

15. Ключковский В.М. Распределение атомных электронов и правило последовательного заполнения (n+1)- групп. М. Атомиздат 1968
16. Делоне Н.Б. Ридберговские атомы. Соросовский журнал, № 4, 1988. – С. 64 -70
17. Белов Н.В. Средневековая мавританская орнаментика в рамках групп симметрии. Кристаллография, 1956, том 1, в.5. – 612 с.
18. Mamedov Kh.S. Crystallographic patterns. Comp&Math with Appl. V.12I No 3-4, p.511-529
19. Александров А.Д., Вернер А.Л., Рыжик В.И. Геометрия для 8-9 классов. ПРОСВЕЩЕНИЕ 1996. – 416 с.
20. Делоне Б.Н. Теория планигонов. Известия АН СССР, 23 (1959 г.). – С. 365-386
21. International Tables for X-ray Crystallography. Birmingham 1952, 558 p.
22. Галиулин Р.В. Кристаллография электрического тока. // Тез. 5-я Национальная конференция по применению синхротронного излучения для исследования наноматериалов и наносистем. Москва. – С. 280
23. Шубников А.В. К вопросу о строении кристаллов. Изв. Имп. АН. Сер.6 т.10. – С. 755-779
24. Галиулин Р.В. Двумерные дискретные группы с конечной фундаментальной областью, их физический и гуманитарный смыслы. ЖВМ. 2005, т.45, № 8. –С.1331-1344
25. Кузьменков Л.С. Рост структур с сохранением их подобия (Теория А.А.Власова). В книге «Теория реального кристаллообразования», НАУКА, 1977. – С. 221-227
26. Ферсман А.Е. Е.С.Федоров и его роль в науке. Природа., 1920, № 1., – С. 13-15
27. Галиулин Р.В. Аксиоматика формирования месторождений кристаллических полезных ископаемых. Информационный сборник «Геологическое изучение и использование недр», вып.5. – С. 38-43
28. Шмидт О.Ю. Происхождение Земли и планет. ИАН, 1962. – 132с.
29. В.Кудрин. Интеграция органической и неорганической гипотез генезиса углеводородов. Теплоэнергетический комплекс, 2002, № 3, – 44 с.
30. Гончаров Н.Ф., Макаров В.А., Морозов В.С.. Земля – большой кристалл? Химия и Жизнь. 1974 №3. – С. 34-38
31. Земля – большой кристалл? По материалам исследований Н.Ф.Гончарова, В.А.Макарова, В.С.Морозова. Изд-во ЗАХАРОВ 2005. – 224 с.
32. Федоров А.Е. Мировая история и глобальные геологические структуры (часть вторая). 13-й Научный семинар по нетрадиционным вопросам геологии (труды), 2005. – С. 353-500
33. Желудев И.С.. Простая симметричная модель мироздания. НАУКА 1996
34. Власов А.А. Теория многих частиц. ГИТТЛ М. 1950. – 348 с
35. Галиулин Р.В., Сигарев Р.В. Об устойчивости минералов с голоэдрическими федоровскими группами. Док. АН СССР, 1987, т.293, – С.99-100
36. Голубев С.Н. Минеральные кристаллы внутри организмов и их роль в происхождении жизни. Журнал общей биологии, № 6, 1987. – С. 784 – 806.
37. Болотов Б.В. Здоровый человек в нездоровом мире. ПИТЕР 2005. – 394 с.
38. Делоне Б.Н. Геометрия положительных квадратных форм. УМН, 1938
39. Delaunay B.N. Neue Darstellung der geometrischen kristallographie. Zs.f.Kristallogr., 1933, Bd. 84, S. 109-149
40. Галиулин Р.В. Системы Делоне. Кристаллография, 1980
41. Галиулин Р.В. Каким должен быть современный учебник геометрии для школьников. Матэматыка. Минск, 2006, № 1. – С.3-5
42. Агештейн М.Э., Мигдал А.А. Как увидеть невидимое. Эксперимент на дисплее. Первые шаги вычислительной физики. Москва, Наука, 1989, Серия «Кибернетика». – С.141-170
43. Медведев Н.Н. Метод Вороного-Делоне в исследовании структуры некристаллических систем. Новосибирск 2000. – 214 с.
44. Ivanenko D.D., Galiulin R.V. Quasicrystal model of the universe. Protvino, 1995, p.180

СТАТИСТИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ МИНЕРАЛЬНЫХ СРАСТАНИЙ В ПОРОДАХ И РУДАХ

Ю.Л. Войтеховский

Геологический институт Кольского НЦ РАН

Введение

Изредка жизнь дарит нам встречи с людьми выдающимися, но мы обычно осознаем это слишком поздно. Остается лишь вспоминать давние события, пытаясь извлечь уроки. Пользуясь случаем, хочу вспомнить два эпизода из многолетнего общения с д.г.-м.н., проф. В.М. Изoitко (см. другую статью автора в настоящем сборнике). Оба они относятся к последнему десятилетию. Пройдя годичную стажировку в Центре геостатистики при Высшей национальной горной школе Парижа в рамках обучения в докторантуре при Институте геологии Коми НЦ УрО РАН, автор был полон идей о применении статистических методов к описанию структур горных пород и руд. Одна за другой появлялись статьи, отсылаемые в «Обогащение руд», где и попадали на рецензию к Виктории Михайловне. Редколлегия научных журналов не любит статей с продолжениями. Но тут чудесным образом серия получилась [1-10], хотя каждую статью приходилось отстаивать в переписке. В итоге редколлекцией была объявлена [6] и в феврале 1998 г. на техническом совете АОЗТ «Меха-

нобр Инжиниринг» состоялась [9] публичная дискуссия. Напомню её основные тезисы, не потерявшие актуальности.

Тезис I. Минералогии (в т.ч. технологической) нужна теоретическая концепция кристаллической горной породы (руды) как пространства

Долгое время считалось, что Земля плоская, оказалось – сферическая. С современной точки зрения, эти две (не столько старая и новая, сколько локальная и глобальная) истины согласуются в известном топологическом утверждении, что сфера локально евклидова. Воспользовавшись этой весьма отдалённой аналогией, поясним первый тезис следующим образом. Минералоги (а также петрографы и вообще все геологи) считают, что кристаллические горные породы суть большие агрегаты минеральных индивидов (зерен, кристаллов), в чём всякий может убедиться невооружённым глазом или с помощью микроскопа. Автор полагает, что эта истина – как раз из разряда локальных. Но в чём тогда состоит глобальная истина?

Прежде чем дать ответ на этот вопрос, сделаем одно замечание. Как представляется, отсутствие теории кристаллической горной породы (руды) гносеологически связано с неуверенностью минералогов в возможностях абстрагирования. Именно поэтому в данной области все теории являются лишь эмпирическими обобщениями. В качестве образца решительного абстрагирования напомним определение гранулометрии по Ж. Матерону. «Пусть E – некоторое множество и $\mathfrak{Z} \subset \mathfrak{R}(E)$. Гранулометрией на $\mathfrak{Z}$ называется всякое однопараметрическое семейство ψ_λ , где $\lambda \geq 0$, отображений класса $\mathfrak{Z}$ в себя, удовлетворяющее следующим условиям: (1) $\psi_\lambda(A) \subset A$ для любых $\lambda \geq 0$ и $A \in \mathfrak{Z}$; (2) $A, B \in \mathfrak{Z}, A \subset B \Rightarrow \psi_\lambda(A) \subset \psi_\lambda(B)$ для любых $\lambda \geq 0$; (3) $\lambda \geq \mu \geq 0 \Rightarrow \psi_\lambda(A) \subset \psi_\mu(A)$ для любых $A \in \mathfrak{Z}$; (4) $\psi_\lambda \times \psi_\mu = \psi_\mu \times \psi_\lambda = \psi_{\sup(\lambda, \mu)}$ для любых $\lambda, \mu \geq 0$ » [6].

На первый взгляд – ничего общего с привычным гранулометрическим анализом. Но если принять, что E – просеиваемый материал, $\mathfrak{Z}$ – совокупность навесок из их мыслимого разнообразия $\mathfrak{R}(E)$, $\psi_\lambda(A)$ – остаток на сите с размером ячеек λ после просеивания навески A , знак $\times$ показывает последовательное просеивание в различных ситах, то всё встаёт на свои места. Легко видеть, что $(\psi_\lambda \times \psi_\mu) \times \psi_\varphi = \psi_\lambda \times (\psi_\mu \times \psi_\varphi) = \psi_{\sup(\lambda, \mu, \varphi)}$ и $\psi_\lambda \times \psi_\lambda = \psi_\lambda$. То есть, мыслимые для данной навески ситования образуют ассоциативный и коммутативный группоид (не являющийся полугруппой), в котором каждый элемент идемпотентен. Рутинная процедура ситования привела нас к основаниям современной алгебры! Но зачем? Затем, что подобные определения лежат в основании математической морфологии, применяемой в автоматических анализаторах структур металлов и сплавов. Согласитесь, полезная вещь...

Можно ли предложить нечто похожее для кристаллической горной породы? Давняя идея автора состоит в том, чтобы понять её как пространство с набором фундаментальных свойств, следующих из неотъемлемых межэлементных отношений. Первый шаг на этом пути – определение горной породы как топологического пространства [7]. Класс объектов $\mathfrak{R}$ называется топологическим пространством, если он может быть представлен как объединение некоторого семейства $\mathfrak{Z}$ своих подмножеств, замкнутого относительно объединения любого числа и пересечения любых двух из них. Семейство $\mathfrak{Z}$ (включая пустое множество) называется топологией $\mathfrak{R}$. Если существует такое семейство $\mathfrak{N}$ множеств, что каждое множество из $\mathfrak{Z}$ есть объединение некоторых множеств из $\mathfrak{N}$, то последнее называется базой $\mathfrak{R}$.

На первый взгляд – сложно. Но заметим, что всякое множество допускает две предельные топологии: (1) тривиальную – $\mathfrak{Z}$ состоит из пустого множества и самого $\mathfrak{R}$, и (2) дискретную – $\mathfrak{Z}$ содержит любое подмножество $\mathfrak{R}$. Применительно к кристаллической горной породе это означает, что $\mathfrak{Z}$ представляет собой (1) монолит, не разделяемый на составные части, и (2) множество всех ассоциаций (не обязательно связанных) слагающих горную породу минеральных зерен, в совокупности образующих базу $\mathfrak{N}$. Дискретная топология предоставляет максимум возможностей для дальнейшего теоретизирования. Но, возможно, проблема состоит в том, чтобы между указанными крайностями найти ту топологию, которая и составляет специфику кристаллической породы как объекта определённого уровня в иерархии неорганической природы.

Следующим шагом является определение горной породы как метрического пространства. Множество $\mathfrak{R}$ называется метрическим пространством, если для его любых элементов i и j определена функция ρ_{ij} , называемая метрикой (расстоянием) и обладающая свойствами: (1) $\rho_{ij} \geq 0$, причём $\rho_{ij} = 0$ равносильно $i \equiv j$, (2) $\rho_{ij} = \rho_{ji}$, (3) для любых трёх элементов i, j, k выполнено $\rho_{ij} + \rho_{jk} \geq \rho_{ik}$. Это определение кажется простым, поскольку напоминает школьный пример евклидовой метрики. Но на множестве минеральных зёрен (в базе топологии) или их произвольных ассоциаций (в самой топологии) в кристаллической горной породе можно определить много других метрик.

К ещё одному определению горной породы как пространства ведёт рассмотрение фундаментальных отношений между её элементами – минеральными зёрнами. Таких отношений три, но каждое допускает логическое отрицание: (1) субстанциальная (не) тождественность, (2) видовая (не) тождественность, (3) (не) контакт

тирование. Анализ показывает, что наиболее интересным для развития теории является отношение неконтактирования, которое рефлексивно, симметрично и не транзитивно, т.е. является толерантностью и превращает горную породу (руды) в пространство толерантности.

Видимо, это максимум того, что может быть определено для всякой кристаллической горной породы (руды). Это топологическое (с различными топологиями в диапазоне от тривиальной до дискретной) и метрическое (с различными метриками, заданными для минеральных зёрен и их произвольных ассоциаций) пространство, а ещё пространство толерантности с образующим отношением пространственного неконтактирования минеральных зёрен. Заметим, что к пространству толерантности ведёт и отношение непустого пересечения ассоциаций минеральных зёрен.

Тезис II. Концепция кристаллической горной породы (руды) может быть построена на фундаменте математической статистики.

Предыдущие определения показывают принципиальную возможность применения фундаментальных математических концепций в интересующей нас области. Но нельзя ли обойтись без них, полагаясь на интуицию? Так, в минералогии и петрографии многие годы обсуждается идея трансляционного порядка. По-видимому, в основании этого лежит психологический феномен – очарование строгой теории, привнесённой в них из кристаллографии. Физические методы не обнаружили её периодического строения. И даже теоретически никто не определил, что следует понимать под элементарной ячейкой горной породы (руды), кроме того лишь, что она должна представлять горную породу по составу и строению. Мы специально не употребляем термин «структура», описательный настолько, что не позволяет развить формальную теорию.

Не менее популярным является представление о «структуре Коксетера» (структуре мыльной пены) как равновесной конфигурации межзерновых границ минерального агрегата, в том числе горной породы (руды). Условия равновесия структуры Коксетера: общий минимум площади межзерновых границ и равенство углов на контактах зёрен – в целом соответствуют физическим представлениям о равновесии мономинеральной горной породы, которое теоретически достижимо путём диффузии атомов через межзерновые границы. Но оно уже недостижимо для полиминеральной породы. Кроме того, структура Коксетера не является периодической, а равновесная форма минерального зерна рассчитана в статистическом приближении и имеет дробное число вершин, рёбер и граней!

Очевидно, бытующие представления об идеальном устройстве горной породы (руды) противоречивы. Но в них присутствует рациональное зерно – явный статистический подтекст, будь то рассуждение об элементарной ячейке или структуре Коксетера. Идея автора состоит в том, чтобы не апеллировать к идеалу горной породы (руды), а разработать статистический метод анализа коррелятивности её составных частей – минеральных зёрен или их ассоциаций. В той или иной аналитической форме, именно здесь задействуются ранее изложенные представления о топологиях и метриках горной породы (руды). Наиболее перспективной для применения представляется хорошо разработанная теория кригинга [4, 8, 10].

В её основе лежит представление об изучаемом феномене как пространственно распределённой случайной функции. Феномен представляется как одна из бесконечного числа его возможных реализаций. Его однородность позволяет принять гипотезу стационарности и применить простейший вариант теории. Применительно к организации горной породы (руды) ковариационный анализ позволяет рассчитать ковариограмму, характеризующую пространственную коррелируемость минеральных зёрен (или их ассоциаций) различных видов в зависимости от расстояния между ними. На её основе процедура кригинга позволяет оценить вероятность принадлежности данного зерна (ассоциации) к тому или иному виду по аналогичной информации об окружающих зёрнах (ассоциациях).

Изучение норитов и габброноритов интрузива Фёдорово-Панских тундр показало, что они являются частично упорядоченными. Минеральные зёрна различных видов коррелированы в них на расстоянии двух координационных сфер. По-видимому, все магматические горные породы являются частично (причём слабо) упорядоченными. Причина этого обсуждалась А.Б. Вистелиусом в его модели идеального гранита (напр., кристаллизация данного минерального зерна исключает зарождение зерна того же сорта в кристаллизационном дворике и повышает вероятность нахождения зерна другого сорта в непосредственном контакте в сформировавшейся горной породе). Но, скорее всего, существуют и неупорядоченные горные породы, реализующие модель «чистой мозаики».

Целью всякой структурной теории, среди прочего, является возможность предсказания положения каждого элемента в пространстве. В этом смысле специфика горной породы (руды) состоит в том, что принадлежность каждого элемента (минерального зерна или их ассоциации) к данному виду предсказуемо с некоторой вероятностью. Предельно упорядоченную (в стиле идеального кристалла) горную породу представить можно, но этот идеал не имеет с реальными горными породами ничего общего. Гораздо ближе к ним совершенно неупорядоченная модель «чистой мозаики». Современное описание идеального кристалла (в духе г, R-

систем Делоне) строится от локального порядка – к глобальному. Степень упорядоченности горной породы (руды) в силу специфики статистического описания фиксируется пространственной ковариограммой, определяемой из всей совокупности межэлементных отношений.

Тезис III. Несмотря на непрерывное изменение модального состава горных пород (руд), их структурная классификация возможна.

Ещё одна важная задача структурной теории горной породы (руды) – построение исчерпывающей классификации. В основе существующих классификаций лежат непрерывно изменяющиеся химический и модальный составы пород при резком подчинении их структурных признаков. Это привело к конвенциональному выбору разделительных границ и давно уже породило пессимизм в отношении самой возможности построения естественной петрографической классификации. Между тем, с формальной точки зрения задача вполне разрешима – непрерывность параметров не противоречит дискретности некоторой функции. Вопрос лишь в том, какие параметры и функцию целесообразно выбрать для описания организации горной породы. Авторский вариант, согласованный с изложенными выше принципами, дан в [1, 3, 5]. Он сводится к тому, чтобы в основу описания горной породы положить не модальный и химический составы горной породы, а отношения между слагающими её элементами, в простейшем случае – вероятности (частоты) контактов минеральных зёрен различных видов. Тип петрографической структуры выражается топологическим типом «структурной индикатрисы» – соответствующей поверхности 2- ... 4-го порядков в n -мерном пространстве, где n – число минералов в горной породе.

Делом будущего является развитие теории структурных перестроек горной породы в различных геологических процессах. Её изложение возможно на языке алгебры матриц. А именно, организация горной породы (руды) в терминах вероятностей различных межзерновых контактов легко записывается в виде симметрических матриц. Преобразование горной породы с сохранением структурного типа есть не что иное, как невырожденное преобразование подобия соответствующей матрицы, хорошо известное в линейной алгебре. Совокупность таких преобразований образует группу подобно тому, как образуют точечную группу движения кристаллического полиэдра или пространственную группу – движения кристаллической решётки. Более того, в рамках алгебры матриц возможно описание качественных (структурных) перестроек горной породы (руды), в том числе с исчезновением или новообразованием минералов. Теория организации и перестроек горной породы (руды) должна быть существенным подспорьем физико-химической теории её твердофазных превращений.

Заключение

Автор считает развиваемый взгляд на организацию горной породы (руды) последовательным и допускающим дальнейшее развитие. Все математические формализмы сводимы к алгоритмам, допускающим автоматическую (приборную) реализацию. Именно такой (технологическо-минералогический) критерий оценки всякой теории неоднократно высказывала В.М. Изюитко в дискуссиях с автором. Является ли статистический взгляд на устройство горной породы (руды) «самым правильным» – рассудит время.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Войтеховский Ю.Л.* Статистический анализ минеральных сростаний в породах и рудах. Состояние и перспективы // Обогащение руд. 1995. № 6. – С. 18-22.
2. *Войтеховский Ю.Л.* Статистический анализ минеральных сростаний в породах и рудах. II. Принцип априорных вероятностей // Обогащение руд. 1996. № 3. – С. 30-33.
3. *Войтеховский Ю.Л.* Статистический анализ минеральных сростаний в породах и рудах. III. Некоторые проблемы систематики структур // Обогащение руд. 1997. № 1. – С. 28-30.
4. *Войтеховский Ю.Л.* Статистический анализ минеральных сростаний в породах и рудах. IV. Индикаторные функции // Обогащение руд. 1997. № 3. – С. 32-36.
5. *Войтеховский Ю.Л.* Статистический анализ минеральных сростаний в породах и рудах. V. К аналитической систематике структур // Обогащение руд. 1997. № 4. – С. 31-33.
6. *Войтеховский Ю.Л.* Статистический анализ минеральных сростаний в породах и рудах. VI. Рассуждение о методе: от конкретного к абстрактному – и обратно // Обогащение руд. 1997. № 6. – С. 27-31.
7. *Войтеховский Ю.Л.* Статистический анализ минеральных сростаний в породах и рудах. VII. Метрики и топологии // Обогащение руд. 1998. № 1. – С. 23-26.
8. *Войтеховский Ю.Л.* Статистический анализ минеральных сростаний в породах и рудах. VIII. Простой и обычный крайгинг // Обогащение руд. 1998. № 2. – С. 32-37.
9. Дискуссия по проблеме «Статистический анализ минеральных сростаний в породах и рудах» // Обогащение руд. 1998. № 3. – С. 25-29.
10. *Войтеховский Ю.Л.* Статистический анализ минеральных сростаний в породах и рудах. IX. Дискретный крайгинг, эрмитовы полиномы и гауссов анаморфозис // Обогащение руд. 1999. № 1-2. – С. 46-48.