(Z)},$$

где $\eta(Z) = C(Z) [\psi(Z) - 1]$.

Наиболее строгое и полное исследование оценок математического ожидания дано в работе А. И. Пономаренко (1974). Им сделано обобщение результата Гренандера, полученного для стационарных процессов, на случай непрерывного (в среднем квадратичном) однородного случайного поля $\xi(Z)$ в R^v :

$$\hat{\mu}_\xi = \lim_q \frac{1}{L(V_q)} \int_{V_q} \xi(Z) l(dZ),$$

где величину $L(V_q)$ можно воспринимать в первом приближении как объем (строго математически — мера Лебега в R^v), $\{V_q\}$ — сеть ограниченных выпуклых множеств, входящих в R^v

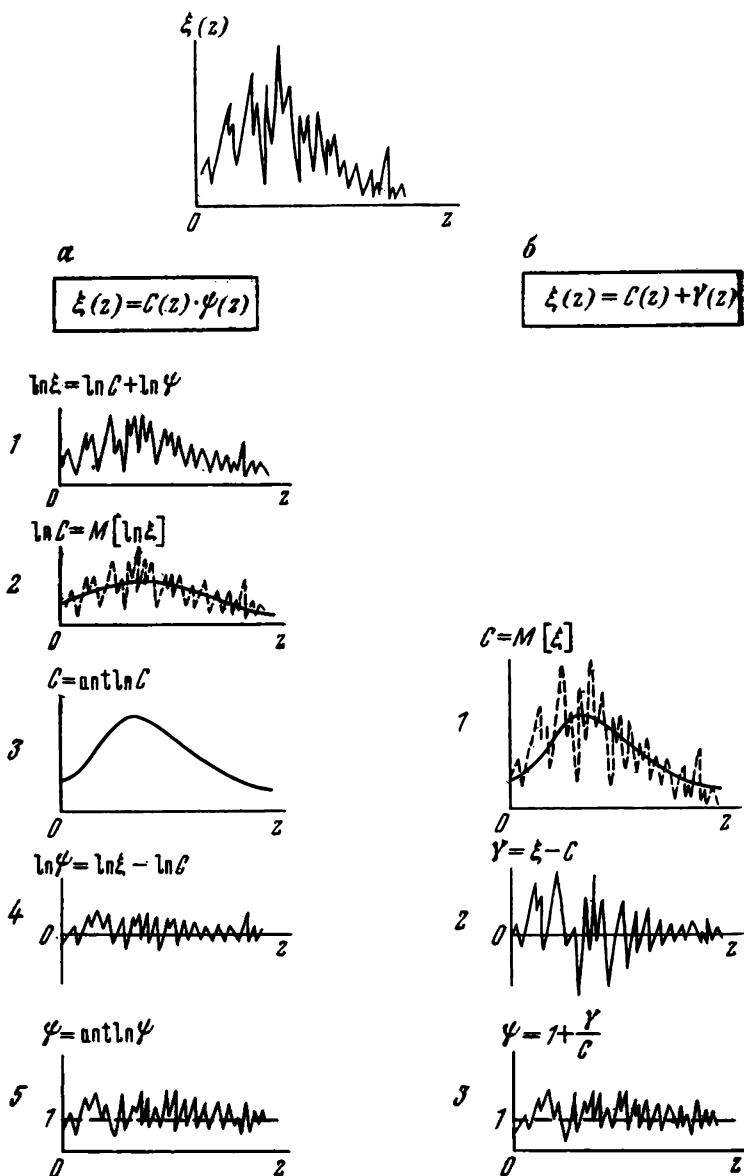


Рис. 11. Процедуры выделения составляющих в мультипликативной и аддитивной моделях.

а — мультипликативная модель: 1 — логарифмирование, 2 — сглаживание, 3 — потенцирование, 4 — центрирование, 5 — потенцирование; б — аддитивная модель: 1 — сглаживание, 2 — центрирование, 3 — нормирование

М. И. Ядренко (1973) дает линейные, эффективные и несмещенные оценки математического ожидания изотропного случайного поля, построенные для ряда частных случаев.

В работе С. Я. Виленкина и Т. И. Дубенко (1970) рассмотрены простейшие несмещенные оценки математического ожидания поля $\xi(Z)$, заданного на плоскости и измеренного в области V пространства R^2 , так что

$$V = \{(z_1, z_2); 0 \leq z_1 \leq T, 0 \leq z_2 \leq \varphi(z_1)\}.$$

Среднеинтегральная оценка μ имеет следующий вид:

$$\hat{\mu}_v = \frac{1}{L_v} \iint_V \xi(z_1, z_2) dz_1 dz_2,$$

где L_v — площадь области V ,

а среднеарифметическая оценка μ представлена выражением:

$$\hat{\mu}_n = \frac{1}{n} \sum_{i=0}^{n_1} \sum_{j=0}^{n_2(i)} \xi(i\tau, j\Delta),$$

где τ и Δ — шаги прямоугольной сетки по осям z_1 и z_2 соответственно, в узлах которой сделаны измерения поля $\xi(Z)$, так что

$$n_1 = \left[\frac{T}{\tau} \right], \quad n_2(i) = \left[\frac{\varphi(i\tau)}{\Delta} \right], \quad n = \sum_{i=0}^{n_1} (n_2(i) + 1).$$

Доказано, что при определенных ограничениях, накладываемых на конфигурацию области V , функцию $\varphi(z_1)$ и корреляционную функцию поля $K(\cdot)$, существуют положительные τ и Δ , при которых дисперсия среднеарифметической оценки $\hat{\mu}_n$ меньше дисперсии оценки $\hat{\mu}_v$. Если учесть, что при $\tau, \Delta \rightarrow 0$ среднеарифметическая оценка $\hat{\mu}_n$ стремится к $\hat{\mu}_v$, то указанный факт означает наличие минимума дисперсии оценки $\hat{\mu}_n$ при некоторых τ и Δ , если выполняются выше упомянутые ограничения.

Как мы уже указывали в разделе 2 данной главы, простейшие оценки математического ожидания вычисляются методом сглаживания исследуемого поля (вычисления текущего среднего)

$$\hat{\mu}_\xi(Z) = \bar{\xi}(Z) = \frac{1}{L_v} \int_V \xi(Z) dZ, \quad (IV.11)$$

где L_v — v -мерный объем окрестности V с центральной точки Z .

При дискретной системе измерений имеем

$$\hat{\mu}_\xi(Z) = \bar{\xi}(Z) = \frac{1}{N} \sum_{Z_i \in V} \xi(Z_i), \quad (IV.12)$$

где N — число точек измерения поля в окрестности V вокруг точки с координатами Z .

Наиболее общие условия, обеспечивающие несмещенность оценки математического ожидания, получаемой операцией сглаживания, приведены у А. Ф. Романенко и Г. А. Сергеева (1968, с. 82—86).

Для того чтобы имело место нулевое смещение при оценке математического ожидания оператором сглаживания, необходимо, чтобы оцениваемое математическое ожидание выражало аналитически собственную функцию оператора сглаживания. Тогда в общем случае несмещенная оценка будет

$$\hat{\mu}_\varepsilon(Z) = \lambda \bar{\varepsilon}(Z), \quad (\text{IV.13})$$

где λ — соответствующее собственное число оператора.

Например:

1) если детерминированная составляющая (моделируемая математическим ожиданием) линейна в области усреднения V , то $\lambda=1$ и несмещенная оценка математического ожидания вычисляется посредством операторов (IV.11) и (IV.12) текущего среднего;

2) если детерминированная составляющая экспоненциальна (с параметром α), то для получения несмещенной оценки необходимо использовать множитель λ_s перед оператором вычисления текущего среднего, как в формуле (IV. 13):

$$\lambda = \lambda_s = \frac{\alpha L}{2} \left(\text{sh} \frac{\alpha L}{2} \right)^{-1}$$

где sh — обозначение гиперболического синуса;

3) если детерминированная составляющая имеет колебательный характер с частотой ω , то множитель λ в (IV. 13) должен быть следующим:

$$\lambda = \lambda_k = \frac{\omega L}{2} \left(\sin \frac{\omega L}{2} \right)^{-1}$$

Условие линейности математического ожидания в окрестности вычисления текущего среднего находим также у В. С. Пугачева (1962, с. 115) наряду с дополнительным условием: размеры окрестности усреднения V по всем v координатам должны значительно превышать соответствующие интервалы коррелированности $r_k^{(i)} (i=1, \dots, v)$ флуктуационной составляющей случайного поля — см. формулы (III.5) и (III.6).

В монографии Р. И. Дубова (1974) подробно описан способ оценки математического ожидания поля методом сглаживания. Приведены результаты исследования точности определения геохимических данных, являющихся исходным материалом для рассматриваемых нами задач. Высказаны соображения, по которым широко распространенный метод выделения геохимических аномалий согласно «Инструкции по геохимическим методам поисков рудных месторождений» (1965), не представляется достоверным.

Когда условия применимости метода сглаживания не выполняются, необходимо прибегать к фильтрации с весовыми функциями, общий вид которой приведен в формуле (IV. 4).

Исследование оценок математического ожидания типа (IV. 4) для поля, заданного на плоскости ($v=2$), приведено в работе С. Я. Виленкина, Т. И. Дубенко (1971). При непрерывном задании поля $\xi(Z)$ оценка имеет вид:

$$\hat{\mu}_v(Z) = \int_0^{T_1} \int_0^{T_2} \xi(z_1, z_2) \cdot g(z_1, z_2) dz_1 dz_2, \quad (\text{IV.14})$$

где Z — центр прямоугольника ($0-T_1, 0-T_2$), а весовая функция $g(z_1, z_2)$ должна удовлетворять условию

$$\int_0^{T_1} \int_0^{T_2} g(z_1, z_2) dz_1 dz_2 = 1.$$

Определение оптимальной оценки (IV. 14) математического ожидания по непрерывной реализации требует решения двумерного уравнения Винера—Хопфа:

$$\int_0^{T_1} \int_0^{T_2} g(z_1, z_2) k(z_1 - \tau, z_2 - \Delta) dz_1 dz_2 = D[\hat{\mu}_v].$$

В работе предложен метод решения этого уравнения для одного класса однородных полей с дробно-рациональными спектральными плотностями.

В дискретном варианте оценка (IV. 14) имеет вид:

$$\hat{\mu}_n(Z) = \sum_{i=0}^{n_1} \sum_{j=0}^{n_2} \xi(i\tau, j\Delta) g_{ij},$$

где Z — центр прямоугольника ($0-n_1\tau, 0-n_2\Delta$; $n = (n_1+1) \cdot (n_2+1)$), а весовые коэффициенты $\{g_{ij}\}$ должны удовлетворять соотношению

$$\sum_{i=0}^{n_1} \sum_{j=0}^{n_2} g_{ij} = 1.$$

Построение оптимальной дискретной оценки при условии минимизации дисперсии оценки $D[\hat{\mu}_n]$ сводится к решению системы $(n+1)$ линейных уравнений относительно n оптимальных весовых коэффициентов $\{g_{ij}\}$ и минимальной дисперсии $D[\hat{\mu}_n]$:

$$\left\{ \begin{array}{l} \sum_{i=0}^{n_1} \sum_{j=0}^{n_2} g_{ij} k[(i-l)\tau, (j-t)\Delta] = D[\hat{\mu}_n], \quad l=0, \dots, n_1, \\ t=0, \dots, n_2, \\ \sum_{i=0}^{n_1} \sum_{j=0}^{n_2} g_{ij} = 1, \end{array} \right.$$

где $k[(i-l)\tau, (j-t)\Delta]$ — значение известной корреляционной функции поля $\xi(Z)$, измеряемое между точками $(i\tau, j\Delta)$ и $(l\tau, t\Delta)$ в плоскости R^2 задания поля.

Для более сложных моделей, чем аддитивная модель (IV. 8) или приводящаяся к ней простая мультипликативная модель (IV. 9), выделение детерминированной составляющей не сводится к оценке математического ожидания. В таких случаях можно воспользоваться аппаратом выделения сигнала из шумов, если известны некоторые характеристики сигнала.

Так, в работе В. Н. Ботнева и В. Г. Заболотских (1973) приведено решение для задачи выделения сигнала из шума, когда имеет место функциональное взаимодействие сигнала и шума:

$$\xi(Z) = Q[\varphi(Z), \psi(Z)],$$

где $Q(\cdot)$ — заданный оператор, определяющий композицию полезной информации $\varphi(Z)$ и гауссовского белого шумового поля $\psi(Z)$ с нулевым математическим ожиданием и интенсивностью N_ψ .

При этом под полезной информацией понимается поле, представляемое суммой сигнала $C(V_Z)$ и помехи $\delta(Z)$

$$\varphi(Z) = C(V_Z) + \delta(Z),$$

где $\varphi(Z)$ — марковское случайное поле, заданное в узлах двумерной решетки E^2 ; $C(V_Z)$ — заданная функция, аргументы которой принадлежат окрестности V_Z точки Z ; $\delta(Z)$ — поле белого шума с нулевым математическим ожиданием и интенсивностью N_δ .

Подобного рода модель может оказаться весьма полезной для поисковой геохимии, так как модель (IV. 10) является ее частным случаем при

$$Q[\varphi(Z), \psi(Z)] = [C(V_Z) + \delta(Z)] \psi(Z),$$

где $\psi(Z)$ имитирует ошибки спектрального анализа, входящие мультипликативно в наблюдаемое геохимическое поле $\varphi(Z)$, а $\varphi(Z)$ состоит из суммы централизованного сингенетического поля рассеяния $\delta(Z)$ и детерминированной составляющей $C(V_Z)$, которую имеет смысл представлять в виде суммы общего тренда геохимического поля и локальных аномалий ограниченных размеров.

Задание поля в узлах двумерной решетки E^2 будет иметь место при опробовании поверхности по равномерной сети. Оценка сигнала $C(V_Z)$ в узлах равномерной сети опробования сводится к решению системы n уравнений с n неизвестными. При достаточно большом отношении сигнала к шуму предлагаемые в работе оценки будут максимально правдоподобными. Решение задачи выделения детерминированной составляющей в модели (IV.10) может быть получено на ЭВМ, например, методом последовательных приближений.

В тех случаях когда форма полезного сигнала неизвестна и флуктуационное поле шума нестационарно, необходимо использовать нелинейные фильтры для выделения детерминированной

составляющей. Привлечению методов нелинейной фильтрации к некоторым задачам геофизики посвящены работы И. Д. Савинского и др. (1973).

Подводя итог описанию различных конструктивных математических моделей геохимического поля, необходимо отметить общее смысловое (геологическое) содержание детерминированной составляющей в этих моделях, а именно: детерминированная составляющая описывает сумму общего тренда регионального фона $C_{\Phi}(Z)$, обусловленного дифференциацией пород, и ло-

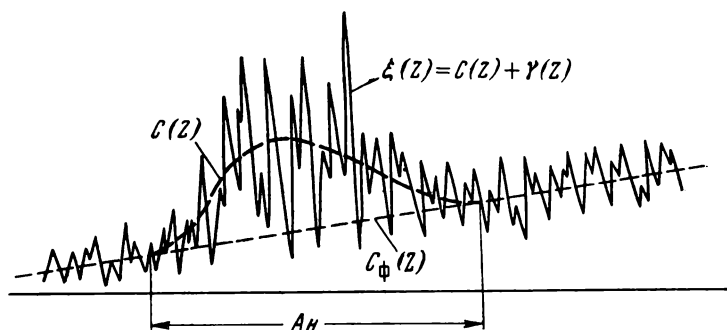


Рис. 12. Схема выделения локальной аномалии методом полосовой фильтрации $C_{ан}(z) = C(z) - C_{\Phi} = [\xi(z) - \gamma(z)] - C_{\Phi}(z)$.

АН — зона проявления локальных аномалий

кальных аномалий $C_{ан}(Z)$, отмечающих ограниченные участки повышенных концентраций:

$$\begin{aligned} C(Z) &= C_{\Phi}(Z) + C_{ан}(Z), \\ \xi(Z) &= C(Z) + \gamma(Z) = C_{\Phi}(Z) + C_{ан}(Z) + \gamma(Z). \end{aligned} \quad (IV.15)$$

Выделение локальных аномалий $C_{ан}(Z)$ можно провести операцией полосовой фильтрации, т. е. вычитанием из исходного поля как флуктуационной составляющей $\gamma(Z)$, так и составляющей самой низкой частоты $C_{\Phi}(Z)$ (рис. 12).

Выделение детерминированной составляющей геохимического поля подразумевает, естественно, дальнейший ее анализ на предмет выяснения пространственных закономерностей распределения концентраций в околорудном пространстве. Если вспомнить результаты решения прямых задач геохимии (см. главу II), то следует ожидать экспоненциальный вид у детерминированной составляющей $C_{ан}(Z)$ поля концентраций элементов в близрудных зонах.

Не затрагивая пока проблем, связанных с многофазностью оруденения и пострудными нарушениями, искажающими простейшую картину геохимического поля, зададимся вопросом: нельзя ли обнаруживать участки повышенных концентраций

(аномалий) с характерными признаками экспоненциального поведения содержаний в пространстве без операции выделения детерминированной составляющей? Такого рода задачи решаются статистическими методами обнаружения сигнала в шуме, суть которых излагается в следующем разделе.

4. СТАТИСТИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ ОБНАРУЖЕНИЯ СИГНАЛА В ШУМЕ В ПРИЛОЖЕНИИ К ПОИСКУ РУДОГЕННЫХ АНОМАЛИЙ

Как известно, околорудный ореол характеризуется повышенными концентрациями некоторого комплекса элементов, а также еще и организацией в пространстве. Наиболее полная схема такой организации состоит, по-видимому, в неслучайной смене зон комплексных аномалий. Что же касается аномалии каждой компоненты, участвующей в рудном процессе, ее форму гипотетически можно описать экспонентой с неизвестными в общем случае параметрами. Примеры подобного рода идентификации детерминированной составляющей в ореольном пространстве ряда месторождений можно найти у Р. И. Дубова (1974, с. 226, 236).

Определив аномалию с заданной (например, в виде кривой Гаусса) формой в пространстве как искомый сигнал в зашумленном геохимическом поле, можно воспользоваться методикой обнаружения сигнала в шуме, хорошо разработанной в радиотехнике. Эта методика формулируется в терминах проверки гипотез и состоит в следующем.

Примем аддитивную модель исследуемого поля концентраций

$$\xi(Z) = C(Z) + \gamma(Z),$$

где под детерминированной составляющей понимается «сигнал» определенной формы, типичной для рудогенных аномалий.

Будем проверять нулевую гипотезу H_0 об отсутствии рудогенной аномалии в исследуемом поле против альтернативы H_1 , что рудогенная аномалия $C(Z)$ предполагаемой формы, контрастности и местоположения имеется в исследуемом геохимическом поле:

$$H_0: \xi(Z) = \gamma(Z),$$

$$H_1: \xi(Z) = C(Z) + \gamma(Z).$$

Существует несколько критериев для проверки высказанной гипотезы. Если информация о «стоимости» потерь при неверных ответах отсутствует, то все оптимальные критерии сводятся к правилу определения максимума апостериорной вероятности гипотезы. Тогда критерий проверки гипотезы заключается в сравнении функции правдоподобия $L[\xi(Z)]$ с порогом:

$$L[\xi(Z_1), \dots, \xi(Z_n)] = \frac{p_0(x_{Z_1}, \dots, x_{Z_n} | H_1)}{p_0(x_{Z_1}, \dots, x_{Z_n} | H_0)} \geq b, \quad (\text{IV.16})$$

где плотности распределения $p_v(\cdot)$ значений поля при справедливости той или иной гипотезы определены в формуле (III. 2), а порог b зависит от соотношения априорных вероятностей гипотез. При равных вероятностях нулевой гипотезы (P_0) и альтернативной гипотезы (P_1) порог

$$b = \frac{P_1}{P_0} = 1.$$

Функция правдоподобия $L(\cdot)$ в (IV.16) может быть аналитически вычислена только в том случае, если непрерывные распределения $p_v(\cdot/H_1)$ и $p_v(\cdot/H_2)$ взаимно абсолютно непрерывны (Уилкс, 1967).

Проблеме выяснения условий взаимной абсолютной непрерывности двух плотностей распределения для гауссовских полей посвящены работы П. С. Кнопова (1966), М. И. Ядренко (1974), А. В. Скорохода и М. И. Ядренко (1973).

Для гауссовских полей логарифм функции правдоподобия может быть записан так:

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \{\ln L[\xi(Z_1), \dots, \xi(Z_n)]\} = \int_V \left[\xi(Z) - \frac{C(Z)}{2} \right] g(Z) dZ,$$

где $g(Z)$ является решением уравнения

$$\int_V K_\gamma(Z, \tau) \cdot g(\tau) d\tau = C(Z). \quad (\text{IV.17})$$

Тогда (при вещественных сигналах) решающее правило заключается в следующем:

$$\begin{cases} \text{принимается } H_1, \text{ если } \int_V \xi(Z) \cdot g(Z) dZ \geq \frac{1}{2} \int_V C(Z) \times \\ \quad \times g(Z) dZ + \ln b, \\ \text{принимается } H_0 \text{ в противном случае.} \end{cases} \quad (\text{IV.18})$$

С методами решения уравнения (IV.17) можно познакомиться в работе А. Г. Рамма (1973).

В качестве одного из примеров рассмотрим задачу обнаружения сигнала $C(Z)$ на фоне белого гауссовского шума $\gamma(Z)$. Белым шумом мы условились называть случайное изотропное поле с нулевым математическим ожиданием и корреляционной функцией $K_\gamma(Z, \tau) = N_\gamma \cdot \delta(Z - \tau)$, где N_γ — интенсивность белого шума (или спектральная плотность).

Из приведенного выражения для корреляционной функции белого шума видно, что значения поля в точках, сколь угодно близких друг к другу в пространстве R^n , некоррелированы.

Итак,

$$\begin{aligned} H_0: \xi(Z) &= \gamma(Z), \\ H_1: \xi(Z) &= \gamma(Z) + C(Z). \end{aligned}$$

Для белого шума в качестве флуктуационной составляющей $\gamma(Z)$ решение уравнения (IV.17) будет

$$g(Z) = C(Z)/N_{\gamma}.$$

Тогда имеем следующее решающее правило:

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{принимается } H_1, \text{ если } \int_V \xi(Z) C(Z) dZ \geq \\ \geq \frac{1}{2} \int_V |C(Z)|^2 dZ + \ln b, \\ \text{принимается } H_0 \text{ в противном случае.} \end{array} \right. \quad (\text{IV.19})$$

Для поиска месторождений по данным геохимического поля естественна ситуация, когда величина и местоположение эпицентра аномалии не известны. В терминах рассматриваемой математической модели это можно записать в виде сигнала с неизвестной амплитудой A и местоположением Z_0 его максимума:

$$C(Z) = AC_0(Z - Z_0),$$

где $C_0(Z - Z_0)$ — аналитическая запись сигнала известной формы с максимумом в точке Z_0 , равным по величине единице.

Рассмотрим сначала вопросы оценки местоположения Z_0 эпицентра сигнала и оценки амплитуды A сигнала.

При неизвестном местоположении сигнала $C(Z - Z_0)$ критерий (IV.18) трансформируется из-за необходимости вычисления серии значений интегралов

$$\int_V \xi(Z) g(Z - Z') dZ \text{ и } \int_V C(Z) g(Z - Z') dZ \quad (\text{IV.20})$$

при всевозможных $Z' \in R^n$, имитирующих местоположение сигнала (Вайнштейн, Зубаков, 1960, с. 111).

В случае белого шума, аддитивно добавляющегося к сигналу, соотношения (IV.20) приобретают вид соответственно взаимной и автокорреляционной функций:

$\int_V \xi(Z) C(Z - Z') dZ$ — взаимная корреляционная функция «наблюдение—сигнал»;

$\int_V C(Z) C(Z - Z') dZ$ — автокорреляционная функция сигнала.

Местоположение Z_0 сигнала оценивается по местоположению максимума взаимной корреляционной функции «наблюдение—сигнал»: $\hat{Z}_0 = Z'$, для которого имеет место

$$\max_{Z'} k_{\xi c}(Z, Z - Z') = \max_{Z'} \int_V \xi(Z) C(Z - Z') dZ. \quad (\text{IV.21})$$

Используя оценку для Z_0 , можно применять правило проверки гипотезы, аналогичное (IV.19):

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{принимаем } H_1, \text{ если } \int_V \xi(Z) C(Z - \hat{Z}_0) dZ \geq \\ \geq \frac{1}{2} \int_V |C(Z - \hat{Z}_0)|^2 dZ + \ln b, \\ \text{принимаем } H_0 \text{ в противном случае.} \end{array} \right.$$

В тех случаях, когда не известна только амплитуда A сигнала $AC_0(Z)$, аддитивно смешанного с белым шумом,

$$\begin{aligned} H_0: \xi(Z) &= \gamma(Z), \\ H_1: \xi(Z) &= \gamma(Z) + AC_0(Z), \end{aligned} \quad (IV.22)$$

оценка неизвестной амплитуды находится с помощью соотношения (Рамм, 1973; Кнопов, 1965):

$$\hat{A} = \frac{\int_V \xi(Z) C_0(Z) dZ}{\int_V |C_0(Z)|^2 dZ} = \frac{k_{\xi c_0}(Z, Z)}{E}, \quad (IV.23)$$

дающего состоятельную и асимптотически эффективную оценку.

А. Г. Рамм (1973) приводит следующее решающее правило для этого случая:

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{принимается } H_1, \text{ если } \frac{2}{\sqrt{2\pi}} \int_{\hat{A} \sqrt{\frac{E}{N_\gamma}}}^{\infty} \exp\left\{-\frac{t^2}{2}\right\} dt \leq \varepsilon, \\ \text{принимается } H_0 \text{ в противном случае,} \end{array} \right. \quad (IV.24)$$

где $E = \int_V |C_0(Z)|^2 dZ$ — энергия пробного сигнала с единичной амплитудой; N_γ — энергия белого шума; ε — заданная вероятность принятия нулевой гипотезы, когда она верна, что соответствует уровню значимости решающего правила, равному $(1-\varepsilon)$ 100%.

Обратившись к таблице гауссовского распределения, можно заменить неравенство (IV.24) при заданном $\varepsilon=0,95$ на следующее:

$$\hat{A} \sqrt{\frac{E}{N_\gamma}} = \frac{k_{\xi c_0}(Z, Z)}{\sqrt{EN_\gamma}} > 0,0624.$$

Вероятность ошибки обнаружения сигнала уменьшается при увеличении отношения энергии сигнала к интенсивности шума. Критерий максимума апостериорной вероятности предназначен для выделения сигналов, соизмеримых с уровнем помех, т. е. когда $E/N_\gamma > 1$.

Зависимость вероятности ошибки выделения аномалий от интенсивности аномалий имеет ту же закономерность (Никитин и др., 1966).

В работе М. И. Ядренко (1973) приведены оценки для амплитуды сигнала A в модели (IV.22), записанные в полярных координатах для случая, когда флуктуационная составляющая поля $\gamma(Z)$ изотропна.

В тех случаях, когда приходится оценивать и амплитуду и местоположение сигнала, форма которого $C_0(Z-Z')$ известна с точностью до всех параметров, алгоритм обнаружения сигнала

может быть сведен согласно уравнений (IV.21), (IV.23) и (IV.24) к следующему:

1) $\hat{Z}_0 = Z'$, для которого имеет место $\max_{Z'} \int_V \xi(Z) C_0(Z - Z') dZ$;

$$2) \hat{A}(\hat{Z}_0) = \frac{\int_V \xi(Z) C_0(Z - \hat{Z}_0) dZ}{\int_V |C_0(Z - \hat{Z}_0)|^2 dZ} = \frac{k_{\xi c_0}(Z, Z - \hat{Z}_0)}{E}; \quad (\text{IV.25})$$

$$3) \begin{cases} \text{принимается } H_1, \text{ если } \frac{2}{\sqrt{2\pi}} \int_{\hat{A}(\hat{Z}_0) \sqrt{\frac{E}{N_T}}}^{\infty} \exp\left\{-\frac{t^2}{2}\right\} dt < \epsilon, \\ \text{принимается } H_0 \text{ в противном случае.} \end{cases}$$

Как уже упоминалось, проверка гипотезы может проводиться при заданном $\epsilon = 0,95$ по следующему соотношению:

$$\hat{A}(\hat{Z}_0) \sqrt{\frac{E}{N_T}} = \frac{\max_{\hat{Z}_0} k_{\xi c_0}(Z, Z - \hat{Z}_0)}{\sqrt{EN_T}} > 0,0624,$$

что эквивалентно проверке значимости максимального значения корреляции между наблюдениями и заданным сигналом (при 5% уровне значимости).

При моделировании геохимического поля существуют, как мы уже говорили, предпосылки, позволяющие представлять единственный сигнал $C_0(Z)$ экспоненциальными функциями. Однако описанный выше алгоритм требует знания сигнала $C_0(Z)$ с точностью до параметров (для экспоненты должен быть известен параметр затухания).

Ситуация, при которой решение задачи может быть сведено к алгоритму (IV.25), имеет место, например, при организации обнаружения рудогенных аномалий в пределах изученного рудного поля, где все известные (и искомые) рудные тела имеют практически одинаковые размеры ореолов. Указанное ограничение на идентичность размеров ореолов позволяет использовать при поиске оценку параметра затухания экспоненты, полученную при изучении околорудного пространства известных месторождений.

Сопоставление работы алгоритма (IV.25) с традиционным методом выделения аномалии по критерию превышения минимально-аномального значения в пробе можно провести с помощью рис. 13.

Пусть результаты химического анализа содержаний некоторого элемента по геохимическим пробам, отобранным по некоторому профилю в пределах изучаемого рудного поля, представлены графиком 1. Выделение аномалий по критерию превышения содержания в пробе уровня минимально-аномальной концентрации позволяет отметить несколько аномальных проб. Ка-

кие из выделенных аномальных проб могут являться представителями рудных аномалий, а какие, вероятнее всего, относятся к классу ураганных проб или обусловлены ошибками анализа?

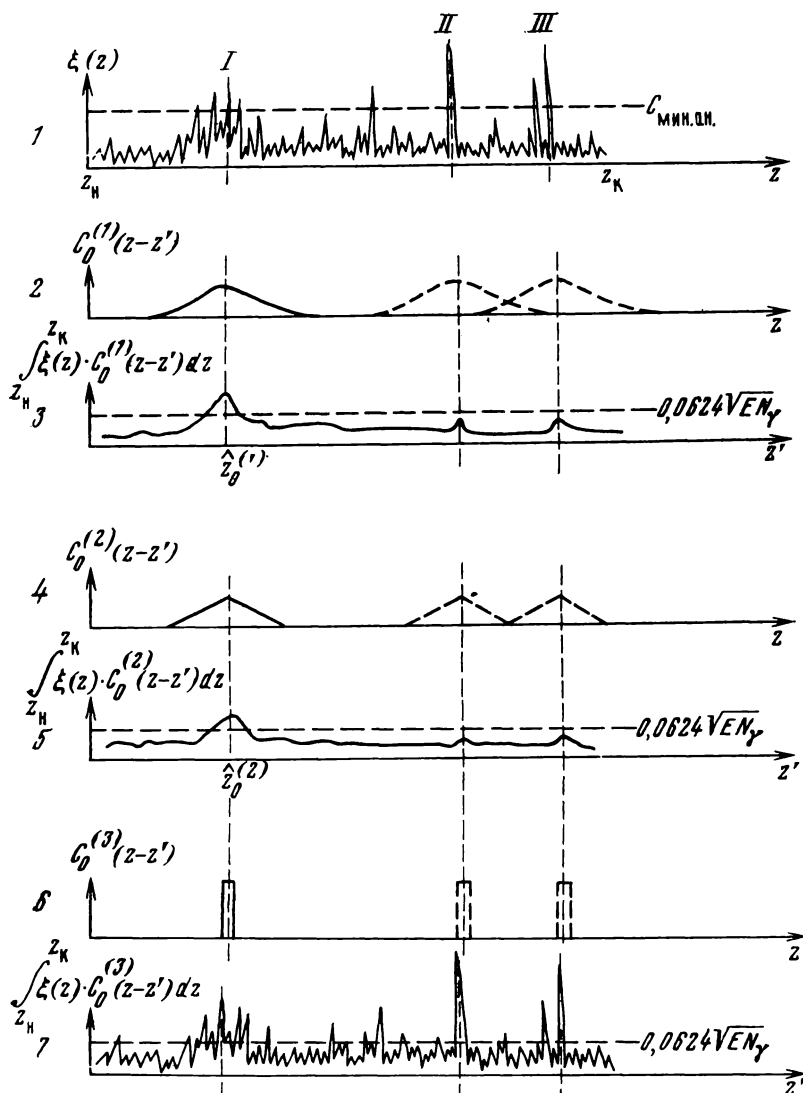


Рис. 13. Графическая иллюстрация алгоритма (IV.25) обнаружения сигнала (аномалии заданной формы) в шуме.

Для ответа на поставленный вопрос необходимо привлечение информации об особенностях рудных ореолов помимо их конгустности. Например, выработанное опытом предыдущих ис-

следований представление об обязательной комплексности и организованности в пространстве околорудных аномалий.

Воспользуемся последним признаком. Пусть в пределах рудного поля уже установлен факт, что на поверхности над известными рудными жилами образуются аномалии определенного комплекса элементов, имеющие линейно вытянутые формы. Если геологическая обстановка такая, что все рудоносные жилы в коренных породах имеют приблизительно одинаковую мощность, глубину залегания и субпараллельное простирание, то сечение аномалии по профилям, заложенным вкрест простирания жил, можно описать достаточно точно экспоненциальными функциями — см. формулу (II.8)

$$C(z) = A \exp \{-\tau(z - z_0)^2\},$$

где A — содержание исследуемого элемента над жилой в центре аномалии; τ — параметр затухания экспоненты, определяющий ширину аномалии в поперечном сечении; z_0 — местоположение центра аномалии на профиле, секущем аномалию вкрест простирания.

Параметр должен быть оценен по заведомо рудным аномалиям. Теоретически для этого достаточно любых двух измерений на одном крыле экспоненты — $C(z_1)$ и $C(z_2)$. Тогда

$$\hat{\tau} = \frac{\ln C(z_2) - \ln C(z_1)}{(z_1 - z_0)^2 - (z_2 - z_0)^2}.$$

Практически лучше оценивать τ как среднее значение по нескольким измерениям, что обусловлено естественной приближенностью любой модели к действительности.

Если перекрывающие толщи пород в пределах рудного поля имеют достаточно выдержанную мощность, то оценка τ по заведомо рудным аномалиям может быть использована в алгоритме (IV.25) для обнаружения новых идентичных жил.

Местоположение возможных аномалий на профиле отмечается по максимумам значения интеграла $\int_{z_H}^{z_K} \xi(z) \exp\{-\hat{\tau}(z - z')^2\} dz$, вычисляемого для всех z' из интервала $z_H - z_K$. Изменение параметра z' эквивалентно перемещению пробного сигнала C_0 вдоль профиля, как показано на графике 2 рис. 13. Значения упомянутого интеграла и местоположения его максимумов отображены на графике 3.

Оценка содержания исследуемого элемента в центре аномалии может быть получена следующим образом:

$$\hat{A}(\hat{z}_0) = \frac{\int_{z_H}^{z_K} \xi(z) \exp\{-\hat{\tau}(z - \hat{z}_0)^2\} dz}{\int_{z_H}^{z_K} |\exp\{-\hat{\tau}(z - \hat{z}_0)^2\}|^2 dz}.$$

Решение считать выделенную аномалию рудной принимаем с 95 %-ной достоверностью, если

$$\hat{A}(\hat{z}_0) \sqrt{E/N_1} > 0,0624,$$

где $E = \int_{z_n}^{z_k} |\exp\{-\tau(z - \hat{z}_0)^2\}|^2 dz$; N_1 — энергия шума, которая должна быть оценена при предварительных исследованиях рудного поля как дисперсия флуктуационной составляющей поля, получаемой, например, методом вычитания выделенных аномалий из исследуемого поля $\xi(Z)$.

В противном случае аномалия признается нерудной. Так, например, судя по графику 3 на рис. 13, рудной признается лишь аномалия I, а аномалии II и III — безрудными.

Естественно, что окончательное решение о перспективности аномалии следует принимать лишь в том случае, если получены положительные результаты исследования поведения в пространстве всего комплекса элементов-индикаторов.

На рис. 13 продемонстрировано также, насколько чувствителен алгоритм (IV.25) к выбору опорного сигнала $C_0(z - z')$. Графики 4 и 5 показывают, что искажение формы при правильной оценке ширины основного характера сигнала $C_0(z - z')$ в пространстве не сказывается сильно на результатах. Неверный же тип выбранного опорного сигнала может очень изменить результаты работы алгоритма. Так, например, использование узкого импульсного опорного сигнала $C_0(z - z')$, показанного на графике 6, эквивалентно выделению аномалий по критерию превышения минимально-аномального содержания (графики 1 и 7). Известные трудности интерпретации таких аномалий объясняются (в рамках нашей модели) неадекватностью узкого импульса форме реальных аномалий в пространстве.

Основные препятствия к широкому применению алгоритмов обнаружения сигнала в шуме при решении поисковых задач заключаются, по-видимому, в следующем. Во-первых, многофазность рудообразования и пострудные нарушения осложняют геохимическое поле настолько, что обойтись без прямого выделения детерминированной составляющей зачастую не удастся.

Во-вторых, использование результатов массового спектрального анализа с большими ошибками, зависящими от измеряемой величины, требует либо исследования мультипликативных (а, возможно, и еще более сложных) моделей, либо учета неізотропности шумового поля в аддитивной модели.

В первом приближении для геохимического поля, заданного результатами спектрального анализа, можно принять модель (IV.9) и использовать алгоритм (IV.25) для логарифмов содержаний, описывая сигнал квадратичной функцией

$$\ln C(z - z_0) = \ln A - \tau(z - z_0)^2.$$

Более сложные модели соотношения детерминированной составляющей и флуктуационной помехи подразумевают функциональное взаимодействие сигнала и шума типа (IV.10).

В-третьих, обобщение процедуры (IV.25) на обнаружение рудогенной аномалии в многомерном поле имеет для геохимии свои специфические сложности. Пространственные распределения аномальных концентраций различных элементов можно интерпретировать как сигналы о

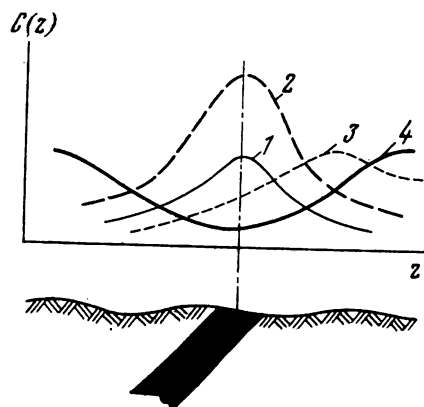


Рис. 14. Возможные соотношения в пространстве аномалий различных элементов (по В. Ф. Мягкову).

1 и 2 — конкордатные элементы, 1 и 3 — дискордатные элементы, 1 и 4 — антикордатные элементы

близко лежащем рудном теле, «принятые по различным каналам», лишь при определенных соотношениях в пространстве аномалий различных элементов (в силу зонального строения ореола). Наиболее простые методы многоканального обнаружения сигнала (Башаринов, Флейшман, 1962, с. 162) — обнаружение сигнала хотя бы в одном канале и обязательное обнаружение сигнала во всех каналах — нецелесообразны для поисковой геохимии. Опознавание «каналов» — элементов, для которых экстремумы аномалий совпадают в пространстве, выявление элементов со сдвинутыми

в пространстве аномалиями относительно совпадающих — все эти «нюансы» имеют колоссальную информативность в геохимии. Проблема выяснения такого рода соотношений в пространстве поднята в работе В. Ф. Мягкова (1975), где введены понятия «конкордатных элементов» (с максимумами аномалий в одном месте пространства R_v), «антикордатных элементов» (у которых совпадает местоположение противоположных экстремумов) и «дискордатных элементов» (со сдвинутыми максимумами аномалий в пространстве R_v) (рис. 14).

В свете сказанного процедура многоканального обнаружения сигнала для обработки геохимической информации должна обладать разрешающей способностью фиксировать совокупности «каналов» — элементов с конкордатным и антикордатным поведением сигналов и позволять задавать различные (неравные) априорные вероятности наличия сигнала в различных каналах. Тогда порог b в (IV.16) будет различным для различных элементов:

$$b_{(i)} = \frac{P_1(i)}{P_0(i)} = \frac{P_1(i)}{1 - P_1(i)},$$

где $P_1(i)$ — априорная вероятность аномалий i -го элемента в исследуемом поле.

Оценки априорных вероятностей, необходимые для определения порога b , задаются исследователем или вычисляются заранее в соответствии с имеющимися априорными представлениями о специализации района и существующими гипотетическими представлениями о процессах рудо- и ореолообразования.

Такого рода взвешивание значимости аномалий различных элементов проводится геохимиками-поисковиками на интуитивном уровне и пока совершенно не формализовано.

Получивший широкое распространение алгоритм оконтуривания аномалий по значениям суммы или произведения содержаний (Григорян, Туманян, 1972) является разновидностью метода многоканального обнаружения сигнала в шуме. В этом алгоритме используется узкий импульс в качестве пробного сигнала S_0 , алгоритм не обладает требуемой разрешающей способностью и не дифференцирует элементы по их информативности в околорудном ореоле. Его основное достоинство — простота. Отсутствие же необходимых свойств у алгоритма требует дальнейших исследований характера выделенных с его помощью аномалий. Аддитивные и мультипликативные аномалии используют свойства контрастности и комплексности концентраций элементов-индикаторов в ореоле по закону дизъюнкции («или»), в то время как суть геохимического поиска требует применения операции конъюнкции («и»). Правильнее, по нашему мнению, выделять зоны проявления ассоциации аномальных элементов по одновременному превышению порогов содержаниями комплекса элементов в совокупности соседних проб.

Четвертая трудность, встающая при внедрении методов обнаружения сигналов в шуме при решении геохимических поисковых задач, заключается в отсутствии знания корреляционных функций (или спектров) «шумов» в геохимическом поле. Проблема измерения корреляционных функций и спектров посвящена довольно обширная литература (Котюк и др., 1967; Розенберг, 1968; Мирский, 1972; Химмельблау, 1973; Бендат, Пирсол, 1974). Типичный вид корреляционных функций изотропного случайного поля представлен аналитически в уравнениях (III.11), (III.12) и на рис. 6 и 7. Однако опыт измерения корреляционных функций и спектров флуктуационной составляющей геохимических полей практически отсутствует. Наиболее распространенной гипотезой является предположение о независимости соседних проб при дискретной сети точечного пробоотбора. Если расстояние между геохимическими пробами действительно намного превышает интервал корреляции случайной составляющей поля, то модель белого шума для поисковых задач становится достаточно правомочной.

Выводы.

Одной из наиболее приемлемых конструктивных математических моделей геохимического поля представляется аддитивная модель. При анализе геохимического поля в рамках этой модели имеет смысл использовать хорошо разработанный аппарат линейной фильтрации, позволяющей раскладывать анализируемые пространственные данные на низкочастотные плавные составляющие и высокочастотные флуктуации. Методы выделения локальных аномалий в рамках аддитивной модели сводятся к реализации полосового фильтра. При наличии априорной информации о пространственной конфигурации аномалий, связанных с рудогенным процессом, поисковые задачи могут решаться посредством методов выделения сигнала из шума (хорошо разработанных в теории приема радиосигналов).

Глава V. НЕКОТОРЫЕ СПЕЦИАЛЬНЫЕ МЕТОДЫ ИЗУЧЕНИЯ НЕОДНОРОДНОГО ПОЛЯ

1. АНАЛИТИЧЕСКИЕ АППРОКСИМАЦИИ ГЕОХИМИЧЕСКОГО ПОЛЯ

Выделение геохимических аномалий эквивалентно по постановке задачи выделению сигналов на фоне шума. Однако использование методов линейной фильтрации, описанных в главе IV, связано с рядом трудностей. Во-первых, в анализируемом геохимическом поле присутствуют различные «сигналы» одновременно (различные ассоциации химических элементов с повышенными концентрациями различной степени, что обусловлено зональным характером строения ореолов). Зачастую бывает неизвестно, какие именно сигналы могут присутствовать в реализации исследуемого поля. Во-вторых, в настоящее время еще нет достаточно надежных сведений о статистических характеристиках геохимического фона и помех геохимического опробования. И, в-третьих, исследователь всегда имеет одну реализацию геохимического поля, в то время как неоднородное поле не эргодично.

Все это привело к развитию специальных методов исследования неоднородного поля по одной реализации, основанных на возможности аппроксимации реализации аналитическими функциями:

$$\xi(Z) = \sum_{i=1}^m A_i \varphi_i(Z) + \varepsilon(Z) = \hat{\xi}(Z) + \varepsilon(Z), \quad (V.1)$$

где $\varphi_i(Z)$ — система известных аналитических функций; A_i — коэффициенты, вычисляемые по данным измерения поля в известной реализации; $\varepsilon(Z)$ — ошибка аппроксимации, величину которой ограничивает критерий близости аппроксимирующей функции $\hat{\xi}(Z)$ к аппроксимируемой функции $\xi(Z)$ Ахизер, 1947).

Значение аналитического представления поля заключается в первую очередь в том, что вся сумма информации о структуре исследуемого поля концентрируется в сравнительно немногих (10—20) коэффициентах. Ярчайшим представителем метода аппроксимации является спектральное разложение поля (см. раздел 2 главы III).

При аппроксимации поля на ограниченных территориях околоземного и земного пространства (в метеорологии, геофизике, геологии) часто используют алгебраические полиномы в качестве системы функций $\{\varphi_i(Z)\}$. Например, аппроксимирующий полином степени N на плоскости запишется так:

$$\hat{\xi}(z_1, z_2) = A_{00} + A_{10}z_1 + A_{01}z_2 + A_{11}z_1z_2 + \dots + A_{0N}z_2^N. \quad (V.2)$$

Качество аппроксимации измеряется обычно среднеквадратической погрешностью приближения в точках наблюдения:

$$\delta = \sum_{i=1}^n \varepsilon^2(Z_i) = \sum_{i=1}^n [\xi(Z_i) - \hat{\xi}(Z_i)]^2, \quad (V.3)$$

где n — число точек наблюдения в исследуемой реализации.

Условие минимума (V.3) приводит к решению системы уравнений относительно коэффициентов $\{A_{jk}\}$:

$$\left\{ \frac{\partial \delta}{\partial A_{jk}} = 0 \right\}, \quad j, k = 0, \dots, N.$$

Найденные коэффициенты A_{jk} подставляются в (V.2), что позволяет проводить интерполяцию поля в любой точке (z_1, z_2) пространства R^2 и вычислять остаточные отклонения $\varepsilon(Z)$ согласно (V.1).

Модель (V.1) принципиально отличается от статистической схемы оптимальной фильтрации (IV.5) тем, что в последней система весовых функций $\{g(\cdot)\}$ не задается, а определяется с помощью системы уравнений (IV.6), в которой заложена информация о статистических свойствах поля в виде корреляционных функций. В (V.1) аналитические функции $\varphi_i(Z)$ выбираются исследователем по тем или иным соображениям, от которых и зависит успех аппроксимации поля.

При отсутствии информации о корреляционной функции поля иногда пользуются различными системами весовых функций в (IV.5), для которых имеются эвристические доказательства их оптимальности.

Можно показать (Пановский, Брайер, 1972), что свойства сглаживающего фильтра будут ближе к оптимальным, если весовая функция будет равномерно и симметрично убывающей от центрального весового коэффициента в точке аппроксимации Z . Таким свойством обладают средние Стеклова*, у которых весовая функция в формулах (IV.4) для сглаживания процесса, усредняемого в «окне» длиной $2L$, имеет следующий вид:

$$g(z, z_i) = \frac{2}{L} \Phi\left(\frac{z - z_i}{L}\right) = \frac{2}{L} \left[1 + \frac{|z - z_i|}{L} \left(\ln \frac{|z - z_i|}{L} - 1 \right) \right]. \quad (V.4)$$

Характер взвешивающей функции $\Phi(u)$ приведен на рис. 15.

* Модифицированный алгоритм вычисления средних Стеклова и аналитический вид весовой функции (V.4) сообщены К. И. Осколковым.

К этому же классу субоптимальной фильтрации относятся схемы экспоненциального сглаживания (Романенко, Сергеев, 1968, с. 99):

$$\hat{\xi}(Z) = \frac{1}{L} \int_0^Z \exp\left\{-\frac{Z-Z'}{L}\right\} \xi(Z') dZ'$$

$$\text{и } \hat{\xi}(Z) = \frac{1}{N} \sum_{i=0}^n \left(1 - \frac{1}{N}\right)^{n-i} \xi(Z_i),$$

где L и N — параметры сглаживания, $\{Z_i\}$; $i=1, 2, \dots, n$ — система равноотстоящих друг от друга точек измерения поля.

Для системы неравноотстоящих точек в работе В. Г. Иванченко (1975) предлагается схема вычисления весовых функций $g(Z, Z_i)$ в (IV.5) по расстояниям точки интерполяции Z до точек измерения Z_i в пространстве R^n , которая моделирует интуитивные действия человека при решении рассматриваемой задачи:

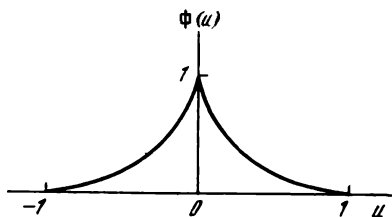


Рис. 15. Характер взвешивающей функции $\Phi(u)$ в алгоритме вычисления средних Стеклова

$$g(Z, Z_i) = \left[(|Z - Z_i|^2 + a^2) \sum_{j=1}^n (|Z - Z_j|^2 + a^2) \right]^{-1}$$

где a — параметр шума измерений, для определения которого рекомендуется решение определенного уравнения.

Описанные алгоритмы субоптимальной фильтрации занимают промежуточное положение между методами оптимальной линейной фильтрации и методами аналитической аппроксимации. В алгоритмах субоптимальной фильтрации весовые функции задаются априори, что типично для методов аппроксимации. Однако выбранными весовыми функциями взвешиваются непосредственно значения измеренного поля в соответствии с (IV.5), в то время как в алгоритмах аппроксимации (V.1) коэффициенты $\{A_i\}$ вычисляются так, чтобы аппроксимация удовлетворяла заданному критерию качества типа (V.3). Обычное отсутствие в алгоритмах субоптимальной фильтрации аппарата вычисления каких-либо параметров, оптимизирующих некоторый критерий качества (за исключением алгоритма В. Г. Иванченко), вынуждает исследователя приводить эвристические, интуитивные доказательства целесообразности таких алгоритмов. Таким образом, оптимальная фильтрация безусловно лучше субоптимальной, но и от алгоритмов аппроксимации можно ожидать лучшего качества в общем случае, чем от субоптимальной фильтрации.

Наименьшее число членов аппроксимирующего ряда при заданной ошибке аппроксимации получается при использовании ортогональных полиномов Чебышева

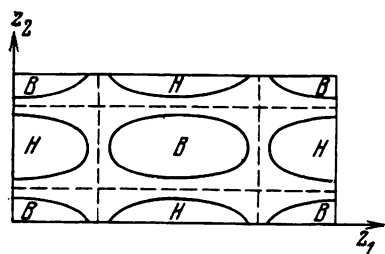
$$\hat{\xi}(z_1, z_2) = A_{00}\varphi_0(z_1)\varphi_0(z_2) + \dots + A_{ii}\varphi_i(z_1)\varphi_i(z_2) +$$

Ортогональная система полиномов Чебышева строится по следующему алгоритму:

$$\varphi_0(z) = 1,$$

$$\varphi_1(z) = z - p_{10}\varphi_0(z),$$

$$\varphi_l(z) = z^l - \sum_{k=0}^{l-1} p_{lk}\varphi_k(z),$$



$$\text{где } p_{lk} = \frac{\sum_{j=0}^k [z^l \varphi_j(z)]}{\sum_{j=0}^k [\varphi_j(z)]^2}$$

Коэффициенты разложения $\{A_{ij}\}$, получаемые по среднеквадратическому критерию (V.3), вычисляются согласно следующему выражению:

Рис. 16. Вид полиномов Чебышева $\varphi_2(z_1)$ $\varphi_2(z_2)$ на участке плоскости $z_1 z_2$.

В — повышения поверхности $\varphi_2(z_1)$ $\varphi_2(z_2)$; Н — понижения

$$A_{ij} = \frac{\sum_{k=1}^{n_1} \sum_{l=1}^{n_2} [\xi(z_{k1}, z_{l2}) \varphi_l(z_{k1}) \varphi_j(z_{l2})]}{\sum_{k=1}^{n_1} [\varphi_i^2(z_{k1})] \sum_{l=1}^{n_2} [\varphi_j^2(z_{l2})]}.$$

Для каждого полинома характерно свое собственное поле. Так, первые полиномы $\varphi_1(z_1)\varphi_0(z_2)$ и $\varphi_0(z_1)\varphi_1(z_2)$ дают линейную аппроксимацию поведения поля по направлениям z_1 и z_2 соответственно. Вторые полиномы $\varphi_2(z_1)\varphi_0(z_2)$ и $\varphi_0(z_1)\varphi_2(z_2)$ описывают составляющие поля с одним экстремумом; полином $\varphi_2(z_1)\varphi_2(z_2)$ представлен в качестве примера на рис. 16. Весьма значительные упрощения расчетов достигаются, если измерения на поле взяты через равные интервалы. Тогда можно использовать таблицы стандартных полиномов до шестого порядка (для 50 точек).

Плотность точек опробования должна быть такова, чтобы расстояние между ними было в 2—3 раза меньше масштаба характерных структурных образований поля.

Для удобства интерпретации следует пользоваться нормализованными полиномами $\varphi_i^{(n)} = \varphi_i \left[\sqrt{\sum_{k=1}^n \varphi_i^2(z_k)} \right]^{-1}$. Коэффициенты при таких полиномах непосредственно указывают на степень важности соответствующих слагаемых.

Большая точность аппроксимации имеет место при использовании интерполяционных многочленов (Гольцман, 1973):

$$\hat{\xi}(Z) = \sum_{i=1}^n G(Z, Z_i) A_i,$$

где $G(Z, Z_i)$ — известные функции, зависящие от координат Z поля в точке интерполяции и от координат $Z_i (i=1, 2, \dots, n)$ в узлах интерполяции, а $A_i (i=1, 2, \dots, n)$ — искомые коэффициенты, зависящие от значений аппроксимируемого поля в узлах интерполяции.

Для аппроксимации функции ($v=1$) удобен интерполяционный многочлен Лагранжа. Для аппроксимации поля на плоскости ($v=2$) может быть использован интерполяционный многочлен Ньютона.

Аппроксимация полей интерполяционными многочленами обеспечивает совпадение значений исследуемой реализации поля $\xi(Z)$ и аппроксимирующего многочлена $\hat{\xi}(Z)$ в узлах интерполяции. Чем больше узлов интерполяции, тем детальнее аппроксимируется искомое поле, но тем выше дисперсия оценок A_{ij} .

В упомянутой работе Ф. М. Гольцмана (1973) показан вариант учета априорной информации при построении аппроксимирующих поверхностей в виде заданных линейных связей и в виде априорной плотности распределения значений поля.

Чаще всего на практике аппроксимируют аналитическими функциями не всю реализацию поля, а его низкочастотную составляющую, обусловленную процессами регионального масштаба и называемую обычно трендом. В свете статистической теории, изложенной в главе IV, тренд тождествен оценке математического ожидания поля, которая может быть построена методами фильтрации (сглаживания) как графически, так и численно. Термин же «тренд» применяется в основном в тех случаях, когда оценка математического ожидания поля аппроксимируется алгебраическими полиномами различных степеней (соответственно получается тренд того или иного порядка):

$$\xi(Z) = \hat{C}(Z) + \Delta(Z),$$

где $\hat{C}(Z)$ вычисляется согласно (V.2), а $\Delta(Z)$ включает в себя флуктуационную составляющую исследуемого поля, а также шум опробования и аппроксимации.

При попытке решить задачу разложения исходного поля на детерминированную и флуктуационную составляющие в самом общем виде (без какой-либо априорной информации) исследователь получает неоднозначное решение (например, поверхности тренда различных порядков). Простой на первый взгляд вопрос о выборе степени аппроксимирующего полинома является камнем преткновения в практике использования тренд-анализа. Универсальных рекомендаций привести естественно невозможно.

В монографии У. Крамбеяна, Ф. Грейбилла (1969) модель случайного поля введена в главе, касающейся анализа карт. В работе подробно описана методика построения поверхностей тренда и приводятся результаты исследований, касающихся ин-

терпретации таких поверхностей. Среди линейных моделей аппроксимации интересно выделить модель, позволяющую использовать понятие «регионального фона» $\hat{C}_\Phi(Z)$ и локальных аномалий $\hat{C}_{ан}(Z)$, измеряемых и аппроксимируемых с ошибками $\Delta(Z)$ (см. IV.15):

$$\xi(Z) = \hat{C}_\Phi(Z) + \hat{C}_{ан}(Z) + \Delta(Z).$$

Выделение локальных аномалий $\hat{C}_{ан}(Z)$ в этом случае может быть осуществлено построением тренд-поверхности более высокого порядка, чем тренд-поверхность фона $\hat{C}_\Phi(Z)$. Решение задачи сводится к вычислению «вторичного тренда» у поля, представляющего собой результат вычитания фона $\hat{C}_\Phi(Z)$ из исходного поля $\xi(Z)$. Другими словами, мы имеем дело с аппроксимацией полосового фильтра.

Для оценки качества подобранной тренд-поверхности У. Крамбейн и Ф. Грейбилл предлагают понятие «силы» построенной поверхности, выражаемой в виде доли от общей изменчивости поля, вычисленной для всей поверхности тренда. Тогда, по их мнению, большие отклонения от тренда низкого порядка свидетельствуют о том, что эти разности не случайны, что они содержат в себе тренд более высокого порядка.

Однако мы не можем согласиться с таким критерием оценки тренд-поверхностей. Действительно, легко представить себе поле, математическое ожидание которого — поверхность первого порядка, а флуктуации не зависят от координат пространства и имеют сколь угодно большую дисперсию. В таком случае тренд первого порядка будет иметь сколь угодно малое значение «силы», что совсем не означает в данном случае наличия тренда более высокого порядка у поля флуктуаций. Такого рода ошибка, по нашему мнению, обусловлена тем, что в понятии «силы» тренда потеряна информация о связи переменной ξ с пространственными координатами. Таким образом, мы здесь снова встретились с трудно решаемым вопросом оценки качества построенных тренд-поверхностей, что затрудняет их интерпретацию.

Критерии аппроксимации той или иной составляющей геохимического поля должны базироваться либо на априорной информации о структурных особенностях поля, либо на целевых аспектах применяемых процедур. Например, неинформативность отфильтровываемой (остаточной) составляющей заключается в ее независимости от координат пространства.

Так, в работе А. А. Андриюшенко, В. И. Беляева (1972) продемонстрировано удачное приложение метода аппроксимации к анализу случайного поля. Качество аппроксимации оценивается не количественной характеристикой остаточной дисперсии (которую неизвестно с чем нужно было бы сравнивать), а степенью изотропности поля отклонений $\Delta(z_1, z_2)$ по оценке пространственной автокорреляционной функции $K(r)$. Такой критерий поз-

воляет, во-первых, дать интерпретацию составляющих поля в принятой модели и, во-вторых, свести критерий к известным классическим критериям значимости различий между коэффициентами корреляции.

Другой критерий подбора тренд-поверхности, моделирующей математическое ожидание поля, можно позаимствовать из работы В. Н. Бондаренко, С. М. Кравченко (1968). Суть метода заключается в том, что проверяется гипотеза о равенстве нулю математического ожидания остаточного (высокочастотного) поля $\Delta(Z)$ на всех участках пространства задания поля. Этот метод позволяет построить тренд-поверхность, наиболее близкую к математическому ожиданию поля, и сводит критерий подбора тренд-поверхности к известным в классической статистике критериям.

К настоящему времени В. Н. Бондаренко (1978) разработано несколько модификаций метода, позволяющих использовать его при различных уровнях задания априорной информации и при различных требованиях к точности фильтрации высокочастотного шума.

Использование априорной информации о структурах, встречающихся в нефтяной геологии, позволило решить ряд задач при тектоническом анализе платформенных структур (Математический метод...,» 1969). Так, примером использования в структурной геологии процедуры разделения поля картируемой переменной на слагаемые поля в ее наипростейшей форме служит метод снятия со структурных карт влияния регионального наклона слоев (тренда первого порядка). Или, например, поверхность третьего порядка, которая может иметь максимумы и минимумы, помогла выявить сопряжения структур разных знаков — вала и прогиба и т. п.

Основной недостаток разложения поля по степеням прямоугольных координат — его искусственность, затрудняющая в общем случае описание направлений главной изменчивости, свойственных изучаемому полю. В силу этого обычно не удается экстраполировать разложение поля за границы области, для которой это разложение получено. Механическое выполнение операций аппроксимации без малейших попыток выяснения статистических закономерностей поля и его структурных особенностей приводит довольно часто к неинтерпретируемым результатам.

Учет априорной информации при решении задач аппроксимации обязателен. Так, например, для аналитического представления метеорологических полей на поверхности земного шара рекомендуется (Багров, 1958) пользоваться сферическими функциями, дающими хорошие решения в задачах экстраполяции поля благодаря их согласию с конфигурацией околоземного пространства.

Опираясь на решение прямых задач геохимии, можно считать подходящей для геохимического поля аппроксимацию детерми-

нированной составляющей совокупностью экспоненциальных функций. Такого рода аппроксимация, обеспечивающая гладкость аппроксимирующих кривых до второй производной включительно, предложена Г. Ф. Кузнецовым (1972).

$$C(z) = A_1 e^z + A_2 e^{-z} + (A_3 e^{\frac{z}{\sqrt{2}}} + A_4) e^{-\frac{z}{\sqrt{2}}} \cos \frac{z}{\sqrt{2}} + \\ + (A_5 e^{\frac{z}{\sqrt{2}}} + A_6) e^{-\frac{z}{\sqrt{2}}} \sin \frac{z}{\sqrt{2}}.$$

Для аппроксимации многоэкстремальной детерминированной составляющей может быть использована и полигауссовская поверхность:

$$\hat{C}(Z) = \sum_{i=1}^I \alpha_i N(Z; Z_{\text{ц}i}, \sigma_i),$$

где, как и в (IV.3), через $N(Z; Z_{\text{ц}i}, \sigma_i)$ обозначена аналитическая запись гауссовской кривой с координатами максимумов $\{Z_{\text{ц}i}\}$ аппроксимирующей компоненты и вектором параметров $\{\sigma_i\}$, регулирующих «ширину» i -й компоненты в пространстве R^n . Количество слагаемых I в аппроксимирующем выражении равно числу максимумов у выделенной детерминированной составляющей поля.

Для параметров σ_i предлагаются (Кубанейшвили, 1975) оценки, вытекающие из соотношения:

$$\frac{C(Z_{i \max})}{C(Z_{i \max} \pm \hat{\sigma}_i)} = \sqrt{e},$$

где через $Z_{i \max}$ обозначены координаты i -го максимума в реализации детерминированной составляющей поля. Тогда оценка параметра σ_i по j -й координате в пространстве R^n будет следующей:

$$\hat{\sigma}_{i(j)} = |z_{i \max, j} - z_{ij}^*|,$$

где z_{ij}^* — значение j -й координаты, при которой детерминированная составляющая $C(Z)$ уменьшилась в $\sqrt{e}$ раз по сравнению со своим значением в i -м максимуме.

Более общая формула для оценки параметров σ_i имеет следующий вид:

$$\hat{\sigma}_{i(j)} = \frac{|z_{i \max, j} - z_j|}{\sqrt{2} [\ln C(Z_{i \max}) - \ln C(Z)]} = \\ = \sqrt{\frac{\lg_{10} e}{2}} \frac{|z_{i \max, j} - z_i|}{\sqrt{\lg_{10} C(Z_{i \max}) - \lg_{10} C(Z)}}, \quad (\text{V.5})$$

где z_j — j -ая координата любой точки Z в области определения i -й гауссовской компоненты детерминированной составляющей поля, равной в этой точке $C(Z)$.

Для более точного определения параметров разложения $\{\alpha_i, Z_{ui}, \sigma_i\}$ разработаны итерационные процедуры, обеспечивающие сходимость аппроксимирующей функции к аппроксимируемой по критерию равенства значений этих функций в их максимумах:

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \hat{C}^{(n)}(Z_{ui}) = C(Z_{i \max}),$$

где n — номер шага итерации.

Тогда (Кубанейшвили, 1975) имеем:

$$\hat{Z}_{ui}^{(0)} = Z_{i \max}; \quad \hat{\alpha}_i^{(0)} = C(Z_{i \max});$$

$$\hat{Z}_{ui}^{(n)} = Z_{i \max} - \frac{\beta_i^{(n-1)}}{C(Z_{i \max}) - \gamma_i^{(n-1)}} \hat{\alpha}_i^{(n-1)};$$

$$\hat{\alpha}_i^{(n)} = [C(Z_{i \max}) - \gamma_i^{(n-1)}] \exp \left\{ \hat{\alpha}_i^{(n-1)} \frac{\beta_i^{(n-1)}}{C(Z_{i \max}) - \gamma_i^{(n-1)}} \right\};$$

где

$$\beta_i^{(n-1)} = \sum_{\substack{k=1 \\ k \neq i}}^I \alpha_k^{(n-1)} \frac{\hat{Z}_{uk}^{(n-1)} - Z_{k \max}}{\hat{\sigma}_k^2} \exp \left\{ - \frac{[Z_{i \max} - \hat{Z}_{uk}^{(n-1)}]^2}{\hat{\sigma}_k^2} \right\},$$

$$\gamma_i^{(n-1)} = \sum_{\substack{k=1 \\ k \neq i}}^I \alpha_k^{(n-1)} \exp \left\{ - \frac{[Z_{i \max} - \hat{Z}_{uk}^{(n-1)}]^2}{\hat{\sigma}_k^2} \right\}.$$

Примеры аппроксимации экспонентами геологических данных находим у А. Б. Вистелиуса (1963₂), М. А. Романовой (1964), М. Д. Белониной (1964).

Наиболее общий алгоритм итерационной непараметрической аппроксимации с необходимыми свойствами приведен в разработках метода потенциальных функций (Айзерман и др., 1970). В общем случае итерационный алгоритм представляет собой следующее:

$$\hat{C}^{(n)}(Z) = \hat{C}^{(n-1)}(Z) + \gamma_{n-1} [C(Z_n) - \hat{C}^{(n-1)}(Z_n)] Q(Z, Z_n),$$

где n — номер итерации; $\{\gamma_n\}$ — последовательность положительных чисел, для которых $\sum_{i=1}^{\infty} \gamma_i$ расходится, а $\sum_{i=1}^{\infty} \gamma_i^2$ сходится; нулевое приближение $\hat{C}^{(0)}(Z)$, например, — тождественный нуль, а $Q(Z, Z_n)$ — потенциальная функция. В частности, когда Z принадлежит всей числовой оси, потенциальная функция может быть задана в следующем виде:

$$Q(Z, Z_n) = \frac{1}{\sqrt{\pi(1-\alpha^2)}} \exp \left\{ \frac{2ZZ_n\alpha - (Z^2 - Z_n^2)\alpha^2}{1-\alpha^2} \right\},$$

где α — параметр, регулирующий ширину колоколообразной потенциальной функции $Q(Z, Z_n)$; чем ближе α к 1, тем ближе потенциальная функция к δ -функции Дирака.

Достоинство полигауссовских и потенциальных стохастических аппроксимаций мы видим в их адекватности понятийной

модели ореольного пространства при современном представлении последнего.

Проводя геохимические исследования на известных месторождениях, имеет смысл строить гауссовские аппроксимации знаomialной составляющей в разрезе по вертикали

$$C(h) = C_0 \exp \left\{ - \frac{(h - h_0)^2}{2\sigma^2} \right\},$$

где C_0 — значение детерминированной составляющей на уровне h_0 центральных частей руды, а параметр σ оценивается по данным разведочных скважин.

Тогда при поисках новых рудных тел того же типа и тех же масштабов на флангах известного месторождения можно оценивать глубину залегания руды и масштабы оруденения по данным опробования керна поисково-оценочных скважин. Если результаты геохимического опробования керна поисково-оценочной скважины позволяют предполагать ниже рудное тело, то глубина залегания h_0 эпицентра оруденения и его приблизительная протяженность Δh по вертикали могут быть оценены с привлечением данных измерения с любых двух горизонтов h_1 и h_2 по следующему формулам:

$$h_0 = \frac{\hat{\sigma}^2}{h_2 - h_1} [\ln C(h_2) - \ln C(h_1)] + \frac{1}{2} (h_2 + h_1),$$

$$\Delta h = 2\hat{\sigma} \sqrt{2 (\ln C_0 - \ln C_{\text{борт}})}, \quad (\text{V.6})$$

где оценка максимального значения детерминированной составляющей (C_0) поля на уровне h_0 вычисляется по данным любого горизонта h_j :

$$C_0 = C(h_j) \exp \left\{ \frac{(h_j - h_0)^2}{2\hat{\sigma}^2} \right\},$$

а бортовое значение $C_{\text{борт}}$ должно быть известно априори.

Огромный вклад в разработку методов фильтрации и аппроксимации пространственных полей в геофизике внес В. И. Арон (1977; Система программ. . ., 1972; Алгоритм программы . . ., 1977). Проведенные им исследования позволили выделить оптимальные функции для ряда задач. Так, для некоторых задач гидрогеологии наиболее удобными названы функции, являющиеся решением стационарного уравнения фильтрации:

$$\varphi_i(z_1, z_2) = [(z_1 - z_{1i})^2 + (z_2 - z_{2i})^2 + U^2]^{-\frac{1}{2}},$$

где $i = 1, 2, \dots, n$; n — число точек наблюдения; U — параметр, выбор значения которого определяет в основном точность аппроксимации.

В практике достаточно распространена аппроксимация детерминированной составляющей несколькими первыми гармо-

никами из ряда Фурье. В одной из работ последних лет (Арский, Гольдвирт, 1977) аппроксимация закономерной составляющей тремя первыми гармониками использована при решении вопроса о рациональном выборе разведочной сети. Здесь следует заметить, что число первых гармоник в аппроксимации (как и порядок аппроксимации полиномом) должно не задаваться, а находиться либо по критерию изотропности остаточного поля или некоторого его преобразования (см., например, постановку вопроса к рис. 11), либо по виду спектральной плотности наблюдаемого поля $\xi(Z)$.

Интересные результаты для задачи аппроксимации получены в работе авторов под руководством М. И. Юдина (Естественные составляющие метеорологических полей, 1970). В монографии показано, что более правдоподобные и интерпретируемые результаты аппроксимации поля получаются при разложении его по системе функций, представляющих собой собственные векторы матрицы (B) корреляций n точек наблюдения исследуемого признака в пространстве R^n

$$B = \begin{pmatrix} b_{11} & b_{12} & \dots & b_{1n} \\ & & & \\ & & & b_{nn} \end{pmatrix},$$

где

$$b_{ij} = M [\xi^0(Z_i) \xi^0(Z_j)], \quad \hat{b}_{ij} = \frac{1}{m-1} \sum_{h=1}^m [\xi_h(Z_i) - \overline{\xi(Z_i)}] \times \\ \times [\xi_h(Z_j) - \overline{\xi(Z_j)}];$$

m — число наблюдений признака в каждой из n точек пространства R^n

В упомянутой работе эти собственные векторы корреляционной матрицы, соответствующие значимым по величине собственным значениям, названы естественными составляющими поля (в приложении к метеорологии) и используются в качестве системы функции $\{\phi_i\}$ при аппроксимации. Собственные векторы корреляционной матрицы — линейные комбинации значений анализируемого признака в нескольких точках пространства, определяющих в основном степень рассеяния признака и имеющих наиболее сильную корреляционную зависимость между собой. Вычисление собственных векторов и собственных значений матрицы проводится согласно Q -модификации метода главных компонент, который рассмотрен несколько подробнее в разделе 3 данной главы.

Аналитическим аппроксимациям полей в геологии посвящено большое число работ (Боровко, 1971), и мы не будем останавливаться на этих методах.

2. СПЕЦИФИКА СТАТИСТИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК НЕОДНОРОДНОГО ПОЛЯ

Как уже было сказано в главе II, моделирование геохимического околорудного пространства одного месторождения или определенной площади опоискования в форме единственной реализации случайного поля не является недопустимым с физической точки зрения, но вызывает трудности точного определения с математической точки зрения. До сих пор мы придерживались в основном аддитивной модели, в которой неоднородность геохимического поля моделировалась детерминированной составляющей. Остаточное флуктуационное поле мы моделировали изотропным случайным полем, т. е. имели дело с тем случаем, когда статистические свойства случайной составляющей можно оценивать по одной реализации. Обобщая модель случайного поля, мы идентифицировали детерминированную составляющую как математическое ожидание исследуемого случайного поля и говорили о неоднородности исходного поля по математическому ожиданию. Неоднородности более высоких порядков (Котюк, Цветков, 1970) требуют более точного определения принимаемой модели.

Нам представляются возможными три формы уточнения модели.

Первая модель: случайная составляющая моделирует лишь ошибки измерения содержаний химических элементов, а поле концентраций в любой точке земной коры считается детерминированной функцией от координат этой точки. Такая модель вполне адекватна регуляризованному полю концентраций, измеряемому методами сплошного (например, бороздового) опробования. В рамках этой модели можно исследовать подробнее мультипликативную модель (IV.9), которая описывает поле, неоднородное и по математическому ожиданию и по дисперсии. Корреляционная функция случайной составляющей в этом случае представляет собой δ -функцию.

Вторая модель: исследуется совокупность геохимических полей одинакового генезиса. Неоднородность случайного поля, моделирующего всю совокупность, понимается в общепринятой форме (см. определения неоднородности в широком и узком смысле — раздел I главы III). Методическая сложность применения этой модели заключается в необходимости отработать способы сопоставления различных полей и месторождений, на которых признаки их общего генезиса всегда завуалированы различными геологическими структурными, тектоническими, морфологическими особенностями, а масштаб оруденения сказывается не в простой линейной деформации размеров ореольного пространства. Формально можно говорить о проблеме выбора начала отсчета и системы измерения пространственных координат.

нат в различных реализациях (месторождениях) моделируемого геохимического поля определенного генезиса.

При попытках практического приложения указанной модели исследователь столкнется с трудно преодолимой сложностью сопоставления результатов различных способов опробования и анализов различных спектральных лабораторий.

Общая математическая модель геохимического поля определенного генезиса, безусловно, перспективна для получения теоретического знания об исследуемом предмете. Однако современная методика описания зонального строения отдельного месторождения носит качественный характер, что не позволяет пока перейти к математическому моделированию генетического типа месторождения в целом. Необходимо предварительное улучшение количественного описания отдельных месторождений.

Мы рассмотрим подробнее еще одну модель, позволяющую подойти к описанию сложного ореольного пространства на отдельном месторождении, используя хорошо разработанные математические методы исследования случайных функций.

Третья модель: исследуется совокупность геохимических данных по профилям (скважинам) в пределах одного геохимического поля. Понятие неоднородности случайного поля, моделирующего исследуемое геохимическое поле, сводится к понятию неоднородности упорядоченной совокупности случайных функций, моделирующих распределение измеряемых концентраций химических элементов по заданным профилям. Для правильного сопоставления реализаций по профилям необходимо решение проблемы о начале отсчета на каждом профиле, имеющем физический смысл.

Модель совокупности геохимических профилей достаточно естественна при современных методах опробования. Геохимические поля, опробованные по равномерной сетке, также могут быть исследованы в рамках этой модели. И лишь для полей, опробованных по случайной сети точек, невозможно дать точную статистическую модель с неоднородностью более высокого порядка, чем по математическому ожиданию. В этом случае приходится либо пользоваться первой моделью даже для анализа нерегуляризованных полей, либо прибегать к нестрогим обобщениям методов исследования случайного поля в рамках третьей модели.

Воспользуемся идеей В. В. Ольшевского и Э. И. Цветкова (1968): построим следующую модель околорудного пространства, исследованного совокупностью скважин. Будем рассматривать продольные и поперечные разрезы, как это принято в геологии. Скважины в каждом случае естественным образом упорядочены, например, снизу вверх по простиранию или по падению рудного тела (рис. 17). Будем различать висячий и лежащий бока вмещающих пород, независимо от угла падения рудного тела. Введем новый аргумент t для всех геохимических

данных, равный расстоянию от кромки рудного тела до пробы по направлению нормали к поверхности залежи. Расстояние t отсчитывается от кровли рудного тела в сторону висячего бока и от подошвы рудного тела в сторону лежачего бока. За границы тела принимается контур, проведенный в соответствии с инструкцией оконтуривания рудных тел определенной категории

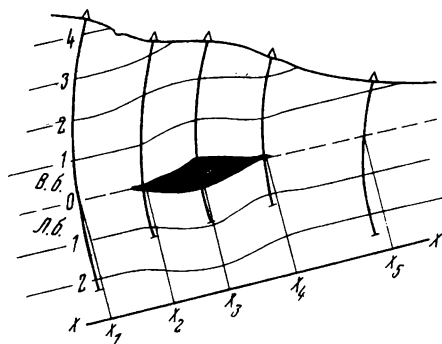


Рис. 17. Схема упорядочения данных геохимического опробования керна скважин на известном месторождении для введения понятий текущей эргодичности и локальной стационарности в неоднородном поле.

В.б. — висячий бок рудного тела; Л.б. — лежачий бок рудного тела; $X-X$ — условная ось продольного или поперечного сечения ореолового пространства с условными отметками скважин X_i .

на текущем этапе разведки. Тогда данные геохимического опробования будут представлять собой совокупность реализаций случайного процесса в висячем боку $\{\xi_{вq}(t)\}$ и в лежачем боку $\{\xi_{лq}(t)\}$ (где q — порядковый номер скважины в упорядоченном ряду) с началами отсчета аргумента t , имеющими физический (геологический) смысл. Для обеих совокупностей реализаций случайных функций можно ввести понятие нестационарности в широком и в узком смысле, как это общепринято (Пугачев, 1962). Но мы продолжим идеи В. В. Ольшевского и Э. И. Цветкова, разделяющих понятия стационарности и эргодичности,

когда есть упорядоченная совокупность экспериментальных данных.

Будем различать текущие статистические характеристики поля (Цветков, 1973)

$$\theta(t) = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_{q=1}^N G[\xi_q(t)]$$

и локальные статистические характеристики

$$\theta(q) = \lim_{T_q \rightarrow \infty} \frac{1}{T_q} \int_0^{T_q} G[\xi_q(t)] dt, \quad (V.7)$$

где q — порядковый номер реализации (скважины) в упорядоченном ряду; N — число реализаций, T_q — длина q -й реализации; G — некоторый оператор.

Если оценка текущей характеристики

$$\hat{\theta}_N(t) = \frac{1}{N} \sum_{q=1}^N G[\xi_q(t)] \quad (V.8)$$

при любых q и N сколь угодно мало отличается по вероятности от определенной характеристики $\theta(t)$, то можно говорить о текущей эргодичности исследуемого поля. Нам удобнее будет употреблять термины «продольной» и «поперечной» эргодичности в зависимости от характера исследуемого разреза.

Текущие характеристики поля вполне целесообразны при изучении месторождений больших размеров и в основном осадочного генезиса. Так, при изучении осадочных месторождений железных или марганцевых руд, простирающихся на площадях в несколько квадратных километров, имеет смысл вопрос о содержании, например, полезного компонента на уровне 10 или 50 м над (или под) рудной залежью.

В ореольном пространстве небольших рудных тел и тем более гидротермального генезиса мы будем иметь дело с поперечной и с продольной неэргодичностью исследуемого геохимического поля, которая и является предметом изучения геохимика-поисковика.

Локальные статистические характеристики типа (V.7) дают некоторое интегральное представление об исследуемом признаке в q -й реализации, т. е. в соответствующем ей «локальном» участке околорудного пространства.

Если оценка локальной характеристики

$$\hat{\theta}_T(q) = \frac{1}{T} \int_{t_n}^{t_k} G[\xi_q(t)] dt$$

при любых t_n и t_k ($T = t_k - t_n$) сколько угодно мало по вероятности отличается от предельной характеристики (V.7), то можно говорить о локальной стационарности исследуемого поля.

По локальной стационарности можно судить о выходе реализации (скважины) за пределы ореольного пространства в область сингенетичного рассеяния элементов.

Сопоставляя оценки локальных характеристик по лежащему и висящему бокам, можно проверять гипотезу о гидротермальном генезисе для крутопадающих рудных тел. Если гипотеза о гидротермальном генезисе верна, то локальные характеристики по висящему и лежащему бокам $\theta_{вТ}(q)$ и $\theta_{лТ}(q)$ должны быть статистически равными (с определенным уровнем значимости критерия сравнения) в силу симметричности развития гидротермального процесса рудо- и ореолообразования при почти вертикальном движении растворов.

Если условие локальной стационарности не выполняется, то мы имеем дело с локально нестационарным полем, в котором оценки локальных характеристик зависят от аргумента:

$$\hat{\theta}_T(t; q) = \frac{1}{T} \int_{t-T/2}^{t+T/2} G[\xi_q(t')] dt'. \quad (V.9)$$

К такого рода характеристикам будут относиться традиционные «скользящие» статистики:

$$\hat{\mu}_T(t; q) = \frac{1}{T} \int_{t-T/2}^{t+T/2} \xi_q(t') dt', \quad (V.10)$$

$$\hat{\sigma}_T^2(t; q) = \frac{1}{T} \int_{t-T/2}^{t+T/2} [\xi_q(t') - \hat{\mu}_T(t'; q)]^2 dt', \quad (V.11)$$

$$\begin{aligned} \hat{k}_T(t, \tau; q) = & \frac{1}{T} \int_{t-T/2}^{t+T/2} [\xi_q(t') - \hat{\mu}_T(t'; q)] [\xi_q(t' + \tau) - \\ & - \hat{\mu}_T(t' + \tau; q)] dt' \end{aligned} \quad (V.12)$$

Что же касается спектральной плотности, то относительно ее имеется несколько обобщений для случая нестационарности. Сравнивая имеющиеся обобщения, В. А. Геранин (1971) приводит доводы к большей целесообразности пользоваться формулами С. Я. Раевского (1954)

$$s_T(\omega, t; q) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} k_T(t, \tau; q) e^{-i\omega\tau} d\tau \quad (V.13)$$

и Н. А. Железнова (1959)

$$s_T(\omega_1, \omega_2; q) = \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} k_T(t_1, t_2; q) e^{-i(\omega_1 t_1 - \omega_2 t_2)} dt_1 dt_2.$$

О. Л. Соколов и О. Ю. Боренштейн (1975) рекомендуют определять энергетический спектр как

$$s_T(\omega_1, \omega_2; q) = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{(T\pi)^2} \int_0^T \int_0^T d\tau_1 d\tau_2 \int_0^{\tau_1} \int_0^{\tau_2} k_T(t_1, t_2; q) e^{-i(\omega_1 t_1 - \omega_2 t_2)} dt_1 dt_2,$$

поскольку это определение позволяет оценивать смещение и дисперсию непредельных статистик, с которыми исследователи имеют дело на практике. В указанной работе приведены оценки точности вычисления спектров для ряда мультипликативно-аддитивных процессов.

Строго говоря, оценки (V.10), (V.11), (V.12) будут малосмещенными оценками соответствующих параметров исследуемой случайной функции лишь при относительно медленных нестационарных изменениях этих параметров (Стратонович, 1961, с. 122). Другими словами, скорость изменения параметра с течением аргумента t должна быть много меньше значения соответствующего параметра:

$$\frac{\partial \mu(t)}{\partial t} \ll \mu(t), \quad \frac{\partial k(t, \tau)}{\partial t} \ll k(t, \tau), \quad \frac{\partial s(\omega t)}{\partial t} \ll s(\omega t).$$

Точность оценки математического ожидания алгоритмом скользящего среднего (сглаживания) мы обсуждали в разделе 3 главы IV — см. (V.10) и (IV.11).

Выражение для смещения оценки корреляционной функции, меняющейся с течением аргумента t , находим у А. Ф. Романенко, Г. А. Сергеева (1968, с. 125):

$$\epsilon_{\text{см}} = M[k(t, \tau; q)] - \hat{k}_T(t, \tau; q) \approx \frac{T^2}{48} \cdot \frac{\partial^2 k(t, \tau; q)}{\partial t^2}.$$

Прямая зависимость смещения оценки от величины второй производной подтверждает необходимость ограничений, сформулированных Р. Л. Стратоновичем (1961). Отсутствие смещения оценки $k(t, \tau)$ будет иметь место лишь при линейном законе изменения корреляционной функции с течением аргумента t (Пугачев, 1962, с. 569), так как только в этом случае вторая производная будет равна нулю.

Изучение погрешностей коррелометрии в условиях нестационарности имеет очень важное значение. Тщательное исследование этого вопроса для негауссовых случайных процессов проведено Н. Н. Вишняковой и В. А. Гераниным (1978). Ими показано, что среднеквадратическая погрешность оценки функции корреляции негауссова процесса может превышать в 5 раз одноименную величину для гауссова процесса с такой же корреляционной функцией. Из нестационарных моделей ими подробно исследована мультипликативная модель

$$\xi(t) = C(t) \cdot \psi(t),$$

где $C(t) = e^{-\beta t}$, $\psi(t) = X_1(t)X_2(t)$, $X_1(t)$ и $X_2(t)$ — гауссовы центрированные случайные процессы с корреляционными функциями $k_i(\tau) = D_i e^{-\alpha_i \tau}$ ($i = 1, 2$).

Таким образом, показано, что: 1) дисперсия оценки корреляционной функции уменьшается с ростом отношения параметров α_2/α_1 ; 2) приращение дисперсии за счет негауссовости положительно и монотонно уменьшается с ростом τ ; 3) в диапазоне значений $0,05 \leq \beta_T \leq 10$ (характеризующих степень нестационарности) влияние негауссовости на погрешность коррелометрии практически одинакова. Аналитические зависимости погрешностей статистических оценок от параметров нестационарности, параметров негауссовости и интервала усреднения T обычно очень сложны (Вишнякова, Геранин, 1978; Васильев и др., 1978; Воллернер, 1968). Однако факт существования минимума погрешности при некотором значении T позволяет находить оптимальный интервал усреднения графическими методами и способом последовательных приближений для каждой конкретной модели в отдельности.

Ошибки спектрометрии ограниченных отрезков нестационарных функций всегда будут иметь место из-за неадекватности исследуемым процессам системы бесконечных (по аргументу) строго периодических функций синуса—косинуса. Интересную

попытку разложения нестационарных процессов по специальным системам нестационарных ортогональных функций предпринял В. В. Семенов (1968, 1969).

При практической работе с реализациями исследователь часто не знает заранее, со стационарной или нестационарной функцией он имеет дело. В связи с этим возникли попытки оценивать степень нестационарности функции. Для формулировки таких оценок полезным оказалось понятие «порядка нестационарности», введенное А. Ф. Котюком и Э. И. Цветковым (1970). Порядок нестационарности определяется низшим порядком статистического момента, начиная с которого проявляется нестационарность процесса.

Мера нестационарности первого и второго порядков предложена В. А. Антошиным и Н. А. Рубичевым (1969):

$$\eta_n(t) = \min_{\alpha, \beta} d \{ p_n [\alpha(t_1) \cdot \xi(t_1) + \beta(t_1), \quad \alpha(t_n) \cdot \xi(t_n) + \beta(t_n)], p_n [\xi(t_1 + t), \quad \xi(t_n + t)] \}, \quad (V.14)$$

где n — число точек определения исследуемой функции $\xi(t)$; d — некоторая мера сходства n -мерных плотностей распределения вероятностей p_n .

Если минимум в выражении (V.14) достигается при изменении параметра $\beta(t)$, когда $\alpha(t) = 1$, то это означает нестационарность первого порядка, так как мы имеем дело с изменением математического ожидания. Если минимум в (V.14) достигается при изменении $\alpha(t)$, когда $\beta(t) = 1$, то это будет уже нестационарность второго порядка, так как означает непостоянство дисперсии. В обоих этих случаях, а также когда изменяется и математическое ожидание и дисперсия, случайные функции приводимы к стационарным методами нормировки (приведение мультипликативной модели к стационарной обсуждалось в главе IV — см. рис. 11).

При изменении вида закона распределения, что сопровождается нестационарностью моментов более высоких порядков, мы имеем дело с существенной нестационарностью функции, которая уже не приводима к стационарной.

Однако мера (V.14) имеет скорее теоретическое значение, поскольку на практике редко существует возможность получить хорошие оценки для многомерной плотности распределения (тем более при текущей неэргодичности поля).

В первом приближении о неоднородности выборки можно судить по характеру оценки плотности распределения вероятностей для всех выборочных значений. Как мы уже говорили (см. раздел 1 главы IV), неоднородные совокупности характеризуются чаще всего полимодальными плотностями.

Более простую меру можно предложить на том основании, что нестационарные процессы имеют больший разброс статистических характеристик, чем стационарные (Воллернер, 1968).

Как показала практика геохимических исследований (Григорян, Резников, 1972; Кравченко, Болотников, 1971), средняя дисперсия выборки, включающей в себя данные опробования околорудных зон, обычно много больше, чем выборочные дисперсии зон рассеянной минерализации, не говоря уже о значительно меньшей дисперсии в полях сингенетического рассеяния элементов. Под средней дисперсией выборки понимается следующая статистика:

$$\bar{\sigma}_n^2(q) = \frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^n [\xi_q(i) - \bar{\mu}_n(q)]^2,$$

где $\xi_q(i)$ — значение признака в i -й пробе q -й выборки; $\bar{\mu}_n(q)$ — среднее значение n выборочных данных q -й выборки:

$$\bar{\mu}_n(q) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \xi_q(i).$$

Анализ поведения нормированной статистики (оценки коэффициента вариации)

$$V_n(q) = \frac{\bar{\sigma}_n(q)}{\bar{\mu}_n(q)} \quad (V.15)$$

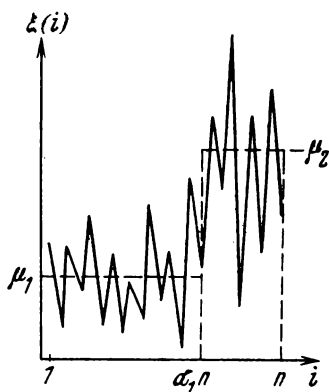


Рис. 18. Модель неоднородной выборки

для простейшей модели, изображенной на рис. 18, показал (Верховская, 1973), что статистика (V.15) может служить мерой неоднородности выборки. Математическое ожидание оценки квадрата коэффициента вариации (в пределах точности линейаризации функции и при достаточно большом объеме выборки, когда $\frac{n}{n-1}$ близко к 1) равно следующему выражению:

$$M[\bar{V}_n^2(q)] = \frac{V_2^2 + \alpha_1}{\alpha_2} + \frac{(V_1^2 + \alpha_1) \alpha_1 \alpha_2 - (V_2^2 + \alpha_1) \alpha_2^2 - 2\alpha_1 \alpha_2 (V_2^2 + 1) Y}{(\alpha_1 + \alpha_2 Y)^2}, \quad (V.16)$$

где $V_1 = \frac{\sigma_1}{\mu_1}$ и $V_2 = \frac{\sigma_2}{\mu_2}$ — параметры стационарных случайных функций, смешанных в исследуемой q -й выборке: α_1 и α_2 — доля выборочных данных соответственно первой и второй функций ($\alpha_2 = 1 - \alpha_1$) в q -й выборке: $Y = \frac{\mu_2}{\mu_1}$ (при $\mu_2 > \mu_1$) — относительная величина «скачка» математического ожидания в неоднородной q -й выборке.

В предельных случаях имеем:

$$\lim_{Y \rightarrow 1} M[\bar{V}_n^2(q)] = \alpha_1 V_1^2 + \alpha_2 V_2^2,$$

$$\lim_{Y \rightarrow \infty} M[\bar{V}_n^2(q)] = \frac{V_2^2 + \alpha_1}{\alpha_2}.$$

Характер зависимости $M[\bar{V}_n^2(q)]$ от величины скачка Y математического ожидания в соответствии с (V.16) при различных соотношениях параметров смешанных совокупностей в неоднородной выборке показан на рис. 19.

Если закон распределения вероятностей значений положительно определенной случайной функции симметричен, то квадрат ее коэффициента вариации не может превышать $1/3$, т. е.

$$\max_{p(\xi)_{\text{сим}}} V = \sqrt{\frac{1}{3}} = 0,577.$$

В упомянутой работе показано, что при расширении класса допустимых распределений вероятностей элементарных однородных геохимических совокупностей за счет включения асимметричных распределений типа логнормального с коэффициентом асимметрии не более 4 можно считать максимально допустимым для однородных выборок значение коэффициента вариации, равное единице.

Пользуясь этим критерием, мы будем встречаться с ошибками первого рода (когда однородная выборка с $\bar{V}_n(q) > 1$ будет принята за неоднородную) лишь в случае сильно асимметричных распределений вероятностей значений анализируемой функции. Что касается ошибок второго рода (когда неоднородная выборка с $\bar{V}_n(q) < 1$ будет идентифицирована как однородная), то они будут малы в случае присутствия в материале проб — представителей положительной аномальности (т. е. когда $\alpha_1 > 0,5$ при $\mu_1 < \mu_2$). Ошибки второго рода могут оказаться значительными, когда V_1 и V_2 малы и в выборке преобладают данные, представляющие совокупность с большим математическим ожиданием (т. е. когда $\alpha_2 > 0,5$ при $\mu_1 < \mu_2$). Такое положение вещей может иметь место при наличии в опробованном пространстве зон выноса исследуемого элемента, или когда локальный фон пред-

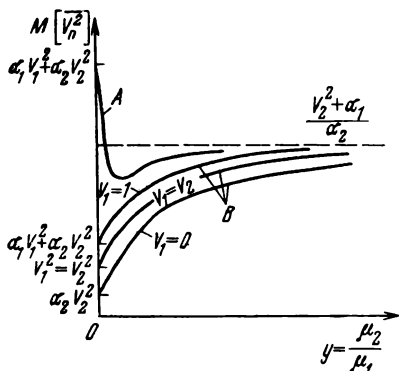


Рис. 19. Зависимость коэффициента вариации от степени неоднородности выборки при различных значениях параметров совокупностей, смешанных в выборке.

А — при $|V_1 - V_2| > \frac{1}{\alpha_2} (V_2^2 + 1)$; В — при $|V_1 - V_2| < \frac{1}{\alpha_2} (V_2^2 + 1)$

ставлен в выборке слабо. Применение оценки коэффициента вариации в качестве меры однородности выборки при геологических исследованиях встречаем в работах Р. Миллера, Дж. Кана (1965, с. 135), А. П. Прокофьева (1967), А. К. Козодоя и др. (1973), Ю. П. Трошина и др. (1966).

Правильность ответа на вопрос, стационарна или нет исследуемая выборка, зависит также от соотношения длины выборки (T) с пространственными размерами неоднородностей в исследуемом поле. Как справедливо отметил А. Ф. Воллернер (1968), «характеристики реальных нестационарных процессов не могут монотонно, бесконечно долго, с конечной скоростью изменяться в одном направлении в силу ограниченной мощности реальных объектов». Поэтому всегда можно говорить о некотором среднем периоде T_2 изменения нестационарной функции. Если гипотеза об однородности выборки проверяется по статистикам типа (V.15), полученным в результате усреднения по всей выборке, то в общем случае любая выборка будет признана стационарной, если $T \gg T_2$, нестационарной с медленными изменениями, если $r_k \ll T \ll T_2$, и существенно нестационарной, если $T < r_k$ (где r_k — интервал корреляции флуктуационной составляющей).

При геохимических исследованиях средних масштабов, когда расстояние между профилями (скважинами) и длины их имеют один порядок с размерами ореолов, мы имеем принципиальную возможность проследивать характер нестационарности даже простыми статистиками. При мелкомасштабных исследованиях, когда $T \gg T_2$, есть опасность пропустить аномалии, основывая результаты анализа поля на простых одномерных статистиках. При мелкомасштабных исследованиях необходимо «усиливать сигнал», используя информативность комплекса элементов (см. раздел 3 данной главы).

Вернемся от способов оценки локальных статистических характеристик (V.7) к изучению текущей неэргодичности, или продольной и поперечной неэргодичности. При исследовании продольной и поперечной зональности ореольного пространства по данным скважинного опробования имеет смысл пользоваться оценками текущих характеристик (V.8) при $N=1$, т. е. по отдельным скважинам без усреднения из-за сравнимого расстояния между скважинами с размерами неоднородности поля. Если оператор G в (V.8) положить равным оператору вычисления локальной характеристики (V.9), то изучение продольной и поперечной неэргодичности можно вести по серии локальных характеристик:

$$\hat{\theta}_1(t) = \hat{\theta}_T(t; q), \quad q = 1, 2, \quad N_{\text{ск}},$$

где $N_{\text{ск}}$ — число скважин (реализаций поля) в разрезе.

Если работать с локальными характеристиками, относительно которых поле локально стационарно, то мы будем иметь по-

следовательность некоторых интегративных характеристик скважин:

$$\hat{\theta}_T(q), \quad q = 1, 2, \dots, N_{\text{ск}}.$$

К такого рода характеристикам можно отнести средние содержания элементов по скважине в пределах ореольного пространства. Они могут вычисляться согласно (V.10) при большом значении T , отчего перестают быть функциями аргумента t :

$$\hat{\mu}_T(q) = \lim_{T \rightarrow T_{\text{ореола}}} \frac{1}{T} \int_{t-T/2}^{t+T/2} \xi_q(t') dt'$$

При бороздовом опробовании оценки такого рода (линейные продуктивности) вычисляются так:

$$\hat{\mu}(q) = \frac{1}{\sum_{j=1}^{M_q} L_j} \sum_{j=1}^{M_q} \xi_q(j) L_j,$$

где M_q — число проб в q -й выборке; L_j — длина пробы с порядковым номером j .

Оценка $\mu(q)$ может быть многомерной, т. е. состоящей из набора значений линейных продуктивностей m различных элементов:

$$\hat{\mu}(q) = \{\hat{\mu}_1(q), \quad \hat{\mu}_m(q)\}.$$

Одна из традиционных методик описания продольной и поперечной неэргодичности заключается в упорядочении элементов по расположению «центров тяжести» их линейных продуктивностей вдоль разреза (Григорян и др., 1975):

$$T_i = \frac{\sum_{i=1}^{N_{\text{ск}}} Y_i(q) X_q}{\sum_{i=1}^{N_{\text{ск}}} Y_i(q)},$$

где T_i — центр тяжести i -го элемента на условной шкале продольного (или соответственно поперечного) сечения изучаемого пространства с отметками скважин на этой условной шкале — X_q (см. рис. 17); $Y_i(q)$ — показатель зональности (или удельная продуктивность i -го элемента), вычисляемый по формуле

$$Y_i(q) = \frac{\hat{\mu}_i(q)}{\sum_{i=1}^m \hat{\mu}_i(q)}.$$

Ряд элементов, выстраиваемый по монотонному изменению значений «центров тяжести» T_i и называемый «рядом зональ-

ности», фигурирует в современной литературе как основная характеристика продольной и соответственно поперечной неоднородности ореольного пространства при гидротермальном генезисе руды (или, по меньшей мере, когда имело место гидротермальное обогащение первичных руд). Ряд по «центрам тяжести» следует выстраивать не из всех исследуемых элементов, а лишь из тех, которые имеют мономодальное поведение вдоль рассматриваемого сечения (или у которых один из максимумов в несколько раз превышает значения других).

В более общем случае алгоритмы подобного класса могут различаться, во-первых, видом локальной или текущей характеристики, по которой анализируется продольная и поперечная неоднородность (неэргодичность по терминологии нашей модели), во-вторых, критерием сравнения выбранных характеристик и, в-третьих, формой представления извлекаемой информации о неоднородности поля. Мы здесь вкратце коснемся имеющихся разработок по данному вопросу.

Как справедливо замечено А. Ф. Романенко и Г. А. Сергеевым (1968, с. 229), выяснение характера неоднородности по ряду реализаций можно вести принципиально по любым статистикам, построенным на базе эффективных оценок параметров случайного процесса. В работе рекомендуется использовать для сопоставления широкополосных (медленно меняющихся) процессов статистику

$$\theta_{\text{ш}}(t; q) = \frac{1}{r_{k2}} \overline{\sigma^2_T}(t; q), \quad (\text{V.17})$$

а для узкополосных процессов

$$\theta_y(t; q) = r_{k2} \overline{\sigma^2_T}(t; q),$$

где дисперсия $\sigma^2(t; q)$ оценивается аналогично (V.11) при $\mu_T(t; q) = \mu(q)$, а интервал корреляции r_{k2} — согласно (III.5).

Интерес представляет также использование статистики, оценивающей «скользящее» значение начального второго момента (нецентрального аналога корреляционной функции) — см. (V.12):

$$\overline{B_T}(t, \tau; q) = \frac{1}{T} \int_{t-T/2}^{t+T/2} \xi_q(t') \xi_q(t' + \tau) dt'. \quad (\text{V.18})$$

Если в первом приближении ограничиться аддитивной моделью геохимического поля с независимыми детерминированной $C(t)$ и флутуационной $\gamma(t)$ составляющими, то начальный момент второго порядка можно представить в виде суммы начальных вторых моментов составляющих:

$$B(t, \tau) = B_{\Delta}(t, \tau) + B_{\Phi}(\tau). \quad (\text{V.19})$$

Известно, что начальный момент второго порядка имеет следующие значения для ряда детерминированных функций:

$$\text{если } C(t) = C_0, \text{ то } B_d(t, \tau) = \frac{1}{2} C_0^2,$$

$$\text{если } C(t) = C_0 \sin(\omega t + \varphi), \text{ то } B_d(t, \tau) = \frac{1}{2} C_0^2 \cos \omega \tau,$$

$$\text{если } C(t) = C_0 e^{-\alpha t}, \text{ то } B_d(t, \tau) = \frac{1}{2} C_0^2 e^{-\alpha \tau} e^{-2\alpha t},$$

$$\begin{aligned} \text{причем } \overline{B_T}(t, \tau) &= \frac{1}{T} \int_{t-T/2}^{t+T/2} C(t') \cdot C(t' + \tau) dt' = \\ &= \frac{1}{2} C_0^2 e^{-\alpha \tau} e^{-2\alpha t} \frac{e^{T/2} - e^{-T/2}}{\alpha T}. \end{aligned} \quad (\text{V.20})$$

На участках сингенетичного рассеяния элементов статистика, подсчитываемая по формуле (V.18), будет равна

$$\overline{B_T}(t, \tau; q) = \overline{B_T}(t, \tau) = B_\Phi(\tau) = \frac{1}{2} C_\Phi^2 + D_\Phi \cdot \delta(\tau),$$

где C_Φ — среднее фоновое содержание элемента; $D_\Phi \cdot \delta(\tau)$ — корреляционная функция флуктуационной составляющей с дисперсией D_Φ .

По мере приближения местоположения «скользящей» оценки (V.18) к рудному телу значения момента $\overline{B_T}(t, \tau; q)$ будут увеличиваться, так как вычисляемая статистика начнет включать в себя в соответствии с (V.19) текущие значения второго момента экспоненциальной детерминированной составляющей (V.20).

Как показали исследования геохимических полей (Использование статистических характеристик..., 1977), при переходе от участков сингенетичного рассеяния элементов к зонам околорудного пространства наблюдается изменение не только «скользящего» среднего значения (что очевидно), но и «скользящих» оценок таких характеристик, как коэффициентов асимметрии и эксцесса, нецентральных аналогов дисперсии, корреляционной функции и интервала корреляции. Экспериментом подтверждены следующие закономерности изменения «скользящих» статистик по мере приближения к рудной залежи: 1) увеличивается среднее значение и «дисперсия» распределения концентраций полезного компонента; само распределение приобретает вид левоасимметричного распределения; 2) увеличивается интервал автокорреляции, а нецентральный аналог корреляционной функции преобразуется от вида δ -функции (в поле сингенетичного рассеяния) к экспоненциальному виду; 3) почти равномерная спектральная плотность (в поле сингенетичного рассеяния) сменяется более узкополосной разностью, часто с превалирующей частотой (объясняемой ритмом смены зон трещиноватости и дру-

гих ослабленных участков земной коры, повлиявших на «почти периодическое» распределение концентраций в пространстве). Полученные результаты говорят о существенной неоднородности геохимического поля. В работе приведен пример исследования неоднородности геохимического поля посредством статистики (V.17). Поле представлено данными опробования керна скважин (а также результатами каротажа). Скважины заложены по профилям вкрест зоны тектонических разломов, контролирующих оруденение.

Пример демонстрирует возможности использования описываемой методики для обнаружения и оконтуривания рудогенных аномалий в условиях поиска. Критериями обнаружения служат выявляемые закономерности, заранее изученные на разрезах типа рис. 17. Количественные значения исследуемой статистики (например, V.17), полученные предварительно на полях сингенетичного рассеяния элементов изучаемого региона, позволяют назначить порог и оконтуривать аномалии. Чувствительность статистики (V.17) в 2,2 раза выше, чем при традиционных методах оконтуривания по правилу фиксации проб, содержание элемента в которых превышает установленное минимально-аномальное значение.

Именно на описанном свойстве начального второго момента аддитивного поля построены транзитивная теория ковариограмм Ж. Матерона (1968), объяснение эффекта самородков и влияния регуляризации поля при опробовании на аналитические свойства пространственной переменной.

Что касается способов представления и сравнения результатов анализа неоднородного поля, то мы уже на примерах столкнулись с аналитической обработкой графиков зависимости исследуемой характеристики от координат пространства (как при вычислении «центров тяжести» линейных продуктивностей в работе С. В. Григоряна и др., 1975) и с картированием исследуемой характеристики на разрезах и площадях («Использование статистических характеристик. .», 1977). В обоих случаях значения получаемых характеристик сравнивались между собой арифметически, т. е. как значения детерминированной функции.

Строго говоря, характеристики, получаемые по экспериментальным данным, являются случайными величинами, так как включают в себя по меньшей мере случайные ошибки измерения, а также погрешности, обусловленные конечным объемом экспериментальных данных и несоответствием реального объекта в точности принятой модели. Кроме того, при исследовании нерегуляризованных полей (при точечном опробовании) могут иметь место погрешности, обусловленные дисперсией флуктуационной составляющей геохимического поля.

Для сравнения случайных величин и случайных функций в математической статистике разработан аппарат проверки гипотез о равенстве статистических характеристик.

Мера расхождения (или близости) двух статистических характеристик чаще всего вычисляется по среднему квадрату разности или по максимальному значению разности (Вулих, 1967, с. 135). Так, например, мера расхождения оценок корреляционных функций (или спектральных плотностей), полученных по различным реализациям (q_1 и q_2) или при различных значениях аргумента (t_1 и t_2), может быть вычислена так (по среднему квадрату разности):

$$\begin{aligned} d(q_1, q_2) &= \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} [\hat{S}_T(\omega_1, \omega_2; q_1) - \hat{S}_T(\omega_1, \omega_2; q_2)]^2 d\omega_1 d\omega_2 = \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} [\hat{K}_T(t, \tau; q_1) - \hat{K}_T(t, \tau; q_2)]^2 dt d\tau; \\ d(t_1, t_2) &= \int_{-\infty}^{\infty} [\hat{S}_T(\omega, t_1; q) - \hat{S}_T(\omega, t_2; q)]^2 d\omega = \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} [\hat{K}_T(t_1, \tau; q) - \hat{K}_T(t_2, \tau; q)]^2 d\tau. \end{aligned} \quad (V.21)$$

Статистики (V.21), подсчитанные по экспериментальным данным, являются случайными величинами. Для того чтобы иметь возможность судить о значимости расхождения (похожести) сравниваемых характеристик, необходимо знать законы распределения вероятностей для $d(q_1, q_2)$ и $d(t_1, t_2)$ или некоторых функций от них.

Большое количество критериев сравнения выборочных характеристик для геологических объектов с закономерной изменчивостью свойств разработаны В. Н. Бондаренко (1978). Сформулированы предлагаемые критерии в терминах проверки статистических гипотез.

Схема проверки гипотез о равенстве исследуемой характеристики для последовательности реализаций позволяет отмечать в пространстве участки стационарности и эргодичности, а также фиксировать местоположение (локализацию) реализаций, начиная с которых прекращает приниматься гипотеза об однородности поля. Это дает возможность оконтуривать аномалии по исследуемой пространственной характеристике поля.

Границы между областями с различающимися характеристиками поля могут быть и плавными и резкими. В тех случаях, когда изменение параметров описания поля можно моделировать достаточно резкими скачками, целесообразно работать с иной математической моделью, чем рассматриваемая нами до сих пор, а именно, с моделью кусочно-однородного (квазиоднородного) поля. Обоснования построения понятийной модели геохимического поля, приводящей к такого рода математической модели, мы приводили в главе 1.

Исследование кусочно-однородного поля можно проводить методами анализа его сечений по профилям и скважинам посредством фильтра Калмана—Бьюси (Калман, Бьюси, 1961). Рекуррентный алгоритм фильтрации процесса в фильтре Калмана—Бьюси осуществляет по сути дела скользящее оценивание математического ожидания. Определенные модификации такого фильтра предназначаются для фиксации момента скачкообразного изменения математического ожидания. Обширный обзор методов определения момента изменения различных вероятностных характеристик в последовательности случайных величин предпринят И. Ш. Торговицким (1976).

К решению задачи разделения исследуемого геохимического поля на участки нормального геохимического фона и аномалии, представляющие собой различные зоны окорудных или вторичных (в зависимости от характера экспериментального материала) ореолов, можно подойти и с позиций методов классификации многомерных наблюдений.

Как уже говорилось выше, в пространстве земной коры, на которой задано исследуемое геохимическое поле, могут быть проявлены ореолы различного генезиса и химического состава. Естественно, что они должны быть выделены исследователем как различные аномалии (различные классы, на языке методов классификации). Кроме того, зоны одного и того же ореола часто характеризуются настолько различными геохимическими ассоциациями, что при детальном изучении поля не может быть и речи о классификации наблюдений геохимического поля на два класса — фон и аномалия.

Существует несколько методов классификации многомерных наблюдений, принципиально различающихся между собой по степени использования априорной информации о классах. Наиболее простое и полное изложение вопросов классификации многомерных наблюдений можно найти у С. А. Айвазяна и др. (1974), откуда частично заимствована табл. 2.

Из табл. 2 видно, что классификация геохимических наблюдений при поисковых работах представляет собой задачу, решение которой могут в принципе дать методы кластер-анализа. Однако практика показала, что геохимические аномалии зачастую не подходят даже под самые общие предположения о компактности классов в признаковом пространстве, что затрудняет применение общеизвестных схем кластер-анализа и требует специальных разработок.

Ниже приведем основные положения кластер-анализа (Айвазян и др., 1974) и некоторые примеры применения методов его в геологии.

Задача классификации в кластер-анализе ставится как задача разбиения совокупности наблюдений на однородные группы (классы). Наиболее трудным и наименее формализованным в данной постановке задачи является пункт, связанный с опре-

делением понятия однородности наблюдений (объектов).

В кластер-анализе понятие однородности задается посредством правила вычисления расстояния между наблюдениями в m -мерном признаковом пространстве и сравнения его с некоторым порогом. Наиболее часто в задачах кластер-анализа используются следующие метрики.

Т а б л и ц а

Методы классификации многомерных наблюдений

Априорные сведения о классах	Предварительная выборочная информация	
	Нет информации	Есть обучающие выборки
Самые общие предположения о законе распределения признаков внутри каждого класса (гладкость, сосредоточенность внутри ограниченной области и т. п.)	Кластер-анализ (автоматическая классификация, таксономия)	Непараметрические и эвристические методы классификации
Параметрическое семейство законов распределения признаков внутри каждого класса задано, но параметры неизвестны	Разделение смеси классов с помощью методов оценивания неизвестных параметров	Параметрические методы классификации (распознавание образов)
Однозначно заданы законы распределения признаков внутри каждого класса	Дискриминантный анализ	Обучающие выборки не нужны

1. Обычное евклидово расстояние:

$$d_E(x_i, x_j) = \sqrt{(x_{i1} - x_{j1})^2 + \dots + (x_{im} - x_{jm})^2}.$$

Использование этого правила вычисления расстояния оправдано лишь тогда, когда все m признаков взаимно независимы и имеют либо одинаковые дисперсии, либо одинаково важны с точки зрения решения вопроса об отнесении объекта к тому или иному классу.

2. Взвешенное евклидово расстояние:

$$d_{Ев}(x_i, x_j) = \sqrt{\alpha_1(x_{i1} - x_{j1})^2 + \dots + \alpha_m(x_{im} - x_{jm})^2}.$$

Определение весов $\{\alpha_i\}$, $i = 1, 2, \dots, m$ требует дополнительной информации (например, от экспертов) или дополнительных исследований (например, методами факторного анализа).

3. Метрика типа расстояния Махаланобиса:

$$d_M(x_i, x_j) = \sqrt{(x_i - x_j)^T A^{-1} K^{-1} A (x_i - x_j)},$$

где K — ковариационная матрица генеральной совокупности; A — симметричная матрица весовых коэффициентов, которая чаще всего выбирается диагональной.

Использование этой метрики оправдано для признаков с гауссовским распределением или несколько другим, но мономодальным.

4. Расстояние Хемминга:

$$d_H(x_i, x_j) = |x_{i1} - x_{j1}| + \dots + |x_{im} - x_{jm}|$$

используется для бинарных признаков.

5. Меры, задаваемые с помощью потенциальных функций

$$Q(x_i, x_j) = \exp\{-\beta d^2_{\text{П}}(x_i, x_j)\}$$

или

$$Q(x_i, x_j) = [1 + \beta d^2_{\text{П}}(x_i, x_j)]^{-1},$$

где $\beta > 0$.

Эти меры используются при оценке плотности распределения исследуемой совокупности в виде сглаженной гистограммы (в общем случае, полимодальной) и в ряде специальных алгоритмов классификации (подробнее см. Айвазян, 1974, с. 79).

Для вычисления расстояний между классами (группами наблюдений) применяются обычно следующие метрики.

1. Расстояние, измеряемое по принципу «ближайшего соседа»,

$$d_{\min}(T_k, T_l) = \min_{i,j} d(x_{ki}, x_{lj}).$$

2. Расстояние, измеряемое по принципу «самого дальнего соседа»,

$$d_{\max}(T_k, T_l) = \max_{i,j} d(x_{ki}, x_{lj}).$$

3. Расстояние между «центрами тяжести» групп

$$d_{\text{ц.т.}}(T_k, T_l) = d(\bar{x}_k, \bar{x}_l).$$

4. Расстояние, измеряемое по принципу «средней связи»_х

$$d_{\text{ср}}(T_k, T_l) = \frac{1}{n_k n_l} \sum_{j=1}^{n_l} \sum_{i=1}^{n_k} d(x_{ki}, x_{lj}).$$

Измеряя расстояния между наблюдениями и группами наблюдений, можно решать вопрос о возможности отнесения сравниваемых объектов к одному классу, если задаться величиной порога для расстояния между наблюдениями в пределах одного класса. При работе кластер-процедуры порог может оста-

ваться постоянным, а может и изменяться в соответствии с некоторым заданным правилом.

Если число классов в исследуемом экспериментальном материале неизвестно, то наиболее приемлемой процедурой для решения задачи методами кластер-анализа является иерархическая процедура последовательного разделения или объединения.

В качестве примера использования кластер-анализа в геохимических исследованиях можно привести работу R. Obial, (1970), в которой выделяются группы с различными корреляционными связями с помощью иерархических дендрограмм. В работе «Алгоритмы автоматической классификации...» (1968) использован метод потенциальных функций при построении иерархической процедуры разделения минералов группы пироклор—микролит. Проведено сопоставление результатов автоматической классификации с классификацией, принятой в настоящее время в минералогии. Положительные результаты этого сопоставления дают некоторое подтверждение универсальности принципов кластер-анализа и возможностей использования его для решения отдельных задач геологии. Пример использования методов кластер-анализа для петрохимических данных имеется также в работе Г. М. Другова и др. (1974). Различные модификации алгоритмов разграничения геологических объектов на квазиоднородные области созданы Д. А. Родионовым (1968, 1972).

При решении поисковых задач по геохимическим данным нам представляется достаточно рациональным предварительное использование метода главных компонент для выяснения тех ассоциаций элементов, комплексные аномалии которых следует оконтуривать в качестве квазиоднородных зон ореола.

3. ОПРЕДЕЛЕНИЕ АССОЦИАЦИЙ ТИПОМОРФНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ МЕТОДОМ ГЛАВНЫХ КОМПОНЕНТ

До сих пор мы затрагивали в основном вопросы исследования законов распределения концентраций отдельного химического элемента в околорудном пространстве. При этом учитывалась информация о статистических взаимосвязях различных элементов в виде матричнозначной корреляционной функции геохимического поля. Эта вероятностная характеристика геохимического поля обусловлена по сути дела его флуктуационной составляющей. Но и детерминированные составляющие, описывающие закономерное поведение различных элементов в околорудном пространстве, взаимозависимы.

Взаимосвязанное поведение различных химических элементов в околорудном пространстве обусловлено в основном тремя явлениями: парагенезисом минералов, зависящим от физико-химических условий их образования; сродством элементов, образующих химические связи в минералах, и изоморфизмом опре-

деленных групп элементов в кристаллических решетках минералов.

Эти явления отражают закономерности формирования литосферы на двух различных уровнях описания земной коры как системы — на уровне минералов и на уровне химических элементов. В системном анализе такие различные уровни абстрагирования называют стратами (Месарович и др., 1973, с. 56), а описание системы на определенном уровне — стратифицированным описанием.

Геохимическое поле является стратифицированным описанием участка земной коры на атомном уровне. Поведение химических элементов в пространстве и их взаимосвязи представляют структуру такого стратифицированного описания. Описание того же участка земной коры на страте минералов имеет уже другую структуру, законы формирования которой выступают как условия или ограничения формирования геохимического поля (как системы на более низком страте — на уровне атомов). Такого рода соотношение страт предопределило существование различных парагенезисов элементов у различных групп пород, руд и других геологических образований.

Что же касается химического сродства и изоморфизма элементов, то эти явления выступают, по-видимому, основополагающими при формировании структур геохимических систем.

Используя символическую запись структур S различных страт, можно написать следующие соотношения:

$$\begin{aligned} M_i &= S_M \{E_{1i}, \dots, E_{ki}, \dots, E_{ni}, \dots, E_{mi}\}, \\ P_j &= S_P \{M_1, \dots, M_i, \dots, M_q\}, \end{aligned}$$

где M_i — некоторый (i -ый) минерал, представляющий собой некоторую структуру S_M на молекулярном страте, когда в качестве элементов системы выступают химические элементы, а именно $E_{1i}, \dots, E_{ki},$ каждый из которых в общем случае может быть замещен в кристаллической решетке минерала изоморфными для себя элементами $E_{li}, \dots, E_{mi}$ или $E_{ni}, \dots, E_{pi}$ соответственно; P_j — некоторый (j -ый) парагенезис минералов, представляющий некоторую структуру S_P на своем страте, где в качестве элементов системы выступают минералы.

Геохимическая проба из участка ореольного пространства, представленного парагенезисом минералов P_j , выявляет наличие повышенных концентраций элементов $E_{11}, E_{1l}, \dots, E_{kq}, \dots, E_{pq}.$

В таком случае принято говорить об «ассоциации элементов в состоянии концентрации» (Сауков, 1976, с. 9). При этом в любой ассоциации, по-видимому, можно найти группы элементов, представляющие известные ряды изоморфных элементов.

Приведем для конкретности дальнейшего изложения ассоциативные группы редких и рассеянных элементов, рекомендуемые

Ю. Н. Капковым и др. (1966) для геохимических прогнозных карт:

1. Ti, V, Cr, Mn, Co, Ni	(фемафилы)	
2. F, P, Cl, J, Br	(летучие)	
3. S, As, Se, Sb, Hg	}	(сильно подвижные)
4. Li, Rb, Cs, Sr, Ba		
5. Cu, Zn, Ag, Au, Pb		(халькофилы)
6. Be, Mo, Sn, W, Bi		(мало подвижные)
7. Ga, Ge, Cd, In, Tl	}	(плохо изученные)
8. Sc, Y, Zr, La, Ce, Hf		
9. Nb, Ta, Ra, Th, U		(радиоактивные)
10. Rh, Pd, Os, Ir, Pt		(химически инертные)

Современное представление о формировании ореольного пространства (с аномальными концентрациями) вокруг месторождений гидротермального генезиса опирается на схему последовательной смены образующихся минеральных парагенезисов во времени (а следовательно, и в пространстве) по мере уменьшения температуры. При этом «тыловые» зоны ореольного пространства характеризуются аномальностью мало подвижных элементов ассоциативной группы Be, Mo, Sn, W, Bi (высокоэнергетичным парагенезисом), а «фронтальные» зоны ореола — аномальностью летучих элементов F, P, Cl, J, Br и сильно подвижных элементов групп S, As, Se, Sb, Hg и Li, Rb, Cs, Sr, Ba (низкоэнергетичными парагенезисами).

Факт смены ассоциаций элементов по направлению движения растворов от «тыловых» к «фронтальным» проявляется достаточно стабильно и может быть использован при поисках для индикации направления простираения рудного тела.

Что же касается элементов обогащения руды, то их набор предопределен прежде всего концентрациями элементов в гидротермальном растворе. При прогнозных построениях по характеристикам геохимических аномалий тип оруденения может быть ориентировочно определен по набору элементов, образующих наиболее широкий и контрастный ореол, т. е. по набору элементов, присутствующих во всех ассоциациях аномальных элементов совместно и с «тыловыми» и «фронтальными».

Строго говоря, существующее понятие «ассоциаций элементов» является лишь бинарной характеристикой прямой закономерной взаимосвязи элементов в пространстве. Характеристика бинарна, так как в ней потеряна информация о контрастности аномалии различных элементов, и отображает лишь прямую зависимость, потому что в ассоциации не включаются элементы выноса, как и «нейтральные» элементы, ведущие себя одинаково и в поле сингенетического рассеяния, и в ореольном пространстве исследуемого типа месторождений. Обзор различных статистических методов определения ассоциаций элементов по экспериментальному материалу можно найти у Б. И. Смирнова (1975).

К более точному решению прогнозной задачи можно прийти, во-первых, используя количественные данные о поведении детерминированных составляющих в пространстве и, во-вторых, модифицируя характеристику «ассоциация элементов» так, чтобы избавиться от перечисленных выше недостатков.

Модификация формы представления ассоциации элементов может быть проведена введением различных весовых коэффициентов для элементов, входящих в ассоциацию. При этом имеет смысл давать один знак весовым коэффициентам при конкордатных элементах и противоположный знак для антикордатных элементов. Так, например, ассоциация элементов с аномальными концентрациями в близрудных зонах медноколчеданного месторождения может выглядеть так:

$$0,6 \text{ Cu} + 0,5 \text{ Zn} + 0,4 \text{ Pb} + 0,3 \text{ Ag} - 0,2 \text{ Ga} - 0,1 \text{ Y} - 0,1 \text{ Sc}.$$

Такого рода аддитивные комбинации взвешенных элементов можно получить при анализе признакового пространства методом главных компонент.

В разделе 1 данной главы мы упоминали об использовании Q -модификации метода главных компонент (Естественные составляющие..., 1970), с помощью которой выделяются «ассоциации» точек наблюдения с наиболее близкими друг к другу характеристиками. В этом случае анализируется матрица рассеяния $n \times n$, состоящая из оценок коэффициентов ковариации одного признака в n точках наблюдения пространства R^n . При этом каждый признак поля (у нас — химический элемент) исследуется отдельно посредством m измерений в каждой из n точек пространства R^n .

Для задач геохимических поисков типична другая форма сбора экспериментального материала, когда в распоряжении исследователя имеется одна реализация измерений m признаков в n точках пространства R^n ($v=1, 2, 3$). Ряд исследователей (Крамбейн, Грейбилл, 1969, с. 315; Голубева, 1975) используют механизм Q -модификации метода главных компонент для анализа структуры пространства R^n по m признакам (вместо m измерений одной характеристики поля).

Более естественным для геохимических материалов является использование R -модификации метода главных компонент, в которой анализируется матрица $K[m \times m]$ ковариаций признаков:

$$K = M [(\xi - \mu_\xi)^T (\xi - \mu_\xi)] = \begin{pmatrix} k_{11} & k_{12} & \dots & k_{1m} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ k_{mm} \end{pmatrix}.$$

Оценка элемента матрицы k_{ij} может быть вычислена следующим образом:

$$\hat{k}_{ij} = \frac{1}{n-1} \sum_{l=1}^n [\xi_i(Z_l) - \bar{\xi}_i] [\xi_j(Z_l) - \bar{\xi}_j].$$

Главные компоненты $\{y_i\}$ — линейные комбинации исходных признаков $\xi_1, \dots, \xi_m$:

$$y_i = \beta_i^T \xi = \beta_{i1}\xi_1 + \beta_{i2}\xi_2 + \dots + \beta_{im}\xi_m \quad (i=1, \dots, m), \quad (V.22)$$

дисперсии которых обладают следующим свойством.

Дисперсия первой главной компоненты имеет максимально возможное значение среди дисперсий всех возможных линейных комбинаций исходных признаков

$$M[(\beta_1^T \xi)^2] = \beta_1^T K \beta_1 = \max_{\beta} M[(\beta^T \xi)^2].$$

Дисперсия второй главной компоненты максимальна для всех линейных комбинаций, ортогональных к первой, т. е.

$$M[(\beta_2^T \xi)^2] = \max_{\beta} M[(\beta^T \xi)^2]$$

при условии

$$M[(\beta_1^T \xi)^T (\beta_2^T \xi)] = 0.$$

И так далее для всех главных компонент.

Можно показать (Андерсон, 1963), что векторы $\{\beta_i\}$ ($i=1, m$) являются решениями уравнения

$$(K - \lambda I) \beta = 0, \quad (V.23)$$

где I — единичная матрица; λ — множитель Лагранжа, посредством которого вводится условие нормировки векторов

$$\beta^T \beta = I.$$

Из курса высшей алгебры известно, что векторы $\beta_1, \dots, \beta_m$, удовлетворяющие (V.23), являются собственными (характеристическими) векторами матрицы K , а $\lambda_1, \dots, \lambda_m$ — соответствующими собственными (характеристическими) корнями матрицы K .

Важно заметить, что λ_i ($i=1, \dots, m$) равна дисперсии i -й главной компоненты, при этом $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \dots \geq \lambda_m$. Если задаться каким-либо критерием значимости для дисперсий главных компонент, то это зачастую помогает в дальнейших исследованиях ограничиться меньшим количеством переменных, чем m .

Информация о взаимном расположении точек в пространстве R^v восстанавливается при рассмотрении поля главных компонент $\{y_i\}$ ($i=1, 2, \dots, t; t \geq m$), которое имеет ряд преимуществ перед полем исходных признаков. Во-первых, главные компоненты представляют собой ассоциации наиболее тесно связанных между собой элементов, выделяемые автоматически в силу самой сущности метода главных компонент. Во-вторых, главные компоненты независимы между собой (так как собственные векторы $\{\beta_i\}$ ортогональны), что упрощает интерпретацию многомерной модели поля. В-третьих, число признаков может быть существенно сокращено (до 1—5 вместо нескольких десятков).

Метод главных компонент является методом исследования статистического материала, различные свойства которого выявляются при обработке различных матриц K . Непосредственно ковариационная матрица может быть исследована методом главных компонент только в том случае, когда все признаки имеют один масштаб разброса значений. В геохимии содержания многих элементов различаются между собой на порядки. В подобных ситуациях требуется какая-либо нормировка признаков (Айвазян и др., 1974, с. 158).

Чаще всего пользуются нормировкой делением на значения среднеквадратических отклонений признаков, что эквивалентно анализу матрицы нормированных коэффициентов корреляции в качестве матрицы рассеяния. Однако в нормированной корреляционной матрице совершенно потеряна информация о степени рассеяния признаков, что весьма нежелательно. Мы считаем более целесообразным пользоваться нормировкой делением на средние значения, что эквивалентно анализу матрицы коэффициентов вариации (О применении метода главных компонент. 1975):

$$V = \begin{pmatrix} v_{11} & v_{12} & \dots & v_{1m} \\ & & & \\ & & & \\ & & & v_{mm} \end{pmatrix}, \quad (\text{V.24})$$

где оценка коэффициента вариации v_{ij} вычисляется аналогично (V.15):

$$\hat{v}_{ij} = \sqrt{\frac{\hat{k}_{ij}}{\hat{\mu}_i \hat{\mu}_j}}.$$

Такая матрица рассеяния позволяет сохранить (и использовать) информацию о степени рассеяния признаков.

Главная компонента, получаемая при анализе корреляционной матрицы, включает в себя ассоциацию положительно коррелированных элементов, при которых коэффициенты β_{ij} в (V.22) имеют один знак, и в ряде случаев группу элементов, имеющую отрицательную корреляционную связь с выделенной ассоциацией (коэффициенты β_{ij} в (V.22) при этой группе элементов имеют противоположный знак).

Используя матрицу вариаций (V.24) в качестве анализируемой матрицы рассеяния, мы исключаем из получаемых ассоциаций (главных компонент) элементы с малой дисперсией, точнее элементы, образующие однородные поля в ореольном пространстве и являющиеся поэтому неинформативными. Другими словами, главные компоненты по матрице вариаций — это ассоциации конкордатных и антикордатных элементов, образующих контрастные аномалии концентрации и выноса в околорудном пространстве.

Основные требования к экспериментальному материалу, которые должны выполняться при использовании метода главных компонент (как и других алгоритмов факторного анализа), изложены В. А. Голубевой (1976, с. 15—17). В другой работе (Голубева, 1975) показано, как имеет смысл использовать в геологии связь Q - и R -модификаций метода главных компонент.

Применение главных компонент для классификации геологических объектов находим в целом ряде работ (Евдокимова и др., 1973; Нарымский и др., 1973; Wiatr, Stenzel, 1974; Голубева и др., 1976). Исследование поля главных компонент при анализе окolorудного ореола проведено в работе Б. Наирис (1973).

Наиболее приспособленным к изучению зонального строения ореольного пространства представляется алгоритм И. Н. Голынка (1977). Ассоциации элементов, выделяемые методом главных компонент, определяются в работе по отдельности для фрагментов исследуемого поля, каждый из которых оконтуривается априори в соответствии с геологическим строением района. Это позволяет характеризовать каждый участок ореольного пространства своей ассоциацией элементов и прослеживать закономерность смены этих ассоциаций в разных направлениях.

Приведем вкратце основные выводы И. Н. Голынка (1977), которые считаем важными для обоснования и построения алгоритмов поиска и прогноза месторождений по данным изучаемой зональности ассоциативных комплексов элементов.

I. Типоморфные рудные ассоциации в редуцированном виде проявляются во всех группах рудоносного комплекса, в том числе на значительном удалении от рудных узлов.

II. По мере приближения к рудному узлу доля рудных факторов возрастает.

III. Среди типоморфных ассоциаций выделяются главные, определяющие тип оруденения, и ассоциации-спутники. Центральная часть ореола — рудный узел — является областью с высокой дисперсией значений всех рудных факторов и максимальным проявлением определяющей типоморфной ассоциации.

Общность закономерности построения ореольного пространства для рудных объектов разных масштабов (Овчинников и др., 1972) позволяет интерпретировать выделяемую смену геохимических зон как проявление необходимого (хотя еще не достаточного) условия локализации оруденения.

Выводы.

Математические методы исследования геохимического поля могут быть построены лишь на основе определенных понятийных (геологических) моделей. Основной признак ореольного пространства — это закономерное распределение в пространстве аномальных концентраций комплексов типоморфных элементов.

Только математические методы, фиксирующие и аппроксимирующие такого рода пространственные закономерности, могут быть использованы для выяснения информативных характеристик ореольного пространства, с тем чтобы использовать найденные характеристики в алгоритмах прогноза месторождений по геохимическим данным. Наилучшей аналитической аппроксимацией распределения концентраций в околорудном пространстве представляется полигауссовская поверхность, характер которой обоснован решением прямых задач геохимии. Комплексность аномалий следует устанавливать либо с помощью логических алгоритмов, фиксирующих конкордатное и антикордатное поведение детерминированных составляющих многомерного геохимического поля, либо посредством метода главных компонент.

Глава VI. МАТЕМАТИЧЕСКОЕ ОПИСАНИЕ ГЕОХИМИЧЕСКИХ ДАННЫХ С ПОЗИЦИЙ МОДЕЛИ СЛУЧАЙНОГО ПОЛЯ

1. ОСНОВНЫЕ ПРИНЦИПЫ ПОСТРОЕНИЯ МЕТОДИКИ ОБРАБОТКИ ГЕОХИМИЧЕСКОЙ ИНФОРМАЦИИ В ПОИСКОВЫХ ЗАДАЧАХ

Методика математической обработки геохимических данных при поисках месторождений зависит прежде всего от объема, характера и надежности априорной информации о типе искомого оруденения и его структурно-морфологических особенностях. Полнота априорной информации, определяемая степенью изученности объема исследования, тесно связана со стадийностью и масштабностью геологоразведочных работ.

На настоящем этапе развития геохимических методов поиска имеет смысл, по-видимому, разрабатывать две различные ветви в алгоритмах обработки геохимических данных: для решения поисковых задач без априорной информации и для решения задачи поиска определенного оруденения.

Задачи без априорной информации о типе и особенностях искомого оруденения — это в основном задачи прогнозно-рекогносцировочного характера, решаемые в процессе ведения общих и детальных поисков, а также частично на стадии региональной геологической съемки, при исследованиях масштаба 1:25 000 и мельче. Целью такого рода поисковых работ является выделение территорий, перспективных на обнаружение слепых месторождений полезных ископаемых, тип которых ориентировочно выявляется апостериори (иногда исследователь имеет возможность опираться в своих решениях на список типов оруденения, наиболее вероятных в исследуемом регионе). В дальнейшем будем называть для краткости такие задачи задачами среднемасштабных поисков.

Задачи при наличии априорной информации о типе искомого оруденения и его структурно-морфологических характеристик — это задачи поиска новых рудных тел на флангах известных месторождений, а также, в ряде случаев, задачи поисково-оценочных работ на стадии детальных поисков. Исследования этого рода ведутся обычно в масштабах 1:10 000 и крупнее. Целью работ является предсказание местоположения возможных рудных тел, оценка эрозийного среза и прогнозной глубины залегания предполагаемой зоны оруденения. Задачи подобного типа будем называть в дальнейшем задачами крупномасштабного поиска известного типа оруденения.

Соотношение между масштабами геологоразведочных работ, объемом априорной информации и задачами геохимических исследований приведено в табл. 3.

Геологоразведочные работы в условиях горного отвода позволяют решать задачи крупномасштабных поисков в два этапа, известные в теории классификации как этап «обучения» и этап «распознавания».

Первый этап, этап «обучения», состоит в выяснении информативных характеристик околорудных ореолов определенного типа оруденения по результатам разведочных работ на известных рудных телах. Такие информативные характеристики, определенные с точностью до числовых значений всех их параметров, называют также «эталоном» заданного класса околорудных ореолов.

Второй этап крупномасштабных поисков состоит по сути дела в «распознавании» аномалий, выделяемых на флангах месторождения. В качестве априорной информации на этом этапе в таких случаях выступают информативные характеристики околорудного пространства, выработанные на первом этапе. Для математической реализации алгоритма идентификации аномалий при наличии полной априорной информации могут быть привлечены параметрические методы классификации («распознавания образов»), а при неполных априорных сведениях — непараметрические и эвристические методы классификации (см. табл. 4).

«Эталонная» геохимическая информация должна так или иначе характеризовать контрастность и комплексность рудных аномалий, их зональное строение, а также форму и протяженность в пространстве. Информативные характеристики аномалий, связанных с рудообразованием, для алгоритмов математической обработки материала могут быть любой математической категории: величиной, матрицей, бинарным кодом, функцией, функционалом и т. п.

При проведении работ в условиях горного отвода существует принципиальная возможность определить информативные признаки околорудного пространства с точностью до численных значений параметров для детерминированных характеристик и для законов распределения вероятностей случайных характеристик.

Проводя прогнозно-рекогносцировочные работы, исследователь восполняет отсутствие априорной информации за счет известных данных изученных месторождений, руководствуясь принципами обобщений и аналогий. Обычно привлекаются аналитические формулы, схемы, критерии без числовых значений параметров. Количественные значения параметров информативных характеристик оцениваются в таких случаях непосредственно по данным опробования в соответствии с критериями оптимальности алгоритма самонастраивающегося классификатора.

Краткая характеристика поисковых задач

Стадия (масштаб работ)	Объект изучения	Цель геохимиче- ских исследований	Типовая исходная (априорная) информация	Требуемая а posteriorи информация	Наиболее удобная документация результатов исследования
Прогнозно- рекогносциро- вочная (1 : 25000 и мельче)	Регион	Поиск рудных полей	1) геологическая карта, 2) результаты гео- химического оп- робования на поверхности, 3) перечень воз- можных типов оруденения в регионе (не всегда)	1) пространственное по- ложение предполагаемых рудных полей 2) диагностика возможного типа оруденения	Прогнозная карта (карта с окоптуренными перспек- тивными аномалиями и таблица геохимических предпосылок)
Разведочные работы	Ореолы известных рудных тел	Выбор инфор- мативных характеристик околорудного ореола	1) геологическая карта, 2) серия геологи- ческих разрезов через рудные тела и ореольное пространство, 3) тип месторож- дения, 4) результаты гео- химического оп- робования керна разведочных сква- жин и горных выработок	1) пространственная струк- тура ореола (аналитичес- кая или схематическая), 2) критерий опознавания над- рудных зон ореола, 3) комплекс типоморфных элементов, 4) связь некоторых пара- метров ореола с масшта- бом и типом оруденения, 5) обобщенные характери- стики (ряд зональности, индикаторное отношение)	Математические формулы, схемы; перечни элементов, критерия; количественные значения; параметров и констант; оценка вероят- ностей проявления на еди- нице площади искомого оруденения
Поисково- оценочные работы	Фланги известных месторождений	Поиск новых рудных тел	1) геологическая карта, 2) «эталонные» воз- можных типов оруденения, 3) результаты гео- химического оп- робования на по- верхности и керна поисково-оценоч- ных скважин	1) пространственное поло- жение предполагаемых руд- ных тел, 2) уточнение типа предпо- лагаемого оруденения, 3) ориентировочная оценка масштаба оруденения	Прогнозная карта, про- гнозные разрезы, таблица качественных и количест- венных показателей всех перспективных аномалий

В условиях горного отвоя (1 : 10 000 и крупнее)

Для примера можно напомнить приведенные в главе IV алгоритмы обнаружения сигнала («следа» эндогенных процессов) в шуме при различном объеме априорной информации о сигнале. Информативной характеристикой при такой постановке задачи является пространственная форма сигнала (например, в виде кривой Гаусса). Полная априорная информация подразумевает точное знание аналитической записи сигнала как функции пространственных координат и ее параметров (для кривой Гаусса — амплитуды и параметра затухания), а также вероятности появления сигнала. Если все параметры и вероятности имеют количественные оценки, то идентификация нового геохимического материала осуществляется с помощью аппарата проверки статистических гипотез (см. IV. 19), что эквивалентно проведению процедуры параметрической классификации на два класса. Точное знание параметров сигнала позволяет с определенной степенью надежности отличать рудогенные аномалии от зон рассеянной минерализации. Такое положение достаточно типично для поисков новых рудных тел в условиях горного отвода при априорном знании структурно-морфологических особенностей рудного поля.

Если некоторые параметры сигнала (нашей информативной характеристики) неизвестны, то в процедуре принятия решения появится дополнительная неопределенность (см. смысловое содержание величины ϵ в выражении (IV. 24)). Такая ситуация типична для среднемасштабных поисков.

Математическим методам принятия решений в условиях неопределенности при прогнозировании месторождений полезных ископаемых (в масштабах работ 1 : 25 000 и мельче) посвящена монография А. Н. Бугайца, Л. Н. Дуденко (1976). Поэтому мы не будем рассматривать более подробно различные методики классификации. Отметим только, что формальные процедуры оптимальной классификации разработаны в математической статистике достаточно полно. Однако хорошо известно, что их оптимальность имеет место при наличии количественной априорной информации о параметрах распределения вероятностей и множестве описаний всех классов рудных аномалий. При отсутствии количественной априорной информации оптимальность процедур принятия решений может оказаться фиктивной. Успех прогнозных построений с помощью «оптимальных» процедур зависит прежде всего от того, насколько информативны те признаки, которые выбраны априори как аналитические, количественные и качественные характеристики околорудного пространства и используются в алгоритмах классификации в качестве информативных признаков. Именно на этом вопросе мы и остановимся подробнее.

Информативные признаки исследуемых объектов для алгоритмов классификации этих объектов могут выбираться двумя путями. Первый путь — это выделение комплекса признаков из

числа заданных по критерию максимизации различия заданных классов или максимизации компактности каждого класса. Если все признаки из набора заданных относятся к одной математической категории, то такой путь «минимизации описания» классов легко формализуется, алгоритмизируется и, в силу четкости и однозначности результатов, широко распространен в практике применения математических методов классификации. Однако этот путь выбора информативных характеристик совершенно не отвечает на вопрос, насколько удачно задан начальный набор признаков. Именно по этой причине, на наш взгляд, большое количество прогнозных алгоритмов в поисковой геохимии до сих пор не удовлетворяет потребностей практики.

Второй путь, не исключающий, а, по-видимому, предшествующий первому, — это выбор информативных признаков по принципу максимизации приближения к наиболее точному математическому отображению понятийной (геологической) модели. Этот путь пока не формализован, что ведет к субъективности решений. Но все-таки именно этот вопрос нам кажется наиболее актуальным в настоящее время. К такой математической категории должны относиться информативные характеристики околорудного пространства. Какого рода упрощения математической модели геохимического поля допустимы? Следует ли так стремиться к простым обобщенным математическим характеристикам, как это делается до сих пор?

Попробуем подойти к вопросу, проследив цепочку исследовательских построений: цель исследования → понятийная модель объекта исследования → математическая модель объекта исследования → информативные характеристики описания объекта, позволяющие достичь цель исследования.

Цель исследования: определение местонахождения рудных полей или рудных тел (в зависимости от масштаба поисковых работ) по данным геохимического опробования исследуемых территорий. Отсюда следует, что и модель изучаемого объекта и его основные характеристики должны описываться в рамках математической модели функциями пространственных координат (математическая категория информативных признаков в виде функции определяется однозначно).

Понятийная модель околорудного пространства заключается в основном в следующем. Рудное тело и околорудный ореол образуют единую пространственную статическую систему одного генезиса. Комплекс аномальных элементов в ореольном пространстве эквивалентен типоморфному комплексу элементов обогащения руды. Размеры ореола пропорциональны масштабам оруденения. Пространственная форма ореола (не измененная пострудными тектоническими нарушениями) обусловлена рядом геохимических процессов (фильтрацией, диффузией, химическими реакциями и т. п.).

Отличие рудных аномалий от зон рассеянной минерализации на геохимическом страте носит в основном количественный характер, обусловленный экономической эффективностью разработки в настоящее время участков определенной концентрации полезного компонента и неэффективностью разработки меньших скоплений. Для элементов, образующих собственные месторождения, понятие руды сформулировано на страте минералов. Однако при решении поисковых задач, ограниченных возможностью привлечения лишь геохимического материала (например, по причине дешевизны последних по сравнению с минералогическими исследованиями), различие рудогенных аномалий и зон рассеянной минерализации может опираться, по-видимому, в основном на следующие количественные соотношения. Околорудное пространство отличается от зон рассеянной минерализации большей концентрацией элементов типоморфного комплекса, а также большей дисперсией этих концентраций (Горигорян, Резников, 1972; Кравченко, Болотников, 1971). Из качественных различий можно отметить более четкое зональное строение околорудных ореолов.

Из сказанного следует, что для определения типа оруденения необходимо уметь определять типоморфный комплекс элементов, для определения эрозийного среза исследуемого ореола — последовательность смены в пространстве зон проявления ассоциаций сонахождения элементов, для оценки размеров и удаленности оруденения от рассматриваемого среза ореола — функцию, описывающую зависимость размеров, контрастности и комплексности аномалии от расстояния до руды. Перечисленные следствия из анализа понятийной геологической модели вполне очевидны и общеизвестны. Но какие же выводы из них можно сделать при конструировании математической модели?

О рациональном построении математической модели типоморфного комплекса элементов мы говорили в разделе 3 главы V. Из всех существующих математических приемов наиболее приемлемым для оценки типоморфной ассоциации представляется метод главных компонент. Зоны проявления ассоциаций сонахождения элементов могут быть выделены как в рамках непрерывной, так и кусочно-однородной модели поля концентраций. В первом случае задача сводится к выделению ассоциации элементов, имеющих конкордатное пространственное распределение концентраций (см. раздел 4 главы IV), а во втором случае — к многомерному кластер-анализу (см. раздел 2 главы V) с учетом пространственной привязки проб.

Что касается построения функции, отображающей зависимость некоторой характеристики ореола от расстояния исследуемого среза ореола до рудного тела, то оно должно опираться на аналитические аппроксимации пространственных закономерностей в поведении концентраций типоморфного комплекса элементов (см. раздел 1 главы V).

Итак, какова должна быть математическая модель геохимического поля, конструируемая в соответствии с рассмотренными требованиями к ней?

Наиболее подходящей (гомоморфной) математической моделью для геохимических данных в поисковых задачах является многомерное случайное поле с детерминированной составляющей. В детерминированной составляющей имеет смысл различать низкочастотную составляющую регионального фона и локальные поля аномалий (см. формулу (IV.15) и рис. 12), аппроксимируемые экспоненциальными функциями.

При среднемасштабных поисках геохимическое поле задается выборочными значениями в узлах нерегулярной в общем случае сети точек (в соответствии с системой опробования обнажений в исследуемом регионе). Практически точечное опробование предопределяет отсутствие операции регуляризации поля в процессе его опробования. Флуктуационная составляющая геохимического поля при среднемасштабных поисках обусловлена поэтому не только ошибками пробоотбора и измерения концентраций, но и неоднородностями петрографического состава пород.

При крупномасштабных исследованиях система профильного опробования позволяет упростить на некоторых этапах рабочую модель случайного поля до упорядоченной серии случайных функций (такая модель подробно рассмотрена в разделе 2 главы V). Измеряемое геохимическое поле при исследованиях крупных масштабов обычно регуляризовано вследствие бороздового опробования. В этом случае флуктуационная составляющая определяется в основном ошибками опробования, обработки проб и измерения концентраций химических элементов.

Ввиду того, что объектами тщательного изучения при решении поисковых задач являются локальные поля аномалий, основополагающей информативной характеристикой геохимического поля в математической модели является его детерминированная составляющая.

Дальнейшее сокращение информации необходимо проводить, выделяя комплекс конкордатных и антикордатных элементов, моделирующих в своей совокупности ассоциацию типоморфных элементов. Для дальнейших вычислительных (прогнозных) построений желательно, чтобы математической моделью типоморфного комплекса была однозначная функция (см. раздел 3 главы V).

Информативная характеристика геохимического поля — это, по всей видимости, аналитическая функция, аппроксимирующая зависимость взвешенной комбинации содержаний элементов типоморфного комплекса от пространственных координат (например, с помощью кривой Гаусса) (см. главы II, V).

В зависимости от аналитического вида информативной характеристики, от полноты априорного знания о ее параметрах

и вероятностях искомого оруденения, от объема экспериментального материала на территории поиска с различной степенью точности определяются местоположение и размеры прогнозируемого оруденения. Здесь следует заметить, что для ориентировочной оценки глубины залегания и размеров предполагаемого оруденения необходимо иметь данные по меньшей мере с двух горизонтов (для определения градиента информативной характеристики по вертикали). Вычислить интересующие исследователя параметры рудных зон по данным одной поверхности можно будет, видимо, лишь после тщательного изучения взаимного соотношения в пространстве детерминированных составляющих дискордатных элементов.

Итак, предлагаемые нами принципы организации математической обработки геохимической информации при описании экспериментального материала требуют, чтобы в обрабатывающих программах присутствовали следующие операции:

1) выделение участков локальных аномалий посредством реализации полосового фильтра, отфильтровывающего низкочастотное поле регионального фона и высокочастотный шум измеренного геохимического поля;

2) оценка типоморфного комплекса элементов аналитической функции;

3) аналитическая аппроксимация пространственных закономерностей распределения типоморфного комплекса.

Алгоритмы, отвечающие вышеизложенным требованиям, могут быть реализованы немалым числом способов с помощью различных методов. Основные из них перечислены в табл. 4.

Ниже приведен краткий анализ тех алгоритмов, которые используются в настоящее время в практике первичной обработки геохимической информации. В алгоритмах выделения локальных аномалий учет регионального фона обычно сводится к аннулированию влияния разновидностей пород путем вычитания среднефоновых содержаний. В первом приближении эта операция представляется достаточно правомочной (особенно, при крупномасштабных работах). Фильтрация флуктуационного шума в измеренном геохимическом поле проводится обычно методами скользящего усреднения. Возражение вызывает лишь отсутствие критериев степени усреднения.

Оценка типоморфного комплекса обычно сводится к мультипликативной функции, а построение информативной характеристики для дальнейших прогнозных оценок — к формированию индикаторного отношения. Принципиальных возражений эти характеристики не вызывают, так как базируются на ряде зональности, для построения которого анализируется пространственная закономерность изменения линейных продуктивностей ореола. Неравномерное взвешивание различных элементов обычно достигается с помощью метода главных компонент, который начинает использоваться все шире.

**Методы реализации основных операций математического описания
геохимических данных**

Операция	Возможные методы реализации	Необходимые априорные данные
Полосовая фильтрация: а) выделение регионального фона	Высокочастотная фильтрация	Корреляционная функция или спектр полей локальных аномалий
	Глобальное сглаживание «большим окном»	Размеры макронеоднородностей регионального масштаба
	Линейная аппроксимация	—
	Переход к модели поля приращений	—
	Аппроксимация регионального фона ступенчатой функцией, постоянной в пределах каждой разновидности пород	Среднефоновые содержания всех элементов во всех разновидностях пород исследуемой территории
б) вычитание регионального фона	Вычитание регионального фона	То же
в) вычитание ошибок опробования, обработки и измерений	Низкочастотная фильтрация	Корреляционная функция или спектр шумовой составляющей
	Сглаживание «небольшим окном»	Размеры макронеоднородностей локального масштаба
	Аналитическая аппроксимация: полигауссовская, полиномиальная для логарифмов содержаний, полиномами Чебышева и др.	Размеры макронеоднородностей локального масштаба
Оценка типоморфного комплекса элементов	Метод главных компонент	—
	Логико-статистические алгоритмы фиксации элементов с конкордатным и антиконкордатным поведением в пространстве	Интервал корреляции шумов

Операция	Возможные методы реализации	Необходимые априорные данные
	Мажоритарный ряд Зубова	—
	Мультипликация заданного набора элементов	Известен тип оруденения
	Построение индикаторного отношения с помощью ряда зональности	То же
Аналитическая аппроксимация закономерностей	Полигауссовская поверхность для геохимического поля регионов	—
	Кривая Гаусса для линейных разрезов ореола гидротермального генезиса (в крупном масштабе)	—
	Экспоненциальная кривая для линейных разрезов ореола осадочного генезиса (в крупном масштабе)	—
	Линейное приближение для вертикальных разрезов в пределах надрудных зон	—

Что касается аналитических аппроксимаций геохимического поля, то распространение в практике имеют в основном полиномиальные тренды. Они обычно не допускают экстраполяции за пределы исследованных территорий, что можно объяснить их искусственностью, не отвечающей физической природе исследуемых явлений. Мы же считаем более правильным строить аппроксимации геохимического поля с помощью экспоненциальных (полигауссовских) поверхностей, что предопределяется термодинамическими законами образования рудных тел и их ореолов. Для описания закономерностей в вертикальной плоскости чаще всего используются линейные аппроксимации в пределах надрудных зон ореола, что вполне оправдывается простотой прогнозных оценок и отсутствием более точной информации.

Естественно, что любой способ описания экспериментального

материала должен предусматривать возможности дальнейшей классификации геологических объектов по системе признаков, предлагаемых для описания объекта. Схемы классификации в геохимических исследованиях применяются довольно широко, что объясняется характером поисковых задач и требованиями к прогнозным оценкам. Однако используемые процедуры выбора информативных признаков пока слишком формальны, так что трудно ожидать больших успехов от развития этого направления. Предлагаемая нами схема описания аномалий посредством аналитических функций пространственных координат требует использования (и развития) систем классификаций, построенных на процедурах сравнения и идентификации функций.

Выделение в геохимическом поле аномалий, в пределах которых распределение концентраций комплекса элементов можно аппроксимировать функцией Гаусса, совмещает две процедуры: обнаружение участков с аномальными концентрациями некоторых элементов и опознание участка, на котором происходили какие-то эндогенные процессы обогащения первичных пород. В связи с этим намечаются три преимущества в предлагаемом способе описания геохимического поля.

Во-первых, гауссовское (или иное экспоненциальное) распределение концентраций в пределах аномалии можно рассматривать как проявление необходимого (хотя еще недостаточного) условия локализации оруденения.

Во-вторых, аналитическое описание геохимического поля дает принципиальную возможность обобщенного математического описания околорудного пространства месторождений определенного генезиса.

В-третьих, неудовлетворительная эффективность статистических систем классификации геологических объектов по исходным геохимическим данным требует решительного шага в область использования новых (пусть, более сложных) математических категорий для информативных признаков. В свете этих требований только от функции нескольких переменных можно ждать гомоморфного отображения пространственных закономерностей в геохимическом поле.

2. БЛОК-СХЕМА АЛГОРИТМА МАТЕМАТИЧЕСКОЙ ОБРАБОТКИ ГЕОХИМИЧЕСКИХ ДАННЫХ НА ЭВМ ПРИ ОПИСАНИИ ИССЛЕДУЕМОГО ГЕОХИМИЧЕСКОГО ПОЛЯ

На рис. 20 приведена блок-схема алгоритма обработки первичных геохимических данных в качестве примера возможной методики математического описания исследуемого объекта при решении поисковых задач. Все основные операции предопределены теми принципами построения методики обработки геохимической информации, о которых говорилось выше.

Выделение детерминированной составляющей геохимического поля проводится методами линейной фильтрации. Прежде всего вычисляются оценки параметров фона, минимально-аномальные

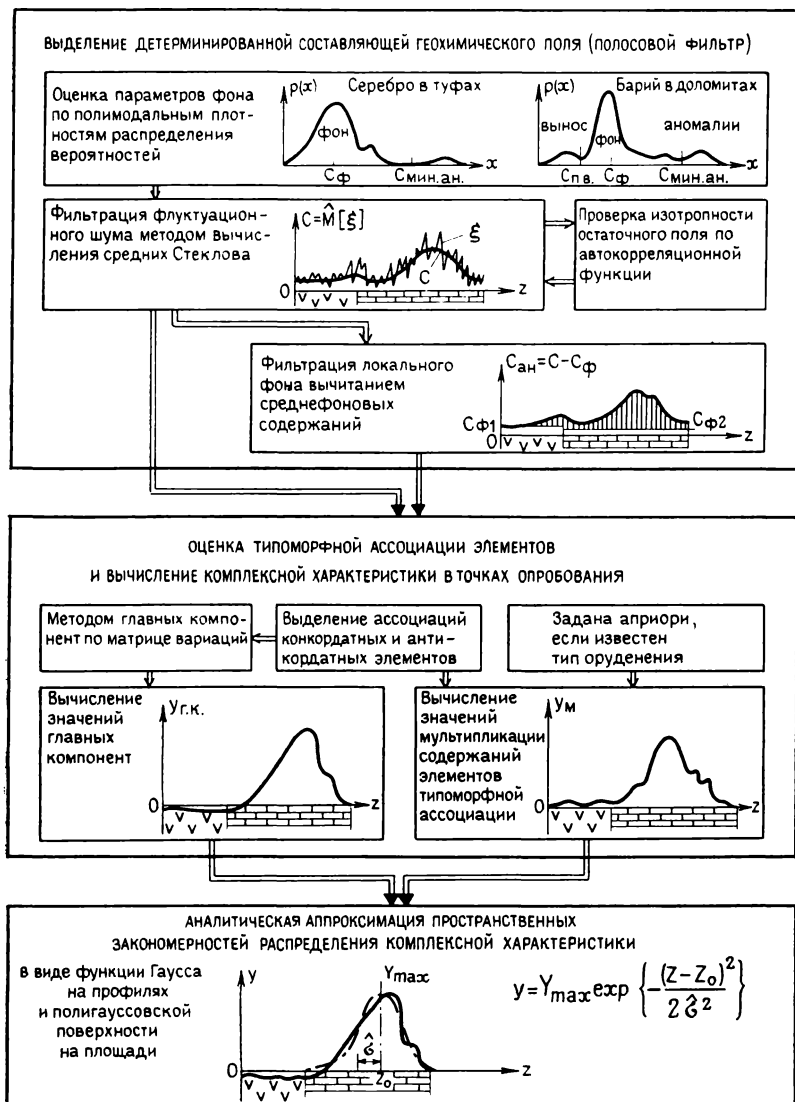


Рис. 20. Блок-схема алгоритма математической обработки первичной геохимической информации

содержания и пороги зон выноса для всех элементов во всех разновидностях пород по имеющемуся геохимическому материалу методом анализа полимодальных оценок плотностей распре-

деления вероятностей содержаний, вычисленных в соответствии с (IV.1) (см. рис. 9) *.

Низкочастотная фильтрация геохимического поля, исключая флуктуационные шумы, осуществляется посредством вычисления средних Стеклова с весовой функцией (V.4) **. Критерием для определения параметров фильтрации (длины «окна» сглаживания $2L$) служит вид автокорреляционной функции флуктуационной (отфильтровываемой, остаточной) составляющей геохимического поля, приближающийся к δ -функции при правильных параметрах фильтрации ***. При обработке результатов химического анализа исследуются автокорреляционные свойства аддитивного шума, а при использовании результатов спектрального анализа — свойства мультипликативного шума (см. рис. 11). Кроме автокорреляционных свойств шума при правильных параметрах фильтрации должна выполняться статистическая гипотеза равенства математического ожидания шума нулю для аддитивной модели и единице для мультипликативной модели.

При крупномасштабных исследованиях исключение регионального фона сведено к исключению влияния разновидностей пород методом вычитания среднефоновых содержаний **** Эта операция эквивалентна аппроксимации поля локального фона $C_F(Z)$ в (IV.15) ступенчатой функцией, сохраняющей постоянное значение в пределах каждой породы (вместо линейной функции, изображенной на рис. 12). При среднемасштабных исследованиях эта операция опускается.

Для оценки типоморфной ассоциации элементов используется метод главных компонент, анализирующий матрицу вариаций (V.24) в качестве матрицы рассеяния ***** Процедура вычисления собственных векторов и собственных значений заданной матрицы методов Якоби заимствована у Е. М. Самегон (1967). Дальнейшие исследования в этом случае ведутся над полем значений главных компонент, т. е. когда в каждой точке опробования задаются (вычисляются) значения основных комплексных главных компонент (обычно одной или двух-трех).

Выбор основных (интерпретируемых) главных компонент из числа автоматически вычисляемых при среднемасштабных поисках, когда не известен тип искомого оруденения, проводится по результатам операции выделения ассоциаций конкордатных

* Программа Л. А. Верховской DENSITY (Верховская и др., 1980).

** Программа И. А. Якшиной SGLAD для линейно упорядоченных данных по профилю или скважине и программа А. М. Рониной GLASS для поля на площади (Верховская и др., 1980).

*** Программа А. М. Рониной CORAN (Верховская и др., 1980).

**** Программа Л. А. Верховской NORMIR (Верховская и др., 1980).

***** Программа Л. А. Верховской COMPONENT (Верховская и др., 1980).

и антикордатных элементов*. Процедура вычислений состоит в следующем. В каждой точке опробования выделяется набор элементов, для которых содержание (точнее, величина детерминированной составляющей, вычисленная на предыдущем этапе) превышает минимально-аномальное значение или ниже порога зон выноса. Соседние в пространстве пробы с близкими наборами аномальных элементов объединяются в группу проб. Наиболее контрастные и достаточно распространенные на исследуемой территории наборы аномальных элементов идентифицируются потенциально как качественные оценки типоморфных ассоциаций. Количественная оценка типоморфной ассоциации выбирается из числа вычисленных главных компонент по критерию близости комплекса ведущих элементов в главной компоненте (с весовыми коэффициентами, превышающими 0,1) одному из наборов аномальных элементов, проявленных на территории.

Другая количественная оценка выделенным ассоциациям аномальных элементов может быть задана в виде суммы или произведения содержаний с равными весовыми коэффициентами для всех элементов ассоциации. Последняя оценка широко распространена под названием мультипликации**. Набор элементов для ее вычисления обычно задается априори, что вполне оправдано при поисках новых рудных тел на флангах изученных месторождений.

В роли аналитического описания локальных аномалий в пространстве земных координат используется функция Гаусса. Для данных опробования профилей и скважин оцениваются в каждой аномалии максимальное значение и параметр затухания экспоненты по формуле (V.5)***. Для поля на площади следует строить полигауссовскую аппроксимацию по алгоритму Э. С. Кубанейшвили (1975) (см. раздел 1 главы V).

При решении задач среднемасштабных поисков предлагаемый алгоритм заканчивается фиксацией местоположения максимумов полигауссовской поверхности, аппроксимирующей пространственное распределение комплексной информативной характеристики исследуемого геохимического поля. Преимущества данного подхода заключаются в том, что распределение концентраций в пространстве по закону Гаусса, восстанавливаемое методами аппроксимации, несет информацию о возможной рудогенности аномалий, что и является целью поисковых работ. Хотя следует еще раз подчеркнуть, что выделяемое свойство аномалий представляется необходимым условием рудогенности,

* Программа Л. А. Верховской PROFIL для линейно упорядоченных данных по профилю или скважине (Верховская и др., 1980) и программа А. М. Ронинной SQUARE для поля на площади.

** Программа Л. А. Верховской MULTIPLY (Верховская и др., 1980).

*** Программа Л. А. Верховской GAUSS.

но еще пока недостаточным. Оконтуриваемые аномалии с гауссовским распределением концентраций в пространстве можно интерпретировать как перспективные для дальнейших более детальных поисковых работ.

При решении задач крупномасштабных поисков предлагаемый алгоритм позволяет сформировать эталон описания околорудного пространства известного месторождения, в чем, собственно, и состоит этап обучения при построении математических классификаторов. При наличии экспериментальных данных можно построить не только эталон околорудного пространства, но и эталон зоны рассеянной минерализации.

В качестве эталона запоминается следующая информация:

- 1) аналитический вид информативной характеристики, представляющий собой функцию содержаний элементов типоморфной ассоциации;

- 2) аналитический вид пространственного распределения типоморфного комплекса на поверхности и в разрезе по вертикали (в виде функций Гаусса) с численными оценками параметров аналитической функции;

- 3) оценка вероятности проявления на исследуемых площадях оруденения данного типа.

Что касается определения вероятности проявления оруденения данного типа, то пока единственной возможностью ее оценки представляется вычисление средней частоты встречаемости рассматриваемого типа оруденения среди известных месторождений и рудопроявлений на единице площади региона.

На собственно поисковом этапе при ведении крупномасштабных работ на флангах известных месторождений выработанный эталон околорудного пространства может быть использован в качестве аналитического вида заданного сигнала в алгоритме обнаружения сигнала в шуме (см. раздел 4 главы IV). Наличие оценки вероятности проявления искомого оруденения на исследуемых площадях позволяет уточнить величину пороговой константы в формуле (IV.19).

При наличии глубинных геохимических данных (например, по керну поисково-оценочных скважин) появляется возможность приблизительно оценивать глубину залегания и масштабы предполагаемого оруденения по формулам (V.6).

В тех случаях, когда в пределах рудного поля выработано несколько эталонов, обработка поисковой геохимической информации на собственно поисковом этапе состоит из двух процедур. Сначала проводится гауссовская аппроксимация выделенного (профильтрованного) пространственного распределения искомой комплексной информативной характеристики по алгоритму, представленному на рис. 20. Затем проводится классификация выделенных гауссовских аномалий. Общая схема построения классификаторов при описываемом способе задания классов, известная под названием процедур «распознавания обра-

зов», разработана в специальной литературе достаточно полно. Важнейшие принципы таких построений приведены нами в разделе 2 главы V.

Основное отличие предлагаемого алгоритма от широко распространенных в геологии классификаторов состоит в том, что мы ведем опознавание рудогенных аномалий не по обобщенным статистическим параметрам геохимических данных, а по функциям пространственного распределения комплексных характеристик. Процедуры сравнения экспериментальных данных с эталонами месторождений проводятся в этом случае посредством вычисления мер близости функций. Процедуры такого рода подробно разработаны в монографии В. Н. Бондаренко (1978).

Ниже приведены примеры обработки первичной геохимической информации с реальных геологических объектов в соответствии с блок-схемой алгоритма, представленного на рис. 20.

3. ПРИМЕРЫ МАТЕМАТИЧЕСКОГО ОПИСАНИЯ ГЕОХИМИЧЕСКИХ ПОЛЕЙ

Пример 1. Создание эталона околорудного пространства по данным геологоразведочных работ на изученном месторождении и поиск в условиях горного отвода

Медноколчеданные месторождения исследуемого рудного поля приурочены к вулканогенным толщам девона, перекрытым несогласно залегающими юрскими песчаниками значительной мощности. По масштабам оруденения рудное поле является средним. Руды комплексные; извлекаются Cu, Zn, Ag, Au и S на серную кислоту; поставлен вопрос о возможности извлечения Co и некоторых рассеянных элементов.

Геохимическая специфика юрских отложений, перекрывающих рудовмещающий комплекс девонских пород и выходящих на поверхность, в районе рудного поля почти не изучена. Поэтому все поисковые геохимические исследования ведутся по керну поисково-оценочных скважин, добурившихся до девонских пород.

На рис. 21 приведен разрез одного из изученных месторождений данного рудного поля. Геохимические исследования девонских пород велись по результатам спектрального анализа керна разведочных скважин на следующий набор 20 элементов: Sr, Ba, Mn, Cr, V, Ni, Co, Cu, Ag, Zn, Pb, Sn, Mo, Ga, Sc, Y, Yb, Zr, Nb, В.

Параметры фона вычислялись по статистическим данным 1545 проб из 34 скважин с различных участков рудного поля в соответствии с методикой, изложенной в разделе 1 главы V. Содержания всех 20 исследуемых элементов в трех скважинах разреза сглаживались в соответствии с методом вычисления

средних Стеклова (V.4). Параметр сглаживания $2L$ задавался так, чтобы включались в интервал усреднения нечетные числа проб (3, 5, 7 и т. д.). Для исследуемых материалов, где средняя длина пробы в керне скважин равна 5 м, интервалы $2L$ в алгоритме сглаживания задавались соответственно равными 15 м, 25 м, 35 м и т. д.

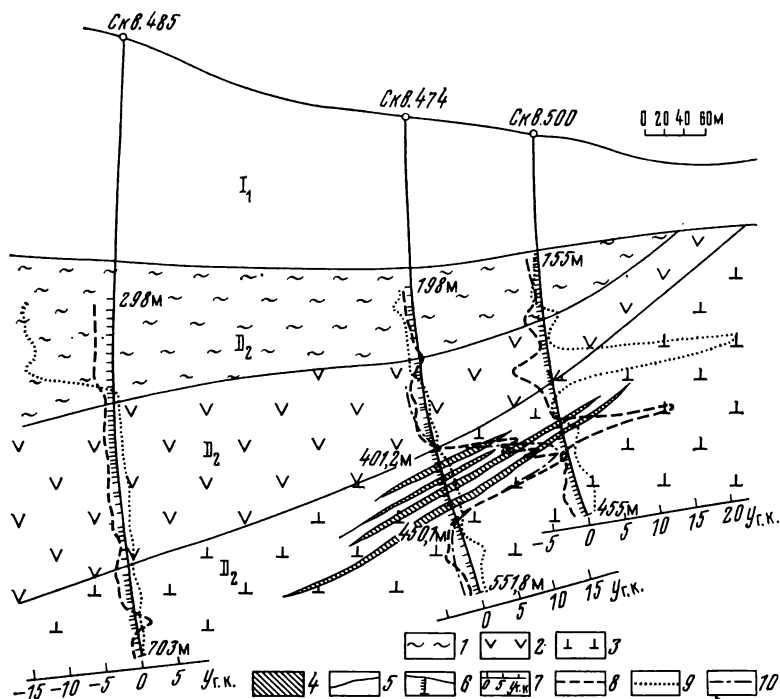


Рис. 21. Эталонный разрез изученного месторождения.

1 — филлиты; 2 — туфы кислого и среднего состава; 3 — липариты; 4 — руда; 5 — геологические границы; 6 — интервалы опробования в скважине; 7 — шкала измерения значений главных компонент $y_i (i=1,2)$; 8 — значения первой главной компоненты; 9 — значения второй главной компоненты; 10 — аналитическая аппроксимация функцией Гаусса

Критерием правильного сглаживания служили параметры автокорреляционной функции мультипликативного шума (см. рис. 11), является

$$\psi(Z) = 1 + \frac{\xi(Z) - \hat{C}(Z)}{\hat{C}(Z)}.$$

Для мультипликативного шума, содержащегося в результатах спектрального анализа концентраций каждого элемента, проверялись две гипотезы: равенство математического ожида-

ния мультипликативного шума единице и согласие вида автокорреляционной функции шума с δ -функцией. На рис. 22 приведены автокорреляционные функции мультипликативного шума для содержаний меди и марганца, вычисленные по данным 154 проб керна скв. 500 на интервале опробования 730 м.

В соответствии с принятыми критериями при 5-процентном уровне значимости была принята гипотеза о независимости шу-

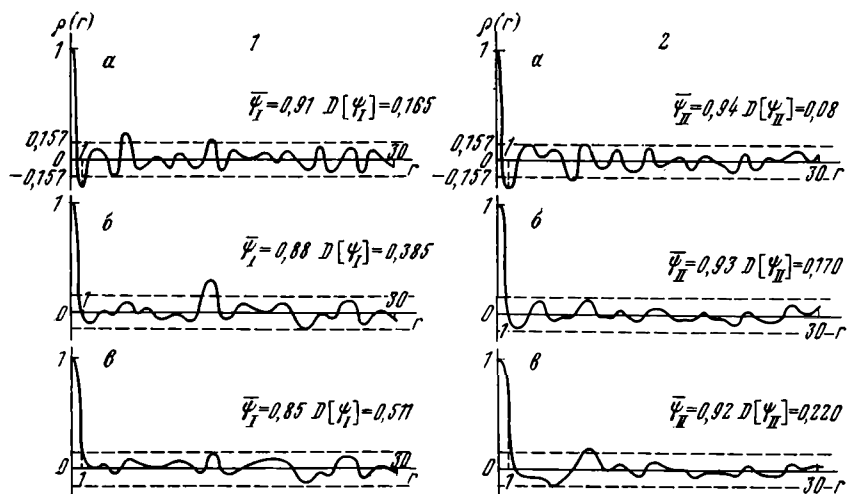


Рис. 22. Автокорреляционные функции мультипликативного шума в результатах спектрального анализа меди (1) и марганца (2) в керне скв. 500. Единица измерения аргумента — 5 м; значения параметров сглаживания $2L$: а — 15 м, б — 35 м, в — 55 м

ма от координат пространства при параметрах сглаживания результатов спектрального анализа $2L=55$ м для меди и $2L=35$ м для марганца (см. графики 1, в и 2, б соответственно). На рис. 22 легко заметить, что при недостаточном усреднении экспериментальных данных наблюдается значимая отрицательная корреляция соседних проб (см. $\rho(r)$ на графиках 1, а и 2, а), а при излишнем усреднении — положительная коррелированность соседних проб (см. $\rho(r)$ на графике 2, в), обусловленная включением в остаточную составляющую $\psi(Z)$ регулярных свойств детерминированной составляющей.

После нормировки сглаженных содержаний вычитанием среднефоновых содержаний (т. е. по результатам полосовой фильтрации) вычислялись главные компоненты по матрице вариаций. Первая главная компонента, включающая в себя 29%

от суммарной вариации 20 элементов, может быть интерпретирована как «рудная»:

$$y_I = 0,60 \text{ Ag} + 0,57 \text{ Pb} + 0,40 \text{ Cu} + 0,30 \text{ Zn} + 0,20 \text{ Co} + 0,11 \text{ Sn}$$

(элементы с весовыми коэффициентами меньше 0,1 не приводятся для наглядности).

Значения первой главной компоненты во всех трех скважинах нанесены на рис. 21. Для данных центральной скв. 474, пересекающей рудное тело, проведена аналитическая аппроксимация функцией Гаусса:

$$\hat{y}_I = -2 + Y_{\max} \exp \left\{ -\frac{(h - h_0)^2}{2\hat{\sigma}^2} \right\}, \quad (\text{VI.1})$$

где $Y_{\max} = 18$; $h_0 = 424$ м; $\hat{\sigma} = 21$ м

(параметр $\hat{\sigma}$ оценивался согласно формуле (V.5)).

Вторая главная компонента, включающая в себя 16% от суммарной вариации 20 элементов, имеет следующий вид:

$$y_{II} = 0,59 \text{ Ba} - 0,51 \text{ Cr} - 0,44 \text{ Ni} - 0,36 \text{ Sr} - 0,18 \text{ Co}.$$

Как видно из анализа пространственного распределения значений второй компоненты, последняя позволяет различать верхнерудные и подрудные зоны по падению рудного тела, а именно: классическое представление геохимии об обогащении надрудных зон барием нашло свое отражение в предлагаемом математическом описании ореольного пространства, заключающееся в положительной гауссовской аномалии второй главной компоненты в соответствующей зоне ореола.

Область больших отрицательных значений второй главной компоненты, эквивалентная конкордатным аномалиям Sr, Cr, Ni, Co, отмечается в прослое филлитов, перекрывающих подрудные толщи вулканогенных пород. Эту отрицательную аномалию второй главной компоненты нельзя считать «литологической», так как, во-первых, фильтрация локального фона пород проведена и, во-вторых, аномальны не все филлиты, а лишь перекрывающие подрудные толщи.

Итак, проиллюстрируем возможную методику записи эталона ореольного пространства (в практической деятельности следует отрабатывать эталон, естественно, не по одному разрезу, как это мы сделали для простоты демонстрации):

1) типоморфная ассоциация элементов медноколчеданного оруденения для исследуемого рудного поля:

$$y_I = 0,60 \text{ Ag} + 0,57 \text{ Pb} + 0,40 \text{ Cu} + 0,30 \text{ Zn} + 0,20 \text{ Co} + \\ + 0,11 \text{ Sn}; \quad (\text{VI.2})$$

2) функция пространственного распределения типоморфной ассоциации в вертикальном разрезе (аргумент — глубина h):

$$\hat{y}_I = -2 + Y_{\max} \exp \left\{ -\frac{(h - h_0)^2}{2\sigma^2} \right\}, \quad (\text{VI.3})$$

где $\hat{\sigma} = 21$ м;

Таблица 5

Вероятность подсечения руды скважиной в зависимости от значений «зональной» главной компоненты

Значения y_{II} в филлитах и туфах	Вероятность появления ниже по скважине (в липаритах)		
	рудного тела	верхне-рудной зоны ореола	нижне-рудной зоны ореола
Зона положительных значений, допускающая гауссовскую аппроксимацию значений y_{II}	0	1	0
$-1 \leq y_{II} \leq +1$:			
а) зона повышенных значений типоморфной ассоциации вскрыта	1	0	0
б) зона повышенных значений типоморфной ассоциации не вскрыта	0,5	0	0,5
Зона больших отрицательных значений в филлитах ($y_{II} < -1$)	0	0	1

3) ориентировочная оценка вероятности подсечения руды скважиной (табл. 5) в соответствии со значениями специальной «зональной» ассоциации, позволяющей различать верхнерудные и подрудные зоны ореола:

$$y_{II} = 0,59 \text{ Ba} - 0,51 \text{ Cr} - 0,44 \text{ Ni} - 0,36 \text{ Sr} - 0,18 \text{ Co}. \quad (\text{VI.4})$$

Собственно поиск новых рудных тел на флангах изученного месторождения подразумевает, во-первых, проведение вычислений, аналогичных рассмотренным по блок-схеме (см. рис. 20), и, во-вторых, проведение классификации новой ситуации в соответствии с имеющимися эталонами (см. разделы 1 и 2 данной главы).

Для демонстрации возможностей применения полученного выше эталонного описания ореольного пространства в вертикальных разрезах рассмотрим в качестве поисковой информации данные по другому разрезу исследуемого месторождения (рис. 23).

По нормированным и сглаженным содержаниям тех же 20 элементов (т. е. по их детерминированным составляющим)

в новых трех скважинах вычисляются функции (VI.2) и (VI.4) в каждой пробе.

Пространственные соотношения рассматриваемых комплексных характеристик подтверждают информативность признаков, выбранных при создании эталона. Руда в этом разрезе богаче: $Y_{\max} = 53$.

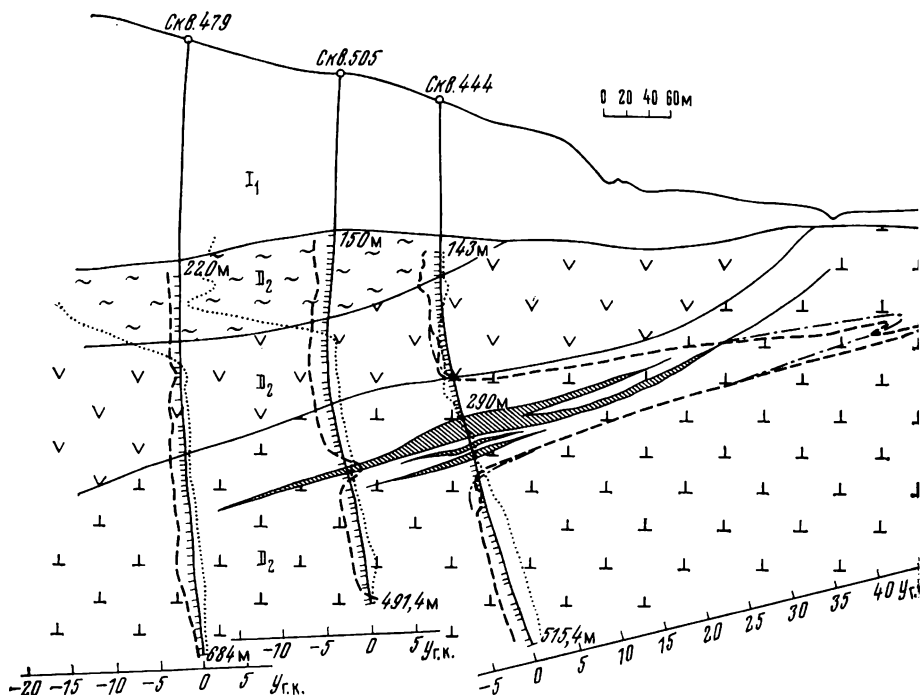


Рис. 23. Экзаменационный разрез. Обозначения см. на рис. 21

Предположим, что скв. 444 пробурена только до глубины 290 м. Вскрытая зона повышенных значений y_1 и статистически нулевые значения y_{11} позволяют в соответствии с табл. 5, использовать эталонную запись (VI.3) пространственной аппроксимации типоморфной ассоциации y_1 в околорудном пространстве ($\hat{\sigma} = 21$ м). Тогда ориентировочная глубина залегания $\hat{h}_0$ центральных частей «предполагаемого» рудного тела может быть вычислена по формуле (V.6). Возьмем для этого два измерения по скв. 444: $h_1 = 266$ м, $y_1(h_1) = 1,1$; $h_2 = 290$ м, $y_1(h_2) = 25,9$. Тогда

$$\hat{h}_0 = \frac{\hat{\sigma}^2}{h_2 - h_1} \{ \ln [2 + y_1(h_2)] - \ln [2 + y_1(h_1)] \} + \frac{1}{2} (h_2 + h_1) = 318 \text{ м.}$$

Основной недостаток приведенного примера заключается в том, что ореолы типоморфной ассоциации элементов вокруг руды слишком узкие. В таких ситуациях следует искать еще дополнительные поисковые признаки помимо указанных (например, в рассматриваемом случае изучать геохимическую зональность юрских отложений).

Напомним еще раз, что цель данной книги — показать информативность математического описания ореольного пространства с помощью функций пространственных координат и найти формы определения последних. Продемонстрированные вычисления на этапе собственно поиска ни в коей мере не исчерпывают всех процедур классификации, а лишь намечают принципиальные пути их возможного конструирования.

Пример 2. Об оценке типоморфной ассоциации элементов по данным опробования поверхности над слепым рудным телом

На рис. 24 приведен поперечный разрез через скарновое полиметаллическое месторождение, генетически связанное с позднепалеозойскими тектоническими нарушениями в известняках нижнего карбона. Геохимические исследования велись по результатам спектрального анализа 11 элементов (Ba, Mn, Ni, Co, Cu, Ag, Zn, Pb, Sb, Sn, Mo) как по керну скважин, так и по профилям на поверхности. Рудное тело не эродировано, видимой минерализации на поверхности не отмечено.

По сглаженным и нормированным данным были вычислены главные компоненты по матрице вариаций отдельно для скв. 401, пересекающей рудное тело, и для двух профилей на поверхности над этим же рудным телом.

Первая главная компонента, явно «рудная», по геохимическим данным скв. 401 (объясняющая 47,4% суммарной вариации элементов) имеет следующий вид:

$$y_1 (\text{скв}) = 0,52 \text{ Cu} + 0,48 \text{ Zn} + 0,41 \text{ Co} + 0,39 \text{ Sb} + 0,27 \text{ Pb} + \\ + 0,20 \text{ Ag} + 0,15 \text{ Sn} + 0,13 \text{ Mn} - 0,12 \text{ Ba} - 0,12 \text{ Mo}.$$

Первая главная компонента по геохимическим данным опробования дневной поверхности, объясняющая 39,4% суммарной вариации элементов, отличается от рудной компоненты по скважине формой вхождения бария, что вполне согласуется с общими представлениями о зональности ореолов:

$$y_1 (\text{поверх}) = 0,65 \text{ Pb} + 0,52 \text{ Ba} + 0,29 \text{ Cu} + 0,27 \text{ Ag} + \\ + 0,24 \text{ Zn} + 0,21 \text{ Mn} + 0,11 \text{ Co}.$$

Значения первых главных компонент y_1 (скв.) и y_1 (поверх.) показаны на рис. 24 соответственно вдоль скв. 401 и вдоль од-

ного из исследованных профилей на поверхности, проходящего через представленный разрез.

Косой срез ореола скв. 401 заставляет строить отдельные аппроксимации верхней и нижней частей ореола. Параметры ап-

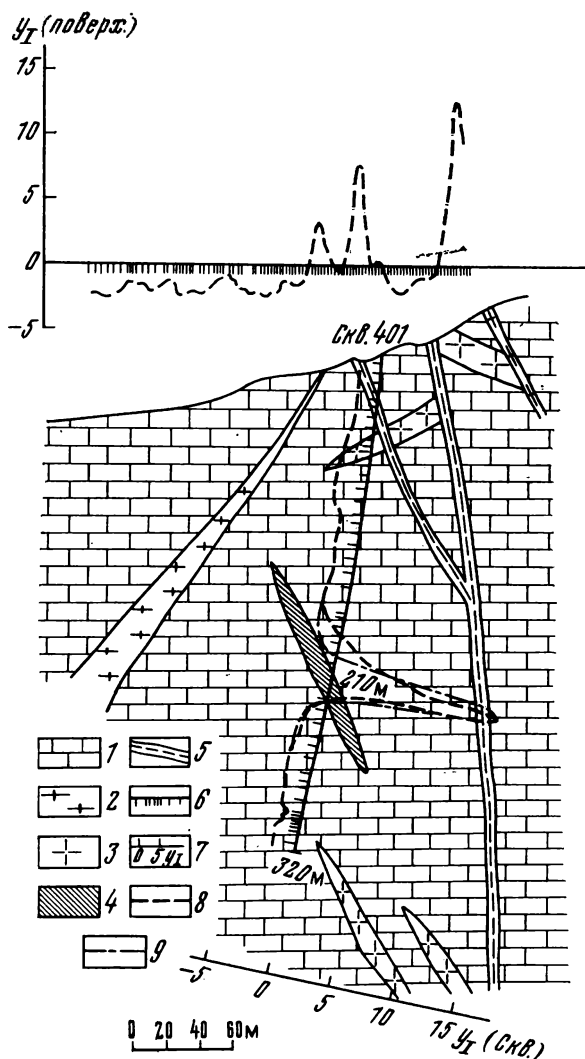


Рис. 24. Разрез, демонстрирующий связь главных компонент на дневной поверхности и в рудном сечении.

1 — известняки; 2 — кварцевые порфиры PZ_3 ; 3 — гранодиорит-порфиры PZ_3 ; 4 — руда; 5 — тектонические нарушения; 6 — геологоразведочные выработки с указанными интервалами опробования; 7 — шкала измерения главных компонент y_I (скв.) и y_I (поверх.); 8 — значения первых главных компонент; 9 — аналитическая аппроксимация функцией Гаусса

проксимирующей функции Гаусса в соответствии с записью (VI. 1) получились следующие:

$$Y_{\max} = 15,5; \hat{\sigma}_{\text{верх}} = 9 \text{ м}; \hat{\sigma}_{\text{нижн}} = 6 \text{ м}.$$

Гауссовские всплески рудной компоненты на поверхности несколько слабее ($Y_{\max} = 5$ и $9,75$; $\hat{\sigma}_{\text{средн}} = 4,5 \text{ м}$) и четко контролируются тектоническими нарушениями.

Приведенные соотношения между главными компонентами, вычисленными по материалам, включающим рудные интервалы, и по материалам опробования поверхности над слепым рудным телом, позволяют считать предлагаемую методику обработки первичных геохимических данных приемлемой для обсчета материалов поисковых работ на дневной поверхности.

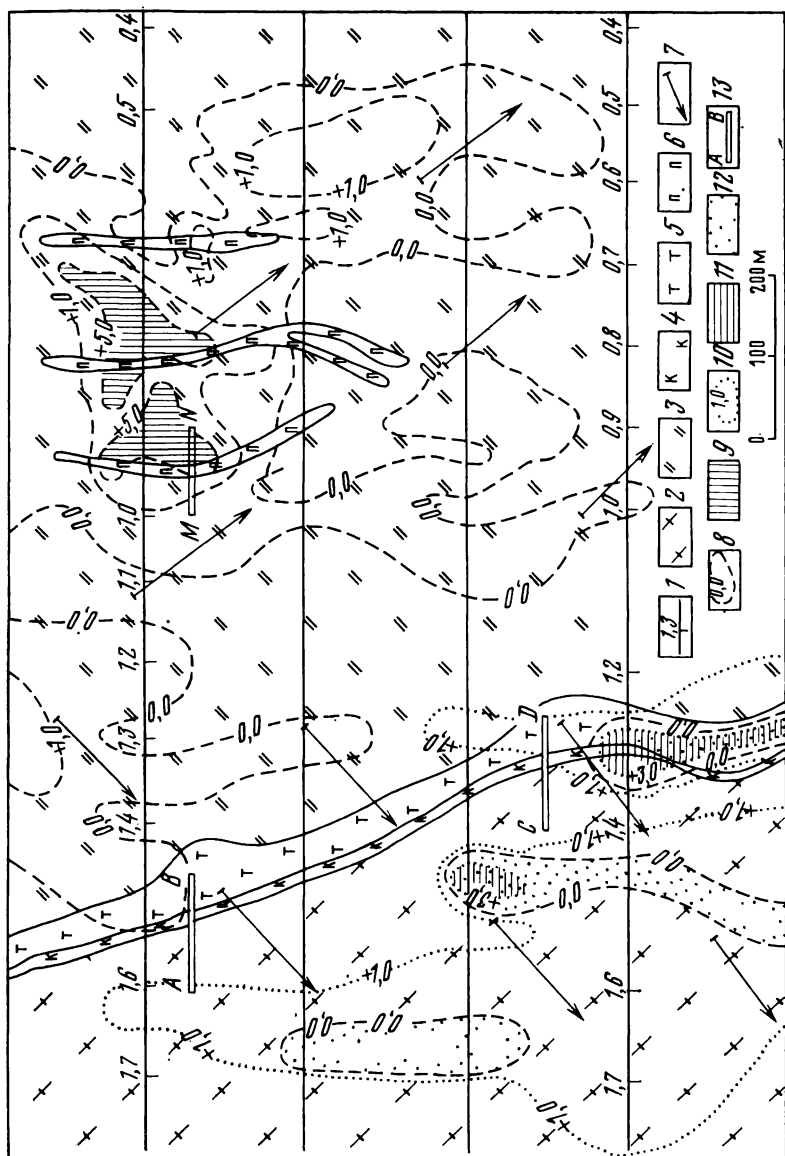
Пример 3. О связи оценок типоморфных ассоциаций по коренным породам и рыхлым отложениям

Описанная схема может найти применение также при поисковых работах различного масштаба, в условиях отсутствия априорной информации о типе оруденения. Ниже рассматриваются результаты обработки данных литохимической съемки масштаба 1 : 10 000 по рыхлым отложениям и данных опробования коренных пород по полотну канав, заложенных для проверки выявленных вторичных ореолов рассеяния.

Исследуемая территория размером $1,5 \times 2$ км сложена породами протерозойского возраста: в западной части гранито-гнейсами, в восточной — сильно метаморфизованными и дислоцированными сланцами и кварцитовидными песчаниками с прослоями доломитизированных известняков. Толща прорывается многочисленными дайками кислого (гранит-порфиры, плагиограниты) и основного (диорит-порфиры) состава.

Участок расположен в сильно расчлененном среднегорье и занимает междуречный массив. Центральная часть междуречья представляет собой широкий и плоский водораздельный гребень, постепенно понижающийся в субмеридиональном направлении. Чехол рыхлых отложений имеет неравномерную мощность — от первых сантиметров на водоразделе до 4—5 м в придолинной части склонов. Локально распространены пятна крупноглыбовых образований.

Литохимическая съемка верхнего горизонта рыхлых отложений проводилась по серии широтных профилей, заложенных вкрест простираения контактовых зон и установленных тектонических нарушений. При детализации исследований на участках аномалий вдоль профилей закладывались канавы, вскрывающие приповерхностную часть коренных пород. В разрезах канав хорошо прослеживаются многочисленные зоны дезинтеграции, фиксированные обломочно-глинистыми образованиями — так называемые «линейные коры выветривания».



Материалы литохимической съемки и результаты опробования коренных пород были обработаны по предложенной схеме. Цель обработки: 1) выявить ведущие типоморфные комплексы и оконтурить зоны минерализации; 2) сопоставить первичные ореолы со вторичными для выявления закономерностей формирования аномалий в рыхлых отложениях.

Обработка данных литохимической съемки. Пробы рыхлых отложений отбирались по равномерной сети профилей. Расстояние между профилями 200 м, шаг опробования 20 м. В центральной части, где предполагались наиболее интенсивные аномалии, сеть опробования сгущена: расстояние между профилями 100 м, шаг опробования 10 м. Общий объем выборки 1450 проб.

Результаты опробования проанализированы спектральным методом на следующие 17 элементов: Ti, Mn, Cr, Ni, Co, V, Mo, Cu, Pb, Zn, Ag, Sn, Zr, Nb, Be, Y, Ba.

После оценки параметров фона проведена обработка по программе PROFIL для выявления ассоциаций конкордатных элементов. Наиболее устойчивыми и часто повторяющимися являются следующие группы элементов: 1) Pb, Zn, Ag; 2) Cu, Ni, Co; 3) Be, Ba.

Затем та же выборка для определения типоморфных ассоциаций обрабатывалась другим способом: по матрице вариаций подсчитывались главные компоненты. Первая главная компонента (включающая 80,2% суммарной вариации элементов) описывается следующим образом:

$$y_I = 0,8 \text{ Pb} + 0,5 \text{ Sn} + 0,3 \text{ Zn} + 0,2 \text{ Ag} + 0,1 \text{ Mn}.$$

Вторая главная компонента включает 5,7% суммарной вариации:

$$y_{II} = 0,99 \text{ Be}.$$

Результаты обоих определений не противоречат друг другу и взаимно дополняют общую картину строения геохимического поля в рыхлых отложениях. На рис. 25 приводится пространственное распределение значений I и II главных компонент. Как видно из рисунка, первая компонента дает интенсивные и протяженные аномалии в северной и гипсометрически наибо-

←

Рис. 25. Распределение значений I и II главных компонент в рыхлых отложениях по территории, опосредованной в масштабе 1 : 10 000.

1 — основные профили и опорные пикеты; 2 — гранито-гнейсы; 3 — метаморфизованная толща осадочных пород (песчаники, углистые сланцы, доломитизированные известняки); 4 — зона окварцевания с признаками редкометальной минерализации; 5—6 — зоны дезинтеграции: 5 — без признаков сульфидной минерализации, 6 — с признаками сульфидной минерализации; 7 — основные направления сноса рыхлых отложений; 8 — изолинии значений I главной компоненты; 9 — эпицентры аномалий I главной компоненты (со значениями более +5,0); 10 — изолинии значений II главной компоненты; 11 — эпицентры аномалий II главной компоненты (со значениями более +3,0); 12 — участки совпадения аномалий I и II компонент; 13 — сечения первичных ореолов по полотну канав (см. рис. 26)

лее повышенной части территории. К югу и вниз по склону они ослабевают, становятся прерывистыми; состав их в основном моноэлементный (аномалии цинка). Протяженные аномалии второй компоненты выявлены лишь в западной части территории, где они частично совпадают со слабыми аномалиями первой компоненты (преимущественно цинкового состава).

Все это позволяет предполагать о наличии на участке двух типов оруденения: сульфидного (представленного комплексом Pb, Zn, Ag, Sn) и редкометального (представленного аномалиями бериллия). Происхождение ассоциации Cu, Ni, Co (выделенной при обработке данных по программе PROFIL) представляется неясным в связи со слабой интенсивностью аномалий и неполнотой информации о литогенной основе участка. Опираясь на представления о едином геохимическом ряде зональности, можно предположить, что ассоциация Pb, Zn, Ag характеризует верхнюю и среднюю части рудной зоны, а Cu, Ni, Co — нижнюю (подрудную) часть.

Обработка данных по сечениям первичных ореолов. Результаты опробования полотно канав также были организованы в единый массив для обработки по принятой схеме. Пробы коренных пород проанализированы на более широкий круг элементов: Ti, Mn, Cr, Ni, Co, V, Mo, W, Cu, Pb, Zn, Ag, Sb, Bi, As, Sn, Zr, Nb, Be, Y, La, Ba, P, Li. Общий объем выборки — 630 проб. При обработке по программе PROFIL получены следующие основные ассоциации конкордатных элементов: 1) Pb, Zn, Ag, Sn, Mn; 2) Be, Ba, Bi, W.

Затем вычислялись значения главных компонент по матрице вариаций. Первая главная компонента, характеризующая 38,8% суммарной вариации, имеет следующий вид:

$$y_I = 0,60 \text{ Pb} + 0,49 \text{ Ag} + 0,44 \text{ Zn} + 0,31 \text{ As} + 0,30 \text{ Sn}.$$

Вторая главная компонента характеризует 25,5% суммарной дисперсии:

$$y_{II} = 0,99 \text{ Be} + 0,12 \text{ Bi}.$$

Анализ полученных результатов показывает, что, во-первых, оба варианта дают не противоречащие друг другу результаты и, во-вторых, состав первичных ореолов близок к составу вторичных.

Пространственное распределение значений главных компонент по наиболее характерным профилям показано на рис. 26. Приведенные графики в общем подтверждают высказанное выше предположение о пространственно разобщенных типах минерализации: аномалии II главной компоненты (редкометальной ассоциации) приурочены к зоне дезинтеграции, вытянутой в субмеридиональном направлении вдоль контакта гранито-гнейсов и метаморфизованных осадочных пород. Эти аномалии

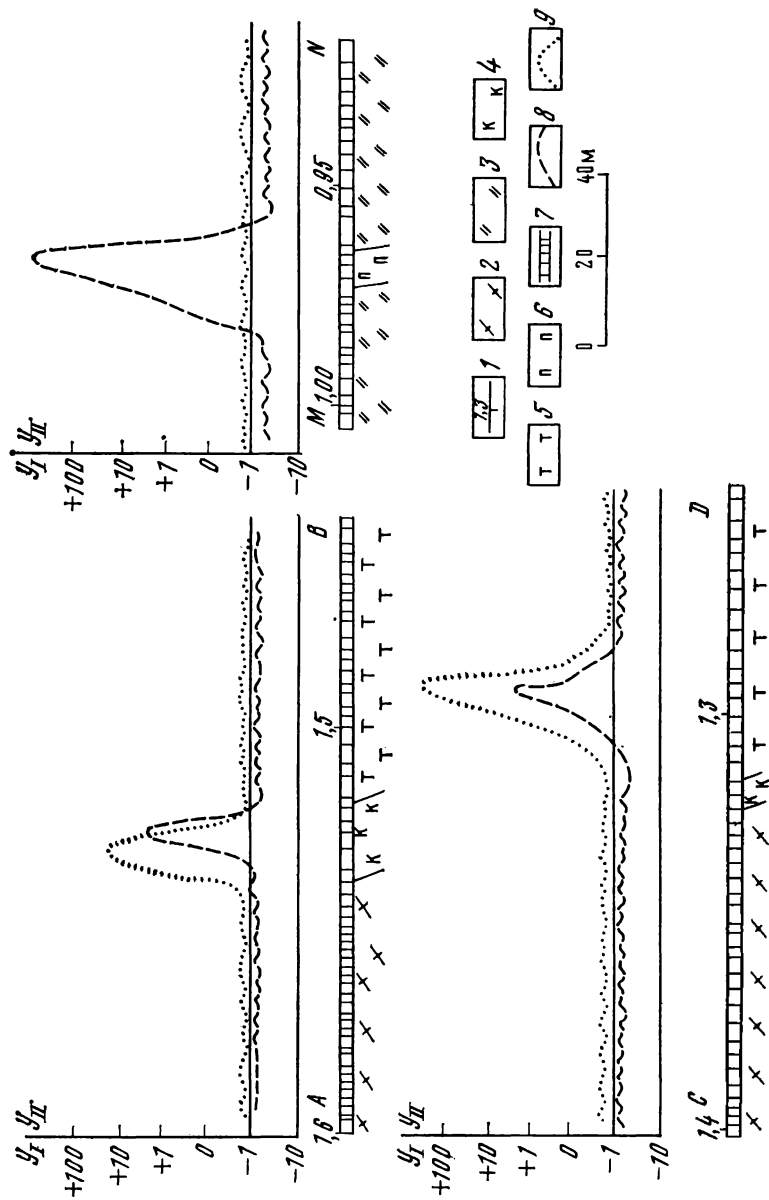


Рис. 26. Распределение значений I и II главных компонент в коренных породах по сечениям A—B, C—D, M—N (см. рис. 25).
 I—6 — см. обозначения на рис. 25; 7 — расположение проб по ложному канав; 8 — значения I главной компоненты y_I ; 9 — значения II главной компоненты y_{II} . Шкала значений на графиках дана в логарифмическом масштабе

сопровождаются слабыми ореолами свинцово-цинковой ассоциации.

В центральной части участка выделяются весьма интенсивные аномалии I главной компоненты (ассоциации сульфидного типа оруденения) при фактически фоновых значениях II компоненты. Эпицентр наиболее яркой аномалии приурочен к сильно оглиненной и лимонитизированной зоне дробления. Однако эти интенсивные аномалии быстро выклиниваются в южном направлении.

Можно отметить, что несмотря на общую расплывчатость контуров вторичных ореолов эпицентры их довольно точно маркируют положение аномалий в коренных породах. Наблюдается смещение вторичных ореолов по отношению к первичным в направлении преобладающего уклона на расстоянии около 200 м.

Пример 4. Опыт оконтуривания перспективных участков по значениям главных компонент

Рассмотрим теперь применение схемы при обработке результатов поисковых работ масштаба 1 : 50 000. Исследуемая территория размером 10×10 км оценивалась с точки зрения выбора перспективных площадей для постановки более детальных работ. Участок в основном сложен вулканогенными породами верхней юры, представленными кварцевыми порфирами, фельзитами, их туфами и лавобрекчиями, а также андезитами, андезит-дацитовыми и диабазовыми порфиритами. В пределах участка преобладают тектонические нарушения северо-восточного и северо-западного направлений. Прослеживается ряд зон гидротермального изменения — окварцевания, каолинизации серицитизации, гематитизации коренных пород.

Рельеф района среднегорный, сильно расчлененный. Хорошая обнаженность территории позволила провести площадное геохимическое опробование коренных пород с поверхности практически по всему участку, за исключением речных долин. Опробование проводилось по неравномерной маршрутной сети.

В пределах участка промышленного оруденения не установлено. Для данной геохимической провинции характерны следующие типы оруденения: 1) редкометалльный и редкометалльно-сульфидный с преобладанием W, Mo, Bi, Be, Sn, V, Cu, Pb, Ag, Zn; 2) сульфидный с преобладанием Sn, Bi, Mo, U, Y, Yb, Ag, Pb, Zn, Cu, As; 3) золото-сульфидный с преобладанием Ag, As, Pb, Sb, Zn, Au.

Геохимические исследования велись по результатам спектрального анализа 24 элементов: Pb, Zn, Ag, Mo, W, Co, Bi, Be, Cu, Ni, U, Ba, V, Cr, Sn, Ce, La, Y, Yb, Zr, Sc, B, As, Sb. Общий объем выборки — 445 проб.

По сглаженным данным вычислены главные компоненты по матрице вариаций. Первая главная компонента, объясняющая 56,5% суммарной вариации элементов:

$$y_I = 0,77 \text{ As} + 0,45 \text{ Sb} + 0,43 \text{ Ag}.$$

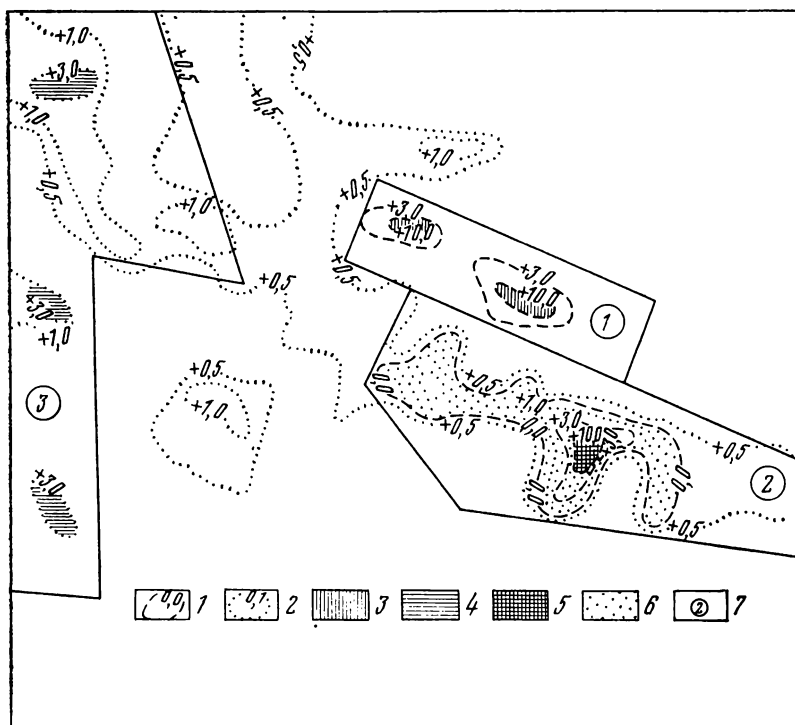


Рис. 27. Распределение значений I и II главных компонент в коренных породах по территории, опосредованной в масштабе 1 : 50 000.

1 — изолинии значений I главной компоненты; 2 — изолинии значений II главной компоненты; 3 — эпицентры аномалий I главной компоненты (со значениями более +10,0); 4 — эпицентры аномалий II главной компоненты (со значениями более +3,0); 5 — участки совпадений эпицентров аномалий I и II компонент; 6 — участки совпадения слабых аномалий I и II компонент; 7 — контуры участков, рекомендованных для постановки детальных работ

Вторая главная компонента, включающая 11,6% суммарной вариации:

$$y_{II} = 0,62 \text{ Ag} + 0,38 \text{ Bi} + 0,25 \text{ Mo} + 0,12 \text{ Be} + 0,11 \text{ U} - \\ - 0,30 \text{ As} - 0,26 \text{ V} - 0,24 \text{ Ba} - 0,22 \text{ Co} - 0,20 \text{ Sb} - 0,14 \text{ Ni}.$$

Обе главные компоненты включают серебро в качестве ведущего элемента, однако по набору остальных элементов они резко различаются. Следует отметить, что такие ведущие элементы I компоненты, как мышьяк и сурьма, во II компоненте присутствуют с отрицательным знаком. Это позволяет рассмат-

ривать значения компонент в качестве характеристик типоморфных ассоциаций различных типов оруденения. Наличие в I главной компоненте серебра указывает на связь соответствующей типоморфной ассоциации с золото-сульфидным типом оруденения. Вторая главная компонента, в которой присутствует бериллий в комплексе с серебром, висмутом, молибденом, характеризует типоморфную ассоциацию редкометалльно-сульфидного типа оруденения.

Пространственное распределение значений I и II главных компонент по площади участка показано на рис. 27. Как видно из рисунка, эпицентры аномалий I главной компоненты наибольшей интенсивности локализуются в центральной и юго-восточной частях территории. Вторая главная компонента также имеет один из эпицентров в юго-восточной части (совмещенный с аномалией I компоненты); однако основные геохимические поля повышенных значений II главной компоненты приурочены к западной части.

Конфигурация аномалий обеих компонент указывает на их связь с нарушениями преимущественно северо-западного простирания.

Сравнительный анализ аномалий I и II главных компонент позволил выделить следующие перспективные площади для постановки более детальных работ: 1) юго-восточную часть (перспективна для детальных поисков золото-сульфидного и редкометалльно-сульфидного оруденения); 2) центральную часть (перспективна для поисков золото-сульфидного типа); 3) северо-западную часть (перспективна для поисков редкометалльно-сульфидного типа). Детализация аномалий, проведенная в процессе последующих работ, подтвердила выявленные закономерности.

Выводы

Современные представления о закономерностях организации околорудного пространства и широкое внедрение электронно-вычислительной техники в практику геологоразведочных работ позволяют в настоящее время разработать более сложные алгоритмы обработки геохимических данных, полнее и точнее использующие информацию об объектах поиска и исследования. Предлагаемая блок-схема алгоритма математической обработки первичной геохимической информации оказывается достаточно гибкой для математического исследования самых разнообразных типов геохимических полей. Применение ее возможно как при выработке эталонов по данным геологоразведочных работ, так и при поисковых работах различного масштаба. Условие применения математических моделей окупается повышением уровня автоматизации и надежности операций обработки геохимических данных при решении поисковых задач.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

При постановке задачи математического моделирования геохимического поля мы исходим из представлений о множественности путей моделирования геологических явлений. Поэтому в данной работе приведено обоснование выбора математической модели, наиболее точно описывающие те характеристики геохимических ореолов рудных месторождений, которые используются при поисковых работах.

Для эффективной обработки информации, полученной при геохимических поисках, математическое описание околорудного пространства предлагается строить на основании определенной понятийной модели, характеризующей участок исследуемой территории как часть геохимического поля геологической оболочки. Наиболее обоснованным представляется конструирование модели на основании системного подхода, когда исследуемый участок рассматривается в виде геосистемы, обладающей определенной структурой. При этом разбиение геосистемы на структурные элементы можно производить с учетом существующих классификаций иерархии природных уровней.

Поскольку геохимические тела относятся к плохо организованным («диффузным») системам, наиболее перспективным является применение для их описания феноменологических статистических моделей.

Характеристика околорудного пространства на основании выбранной модели сводится обычно к математическому описанию пространственной изменчивости геохимических признаков. При этом в зависимости от конкретного материала, наличия и характера априорной информации выбор типа модели сводится обычно к выбору одного из двух путей моделирования геохимических данных: «динамического» (разновидности структурного моделирования процессов минерало-, рудо-, ореолообразования) и «конструктивного» (разновидности феноменологического моделирования ореольного пространства).

В первом случае модель геохимического поля подбирается с учетом физической сущности процессов формирования поля. Во втором изучение конструктивной модели обычно сводится к диагностике ее элементов без обязательного учета природы явления («механизма» становления поля). Эффективность моделирования зависит от удачного подбора структуры модели. Для обоих путей моделирования обязательной предпосылкой является обобщение и схематизация исходного материала. Такая схематизация базируется на двух основных понятиях: «геохимическая ассоциация» (комплекс типоморфных элементов) и «геохимическое тело» (условное название для структурно неде-

лимых участков геохимического поля, характеризующихся определенной индивидуальностью химического состава). При обработке геохимической информации в поисковых целях геохимические ассоциации и тела подразделяются в первую очередь на фоновые (характеризуют состояние рассеяния рудных элементов) и аномальные (характеризуют концентрацию элементов).

Как априорные представления, так и результаты эмпирической обработки данных по множеству месторождений свидетельствуют о наличии закономерной изменчивости геохимического поля околорудного пространства, которая выражается в зональном строении комплексного ореола.

Представления о геохимической зональности являются важной предпосылкой для конструирования математической модели поля. Наличие априорной информации о зональном строении позволяет при выборе математической модели ореола опираться на конструктивную модель аддитивного типа, представляющую геохимическое поле в виде суммы детерминированной и случайной составляющих.

Анализ существующих математических моделей геохимических процессов, основанный на термодинамическом и кинематическом подходах к исследованию миграции химических элементов при фильтрации и диффузии, приводит к представлению об экспоненциальной функции как о наилучшей аналитической записи детерминированной составляющей геохимического поля околорудного пространства в математической модели.

Изучение геохимического поля в рамках феноменологического статистического моделирования, принятого нами в качестве основного направления, требует определения и анализа неоднородного многомерного случайного поля. Существующий математический аппарат позволяет проводить аналитическую аппроксимацию закономерной составляющей поля, что открывает достаточно широкие пути к ее анализу. При этом возможна та или иная степень учета статистических характеристик случайной составляющей поля и априорной информации о классе функций, аппроксимирующих детерминированную составляющую поля.

Как известно, наличие вероятностных характеристик случайной (шумовой) составляющей поля позволяет использовать более точные методы фильтрации при выделении закономерностей исследуемого поля. Практическое отсутствие априорной информации о статистическом описании «шумов» в геохимическом поле, характеризующих ошибки измерений и нестабильность проявления в пространстве закономерностей строения ореола, заставляет исследователей приближаться к решению задачи методом проб и ошибок. Наилучшим средством оптимизации этой операции мы считаем привлечение априорной информации о классе функций, аппроксимирующих пространственные зако-

номерности распределения концентраций химических элементов в околорудном ореоле по данным решения прямых задач геохимии в рамках «динамической» модели.

Аппроксимация детерминированной составляющей геохимического поля полигауссовскими и другими экспоненциальными функциями позволяет, по сути дела, совмещать операцию выделения аномалий и идентификации их как «рудогенных» (т. е. имеющих конфигурацию в пространстве, свойственную околорудным ореолам).

Методика аналитической аппроксимации поля является наиболее подходящим инструментом описания и анализа геохимического поля, так как единственность его реализации и неоднородность вносят определенные методологические трудности в процесс статистического моделирования. Однако привлечение методики аналитических аппроксимаций не снимает задачи выяснения вероятностных характеристик погрешностей измерения и нестабильности закономерностей геохимического поля. Лишь имея эти данные, можно правильно выделять закономерности поля.

Зональное строение ореола может описываться математически двумя способами. Первый способ (в рамках модели непрерывного поля) сводится к выяснению комплексов химических элементов, имеющих конкордатное поведение в пространстве своих детерминированных составляющих. Оценку такого комплекса удастся зачастую получать методом главных компонент. Аналитическая запись закономерной составляющей поля позволяет проводить экстраполяцию поля за пределы исследованного участка, на чем и обосновываются прогнозные построения.

Второй способ (в рамках модели кусочно-однородного поля) сводится к оконтуриванию в пространстве зон проявления различных ассоциаций сонахождения элементов («геохимических тел») и к построению пространственной схемы зональности аномалии. Прогноз в данном случае опирается на диагноз местоположения исследуемого участка поля в схеме зонального строения ореольного пространства месторождений.

Изложенные в книге математические методы описания геохимического поля и вытекающие из них сформулированные нами требования к алгоритмам первичной обработки геохимической информации, задающей исходные признаки описания поля, могут послужить основой для формирования критерия оценки существующих методик обработки геохимических данных. Перечни требований к алгоритмам мы встречаем при исследовании вопросов математизации и других этапов поисковых работ (например, требования к схеме автоматизированного прогнозирования у А. Н. Бугайца, Л. Н. Дуденко, 1976, с. 117). Такого рода подход продиктован, по-видимому, стремлением исследователей к проведению классификации огромного арсенала методов, которые уже используются в настоящее время в геологии.

Проведенный анализ математических методов исследования неоднородных многомерных полей и основных понятийных аспектов моделирования зонального ореольного пространства приводит к выводу о необходимости установления гомоморфизма между геологической (понятийной) и математической моделями по следующим пунктам: 1) пространственная форма ореола, 2) комплексность ореола, 3) статистический характер погрешностей измерения геохимической информации.

Выяснение пространственной формы ореола и учет погрешностей измерений предлагается осуществлять методом полосовой фильтрации геохимического поля. Комплексность ореола может быть описана либо функцией содержаний ассоциации типовых элементов, либо набором элементов, для которых выявлено конкордантное поведение закономерных составляющих в пространстве (полученных после полосовой фильтрации).

Широко распространенные в настоящее время методы анализа геохимического материала с помощью картирования «мультипликаций» и «индикаторных отношений» дают некоторую математическую модель понятию «комплексности ореола» и оставляют вне рамок математического моделирования остальные аспекты понятийной модели. Выяснение пространственных закономерностей и «сглаживание» зашумленных данных проводит геолог вручную при рисовке изолиний (значений мультипликации или индикаторного отношения).

Некоторые попытки использования математических методов при выделении закономерных составляющих поля путем фильтрации «шума» находим в широком распространении тренд-анализа. Однако неадекватность полиномиальных функций природе геохимических полей и нечеткость критерия фильтрации предопределили ограниченную пользу таких построений. Наиболее близки к выполнению выдвинутых нами требований исследования, использующие тренд-анализ главных компонент. Однако и здесь идентификация пространственной формы ореола не осуществлена.

В связи со всем сказанным можно отметить, что методика математической обработки геохимической информации при решении поисковых задач еще требует завершения. Сложность исследуемых геологических объектов является причиной необходимости привлечения и более сложных математических моделей, чем использованные до сих пор. Наличие электронно-вычислительных машин в распоряжении геологов позволяет расширить арсенал применяемых математических методов. И здесь не следует ограничиваться выбором наилучшего метода из числа используемых в геологии алгоритмов и программ. Именно создание методик математической обработки геологической информации, наиболее точно использующих структуру геологических (понятийных) моделей, является достойной целью работы математиков в геологии.

- Абрамович И. И., Груза В. В.* Фациально-формационный анализ магматических комплексов. Л., Недра, 1972.
- Айвзян С. А., Бежаева З. И., Староверов О. В.* Классификация многомерных наблюдений. М., Статистика, 1974.
- Айзерман М. А., Браверман Э. М., Розоноэр А. И.* Метод потенциальных функций в теории обучения машин. М., Наука, 1970.
- Акивис М. А., Гольдберг В. В.* Тензорное исчисление. М., Наука, 1963.
- Алгоритм программы интерполяции и фильтрации/В. И. Аронов, Г. Ф. Кушнир, Б. О. Михайлов и др.* — Экспресс-информация. Серия: Математические методы исследований в геологии. ВИЭМС, 1977, № 12, с. 1—8.
- Алгоритмы автоматической классификации и систематика минералов группы пирохлорамикролита/А. Н. Бугаец, А. А. Дорофеев, А. П. Мазак и др.* — В кн.: Математические методы в геологии. М., Наука, 1968, с. 149—157.
- Андерсон Т.* Введение в многомерный статистический анализ. М., ФИЛ, 1963.
- Андерсон Т.* Статистический анализ временных рядов. М., Мир, 1976.
- Андрющенко А. А., Беляев В. И.* Изучение статистической структуры полей температуры и солености Черного моря применительно к задаче их объективного анализа. — Физика атмосферы и океана, 1972, № 9, с. 1004—1008.
- Анохин В. А.* Моделирование процессов миграции радиоизотопов в ландшафтах. М., Атомиздат, 1974, 143 с.
- Антошин В. А., Рубичев Н. А.* Об одном методе оценки степени нестационарности случайного процесса. — В кн.: Труды II Всесоюзного симпозиума «Методы представления и аппаратный анализ случайных процессов и полей», том 1, Новосибирск, 1969, с. 113—118.
- Арманд Д. Л.* Наука о ландшафте. М., Мысль, 1975.
- Аронов В. И.* Методы математической обработки геологических данных на ЭВМ. М., Недра, 1977.
- Арский Ю. М., Гольдвирт Н. А.* Геолого-математическое обоснование параметров разведочной сети при поисково-оценочных работах. — Экспресс-информация. Серия: Математические методы исследований в геологии. ВИЭМС, 1977, № 1, с. 8—31.
- Ахиезер Н. И.* Лекции по теории аппроксимации. М.—Л., ОГИЗ, 1947.
- Багров Н. А.* Аналитические представления полей. — Труды ЦИПа, вып. 64, 1958, с. 3—25.
- Баранов Э. Н.* Геохимические поиски скрытых колчеданных месторождений по эндогенным ореолам. — Научные собрания ИМГРЭ, вып. 7, М., 1971, с. 3—48.
- Башаринов А. Е., Флейшман Б. С.* Методы статистического последовательного анализа и их приложения. М., Советское радио, 1962.
- Белонин М. Д.* Основные черты эволюции Соколовгорской и Багаевской структур Саратовского Поволжья. — Советская геология, 1964, № 12, с. 90—109.
- Беляев В. И.* Теория сложных геосистем. Киев, Наукова думка, 1978.
- Бендат Дж., Пирсон А.* Измерение и анализ случайных процессов. М., Мир, 1974.
- Беус А. А., Григорян С. В.* Геохимические методы поисков и разведки месторождений твердых полезных ископаемых. М., Недра, 1975.
- Бокс Дж., Дженкинс Г.* Анализ временных рядов. М., Мир, 1974.
- Бондаренко В. Н.* Сравнительный анализ геологических объектов с закономерной изменчивостью свойств. М., Недра, 1978.

Бондаренко В. Н., Кравченко С. М. Статистический метод оценки характера дифференциации базальтоидных комплексов. — В кн.: Применение математических методов в геологии. Алма-Ата, Наука, 1968, с. 27—31.

Бондарик Г. К. Основы теории изменчивости инженерно-геологических свойств пород. М., Недра, 1971.

Боровко Н. Н. Статистический анализ пространственных геологических закономерностей. Л., Недра, 1971.

Ботнев В. Н., Заболотских В. Г. Выделение марковских случайных полей на фоне помех. — Изв. АН СССР, техническая кибернетика, 1973, № 4, с. 167—171.

Бугаец А. Н., Дворниченко Г. К. Об использовании в автоматизированных системах прогнозирования быстрых методов оценки дискретных ортогональных разложений. — В кн.: Тезисы докладов на совещании в Алма-Ате. Проблемы развития АСУ-Геология и применения математических методов в геологии, часть 1. ВИЭМС, 1977, с. 68—70.

Бугаец А. Н., Дубенко Л. Н. Математические методы при прогнозировании месторождений полезных ископаемых. Л., Недра, 1976, 270 с.

Буймов А. Г., Решетников М. Т. Об одной линейной модели изображения. — В кн.: Труды IX Всесоюзного симпозиума. Методы представления и аппаратный анализ случайных процессов и полей, секция IV. Л., ВНИИЭП, 1976, с. 86—88.

Букринский В. А., Коробченко Ю. В. Теоретические основы геометризации месторождений полезных ископаемых. — В кн.: Совершенствование методов маркшейдерских работ и геометризация недр. М., Недра, 1972, с. 220—225.

Быстрые алгоритмы связи преобразований Фурье и Уолша/П. М. Чеголин, В. Н. Пойда, В. С. Кончак и др. — В кн.: Труды IX Всесоюзного симпозиума. Методы представления и аппаратный анализ случайных процессов и полей, секция V. Л., ВНИИЭП, 1976, с. 13—20.

Вайнштейн Л. А., Зубаков В. Д. Выделение сигналов на фоне случайных помех. М., Советское радио, 1960.

Васильев К. К., Захаров Н. Г., Цветов М. А. Точность оценки значений составляющей мультипликативного случайного процесса. — В кн.: Труды X Всесоюзного симпозиума «Методы представления и аппаратный анализ случайных процессов и полей», секция I. Л., ВНИИЭП, 1978, с. 72—77.

Веников В. А. Некоторые методологические вопросы моделирования. — Вопросы философии, 1964, № 11, с. 73—84.

Вернадский В. И. Химическое строение биосферы Земли и ее окружения. М., Наука, 1965.

Верховская Л. А. Использование коэффициентов вариации для выявления аномальных содержаний в геохимических совокупностях. — Экспресс-информация, серия: Математические методы исследований в геологии, ВИЭМС, 1973, № 2, с. 21—33.

Верховская Л. А., Ронина А. М., Якшина И. А. Комплекс программ для обработки на ЭВМ ЕС геологической информации при поисках месторождений рудных полезных ископаемых. — Алгоритмы и программы № 2 (37), ВИЭМС, 1980, 97 с.

Верховская Л. А., Конюхова Т. И. Выявление фоновых и аномальных содержаний элементов с помощью аппроксимации распределения неоднородной совокупности данных. — В кн.: Применение современных математических методов и ЭВМ в области геологии в странах — членах СЭВ. М., ВИЭМС, 1971, с. 16—17.

Виленкин С. Я., Дубенко Т. И. Об оптимальных линейных оценках математического ожидания однородного случайного поля. — Изв. АН СССР, техническая кибернетика, 1971, № 1, с. 134—141.

Виленкин С. Я., Дубенко Т. И. Об оценках математического ожидания случайного поля. — Автоматика и телемеханика, 1970, № 11, с. 69—73.

Вистелиус А. Б. Идеальный гранит и его свойства: вероятностная модель, статистическая идентификация, естественные породы. — В кн.: Доклады советских геологов на XXIV сессии Международного геологического конгресса.

Математические методы в геологии и геологическая информация. М., Наука, 1972, с. 26—37.

Вистелиус А. Б. Проблемы математической геологии. Случайный процесс. — Геология и геофизика, 1963а, № 12, с. 3—10.

Вистелиус А. Б. Фазовая дифференциация палеозойских отложений Среднего Поволжья и Заволжья. Л., АН СССР, 1963б.

Вишнякова Н. Н., Геранин В. А. Современное состояние теории погрешностей статистического корреляционного анализа негауссовских случайных процессов. — В кн.: Труды X Всесоюзного симпозиума «Методы представления и аппаратный анализ случайных процессов и полей», секция I. Л., ВНИИЭП, 1978, с. 20—38.

Воллернер Н. Ф. Некоторые вопросы аппаратного анализа нестационарных случайных процессов. — В кн.: Труды I Всесоюзного симпозиума. Методы представления и аппаратный анализ случайных процессов и полей, т. 2. Новосибирск, 1968, с. 110—115.

Воронин Ю. А., Еганов Э. А. Методологические вопросы применения математических методов в геологии. Новосибирск, Наука, 1974.

Вулих Б. З. Введение в функциональный анализ. М., Наука, 1967, 415 с.
Геология и математика/Ю. А. Воронин, Б. К. Алабин, С. В. Гольдин и др. Новосибирск, Наука, 1967.

Геометризация месторождений полезных ископаемых. Под ред. В. А. Букринского и Ю. В. Коробченко. М., Недра, 1977.

Геохимические методы при поисках эндогенных рудных месторождений (Методические рекомендации). ИМГРЭ, 1974. 215 с.

Геранин В. А. К определению спектра нестационарного случайного процесса. — Акустический журнал, 1971, вып. 3, с. 379—384.

Гинзбург И. И. Опыт разработки теоретических основ геохимических методов поисков. М., Госгеолтехиздат, 1957.

Глушков В. М. Введение в АСУ. Киев, Техника, 1972.

Глушков В. М. Гносеологические основы математизации науки. Киев, Наукова думка, 1965.

Гнеденко Б. В. Курс теории вероятностей. М., ФИЛ, 1961.

Голева Г. А. Эволюция форм миграции элементов-индикаторов рудных месторождений и ее влияние на зональность литохимических ореолов. — В кн.: Научные основы геохимических методов поисков месторождений полезных ископаемых. Апатиты, 1972, с. 228—235.

Голубев В. С., Гариблянц А. А. Гетерогенные процессы геохимической миграции. М., Недра, 1968.

Голубева В. А. Дуализм главных компонент и его использование в геологии. — Экспресс-информация, серия: Математические методы исследований в геологии, 1975, № 10, ВИЭМС, с. 1—11.

Голубева В. А. Применение методов факторного анализа в геологических исследованиях. — Экспресс-информация, серия: Математические методы исследований в геологии. ВИЭМС, № 4, 1976, с. 1—41.

Голубева В. А., Тимофеева Н. В. Использование метода главных компонент для классификации остаточных и переотложенных продуктов коры выветривания. — Экспресс-информация, серия: Математические методы исследований в геологии. ВИЭМС, 1976, № 4, с. 42—51.

Гольцман Ф. М. Статистические алгоритмы восстановления сигналов и полей по их линейным преобразованиям. — Физика Земли, 1973, № 4, с. 24—36.

Голынки И. Н. Изучение закономерностей распределения и концентрации химических элементов магматических пород с помощью многомерного статистического анализа. — В кн.: Научные основы геохимических методов поисков месторождений полезных ископаемых. Апатиты, 1972, с. 98—103.

Голынки И. Н. Анализ линейных парагенезисов микроэлементов в прогнозно-металлогенических исследованиях. — В кн.: Математические методы при прогнозе рудоносности. М., Наука, 1977, с. 90—103.

Гренандер У. Случайные процессы и статистические выводы. М., Инстр. лит., 1961. 167 с.

Григорян С. В., Резников И. Н. О некоторых актуальных вопросах изучения и практического использования первичных ореолов. — В кн.: Литогеохимические методы при поисках скрытого оруденения. ИМГРЭ, 1972, с. 5—7.

Григорян С. В., Рубо Г. Л., Сандомирский С. А. Обработка геохимической информации на ЭВМ типа «Ряд» с применением программы «мульти». — В кн.: Методы обработки цифровой информации при геохимических поисках. ИМГРЭ, 1975, с. 93—100.

Григорян С. В., Туманян В. З. К методике обнаружения и интерпретации геохимических аномалий. — В кн.: Научные основы геохимических методов поисков глубокозалегающих рудных месторождений, ч. 2. Иркутск, 1972, с. 109—113.

Груза В. В. Методологические проблемы геологии. Л., Недра, 1977.

Девдариани А. С. Формальная постановка задач инженерной геологии. — В кн.: Математические методы в инженерной геологии. МГУ, 1968, с. 21—28.

Добровидов А. В. Об одном алгоритме непараметрической оценки случайных многомерных сигналов. — Автоматика и телемеханика, 1971, № 2, с. 88—99.

Добрушин Р. Л. Задание систем случайных величин при помощи условных распределений. — Теория вероятностей и ее применения, вып. 3, 1970, с. 469—497.

Добрушин Р. Л. Описание случайного поля при помощи условных вероятностей и условия его регулярности. — Теория вероятностей и ее применения, вып. 2, 1968, с. 201—229.

Другов Г. М., Карпов И. К., Санин В. П. Предварительная обработка геохимических данных методом кластер-анализа. — Геология и геофизика, 1974, № 1, с. 119—123.

Дубов Р. И. Количественные исследования геохимических полей для поисков рудных месторождений. Новосибирск, Наука, 1974.

Дуда Р., Харт П. Распознавание образов и анализ сцен. М., Мир, 1967. 511 с.

Евдокимова В. Н., Китаев Н. А. Обработка данных геохимических съемок на основе анализа рудных полей. — В кн.: Геохимические поиски рудных месторождений на территории Сибири и Дальнего Востока по вторичным ореолам и потокам рассеяния. Иркутск, 1973, с. 212—225.

Еганов Э. А. О выделении объектов исследований в геологии. — В кн.: Пути познания Земли. М., Наука, 1971, с. 263—272.

Естественные составляющие метеорологических полей/А. В. Мещерская, Л. В. Руховец, М. И. Юдин и др. Л., Гидрометеоиздат, 1970. 199 с.

Железнов Н. А. Некоторые вопросы спектрально-корреляционной теории нестационарных сигналов. — Радиотехника и электроника, 1959, № 3, с. 359.

Жуков Р. А. Системный подход и методологические резервы теоретической геологии. — В кн.: Методы теоретической геологии. Л., Недра. 1978, с. 24—80.

Заездный А. М. Гармонический синтез в радиотехнике и электросвязи. — М.—Л., Госэнергоиздат, 1961.

Зональность гидротермальных месторождений как основа поисков глубокозалегающих месторождений/В. В. Поликарпочкин, Л. В. Таусон, Р. И. Дубов и др. — В кн.: Научные основы геохимических методов поисков глубокозалегающих рудных месторождений, ч. 1. Иркутск, 1970, с. 252—340.

Иванченко В. Г. Математическое описание некоторой модели аппроксимации геологических данных. — Экспресс-информация, серия: Математические методы исследований в геологии. ВИЭМС, 1975, № 1. 18 с.

Инструкция по геохимическим методам поисков месторождений. М., Недра, 1965. 227 с.

Использование статистических характеристик полей концентраций полезных компонентов для решения прикладных задач поисков и разведок рудных месторождений/Э. М. Богусhevский, В. Д. Гуревич, Г. Ф. Рожкова и др. — В кн.: Математические методы при прогнозе рудоносности. М., Наука, 1977, с. 193—215.

Каждан А. Б. Методологические основы разведки полезных ископаемых. М., Недра, 1974.

Калесник С. В. Общие географические закономерности Земли. М., Мысль, 1970. 283 с.

Каллистов П. Л. Изменчивость оруденения и плотность наблюдений при разведке и опробовании. — Советская геология, сб. 53, 1956, с. 118—151.

Калман Р., Бьюси Р. Новые результаты в линейной фильтрации и теории предсказания. — Техническая механика, серия Д, т. 83, 1961, № 1, с. 95—103.

Капков Ю. Н., Квятковский Е. М., Яковлев В. И. Основные принципы составления геохимических карт масштаба 1:50 000. — Зап. ЛГИ, т. 51, вып. 2, 1966, с. 3—10.

Каримов Р. Н., Некрасов В. Ф. Использование метода статистической интерполяции при дискретизации случайного процесса с помехой. — В кн.: Труды VII Всесоюзного симпозиума «Методы представления и аппаратный анализ случайных процессов и полей», секция III. Л., ВНИИЭП, 1975, с. 84—90.

Кнюпов П. С. К вопросу об оценке коэффициентов регрессии случайных полей. — Кибернетика, 1965, № 3, с. 96—99.

Кнюпов П. С. Некоторые замечания о проверке гипотез для случайных полей. — Кибернетика, 1966, № 6, с. 51—52.

Козловский Ф. И. Почвенный индивидуум и методы его определения. — В кн.: Закономерности пространственного варьирования свойств почв и информационно-статистические методы их изучения. М., Наука, 1970, с. 42—59.

Козодой А. К., Рыбачок И. Н., Романова Л. А. Некоторые приемы обработки экспериментальных зависимостей. — Труды Волгоградского научно-исследовательского и проектного института нефтяной промышленности, вып. 20. Волгоград, 1973, с. 29—33.

Колмогоров А. Н. Локальная структура турбулентности в несжимаемой жидкости при очень больших числах Рейнольдса. — ДАН СССР, т. 30, 1941, № 4, с. 299—303.

Коржинский Д. С. Теория метасоматической зональности. М., Наука, 1969.

Косыгин Ю. А., Соловьев В. А. Статистические, динамические и ретроспективные системы в геологических исследованиях. — Изв. АН СССР, серия геол., 1969, № 6, с. 9—17.

Котельников В. А. Теория потенциальной помехоустойчивости. М., Госэнергоиздат, 1956.

Котюк А. Ф., Ольшевский В. В., Цветков Э. И. Методы и аппаратура для анализа характеристик случайных процессов. М., Энергия, 1967, 240 с.

Котюк А. Ф., Цветков Э. И. Спектральный и корреляционный анализ нестационарных случайных процессов. М., Изд-во стандартов, 1970.

Кравченко Н. С., Болотников А. Ф. Оценка геохимической специализации интрузивов по характеру распределения и величине энтропии редких элементов. — В кн.: Геохимические критерии потенциальной рудоносности гранитоидов, ч. 2. Иркутск, 1971, с. 127—133.

Крамбейн У., Грейбилл Ф. Статистические модели в геологии. М., Мир, 1969. 397 с.

Красин В. П., Кузнецов В. П., Чураков Е. П. Восстановление неизвестной плотности вероятностей с помощью полигауссовской модели. — В кн.: Труды IX Всесоюзного симпозиума «Методы представления и аппаратный анализ случайных процессов и полей», секция V. Л., ВНИИЭП, 1976, с. 45—50.

Круть И. В. Исследование оснований теоретической геологии. М., Наука, 1973.

Круть И. В. Введение в общую теорию Земли. Уровни организации геосистем. М., Мысль, 1978.

Кубанейшвили Э. С. Об одном методе представления многоэкстремального случайного процесса. — В кн.: Труды VIII Всесоюзного симпозиума «Методы представления и аппаратный анализ случайных процессов и полей», секция III. Л., ВНИИЭП, 1975, с. 135—138.

Кузнецов Г. Ф. Метод аппроксимации сложных полей и выделение локальных аномалий (двумерный случай). — Геология и геофизика, 1972, № 12, с. 130—133.

Левинсон А. Введение в поисковую геохимию. М., Мир, 1976.

Ли Ц., Джадж Д., Зельнер А. Оценивание параметров марковских моделей по агрегированным временным рядам. М., Статистика, 1977, 221 с.

Ляхович В. В. Геохимия минералов — рудоносность и генезис гранитоидов. — В кн.: Проблемы минерального сырья. М., Наука, 1974, с. 183—198.

Мановцев А. П. Основы теории радиотелеметрии. М., Энергия, 1973.

Математический метод палеотектонического анализа платформенных структур с применением ЭВМ/Г. И. Лохматов, В. Н. Евдокимова, Г. Алаев и др. — Труды Иркутского ун-та, вып. 3, 1969, 157 с.

Матерон Ж. Основы прикладной геостатистики. М., Мир, 1968.

Месарович М., Мако Д., Текахара И. Теория иерархических многоуровневых систем. М., Мир, 1973.

Миллер Р., Кан Дж. Статистический анализ в геологических науках. М., Мир, 1965.

Мирский Г. Я. Аппаратурное определение характеристик случайных процессов. М., Энергия, 1972.

Морозов К. Е. Математическое моделирование в научном познании. М., Мысль, 1969.

Мягков В. Ф. Вопросы теории математической обработки геохимической информации при поисках месторождений. — В кн.: Методы обработки цифровой информации при геохимических поисках. ИМГРЭ, 1975, с. 3—13.

Нарис Б. Эндогенные ореолы рассеяния вокруг сульфидного месторождения Рудтжебекен в районе Адак, Северная Швеция. — В кн.: Геохимические поиски. М., Мир, 1973, с. 196—214.

Налимов В. В. Теория эксперимента. М., Наука, 1971.

Нарымский Э. Л., Сахновский М. Л. Применение метода главных компонент для распознавания геологических объектов. — Вест. Львовского ун-та, Математические методы в геологии, 1973, с. 79—81.

Никитин А. А., Тархов А. Г., Михайлов И. А. Об оценке надежности выделения слабых геофизических аномалий способом обратных вероятностей. — В кн.: Разведочная геофизика, вып. 15. М., Недра, 1966, с. 88—93.

О применении метода главных компонент для характеристики аномалий при геологических поисках/В. Н. Бондаренко, Л. А. Верховская, Е. П. Сорокина и др. — Советская геология, 1975, № 8, с. 98—106.

Обухов А. М. Вероятностное описание непрерывных полей. — Украинский математический журнал, 1954, № 1, с. 37—42.

Обухов А. М. Статистическое описание непрерывных полей. — Труды Геофиз. ин-та АН СССР, № 24 (151), 1954, с. 3—42.

Овчинников Л. Н., Григорян С. В. Закономерности состава и строения первичных геохимических ореолов сульфидных месторождений. — В кн.: Научные основы геохимических методов поисков глубокозалегающих рудных месторождений, ч. I. Иркутск, 1970, с. 3—36.

Овчинников Л. Н., Григорян С. В., Баранов Э. Н. Первичные геохимические ореолы гидротермальных месторождений и их поисковое значение. — В кн.: Прогнозирование скрытого оруденения на основе зональности гидротермальных месторождений. ИГЕМ, 1972, с. 17—20.

Ольшевский В. В., Цветков Э. И. Вопросы статистического описания нестационарных и неэргодичных случайных процессов. — В кн.: Труды I Всесоюзного симпозиума Методы представления и аппаратный анализ случайных процессов и полей», секция I. Новосибирск, 1968, с. 33—36.

Ольшевский В. В. Феноменологические модели случайных процессов. — В кн.: Труды VI Всесоюзного симпозиума «Методы представления и аппаратный анализ случайных процессов и полей», секция II. Л., ВНИИЭП, 1973, с. 3—14.

Пановский Г. А., Брайер Г. В. Статистические методы в метеорологии. Л., Гидрометеониздат, 1972.

Перельман А. И. Геохимия эпигенетических процессов. М., Недра, 1968.

Петров Т. Г. Обоснование варианта общей классификации геохимических систем. — Вест. ЛГУ, 1971, № 18, с. 30—38.

Поликарпочкин В. В. Вторичные ореолы и потоки рассеяния. Новосибирск, Наука, 1976.

Пономаренко А. И. Об оценках неизвестного среднего однородных случайных полей. — Кибернетика, 1974, № 1, с. 79—83.

Попов Ю. Д., Ядренко М. И. Некоторые вопросы спектральной теории однородных и изотропных случайных полей. — Теория вероятностей и ее применения, вып. 3, 1969, с. 531—540.

Прокофьев А. П. Выявление и учет урананных проб при подсчете запасов рудных месторождений. — Изв. вузов, геология и разведка, 1967, № 4, с. 48—57.

Пугачев В. С. Теория случайных функций. М., ИФМЛ, 1962.

Раевский С. Я. Нестационарные случайные процессы в линейных системах с постоянными параметрами. — Труды ВВИА им. Н. Е. Жуковского, (495), 1954, с. 14—29.

Рамм А. Г. Различение случайных полей на фоне помех. — Проблемы передачи информации, вып. 3, 1973, с. 22—35.

Рац М. В. Структурные модели в инженерной геологии. М., Недра, 1973. 212 с.

Родионов Д. А. Функция распределения содержаний элементов и минералов в изверженных горных породах. М., Наука, 1964.

Родионов Д. А. Статистические методы разграничения геологических объектов по комплексу признаков. М., Недра, 1968. 158 с.

Родионов Д. А., Коган Р. И. К проблеме статистического анализа в палеонтологии и стратиграфии. — В кн.: Методы и результаты математико-статистических исследований в геологоразведочном деле. ВИЭМС, 1972, с. 16—23.

Рожков В. А. О некоторых вопросах вероятностного анализа векторных случайных процессов. — В кн.: Труды VIII Всесоюзного симпозиума «Методы представления и аппаратный анализ случайных процессов и полей», секция III. Л., ВНИИЭП, 1975, с. 128—134.

Розанов Ю. А. О гауссовских полях с заданными условными распределениями. — Теория вероятностей и ее применения, вып. 3. 1967, с. 433—443.

Розенберг В. Я. Вопросы аппаратной аппроксимации характеристик случайных процессов. — В кн.: Труды I Всесоюзного симпозиума «Методы представления и аппаратный анализ случайных процессов и полей», секция I. Новосибирск, 1968, с. 17—27.

Романенко А. Ф., Сергеев Г. А. Вопросы прикладного анализа случайных процессов. М., Советское радио, 1963.

Романова М. А. Современные песчаные отложения Центральных Каракумов и проблема поиска погребенных структур. — Советская геология, 1964, № 12, с. 70—89.

Ронов А. В., Ярошевский А. А. Химическое строение земной коры. — Геохимия, 1967, № 11, с. 1285—1309.

Савинский И. Д., Островский Э. Я., Блащинский В. С. Сглаживание профильных радиометрических измерений при высоком уровне флуктуационных помех. — Атомная энергия, 1973, № 9, с. 189—190.

Сагт Ю. Е., Несвижская Н. И. Геохимические ореолы в неозловияльных ландшафтах. — В кн.: Геохимия ландшафтов. МГУ, 1975, с. 151—178.

Сауков А. А. Геохимические очерки. М., Наука, 1976.

Сафронов Н. И. Основы геохимических методов поисков рудных месторождений. Л., Недра, 1971.

Семенов В. В. Новый спектральный метод описания нестационарных случайных процессов. — В кн.: Труды II Всесоюзного симпозиума «Методы представления и аппаратный анализ случайных процессов и полей», секция I. Новосибирск, 1969, с. 179—184.

Семенов В. В., Солодовников В. В. Спектральный анализ линейных систем с переменными параметрами на конечных нестационарных интервалах времени. — Автоматика и телемеханика, 1968, № 11, с. 14—23.

Система программ обработки на ЭВМ гравитационных и магнитных аномалий, заданных на плоскости или произвольной поверхности/В. И. Аронов, Н. Е. Беляйков, Т. И. Ланда и др. — Обзор, серия: Региональная, разведочная и промысловая геофизика. ВИЭМС, 1972, 93 с.

Скороход А. В., Ядренко М. И. Абсолютная непрерывность мер, соответствующая однородным гауссовским полям. — Теория вероятностей и ее применения, вып. 1, 1973, с. 30—43.

Смирнов Б. И. Статистические методы выделения ассоциаций химических элементов и минералов. — Обзор, серия: Математические методы исследований в геологии. ВИЭМС, 1975.

Смирнов В. И. Геология полезных ископаемых. М., Недра, 1969.

Соколов О. Л., Боренштейн О. Ю. К определению и оценке энергетических спектров некоторых нестационарных случайных процессов. — Изв. вузов, радиофизика, 1975, № 4, с. 558—565.

Соловов А. П. Классификация ореолов рассеяния рудных месторождений. — В кн.: Глубинные поиски рудных месторождений. М., Госгеолтехиздат, 1963, с. 21—34.

Соловов А. Н. Параметры первичного ореола эндогенного месторождения. — Геология рудных месторождений, 1966, № 3, с. 72—83.

Стратонович Р. Л. Избранные вопросы теории флуктуаций в радиотехнике. М., Советское радио, 1961.

Темпельман А. А. Об эргодичности гауссовских однородных случайных полей на однородных пространствах. — Теория вероятностей и ее применения, вып. 1, 1973, с. 177.

Теоретические основы геохимических методов поисков слепых рудных тел/А. П. Соловов, А. В. Гаранин, В. С. Голубев и др. — В кн.: Научные основы геохимических методов поисков глубокозалегающих рудных месторождений, ч. II. Иркутск, 1971, с. 245—297.

Ткачев Ю. А., Юдович Я. Э. Статистическая обработка геохимических данных. Л., Наука, 1975.

Торговицкий И. Ш. Методы определения момента изменения вероятностных характеристик случайных величин. — Зарубежная радиоэлектроника, 1976, № 1, с. 3—52.

Трошин Ю. П., Белов В. И., Петрова Э. И. О генетическом смысле коэффициента вариации концентраций редких элементов в интрузивных породах в связи с проблемой металлогенической специализации интрузий. — В кн.: Математические методы геохимических исследований. М., Наука, 1966, с. 22—30.

Уемов А. И. Логические основы метода моделирования. М., Мысль, 1971.

Уилкс С. Математическая статистика. М., Наука, 1967.

Ферсман А. Е. Геохимия. Т. II. Л., Химтеоретиздат, 1934.

Харбух Дж., Бонзм-Картер Г. Моделирование на ЭВМ в геологии. М., Мир, 1974.

Харвей Д. Научное объяснение в географии. М., Прогресс, 1974.

Хеннан Э. Многомерные временные ряды. М., Мир, 1974.

Химмельблау Д. Анализ процессов статистическими методами. М., Мир, 1973.

Цветков Э. И. Нестационарные случайные процессы и их анализ. М., Энергия, 1973.

Цыпкин Я. З. Основы теории обучающих систем. М., Наука, 1970.

Червяков В. А. Концепция поля в современной картографии. Новосибирск, Наука, 1978.

Четвериков Л. И. Теоретические основы моделирования тел твердых полезных ископаемых. Воронеж, Изд. Воронеж. ун-та, 1968.

Шарапов И. П. Логический анализ некоторых проблем геологии. М., Недра, 1977. 144 с.

Шарков Ю. В. О генетической классификации вторичных литохимических ореолов месторождений. — Литология и полезные ископаемые, 1971, № 4, с. 65—78.

Яглом А. М. Введение в теорию стационарных функций. — Успехи математических наук, вып. 5 (51), 1952, с. 8—168.

Яглом А. М. Некоторые классы случайных полей в n -мерном пространстве, родственные стационарным случайным процессам. — Теория вероятностей и ее применения, вып. 3, 1957, с. 292—337.

Ядренко М. И. Задача о различении гипотез для изотропных случайных полей. — Кибернетика, 1974, № 5, с. 68—72.

Ядренко М. И. Изотропные поля марковского типа в евклидовом и гильбертовом пространстве. — В кн.: Труды Всесоюзного совещания по теории вероятности и математической статистике. Ереван, 1960, с. 263—279.

Ядренко М. И. Об оптимальных оценках коэффициентов регрессии изотропных случайных полей. — Проблема передачи информации, вып. 3, 1973, с. 68—79.

Янке Е., Эмде Ф., Леш Ф. Специальные функции. М., Наука, 1977.

Cameron E. M. A Computer Program for Factor Analysis of Geochemical and other Data. — Geol. Survey of Canada, Paper 67—34, Ottawa, 1967, p. 1—41.

Obial R. C. Cluster Analysis as an Aid in the Interpretation of Multielement Geochemical Data. — Trans. Inst. Mining and Metallurgy, Aug. B79, 1970, p. 175—180.

Parzen E. On estimation of a Probability Density Function and Mode. — Ann. Math. Stat., v. 33, N 3, 1962, p. 1065—1076.

Petersen D. P., Middleton D. Linear Interpolation, Extrapolation and Prediction of Random Space-Time Fields with a Limited Domain of Measurement. — IEEE, Inf. Theory, IT—11, N 1, 1965, p. 8—30.

Petersen D. P., Middleton D. Reconstruction of Multidimensional Stochastic Fields from Discrete Measurements of Amplitude and Gradient. — Inf. and Control, v. 7, N 4, 1964, p. 445—476.

Petersen D. P., Middleton D. Sampling and Reconstruction of Wave-Number-Limited Functions in N -Dimensional Euclidean Spaces. — Inf. and Control, v. 5, N 4, 1962, p. 279—323.

Wiatr I., Stenzel P. Application of Factor Analysis to Classification of Engineering-geological Environment. — Math. Geology, v. 6, N 1, 1974, p. 17—23.

ОГЛАВЛЕНИЕ

Предисловие	3
Обозначения, применяемые в формулах	5
Введение	6
Глава I. Принципы конструирования понятийной модели геохимического поля	8
1. Моделирование как метод исследования	8
2. Особенности моделирования в геологии	12
3. Геохимическое поле. Основные понятия и определения	23
4. Свойства геохимических полей, используемые в задачах литохимических поисков	30
Глава II. Методы математического моделирования геохимического поля	36
1. Основные типы математических моделей поля и возможности их применения в задачах геохимических поисков	36
2. Математическое описание геохимических процессов для решения прямых задач геохимии	45
3. Конструктивное моделирование геохимического поля для целей поисков	55
Глава III. Основные математические понятия, связанные со скалярным случайным полем, и методы его описания	58
1. Определение случайного поля	58
2. Элементы спектральной теории однородного случайного поля	66
3. Случайное поле с однородными приращениями	71
Глава IV. Статистические методы изучения геохимического поля	77
1. Статистические оценки плотности распределения вероятностей значений неоднородного случайного поля.	77
2. Основы теории линейной фильтрации	81
3. Статистические методы выделения детерминированной составляющей геохимического поля	86
4. Статистические методы обнаружения сигнала в шуме в приложении к поиску рудогенных аномалий	94
Глава V. Некоторые специальные методы изучения неоднородного поля	105
1. Аналитические аппроксимации геохимического поля	105
2. Специфика статистических характеристик неоднородного поля	116
3. Определение ассоциации типоморфных элементов методом главных компонент	134
Глава VI. Математическое описание геохимических данных с позиций модели случайного поля	142
1. Основные принципы построения методики обработки геохимической информации в поисковых задачах	142
2. Блок-схема алгоритма математической обработки геохимических данных на ЭВМ при описании исследуемого геохимического поля	152
3. Примеры математического описания геохимических полей	157
Заключение	173
Список литературы	177

ЛЮДМИЛА АЛЕКСАНДРОВНА ВЕРХОВСКАЯ
ЕЛИЗАВЕТА ПАВЛОВНА СОРОКИНА

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ГЕОХИМИЧЕСКОГО ПОЛЯ В ПОИСКОВЫХ ЦЕЛЯХ

Редактор издательства В. В. Кузовкин
Обложка художника А. В. Соловьева
Художественный редактор Е. Л. Юрковская
Технический редактор Н. С. Гришанова
Корректор Т. С. Суворова

ИБ № 2903

Сдано в набор 21.07.80. Подписано в печать 08.05.81. Т-09141. Формат 60×90¹/₈.
Бумага кн-журнальная. Гарнитура «Литературная». Печать высокая. Усл. печ. л. 11,75.
Усл. кр.-отт. 12,0. Уч.-изд. л. 12,39. Тираж 1350 экз. Заказ № 771/7340—14.
Цена 1 р. 90 к.

Издательство «Недра», 103633, Москва, К-12, Третьяковский проезд, 1/19
Ленинградская картографическая фабрика ВСЕГЕИ

УВАЖАЕМЫЙ ТОВАРИЩ!

В издательстве «Недра»
готовятся к печати новые книги

МАКСИМЕНКО И. А., КАВУН К. П. Организация управления геологоразведочными работами в СССР. 10 л. 55 к.

Показано место геологоразведочных работ в системе отраслей народного хозяйства СССР. С учетом отраслевой специфики рассмотрены принципы управления геологоразведочными работами, организационная структура и методы управления. Уделено внимание научно-методическим вопросам совершенствования действующих систем управления и оценке их эффективности. Указаны основные направления усиления воздействия хозяйственного механизма на повышение эффективности и качества геологоразведочных работ.

Для инженерно-технических работников всех уровней, занимающихся вопросами организации и управления производством геологоразведочных работ. Может быть использована в системе экономического образования в отрасли.

ЮШКИН Н. П. Топоминералогия. 20 л. 3 р. 40 к.

Топоминералогия рассматривается как самостоятельное научное направление современной минералогии, изучающее закономерности формирования и распределения минералов в различных геологических системах. Описаны задачи, общие принципы и методы топоминералогических исследований. Показано их значение для металлогенетического анализа, прогнозирования, поисков, разведки и оценки месторождений полезных ископаемых. Изложены методы минералогического картирования и минералогических поисков. Особое внимание уделено анализу минералогических критериев рудоносности.

Для минералогов, геологов, специалистов в области металлогении и геологии рудных месторождений. Может быть полезна студентам геологических вузов.

Интересующие Вас книги Вы можете приобрести в местных книжных магазинах, распространяющих научно-техническую литературу, или заказать через отдел «Книга—почтой» магазинов:

№ 17—199178, Ленинград, В. О., Средний проспект, 61;

№ 59—127412, Москва, Коровинское шоссе, 20.

Издательство «Не