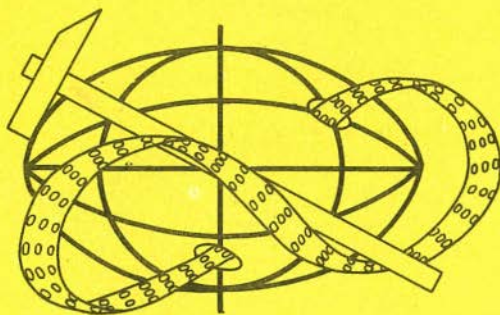


**МОДЕЛИРОВАНИЕ  
ПРИ ЛОГИКО-МАТЕМАТИЧЕСКОЙ  
ОБРАБОТКЕ  
ГЕОЛОГИЧЕСКИХ ДАННЫХ**



**НОВОСИБИРСК 1990**

АКАДЕМИЯ НАУК СССР  
СИБИРСКОЕ ОТДЕЛЕНИЕ  
ИНСТИТУТ ГЕОЛОГИИ И ГЕОФИЗИКИ

МОДЕЛИРОВАНИЕ  
ПРИ ЛОГИКО-МАТЕМАТИЧЕСКОЙ  
ОБРАБОТКЕ  
ГЕОЛОГИЧЕСКИХ ДАННЫХ

СБОРНИК НАУЧНЫХ ТРУДОВ

НОВОСИБИРСК 1990

Моделирование при логико-математической обработке геологических данных: Сб. научн. тр. / АН СССР, Сиб. отд-ние, Ин-т геологии и геофизики. [Редкол.: В.А.Соловьев (отв. редактор) и др.] Новосибирск, 1990. 129 с.

Рассматриваются различные аспекты моделирования в геологии, в том числе методологические вопросы сбора и анализа геологической информации. Обсуждаются подходы к построению и анализу моделей, используемых при решении геологических задач логико-математическими методами. Анализируются некоторые модели геологических объектов, исходных данных, классификационных и прогнозных построений. Уделяется внимание структурному аспекту моделирования. Излагаются алгоритмы и методы анализа данных, которые могут применяться при выборе, построении и анализе моделей и основываются на аппарате дискретной математики, линейной алгебры и временных рядов. Приведены конкретные геологические примеры: моделирование химического состава эвтектоидных горных пород; анализ соотношений процентных весовых и объемных содержаний породобразующих окислов для габброидов норильских интрузий; выделение климатических циклов и построение моделей для прогноза климатических показателей.

Рассчитан на геологов, интересующихся математическими методами и специалистов по прикладной математике, занимающихся анализом данных и математическим моделированием.

Редакционная коллегия

А.Н.Дмитриев, В.А.Соловьев (отв.ред.),  
Г.Ф.Букреева, В.О.Красавчиков, Т.И.Штатнова

Рецензенты

д-р геол.-мин.наук В.Б.Василенко (ИГиГ СО АН СССР)  
канд. геол.-мин.наук М.Л.Щемякин (Новосибирский ун-т)

А. Н. Дмитриев

КОНЦЕПЦИЯ ИНТЕГРАЦИИ ДАННЫХ НА ОСНОВЕ ГЕОТЕСТА  
В СВЯЗИ С ПРОБЛЕМОЙ ГЕОМОНИТОРИНГА

Появление информоемких исследований в геологической отрасли знаний частично сняло противоречие между производством и потреблением информации. В процессе обновления концепций локализуется и возможность глобального обновления наших взглядов на общепланетарную картину. Все чаще выдвигаются и развиваются новые концепции, основывающиеся на фундаментальном предположении об организменной модели Земли. Эта модель была представлена в работе В. И. Вернадского /1/.

Действительно, идея Земли как некоторого космического организма в Солнечной системе оказывается плодотворной не только со стороны открывающегося онтологического богатства модели, но и со стороны обновления исследовательского репертуара. Одним из важных исследовательских приемов является геомониторинг, но его эффективность, на наш взгляд, будет реальной в контексте организменной модели Земли. Как отклик на необходимость развития этой модели появляются новые методы исследования и новые схемы интерпретации. Ставятся новые вопросы, особенно в сфере глобальной экологии и техногенного наращивания неравновесных систем и процессов в литосфере Земли и ее газоплазменных оболочках /8/.

Именно в этих условиях учета и обработки все более тотальных и глобальных сообщений возникает необходимость в некотором новом виде комплексного опроса геологических систем и процессов. Появляется понятие "геотеста", в которое мы вкладываем методологический, теоретический и прагматический смысл. Ниже будут подробно излагаться конструкции и функциональные нагрузки геотестов, в рамках которых можно более конструктивно рассмотреть основополагающий вопрос интеграции и дифференциации геологических, геофизических и геохимических данных.

Представление о "геотесте" ориентировано на выявление состояния природных систем, характеризуется следующим содержанием и является:

- 1) формой интегрального опроса геологической среды;
- 2) формой ответа на заданный геологической среде вопрос;
- 3) комплексной информационной единицей в интегральной или дифференциальной картине геологической системы или процесса;
- 4) участником конструкции информационных моделей исследовательских и производственных процессов (например, разведочный процесс);

Перечисленные функциональные роли геотеста являются довольно сильными и влиятельными в процессе создания потоков преобразования и обработки информации в широком классе целей наук о Земле. Это тем более важно, что перед геологией встали не предусмотренные в ее развитии новые задачи, которые возникли в смежных областях знания и в технике. Например, по мере развития техносферы остро встали вопросы геоэкологического характера:

- физико-химические преобразования газоплазменных оболочек Земли;
- комплексный (интегральный) геофизический отклик на техногенное энерговыделение;
- интегральный геохимический отклик на техногенное преобразование вещества литосферы;
- интегральный геодинамический отклик на разрушение геологических систем и процессов;
- интегральный отклик на комплекс техногенных воздействий, нацеленных на снижение потенциала геолого-геохимико-геофизических закономерностей;
- интегральный отклик на массовое изъятие полезных ископаемых в связи с нарушением вертикального перетока энергии литосферы - ионосфера.

Приведенное выше перечисление при трансформации его в конкретные задачи требует совершенно новых исследовательских приемов и постановок, новых идей и операций в создающихся методиках. Здесь мы рассмотрим общие представления и методологию геотестов с позиций логико-математических подходов, изложенных в конкретных и обзорных работах /3-14/.

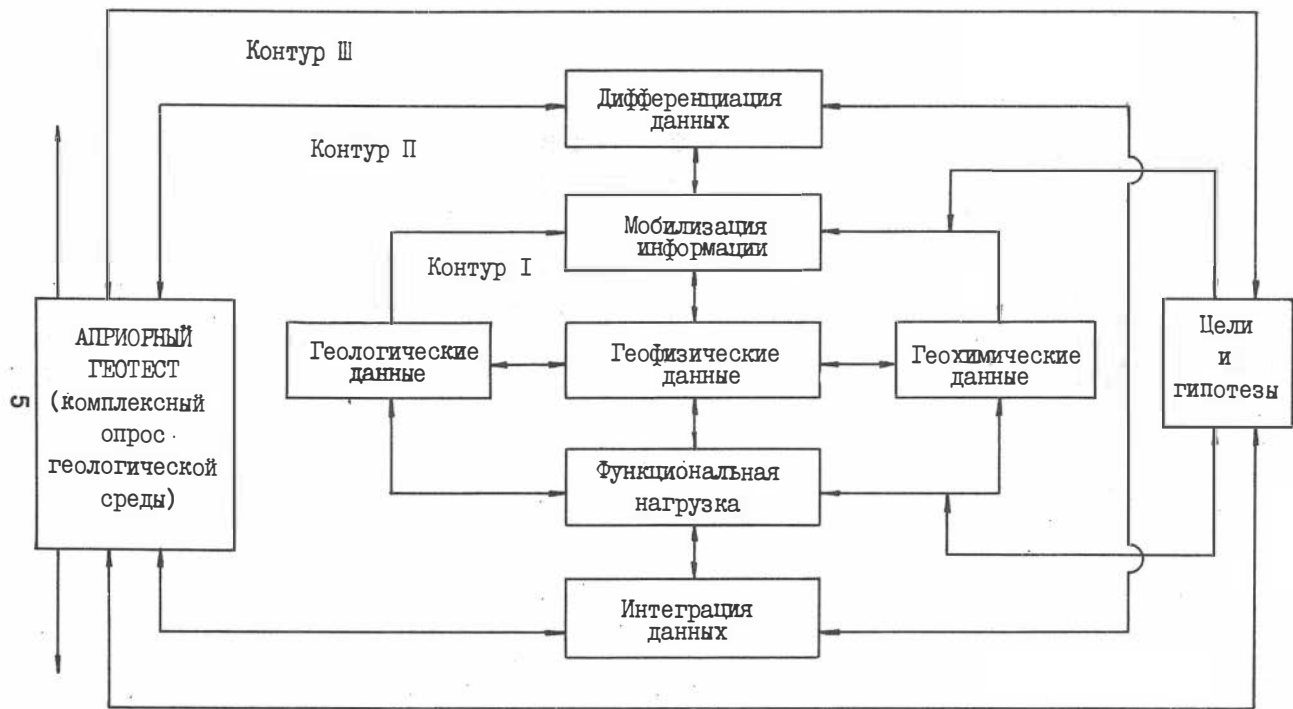


Рис. 1. Блок-схема априорного геотеста (опросный лист)

Центральную роль геотеста (в качестве точки сборки) можно рассмотреть в виде некоей блок-схемы (рис. I). Но для того, чтобы дать содержательную информинтерпретацию предложенной схемы, охарактеризуем внутреннее заполнение геотеста. В связи с задачами интегрального применения данных геологии, геохимии и геофизики понятие геотеста нагружается определенными свойствами.

Постулат I. Геотест – это элементарная информационная единица, фиксирующая в себе опрос и результат опроса геологической среды по пространственно-временным характеристикам полей и характеристикам вещественного состава путем прямой регистрации измеримых и наблюдаемых данных в точке опроса и выявляющая эмерджентные свойства заданной целеуказанием системы и состояния этой системы.

Дадим некоторые разъяснения. "Элементарная информационная единица" в представлении геотеста – это минимальный результат интеграции выявленных особенностей состояния опрашиваемой системы и ее эмерджентных свойств /I6/. Это необходимое количество данных для узнавания того, что мы имеем дело с геологическим объектом и его состоянием. Такое требование является и системным и тестовым, что сразу устанавливает связь с идеями и аппаратом дискретной математики и с работой С.В.Яблонского /I5/. Эмерджентность, отслеживающая свойство целого, в геотесте закрепляется и поддерживается данными о состоянии системы. Нацеленность геотеста на получение этих данных о системах характеризуется в свою очередь высоким уровнем "мониторинговости".

Представим геотест в некотором его структурном срезе, при этом оттеним его статические и динамические составляющие:

ГЕОТЕСТ (ОПИСАНИЕ)	
Статическая составляющая	Динамическая составляющая
Эмерджентное свойство	Состояние системы

Таким образом геотест можно представить в виде определенной анкеты для опроса выделенной части геологической среды в интегральном акте этого опроса (статике и динамике). В этом случае

предполагается некоторый комплексный прибор, работающий на поверхности (или в скважине) в режиме замера ряда параметров, выставленных в перечне геотеста. Заполнение геотеста результатами замеров уже является интегральным актом, поскольку все характеристики снимаются в одной точке, т.е. исследуется общая геологическая обстановка точки опроса. Эта сцепленность геолого-геофизических данных в характеристике исследуемого объекта может вскрыть новые ранее не схваченные особенности. Дифференциальное исследование геологических объектов уже насытило "информационный рынок" геологии, и задачи нового поколения в ряде случаев требуют информации нового типа. Коснувшись информационной базы современной геологии, мы тем самым выходим на ее концептуальные основы /16/.

Не будем вдаваться в существующий концептуальный репертуар геологии, а только отметим, что концептуальный состав геологического знания представляет собой информационную среду, в которой закладываются те или иные наборы гипотез. Следуя организационной модели Земли, мы вслед за блоком концептуальной базы располагаем блок "организменных моделей", т.е. предположений и гипотез, уясняющих то или иное геологическое явление с позиций гомеостатичности, кооперативности геологических процессов и явлений.

Естественно, что предположения и гипотезы не могут существовать вне информационного обеспечения, поэтому посредниками между геотестом и блоком гипотез являются два блока производства и обработки информации (см. рис. I). В связи с тем, что гипотезы и предположения должны уточняться и развиваться или отвергаться и вновь создаваться, то от геотеста, как ответственной информационной единицы, мы вправе потребовать:

- а) коррекции на предмет выявления ошибочных фактов и утверждений в репертуаре гипотез;
- б) коррекции на доисследование устоявшихся гипотез и предположений.

Таким образом, между геотестом и точкой роста знаний (выдвижение гипотез, их опровержение и подтверждение) имеется еще и "контроль качества" – проверка гипотез и коррекция прикладных задач. Так появляется информационный контур с прямым и обратным ходом данных, в котором геотест выступает в роли центрального звена наращивания и уточнения знания. Прямым выходом работы это-



го контура является теоретическая и практическая результативность: теоретическая связывается с проверкой и выдвижением новых гипотез и предположений, а практическая – с коррекцией и с управлением прогнозом, поиском и разведкой.

Следует отметить, что генезис геотеста может быть как прямым (непосредственный опрос и получение данных на полигоне); так и косвенным (мобилизация имеющихся сведений по репертуару вопросов заданного геотеста на опрашиваемой территории). Практически все исследования, связанные с мобилизацией, обработкой и анализом данных, по существу представляют собой работу с косвенными геотестами. Например, совокупная характеристика каждого месторождения – косвенный геотест на уровне целого геологического тела. В этом геотесте суммирована информация по геологии, геохимии и геофизике. Но интеграция данных может осуществляться только с позиций геотеста, в котором заложена возможность выявить "организменность" месторождения, т.е. установить его функциональное значение для геологической окрестности в нижнем и верхнем подпространствах. Интеграция данных, таким образом, есть не только простая сумма свойств процесса или тел, но и означает учет взаимодействий этих свойств в период существования исследуемого объекта. Широкое применение и развитие понятия может в итоге вывести геологические исследования в область установления функциональных свойств геообъектов. Знание функционального значения геологических объектов и явлений позволит вести экологический контроль за техногенным воздействием. Видимо в отношении ряда геологических тел потребуется своя "красная книга", для их сохранения в связи с огромным функциональным значением. Этот подход оценки геообъектов является альтернативным к экономической.

Далее дадим более развернутую характеристику геотестов с учетом их начального и конечного применения.

### Априорный геотест

Идея интеграции геологических, геохимических и геофизических данных, воплощаемая в понятии геотест, нацелена на обновление концептуального аппарата геологического знания и на более всесторонний и глубокий режим взаимодействия с ЭВМ. Именно в связи

с необходимостью сопряжения алгоритм-программного обеспечения анализа данных с исходными данными (концептуальными моделями геологических объектов, например, табличное задание объектов и признаков) требуется подразделить геотесты по их роли в исследовательских и производственных процедурах.

В качестве исходного этапа существования геотестов предлагается ввести понятие априорного геотеста.

Постулат 2. Априорный геотест – это список вопросов геотеста, выявляющих статические и динамические составляющие системы, как части геологической среды.

Согласно постулату 2 множество априорных геотестов представляет собой опрос геологической среды соответственно заданному целеуказанию. Самому этапу составления априорных качеств геотестов предшествует этап мобилизации, первичной обработки данных. Формирование и постановка задачи, изложенной в предыдущих работах /3,5/, присутствует на подходе к составлению геотестов как информационная среда, позволяющая в перечень и структуру геотестов ввести вариантность и функциональную нацеленность предлагаемых решений.

Априорный геотест (рис.2) можно представить некоторой блок-схемой, отражающей составные части, необходимые для конструирования геотеста. Результатом мобилизации исходной информации является создание трех массивов данных: геологического, геохимического, геофизического.

Блок "мобилизация информации" связан с общим целеуказанием. Блок, в котором содержится указание на выявление функциональности объекта в геологической среде, связан с репертуаром гипотез. Естественно, также, что целеуказание на верхнем уровне геологического знания взаимодействует с базой гипотез. Поэтому цель так или иначе опирается на имеющуюся гипотезу или требует выдвижения новой, подходящей в контексте изучения. Имеющиеся массивы исходных геологических, геохимических и геофизических данных в условиях коррекции целью и гипотезой образуют внутренний информационный контур (см. рис.2, контур. I).

В зависимости от характера цели и гипотезы общая стратегия отношения к исходным данным может следовать как по направлению дифференциации данных, так и по направлению их интеграции. Существующий широкий класс исследовательских и производственных

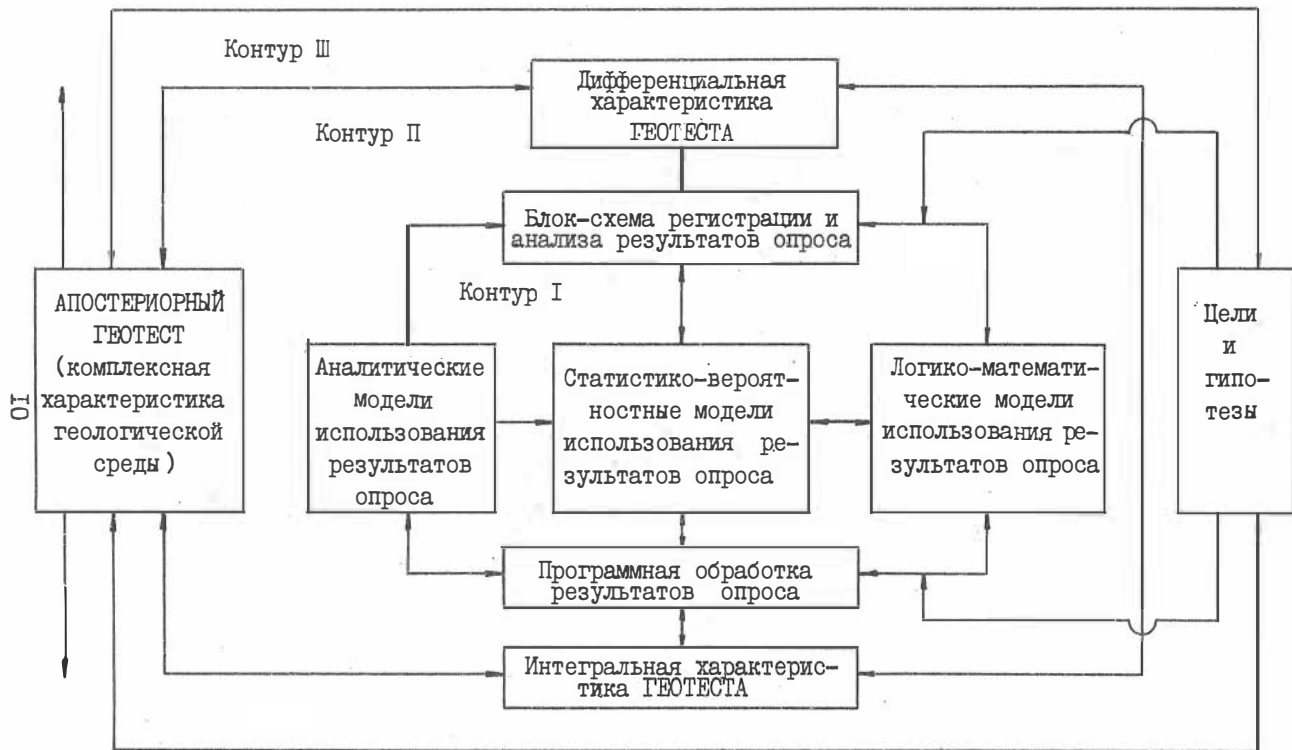


Рис. 2. Блок-схема апостериорного геотеста (результативный геотест)

задач зачастую выливается в задачи с дифференциацией данных. Но появление задач нового поколения, особенно экологоориентированных, требует существенно интегрального подхода в использовании и получении данных.

### Апостериорный геотест

Рост функциональной нагрузки априорного геотеста начинается с получения ответов на вопросы, заданные геологической среде. Причем ответы можно получить как автоматически – путем опроса и получения ответа (например, мониторинг литосферной обстановки по заброшенной скважине), так и традиционными полевыми или камеральными исследованиями. По существу апостериорный геотест – это заполненный априорный.

Постулат 3. Апостериорный геотест – это элементарная информационная единица, заданная совокупностью вопросов априорного геотеста и ответов на них, являющихся результатами первичных измерений.

Следовательно, информационное обогащение геотеста на этапе его апостериорного вида приходит в состояние готовности к применению вычислительных средств в анализе множества геотестов по заданной цели исследования (см. рис.2). Причем на уровне апостериорного геотеста при общей его структуре с априорным появляются математические модели анализа данных по результату опроса. В самом общем виде мы выделяем три основные модели:

А. Аналитическая модель анализа данных, решающие правила которой как бы копируют геологический процесс или явление (процесс рудообразования, нефтенакопления, осадкообразования и др.). Эти модели в основном связываются с экспериментальными задачами при поиске природных аналогов или наоборот, при поиске технического аналога для данного природного геопроцесса.

Б. Статистико-вероятностные модели анализа данных наиболее распространенные и без какой-либо специализации. Этими методами решают (или по крайней мере пытаются решить) все возникающие в геологии задачи, если исходные данные соответствуют требованиям применяемого метода.

В. Логико-математические модели анализа данных имеют свою

специализацию и работают в условиях логической (многокомпонентной) зависимости характеристических признаков. Задачи, решаемые в русле этих моделей, начинаются с задач прогнознo-поискового профиля и заканчиваются решением задач геологической разведки на любой ее стадии.

Предполагается, что множество апостериорных тестов может создать информационную обстановку для решения задач нового поколения, в которых потребуются комплексирование всех блоков анализа данных. В связи с этим предусмотрена общая блок-схема регистрации и анализа результатов опроса геологической среды в автоматическом режиме. Конкретная работа в вычислительной среде должна обеспечиваться программно-алгоритмическим репертуаром, согласно заданным целям анализа данных. Как и в априорном геотесте здесь присутствует блок озадачивания, т.е. набор целей анализа апостериорных геотестов и перечень гипотез как коммутация с геологическими постановками задач.

Множество частных апостериорных геотестов, обработанных согласно заданному целеуказанию, сводится в некий результирующий апостериорный геотест, в котором содержатся ответы на вопросы, заданные геологической среде. Этот обобщенный геотест содержит в себе "портрет" геологического объекта или процесса и выявляет подход к следующему виду геотеста.

### Функциональный геотест

Наращение информации геотеста на апостериорном этапе приводит его к очередному виду существования - эксплуатационному этапу. На данном этапе геотест подчиняется новой среде работы с ним, т.е. находит свое применение вплоть до участия в управляющих системах. Причем это управленческое функционирование геотеста может оказывать влияние на блок целей и гипотез.

Постулат 4. Функциональный геотест - это апостериорный геотест с дополнительной детализацией вопросов и ответов, обусловленной необходимостью прогноза от-

глика на техногенное внесение неисправностей в природные состояния системы<sup>ж)</sup>.

Множество функциональных геотестов может быть использовано для коррекции целеполагания и организации управляющих схем. Процесс перехода апостериорного геотеста в функциональный задается выявлением его пригодности для теоретического или практического применения. Цели и гипотезы в соответствии с их внутренней организацией выбирают и используют апостериорные геотесты.

Банк апостериорных геотестов представляет собой информационную среду, в которой зарождаются целеориентированные программы развития теории или производства. Именно поэтому схема возникновения функционального геотеста (рис.3) содержит в себе в качестве основополагающих три модели: прогноза, поиска и разведки. Как уже было сказано в предыдущих разделах, все виды производственной деятельности могут быть охвачены единой моделью — информационной.

Действительно, результатом любого вида деятельности геологического производства является информация. Несмотря на разнообразие видов сообщений все это информационный материал, поэтому прогноз, поиск и разведку можно решать как информационные задачи. Следовательно, верхний блок, представляющий собой информационную модель видов деятельности, осуществляет поиск, мобилизацию и обработку пригодных для данной цели апостериорных геотестов. Но переток информации по первому контуру блок-схемы функционального геотеста проходит еще и блок модели управления. Этот блок тесно взаимосвязан с информационной моделью и с блоком целей и гипотез, что выводит его во внешний геоконтур. Модель управления, функционирующая в информационной среде реального процесса деятельности, может состыковываться с некоторыми внешними системами управления через блок "цели и гипотезы". Именно в этой агрегации усматриваются дополнительные возможности выхода к решению сложных задач нового поколения геолого-геофизического профиля.

Функциональный геотест в свою очередь может служить некоторой информационной "заготовкой" для применения на следую-

---

<sup>ж)</sup> Отметим, что функциональные геотесты в форме стандартного множества ответов могут тем самым не только характеризовать состояние объекта исследования, но и влиять на селекцию целеуказания (например, строить или не строить ГЭС).

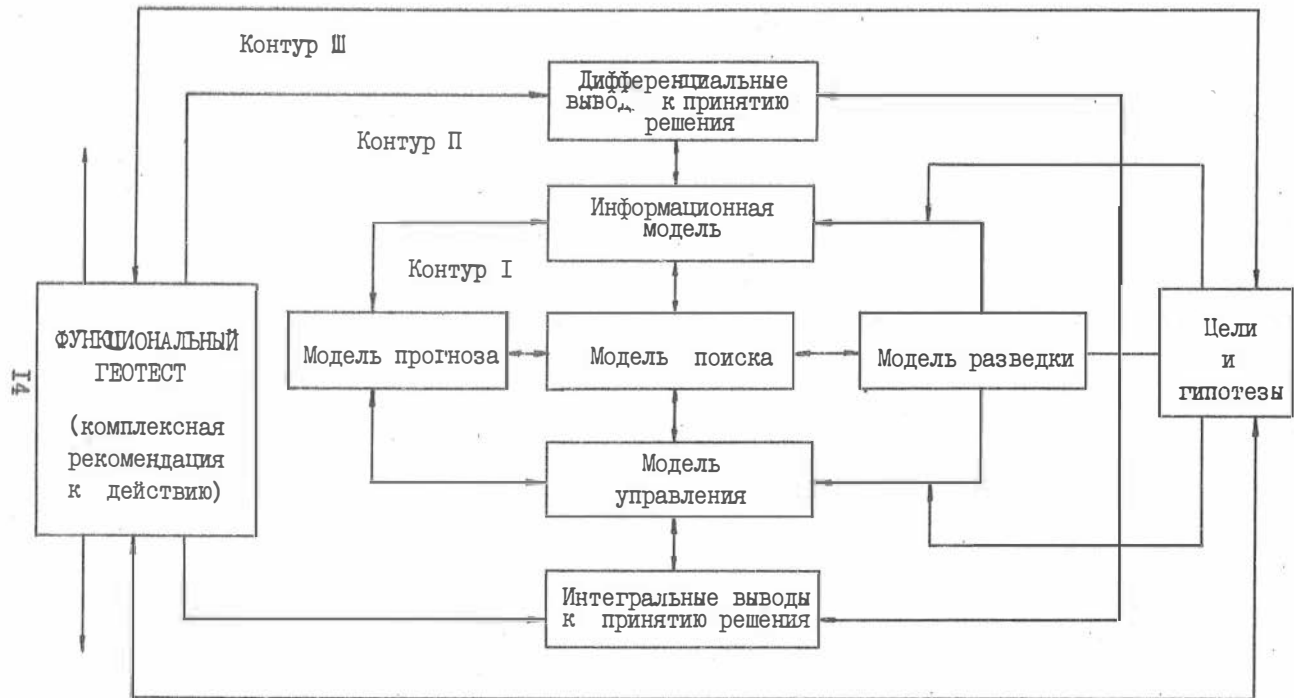


Рис. 3. Блок-схема функционального геотеста (геотест на управление)

щем уровне организации теоретических поисков и прикладных работ. Причем, как и геотесты предыдущих уровней, функциональный геотест имеет две стороны информационной нагрузки – дифференциальную и интегральную.

### Итоговые характеристики

1. Представления о геотесте являются откликом на усложнение задач, подлежащих решению и на повышающиеся возможности автоматических режимов получения и анализа информации. Характер и ритм исследовательских и производственных работ в геологической отрасли знания требует то детальной дифференциации геолого-геофизических данных, то их срочной интеграции. Это не противоречит общему движению развития науки, но требует обязательного и оперативного учета требования сопряженных дифференциации и интеграции данных.

2. Именно поэтому вводимое понятие геотест является многофункциональным, и в самом начале своего возникновения расчленяется на виды. Это расчленение подчинено следующей задаче: отобразить в геотесте этапы наращивания и применения получаемых сведений. В общем геотест охватывает:

- а) опрос геологической среды – вопрос;
- б) ответы по списку вопросов – ответ;
- в) применение ответов в деятельности – использование ответа.

3. Естественно, что понятие геотест наделяется конструктивностью с целью его применения в самых различных и сложных информационных и вычислительных средах. Ведь выход на глобальные планетарные задачи на основе геомониторинга потребует сложных схем решения. Это тем более важно, поскольку текущие фазы техногенного давления на геологическую среду имеют общепланетарное значение, и построение хотя бы грубых прогностических схем для системы "техника – природа" является уже сейчас наиболее актуальной проблемой.

4. Необходимость интеграции геологических, геохимических и геофизических данных вытекает не только из требований широкого прагматизма, но и в связи с началом развития организменной модели Земли. То расчлененное и независимое опраивание геологических



объектов, практикуемое и ныне, должно замениться новым видом опроса, которому присуще выяснение состояния геобъектов. Естественно, что в новом витке опроса Земли должны появиться соответствующие информационные единицы. Ими, на наш взгляд, могут быть (при соответствующей детализации и доработке) геотесты.

Автор искренне благодарит С.Г.Кулагина за стимуляцию внимания к проблеме "Геотеста", а В.О.Красавчикова за критические замечания.

### Литература

1. Вернадский В.И. Философские мысли натуралиста. М.: Наука, 1988. 520 с.

2. Дмитриев А.Н., Журавлев Ю.И., Кренделев Ф.П. О математических принципах классификации предметов и явлений // Дискретный анализ. Вып. 7. Новосибирск, 1966. С. 3-15.

3. Дмитриев А.Н., Кренделев Ф.П., Бишаев А.А. и др. Организация и обработка геологической информации с помощью ЭВМ на основе построения тушиковых тестов // Логико-информационные решения геологических задач. М., 1975. С. 83-128.

4. Дмитриев А.Н., Красавчиков В.О. Процедуры математической обработки описания нефтяных месторождений // Геология и геофизика. 1976. № II. С. 86-96.

5. Дмитриев А.Н. Новые тестовые разработки в задачах прогнозирования рудоносности (на примере трапшových интрузий) // Математические методы при прогнозе рудоносности. М., 1977. С. 104-163.

6. Дмитриев А.Н., Макаров С.В. Об усовершенствовании тестового подхода в задачах диагностики // Логико-математические методы в геологических исследованиях. Новосибирск, 1986. С.6-24.

7. Дмитриев А.Н., Афанасьев С.А. Математические методы и геологоразведка // Геология и геофизика. 1987. № 8. С. 10-18.

8. Дмитриев А.Н. Техногенный вызов Земле // Вест. высш. шк. 1989. № 7. С. 38-44.

9. Логико-математическая обработка геологической информации (программы к ЭВМ для логико-математической обработки геологичес-

кой информации): Оперативно-информационный материал / Дмитриев А.Н., Бабич В.В., Бурова Е.И. и др. Новосибирск: Изд. ИГиГ СО АН СССР, 1975. 189 с.

10. Логико-математическая обработка геологической информации (теория и математический аппарат). Новосибирск: Изд. ИГиГ СО АН СССР, 1976. 152 с.

11. Логико-информационные исследования в геологии (теория и математический аппарат). Новосибирск: Изд. ИГиГ СО АН СССР, 1977. 146 с.

12. Математические методы решения прогнозных задач нефтяной геологии. Новосибирск: Изд. ИГиГ СО АН СССР, 1978. 150 с.

13. Метод согласованных оценок: Методические рекомендации / Дмитриев А.Н., Макаров С.В., Смертин и др. Новосибирск: Изд. ИГиГ СО АН СССР, 1982. 144 с.

14. Программные комплексы для целевой обработки информации: Оперативно-информационный материал / Бабич В.В., Бишаев А.А., Дмитриев А.Н. и др. Новосибирск: Изд. ИГиГ СО АН СССР, 1977. 164 с.

15. Четис И.А., Яблонский С.В. Логические способы контроля работы электрических схем // Тр. Матем. ин-та им. В.А.Стеклова АН СССР. М., 1959. Т.51. С. 270-339.

16. Шарпов И.П. Метагеология. Некоторые проблемы. М.: Наука, 1989. 207 с.

В.О.Красавчиков

## КЛАСТЕР-АНАЛИЗ ПРИ ЗАДАННЫХ НЕОБХОДИМЫХ УСЛОВИЯХ

### § I Введение

При решении классификационных задач в геологии типичной является ситуация, когда исследователь обладает дополнительной информацией, не содержащейся в описаниях объектов заданным набором

признаков, и руководствуется как описаниями, так и выходящими за рамки таблицы "объект-признак" фактами, аксиомами, предположениями. Это связано, не в последнюю очередь, с тем, что таблица "объект-признак", вообще говоря, не позволяет адекватно описывать отношения между объектами. В то же время многие такие отношения можно охарактеризовать средствами математической логики с помощью исчисления предикатов. Очевидна необходимость разработки алгоритмов классификации, результирующие построения которых удовлетворяли бы заданным аксиомам, описывающим взаимосвязь между целевыми отношениями, задающими искомую классификацию, и характеристическими отношениями между объектами. В данной работе эта проблема рассматривается на примере задачи кластер-анализа с дополнительным условием: если объекты  $x$  и  $y$  относятся к одному и тому же кластеру, то выполняется предикат  $\varphi(x, y)$ , т.е.  $\varphi$  задает необходимое условие принадлежности объектов к одному и тому же кластеру. Задачу кластер-анализа будем рассматривать в узкой трактовке как задачу разбиения заданного множества объектов  $M$  или, что то же самое, как задачу определения отношения эквивалентности  $x \sim y$  на  $M$ , удовлетворяющего некоторым дополнительным условиям. Таким образом, речь идет о следующей задаче: на конечном множестве  $M = \{a_1, \dots, a_m\}$  требуется определить отношение эквивалентности  $x \sim y$  таким образом, чтобы для любых  $x, y \in M$  выполнялось условие

$$x \sim y \rightarrow \varphi(x, y), \quad (I)$$

где  $\varphi(x, y)$  - предикат, определенный для всех пар  $(x, y)$  из  $M \times M$ .

В принципе, отношение  $x \sim y$  может оказаться частично определенным; однако для начала рассмотрим случай, когда  $x \sim y$  не определено ни для какой пары  $(x, y)$ . Такая ситуация возникает, например, при моделировании химического состава гранитоидов (см. статью А.Ф.Белюсова и др. наст. сб.).

Рассматриваемая задача всегда имеет решение, поскольку тривиальное разбиение (один объект - один кластер) удовлетворяет условию (I) при любом предикате  $\varphi$ . Однако в содержательном плане тривиальное разбиение не является решением. Как правило, на практике необходимо добиваться как можно меньшего числа классов. С точки зрения содержательной интерпретируемости не менее важно также, чтобы искомое разбиение было регулярно устроено и субъ-

ективизм в определении "классовой принадлежности" объектов был бы минимальным. Если считать, что никакой другой информации кроме заключающейся в выполнении (или невыполнении) условия  $\varphi$ , нет, то интуитивное представление о регулярности строения искомого разбиения может быть уточнено на основе понятия автоморфного разбиения, вводимого во втором параграфе, а в третьем рассмотрено семейство алгоритмов для построения таких разбиений. Это семейство реализует определенное модельное представление о кластеризации, а именно: чем чаще одновременно выполняются условия  $\varphi(x, z)$  и  $\varphi(z, y)$  для объектов  $X$  из множества  $M$ , тем вероятнее отнесение объектов  $x$  и  $y$  к одному и тому же кластеру. Различные уточнения этой нечеткой формулировки приводят к различным мерам близости между объектами  $x$  и  $y$ . При заданной мере близости с помощью некоторого не слишком трудоемкого шагового процесса порождается автоморфное разбиение. Вводится понятие сопряженности разбиения и меры близости, имеющие очевидный содержательный смысл: объекты, относящиеся к одному и тому же кластеру, должны быть более близки между собой, чем относящиеся к различным кластерам. Показано, что пошаговый процесс приводит к минимальному (по числу кластеров) разбиению среди всех разбиений, сопряженных с мерой близости, для которой проводился шаговый процесс. Приведены конкретные примеры "хороших" мер близости, вычисляемых на основе анализа выполнимости предиката  $\varphi$  и имеющих характер эвристик. Установлено, что любое минимальное (в классе автоморфных разбиений) разбиение может быть порождено с помощью описанного шагового процесса при выборе подходящей меры близости.

К сожалению, не всегда шаговый процесс, даже с "хорошей" мерой близости, приводит к нетривиальному разбиению, хотя известные нам примеры такого рода являются довольно искусственными. Эта ситуация во многом аналогична отказу от классифицирования пробы при решении задачи распознавания. В таких случаях целесообразно использовать дополнительные предположения — например, об ожидаемом числе классов. В § 4 рассматривается ситуация, когда заранее известно, что число классов равняется двум. Для этого случая описаны алгоритмы нахождения одного разбиения и перечисления всех разбиений на два класса, удовлет-

ворящих условию (I). Показано, что число всех таких разбиений равняется  $2^{\Theta_0 - 1}$ , где  $\Theta_0$  – некоторое натуральное число, не превосходящее  $m / 2^*$ .

Следует отметить, что рассматриваемый подход, в принципе, применим и в случае, когда предикат  $\varphi(x, y)$  не задан, но есть данные о близости объектов, т.е. имеет место стандартная для кластер-анализа ситуация /2, 3/. Пусть, например, на исходном множестве объектов  $M$  задана мера близости  $\tau(x, y)$ , принимающая значения  $C_1 < C_2 < \dots < C_q$ . Для  $j = 2, \dots, q$  определим предикат  $\varphi_j(x, y)$  следующим образом:  $\varphi_j(x, y)$  истинно, если и только если  $\tau(x, y) \geq C_j$ . Таким образом возникает  $q-1$  вариантов разбиения (не обязательно различных). Для  $j$ -й задачи необходимым условием принадлежности объектов  $x$  и  $y$  к одному и тому же кластеру является то, что их мера близости не менее заданной величины  $C_j$ . Каждая из этих задач решается и затем на основе того или иного функционала качества разбиения среди найденных разбиений выбирается наилучшее (например, состоящее из наименьшего числа классов).

## § 2. Автоморфные разбиения

Как легко видеть, без ограничения общности можно принять, что для любых  $x, y$  из  $M$  выполняется:

- а)  $\varphi(x, y) \leftrightarrow \varphi(y, x)$ ,
- б)  $\varphi(x, x)$ .

Предикат  $\varphi$ , в силу своей симметричности, задает на  $M$  неориентированный граф  $\Gamma_0 = \langle M, G \rangle$ , где  $G_0$  – множество ребер графа  $\Gamma_0$ , следующим образом: вершины  $x$  и  $y$  соединены ребром, если и только если выполняется  $\varphi(x, y)$ . Ясно, что  $\Gamma_0$  – конечный граф без параллельных ребер, причем для любого  $x \in M$  в  $\Gamma_0$  входит петля из  $x$  в  $X$ .

Отношение  $x \sim y$  порождает естественным образом разбиение  $\alpha = (Q_1, \dots, Q_N)$  множества  $M$  на классы смежности. Легко видеть, что если отношение  $x \sim y$  удовлетворяет условию (I), то каждое из

---

\* В предположении, что для любого  $x$  найдется  $y$ , для которых условие  $\varphi(x, y)$  не выполняется.

$Q_1$  является кликой графа  $\Gamma_0$ . Таким образом, приходим к задаче разбиения графа  $\Gamma_0$  на клики, причем любое разбиение графа  $\Gamma_0$  на клики однозначно определяет отношение  $x \sim y$ , удовлетворяющее условию (I).

Переформулируем условие (I) в терминах теории графов. Конечный граф  $\Gamma = \langle V, G \rangle$  где  $V$  — множество вершин,  $V \neq \emptyset$ , а  $G$  — множество ребер графа  $\Gamma$ , будет называться допустимым, если он не имеет параллельных ребер и для любого  $x \in V$  в число ребер входит петля из  $x$  в  $x$ . Для допустимого графа  $\Gamma$  можно отождествлять ребра с неупорядоченными парами  $\{x, y\}$  его вершин.

Следует отметить, что клика как модель кластера неоднократно рассматривалась в литературе [1, 3, 5]. Новыми элементами в данной работе являются: ограничения на класс результирующих разбиений (требование сохранения автоморфизмов графа); алгоритмы построения автоморфных разбиений; меры близости между вершинами графа, ранее не встречавшиеся в литературе. Появление этих элементов обусловлено спецификой задачи отыскания кластеризации, удовлетворяющей заданным аксиомам.

Определение I. Отношение эквивалентности  $x \sim y$  заданное на множестве вершин допустимого графа  $\Gamma = \langle V, G \rangle$ , называется допустимым, если для любых  $u, v \in V$

$$u \sim v \rightarrow \{u, v\} \in G.$$

Пусть  $x \sim y$  — допустимое отношение эквивалентности, заданное на множестве вершин допустимого графа  $\Gamma$ . Через  $[x]$  обозначим множество вершин  $y$  графа  $\Gamma$ , таких, что  $x \sim y$ . Разбиение множества  $V$  на фактор-классы по отношению  $x \sim y$  будем также называть разбиением, порождаемым отношением эквивалентности  $x \sim y$ .

Пусть  $A(\Gamma_0)$  множество всех разбиений, порождаемых отношениями эквивалентности, удовлетворяющими (I). На  $A(\Gamma_0)$  можно определить естественный частичный порядок: для  $\alpha, \beta \in A(\Gamma_0)$ , где  $\alpha = (Q_1, \dots, Q_N)$ ,  $\beta = (P_1, \dots, P_s)$ ,  $\alpha \leq \beta$ , если и только если для любого  $P_i, i = 1, \dots, s$  найдется  $Q_j, j = 1, \dots, N$  такое, что  $P_i \equiv Q_j$ . В этом случае имеется единственный максимальный элемент — тривиальное разбиение  $\alpha_0 = \{\{a_1\}, \{a_2\}, \dots, \{a_m\}\}$ , т.е.  $A(\Gamma_0) \neq \emptyset$ .

Из практических соображений наибольший интерес представляют минимальные элементы  $A(\Gamma_0)$ . Однако их может оказаться очень

много, что затруднит выбор отношения, необходимого для решения конкретной задачи. Если нет полезной информации для выбора разбиения, кроме вложенной в задание предиката  $\varphi$ , то представляется целесообразным ввести некоторые естественные ограничения на класс отыскиваемых отношений эквивалентности, задаваемые определениями 2 и 3.

**Определение 2.** Отношение эквивалентности  $x \sim y$  заданное на множестве вершин допустимого графа  $\Gamma = \langle V, G \rangle$ , называется автоморфным, если для любого автоморфизма  $g$  графа  $\Gamma$  и любых  $x, y \in V$

$$x \sim y \longrightarrow g(x) \sim g(y).$$

Пусть для  $x \in V$   $S_x = \{y \mid \{x, y\} \in G\}$ , иначе говоря,  $S_x$  - окрестность вершины  $x$  графа  $\Gamma$ . Для допустимого графа  $\Gamma$ , как легко видеть,  $x \in S_x$ . Для графа  $\Gamma_0$  равенство  $S_u = S_v$  влечет за собой истинность  $\varphi(u, v)$ .

Разбиение множества  $V$ , порождаемое автоморфным отношением эквивалентности, будем называть автоморфным разбиением. Совокупность всех автоморфных разбиений множества вершин графа  $\Gamma$  обозначим через  $\widehat{\text{Aut}}(\Gamma)$ .

**Определение 3.** Отношение эквивалентности  $x \sim y$ , заданное на множестве вершин допустимого графа  $\Gamma = \langle V, G \rangle$ , называется нормальным, если для любых  $u, v \in V$

$$S_u = S_v \longrightarrow u \sim v.$$

Разбиение, порождаемое нормальным отношением эквивалентности, также будем называть нормальным.

По существу, условие нормальности разбиения совпадает с условием неделимости ядер при любом "разумном" алгоритме кластеризации /1, с. 352/.

На множестве  $\widehat{\text{Aut}}(\Gamma)$  точно также, как и для  $A(\Gamma_0)$ , зададим отношение частичного порядка

**Т е о р е м а.** Всякий минимальный элемент  $\alpha$  множества  $\widehat{\text{Aut}}(\Gamma)$ , является нормальным разбиением.

**Д о к а з а т е л ь с т в о.** Заметим, что если  $x \sim y$  - допустимое автоморфное отношение эквивалентности на  $V$  и  $S_u = S_v$  то либо  $u \sim v$ , либо  $[u] = \{u\}$ ,  $[v] = \{v\}$ . Действительно, пусть  $[u] \neq \{u\}$ ,  $z \neq u$ ,  $z \in [u]$ . Тогда, так как  $z \sim u$ ,  $z \in S_u$  и значит  $z \in S_v$ . Определим  $g_0$  следующим образом:  $g_0(u) = v$ ,  $g_0(v) = u$ ,  $g_0(x) = x$  для  $x \in V$ , не равных  $u, v$ . Отображение  $g_0$  является автоморфизмом в силу того, что  $S_u = S_v$ . Поскольку  $z \sim u$  имеем  $g_0(z) \sim g_0(u)$ , т.е.

$z \sim v$ . Если  $z = v$ , то  $u \sim v$ . Если  $z \neq v$ , имеем:  $u \sim z, z \sim v$ , откуда в силу транзитивности отношения эквивалентности получаем, что  $u \sim v$ .

Пусть  $B = \{u \in V \mid A(u) \neq [u]\} = \{v_1, \dots, v_N\} \neq \emptyset$ . В силу вышесказанного для любого  $u \in B$  имеет место  $A(u) \subseteq B$ , и, значит,  $N > 1$ . Положим  $u_1 = v_1, B_1 = B, B_2 = B/A(u_1)$ . Если  $B_2 \neq \emptyset$ , положим  $u_2 = v_{j_2}$ , где  $v_{j_2}$  — элемент множества  $B$ , имеющий наименьший номер в последовательности  $v_1, \dots, v_N$  среди вошедших в  $B_2$ . Продолжая аналогичным образом, получим последовательность  $u_1, \dots, u_q$ , где  $q < N$ , элементов множества  $B$ , удовлетворяющую следующим условиям:  $u_i \neq u_j, A(u_i) \cap A(u_j) = \emptyset$  при  $i \neq j$  и  $\bigcup_{i=1}^q A(u_i) = B$ . Как легко видеть, разбиение  $\alpha$  можно записать в виде  $\alpha = \{A_1, \dots, A_K, \{v_1\}, \dots, \{v_N\}\}$ . Рассмотрим разбиение  $\beta = \{A_1, \dots, A_K, A(u_1), \dots, A(u_q)\}$ . Из сказанного выше с очевидностью вытекает, что  $\beta \leq \alpha$  и  $\beta \neq \alpha$ . Покажем, что  $\beta$  — автоморфное разбиение. Пусть  $z \sim w$ , где  $x \sim y$  — отношение эквивалентности, порождающее  $\beta$ . Если  $z, w \notin B$ , то  $z \sim w$  по определению отношения  $x \sim y$ , что равносильно  $g(z) \sim g(w)$ . При  $g(z), g(w) \notin B$  это равносильно  $g(z) \sim g(w)$ . При  $g(z), g(w) \in B$  получаем, что  $z = w$ , так как  $[z] = \{z\}, [w] = \{w\}$ , и, значит,  $g(z) \sim g(w)$ . Пусть  $g(z) \in B, g(w) \notin B$ . Тогда  $[g(z)] = \{g(z)\}$ , откуда  $g(z) = g(w)$ , что, очевидным образом, невозможно.

Пусть теперь  $z, w \in B$  и  $z \sim w$ . Тогда существует  $u \in B$  такое, что  $z \in A(u), w \in A(u)$ , откуда  $S_z = S_u = S_w$ . Отсюда  $S_{g(z)} = S_{g(w)}$ . Если  $g(z) \in B$ , то и  $g(w) \in B$ , откуда очевидным образом  $g(w) \sim g(z)$ .

Если  $g(z) \notin B$ , то и  $g(w) \notin B$ . Так как  $g(z) \notin B, A(g(z)) \subseteq [g(z)]$ . Но  $g(w) \in A(g(z))$ , значит,  $g(w) \sim g(z)$  и по определению отношения  $x \sim y$  получаем  $g(w) \sim g(z)$ . Наконец, для любых  $z \in B$  и  $w \notin B$  неверно, что  $z \sim w$ . Теорема доказана.

### § 3. Шаговый процесс построения автоморфных разбиений

В соответствии с работой В.Н.Вагина /1/ взвешенным отношением назовем весовую функцию  $R: V \times V \rightarrow W$ , где  $V$  — множество вершин графа  $\Gamma$ , а  $W$  — множество весов.  $R$  симметрично, если  $R(x_1, x_2) = R(x_2, x_1)$  для всех  $x_1, x_2 \in V$ . Будем считать, что  $W$  ли-



нейно упорядочено и имеет наибольший и наименьший элементы, обозначаемые соответственно  $I$  и  $\omega$ .  $R$  рефлексивно, если  $R(x,x)=I$  для всех  $x \in V$ . Симметричные и рефлексивные взвешенные отношения называются отношениями сходства. В настоящей работе отношения сходства понимаются в более узком смысле - в дополнение к сказанному требуется выполнение еще двух условий:

$$R(x,y) = I \iff S_x = S_y, \quad (2)$$

$$R(x,y) = \omega \iff \{x,y\} \notin G. \quad (3)$$

Если  $w = [0,1]$ , то  $R$  будем называть также мерой сходства. Заданное на множестве вершин допустимого графа  $\Gamma$  взвешенное отношение  $R$  будем называть автоморфным, если для любых  $x,y \in V$  и любого автоморфизма  $g$  графа  $\Gamma$

$$R(x,y) = R(g(x), g(y)). \quad (4)$$

Пример I. Пусть  $w = [0,1]$ . Условиям (2), (3), (4) удовлетворяют меры сходства:

$$a) R^*(x,y) = \begin{cases} |S_x \cap S_y| / |S_x \cup S_y| & \text{при } \{x,y\} \in G; \\ 0 & \text{при } \{x,y\} \notin G \end{cases}$$

б) пусть  $k(x,y)$  - максимум мощностей клик  $K$ , для которых  $x \in K$  и  $y \in K$ . Тогда

$$R(x,y) = \begin{cases} k(x,y) / |S_x \cup S_y|, & \text{если } \{x,y\} \in G \text{ и } S_x \neq S_y; \\ 0 & \text{при } \{x,y\} \notin G \\ 1 & \text{при } S_x = S_y. \end{cases}$$

$$в) R(x,y) = \begin{cases} k(x,y) / v, & \text{если } \{x,y\} \in G \text{ и } S_x \neq S_y; \\ 0 & \text{при } \{x,y\} \notin G; \\ 1 & \text{при } S_x = S_y. \end{cases}$$

Все эти меры учитывают информацию об окрестностях первого порядка точек  $x,y$ . Нетрудно привести примеры мер, для вычисления которых потребуется проанализировать окрестности более высоких порядков.

Определение 4. Кластером допустимого графа  $\Gamma$  называется любая его компонента связности, являющаяся кликой.

Опишем пошаговый процесс построения допустимого разбиения по заданному отношению сходства.

Пусть допустимый граф  $\Gamma$  не является полным и  $R(x,y)$  принимает значения  $w_0 = \omega$ ,  $w_1, \dots, w_N = I$ . Построим последователь-

льность графов  $\Gamma_0, \Gamma_1, \Gamma_2, \dots, \Gamma_{N^*}$ , где  $N^* \leq N$ , следующим образом.

Шаг 1. Полагаем  $\Gamma_0 = \Gamma, V_0 = V, G_0 = G$ . Находим все кластеры графа  $\Gamma_0$  и элементы множества  $A_0$  вершин графа  $\Gamma$ , не вошедших в кластеры графа  $\Gamma_0$ . Полагаем  $i = 0$ .

Шаг 2. Если  $\bigcap_{k=0}^i A_k = \emptyset$ , то СТОП. В противном случае  $i := i + 1$ , переход к шагу 3.

Шаг 3.  $\Gamma_i = \langle V_i, G_i \rangle$ , где  $V_i = \bigcap_{k=0}^{i-1} A_k$ ; в  $G_i$  входят ребра  $\{x, y\}$  исходного графа  $\Gamma$ , соединяющие вершины из  $V_i$  и такие, что  $R(x, y) \geq w_i$ . Находим все кластеры графа  $\Gamma_i$  и элементы множества  $A_i$  вершин графа  $\Gamma_i$ , не вошедших в кластеры графа  $\Gamma_i$ .

Шаг 4. Переход к шагу 2.

Кластером уровня  $i$  назовем любой кластер графа  $\Gamma_i$ .

Пример 2.

1. Для меры  $R^*$  и графа, представленного на рис. 1а, описанный шаговый процесс завершится на первом шаге построением двух кластеров (рис. 1б). Полученное разбиение, очевидным образом, минимально.

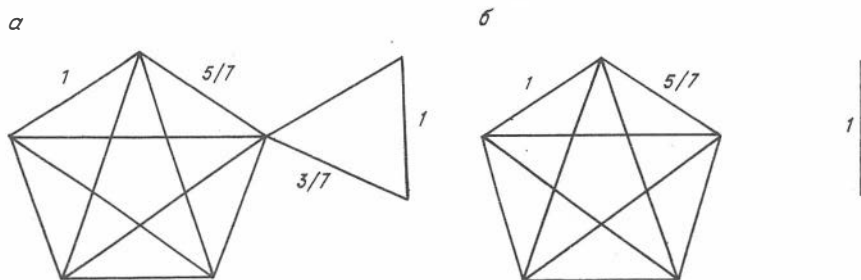


Рис. 1. Граф  $(\Gamma)$  с приписанными ребрам значениями  $R^*$  (а); результирующее разбиение шагового процесса (б).

2. Шаговый процесс для меры  $R^*$  использован при выделении популяций гранитоидов (см. статью А.Ф.Белюсова и др. в наст. сб.).

Л е м м а I. Если  $i < j$ , то  $V_j \subseteq V_i, G_j \subseteq G_i$ .

Д о к а з а т е л ь с т в о: очевидное.

**Лемма 2.** Для любого  $v \in V$  существует  $j$ ,  $0 \leq j \leq N$  и кластер  $K$  уровня  $j$ , такой, что  $v \in K$ .

**Доказательство:** от противного. Пусть  $v$  не принадлежит ни к какому кластеру графа  $\Gamma_i$  для любого  $i = 0, \dots, N$ . В силу сделанного предположения  $N^* = N$  и  $v \in V_N$ . Пусть  $K = \{u | R(u, v) = I\}$ . Если  $|K| = 1$ , то  $K$  - кластер графа  $\Gamma_N$ , что противоречит сделанному предположению. Пусть  $|K| > 1$ . Заметим, что если  $v \in V_N$  и  $R(u, v) = I$ , то и  $u \in V_N$ , поскольку, во-первых,  $u$  и  $v$  - смежные вершины графа  $\Gamma$ ; во-вторых, если  $u$  входит в тот или иной кластер уровня  $i$ , то и  $v$  входит в этот же кластер (так как  $v \in V_i$  для любого  $i = 1, \dots, N$  и ребро, соединяющее  $u$  и  $v$ , входит в  $G_i$ ). Таким образом,  $K \subseteq V_N$ . Заметим, что в силу условия (2)  $R(u, v) = I$  в том и только в том случае, когда  $S_u = S_v$  и если  $S_v = S_u$  и  $S_v = S_w$ , то  $S_u = S_w$ . Поэтому для любых  $u, w \in K$  имеет место  $R(u, w) = I$ , а ребра графа  $\Gamma$ , соединяющие вершины, входящие в  $K$ , являются и ребрами графа  $\Gamma_N$ . Отсюда получаем, что  $K$  - клика графа  $\Gamma_N$ . Пусть  $z$  - вершина графа  $\Gamma_N$ , смежная вершине  $w \in K$ . Тогда  $R(w, z) = I$ , т.е.  $S_w = S_z$  и, значит,  $S_v = S_z$  и, таким образом,  $R(v, z) = I$ . Тем самым  $z \in K$  и, значит,  $K$  - компонента связности  $u$ , как уже ранее было установлено, клика графа  $\Gamma_N$ . Следовательно,  $v$  является элементом кластера графа  $\Gamma_N$ . Приходим к противоречию. Лемма доказана.

**Лемма 3.** Если  $K$  - кластер уровня  $i$  и  $K'$  - кластер уровня  $i'$ , причем  $K \neq K'$ , то  $K \cap K' = \emptyset$ .

**Доказательство:** Если  $i = i'$ , то положим для определенности, что  $i < i'$ . По определению графа  $\Gamma_{i'}$  имеем  $K \cap V_{i'} = \emptyset$ , откуда  $K \cap K' = \emptyset$ . Если  $i = i'$ , то, поскольку  $K \neq K'$  и  $K, K'$  - компоненты связности графа  $\Gamma_i$ , получаем, что  $K \cap K' = \emptyset$ , что и требовалось доказать.

Таким образом, совокупность кластеров всех уровней является разбиением множества  $V$ .

**Определение 5.** Заданное на множестве вершин допустимого графа  $\Gamma$  допустимое отношение эквивалентности  $x \sim y$  называется сопряженным с  $\Gamma$  и заданным на  $V$  взвешенным отношением сходства  $R(x, y)$ , если для любых  $x, u, v, w \in V$  выполняется условие  $(u \in [x] \& v \in [x] \& w \notin [x]) \rightarrow (R(x, u) > R(v, w))$ .

Пусть  $x \overset{\sim}{R} y$  - отношение, заданное следующим образом:  $x \overset{\sim}{R} y$ , если и только если существует  $i$ ,  $0 \leq i \leq N$  и кластер  $K$  уровня  $i$  такие, что  $x \in K$  и  $y \in K$ . Так как совокупность кластеров всех уровней - разбиение,  $x \overset{\sim}{R} y$  - отношение эквивалентности, причем как легко видеть, допустимое. Вместо  $x \overset{\sim}{R} y$  будем, когда это не приводит к недоразумениям, писать просто  $x \sim y$ .

**Л е м м а 4.** Отношение  $x \overset{\sim}{R} y$  является сопряженным с графом  $\Gamma$  и взвешенным отношением  $R$ .

**Д о к а з а т е л ь с т в о.** Пусть  $x \in V$ ,  $u \in [x]$ ,  $v \in [x]$ ,  $w \notin [x]$ . Тогда существует  $i$ ,  $0 \leq i \leq N$  и кластер  $K$  уровня  $i$  такой, что  $u, v, x \in K$ ,  $w \notin K$ . Отсюда  $u, v, x$  - смежные вершины графа  $\Gamma$  и, значит,  $R(x, u) = \lambda > \omega$ ,  $\lambda \geq w_i$ . Если  $v$  и  $w$  - несмежные вершины графа  $\Gamma$ , то  $R(v, w) = \omega$  и лемма доказана. Если  $v$  и  $w$  - смежные, то  $i \neq 0$ . Пусть  $R(v, w) \geq w_i$ . Тогда  $w \notin V_i$ , иначе приходим к противоречию с условием  $w \notin K$ . Таким образом,  $w$  принадлежит некоторому кластеру  $K'$  уровня  $i' < i$ . Далее,  $v \in V_i$  (так как  $v \in V_i$  и в силу леммы 1) и вершины  $v, w$  в графе  $\Gamma_{i'}$  - смежные, откуда  $v \in K'$ , что противоречит условию  $v \in K$ . Тем самым получаем, что  $R(x, u) \geq w_i > R(v, w)$ . Лемма доказана.

**Л е м м а 5.** Пусть  $x$  - клика графа  $\Gamma$ ,

$$w_i = \min_{x, y \in X} R(x, y) > \omega$$

и  $K$  - кластер уровня  $j \leq i$ . Тогда  $x \subseteq K$ , либо  $x \cap K = \emptyset$ .

**Д о к а з а т е л ь с т в о:** от противного. Пусть  $x \cap K \neq \emptyset$ ,  $k$  - кластер уровня  $j \leq i$  и  $z \in x$ , но  $z \notin K$ . Если  $z \in V_i$ , то  $z \in V_j$ , так как  $V_i \subseteq V_j$  и для некоторого  $v \in x \cap K$  имеет место  $R(v, z) \geq w_i \geq w_j$ , т.е. вершины  $v$  и  $z$  - смежные в графе  $\Gamma_j$ , т.е.  $K$  не является компонентой связности графа  $\Gamma_j$ , что противоречит определению  $K$ . Стало быть  $z \in K'$ , где  $K'$  - кластер уровня  $r < i$ . Положим  $h = \min(r, j)$ . Тогда  $v \in V_h$  и  $z \in V_h$ ,  $h \leq i$ , а поскольку  $R(v, z) \geq w_i \geq w_h$ , то вершины  $v$  и  $z$  - смежные в графе  $\Gamma_h$ . Если  $h = r$ , то, таким образом,  $v$  и  $z$  входят в  $K'$ , если же  $h = j$ , то  $v$  и  $z$  входят в  $K$  в силу определения кластера. Полученное противоречие и доказывает лемму.

**Л е м м а 6.** Пусть  $D(R) \neq \emptyset$  - совокупность всех разбиений множества  $V$ , порождаемых сопряженными со взвешенным отношением

сходства  $R$  нетривиальными допустимыми отношениями эквивалентности. Тогда в  $D(R)$  существует единственный минимальный элемент — разбиение, порождаемое отношением  $x \underset{R}{\sim} y$ .

**Доказательство.** Пусть  $\alpha \in D(R)$ ,  $\alpha = (Q_1, Q_2, \dots, Q_M)$ . Обозначим

$$w_{j(i)} = \min_{x, y \in Q_i} R(x, y), \quad i = 1, \dots, M$$

Очевидно, что  $j(i) > 0$  в силу допустимости порождающего  $\alpha$  отношения эквивалентности. Так как  $Q_i$  — клика графа  $\Gamma$ , по лемме 5 для любого кластера  $K^*$  уровня  $h \leq j(i)$  либо  $Q_i \subseteq K^*$ , либо  $Q_i \cap K^* = \emptyset$ . Если всегда  $Q \subseteq K^*$  для некоторого  $K^*$ , лемма доказана. Пусть для некоторого  $i_0$  и любого  $K^*$  уровня  $h \leq j(i_0)$  имеет место  $Q_{i_0} \cap K^* = \emptyset$ . Тогда во всяком случае  $Q_{i_0} \subseteq V_{j(i_0)}$ . Из условия сопряженности разбиения  $\alpha$  вытекает, что для любых  $x, z \in V$  таких, что  $x \in Q_{i_0}$ ,  $z \in Q_{i_0}$  имеет место  $R(x, z) < w_{j(i_0)}$ . Это значит, что в графе  $\Gamma_{j(i_0)}$  множество вершин  $Q_{i_0}$  является кликой и компонентой связности, т.е.  $Q_{i_0}$  — кластер уровня  $j(i_0)$ . Лемма доказана.

**Лемма 7.** Пусть  $R$  — автоморфное взвешенное отношение сходства. Тогда  $x \underset{R}{\sim} y$  — автоморфное отношение эквивалентности.

**Доказательство.** Пусть  $x \underset{R}{\sim} y$ . Тогда существует  $j$  такое, что  $x, y \in K$ , где  $K$  — кластер уровня  $j$ . Для любого автоморфизма  $g$  графа  $\Gamma$  множество  $K' = g[K]$  — клика графа  $\Gamma$ , причем  $u, v \in g[K] \Rightarrow R(u, v) = w_h \geq w_j$  в силу автоморфности  $R$ . По лемме 5 либо  $g[K] \subseteq K''$ , где  $K''$  — кластер уровня  $r \leq h$  (и тогда  $g(x) \sim g(y)$ ), либо  $g[K] \subseteq V_h \subseteq V_j$ . Таким образом,  $K'$  — клика графа  $\Gamma_j$ . Если  $z \notin K'$ ,  $u \in K'$ , а  $x_1, x_2$  таковы, что  $x_1 \in K$ ,  $g(x_1) = u$ ,  $g(x_2) = z$ , то  $R(u, z) = R(g(x_1), g(x_2)) = R(x_1, x_2)$ . Но  $x_2 \notin K$ , иначе (так как  $g(x_2) = z$ )  $z \in K'$ . Поэтому  $R(x_1, x_2) < w_j$ , так как  $K$  — кластер уровня  $j$  и  $x_2 \notin K$ . Отсюда  $R(u, z) < w_j$ . Тем самым показано, что  $g[K]$  — кластер уровня  $j$  и, значит,  $g(x) \sim g(y)$ . Лемма доказана.

**Теорема 8.** Пусть  $\alpha$  минимальное допустимое автомор-

нное разбиение<sup>\*</sup>), причем нетривиальное. Тогда для любых вещественных  $c, d$ , где  $1 > c > d > 0$ , существует автоморфное отношение сходства  $R$ , принимающее значения на множестве  $\{0, d, c, 1\}$  и такое, что:

- а)  $\alpha$  является сопряженным с  $\sim R$ ;
- б)  $\alpha$  порождается автоморфным отношением эквивалентности  $x \sim_R y$ .

**Доказательство.** Пусть  $x \sim y$  — отношение эквивалентности, порождающее разбиение  $\alpha$ . Определим меру  $R(x, y)$  следующим образом:

- 1) для пар  $u, v$  таких, что  $S_u = S_v$ , полагаем  $R(x, y) = 1$ ;
- 2) если  $S_u \neq S_v$ , но  $u \sim v$ , полагаем  $R(u, v) = c$ , где  $0 < c < 1$ ;
- 3) если  $u$  и  $v$  — смежные, но  $u$  не эквивалентно  $v$ , то  $R(u, v) = d$ , где  $0 < d < c < 1$ ;
- 4) если  $u$  и  $v$  — несмежные, то  $R(u, v) = 0$ .

Покажем, что  $R(x, y)$  — автоморфная мера. Установим сначала, что для любых  $x, y \in V$  и автоморфизма  $g$  графа  $\Gamma$  имеет место равенство  $R(g(x), g(y)) = R(x, y)$ .

I. При  $R(x, y) = 1$  имеем  $S_x = S_y$ . Легко видеть, что в данном случае  $S_{g(x)} = S_{g(y)}$ , поэтому и  $R(g(x), g(y)) = 1$ .

II.  $R(x, y) = c$ . В этом случае  $S_x \neq S_y$ , но  $x \sim y$ . Так как  $x \sim y$ , то  $g(x) \sim g(y)$ . С другой стороны, поскольку  $S_x \neq S_y$ , получаем, что  $S_{g(x)} \neq S_{g(y)}$ . Поэтому  $R(g(x), g(y)) = c$ .

III.  $R(x, y) = d$ . В этом случае  $x$  не эквивалентно  $y$ , и  $u, v$  — смежные. Значит  $g(x)$  и  $g(y)$  также не эквивалентны, но являются смежными вершинами графа  $\Gamma$ . Поэтому  $R(g(x), g(y)) = d$ .

IV.  $R(x, y) = 0$ , т.е.  $x$  и  $y$  — несмежные, значит и  $g(x)$  и  $g(y)$  — несмежные, откуда  $R(g(x), g(y)) = 0$ .

Таким образом, мы показали, что  $R(x, y)$  — автоморфная мера.

Заметим, что  $\alpha$  является сопряженным с  $R$ : если  $u, v, w \in Q_1$ , где  $\alpha = (Q_1, \dots, Q_M)$  и  $z \notin Q_1$ , то  $R(u, v) \geq c$ ; значение  $R(w, z)$  не может быть равным  $c$ , причем, если  $R(w, z) = 1$ , то  $S_w = S_z$ . По теореме о нормальности (см. § 2) в силу минимальности  $\alpha$  имеем  $w \sim z$ , что противоречит сделанному допущению относительно  $w$  и  $z$ . Стало быть,  $R(w, z) \leq d$ , откуда  $R(u, v) > R(w, z)$ .

Таким образом  $\alpha \in D(R)$ , где  $D(R)$  — совокупность всех раз-

<sup>\*</sup> Т.е. минимальное в  $\widehat{\text{Aut}}(\Gamma)$ .

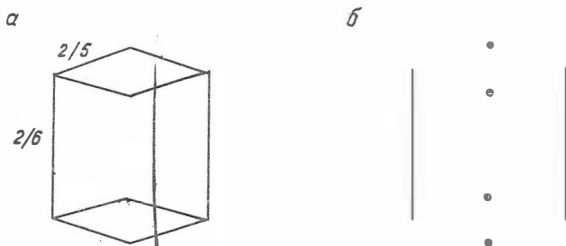


Рис. 2. Исходный граф  $\Gamma$  и значения  $R^{\alpha}$  (а); нетривиальное автоморфное разбиение (б)

биений множества  $V$ , порождаемых сопряженными с  $R$  нетривиальными отношениями эквивалентности. По лемме 6 в  $D(R)$  существует единственный минимальный элемент – разбиение, порождаемое отношением  $x \dot{\sim}_R y$ . В силу минимальности  $\alpha$  получаем, что  $\alpha$  совпадает с разбиением, порождаемым  $x \dot{\sim}_R y$ , а по лемме 7 отношение  $x \dot{\sim}_R y$  автоморфно. Теорема доказана.

Пример 3. Разбиение, порождаемое отношением эквивалентности  $x \dot{\sim}_R^* y$ , является тривиальным; тем не менее нетривиальное автоморфное разбиение существует (рис. 2).

#### § 4. Случай двух классов

Пусть заранее известно, что число классов два и, следовательно, существует разбиение множества вершин графа  $\Gamma$  на два подмножества, каждое из которых является кликой. Будем считать, что граф  $\Gamma$  не является полным, поэтому найдутся несмежные вершины  $u_1, w_1, u_1 \neq w_1$ . В силу сказанного, любая пара несмежных вершин – минимальное доминирующее и максимальное независимое множество  $/4/$ .

Вершину  $u$ , смежную с каждой вершиной графа  $\Gamma$ , будем для краткости называть дефектной. Помытно, что добавление или, наоборот, изъятие дефектных вершин, которые все равно невозможно никаким разумным образом отнести к какому-то классу, не влияет на существование разбиения на две клики. Поэтому ограничимся рас-

смотрением случая, когда граф  $\Gamma$  не содержит дефектных вершин. Покажем, каким образом можно:

- а) найти одно разбиение на две клики;
- б) перечислить все такие разбиения.

Положим  $P(1) = \{u_1\}$ ,  $Q(1) = \{w_1\}$ . Пусть для  $j \leq k$  множества вершин  $P(j)$ ,  $Q(j)$  построены. Тогда  $P(k) = P(k-1) \cup N(k)$ , где  $N(k)$  — совокупность вершин графа  $\Gamma$ , не смежных хотя бы с одной из вершин, входящих в  $Q(k-1)$  и  $Q(k) = Q(k-1) \cup L(k)$ , где  $L(k)$  — совокупность вершин, не смежных хотя бы с одной из вершин, входящих в  $P(k-1)$ .

**Л е м м а 1.**  $P(j) \subseteq P(j+1)$ ,  $Q(j) \subseteq Q(j+1)$  для любого  $j = 1, 2, \dots$ .

**Д о к а з а т е л ь с т в о:** очевидное.

**Л е м м а 2.** Пусть  $R_1, R_2$  — клики графа  $\Gamma$  такие, что  $u_1 \in R_1, w_1 \in R_2, R_1 \cap R_2 = \emptyset, R_1 \cup R_2 = V$ . Тогда  $P(j) \subseteq R_1, Q(j) \subseteq R_2, j = 1, 2, \dots$ .

**Д о к а з а т е л ь с т в о:** по индукции  $P(1) \subseteq R_1, Q(1) \subseteq R_2$  по условию леммы. Пусть для всех  $j \leq k$  доказываемое утверждение справедливо и  $z \in P(k)$ . Если  $z \in P(k-1)$ , то  $z \in R_1$ . При  $z \notin P(k-1)$  существует  $v \in Q(k-1)$  несмежная с  $z$ . Но по предположению индукции  $Q(k-1) \subseteq R_2$ , а так как  $R_2$  — клика, получаем, что  $z \notin R_2$ , т.е.  $z \in R_1$ . Тем самым доказано, что  $P(k) \subseteq R_1$ . Аналогичным образом устанавливается включение  $Q(k) \subseteq R_2$ , что и доказывает лемму.

Пусть  $\zeta_0$  — наименьшее  $k$ , при котором  $P(k+1) = P(k)$ ,  $Q(k+1) = Q(k)$ . Обозначим  $A_1^{(0)} = P(\zeta_0), A_1^{(1)} = Q(\zeta_0)$ . Пусть для  $j \leq k$  множества  $A_j^{(0)}, A_j^{(1)}$  построены,  $A_j^{(0)} \neq \emptyset, A_j^{(1)} \neq \emptyset$ . Положим  $V_k = V \setminus \left( \bigcup_{j=1}^{k-1} (A_j^{(0)} \cup A_j^{(1)}) \right)$ . Если подграф  $\Gamma_k$  с множеством вершин  $V_k$  — полный, то полагаем  $A_k^{(0)} = V_k, A_k^{(1)} = \emptyset$  и на этом процесс построения множеств  $A_j^{(\alpha)}$ , где  $\alpha = 0, 1$ , закончен. Если  $\Gamma_k$  не является полным, то в нем найдутся две несмежные вершины  $u_k$  и  $w_k$ . Для графа  $\Gamma_k$ , вершин  $u_k$  и  $w_k$  построим множества вершин  $P(\zeta_0)$  и  $Q(\zeta_0)$ , где  $\zeta_0 = \zeta_0(\Gamma_k, u_k, w_k)$ . Полагаем  $A_k^{(0)} = P(\zeta_0), A_k^{(1)} = Q(\zeta_0)$ . В результате получаем семейство  $A_j^{(\alpha)}, j=1, \dots, \infty, \alpha=0, 1$  подмножеств вершин исходного графа  $\Gamma$ .



**Л е м м а 3.** Если граф  $\Gamma_{\theta_0}$  - полный, то  $v_{\theta_0}$  совпадает с множеством дефектных вершин графа  $\Gamma$ .

**Д о к а з а т е л ь с т в о.** Пусть граф  $\Gamma_{\theta_0}$  - полный,  $u \in v_{\theta_0}$  и  $v$  - произвольная вершина графа  $\Gamma$ . Если  $v$  не смежна с  $u$ , то  $v \notin v_{\theta_0}$  и значит  $v \in A_j^{(0)} \cup A_j^{(1)}$  для некоторого  $j < \theta_0$ . Пусть для определенности  $v \in A_j^{(0)}$ . Так как  $u \in v_{\theta_0}$  и  $v_{\theta_0} \subset V_j$  имеем  $u \in V_j$ , а поскольку  $u$  не смежна с  $v$ ,  $u \in A_j^{(1)}$ . Действительно  $v \in P(k)$  для графа  $\Gamma_j$  и некоторого  $k \geq 1$ . Если  $u \notin Q(k)$ , то, очевидным образом,  $u \in Q(k+1)$ . Но если  $u \in A_j^{(1)}$  при  $j < \theta_0$ , то  $u \in v_{\theta_0}$ . Приходим к противоречию. Тем самым показано, что  $u$  - дефектная вершина графа  $\Gamma$ .

Обратно, пусть  $u$  - дефектная вершина графа  $\Gamma$ , но  $u \in A_j^{(\alpha)}$ , для  $j < \theta_0$ . Пусть для определенности  $u \in A_j^{(0)}$ . Это значит, что  $u \in P(k)$  для некоторого  $k$ , следовательно, найдется вершина графа  $\Gamma$ , не смежная с  $u$ . Лемма доказана.

**С л е д с т в и е.** Если граф  $\Gamma$  не имеет дефектных вершин, то для любого  $j = 1, \dots, \theta_0$  множества  $A_j^{(0)}, A_j^{(1)}$  непусты.

Предположим, что  $\Gamma$  не имеет дефектных вершин и  $\theta_0, u_1, \dots, \dots, u_{\theta_0}, v_1, \dots, v_{\theta_0}, A_1^{(0)}, A_1^{(1)}, \dots, A_{\theta_0}^{(0)}, A_{\theta_0}^{(1)}$  получены в результате описанного выше процесса. Для произвольного  $\alpha \in \{0, 1\}$  обозначим  $\tilde{\alpha} = 1 - \alpha$ . Положим для  $\tilde{\alpha} = (\alpha_1, \dots, \alpha_{\theta_0}), \alpha_j \in \{0, 1\}, j = 1, \dots, \theta_0$ .

$$X(\tilde{\alpha}) = X(\tilde{\alpha}, u_1, \dots, u_{\theta_0}, v_1, \dots, v_{\theta_0}) = \bigcup_{j=1}^{\theta_0} A_j^{(\alpha_j)}$$

$$Y(\tilde{\alpha}) = Y(\tilde{\alpha}, u_1, \dots, u_{\theta_0}, v_1, \dots, v_{\theta_0}) = \bigcup_{j=1}^{\theta_0} A_j^{(\tilde{\alpha}_j)}$$

В сделанных предположениях справедлива

**Т е о р е м а 4:**

а) пусть  $\tilde{\alpha} = (\alpha_1, \dots, \alpha_{\theta_0})$  - произвольный двоичный набор,

$$X(\tilde{\alpha}) = \bigcup_{j=1}^{\theta_0} A_j^{(\alpha_j)}, \quad Y(\tilde{\alpha}) = \bigcup_{j=1}^{\theta_0} A_j^{(\tilde{\alpha}_j)}, \quad \text{тогда}$$

$$X(\tilde{\alpha}), Y(\tilde{\alpha}) - \text{клики графа } \Gamma, \quad X(\tilde{\alpha}) \cup Y(\tilde{\alpha}) = V, \quad X(\tilde{\alpha}) \cap Y(\tilde{\alpha}) = \emptyset$$

б) пусть  $R_1, R_2 \neq \emptyset$  - клики графа  $\Gamma$  такие, что  $R_1 \cup R_2 = V$ ,  $R_1 \cap R_2 = \emptyset$ , тогда существует двоичный набор  $\tilde{\alpha}$  такой, что  $R_1 = X(\tilde{\alpha})$ ,  $R_2 = Y(\tilde{\alpha})$ .

Доказательство: а) пусть  $u, v \in X(\tilde{\alpha})$ . Тогда для некоторых  $j, s$  имеет место  $u \in A_j^{(\alpha_j)}$ ,  $v \in A_s^{(\alpha_s)}$ . Если  $j = s$ , то по лемме 2  $u$  и  $v$  - смежные вершины графа  $\Gamma$ . Пусть  $j \neq s$ . Положим для определенности  $j < s$ . Тогда

$$v \in V \setminus \left( \bigcup_{r=1}^j (A_r^{(0)} \cup A_r^{(1)}) \right),$$

откуда  $v \in V_{j+1} \subseteq V_j$ . С другой стороны, так как  $v \notin A_j^{(\tilde{\alpha}_j)}$  вершина  $v$  в графе  $\Gamma$  смежна с любой вершиной из  $A_j^{(\alpha_j)}$ , в том числе и с  $u$ . Тем самым показано, что  $X(\tilde{\alpha})$  - клика графа  $\Gamma$ . Рассуждая точно таким же образом, приходим к заключению, что и  $Y(\tilde{\alpha})$  - клика графа  $\Gamma$ .

Пусть  $u$  - произвольная вершина графа  $\Gamma$  такая, что  $u \in X(\tilde{\alpha}) \cup Y(\tilde{\alpha})$ , т.е. ни для какого  $j = 1, \dots, \Theta_0$   $u$  не принадлежит  $A_j^{(0)} \cup A_j^{(1)}$ . Значит  $V_{\Theta_0+1} = V \setminus \left( \bigcup_{j=1}^{\Theta_0} (A_j^{(0)} \cup A_j^{(1)}) \right) \neq \emptyset$ . Если граф  $\Gamma_{\Theta_0+1}$  - полный, то  $u \in A_{\Theta_0+1}^{(0)}$ . Если  $\Gamma_{\Theta_0+1}$  - неполный, то в нем существуют две несмежные вершины  $u_{\Theta_0+1}$ ,  $w_{\Theta_0+1}$  и, следовательно, можно построить множества вершин  $A_{\Theta_0+1}^{(0)}$ ,  $A_{\Theta_0+1}^{(1)}$ . В любом случае приходим к противоречию с определением  $\Theta_0$ .

Пусть  $u \in X(\tilde{\alpha}) \cap Y(\tilde{\alpha}) \neq \emptyset$ . Тогда для некоторых  $j, k$   $u \in A_j^{(\alpha_j)}$  и  $u \in A_k^{(\tilde{\alpha}_k)}$ . Ясно, что если  $k=j$ , то

$$A_j^{(\alpha_j)} \cap A_k^{(\tilde{\alpha}_k)} = \emptyset$$

(см. лемму 2). При  $k \neq j$  положим для определенности  $j < k$ . Тогда

$$u \in \bigcup_{s=1}^{k-1} (A_s^{(0)} \cup A_s^{(1)})$$

и, значит,  $u \in V_k$ , откуда  $u \in A_k^{(\tilde{\alpha}_k)}$ . Приходим к противоречию;

б) пусть  $\Gamma$  не имеет дефектных вершин и для некоторых  $u_1, \dots, u_{\Theta_0}$ ,  $w_1, \dots, w_{\Theta_0}$  множества  $A_j^{(0)}, A_j^{(1)}$ ,  $j = 1, \dots, \Theta_0$  построены. Так как  $u_k, w_k$  - несмежные вершины, то либо  $u_k \in R_1$ ,  $w_k \in R_2$ , либо наоборот,  $u_k \in R_2$ ,  $w_k \in R_1$ . В первом случае пола-

гаем  $\alpha_k = 0$ , а во втором —  $\alpha_k = 1$ . Покажем, что  $X(\tilde{\alpha}) = X(\tilde{\alpha}, u_1, \dots, u_{\theta_0}, w_1, \dots, w_{\theta_0}) \in R_1$ . Действительно, пусть  $u \in X(\tilde{\alpha})$ . Тогда  $u \in A_j^{(\alpha_j)}$  для некоторого  $j=1, \dots, \theta_0$ . Если  $j=1$ , то при  $\alpha_j = 0$  имеем  $u_1 \in R_1$  и по лемме 2  $u \in A_j^{(0)} \subseteq R_1$ , при  $\alpha_j = 1$  имеем  $w_1 \in R_1$  и по лемме 2  $u \in A_j^{(1)} \subseteq R_1$ . Пусть  $1 < k < \theta_0$ . При  $\alpha_k = 0$  имеем  $u_k \in R_1$ . Для графа  $\Gamma_k$  и его клики  $R_1 \cap V_k, R_2 \cap V_k$  лемма 2 дает  $u \in A_k^{(0)} \subseteq R_1 \cap V_k$ . При  $\alpha_k = 1$  имеем  $w_k \in R_1$ , и лемма 2 для  $R_1 \cap V_k, R_2 \cap V_k$  дает  $u \in A_k^{(1)} \subseteq R_1$ . Таким образом  $X(\tilde{\alpha}) \subseteq R_1$ . Аналогичным образом устанавливается что  $Y(\tilde{\alpha}) \subseteq R_2$ . Пусть  $u \in R_1 \setminus X(\tilde{\alpha})$ . Так как по доказанному в пункте (а)  $X(\tilde{\alpha}) \cup Y(\tilde{\alpha}) = V$ , получаем, что  $u \in Y(\tilde{\alpha}) \subseteq R_2$ , тем самым  $u \in R_1 \cap R_2$ , что невозможно. Теорема доказана.

**С л е д с т в и е.** Заметим, что если  $\tilde{\alpha} \neq \tilde{\beta}$  и  $\tilde{\alpha} \oplus \tilde{\beta} \neq \underbrace{(1, \dots, 1)}_{\theta_0}$ , то разбиения  $\{X(\tilde{\alpha}), Y(\tilde{\alpha})\}, \{X(\tilde{\beta}), Y(\tilde{\beta})\}$  не совпадают. Поэтому число разбиений множества вершин графа  $\Gamma$  на две клики в случае, когда граф  $\Gamma$  не имеет дефектных вершин, равняется  $2^{\theta_0 - 1}$ .

Теорема 4 указывает алгоритм нахождения разбиения графа  $\Gamma$  на 2 клики, как и алгоритм перечисления всех таких разбиений. В случае наличия дефектных вершин необходимо проделать некоторые дополнительные процедуры, которые мы вследствие очевидности этого вопроса опускаем.

#### Литература

1. Вагин В.Н. Дедукция и обобщение в системах принятия решений. М.: Наука, 1988. 383 с.
2. Мандель И.Д. Кластерный анализ. М.: Финансы и статистика. 1988. 176 с.
3. Матула Д.В. Методы теории графов в алгоритмах кластер-анализа // Классификация и кластер. М., 1980. С. 83-III.
4. Оре О. Теория графов. М.: Наука, 1980. 336 с.
5. Соловьев Н.А. Разбиение множества объектов на однородные группы // Методы дискретного анализа в решении экстремальных задач. Новосибирск, 1979. № 33. С.90-108.

АЛГОРИТМ ВЫЯВЛЕНИЯ СКРЫТОЙ ПЕРИОДИЧНОСТИ ВРЕМЕННЫХ РЯДОВ  
МЕТОДОМ МАКСИМАЛЬНОЙ ЭНТРОПИИ

В практике научных исследований нередко приходится решать задачи, связанные с изучением структуры периодичности какого-либо процесса и иерархической соподчиненности циклов по единственной его реализации, например, цикличности осадконакопления по изменению параметра зернистости пород, эволюции органического мира по вариации  $S_{орг}$ , вертикальных движений по скорости погружения платформ и т.д. Изучая динамику того или иного параметра, исследователь, по существу, имеет дело с суммарным результатом наложенных друг на друга колебательных движений разного порядка. Разложить исследуемый ряд на простые составляющие, не прибегая к математическим методам, он не может. Такую возможность представляют методы спектрального анализа – математического аппарата, разработанного для исследования свойств временных рядов /4, 5, 6, 10, 12, 13 и др./.

Метод максимальной энтропии в настоящее время считается специалистами лучшим методом спектрального анализа временных рядов. Он обладает рядом преимуществ перед остальными: а) применим для исследования как коротких, так и длинных временных рядов; б) способен выделять периоды, равные исходной реализации (тогда как по методу Блекмана-Тьюки можно выделить периоды длительностью не более  $1/3$  ряда); в) не требует предварительного сглаживания ряда наблюдений, так как оно проводится самим методом, формирующим оптимальные фильтры для подавления шума спектра, параметры которых выражены с помощью авторегрессионной функции с учетом свойств анализируемой совокупности; г) спектральная оценка очень выразительна, даже когда период становится сравним с длиной исходной последовательности; д) детальное распределение спектра позволяет точно установить период максимумов; е) длинно-периодная составляющая шума полностью устранена.

К недостаткам метода относится отсутствие строгого обоснования выбора порядка авторегрессионной модели для описания исследуемого процесса.

Метод максимальной энтропии особенно удобен при спектральном анализе процессов авторегрессии. При этом предполагается, что ряды содержат в себе периодические составляющие и что спектр должен иметь три-четыре максимума, а мы хотим оценить их расположение. Требования к исходной информации таковы: 1) ряд должен быть полным, без пропусков в наблюдении; 2) информация представлена с равномерным шагом во времени; 3) ряд обладает свойствами стационарности и эргодичности. Первые два пункта требований относятся к дискретным рядам наблюдений.

Наличие априорных сведений об исходной информации, перечисленные особенности и возможности метода и определяют круг задач, решаемых с его помощью. Метод используется геофизиками, палеомагнитологами и практически не применяется геологами, хотя он может быть полезен, например, при выявлении микро- и мегациклов геологических процессов, их приуроченности во времени.

Цель работы - описать алгоритм программной реализации спектральной оценки методом максимальной энтропии и показать применение метода при решении конкретной задачи.

## § I. Оценка спектра методом максимальной энтропии (общие сведения)

Метод максимальной энтропии был предложен Дж.П.Бургом /12/, получившим аналитическое выражение оценки спектральной плотности, исходя из принципа максимизации энтропии (распределение с большей энтропией более вероятно, чем с меньшей). Величина энтропии  $H$  дискретного стационарного процесса  $X_t$ , как показано в работе /9/, определяется по выражению

$$H = (1/2) \log \{ \det [C(M)] \} ,$$

где  $C(M)$  - матрица ковариаций порядка  $M$ :

$$C(M) = \begin{vmatrix} \rho(0) & \rho(1) & \dots & \rho(M) \\ \rho(1) & \rho(0) & \dots & \rho(M-1) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \rho(M) & \rho(M-1) & \dots & \rho(0) \end{vmatrix} \quad (1)$$

Идея метода максимальной энтропии состоит в том, чтобы вы-

обрать неизвестные автоковариации  $\rho(M+1)$ ,  $\rho(M+2)$  и т.д. по известным первым  $M+1$  значениям автоковариации  $\rho(0)$ ,  $\rho(1)$ , ..., ...,  $\rho(M)$  таким образом, чтобы энтропия  $H$  процесса  $X_t$  была максимальной на каждом шаге  $k$  ( $k > m$ ). Определить неизвестный коэффициент  $\rho(M+1)$  можно путем максимизации определителя матрицы ковариаций  $C(M)$ :

$$\det \begin{vmatrix} \rho(1) & \rho(0) & \rho(M-1) \\ \rho(2) & \rho(1) & \rho(M-2) \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ \rho(M+1) & \rho(M) & \rho(1) \end{vmatrix} = 0 \quad (2)$$

относительно  $\rho(M+1)$ . Определив  $\rho(M+1)$  из (2), аналогичным способом можно найти  $\rho(M+2)$ ,  $\rho(M+3)$  и т.д.

По определению /4, 5, 6/ спектральная плотность  $S(f)$  стационарного процесса  $X_t$  есть преобразование Фурье от автоковариационной функции  $\rho(k)$ . Таким образом, исходя из принципа максимизации энтропии  $H$  можно получить оценки спектральной плотности  $S(f)$  по выражению, которое приведено в работе /9/:

$$S_{MЭМ}(f) = \frac{P_{M+1}}{f_N \left| 1 + \sum_{j=1}^M \gamma_j \exp(-i2\pi f_j \Delta t) \right|^2}, \quad (3)$$

где  $P_{M+1} = \text{const}$ ;  $\gamma_j$  - коэффициенты автоковариаций, определяемые из матрицы ковариаций;  $\Delta t$  - шаг дискретизации;  $f_j$  - циклическая частота;  $f_N = 2(\Delta t)^{-1}$  - частота Найквиста.

Метод максимальной энтропии, как и любой другой метод спектрального оценивания, можно интерпретировать как решение задачи авторегрессионного оценивания. При этом оценка спектральной плотности сводится к оценке авторегрессионных коэффициентов процесса. В связи с этим утверждением покажем, что формулы спектральной плотности, полученные из максимума энтропии, и для линейного процесса авторегрессии совпадают.

Процесс авторегрессии  $M$ -го порядка имеет такой вид:

$$X_t = \alpha_1 X_{t-1} + \alpha_2 X_{t-2} + \dots + \alpha_M X_{t-M} + a_{Mt}, \quad (4)$$

где  $M$  - порядок авторегрессии;  $t = 1, 2, \dots, N$ ;  $a_{Mt}$  - белый шум с дисперсией  $\sigma_M^2$ .

Спектральная плотность процесса авторегрессии в свою очередь определяется преобразованием Фурье от обеих частей уравнения (4):

$$X(z) = X(z)(\alpha_1 z + \alpha_2 z^2 + \dots + \alpha_M z^M) + A(z), \quad (5)$$

где  $z = \exp(-i2\pi f)$ ,  $|A(z)|^2 = \sigma_M^2$ . Отсюда

$$|X(z)|^2 = \frac{|A(z)|^2}{|1 - \alpha_1 z - \alpha_2 z^2 - \dots - \alpha_M z^M|^2}. \quad (6)$$

Величина, стоящая в правой части уравнения (6), и есть спектральная плотность авторегрессионного процесса. Уравнение (6) в общепринятой аналитической форме имеет вид:

$$S(f) = \frac{\sigma_M^2}{\left| 1 - \sum_{j=1}^M \alpha_{Mj} e^{-i2\pi f_j} \right|^2}, \quad (7)$$

где  $M$  - порядок авторегрессии,  $\alpha_{Mj}$  - коэффициенты авторегрессии  $M$ -го порядка,  $f_j$  - частота,  $\sigma_M^2$  - ошибка прогноза для авторегрессии  $M$ -го порядка.

Сравнивая (3) и (7), видим, что формулы идентичны. Чтобы вычислить спектральную плотность по (7) необходимо задать порядок  $M$  авторегрессии и определить коэффициенты  $\alpha_{Mj}$ . Вначале для авторегрессии  $M$ -го порядка определяется так называемый частный коэффициент корреляции  $\alpha_{MM}$ , а затем любое значение коэффициентов  $\alpha_{Mj}$  определяется из рекурсивного выражения

$$\alpha_{Mj} = \alpha_{(M-1)j} - \alpha_{MM} \cdot \alpha_{(M-1)(M-1)}; \quad j = 1, \dots, M-1, \quad (8)$$

а ошибка прогноза

$$\sigma_M^2 = \sigma_{M-1}^2 (1 - |\alpha_{MM}|)^2. \quad (9)$$

Подставив параметры  $\alpha_{Mj}$  и  $\sigma_M^2$  в выражение (7), получим оценки спектральной плотности анализируемого процесса  $X_t$ .

Существует, по крайней мере, два метода оценки коэффициентов  $\alpha_{Mj}$  - это оценки спектра - по Клу-Уокеру и оценки по Бургу.

По Клу-Уокеру для определения параметров  $\alpha_{Mj}$  в процессе авторегрессии требуется предварительное вычисление оценок автоковариаций  $\rho(0), \dots, \rho(M)$  процесса. При этом увеличивается время на проведение вычислительных процедур и невозможно получить оптимальные оценки ковариаций: в зависимости от используе-

мых выражений для их оценок они либо имеют большое смещение и небольшую среднеквадратическую ошибку, либо наоборот -- большую среднеквадратическую ошибку и малое смещение.

Бургом предложен иной подход в определении параметров  $\alpha_{Mj}$  в процессе авторегрессии, который не требует предварительного вычисления функций автоковариаций  $\rho(k)$ . Для определения неизвестных коэффициентов  $\alpha_{Mj}$  он также воспользовался рекурсивным выражением (8), но частные коэффициенты  $\alpha_{MM}$  находил из минимизации  $\sum a^2$  в выражении (4) относительно  $\alpha_{MM}$ , что эквивалентно минимизации выборочной среднеквадратической ошибки прогноза процесса  $X_t$  относительно  $\alpha_{MM}$ .

Процедура оценки коэффициентов  $\alpha_{Mj}$  строится следующим образом. Сначала определяются начальные значения для коэффициента частной корреляции  $\alpha_{11}$  и ошибки прогноза  $\sigma_1^2$  для самого простого случая, т.е. для авторегрессионной модели 1-го порядка ( $M=1$ ), из выражений

$$\alpha_{11} = 2 \sum_{j=1}^{N-1} X_j X_{j+1} / \sqrt{\sum_{j=1}^{N-1} (X_j^2 + X_{j+1}^2)}; \quad (10)$$

$$\sigma_1^2 = 2 \sum_{j=1}^N X_j / \sum_{j=2}^N X_j,$$

где  $N$  - число точек в исследуемом ряду.

Затем, используя начальное значение  $\alpha_{11}$ , по рекуррентным формулам (8) и (9) вычисляются  $\alpha_{22}$ ,  $\alpha_{2j}$  и  $\sigma_2^2$  для авторегрессионной модели 2-го порядка ( $M=2$ ). Последние в свою очередь используются для оценки параметров авторегрессии следующего 3-го ( $M=3$ ) порядка и т.д. Этот процесс заканчивается тогда, когда будут вычислены параметры авторегрессии заданного порядка  $M$ . В общем виде рекурсивные выражения для оценки частного коэффициента корреляции  $\alpha_{MM}$ , коэффициентов авторегрессии  $\alpha_{Mj}$  и ошибки прогноза  $\sigma_M^2$  запишутся в виде

$$\alpha_{MM} = 2 \sum_{j=1}^{N-M} b_{Mj} \cdot b'_{Mj} / \sum_{j=1}^{N-M} (b_{Mj}^2 + b'^2_{Mj}), \quad (11)$$

$$\alpha_{Mj} = \alpha_{(M-1)j} \cdot \alpha_{(M-1)(M-j)}, \quad j=1, \dots, M-1 \quad (12)$$



$$\sigma_M^2 = \sigma_{M-1}^2 (1 - |\alpha_{MM}|^2),$$

где в (11)

$$b_{Mj} = \sum_{k=0}^M \alpha_{(M-1)(M-k)} X_{j+M-k},$$

$$b'_{Mj} = \sum_{k=0}^M \alpha_{(M-1)(M-k)} X_{1+k},$$

которые находятся из рекуррентных соотношений

$$b_{Mj} = b_{(M-1)j} - \alpha_{(M-1)(M-1)} b'_{(M-1)j},$$

$$b'_{Mj} = b'_{(M-1)(j+1)} - \alpha_{(M-1)(M-1)} b_{(M-1)(j+1)}.$$

Оценка спектральной плотности затем производится подстановкой найденных  $\alpha_{Mj}$  и  $\sigma_M^2$  в выражение (7).

## § 2. Алгоритм программной реализации метода максимальной энтропии

Для оценки спектра методом Бурга через оценку коэффициентов частной корреляции и авторегрессии составлена программа MEM. За ее основу принята программа, разработанная в Центре мировых данных по алгоритму, опубликованному в работе /13/. Автором программа переведена с языка фортран на язык ПЛ/Г, дополнена блоками определения амплитуд начальных фаз гармонических составляющих ряда, вывода спектра на графопостроитель.

Для выполнения программы MEM в качестве исходных данных используются: число точек в исходном ряду, величина равномерного шага, исходный ряд.

Последовательность вычислительных процедур, осуществляющая программную реализацию метода, отражена на блок-схеме (рис.1) и описана ниже по шагам.

1. Ввод исходных данных.

2. Определение максимального порядка  $M$  авторегрессионной модели, равно  $1/3 N$  (длины исходного ряда, блок 1).

3. Расчет среднего значения ряда и его центрирование.

$$\bar{x} = \sum_{i=1}^N x_i; \quad x_i = x_i - \bar{x}.$$

4. Расчет дисперсии центрированного исходного ряда (блок 2);

$$SL = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (x_i - \bar{x})^2$$

Следующие пункты (с 5 по 10) раскрывают содержание подготовительного этапа к началу итерационного процесса. В ходе его выполнения определяются начальные значения коэффициента частной корреляции  $\alpha_{11}$  и ошибка прогноза  $\epsilon_1^2$ , которые в дальнейшем используются в рекуррентных отношениях, оценивающих  $\alpha_{MM}$ ,  $\alpha_{M1}$  и  $\epsilon_M^2$  для АР-модели произвольного порядка  $M$ . Параметры  $\alpha_{11}$  и  $\epsilon_1^2$  находятся для самого простого случая - АР-модели 1-го порядка ( $M = 1$ ). Процесс определения начальных значений реализован следующей последовательностью операций.

5. Задается начальный порядок АР-модели, равный  $M = 1$  (блок 3).

6. Для АР-модели 1-го порядка формируется содержание двух вспомогательных одномерных массивов  $B1$  и  $B2$  (блок 4). В массив  $B1$  помещаются все значения исходного ряда, начиная с первого  $x_1$  и кончая предпоследним  $x_{N-1}$ , а в  $B2$  - те же значения исходного ряда только со сдвигом, равным 1, т.е. начиная со второго значения  $x_2$  и кончая последним  $x_N$ :

$$B1_1 (x_1, x_2, \dots, x_{N-1}),$$

$$B2_1 (x_2, x_3, \dots, x_N).$$

Это содержание массивов  $B1$  и  $B2$  (для случая  $M = 1$ ) служит в качестве начального, используемого в рекурсионных операциях.

7. Обнуление ("чистка") рабочих ячеек  $S0N$  и  $DEN$  (блок 5).

8. Суммирование элементов массивов  $B1$  и  $B2$  в рабочие ячейки (блок 6):

$$S0N = \sum_{i=1}^{N-1} B1_{1i},$$

$$DEN = \sum_{i=1}^{N-1} (B1_{1i}^2 + B2_{1i}^2).$$

RAV(80),N,SAG,X(N)

I.

N4=N/3 - начальное число рекурсий  
N5=2\*N/3 - конечное число рекурсий  
N6=2\*N/3-N/2 - шаг по рекурсиям

2.  $\bar{x}; SL = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (x_i - \bar{x})^2;$

3. M = 1  
Порядок AR

4. B1(N)=x<sub>1</sub>, ..., x<sub>N</sub> ;  
B2(N)=x<sub>2</sub>, ..., x<sub>N-1</sub> ;

5. E14: SON=0; DEN=0;

6.

DO I=1 TO N-M;  
SON=SON+B1(I)\*B2(I);  
DEN=DEN+B1(I)\*\*2+B2(I)\*\*2;  
END;

7. F(M)=2\*SON/DEN; коэффициент частной корреляции  
 $\propto_{MM}$  авторегрессии M-го порядка

8. M > 1? да: P(M)=P(M-1)\*(1-F(M)\*F(M))  
- ошибка прогноза  $\sigma_w^2$

нет: P(1)=1-F(1)\*F(1) начальное значение  
ошибки прогноза  $\sigma_1^2$

E10: M=M+1; порядок AR

II.

DO I=1 TO M-1;  
A1(I)=F(I);  
END;  
DO I=1 TO N-M;  
B1(I)=B1(I)-A1(M-1)\*B2(I);  
B2(I)=B2(I+1)-A1(M-1)\*B1(I+1);  
END;

I3. DO I=1 TO M-1; коэф-ты  
F(I)=A1(I)-F(M)\*A1(M-I); M-го порядка  
END;

да 14. M < N4?  
нет

A

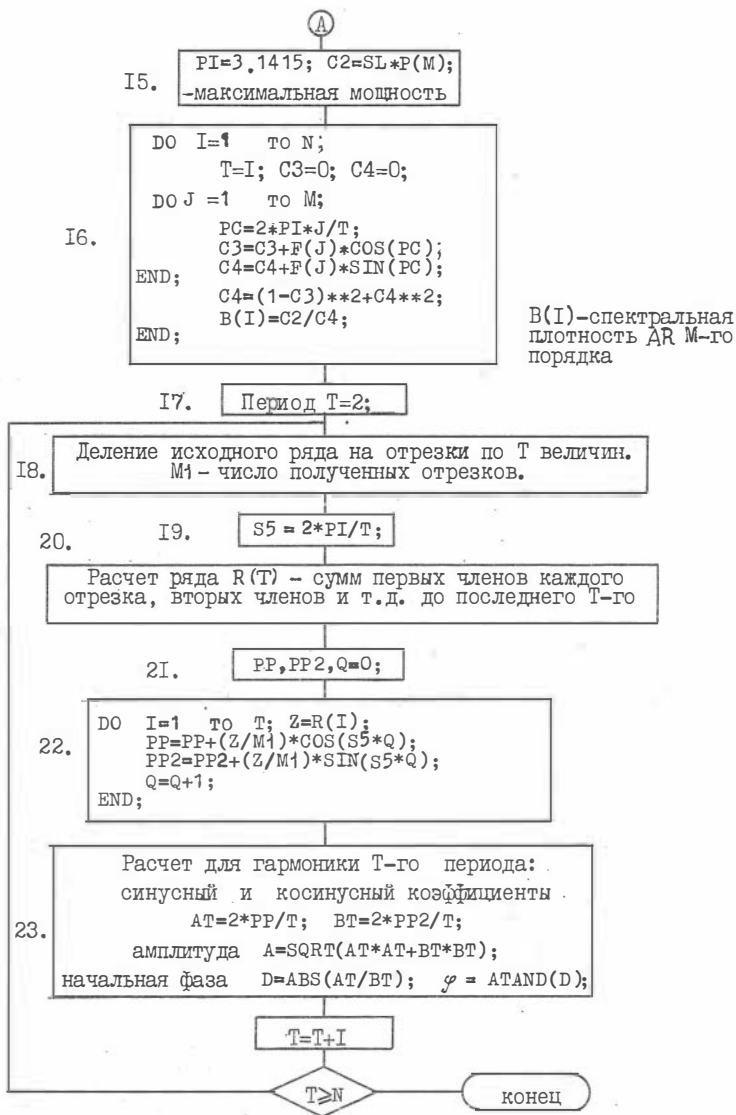


Рис. 1. Блок-схема программы MEM "Оценка спектра методом максимальной энтропии и определение параметров гармонических составляющих исходного ряда"

При первом попадании в этот блок (для  $M = 1$ ) происходит подготовка знаменателя SON и числителя DEN для определения  $\alpha_{11}$  частного коэффициента корреляции AP-модели 1-го порядка ( $M = 1$ ).

9. Оценка начального значения коэффициента частной корреляции  $\alpha_{11}$  для AP-модели 1-го порядка (блок 7). Эта операция проводится при первом попадании в этот блок. Расчет параметра  $\alpha_{11}$  осуществляется по формуле (10):

$$\alpha_{11} = 2 \sum_{i=1}^{N-1} x_i x_{i+1} / \sum_{i=1}^{N-1} (x_i^2 + x_{i+1}^2).$$

При входе в блок 7 во время итерационного цикла, т.е. когда  $M > 1$ , происходит оценка коэффициента частной корреляции  $\alpha_{MM}$  для AP-модели произвольного порядка  $M > 1$ .

Запоминание и хранение (временное) вычисленного параметра  $\alpha_{MM}$  предусмотрено в  $M$ -ом элементе массива F. Таким образом, найденная оценка коэффициента  $\alpha_{11}$  записывается 1-ым элементом массива F:  $F(1) = \alpha_{11}$ .

10. Оценка начального значения ошибки прогноза  $\epsilon_1^2$  (блок 9). Она определяется как ошибка прогноза для AP-модели 1-го порядка ( $M = 1$ ) по уже известному начальному значению коэффициента частной корреляции  $\alpha_{11}$  (см. выше пункт 9), входящему в выражение

$$\epsilon_1^2 = 1 - |\alpha_{11}|^2.$$

Вычисленное значение  $\epsilon_1^2$  помещается и запоминается 1-м элементом массива P, в котором накапливаются и хранятся до конца работы программы ошибки прогноза для всех AP-моделей (от первого до последнего порядка M), используемых в расчетах.

Этот блок используется только один раз - для случая AP-модели 1-го порядка ( $M = 1$ ). При  $M > 1$  выполнение программы идет в обход этого блока.

На этом заканчивается подготовительный этап работы программы - оценка начальных значений  $\alpha_{11}$  и  $\epsilon_1^2$ , выполняемых при  $M = 1$ . Теперь все готово к проведению рекурсивных операций по оценке параметров  $\alpha_{MM}$ ,  $\alpha_{Mi}$ ,  $\epsilon_M^2$  для AP-модели произвольного порядка M. Путь рекурсивного цикла на блок-схеме программы MEM обозначен жирной линией. Цикл начинается с блока 10, затем последовательно выполняются блоки II, 5, 6, 7, 8,

I2, I3, I4 (цикл завершен) и управление вновь передается блоку I0. По существу конец итерационного цикла находится в блоке I3, а блок I4 служит только для проверки: достигла ли программа в своих вычислениях заданного ей порядка AP-модели. Ниже рассматривается каждый этап итерационного цикла, являющийся логическим продолжением алгоритма.

II. Порядок AP-модели увеличивается на единицу :  $M = (M + 1)$  (блок I0). Это начальная точка в процедуре выполнения очередной рекурсии, т.е. в вычислении соответствующих параметров для AP-модели следующего  $M = (M + 1)$ -го порядка.

I2. Пересылка и "запоминание" в массиве A1 содержимого массива F (блок II). На данный момент массив F в своих  $(M - 1)$ -й ячейках содержит коэффициенты авторегрессии  $\alpha_{Mi}$ , а в M-й ячейке - коэффициент частной корреляции  $\alpha_{MM}$  AP-модели M-го порядка, вычисленных на только что закончившейся предыдущей итерации. Необходимость такой передачи вызвана тем, что содержание массива F соответствующим образом будет изменено вычислениями следующего  $M = (M + 1)$ -го итерационного цикла.

I3. Проведение подготовительной операции, направленной на выполнение очередной  $M = (M + 1)$ -й итерации (блок II). Для этого изменяют содержание массивов B1 и B2 путем подстановки найденного коэффициента частной корреляции  $\alpha_{MM}$  для AP-модели предыдущего M-го порядка в рекуррентные выражения:

$$B1_i = B1_i - \alpha_{MM} \cdot B2_i,$$

$$B2_i = B2_{i+1} - \alpha_{MM} \cdot B1_{i+1}, \quad i = 1, 2, 3, \dots, N-M.$$

I4. Обнуление ("чистка") рабочих ячеек SON и DEN (блок 5).

I5. Вычисление числителя SON и знаменателя DEN для формулы (11), оценивающей коэффициент частной корреляции  $\alpha_{MM}$  для AP-модели  $M = (M + 1)$ -го порядка (блок 6). Осуществляется эта операция путем суммирования в указанные ячейки значений элементов массивов B1 и B2:

$$SON = \sum_{i=1}^{N-M} B1_{Mi} \cdot B2_{Mi},$$

$$DEN = \sum_{i=1}^{N-M} (B1_{Mi}^2 + B2_{Mi}^2).$$

16. Оценка коэффициента частной корреляции  $\alpha_{MM}$  для AP-модели  $M = (M + 1)$ -го порядка по формуле (11) (блок 7):

$$\alpha_{MM} = 2 \sum_{i=1}^{N-M} B1_{Mi} \cdot B2_{Mi} / \sum_{i=1}^{N-M} (B1_{Mi}^2 + B2_{Mi}^2) = 2 \cdot \text{SON} / \text{DEN}.$$

Вычисленное значение коэффициента  $\alpha_{MM}$  помещается в  $M$ -ю ячейку массива  $F$ , в остальных ячейках массива  $F$  пока находятся коэффициенты AP-модели предыдущего порядка.

17. Проверка значения  $M$  - текущего порядка AP-модели (блок 8). Если порядок  $M > 1$ , то программа переходит к оценке ошибки прогноза (см. следующий пункт).

18. Оценка ошибки прогноза  $\sigma_M^2$  для AP-модели  $M = (M + 1)$ -го порядка (блок 12) по рекуррентной формуле (13):

$$\sigma_M^2 = \sigma_{M-1}^2 (1 - |\alpha_{MM}|^2).$$

19. Оценка коэффициентов  $\alpha_{Mi}$  AP-модели  $M = (M + 1)$ -го порядка (блок 13). Она осуществляется подстановкой коэффициентов  $\alpha_{(M-1)i}$  AP-модели предыдущего  $(M - 1)$ -го порядка и коэффициента частной корреляции  $\alpha_{MM}$  для AP-модели  $M = (M + 1)$ -го порядка в рекуррентное выражение (12):

$$\alpha_{Mi} = \alpha_{(M-1)i} - \alpha_{MM} \cdot \alpha_{(M-1)(M-i)}.$$

Значения коэффициентов  $\alpha_{Mi}$  помещаются в массив  $F$  в первые  $M$  ячеек.

20. Проверка значения  $M$  - текущего порядка AP-модели (блок 14). Если окажется, что порядок  $m < 1/3N$  (длины исходного ряда), то программа передает управление в блок 10 на начало нового цикла и вновь последовательно выполняются операции, начиная с п. 11.

21. Расчет максимальной мощности  $PM$  (числитель в формуле оценки спектра  $S(T)$ ), исходя из дисперсии  $SL$  ряда и ошибки прогноза  $\sigma_M^2$  для AP-модели  $M$ -го порядка (блок 15) по выражению:

$$PM = SL \cdot \sigma_M^2.$$

22. Оценка спектра  $S(T)$  по максимальной мощности  $PM$  и коэффициентам AP-модели  $M$ -го порядка (блок 16).

Затем выполняется 2-я часть программы - определение амплитуд и начальных фаз гармоник.

Способ, применяемый для оценки параметров гармоник, присутствующих в исходном ряду, реализуется последовательным выполнением следующих шагов.

23. Задается начальное значение периода  $T = 2$  (блок I7).

24. Определяется переменная  $M_1$  — число отрезков величиной  $T$  целое число раз уложившихся в исходном ряду (блок I8).

25. Перевод угловой частоты в радианы (блок I9).

26. Суммирование первых членов каждого отрезка, вторых членов и т.д. до последнего  $T$ -го и запоминание их в массиве  $R(T)$  (блок 20).

27. Обнуление рабочих ячеек  $PP$  и  $PP2$  (блок 21).

28. Суммирование в ячейки  $PP$  и  $PP2$  величин  $R(I) / M_1$  — средних значений сумм первых членов каждого отрезка, вторых членов и т.д. до последнего  $T$ -го (блок 22).

29. Расчет синусного  $AT$  и косинусного  $BT$  коэффициентов гармоник с периодом  $T$  (блок 23) по формулам:

$$AT = 2 \cdot PP/T; \quad BT = 2 \cdot PP2/T.$$

30. Расчет амплитуды  $A$  и начальной фазы  $\psi_T$  для периода  $T$  (блок 23) по следующим равенствам:

$$A = \sqrt{AT^2 + BT^2}; \quad \psi = \arctg \left| \frac{AT}{BT_R} \right|.$$

31. Вывод результатов счета на широкую печать и графопостроитель. На этом выполнение программы MEM заканчивается.

Вывод включает в себя: название объекта исследования; число точек в исходном ряду; исходный ряд; оценка спектральной плотности; уровень значимости при вероятности 95 %; значения амплитуд и начальных фаз гармонических составляющих ряда; график функции спектральной плотности, выведенный на графопостроитель.

### Особенности программы

В программе реализовано вычисление спектра с использованием АР-модели, порядок который составляет  $1/3 N$  (исходного ряда).

Для выполнения программы требуется графопостроитель и система СМОГ /11/.



### § 3. Приложение метода максимальной энтропии к задаче исследования палеоклимата

Выбор метода максимальной энтропии для оценки спектра в задаче палеоклиматических реконструкций /8/, выполняемых на материале палинологических исследований, обусловлен тем, что исходные палинологические и климатические ряды отвечают требованиям, предъявляемым методом к исходной информации: априорно известно, что ряды содержат в себе периодические составляющие и что спектр будет иметь несколько максимумов; кроме того, проверками установлено, что ряды отвечают требованиям стационарности и эргодичности. Привлекательна и та особенность метода, что его можно использовать при сравнительно коротких записях данных, что нередко имеет место при палинологических анализах по конкретному геологическому разрезу.

Для анализа изменений климата и растительности достаточно рассматривать такие случайные процессы, которые являются стационарными лишь в течение того промежутка времени, в котором проводится исследование. Так, например, при изучении климата голоцена не следует принимать во внимание тот период времени, когда растительность только зарождалась. Следовательно, метод максимальной энтропии используется здесь для оценки спектральной плотности процесса, о котором известно, что он стационарный в случае, когда мы располагаем данными о нем только на малом отрезке времени.

Изучению климата в последнее время уделяется особенное внимание. Связано это с возникшей проблемой глобального потепления, вызванного хозяйственной деятельностью человека, масштабами и формами воздействия потепления на биосферу и климат. Повышение средней температуры у земной поверхности даже на несколько сотых градуса уже приведет к крупным изменениям природных условий на планете: количество осадков в средних широтах уменьшится, частота засух возрастет, переместятся основные географические зоны (в частности будет исчезать зона тундры), сократятся площади ледников и зоны вечной мерзлоты. Поэтому в настоящее время остро стоит проблема детального исследования климата, в процессе которого требуется, с одной стороны, выявить тенденции изменения климата, не связанные с деятельностью человека, а с

другой – оценить долю антропогенных воздействий. Решение первой части проблемы затруднено тем, что инструментальный ряд наблюдений слишком короткий – в лучшем случае составляет всего 60–100 лет. Это обстоятельство не дает возможности определить по таким рядам продолжительность крупных климатических циклов, имеющих периоды в сотни и тысячи лет. А без знания климата прошлого невозможно осуществлять качественный прогноз климата будущего. Поэтому особое значение сейчас приобретают палеоклиматические реконструкции как одна из основ прогноза климата будущего.

Разработки последних лет, проводимые в ИГиГ СО АН СССР, позволяют математическим путем извлекать информацию о климате из состава ископаемых спорово-пыльцевых спектров, восстанавливать количественные оценки элементов палеоклимата в момент захоронения спектра, определяя температуру в градусах, осадки в миллиметрах и т.д. /1, 2, 3, 7/. Наиболее достоверны оценки, получаемые по палинологическим спектрам голоценовых отложений. Наличие определений абсолютного возраста по геологическому разрезу дает возможность составлять временные ряды изменения того или иного элемента палеоклимата длительностью до 10–12 тыс. лет и увеличивает разрешающую способность выявления крупных климатических циклов этого порядка. В методике /8/, реализующей количественный подход при изучении периодичности климата, принимается, что наиболее подходящей и отвечающей реальности динамической моделью, описывающей этот процесс, может служить гармоническая модель в виде ряда Фурье

$$f(y) = \bar{y} + \sum_{k=1}^N A_k \sin(\omega x_k + \psi_k) + \xi \quad (14)$$

Каждая гармоническая составляющая этой модели характеризует колебательное движение с периодом  $T$ , амплитудой  $A$  и начальной фазой  $\psi$ , присущими только ему.

Решение задачи выявления скрытой периодичности сводится к оценке параметров динамической модели процесса (14): суммарный результат этого сложного процесса раскладывается на простые составляющие, каждая из которых представляет собой доминирующее колебательное движение со своими параметрами – периодом, амплитудой и начальной фазой. В итоге получаем два важных результата: 1) определяется число доминирующих периодов и их продолжитель-

Результаты спектрального анализа, выполненного программой MEM  
по временному ряду среднеиюльских температур

Торфяник Знаменское 8I - 5, N = 24, температура июля длина

I	18,500	4	18,800	7	18,000	10	18,000
2	17,700	5	18,600	8	18,000	11	18,000
3	17,900	6	18,500	9	18,200	12	18,200

Начальное число рекурсий,  $N_4 = 8$ ; конечное число рекурсий,  
SAG = 5; среднее значение 1,8154I; дисперсия 0,00I.  
Число рекурсий, M = 8.

Период	Период в годах	Спектр	Период	Период в годах	Спектр
1	5,00	0,0003	7	35,00	0,0007
2	10,00	0,0003	8	40,00	0,0009
3	15,00	0,0008	9	45,00	0,0012
4	20,00	0,0018	10	50,00	0,0015
5	25,00	0,0018	11	55,00	0,0017
6	30,00	0,0008	12	60,00	0,0016

Максимальное значение спектра,  $\text{vmax} = 0,001826$ ; среднее  
бета = 0,00; D = 24,00; L-I = 23,00; значимые значения спектра

T	Ампли- туда	Фаза	T	Ампли- туда	Фаза	T	Ампли- туда
2	0,0083	270,0784	3	0,0441	289,1099	4	0,1121
7	0,1460	211,6569	8	0,1758	234,1197	9	0,1949
12	0,0750	61,7059	13	0,1986	340,1741	14	0,1547
17	0,1175	356,4622	18	0,1205	1,6879	19	0,1243
22	0,1450	9,6455	23	0,1486	29,4395	24	0,1481

ность, 2) выделяется закономерная составляющая (тренд) ряда как  
сумма доминирующих гармоник. Полученный тренд представляет  
собой уравнение, функционально выраженное в виде тригоно-  
метрического полинома, для исследуемого климатического пара-  
метра.

Пример. По данным палинологического анализа проб из разреза  
торфяника позднеголоценового возраста, расположенного в южной  
части лесостепной зоны Минусинской котловины, были восстановлены

ряда наблюдений,  $N = 24$  вывод спектра для периодов  $H=T = 24$

I3	I7,900	I6	I7,500	I9	I8,000	22	I8,200
I4	I8,900	I7	I8,100	20	I7,700	23	I8,500
I5	I8,00	I8	I8,100	2I	I8,100	24	I8,300

$n 5 = I6$ ; шаг по рекурсиям,  $n 6 = 4$ ; цена равномерного шага,

Период	Период в Годах	Спектр	Период	Период в Годах	Спектр
I3	65,00	0,00I5	I9	95,00	0,0007
I4	70,00	0,00I3	20	100,00	0,0007
I5	75,00	0,00II	2I	105,00	0,0006
I6	80,00	0,00IO	22	110,00	0,0006
I7	85,00	0,0009	23	115,00	0,0006
I8	90,00	0,0008	24	120,00	0,0005

значение спектра,  $BSR = 0,00$ ; число степеней свободы  $=5$ ; Уровень с вероятностью 95 %

Фаза	T	Амплитуда	Фаза	T	Амплитуда	Фаза
48,0093	5	0,1697	210,5893	6	0,1302	I83,6738
304,5696	10	0,1818	328,6418	11	0,1292	2,7714
28,2790	15	0,1199	29,8829	16	0,1125	351,8696
2,2361	20	0,1385	351,4255	21	0,1438	359,0471
41,1956						

за период последних 1440 лет среднемесячные температуры июля с помощью расчетных моделей /3/. Временной ряд составили 24 расчетных значения температур с равномерным шагом во времени  $\Delta t = 60$  лет.

Требуется, во-первых, выявить доминирующие периоды в изменении среднеиюльских температур в данном районе в течение указанного периода, во-вторых, спрогнозировать их изменение в будущем.

24 I 24

18.5 I7.7 I7.9 I8.8 I8.6 I8.5 I8 I8 I8.2 I8 I8 I8.2 I7.9 I8.9  
I8 I7.5 I8.I I8.I I8 I7.7 I8.I I8.2 I8.5 I8.3

Передаваемая в программу последовательность данных указывает, что:

24 - число точек в исследуемом ряду;

I - равномерный шаг во времени (условная единица, равная 60 годам);

24 - вывод спектра на график выполнить для всех 24 периодов;

18.5 I7.7 и т.д. - значения временного ряда (рассчитанных среднеиюльских температур), всего их 24.

Результаты выполнения программы МЕМ выводятся на широкую печать (см. таблицу) и графопостроитель (см. рис. 2).

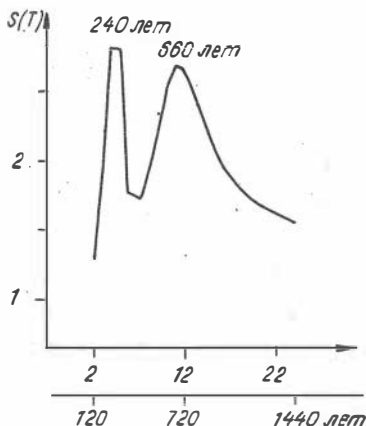


Рис. 2. Спектр, полученный методом максимальной энтропии по ряду расчетных среднеиюльских температур за период 1440 лет (данные по разрезу торфяника южной части лесостепной зоны Минусинской котловины).

На полученном графике спектра (рис. 2) четко фиксируются два доминирующих периода ( $T = 240$  и  $T = 660$  лет). Отсюда можно сделать вывод, что исследуемая последовательность июльских температур есть суммарный результат двух колебательных движений,

повторяющихся с периодичностью 240 и 660 лет.

Составить прогнозное уравнение для среднеиюльских температур позволяет выделение закономерной составляющей (тренда) исходного ряда данной климатической характеристики. Так как временной ряд содержит две доминирующие гармонические составляющие  $T = 240$  лет и  $T = 660$  лет, то тренд в данном случае представляет собой сумму двух указанных гармоник. В соответствии с амплитудами и начальными фазами указанных гармоник (их значения находятся из таблицы результатов) прогнозное уравнение для расчета температуры имеет вид:

$$T_{И}^{\circ} = 18,15 + 0,13 \cdot \sin [(360/11)t + 2,77] + 0,11 \cdot \sin [(360/4)t + 48] + \varepsilon$$

Начальные фазы приурочены к подошве исследуемого геологического разреза. В уравнении период  $T$ , а также текущее время  $t$  выражены в условных единицах, означающих число точек исходного ряда: причем одна точка соответствует шагу  $\Delta t = 60$  лет. Поэтому период в 660 лет обозначен как  $T = 11$ , а период в 240 лет — как  $T = 4$ .

Прогнозные (ожидаемые) значения среднемесячных температур июля данного района на каждые следующие 60 лет можно рассчитать, подставив в уравнение соответствующее текущее время (также в условных единицах). Среднемесячная температура июля в исследуемом районе в настоящее время  $18,3^{\circ}$ . Согласно расчетам в 2030 г. она составит  $18,4^{\circ}$ , а в 2090 г. —  $18,2^{\circ}$ . Из этого следует, что в течение нескольких десятков лет здесь не произойдет изменения июльских температур, если только не будет антропогенного вмешательства.

### Литература

1. Букреева Г.Ф., Вотах М.Р., Бишаев А.А. Методика определения палеоклимата по информативным системам признаков спорово-пыльцевых спектров // Геология и геофизика. 1984. №6. С.16–28.
2. Букреева Г.Ф., Вотах М.Р., Бишаев А.А. Определение палеоклиматов по палинологическим данным методами целевой интеракционной классификации и регрессионного анализа. Новосибирск: Изд. ИГиГ СО АН СССР, 1986. 190 с.

3. Букреева Г.Ф., Зубарева Г.Ю. Применение объективных численных методов обработки палинологических данных на примере территории Минусинской котловины // Палеогеография Средней Сибири. Красноярск, 1987. С. 49-64.

4. Джейнс Э.Т. О логическом обосновании методов максимальной энтропии // ТМИЭР. 1982. Т.70. №9. С. 33-51.

5. Дженкинс Г., Ваттс Д. Спектральный анализ и его приложение. М.: Мир. 1972. Вып. 1. 316 с.; Вып. 2. 287 с.

6. Коняев К.В. Спектральный анализ случайных процессов и полей. М.: Наука, 1973. 168 с.

7. Математические методы в палинологии. Вып. 2. Количественная оценка элементов палеоклимата по палинологическим данным методом главных компонент и пошаговым регрессионным анализом: Метод. разработки / Составитель Г.Ф.Букреева. Новосибирск: Изд. ИГиГ СО АН СССР, 1989. 98 с.

8. Математические методы в палинологии. Вып. 3. Исследования периодичности процессов изменения палеоклимата и палеорастительности методом максимальной энтропии (по палинологическим данным): Метод. разработки / Составитель Г.Ф.Букреева. Новосибирск: Изд. ИГиГ СО АН СССР, 1989. 123 с.

9. Папаташвили Н.Е., Ротанова Н.М. Метод максимальной энтропии и его применение к анализу временных рядов геомагнитного поля // Геомагнетизм и аэрономия. 1979. Т. XIX. № 3. С. 543-550.

10. Серебренников М.Г., Первозванский А.А. Выявление скрытых периодичностей. М.: Наука, 1965. 244 с.

11. СМОГ. Инструкция по программированию. Математическое обеспечение графопостроителей. I - II уровень. Новосибирск: Изд. ВЦ СО АН СССР, 1976. Уровень I - II 8 с.; уровень II - 78 с.

12. Burg J.P. Maximum entropy spectral analysis // Proc. 37 the Meet. Soc. Exploration Geophysicists. 1967. Stanford Thesis, 1975.

13. Notes Short. On the calculation of filter coefficients for maximum entropy spectral analysis // Geophysics. 1974. Vol. 39, N 1. P. 69-72.

К ПРОБЛЕМЕ ОЦЕНИВАНИЯ НЕОПРЕДЕЛЕННОСТИ  
ГЕОЛОГО-ГЕОФИЗИЧЕСКИХ ДАННЫХ

Неопределенность геолого-геофизических данных заложена в концептуальных моделях геологических объектов. Источниками ее являются неточность и ошибочность, допускаемые при формировании таблиц исходных данных, при работе в предметной области (ошибки метрических величин, недоисследование, сложность геологических ситуаций).

При сравнительном изучении геологических объектов неопределенность, в зависимости от целей этого изучения, может становиться предметом самостоятельного исследования. Это особенно важно при решении задач прогнозного характера, в которых оценивание неопределенности данных может иметь решающее значение. Например, выявление существенности исследуемого объекта в ряде случаев можно свести к оцениванию неопределенности.

Предлагается метод оценивания неопределенности, основанный на теореме о сингулярном разложении /1,5/. Этот метод тесно связан с ранее разработанным методом согласованных оценок /2,6/.

I. Общие установки

Будем рассматривать проблему в частном случае, как поиск аномального объекта в исследуемой совокупности. Аномальность берется в смысле непохожести данного объекта на все другие по сумме характеристик. Имеется в виду, что совокупность геологических объектов представлена их описаниями в виде таблицы исходных данных, которые отражают концептуальные модели геологических объектов. Мы анализируем прямоугольные таблицы вида объект-признак (строки таблиц - объекты, а столбцы - признаки). На характер таблиц строгих ограничений не накладывается, значения признаков могут иметь различную природу (логические, количественные, качественные значения). "Зернистость" информации, детальность характеристик объектов зависит от масштабов исследуемых объектов



(регион, отдельная структура, месторождение, участок, информация о скважине и ее окрестности).

В выдвигаемой постановке задачи оценивание неопределенности сводится к определению "недостатка информативности". Естественно, что этот недостаток может иметь двойкий источник: первое – состояние Природы; второе – изъяны информационного обеспечения. Разработанный метод оценивания неопределенности позволяет выявлять ее как для отдельно взятого столбца (признака), так и для отдельно взятой строки (объекта). Это свойство метода и определяет характер возможных постановок задач.

Рассмотрим случай прогнозирования в условиях отсутствия эталонов или при очень малой выборке ( $m \leq 5$ ). Как при наличии эталонов, так и при их отсутствии зачастую требуется оценить типичность или аномальность прогнозируемого объекта. Существует немало способов получения этой оценки. Но, как правило, эти способы не учитывают величины неопределенности анализируемых данных. Измеренная неопределенность может служить указанием на оригинальность того или иного объекта по отношению к изучаемой выборке. Однако отфильтрованные по аномальности объекты могут иметь разные причины попадания в аномальные. В одном случае эти объекты аномальны по своей геологической природе, в другом – эта аномальность может иметь искусственное происхождение. Возникает проблема дополнительной диагностики аномальных объектов для выяснения природы аномальности.

В связи с этой проблемой предлагается специальный прием оценивания неопределенности (или, в иной трактовке – "непохожести").

## 2. Оценивание неопределенности на основе SVD.

Пусть имеются два массива экспериментальных данных, каждый из которых представлен как таблица "объект – признак".

А – опорный массив: надежные данные, полученные "прямыми" методами (посредством детальной разведки или эксплуатации).

В – поисковый массив: ориентировочные данные, полученные косвенными методами (ускоренными методами съемки).

Оба массива представлены одним набором признаков ( $n$ ), но могут иметь разное количество объектов:  $m_A$  и  $m_B$ .

Требуется оценить неопределенности информации, содержащейся в наборе измерений (признаков), относящихся к каждому объекту в поисковом массиве (иными словами, неопределенность объектов В), по отношению ко всей совокупности данных  $C = A \cup B$ .

$C$  - сводный массив (объединение массивов А и В).

Оценки неопределенности для объектов в В могут служить основанием для установления очередности проведения дорогостоящей детальной разведки объектов В. Неопределенность объекта из В по отношению к сводному массиву С можно интерпретировать как "непохожесть объекта из В на большинство объектов сводного массива".

Для оценивания неопределенности ("непохожести") можно использовать характеристики, получаемые с помощью SVD <sup>\*)</sup>.

## 2.1. Схема SVD

Кратко схему SVD можно представить так. Пусть X - таблица "объект-признак", размера  $m \times n$ ; число объектов -  $m$ ; число признаков -  $n$ . Элемент  $x_{ik}$  есть значение  $k$ -го признака на  $i$ -ом объекте.

$w = X^T \cdot X$  - ковариационная матрица (к.м.). (Это определение не совпадает с определением, принятым в математической статистике).

Основная задача: нахождение собственных чисел (с.ч.) и собственных векторов (с.в.) матрицы  $w$ .

Основное уравнение:

$$w u = \lambda u \quad (I)$$

Матрица  $w$  - симметричная, порядка  $n$ . Поэтому все с.ч., получаемые в основной задаче - вещественные. Некоторые из них могут быть нулевыми. Предполагается, что среди ненулевых с.ч. нет кратных.

Решение основной задачи выполняется по стандартной схеме. Собственному числу  $\lambda_1$  соответствует с.в.  $u^{(1)} = (u_{11}, \dots, u_{n1})^T$ .

$$\Lambda = (\lambda_1, \dots, \lambda_n) \quad (2)$$

---

<sup>\*)</sup> SVD - singular values decomposition (сингулярное разложение).

Спектр  $\Lambda$  представляется диагональной матрицей  $L$  :

$$L = \begin{bmatrix} \lambda_1 & & & & 0 \\ & \cdot & & & \\ & & \cdot & & \\ & & & \cdot & \\ & 0 & & & \lambda_n \end{bmatrix} \quad (3)$$

Набор с.в.  $u^{(i)}$  ( $i = 1, \dots, n$ ) образует матрицу с.в.  $U$ , в которой  $i$ -й столбец есть  $i$ -й с.в.:

$$U = \left| \begin{pmatrix} u_{11} \\ \vdots \\ u_{n1} \end{pmatrix} \cdot \cdot \cdot \begin{pmatrix} u_{n1} \\ \vdots \\ u_{nn} \end{pmatrix} \right| \quad (4)$$

Имеет место ортонормированность:  $U^T \cdot U = L$ . В дальнейшем предполагается, что с.ч.  $\lambda_i$ , образующие спектр, располагаются в убывающем порядке. Максимальному с.ч.  $\lambda_1$  соответствует главный с.в.

Основное уравнение в матричном виде:

$$WU = UL \quad (5)$$

Решение его есть пара матриц  $L$ ,  $U$ , содержащих набор с.ч. и с.в.  
 $Y$  - матрица главных компонент:

$$Y = XU; \quad (Y^T Y = L) \quad (6)$$

$V$  - матрица нормированных главных компонент

$$V = XU L^{-1/2} \quad (7)$$

Примечание. Формула (6) применяется только в том случае, если среди с.ч. нет нулевых или "почти нулевых".

Ортонормированность:

$$V^T \cdot V = I. \quad (8)$$

Соотношение (8) может быть использовано для контроля вычислений.

Сингулярное разложение (SVD) таблицы данных  $X$ :

$$X = VL^{-1/2} \cdot U^T. \quad (9)$$

Приближенное SVD с параметром  $k$ :

$$X \approx V_k L_k^{-1/2} U_k^T \quad (k \leq n). \quad (10)$$

Матрицы  $V_k$ ,  $L_k$ ,  $U_k$  образуются первыми  $k$  - столбцами матриц  $V$ ,  $L$ ,

$U$ , соответственно. При этом отбрасывается нулевая часть спектра (2), а также может быть еще несколько с.ч. в соответствии с выбором  $k$ .

Целочисленный параметр  $k$  есть параметр регуляризации.

Норма погрешности приближенного SVD:

$$R_k = \| X - V_k L_k^{-1/2} U_k^T \|^2. \quad (11)$$

Скалярная запись представления (10):

$$x_{ij} \approx \sum_{s=1}^k \frac{\lambda_s^{-1/2}}{s} v_{is} u_{js}. \quad (12)$$

Слагаемое:

$$z_{ij}^{(s)} = \lambda_s^{-1/2} v_{is} u_{js} \quad (13)$$

есть, по определению,  $s$ -я факторная компонента значения  $x_{ij}$ .

Матрица

$$Z_s = \| z_{ij}^{(s)} \| = \| \lambda_s^{-1/2} v_{is} u_{js} \| \quad (14)$$

есть  $s$ -я (матричная) факторная компонента  $X$ .

Таким образом, таблица данных  $X$  представляется как приближенная сумма  $k$ -факторных компонент.

$$X \approx \sum_{s=1}^k Z_s. \quad (15)$$

Если  $k = n$ , то соотношение (15) превращается в точное равенство

$$X = \sum_{s=1}^n Z_s. \quad (16)$$

### 3. Упрощенный способ

Сначала выполняется центрирование и нормирование данных сводного массива. Центрирование состоит в приведении всех данных к началу координат, определяемому средними арифметическими значениями (по каждому признаку), нормирование - в выборе масштабов (по каждому признаку), для получения удобных для последующей обработки чисел. Фиксируется параметр  $k$  - глубина SVD. В дальнейшем индекс  $k$  опускается (для упрощения обозначений). Выполняется

преобразование SVD для сводного массива С:

$$C = VL^{1/2}U^T.$$

Выделяется представление SVD для пробного массива В:

$$B = \tilde{V}L^{1/2}U^T.$$

Матрица  $\tilde{V}$  есть часть V; размер  $\tilde{V}$  есть  $(m_B \times n)$ .

Возьмем  $i$ -й объект ( $b_i$ ) массива В. Ему соответствует  $i$ -я строка  $\tilde{V}_i$  матрицы  $\tilde{V}$  нормированных компонент:

$$\tilde{V}_i = (\tilde{v}_{i1}, \dots, \tilde{v}_{ik}).$$

Мера неопределенности (непохожести) объекта  $b_i$  есть  $\gamma_i^2$ :

$$\gamma_i^2 = \tilde{V}_i \tilde{V}_i^T = \tilde{v}_{i1}^2 + \dots + \tilde{v}_{ik}^2.$$

Величина  $\gamma_i^2$  есть квадрат расстояния объекта  $b_i$  от начала координат, совпадающего с центром тяжести массива С. Большое значение  $\gamma_i^2$  может быть обусловлено либо неточностью измерений признаков  $b_i$ , либо фактической непохожестью (нетипичностью) объекта  $b_i$ . Как в первом, так и во втором случае детальная разведка на объекте  $b_i$  (имеющем относительно большое значение  $\gamma_i^2$ ) может дать существенную дополнительную информацию. В первом случае будет исправлена большая неточность предварительных данных; во втором — будет подтверждена значительная непохожесть (оригинальность) объекта  $b_i$ .

Набор величин  $\gamma_i^2$ , расположенных в убывающем порядке, задает порядок (очередность) детальной разведки объектов В.

### 3.1. Оценивание неопределенности посредством восстановления фиктивных пропусков

Более надежный (но зато весьма трудоемкий) способ оценивания неопределенности основан на поэлементном восстановлении фиктивных пропусков по методу, описанному в работе /5/.

Возьмем сводный массив  $C = AUB$ . Фиксируем параметр  $k$  — глубину SVD. Данные  $C$  — не обязательно центрированные.

Выделим объект  $b_i$  в поисковом массиве В, и возьмем значение  $b_i$  (элемент, лежащий в  $i$ -й строке и в  $j$ -ом столбце).

Считая, что значение  $b_{ij}$  неизвестно (пропуск), восстановим его по методу, описанному в названной работе (модификация гребневой регрессии на основе SVD).

Пусть полученная оценка есть  $\beta_{ij}$ . Квадрат разности  $\rho_{ij}^2 = (\beta_{ij} - b_{ij})^2$  характеризует неопределенность (информативность) элемента  $b_{ij}$  относительно сводного массива (в рамках линейных методов). Если величина  $\rho_{ij}^2$  относительно мала, то это означает, что элемент  $b_{ij}$  дает мало дополнительной информации (ввиду его хорошей восстанавливаемости линейными методами по массиву  $c$ ). Если величина  $\rho_{ij}^2$  относительно велика, желательно проверить, вызвано ли это отклонение ошибками измерений или же фактической непохожестью (нетипичностью) объекта  $b_i$  по  $j$ -му признаку.

Величина  $\tau_i^2 = \sum_{j=1}^n \rho_{ij}^2$  характеризует нетипичность объекта  $b_i$  в среднем по всем признакам. Для нахождения  $\tau_i^2$  надо вычислить набор  $\rho_{ij}^2$  для всех значений  $j$  (т.е. для всех признаков объекта  $b_i$ ).

Такой метод оценивания неопределенности (или нетипичности) можно назвать "методом фиктивных пропусков". Для его реализации требуется многократное применение алгоритма восстановления одиночных пропусков (см. /5/).

## Литература

1. Алберт А. Регрессия, псевдорегрессия и рекуррентное оценивание. М.: Наука, 1977. 220 с.
2. Васильев Ю.Л., Дмитриев А.Н. Спектральный подход к сравнению объектов, охарактеризованных набором признаков // Докл. АН СССР. 1972. Т.206. №6. С. 1309-1312.
3. Дмитриев А.Н., Афанасьев С.А. Математические методы и геологоразведка // Геология и геофизика. 1987. №8. С. 10-17.
4. Йереског К.Г., Клован Д.И., Реймент Р.А. Геологический факторный анализ. Л.: Недра, 1980. 224 с.
5. Макаров С.В. Восстановление одиночного пропуска в таблице "объект-признак" на основе сингулярного разложения данных // Логико-математические методы в геологических исследованиях.

6. Методы согласованных оценок: Метод. рекомендации / Дмитриев А.Н., Макаров С.В., Смертин Е.А. и др. Новосибирск: Изд. ИГиГ СО АН СССР, 1982. 144 с.

С.В.Макаров

ФАКТОРНОЕ РАЗЛОЖЕНИЕ НЕПОЛНЫХ ТАБЛИЦ  
И ВОССТАНОВЛЕНИЕ ПРОПУСКОВ

Предполагается метод вычисления собственных чисел и собственных векторов, применимый для обработки таблиц типа "объект-признак", содержащих пропуски.

§ I. Сингулярное разложение (SVD)

Дана таблица "объект-признак":  $X = \|x_{ik}\|$ . Строка  $x_i$  соответствует  $i$ -му объекту, столбец  $x_k$  - соответствует  $k$ -му признаку. Элемент  $x_{ik}$  есть значение  $k$ -го признака на  $i$ -ом объекте ( $i = 1, \dots, m, k = 1, \dots, n$ ). Примем для определенности, что  $m \geq n$ .

Матрица  $X^T X$  - симметричная, поэтому ее собственные числа (с.ч.) вещественные. Будем считать, что ранг  $X^T X$  равен  $n$  и что все собственные числа  $X^T X$  - однократные. Запишем их в убывающем порядке:  $\lambda_1, \dots, \lambda_n$ . Сингулярные значения:

$$\gamma_i = \lambda_i^{1/2} \quad (i=1, \dots, n).$$

Матрица  $X X^T$  имеет те же нулевые собственные числа и, кроме того,  $(m - n)$  нулевых собственных чисел.

Вектор  $u_i$  есть собственный вектор (с.в.) матрицы  $X^T X$ , соответствующий с.ч.  $\lambda_i$ .

Вектор  $v_i$  есть с.в. матрицы  $X X^T$ , соответствующий с.ч.  $\lambda_i$ .

По определению с.в. имеем:

$$X^T X u_i = \lambda_i u_i \quad (u_i^T u_i = 1); \quad (1)$$

$$X X^T v_i = \lambda_i v_i \quad (v_i^T v_i = 1). \quad (2)$$

Векторы  $u, v$  связаны соотношениями:

$$\left. \begin{aligned} u_i &= \lambda_i^{-1/2} X^T v_i \\ v_i &= \lambda_i^{-1/2} X u_i \end{aligned} \right\} \quad (3)$$

$$(4)$$

Основным блоком излагаемых ниже алгоритмов является задача нахождения максимального с.ч. и соответствующего главного собственного вектора (г.с.в.) - задача ГСВ.

Рассмотрим задачу об аппроксимации прямоугольной матрицы матрицей меньшего ранга.

Дана прямоугольная матрица  $X$  размера  $(m \times n)$ , ранга  $n$ . Требуется вычислить матрицу  $X_k$  ранга  $k < n$ , являющуюся наилучшим приближением к  $X$  по евклидовой норме, т.е. матрицу, на которой обращается в минимум норма погрешности:

$$R = \|X - X_k\|^2 = \text{tr} [(X - X_k)^T (X - X_k)] \quad (5)$$

Решение этой задачи дается формулой

$$X_k = \lambda_1^{1/2} v_1 u_1^T + \dots + \lambda_k^{1/2} v_k u_k^T \quad (X_n = X), \quad (6)$$

где  $\lambda, u, v$  являются решением уравнений (1) -- (4).

При  $k = n$  возникает сингулярное разложение (SVD), гарантируемое теоремой Экарта-Янга о базисной структуре:

$$X = \lambda_1^{1/2} v_1 u_1^T + \dots + \lambda_n^{1/2} v_n u_n^T. \quad (7)$$

Другая формулировка задачи:

- найти набор величин  $\lambda_i, u_i, v_i$  ( $i = 1, \dots, n$ ), на которых обращается в минимум норма погрешности:

$$R = \|X - \sum_{i=1}^n \lambda_i^{1/2} v_i u_i^T\|^2 \rightarrow \min \quad (8)$$

при условии:  $u_i^T \cdot u_i = 1, \quad v_i^T \cdot v_i = 1.$

Определение.

Матрица  $\Phi_i = \lambda_i^{1/2} v_i u_i^T$  есть  $i$ -я факторная компонента (ф.к.) матрицы  $X$ .

Сингулярное, или факторное, разложение

$$X = \sum_{i=1}^n \Phi_i. \quad (9)$$



Приближенное факторное разложение

$$X \approx \sum_{i=1}^k \Phi_i \quad (10)$$

О сингулярном разложении (базисной структуре) см. /1, 2/.

Совокупность столбцов  $u_i$  образует матрицу  $U (m \times n)$ . Совокупность столбцов  $v_i$  образует матрицу  $V (m \times n)$ . Матрица  $L^{1/2}$  есть диагональная матрица с элементами  $1/2$ .

Матрицы  $L, U, V$  связаны соотношениями:

$$X^T X U = U L, X X^T V = V L, U^T U = I, V^T V = I. \quad (11)$$

Сингулярное разложение (7) в матричном виде:

$$X = V L^{1/2} U^T. \quad (12)$$

Псевдообратная матрица  $X^+$  определяется свойствами:

$$\begin{aligned} X X^+ X &= X, & X^+ X X^+ &= X^+ \\ X^+ X, X X^+ &- \text{симметричные} \end{aligned} \quad (13)$$

Если столбцы  $X$  линейно независимы, то  $X^+ = (X^T X)^+ X^T$ .

Имея разложение (12), легко получить псевдообращение

$$X^+ = U L^{-1/2} V^T. \quad (14)$$

Обозначение:  $U_k, V_k$  - суть матрицы, составленные первыми  $k$  - столбцами матриц  $U, V$ . Матрица  $L_k^{1/2}$  - диагональная, имеющая на главной диагонали  $\lambda_1^{1/2} \dots \lambda_k^{1/2}$ .

Приближенное сингулярное разложение

$$X \approx V_k L_k^{1/2} U_k^T. \quad (15)$$

Приближенное псевдообращение

$$X^+ \approx U_k L_k^{-1/2} V_k^T. \quad (16)$$

Примечание. Уравнения вида (11) возникают в известном методе главных компонент (МГК). Но в отличие от классического варианта МГК, где элементы  $X$  - центрированные данные, здесь входные данные могут быть любыми (не обязательно центрированными и нормированными).

## § 2. Вычислительная процедура

Элементы матриц  $L, U, V$  могут быть найдены как решение полной проблемы собственных значений из уравнений (1), (2). Мож-

но использовать какой-либо алгоритм нахождения с.ч. и с.в. симметричных матриц, например, метод исчерпывания /4/, в котором с.ч. и с.в. находятся последовательно, как решение задачи ГСВ (см. § I).

Существует другой подход к этой вычислительной проблеме: нахождение  $\lambda$ ,  $u$ ,  $v$  как элементов, минимизирующих (5). В такой постановке задача также может решаться последовательно: сначала отыскиваются величины  $\lambda_1, u_1, v_1$ , затем  $\lambda_2, u_2, v_2$  и т.д.

### Схема вычислительного алгоритма

1. Минимизировать функционал  $R_1$ :

$$R_1 = \| z_1 - \lambda_1^{1/2} v_1 u_1^T \|^2; \quad (u_1^T u_1 = 1, v_1^T v_1 = 1); \quad z_1 = x. \quad (17)$$

Сформировать матрицу  $z_2 = z_1 - \lambda_1^{1/2} v_1 u_1^T$ .

2. Минимизировать  $R_2$ :

$$R_2 = \| z_2 - \lambda_2^{1/2} v_2 u_2^T \|^2; \quad (u_2^T u_2 = 1, v_2^T v_2 = 1). \quad (18)$$

Сформировать матрицу  $z_3 = z_2 - \lambda_2^{1/2} v_2 u_2^T$ .

3. Минимизировать  $R_3$ :

$$R_3 = \| z_3 - \lambda_3^{1/2} v_3 u_3^T \|^2; \quad (u_3^T u_3 = 1, v_3^T v_3 = 1) \quad (19)$$

и т.д., кончая нахождением  $\lambda_k, u_k, v_k$  ( $k \leq n$ ).

Таким образом на  $i$ -ом этапе решается задача на минимум:

$$R_i = \| z_i - \lambda_i^{1/2} v_i u_i^T \|^2 \rightarrow \min, \quad (u_i^T u_i = 1, v_i^T v_i = 1) \quad (20)$$

Известно, что минимум  $R_i$  достигается на г.с.в. матриц  $z_i^T, z_i, z_i z_i^T$ , которые можно найти, решив задачу ГСВ. При такой конкретизации рассматриваемая вычислительная схема представляет собой не что иное, как метод исчерпывания /4/.

Однако такая конкретизация не является обязательной. Задача на минимум (17) может решаться каким-либо численным методом (например, методом покоординатного спуска), пригодным для широкого класса функций, непосредственно, без вычисления матриц  $z^T z$ ,  $z z^T$  и без использования методов и программ решения задачи ГСВ.

Такая непосредственная минимизация будучи невыгодной в вычислительном отношении для функционалов вида (17), может оказать-

ся эффективной для функционалов более общего вида, для которых процедура задачи ГСВ неприменима. Один из таких функционалов будет рассмотрен в следующем параграфе.

### § 3. Факторное разложение таблиц с пропусками

Пусть таблица  $X$  содержит пропуски  $\tilde{x}_{ik}$ . Термин "пропуск  $\tilde{x}_{ik}$ " означает, что значение  $x_{ik}$  неизвестно. В таблице не должно быть строк и столбцов, состоящих только из пропусков. В остальном количество и размещение пропусков в таблице могут быть, вообще говоря, произвольными. Но при "неудачной" конфигурации множества пропусков вычислительный процесс, излагаемый ниже, может расколоться или приводить к тривиальному результату.

Введем индикатор пропусков -  $\zeta_{ik}$ .

Определение  $\zeta_{ik} = \begin{cases} 0, & \text{если } x_{ik} \text{ неизвестно (пропуск)} \\ 1, & \text{если } x_{ik} \text{ известно ("непропуск")} \end{cases}$

Будем искать сингулярное (факторное) разложение  $X$  в виде (9), вычисляя ф.к.  $\Phi_i$  последовательно, как в схеме § 2, но с другим критерием качества.

Детализируем обозначение векторов  $u_i, v_i$ :

$$u_s = \begin{pmatrix} u_{s1} \\ \vdots \\ u_{sn} \end{pmatrix} \quad v_s = \begin{pmatrix} v_{s1} \\ \vdots \\ v_{sm} \end{pmatrix} \quad (21)$$

Первая факторная компонента

$$\Phi_1 = \lambda_1^{1/2} v_1 u_1^T. \quad (22)$$

Критерий качества для  $\Phi_1$ :

$$Q_1 = \sum_{i=1}^m \sum_{k=1}^n \zeta_{ik} (x_{ik} - \lambda_1^{1/2} v_{1i} u_{1k})^2 \rightarrow \min_{(\lambda, u, v)} \quad (23)$$

В норму погрешности  $Q_1$  входят отклонения от "непропусков". Неизвестные значения (пропуски)  $\tilde{x}_{ik}$  элиминируются индикатором  $\zeta_{ik}$ .

Если пропусков нет ( $\zeta_{ik} \equiv 1$ ), то  $Q$  совпадает с  $R_1$  (17).

Условия минимума  $Q_1$  по  $u_{1i}, v_{1k}$ :

$$u_{1k} = \frac{\sum_{i=1}^m \xi_{ik} x_{ik} v_{1i}}{\sum_{i=1}^m \xi_{ik} v_{1i}^2}; \quad v_{1i} = \frac{\sum_{k=1}^n \xi_{ik} x_{ik} u_{1k}}{\sum_{k=1}^n \xi_{ik} u_{1k}^2}. \quad (24)$$

При этом

$$\lambda_1 = \frac{\sum_{i=1}^m \sum_{k=1}^n \xi_{ik} v_{1i} u_{1k}}{\sum_{i=1}^m \sum_{k=1}^n \xi_{ik} v_{1i}^2 u_{1k}^2}; \quad (25)$$

Обозначения:

$$\mu_k^{-1}(v) = \sum_{i=1}^m \xi_{ik} v_{1i}^2; \quad \gamma_i^{-1}(u) = \sum_{k=1}^n \xi_{ik} u_{1k}^2 \quad (26)$$

$$G_v = \begin{pmatrix} \mu_1(v) & & 0 \\ & \ddots & \\ 0 & & \mu_n(v) \end{pmatrix}; \quad H_u = \begin{pmatrix} \gamma_1(u) & & 0 \\ & \ddots & \\ 0 & & \gamma_m(u) \end{pmatrix} \quad (27)$$

Введя нормирующие множители  $\rho$ ,  $\tau$ , запишем условия (24) в сжатом виде:

$$\left. \begin{aligned} u &= \rho G_v X^T v \\ v &= \tau H_u X^* u \end{aligned} \right\} \quad (28)$$

Систему (28) можно решить методом итерации.

Начальное значение вектора  $u_1$ :

$$u_1^{(0)} = \text{const} (1, \dots, 1)^T \quad (29)$$

Нормирующие множители  $\rho$ ,  $\tau$  определяются на каждом этапе итерационного процесса условием нормировки:

$$u_1^T \cdot u_1 = 1, \quad v_1^T v_1 = 1. \quad (30)$$

Полученное решение системы (28) дает ф.к.  $\Phi_1$ .

Затем формируется матрица  $Z_2 = \left\| z_{ik}^{(2)} \right\|$

$$\left. \begin{aligned} z_{ik}^{(2)} &= x_{ik} - \lambda_1^{1/2} v_{1i} u_{1k}, & \text{если } \xi_{ik} &= 1, \\ z_{ik}^{(2)} &= 0, & \text{если } \xi_{ik} &= 0. \end{aligned} \right\} \quad (31)$$

Примечание. В случае  $\xi_{ik} = 0$  величину  $z_{ik}$  можно приравнять

любому числу (значение  $z_{ik}^{(2)} = 0$  выбрано для определенности).

С матрицей  $Z_2$  выполняется такая же вычислительная процедура.

$$Q_2 = \sum_{i=1}^m \sum_{k=1}^n \zeta_{ik} (z_{ik}^{(2)} - \lambda_2^{1/2} v_{2i} u_{2k})^2 \rightarrow \min_{(\lambda, u, v)} \quad (32)$$

Значения  $\lambda_2, u_2, v_2$  дают ф.к.  $\Phi_2$ .

Формируется матрица  $Z_3 = \|z_{ik}^{(3)}\|$ :

$$z_{ik}^{(3)} = z_{ik}^{(2)} - \lambda_2^{1/2} v_{2i} u_{2k}, \quad \text{если } \zeta_{ik} = 1, \quad (33)$$

$$z_{ik}^{(3)} = 0, \quad \text{если } \zeta_{ik} = 0,$$

$$Q_3 = \sum_{i=1}^m \sum_{k=1}^n \zeta_{ik} (z_{ik}^{(3)} - \lambda_3^{1/2} v_{3i} u_{3k})^2 \rightarrow \min_{(\lambda, u, v)} \quad (34)$$

Значения  $\lambda_3, u_3, v_3$  дают ф.к.  $\Phi_3$  - и т.д.

На каждом этапе минимизируется функционал:

$$Q_S = \sum_{i=1}^m \sum_{k=1}^n \zeta_{ik} (z_{ik}^{(S)} - \lambda_S^{1/2} v_{Si} u_{Sk})^2 \rightarrow \min_{(\lambda, u, v)} \quad (35)$$

$$(u_S^T u_S = 1, \quad v_S^T v_S = 1).$$

При  $S = 1$  формула (35) должна совпадать с (28). Для этого следует ввести обозначения:  $z_{ik}^{(1)} = x_{ik}$ ,  $Z_1 = \|z_{ik}^{(1)}\| = X$ .

После  $r$ -го этапа получаем факторное разложение:

$$X \approx \Phi_1 + \dots + \Phi_r \quad (36)$$

Значение  $r$  ("глубина") является параметром регуляризации. Для конкретных данных оптимальное значение  $r$  может быть найдено экспериментально. На первой стадии обработки величина  $r$  назначается произвольно или с учетом спектра  $\lambda_i$  подобно тому, как это делается в МК при выборе количества компонент.

Сумма в правой части (36) есть матрица, в которой все элементы являются известными (вычисленными), тогда как матрица  $X$  в левой части (36) содержит пропуски  $\tilde{x}_{ik}$ .

Таким образом возникают "факторные" оценки:

$$\tilde{x}_{ik} = \lambda_1^{1/2} v_{1i} u_{1k} + \dots + \lambda_r^{1/2} v_{ri} u_{rk} \quad (37)$$

Эти оценки не являются наилучшими (в смысле МК). Для полу-

чения оценок, более близких к оценкам МНК, рекомендуется сначала вычислить, как указано выше, факторные оценки (37), и затем, выделяя поочередно пропуски  $x_{ik}$  вычислить для них регрессионные оценки (используя в процессе вычислений оценки (37)).

На практике часто обнаруживается явление мультиколлинеарности, которое проявляется в неустойчивости регрессионных оценок по отношению к варьированию данных. В таком случае рекомендуется вычислить гребневые оценки.

Один из вариантов метода гребневой регрессии, основанный на сингулярном разложении с псевдообращением, описан в работе /3/. Приведем окончательный результат.

Пусть требуется оценить пропуск  $\tilde{x}_{ik}$ .

Обозначения. Вектор-строка  $a_i$  есть строка в  $X$  без элемента  $x_{ik}$ . Вектор-столбец  $b_k$  есть столбец в  $X$  без элемента  $x_{ik}$ . Матрица  $\tilde{X}$  получается из  $X$  удалением элементов  $\tilde{x}_{ik}$ ,  $a_i$ ,  $b_k$ .

Гребневая оценка пропуска

$$\tilde{x}_{ik} = a_i \tilde{X}_T^+ b_k, \quad (38)$$

$\tilde{X}_T^+$  - приближенная псевдообратная матрица (I6).

Предложенный метод оценивания пропусков (с предварительным вычислением факторных оценок) может быть эффективным при относительно большом количестве пропусков.

Примечание. Термины "сингулярное разложение" и "факторное разложение" в применении к таблицам без пропусков являются синонимами. Но для таблиц, имеющих пропуски, рекомендуется специальный (обобщающий) термин: "факторное разложение". Это вызвано тем, что представления (10) и (36), при формальном сходстве, скрывают существенное различие. Векторы  $u_i$ ,  $v_i$ , входящие в (10), обладают свойством ортогональности ( $U^T U = I$ ,  $V^T V = I$ ), тогда как аналогичные векторы  $u_i$ ,  $v_i$ , входящие в (36), вообще говоря, таким свойством не обладают.

## Литература

1. Алберт А. Регрессия, псевдорегрессия и рекуррентное оценивание. М.: Наука, 1977. 220 с.

2. Йереског К.Г., Клован Д.И.; Реймент Р.А. Геологический факторный анализ. Л.: Недра, 1980. 224 с.

3. Макаров С.В. Восстановление одиночного пропуска в таблице "объект-признак" на основе сингулярного разложения данных // Логико-математические методы в геологических исследованиях. Новосибирск, 1986. С. 25-29.

4. Фаддеев Д.К., Фаддеева В.Н. Вычислительные методы линейной алгебры. М.: Наука, 1963. 736 с.

В.Д.Карбышев, А.С.Вакуленко

АНАЛИЗ СООТНОШЕНИЙ ВЕСОВЫХ ПРОЦЕНТНЫХ  
И ОБЪЕМНЫХ СОДЕРЖАНИЙ ПОРОДООБРАЗУЮЩИХ  
ОКИСЛОВ НА ПРИМЕРЕ ТАББРОИДОВ НОРИЛЬСКИХ ИНТРУЗИЙ

Формы представления химического состава пород могут быть разными, например: весовые (массовые) процентные и объемные содержания породообразующих окислов. В первом случае - это широко используемые в петрохимии силикатные химические анализы, во-втором - расчеты объемной концентрации окислов (масса окисла в единице объема горной породы), используемые, например, в геохимии при анализе привноса и выноса вещества. По вопросу использования в практике петрохимических исследований весовых процентных или объемных содержаний окислов имеются различные точки зрения.

Одна из них основана на том, что это физически отличающиеся друг от друга величины, характеризующие разные особенности пород. Рядом исследователей /2, 3, 6 и др./ было показано, что использование процентных величин при петрохимических исследованиях существенно ограничено, а при изучении связей между содержаниями элементов в породе даже невозможно /10, 11, 12/. Так, А.Б.Вистелиус пишет /3, с. 110/: "... как поступать при изучении горных пород, исследуя соотношения между составляющими их химических анализов, неизвестно. Все способы пересчета в петрохимии (Харкера, Ниттли и Заварицкого) этот вопрос игнорируют. Исключительная важность его была понята Бартом, предложившим пересчитывать анализ на постоянное число атомов в некоторой кислородной ячейке.

Это предложение, в основе совершенно верное, иногда отвергалось из-за споров об упаковке кислородных атомов".

Другая точка зрения основана на том, что, несмотря на различие рассматриваемых величин, они в ряде случаев могут давать близкие результаты при характеристике пород. В.А.Рудник, например, считает /9, с. 16/: "Процентное выражение состава горных пород, руд и минералов, не приемлемое в общем случае для сравнительной характеристики указанных объектов, в отдельных случаях может быть с успехом использовано. Такими частными случаями являются: а) сравнение пород близкого минерального состава одной и той же классификационной группы; ...". Другими словами "однородные" в некотором смысле породы (например "гранитоиды", "габброиды") оказываются примером природной системы, когда искажения, вносимые процентным пересчетом, невелики /1, 5, 9/.

Вопрос использования весовых процентов и объемных содержаний подробно рассмотрен в работах Ю.А.Ткачева, Я.Э.Юдовича /13/ и В.В.Груза /4/. Авторы справедливо замечают, что необходимо различать закономерности (например, корреляционные зависимости), полученные для объемных концентраций породообразующих окислов и для весовых процентов этих же окислов. В первом случае речь идет о закономерностях между содержаниями окислов в породе, во втором - о закономерностях между весовыми их долями. Результаты будут эквивалентны друг другу, если плотность или объемный вес рассматриваемых пород не изменяется от пробы к пробе (или изменяется незначительно, что не сказывается существенно на результатах). Эти положения и были проверены для рассматриваемой группы оливиновых габбро-норитов норильских интрузий.

Прежде чем перейти к изложению полученных результатов, обратимся к понятию плотность породы и в связи с этим рассмотрим соотношение между весовыми (массовыми) процентными и объемными содержаниями породообразующих окислов.

Допустим, что химический состав образца породы состоит из двух окислов. В абсолютных весовых отношениях это будет выглядеть так:

$$P_1 + P_2 = P.$$

При переходе к относительным весовым отношениям сделаем следующее преобразование:

$$P_1/P + P_2/P = 1.$$



Отметим, что переход к процентным весовым отношениям осуществляется умножением на 100 правой и левой части уравнения.

Допустим, известна (измерена или рассчитана) величина плотности образца породы  $\rho$ . Умножим на  $\rho$  правую и левую часть уравнения:

$$\frac{P_1 \cdot \rho}{P} + \frac{P_2 \cdot \rho}{P} = \rho.$$

Подставим в левую часть уравнения вместо плотности ( $\rho$ ) выражение ее через вес и объем  $\rho = P/gV$ :

$$\frac{P_1 \cdot P}{P \cdot g \cdot V} + \frac{P_2 \cdot P}{P \cdot g \cdot V} = \rho.$$

Сократим в уравнении величину  $P$  и вместо  $P_1/g = m_1$ ,  $P_2/g = m_2$  подставим соответственно значения массы окислов  $m_1$  и  $m_2$ :

$$\frac{m_1}{V} + \frac{m_2}{V} = \rho,$$

где  $m_1/V$  и  $m_2/V$  и есть объемные содержания окислов в породе, другими словами, масса (количества вещества) окислов в единице объема или плотность окислов в породе.

Таким образом, умножая величину плотности породы на весовые доли окислов или их процентные содержания (с последующим делением на 100), можно перейти к объемным содержаниям этих окислов в породе. Отметим, что объемное содержание окисла в породе является величиной физически (аналитически), по-видимому, трудноизмеримой, редко используемой и петрохимически характеризующей породу с новой, малоизученной стороны.

Для изучения корреляционных связей в породе между весовыми процентными и объемными содержаниями окислов были использованы химические анализы ( $n = 207$ ) габброидов по семи дифференцированным интрузиям Норильского района (Верхне- и Нижне-Талнахская, Норильск-I и II, Гора Черная, Гора Зуб и Моронго), а также плотности пород, полученные при расчетах количественно-минерального состава габброидов /7,8/.

Плотность пород меняется для всей рассматриваемой совокупности в пределах 3,014 - 3,371 г/см<sup>3</sup>, возрастая от "троктолитовых" габбро-норитов и троктолитов к "пикритовым" габбро-норитам (рис. I). Перечисленные три разновидности пород были рассмотре-

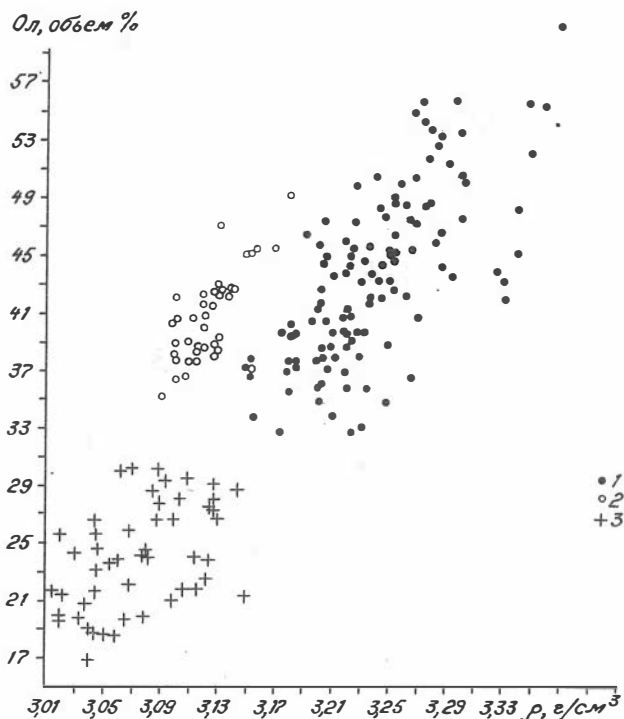


Рис. 1. Распределение разновидностей габброидов норильских интрузий по рассчитанным объемным содержаниям оливина и плотностям пород ( $n=207$ ):  
 1 - "пикритовые" габбро-нориты; 2 - троктолиты;  
 3 - "троктолитовые" габбро-нориты

ны и выделены с использованием логико-математических средств в результате количественно-минералогической и химической классификации /8/. Как видно на рис. 1, плотность породы является так же, как и содержание оливина, сильным классифицирующим критерием для перечисленных разновидностей пород. Отметим, что классифицирующая роль плотности породы сохраняется в сочетании с содержаниями плагиоклаза, окислов магния, алюминия, с которыми у плотности тесная корреляционная связь: с оливином ( $r = 0,81$ ),

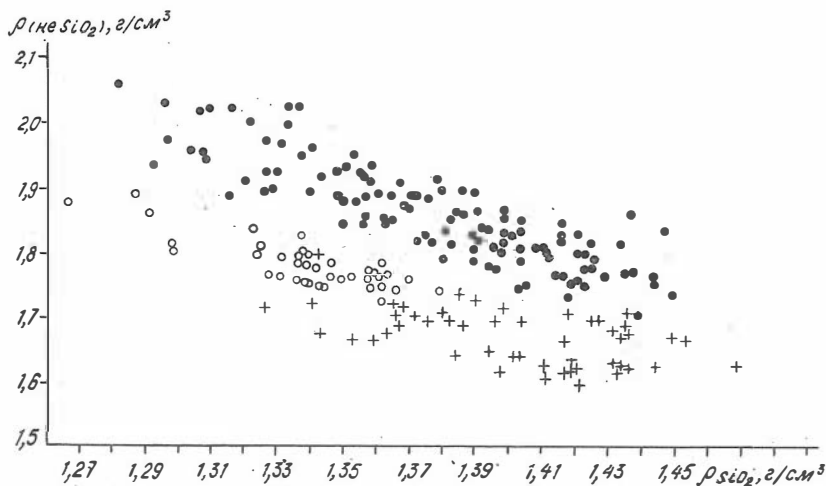


Рис. 2. Распределение разновидностей пород по рассчитанным плотностям (объемным содержаниям) кремнезема и прочих окислов ("некремнезема"). Усл. обозн. см. на рис. I.

плагноклазом ( $r = -0,96$ ), магнием ( $r = 0,87$ ), алюминием ( $r = -0,95$ ).

Отметим, что самостоятельная классифицирующая роль сохраняется для плотности породы как таковой (рис. 2), если плотность разделить на две части: "кремнеземную" и "некремнеземную". Кроме того, здесь заложена и генетическая информация (см. рис. I, 2). Так, плотность у "пикритовых" габбро-норитов и общая, и разделенная больше, чем у двух других разновидностей пород. В свою очередь, троктолиты и "троктолитовые" габбро-нориты также отличаются друг от друга. В троктолитах (см. рис. I, 2) общая плотность породы и плотность "некремнеземной" части больше, а плотность кремнезема меньше, чем в "троктолитовых" габбро-норитах. Такое разнонаправленное поведение вещества в породах может говорить о генетической обособленности рассматриваемых разновидностей пород относительно друг друга. Это согласуется с полученными ранее результатами [8] выделения трех резко разобнесенных групп пород на количественно-минералогической основе.

Таблица I

Коэффициенты корреляции для весовых процентных (первая строка) и объемных (вторая строка) содержаний породообразующих окислов в породах норильских интрузий

Окислы	TiO <sub>2</sub>	Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	Fe <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	FeO	MnO	MgO	CaO	Na <sub>2</sub> O	K <sub>2</sub> O	P <sub>2</sub> O <sub>5</sub>
SiO <sub>2</sub>	0,15	0,57	-0,56	-0,40	-0,13	-0,71	0,68	0,50	0,48	0,10
	0,28	-0,03	-0,28	-0,25	0,09	-0,26	0,27	0,16	0,48	0,07
TiO <sub>2</sub>	-	-0,16	0,15	-0,03	0,24	-0,15	0,10	0,27	0,17	0,22
		-0,22	0,18	0,02	0,26	-0,08	0,08	0,25	0,16	0,22
Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub>		-	-0,61	-0,24	-0,40	-0,88	0,77	0,61	0,12	0,07
			-0,64	-0,33	-0,47	-0,90	0,72	0,56	0,07	0,03
Fe <sub>2</sub> O <sub>3</sub>			-	-0,27	0,26	0,52	-0,43	-0,26	-0,11	-0,04
				-0,15	0,31	0,57	-0,42	-0,25	-0,09	-0,02
FeO				-	-0,002	0,20	-0,48	-0,10	-0,38	-0,05
					0,08	0,31	-0,53	-0,14	-0,37	-0,04
MnO					-	0,31	-0,28	-0,25	0,03	0,08
						0,38	-0,32	-0,27	0,02	0,09
MgO						-	-0,86	-0,74	-0,28	-0,18
							-0,83	-0,71	-0,24	-0,14
CaO							-	0,47	0,42	0,21
								0,40	0,40	0,18
Na <sub>2</sub> O								-	-0,07	0,18
									-0,12	0,16
K <sub>2</sub> O									-	0,09
										0,08

Рассмотрим поведение корреляционных связей при переходе от процентных величин к объемным. Для исходной матрицы (X) химических анализов (n = 207) были получены коэффициенты парной корреляции (табл. I, первая строка) между окислами (между процентными весовыми содержаниями окислов). Затем матрица (X) была преобразована в (X') путем умножения каждого химического анализа на соответствующую плотность породы (с последующим делением на 100), т.е. осуществлен переход к объемным содержаниям окислов. Для преобразованной матрицы (X') рассчитаны коэффициенты парной корреляции между объемными содержаниями окислов (см. табл. I, вто-

рая строка). Из корреляционной матрицы (см. табл. I) видно, что коэффициенты парной корреляции заметно изменяются только для кремнезема при переходе от весовых процентных содержаний к объемным. При этом величины корреляции кремнезема с большинством окислов уменьшаются (по модулю) для объемных содержаний по сравнению с процентными, кроме титана, у которого происходит увеличение корреляции, и калия, фосфора, марганца – здесь корреляция остается неизменной. Причины такого поведения корреляции для кремнезема могут быть разные.

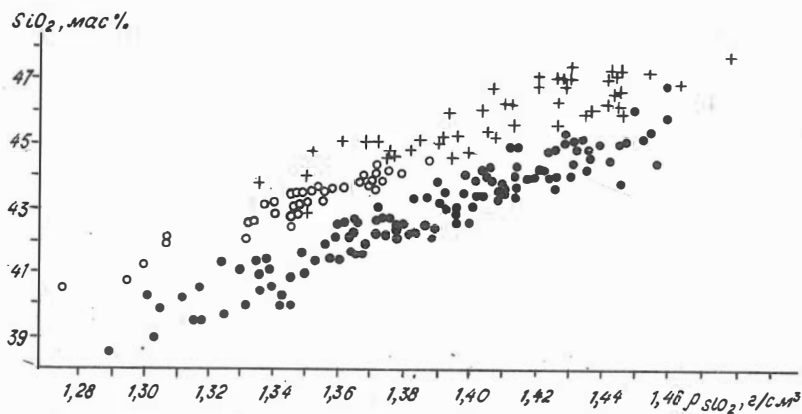


Рис. 3. Распределение разновидностей пород по весовому процентному и рассчитанному объемному содержанию кремнезема.

Усл. обозн. см. на рис. I

Так, кремнезему принадлежит наибольшая весовая доля в химическом анализе, т.е. кремнезем – наибольшая по абсолютному значению величина. Возможно по этой причине при умножении на плотность породы происходит существенный разброс значений кремнезема (рис. 3) по сравнению с другими окислами, например; магния и двухвалентного железа (рис. 4, а, б). Соответственно и коэффициент корреляции между процентным и объемным содержанием кремнезема меньше, чем такого же рода коэффициенты для других окислов (табл. 2).

Таблица 2

Коэффициенты корреляции между весовыми процентными и объемными содержаниями одного и того же окисла

SiO <sub>2</sub>	TiO <sub>2</sub>	Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	F <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	FeO	MnO	MgO	CaO	Na <sub>2</sub> O	K <sub>2</sub> O	P <sub>2</sub> O <sub>5</sub>
0,809	0,998	0,999	0,999	0,993	0,996	0,998	0,997	0,998	0,999	0,999

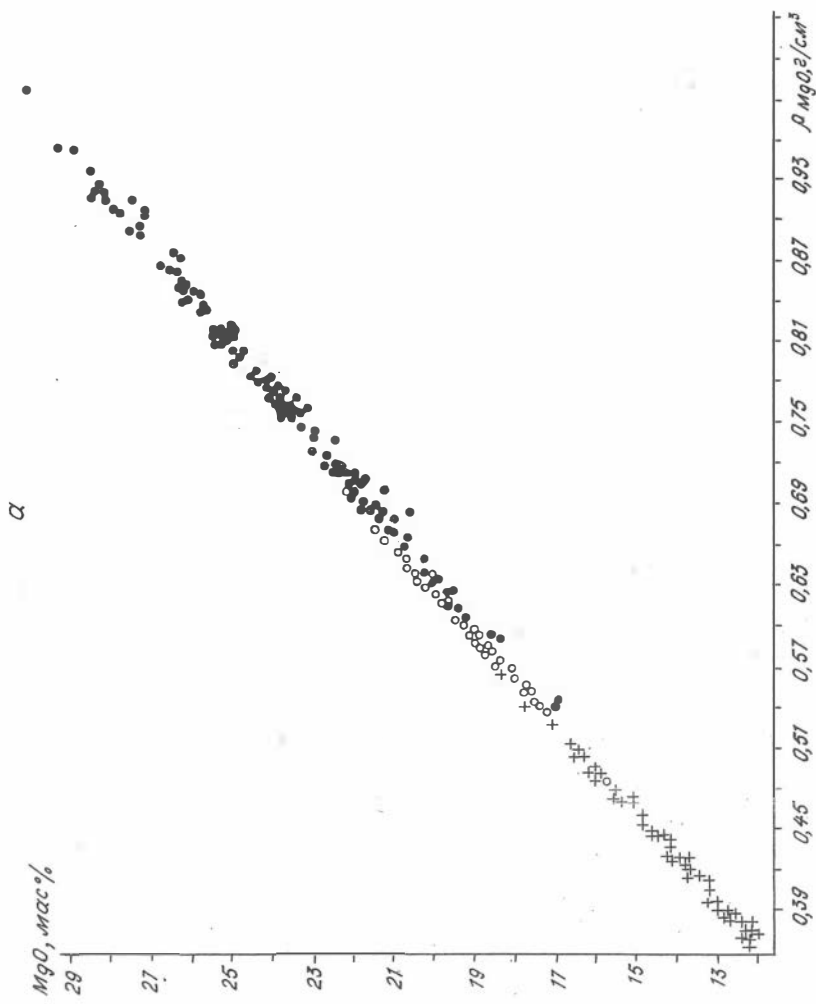
Таким образом, данные приведенных диаграмм (см. рис. 3; 4, а, б) и табл. 2 не противоречат тому, что возможная причина аномальных корреляций для кремнезема (см. табл. I) – влияние самого кремнезема как большой величины на силу связи его с другими окислами при переходе от процентных содержаний к объемным. Далее нами было сделано предположение, что величина кремнезема является не единственной причиной, влияющей на корреляцию. Предположение\* проверялось следующим образом.

При переходе от процентных величин к объемным был использован набор плотностей пород, отличающийся от первоначального набора. Для каждого химического анализа породы ( $k = 207$ ) выбиралась случайным образом (с помощью датчика случайных чисел) плотность из имеющегося первоначального набора. Такая операция проводилась три раза, соответственно получено три набора плотностей пород ( $\rho_1, \rho_2, \rho_3$ ) и матрицы объемных содержаний окислов ( $X_1, X_2, X_3$ ). Для этих матриц рассчитаны коэффициенты корреляции (табл. 3, вторая, третья и четвертая строка).

Можно констатировать, что для всех окислов, кроме кремнезема, корреляция осталась практически на одном уровне, независимо от того, использовалось их весовое или объемное содержание.

В объемных содержаниях для кремнезема величина связи с алюминием, трехвалентным железом, магнием, кальцием и натрием изменилась в сторону сближения с исходным (весовым процентным, см. табл. 3, первая строка) вариантом. Значит при переходе к объемным содержаниям в исходном случае (см. табл. I) на силу связи

\* Если большая величина кремнезема единственная причина, влияющая на силу связи при переходе от весовых процентных содержаний к объемным, то как бы мы не выбирали в других случаях плотности пород в рассматриваемом диапазоне их значений, коэффициенты корреляции для объемных содержаний окислов должны быть такие же, как и в первоначальном случае (см. табл. I).



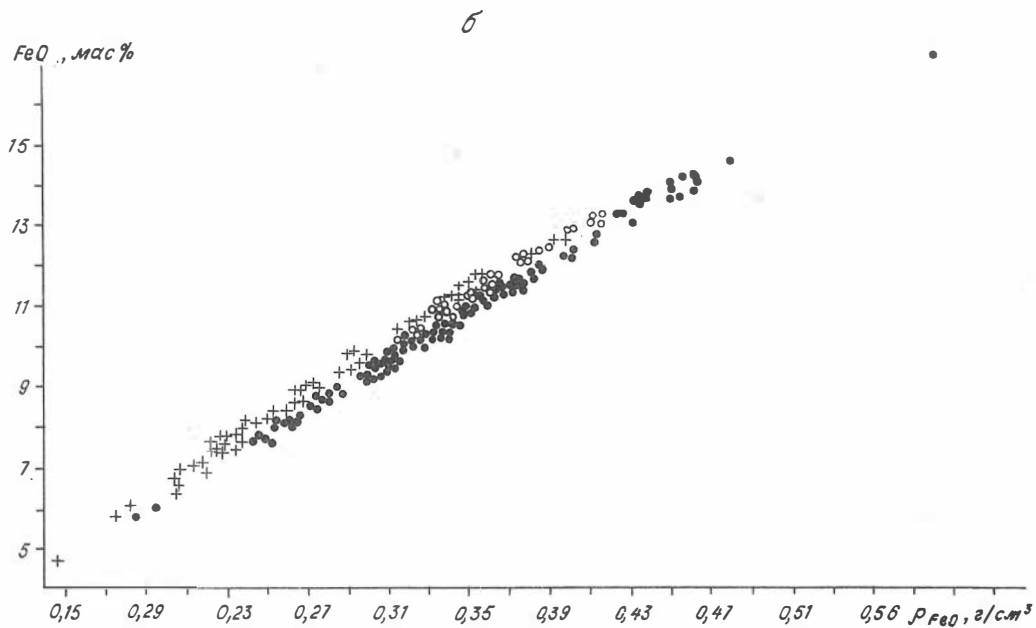


Рис. 4. Распределение разновидностей пород по весовому процентному и рассчитанному объемному содержанию: а - для магния, б - для двухвалентного железа  
Усл.обозн. см. на рис. I



Таблица 3

Коэффициенты корреляции для весовых процентных (первая строка)  
и объемных (вторая, третья и четвертая строка) содержаний  
породообразующих окислов

Окислы	TiO <sub>2</sub>	Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	Fe <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	FeO	MnO	MgO	CaO	Na <sub>2</sub> O	K <sub>2</sub> O	P <sub>2</sub> O <sub>5</sub>
SiO <sub>2</sub>	0,15	0,57	-0,56	-0,40	-0,13	-0,71	0,68	0,50	0,48	0,10
	0,16	0,55	-0,45	-0,30	-0,05	-0,55	0,66	0,47	0,44	0,12
	0,09	0,58	-0,47	-0,28	-0,12	-0,56	0,64	0,43	0,44	0,05
	0,19	0,58	-0,45	-0,23	-0,10	-0,62	0,67	0,54	0,43	0,14
TiO <sub>2</sub>	-0,16	0,15	-0,03	0,24	-0,15	0,10	0,27	0,17	0,22	
	-0,15	0,16	-0,03	0,25	-0,14	0,11	0,27	0,18	0,22	
	-0,17	0,15	-0,05	0,23	-0,16	0,09	0,26	0,17	0,22	
	-0,14	0,15	-0,01	0,25	-0,15	0,12	0,28	0,18	0,23	
Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub>			-0,61	-0,24	-0,40	-0,88	0,77	0,61	0,12	0,07
			-0,61	-0,23	-0,38	-0,86	0,77	0,61	0,13	0,08
			-0,60	-0,21	-0,39	-0,85	0,77	0,61	0,12	0,05
			-0,60	-0,20	-0,38	-0,87	0,77	0,62	0,12	0,08
Fe <sub>2</sub> O <sub>3</sub>				-0,27	0,26	0,52	-0,43	-0,26	-0,11	-0,04
				-0,27	0,26	0,53	-0,42	-0,26	-0,10	-0,04
				-0,26	0,26	0,52	-0,43	-0,26	-0,10	-0,04
				-0,25	0,26	0,53	-0,42	-0,25	-0,10	-0,03
FeO					-0,002	0,20	-0,48	-0,10	-0,38	-0,05
					0,002	0,21	-0,45	-0,09	-0,38	-0,05
					-0,001	0,22	-0,45	-0,10	-0,37	-0,06
					0,012	0,20	-0,43	-0,06	-0,36	-0,04
MnO						0,31	-0,28	-0,25	0,03	0,08
						0,31	-0,24	-0,23	0,04	0,09
						0,31	-0,27	-0,26	0,03	0,08
						0,30	-0,26	-0,22	0,03	0,09
MgO							-0,86	-0,74	-0,28	-0,18
							-0,82	-0,73	-0,27	-0,18
							-0,83	-0,74	-0,27	-0,19
							-0,84	-0,73	-0,28	-0,18
CaO								0,47	0,42	0,21
								0,48	0,43	0,21
								0,46	0,43	0,19
								0,49	0,42	0,22
Na <sub>2</sub> O									-0,07	0,18
									-0,06	0,18
									-0,07	0,17
									-0,06	0,19
K <sub>2</sub> O										0,09
										0,09
										0,08
										0,09

Примечание. Объемные содержания рассчитаны с использованием наборов плотностей ( $\rho_1, \rho_2, \rho_3$ ), полученных с помощью датчика случайных чисел.

кремнезема с этими окислами влияла еще какая-то другая причина, а не только большая величина самого кремнезема. Такой причиной может быть особенность образования (кристаллизации) рассматриваемых пород.

При делении всей массы породы в объеме на части: количество кремнезема и "некремнезема", а на минеральном уровне для рассматриваемых пород - это соответственно количество плагиоклаза и оливина с магнетитом, - мы как бы начинаем переходить к системе процентных величин. В такой системе с количеством плагиоклаза связано соответствующее количество окислов алюминия, кальция, натрия, а с количеством оливина и магнетита - окислов магния, железа. И связи у кремнезема с переходом к процентным величинам возрастают, сохраняя тот же знак, что и у объемных величин, являясь по отношению к последним производными (вторичными), или как у А.Б.Вистелиуса, О.В.Сарманова - "ложными" /2, II/. Связующим здесь закономерным звеном выступает плотность породы, имеющая тесную корреляцию с количеством оливина ( $r = 0,81$ ), плагиоклаза ( $r = -0,96$ ), магнетита ( $r = 0,65$ ). Все окислы, у которых произошли изменения величин корреляции с кремнеземом, имеют с плотностью сильные связи (табл. 4), что в конечном счете и предопре-

Таблица 4

Коэффициенты корреляции весовых процентных и объемных содержаний окислов с плотностью породы ( $\rho$ )

Окислы	SiO <sub>2</sub>	Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	Fe <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	MgO	CaO	Na <sub>2</sub> O
$\rho$ ,	-0,75	-0,96	0,63	0,87	-0,81	-0,62
г/см <sup>3</sup>	-0,21	-0,95	0,65	0,90	-0,76	-0,58

Примечание. Первая строка - для весовых процентных содержаний окислов, вторая - для объемных.

делило такое изменение силы связи при переходе от процентных содержаний к объемным.

Итак, кратко сформулируем результаты. В работе показано, как расчетным путем, зная величину плотности образца породы, перейти от весовых процентных содержаний окислов к их объемным со-

держаниям. Такие расчеты были проведены для магнезиальных пород норильских интрузий. Выделено три параметра: плотность породы, плотности кремнезема и "некремнеземной" части, обладающие классифицирующим свойством и несущие генетическую информацию. Установлено, что сила связи кремнезема с рядом других окислов изменяется при переходе от весовых процентных содержаний к объемным. Указаны возможные причины такого изменения. Отметим, что полученные результаты являются модельными, так как плотности пород были в свое время рассчитаны В.Д.Карбышевым /7/ при математическом моделировании на ЭВМ количественно-минералогического состава.

Авторы благодарят А.Ф.Белоусова за помощь в подготовке статьи.

#### Литература

1. Алешин С.М. К вопросу о ложной корреляции // *Геохимия*. 1967. № 4. С. 486-490.
2. Вистелиус А.Б. О некоторых ошибках в применении математических методов при анализе геохимических данных // *Геохимия*. 1970. № II. С. 1390-1392.
3. Вистелиус А.Б. Основы математической геологии. Л.: Наука, 1980. 389 с.
4. Груза В.В. Методологические проблемы геологии. Л.: Недра, 1977. 181 с.
5. Добрецов Н.Л., Маковская Н.С. Применение вероятностно-статистических методов в геологии: Курс лекций для геолог. спец. Новосибирск: Изд. НГУ, 1967. 123 с.
6. Иванов Д.Н., Подольский Ю.В. Об оценке связи между количественными характеристиками при геолого-геохимических исследованиях // *Сов. геология*. 1971. № 9. С. 137-141.
7. Карбышев В.Д. Использование процентных весовых величин в задачах классификации и прогноза (на примере габброидов и пикритов северо-запада Сибирской платформы) // *Петрохимия. Аспекты петрологии и металлогении*. Новосибирск, 1982. С. 129-146.
8. Карбышев В.Д. Классификация пород норильских интрузий

как задача таксономии, распознавания образов // Таксономия в классификационных и прогнозных задачах. Новосибирск, 1989. С. 70-91.

9. Рудник В.А. Атомно-объемный метод в применении к метасоматическому минерало- и породообразованию. Л.: Недра, 1966. 118 с.

10. Сарманов О.В., Вистелиус А.Б. О корреляции между процентными величинами // Докл. АН СССР. 1959. Т.126, № 1. С. 22-25.

11. Сарманов О.В. О ложной корреляции между случайными величинами // Тр. Матем. ин-та им. В.А.Стеклова АН СССР. М., 1961. Т. 64. С. 173-184.

12. Сарманов О.В. О применении математики в геологии // Взаимодействие наук при изучении Земли. М., 1963. С. 312-321.

13. Ткачев Ю.А., Юдович Я.Э. Статистическая обработка геохимических данных. Л.: Наука, 1975. 233 с.

А.Ф.Белуосов, В.О.Красавчиков, Э.Г.Полякова  
ИСТОЛКОВАНИЕ СОСТАВА ГРАНИТОИДОВ С ПОМОЩЬЮ  
МОДЕЛИ ЭВТЕКТИЧЕСКИХ ПРОПОРЦИЙ ГЛАВНЫХ ОКИСЛОВ

§ I. Проблемная ситуация

Для петрологии магматических горных пород особо важное значение имеют понятия котектики и эвтектики. Под котектикой понимается совокупность совместно и равновесно вступающих в кристаллизацию либо в плавление кристаллических фаз и расплава, под эвтектикой - предельная (т.е. наиболее низкотемпературная) котектика, состав которой остается постоянным в ходе продолжающегося плавления или кристаллизации.

В эвтектике сохраняются постоянными набор (видовой состав) и химический состав входящих в нее кристаллических фаз и расплава, а также валовой химический состав равновесной смеси кристал-

лических фаз; последний химически эквивалентен составу расплава. Такие постоянные составы называют стехиометрическими. В эвтектике меняется лишь количественное соотношение между кристаллической и жидкой частями. Эвтектика с фиксированной стехиометрией существует лишь при фиксированных интенсивных параметрах (температура, давление, химическая активность компонентов). При изменении этих параметров в плавящейся или кристаллизующейся эвтектоидной системе могут изменяться химический состав твердых фаз и сосуществующего расплава, а также пропорции твердых фаз. Таким образом, при изменении интенсивных параметров эвтектическая точка превращается в эвтектическую линию /6/ и состав эвтектоидной системы будет определяться не константой, а некоторым конечным интервалом величин.

Плавление системы начинается с наиболее низкотемпературной эвтектики, которая иногда включает в себя все содержащиеся в исходной плавящейся породе минералы, но чаще лишь часть их; эта часть, взятая в эвтектической пропорции, представляет собой эвтектическую компоненту исходной породы. В кристаллизующейся системе эвтектическая компонента включает в себя набор минералов заключительной кристаллизации и равновесный с ним остаточный расплав.

В системах магмогенеза и магматического породообразования известны две группы наиболее низкотемпературных силикатных эвтектик, которые, по-видимому, имеют глобальное значение не только для Земли, но и вообще для планет с силикатным магматизмом. Это эвтектики, пересыщенные кремнеземом, кислые (ацидитовые) и недосыщенные кремнеземом фельдшпатоидно-щелочнополевошпатовые. Эвтектики первого типа порождают гранитоиды и риолитоиды, второго — щелочносалические породы — сиенитоиды, трахиты и фонолиты. Кислая и щелочносалическая предельные эвтектики — наиболее низкотемпературные, с относительно малой свободной энергией, наиболее низкоплотностные. Магматические породы с кислой и щелочносалической эвтектической компонентой отличаются в общем наиболее сложным среди магматитов видовым спектром минералов (включающим и надэвтектические, т.е. более высокотемпературные).

Надэвтектические природные силикатные котектики представляют собой с этой точки зрения более простые системы. Среди них

можно выделить (используя упрощенные названия) оливин-пироксеновые, двупироксеновые, пироксен-шпинелевые, базитовые (клинопироксен-гранатовые, клинопироксен-плаггиоклазовые, двупироксен-плаггиоклазовые), двуполевошпатовые котектики. Они при кристаллизации порождаются соответственно оливиновые и безоливиновые пироксениты, базиты, полевошпатовые щелочносалические породы, а при плавлении — отвечающие им по химическому составу магмы. Состав предельной кислой эвтектики по данным опытов плавления и кристаллизации, петрографическим данным (качественный и количественный минеральный состав, следы интергранулярного плавления, кристаллизационные структуры) и данным петрохимии (положение мод составов гранитоидов) отвечает трехфазной точке между полями свободного кремнезема и двух полевых шпатов (см. рис. I).

С позиций развиваемой авторами обобщенной модели системы воспроизведения /1, 2, 3/ в этой котектике фиксированного минерального состава следует искать устойчивый структурный элемент, которым управляется (кодируется) воспроизведение индивидов магматической породы одного и того же горнопородного (вида). Управляющий элемент системы воспроизведения здесь конкретнее можно представить как комбинацию свободных поверхностей кристаллических фаз котектики (в частности — поверхности поликристалла), на которых непосредственно идет кристаллизация. Вместо индивида горной породы нам придется взять относительно однородный образец, пробу, представленную химическим анализом. Внутри вида (типа) могут выделиться популяции. Их можно трактовать как более или менее узкие внутривидовые совокупности, воспроизведенные при фиксированном значении или малом изменении интенсивных параметров (температуры, давления, химических активностей дополнительных компонентов и т.д.). В частных случаях они могут оказаться аналогом биологических популяций, занимающих отдельный ареал (локальные популяции).

Группа гранитоидов, вторая по распространенности среди магматических пород в земной коре (после базитов), представляет собой удобный объект для анализа эвтектического механизма воспроизведения магм и магматических пород. Модельной для гранитоидной группы является тройная эвтектика кварц — альбит — ортоклаз, в отличие от которой в реальных породах альбит обычно

заменен кислым плагиоклазом, реже два полевых шпата заменены каликатровым шпатом.

Магматическую эвтектику обычно количественно описывают через содержания химических веществ, отвечающих порообразующим минералам (миналам) и эту модель затем используют для интерпретации состава реальных магматитов. Для гранитоидов подобное изучение раньше проводилось в статистическом плане — путем сопоставления положения моды составов гранитоидов с точкой эвтектического температурного минимума для отмеченной выше трех-минеральной системы, содержащей кристаллическую фазу свободного кремнезема. Хорошо известно, что моды составов лейкократовых гранитоидов приблизительно совпадают с указанной точкой.

Но по-прежнему требуют количественного уточнения вопросы: в какой мере природные гранитоиды соответствуют эвтектическим образованиям; каковы предпочтительные области значений интенсивных параметров существования природной гранитоидной эвтектики. С позиций обобщенной модели системы воспроизведения можно поставить и нетрадиционный вопрос: какова популяционная структура природной совокупности гранитоидных пород, приближенных к эвтектике.

В настоящей статье на материале по гранитоидам Украины /7/ выясняется, какую долю эвтектическая составляющая образует в валовом составе магматической породы. Это позволяет приблизиться к пониманию роли данной котектики в дозировке вещества выплавки и кристаллизующегося из расплава агрегата породы, т.е. в контроле (кодировании) процесса выплавки и кристаллизации магмы.

Как известно, состав силикатной котектики (эвтектики) можно описать и через окислы, т.е. "дофазовые" химические компоненты. И здесь представляют интерес вопросы, связанные с созданием и анализом моделей, связывающих химический состав породы с окисным и минальным составом котектики — например, не находятся ли содержания окислов и какие-либо их отношения в однозначном соответствии с валовым составом породы. Наличие такого соответствия говорило бы о том, что окислы и их отношения как-то контролируют этот валовой состав, либо сохраняют "память" о нем.

Для котектических и эвтектических линий в теории не найдены аналитические зависимости между интенсивными параметрами и содержаниями отдельных химических компонентов расплава /6/. Незн-

вестны также аналитические соотношения между самими химическими компонентами, входящими непосредственно в эвтектику или котектику. Вместе с тем, можно заметить, что вблизи эвтектических точек и около "дна" котектических желобов отрезки сечения поверхности ликвидуса почти прямолинейны. Траектории эвтектических точек в силикатных системах остаются практически прямолинейными при введении небольших добавок обычных породообразующих окислов порядка десятка молекулярных процентов, а часто и больше /8/. Таким образом, есть основания ожидать, что в эвтектических и котектических силикатных составах зависимость между химическими компонентами обычно можно аппроксимировать как линейную. В частности, нет препятствий к тому, чтобы предположить это и для гранитоидной эвтектики.

## § 2. Молекулярные пропорции главных окислов для гранитоидной эвтектики

В качестве опорных мы возьмем составы экспериментальной водосодержащей гранитоидной эвтектики из работы /9/. Массовые соотношения кварца, ортоклаза и альбита в эвтектической пропорции в процентах при давлениях паров воды 0,5, 1, 2 и 3 кбар, снятые с рис. 1, представлены ниже в табл. 1, в молекулярных долях эти же данные приведены в табл. 2.

Зависимость содержания кварца  $y$  от давления паров воды  $x$ , по-видимому, достаточно хорошо описывается линейной функцией. Метод наименьших квадратов, примененный для данных из табл. 2, дает соотношение

$$y = -0,027x + 0,76 \pm 0,005.$$

В табл. 3 представлены давления (переменная  $x$ ), молекулярные доли кварца ( $y$ ), их расчетные значения  $\hat{y}$  и отклонения  $\hat{y} - y$ . Как видно из табл. 3, отклонение фактического значения от расчетного не превосходит 0,005. Учитывая, что исходные данные (см. табл. 1) снимались с диаграммы с определенной погрешностью, результат можно считать вполне приемлемым. Полученная зависимость позволяет оценить долю кварца при атмосферном давлении как  $0,76 \pm 0,005$ . Учитывая вышесказанное можем считать.



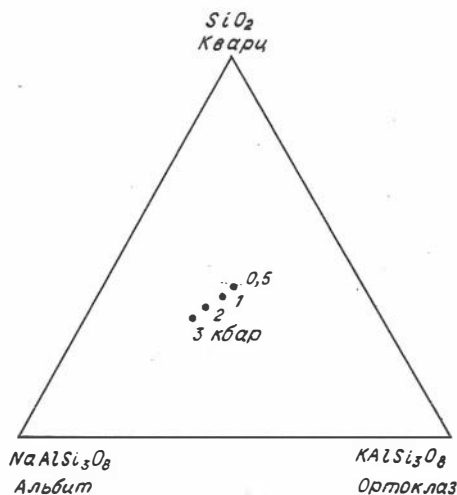


Рис. I. Эвтектические пропорции в системе кварц-ортоклаз-альбит при давлении паров воды от 0,5 до 3 кбар /9/.

Таблица I

$P_{H_2O}$ , кбар	Кварц	Орто-клаз	Альбит
0,5	40	30	30
1,0	37,5	28,5	34
2,0	34,5	26,0	39,5
3,0	32,5	24,5	43

Таблица 2

$P_{H_2O}$ , кбар	Кварц	Орто-клаз	Альбит
0,5	0,75	0,121	0,129
1,0	0,729	0,120	0,151
2,0	0,702	0,114	0,184
3,0	0,692	0,111	0,207

Таблица 3

x	y	$\hat{y}$	$\hat{y} - y$
0,5	0,75	0,747	-0,003
1,0	0,729	0,733	+0,004
2,0	0,702	0,707	+0,005
3,0	0,682	0,679	-0,003

что при изменении давления от 0 до 3 кбар в системе кварц-ортоклаз-альбит молекулярная доля кварца  $\delta$  в эвтектической пропорции для гранитоидной эвтектики изменяется в диапазоне от 0,68 до 0,77.

Молекулярная доля ортоклаза линейно зависит от таковой же для кварца: метод наименьших квадратов дает соотношение  $y = 0,16 x$ , где  $x$  — молекулярная доля кварца,  $y$  — молекулярная доля ортоклаза, причем отклонение фактического

значения от расчетного не превосходит 0,004. Сказанное позволяет получить параметрическое представление линии эвтектики в системе кварц - ортоклаз - альбит:  $(\delta, 0,16\delta, 1 - 1,16\delta)$ , где  $0,68 \leq \delta \leq 0,77$ .

Получим теперь параметрическое представление линии рассматриваемой эвтектики в пространстве четырех окислов:  $\text{SiO}_2, \text{Al}_2\text{O}_3, \text{Na}_2\text{O}, \text{K}_2\text{O}$ . Если молекулярные доли кварца, ортоклаза и альбита обозначим  $h_1, h_2, h_3$ , то для  $\text{SiO}_2, \text{Al}_2\text{O}_3, \text{Na}_2\text{O}, \text{K}_2\text{O}$  молекулярные доли этих окислов равны соответственно

$$\frac{h_1 + 3h_2 + 3h_3}{h_1 + 4h_2 + 4h_3}, \quad \frac{\frac{1}{2}h_2 + \frac{1}{2}h_3}{h_1 + 4h_2 + 4h_3}, \quad \frac{\frac{1}{2}h_3}{h_1 + 4h_2 + 4h_3}, \quad \frac{\frac{1}{2}h_2}{h_1 + 4h_2 + 4h_3}$$

Так как в рассматриваемом случае  $h_1 = \delta, h_2 = 0,16\delta, h_3 = 1 - 1,16\delta$ , где  $0,68 \leq \delta \leq 0,77$ , молекулярные доли окислов для линии эвтектики можно записать так (табл. 4),

Таблица 4

$\text{SiO}_2$	$\text{Al}_2\text{O}_3$	$\text{Na}_2\text{O}$	$\text{K}_2\text{O}$
$3-2\delta$	$0,5-0,5\delta$	$0,5-0,58\delta$	$0,08\delta$
$4-3\delta$	$4-3\delta$	$4-3\delta$	$4-3\delta$

Теперь возьмем в качестве основного параметра не содержание кварца  $\delta$ , а содержание кремнезема в эвтектике

$$x = \frac{3 - 2\delta}{4 - 3\delta}.$$

При изменении  $\delta$  от 0,68 до 0,77 величина  $x$  (содержание кремнезема в эвтектической пропорции) изменяется от 0,837 до 0,864. Поскольку  $x = (3 - 2\delta) / (4 - 3\delta)$ , легко видеть, что  $\delta = (3 - 4x) / (2 - 3x)$ . Произведя замену переменных, получим параметрическое представление линии эвтектики в пространстве четырех окислов ( $\text{SiO}_2, \text{Al}_2\text{O}_3, \text{Na}_2\text{O}, \text{K}_2\text{O}$ ) относительно содержания кремнезема  $x$ :

$(x; 1/2 - x/2; 0,74 - 0,82x; - 0,24 + 0,32x)$ ,  
 где  $x$  изменяется от 0,837 до 0,864.

Полученное параметрическое представление позволяет, в частности, оценить минимальные и максимальные значения окислов в эвтектической пропорции при изменении давления паров воды от 0 до 3 кбар (табл. 5).

Таблица 5

Значения	SiO <sub>2</sub> , %	Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub> , %	Na <sub>2</sub> O, %	K <sub>2</sub> O, %
max	86,4	8,1	5,4	3,6
min	83,7	6,8	3,2	2,8

Эти экстремальные содержания достигаются при крайних значениях содержания кремнезема (табл. 6):

Таблица 6

SiO <sub>2</sub>	Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	Na <sub>2</sub> O	K <sub>2</sub> O
83,7	8,1	5,4	2,8
86,4	6,8	3,2	3,6

Для проверки достоверности параметрического представления пересчитаем на окислы данные табл. 2. В табл. 7 приведены результаты пересчета.

Таблица 7

Давление, кбар	SiO <sub>2</sub>	Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	Na <sub>2</sub> O	K <sub>2</sub> O
0,5	0,857	0,071	0,037	0,035
1,0	0,850	0,075	0,042	0,033
2,0	0,843	0,079	0,048	0,030
3,0	0,837	0,081	0,053	0,029

Поскольку этот пересчет никак не связан с параметрическим представлением, имеет смысл сравнение его результатов с результатами расчета по параметрическому представлению.

При тех же, что и в табл. 7, содержаниях  $SiO_2$  расчет по параметрическому представлению дает значения, приведенные в табл. 8.

Таблица 8

$SiO_2$	$Al_2O_3$	$Na_2O$	$K_2O$
0,857	0,072	0,037	0,034
0,850	0,075	0,043	0,032
0,843	0,078	0,049	0,030
0,837	0,081	0,054	0,028

Расхождения между значениями табл. 7 и 8 не превосходят 0,001, т.е. использование параметрического представления вполне правомерно.

### § 3. Вывод основных соотношений модели

Итак, предполагается, что совокупность окислов, которые следует принимать в расчет, зафиксирована, и исследование химического состава горнопородных индивидов (образцов, проб) ограничено рамками идеализированного валового состава. В качестве описания идеализированного валового состава исследуемого образца примем идеализированный химический анализ — упорядоченный набор вида  $(x_1, \dots, x_n)$ , где  $x_j$  — доля молекул  $j$ -го окисла в валовом составе исследуемого образца, причем  $\sum_{j=1}^n x_j = 1$ ,  $x_j \geq 0$ ,  $j = 1, \dots, n$ . Каждому окислу, тем самым, приписан номер. Пусть, например, анализируются данные по главным окислам гранитоидной эвтектики, т.е.  $SiO_2$ ,  $Al_2O_3$ ,  $Na_2O$  и  $K_2O$ . Их номера в принятой нами последовательности 1, 3, 9, 10 соответственно. В символической записи мы будем использовать обозначения:  $n$  — для числа главных окислов в эвтектике,  $j_1, \dots, j_N$  — для номеров главных

окислов. Так, в рассматриваемом примере  $N = 4$ ,  $j_1 = 1$ ,  $j_2 = 3$ ,  $j_3 = 9$ ,  $j_4 = 10$ . Чтобы задать фиксированную эвтектическую пропорцию для  $N$  главных окислов с номерами  $j_1, \dots, j_N$ , достаточно указать положительные числа  $\lambda_1, \dots, \lambda_N$ , для которых  $\lambda_1 + \lambda_2 + \dots + \lambda_N = 1$ . Таким образом,  $\lambda_i$  — это доля  $i$ -го главного окисла в заданной эвтектической пропорции главных окислов.

При предлагаемом подходе к моделированию составов изверженных пород (это уже отмечалось в § I) используются категории вида (типа) как глобальной совокупности, а также популяции и индивида, т.е. имеет место трехуровневая иерархия, включающая ограниченное число типов пород (по числу основных породообразующих котектик и эвтектик).

Центральным вопросом при математическом моделировании типов и популяций эвтектоидных пород в излагаемом подходе является следующий: каковы необходимые условия принадлежности образца  $X$  к  $i$ -му эвтектическому типу, образцов  $X$  и  $Y$  к одной и той же популяции  $i$ -го типа?

Если такие условия, геологически обоснованные и поддающиеся эффективной численной проверке, будут сформулированы, то для выделения типов и популяций можно будет использовать специальные алгоритмы кластер-анализа, удовлетворяющие этим условиям. Пример применения подобного алгоритма приведен в § 4.

При формулировке вышеуказанных условий мы будем исходить из того, что популяция воспроизводится при фиксированных  $\lambda_1, \dots, \lambda_N$  (в частности, это означает, что давление паров воды либо постоянно, либо изменяется незначительно); при воспроизведении типа (вида) в целом доли главных окислов могут заметно варьировать — в частности, в зависимости от изменения давления. Других различий в концепциях популяции и вида, по существу, нет.

Сначала сформулируем требуемые условия неформальным образом, в тезисной форме. Затем, исходя из содержания этих тезисов, выведем соответствующие математические соотношения.

Как часто бывает при математическом моделировании, в наших рассуждениях будет фигурировать неопределенный параметр, значение которого уточняется на фактическом материале. В рассматриваемом случае — это вещественное число  $N$ , близкое к единице, нормативная доля раскладываемой в эвтектической пропорции части молекул идеализированного валового состава. Значение параметра  $N$  будет

затем определено на основе анализа массовых данных по "надежным" образцам (т.е. заведомо относящимся к  $i$ -му эвтектическому типу), а его точный смысл изложен в формулировках ТЕЗИСОВ I 2.

ТЕЗИС I. Можно выделить 6 типов изверженных горных пород по числу основных породообразующих котектик (эвтектик). Если образец  $X$  принадлежит к  $i$ -му эвтектическому типу, то выполняется следующее условие: из совокупности молекул идеализированного валового состава исследуемого образца можно выделить часть, в которой главные окислы  $i$ -й эвтектики находятся в допустимой для данной эвтектики пропорции  $\lambda_1, \dots, \lambda_N$ , причем доля этой части не меньше положительной константы  $n \leq 1$ . Возможно частичное перекрытие типов.

Сформулированное в ТЕЗИСЕ I условие будем для краткости называть условием соответствия исследуемого образца  $X$   $i$ -й эвтектике, пропорции  $\lambda_1, \dots, \lambda_N$  и числу  $N$ .

ТЕЗИС 2. Если образцы  $X$  и  $Y$  относятся к одной и той же популяции  $i$ -го эвтектического типа, то существует допустимая пропорция  $\lambda_1, \dots, \lambda_N$  главных окислов  $i$ -й эвтектики такая, что как  $X$ , так и  $Y$  соответствует  $i$ -й эвтектике, пропорции  $\lambda_1, \dots, \lambda_N$  и числу  $N$ .

Чтобы условия, сформулированные для анализов образцов в тезисах I, 2 поддавались численной проверке, выведем соответствующие математические соотношения и формализуем (применительно к нашим целям) понятие допустимости эвтектической пропорции.

Предположим, что идеализированный валовой состав исследуемого образца в молекулярном выражении представляет собой  $M$  молекул  $n$  окислов, т.е.  $M_1$  молекул первого окисла,  $M_2$  - второго ... и т.д., где  $M_1 + M_2 + \dots + M_n = M$  и  $x_j = M_j/M$ . Можно ли из этой совокупности отобрать  $M'_1$  молекул первого окисла,  $M'_2$  - второго и т.д., где  $M'_j \leq M_j$ ,  $M'_1 + \dots + M'_n = M' \leq M$ , таким образом, чтобы в отобранной совокупности главные окислы находились в фиксированной эвтектической пропорции  $\lambda_1, \dots, \lambda_N$ , т.е.

$$\frac{M'_{j_s}}{M'} = \frac{M'_{j_s}}{M'_1 + M'_2 + \dots + M'_{j_N}} = \lambda_s,$$

где  $s = 1, \dots, N$ ?

Значения  $\lambda_s$  известны с определенной точностью, как и значения  $x_j$ . И в том, и в другом случае мы заведомо не знаем пятого знака после запятой (т.е. тысячных долей процента при процентном представлении пропорции и химического анализа). Таким образом, можно принять, что для  $s$ -го главного окисла  $\lambda_s = z_s / 10\,000$ , где  $z_s$  — положительное целое число,  $z_s < 10\,000$  и  $z_1 + \dots + z_N = 10\,000$ . Если в нашем распоряжении не менее  $10\,000$  молекул каждого из главных окислов, что заведомо обеспечивается объемом анализируемых навесок, то, полагая  $M'_{j_s} = z_s$  приходим к требуемому результату.

Каково максимально возможное значение  $M'$ ? И как выражается отношение  $M'/M$  через компоненты химического анализа  $x_j$ ? Приведенные выше уравнения для  $\lambda_1, \dots, \lambda_N$  можно переписать как  $M'_{j_s} / \lambda_s = M'_{j_1} + M'_{j_2} + \dots + M'_{j_N} = M'$ ,  $s = 1, \dots, N$ , отсюда получаем

$$\frac{M'_{j_1}}{\lambda_1} = \frac{M'_{j_2}}{\lambda_2} = \dots = \frac{M'_{j_N}}{\lambda_N} = M'.$$

Учитывая, что  $M'_{j_s} \leq M_{j_s}$ , получаем

$$M' = \frac{M'_{j_s}}{\lambda_s} \leq \frac{M_{j_s}}{\lambda_s}, \quad s = 1, \dots, N.$$

что равносильно одному неравенству

$$M' \leq \min_{s=1, \dots, N} \frac{M_{j_s}}{\lambda_s}.$$

Таким образом, максимально возможное значение для  $M'$  задается формулой:

$$M' = \min_{s=1, \dots, N} \left[ \frac{M_{j_s}}{\lambda_s} \right],$$

где  $[a]$  — целая часть вещественного числа  $a$ . Заметим, что

$$\frac{M_{j_s}}{\lambda_s} - \left[ \frac{M_{j_s}}{\lambda_s} \right] < 1,$$

поэтому

$$\frac{M_{j_s}}{M \lambda_s} - \left[ \frac{M_{j_s}}{\lambda_s} \right] / M = \frac{1}{M} \left( \frac{M_{j_s}}{\lambda_s} - \left[ \frac{M_{j_s}}{\lambda_s} \right] \right) < \frac{1}{M}.$$

Учитывая сказанное выше относительно объемов навесок и точности измерения  $x_{j_s}$ ,  $\lambda_s$ , мы можем с полным основанием пренебречь различием между

$$\frac{M_{j_s}}{M \lambda_s} \quad \text{и} \quad \left[ \frac{M_{j_s}}{\lambda_s} \right] / M.$$

Таким образом, принимаем, что  $\left[ \frac{M_{j_s}}{\lambda_s} \right] / M \approx \frac{M_{j_s}}{M \lambda_s} = \frac{x_{j_s}}{\lambda_s}$ ,  $s=1, \dots, N$

и соответственно

$$\frac{M'}{M} \approx \min_{s=1, \dots, N} \frac{x_{j_s}}{\lambda_s}$$

Потребуем, чтобы эта доля  $\frac{M'}{M}$  молекул, находящихся в заданной эвтектической пропорции  $\lambda_1, \dots, \lambda_N$ , была не меньше некоторой величины  $N$ , где  $0 < N \leq 1$ :

$$\frac{M'}{M} \approx \min_{s=1, \dots, N} \frac{x_{j_s}}{\lambda_s} \geq N.$$

Данное неравенство равносильно системе неравенств  $x_{j_s} / \lambda_s \geq N$ ,  $s = 1, \dots, N$ , которая, ввиду положительности  $N$ , равносильна нижеследующей системе:

$$\frac{x_{j_s}}{N} \geq \lambda_s, \quad s = 1, \dots, N.$$

Эта система, таким образом, — формальное выражение условия соответствия исследуемого образца  $i$ -й эвтектике, пропорции  $\lambda_1, \dots, \lambda_N$  и числу  $N$ .

Как уже отмечалось, на практике значения  $\lambda_1, \dots, \lambda_N$  зачастую точно не известны и, кроме того, могут меняться в зависимости от давления и других факторов (см. § I). Поэтому вместо соотношений  $x_{j_s} / N \geq \lambda_s$ ,  $s = 1, \dots, N$  запишем систему уравнений и неравенств относительно неизвестных  $v_1, \dots, v_N$ :



$$(*) \begin{cases} \frac{x_{j_s}}{H} \geq v_s \geq \xi_s, & s = 1, \dots, N \\ \sum_{s=1}^N v_s = 1. \end{cases}$$

Здесь  $v_1, \dots, v_N$  - неизвестные параметры эвтектической пропорции, а  $\xi_1, \dots, \xi_N > 0$  - положительные числа, представляющие собой нижние оценки параметров эвтектической пропорции главных окислов (по состоянию информации на момент исследования), причем  $\sum_{s=1}^N \xi_s \leq 1$ .

Используя в качестве отправной точки систему (\*), дадим более "подходящие" для математического моделирования формулировки ТЕЗИСОВ I,2. Для этого сделаем еще одно модельное предположение: всякая пропорция  $v_1, \dots, v_N$ , для которой  $v_1 + \dots + v_N = 1$  и  $v_s \leq \xi_s, s = 1, \dots, N$ , является допустимой.

Конечно, сделанное предположение весьма приближенно соответствует действительности. Как отмечено выше (см. § I), в случае гранитоидной эвтектики (как и ряда других), реальности, видимо, больше соответствует ситуация, когда в зависимости от "внешних" факторов молекулярная доля кремнезема в эвтектической пропорции изменяется в конечных пределах  $\lambda^{\min}, \lambda^{\max}$ , а доли остальных главных окислов являются линейными функциями от  $\lambda$ :

$\lambda_s = a_s \lambda + b_s, s=2, \dots, N$ . В результате вместо системы (\*) получаем более простую систему (\*\*)

$$(**) \begin{cases} \frac{x_1}{H} \geq \lambda \\ \frac{x_{j_s}}{H} \geq a_s \lambda + b_s, & s = 2, \dots, N \\ \lambda^{\min} \leq \lambda \leq \lambda^{\max} \end{cases}$$

относительно неизвестной  $\lambda$ . Эта система, в отличие от (\*), содержит только одну неизвестную и предъявляет более жесткие, чем (\*) требования к анализам. Однако достоверные сведения о коэффициентах  $a_2, \dots, a_N, b_2, \dots, b_N$  имеются в настоящее время не для всех породообразующих эвтектик и, поскольку ТЕЗИСЫ I,2 говорят лишь о необходимых условиях, использование при неполной

информации огрубленной трактовки допустимости эвтектической пропорции, отраженной в системе (ж), вполне правомерно.

Пусть заданы  $j_1, \dots, j_N$  - номера главных окислов,  $\varepsilon_1, \dots, \varepsilon_N$  - нижние оценки долей главных окислов,  $\varepsilon_1 + \dots + \varepsilon_N \leq 1$ ,  $H$  - нормативная доля эвтектической части анализа,  $0 < H \leq 1$ , а также идеализированные химические анализы  $(x_1, \dots, x_N)$  и  $(y_1, \dots, y_N)$  образцов  $X$  и  $Y$  соответственно.

ТЕЗИС 1'. Если исследуемый образец  $X$  принадлежит к  $i$ -му эвтектическому типу, то система (ж) уравнений и неравенств относительно неизвестных  $v_1, \dots, v_N$

$$(ж) \quad \begin{cases} \frac{x_{j_s}}{H} \geq v_s \geq \varepsilon_s, & s = 1, \dots, N \\ \sum_{s=1}^N v_s = 1 \end{cases}$$

имеет решение.

ТЕЗИС 2'. Если образцы  $X$  и  $Y$  относятся к одной и той же популяции  $i$ -го эвтектического типа, то система уравнений и неравенств (I) относительно неизвестных  $v_1, \dots, v_N$

$$(1) \quad \begin{cases} \frac{x_{j_s}}{H} \geq v_s \geq \varepsilon_s, & s = 1, \dots, N \\ \frac{y_{j_s}}{H} \geq v_s \geq \varepsilon_s, & s = 1, \dots, N \\ \sum_{s=1}^N v_s = 1 \end{cases}$$

имеет решение.

Сформулируем теперь ТЕЗИСЫ 1,2 применительно к ситуации, описываемой системой (жж).

ТЕЗИС 1''. Если исследуемый образец  $X$  принадлежит к  $i$ -му эвтектическому типу, то система неравенств (жж) относительно неизвестной  $\lambda$

$$(жж) \quad \begin{cases} \frac{x_1}{H} \geq \lambda \\ \frac{x_{j_s}}{H} \geq a_s \lambda + b_s, & s = 2, \dots, N \\ \lambda_{\min} \leq \lambda \leq \lambda_{\max} \end{cases}$$

имеет решение.

ТЕЗИС 2''. Если образцы X и Y относятся к одной и той же популяции i-го эвтектического типа, то система неравенств (2) относительно неизвестной  $\lambda$

$$(2) \quad \left\{ \begin{array}{l} \frac{x_1}{H} \geq \lambda, \quad \frac{y_1}{H} \geq \lambda \\ \frac{x_{j_s}}{H} \geq a_s \lambda + b_s, \quad \frac{y_{j_s}}{H} \geq a_s \lambda + b_s, \quad s=2, \dots, N \\ \lambda^{\min} \leq \lambda \leq \lambda^{\max} \end{array} \right.$$

имеет решение.

В зависимости от наличия экспериментальных данных по той или иной эвтектике, выбирается первый или второй вариант формулировок тезисов.

Проанализируем более подробно тезисы 1'', 2''. Множество номеров  $s \geq 2$ , для которых  $a_s > 0$ , обозначим  $W^+$ , а множество номеров  $s \geq 2$ , для которых  $a_s < 0$ , обозначим  $W^-$  (предполагается, что все  $a_s \neq 0$ ). Нетрудно проверить, что система (жж) равносильна нижеследующей:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{x_1}{H} \geq \lambda \\ \frac{x_{j_s}}{H a_s} - \frac{b_s}{a_s} \geq \lambda \quad s \in W^+ \\ \frac{x_{j_s}}{H a_s} - \frac{b_s}{a_s} \leq \lambda \quad s \in W^- \\ \lambda^{\min} \leq \lambda \leq \lambda^{\max} \end{array} \right.$$

Последняя, в свою очередь, равносильна неравенствам (3)

$$(3) \quad \begin{aligned} & \max \left( \lambda^{\min}, \max_{s \in W^-} \left( \frac{x_{j_s}}{H a_s} - \frac{b_s}{a_s} \right) \right) \leq \lambda \leq \\ & \leq \min \left( \lambda^{\max}, \frac{x_1}{H}, \min_{s \in W^+} \left( \frac{x_{j_s}}{H a_s} - \frac{b_s}{a_s} \right) \right) \end{aligned}$$

или, в более короткой записи,

$$A(X, H) \leq \lambda \leq B(X, H),$$

$$\text{где } A(X, H) = \max \left( \lambda \min, \max_{s \in W^-} \left( \frac{x_{js}}{H a_s} - \frac{b_s}{a_s} \right) \right),$$

$$B(X, H) = \min \left( \lambda \max, \frac{x_1}{H}, \min_{s \in W^+} \left( \frac{x_{js}}{H a_s} - \frac{b_s}{a_s} \right) \right).$$

Таким образом, для того, чтобы химический анализ образца X удовлетворял условию ТЕЗИСА 1'' при заданном H, необходимо и достаточно, чтобы выполнялось неравенство:

$$A(X, H) \leq B(X, H).$$

$A(X, H)$  и  $B(X, H)$  — концы отрезка подходящих для образца X содержаний кремнезема в эвтектической пропорции, т.е., если  $A(X, H) \leq \lambda \leq B(X, H)$ , то доля молекул, расписываемых в эвтектической пропорции, имеющей содержание кремнезема, равное  $\lambda$ , не меньше H.

Каково наибольшее H, при котором химический состав образца X удовлетворяет условию ТЕЗИСА 1''? Несложные математические рассуждения (см. приложение I в конце параграфа) показывают, что если для какого-либо положительного  $H \leq 1$  выполняется  $A(X, H) \leq B(X, H)$ , то существует наибольшее  $H \leq 1$ , среди удовлетворяющих неравенству  $A(X, H) \leq B(X, H)$ . Данное H — наибольшее из решений уравнения  $A(X, H) = B(X, H)$ , причем, так как  $A(X, H) = B(X, H)$ , из неравенства (3) вытекает, что существует единственное  $\lambda$  и, значит, единственная эвтектическая пропорция, при которой достигается наибольшее H. В дальнейшем это наибольшее H и соответствующее содержание кремнезема в эвтектической пропорции будем обозначать  $H(X)$  и  $\lambda(X)$ .

Величина  $H(X)$  может быть представлена не в долях, а в процентном выражении, тогда ее будем называть процентом расписываемости анализа образца X в эвтектической пропорции (для заданной эвтектики). Величину  $\lambda(X)$  будем называть нормативным содержанием кремнезема в эвтектической пропорции для образца X.

В том случае, когда величина H, фигурирующая в формулировках ТЕЗИСОВ 1'', 2'', известна, ее можно использовать для оценки того, насколько однозначно в химическом анализе запечатлелись условия образования породы, отражаемые эвтектической пропорцией. Пусть образец X относится к i-му эвтектическому типу. Разбросом подходящих для образца X содержаний кремнезема в эвтектической пропорции назовем величину

$$r(X) = \frac{B(X, H)}{\lambda_{\max}} - \frac{A(X, H)}{\lambda_{\min}}$$

Чем меньше разброс, тем уже диапазон подходящих содержаний кремнезема и, соответственно, тем однозначнее можно судить об условиях образования породы, представленной образцом  $X$ . Важность понятия разброса становится очевидной из анализа содержания ТЕЗИСА 2". Неравенство (3) позволяет придать ТЕЗИСУ 2" следующую формулировку: если образцы  $X$  и  $Y$  относятся к одной и той же популяции  $i$ -го эвтектического типа, то отрезки  $A(X, H)$ ,  $B(X, H)$  и  $A(Y, H)$ ,  $B(Y, H)$  пересекаются. Таким образом, если при выделении популяций мы будем руководствоваться ТЕЗИСОМ 2", то получим, что у образцов  $X$  с большим разбросом  $r(X)$  отрезки  $[A(X, H), B(X, H)]$  пересекаются с отрезками  $[A(Y, H), B(Y, H)]$  для весьма разнородных образцов  $Y$ , поэтому отнести (а особенно не отнести)  $X$  к той или иной популяции сколько-нибудь обоснованно практически невозможно. Горнопородные индивиды, представленные образцами  $X$  с большими значениями  $r(X)$ , могут возникать в широком диапазоне обстановок, а при  $r(X) = 1$  - в любой подходящей для данного эвтектического типа обстановке. По-видимому, широкое распространение таких "не помнящих" условий возникновения пород химических анализов составляет главное затруднение при попытках генетической классификации изверженных горных пород на основе их химического состава. Представляется целесообразным перед началом конкретных популяционных построений выявлять и отсеивать анализы образцов  $X$  с большими разбросами  $r(X)$ . Конкретный пример такого отсева приведен в § 4.

ПРИЛОЖЕНИЕ I. Доказательство утверждения, обосновывающего существование наибольшего  $H$ .

Утверждение I. Пусть  $0 < \lambda_{\min} < \lambda_{\max}$  и для некоторого  $H$ ,  $0 < H \leq 1$  имеет место неравенство  $A(X, H) \leq B(X, H)$ . Тогда существует  $H^*$ , наибольшее среди  $H \leq 1$ , удовлетворяющих неравенству  $A(X, H) \leq B(X, H)$ . При этом  $H^*$  - наибольшее из решений уравнения  $A(X, H) = B(X, H)$ .

Доказательство. Пусть  $A(X, 1) \leq B(X, 1)$ . Тогда очевидным образом  $H^* = 1$ . Обозначим через  $\lambda^*$  произвольное вещественное число, для которого  $A(X, 1) \leq \lambda^* \leq B(X, 1)$ . По определению  $\lambda^*$ , для него выполняется система неравенств ( $\ast\ast$ ) при  $H$ , равном единице.

$$\begin{cases} x_1 \geq \lambda^* \\ x_{j_s} \geq a_s \lambda^* + b_s, \quad s = 2, \dots, N \\ \lambda^{\min} \leq \lambda^* \leq \lambda^{\max} \end{cases}$$

Отсюда, так как сумма  $\lambda^* + \sum_{s=2}^N (a_s \lambda^* + b_s) = 1$ , получаем,

что  $x_1 + \sum_{s=2}^N x_{j_s} \geq 1$ , но  $x_1 + x_2 + \dots + x_n = 1$ , и, значит,  $x_1 + \sum_{s=2}^N x_{j_s} = 1$ , причем, как легко видеть,  $x_1 = \lambda^*$ ,  $x_{j_s} = a_s \lambda^* + b_s$ ,  $s = 2, \dots, N$ . Поэтому, так как  $\lambda^{\min} \leq \lambda^* \leq \lambda^{\max}$ ,

$$\text{то } A(X, 1) = \max_{s \in W^-} (\lambda^{\min}, \frac{a_s \lambda^* + b_s}{a_s} - \frac{b_s}{a_s}) = \lambda^*,$$

$$B(X, 1) = \min_{s \in W^+} (\lambda^{\max}, \frac{a_s \lambda^* + b_s}{a_s} - \frac{b_s}{a_s}) = \lambda^*,$$

т.е.  $A(X, 1) = B(X, 1)$ , т.е.  $\lambda^* = 1$  - решение уравнения  $A(X, \lambda) = B(X, \lambda)$ .

Пусть  $A(X, 1) > B(X, 1)$ . Заметим, что в интервале  $(0, \infty)$  функция  $y(\lambda) = B(X, \lambda) - A(X, \lambda)$  является непрерывной в каждой внутренней точке и монотонно убывающей (так как  $A(X, \lambda)$  - неубывающая, а  $B(X, \lambda)$  - невозрастающая функции в этом интервале).

Так как по условию  $y(\lambda) > 0$  для некоторого  $1 \geq \lambda > 0$  и  $y(1) < 0$ , в силу непрерывности функции  $y(\lambda)$  существует  $\lambda$  такое, что  $y(\lambda) = 0$ . В силу монотонности и непрерывности функции  $y$  множество

$$\hat{N} = \{ \lambda \mid 0 < \lambda < 1, \quad y(\lambda) = 0 \}$$

представляет собой отрезок либо точку, причем  $\sup \hat{N} \in \hat{N}$ . Положим  $\lambda^* = \sup \hat{N}$ . В силу сказанного выше,  $A(X, \lambda^*)$  и  $\lambda^*$  - наибольшее, для которого  $A(X, \lambda) \leq B(X, \lambda)$ , что и требовалось доказать.

Примечание. Численный метод для приближенного нахождения наибольшего  $\lambda$  использует факт монотонности функции  $y(\lambda)$  и основывается на доказанном утверждении. Строится возрастающая последовательность  $N_0, N_0 + \epsilon, N_0 + 2\epsilon, \dots, N_0 + k\epsilon$ , где  $y(N_0) > 0$  и  $k$  таково, что  $y(N_0 + k\epsilon) > 0$ , но  $y(N_0 +$

+ (k + 1) ε ) < 0. Затем обычным путем шаг ε уменьшается до тех пор, пока не будет достигнута требуемая точность.

#### § 4. Проверка адекватности модели

Целесообразно провести такую проверку для каждого типа изверженных горных пород, основываясь каждый раз на учете представительного фактического материала — химических анализов образцов, заведомо относящихся (исходя из чисто геологических предпосылок, безотносительно к рассматриваемой модели) к данному эвтектическому типу. Как для исходной (ТЕЗИСЫ 1', 2'), так и для линейной (ТЕЗИСЫ 1'', 2'') модели прежде всего следует оценить, насколько хорошо расписываются анализы упомянутых выше "надежных" образцов в эвтектической пропорции. Для этого достаточно проанализировать характер распределения величины  $N(X)$ . Если модель адекватна, то подавляющее большинство анализов будет иметь величину  $N(X)$ , близкую к 100 %.

В линейном случае дальнейший анализ модели проводится по следующей схеме:

1. Оценивается величина  $N$ , фигурирующая в формулировках тезисов 1'', 2''. Как такая оценка может быть получена? Заметим, что очевидным следствием тезиса 1' (как и тезиса 1'') является неравенство  $x_{j_1} + x_{j_2} + \dots + x_{j_N} \geq N$ . Поэтому в качестве верхней оценки  $N^*$  для величины  $N$  естественно принять минимум суммы главных окислов по всем исследованным "надежным" образцам. Ясно, что "настоящее"  $N$  заведомо не больше  $N^*$ ,  $N \leq N^*$ , а разность  $N^* - N$  будет тем меньше, чем представительнее обучающая выборка.

2. Выделяются "надежные" анализы, удовлетворяющие тезису 1'' при  $N = N^*$ . Если модель адекватна, большинство "надежных" анализов должно удовлетворять тезису 1'' при  $N = N^*$ . Выделенные при  $N = N^*$  анализы в дальнейшем именуется элитными представителями данного горнопородного вида (типа).

3. Для элитных представителей анализируется распределение по разбросам  $r(X)$  и оптимальному значению кремнезема; для представителей с малым разбросом (т.е. обладающим "памятью") проводится кластер-анализ с целью выделения популяций. Важная особенность применяемого метода кластеризации заключается в следу-

ищем: если X и Y отнесены к одному и тому же кластеру (математической модели популяции), то для X и Y выполняются требования тезиса 2".

Рассмотрим, как данная схема реализуется для гранитоидной эвтектики. Химические анализы из справочника /7/ с целью отбора "надежных" представителей гранитоидного типа были подвергнуты отбраковке. Отобранные образцы удовлетворяют следующим требованиям:

1) имеются данные по восьми окислам -  $\text{SiO}_2$ ,  $\text{Al}_2\text{O}_3$ ,  $\text{Fe}_2\text{O}_3$ ,  $\text{FeO}$ ,  $\text{MgO}$ ,  $\text{CaO}$ ,  $\text{Na}_2\text{O}$ ,  $\text{K}_2\text{O}$ ;

2) сумма массовых процентов перечисленных окислов находится в пределах от 98,5 до 101 %;

3) для породы образца имеется указание "гранит" (в виде отдельного термина или корня термина), "пегматит", "рапакиви", "аплит"; не брались случаи с указаниями "монцонитовый", "гибридный", "метасоматический";

4) сумма массовых процентов  $\text{FeO}$  и  $\text{Fe}_2\text{O}_3$  не превосходит 7,5 %, массовой процент  $\text{MgO}$  составляет не более 3,5 % (фильтрация по сумме феррических компонент);

5) массовое содержание  $\text{SiO}_2$  не менее 64 %,  $\text{Al}_2\text{O}_3$  не выше 16 % (отбраковка сиенитов);

6) отношение массового содержания  $\text{Na}_2\text{O}$  к таковому для  $\text{K}_2\text{O}$ , как и обратное отношение, больше 0,15 (отбраковка вероятных существенно альбитизированных и микроклинизированных пород).

В результате фильтрации из 1507 отобрано 452 анализа в качестве материала обучения, относящегося с достаточной уверенностью к гранитоидному типу.

Идеализированный химический анализ характеризовал в рассматриваемом случае молекулярные доли восьми упомянутых выше окислов, т.е. для модели гранитоидного эвтектического типа принималось  $n = 8$  и, естественно,  $N = 4$ . Система (жж), задающая необходимое условие принадлежности к i-му эвтектическому типу, принимает, в соответствии с изложенным в § 3, вид

$$\begin{cases} (x_1/N) \geq \lambda & (\text{SiO}_2) \\ (x_2/N) \geq 0,5-0,5 \lambda & (\text{Al}_2\text{O}_3) \\ (x_7/N) \geq 0,74-0,82 \lambda & (\text{Na}_2\text{O}) \\ (x_8/N) \geq -0,24+0,32 \lambda & (\text{K}_2\text{O}) \\ 0,864 \geq \lambda \geq 0,837 \end{cases}$$



Соответственно

$$A(X, H) = \max\left(0,837, -\frac{2x_2}{H} + 1, -\frac{x_7}{0,82H} + \frac{74}{82}\right),$$

$$B(X, H) = \min\left(0,864, \frac{x_1}{H}, \frac{x_8}{0,32H} + \frac{3}{4}\right).$$

На рис. 2 показана диаграмма распределения анализов по величине  $H(X)$  – проценту расписываемости анализа образца  $X$  в эвтектической пропорции для гранитоидной эвтектики, учитывающая все 452 отобранных анализа. Отметим экспоненциальный характер возрастания анализируемой характеристики и тот факт, что значение  $H(X) \geq 80\%$  имеют 365 объектов (т.е. 80% выборки), что на наш взгляд, является свидетельством адекватности модели.

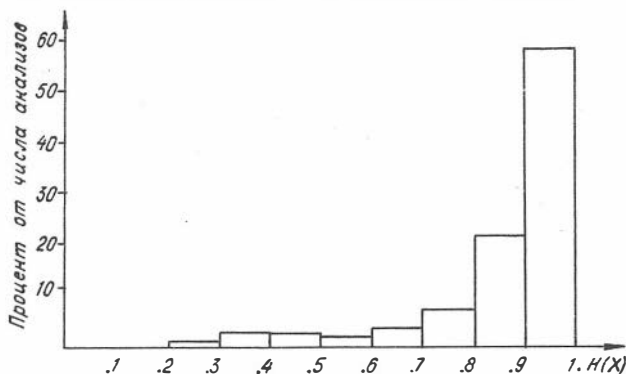


Рис. 2. Распределение анализов по величине  $H(X)$  – проценту расписываемости анализа образца  $X$  в эвтектической пропорции для гранитоидной эвтектики ( $m = 452$ ).

В табл. 9 представлены анализы, наимудшим образом расписывавшиеся в эвтектической пропорции ( $H(X) < 30\%$ ). Все эти анализы, как видно из табл. 9, отличаются малым содержанием  $K_2O$  (0,86–1,15%), в то время как содержание  $Na_2O$  колеблется в пределах трех–пяти процентов.

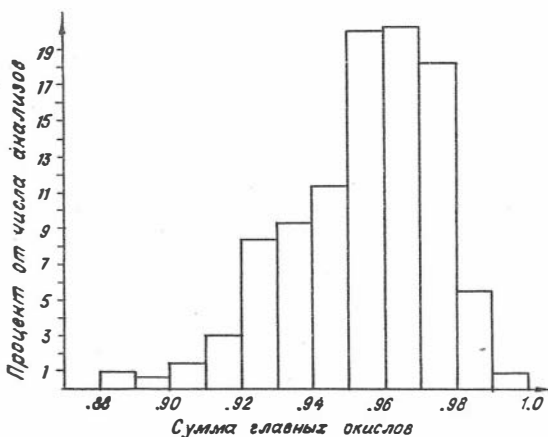
Для нахождения величины  $H^*$  было проанализировано распределение 452 образцов обучающей выборки по суммам главных

Анализы с наименьшими значениями  $H(X)$ 

$H(X)$ %	Номер по 77	SiO <sub>2</sub>	TiO <sub>2</sub>	Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	Fe <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	FeO	MnO	MgO	CaO	Na <sub>2</sub> O	K <sub>2</sub> O	H <sub>2</sub> O <sup>+</sup>	P <sub>2</sub> O <sub>5</sub>
29	1073	72,34	.24	15,63	.93	1,39	.02	.64	3,15	3,57	1,15	-	-
28,5	816	71,6	.14	14,94	.17	2,16	.05	.69	3,09	5,06	1,14	.15	-
25,5	751	71,38	.72	12,6	1,41	3,76	.04	2,87	1,96	3,52	1,02	-	.14
23,0	796	75,36	.24	10,65	1,71	2,38	.02	.28	4,20	3,65	.93	-	-
21,5	771	72,82	.42	12,76	.87	3,62	.05	2,49	1,96	3,47	.86	-	.14

окислов (рис. 3). Оказалось, что для преобладающей части образцов сумма главных окислов колеблется в пределах 94–98 %, а минимальную сумму, равную 88 %, имеют пять анализов (табл. 10). Таким образом, принимается  $H^* = 0,88$ . При  $H^* = 0,88$  были отобраны "алитные" представители (э.п.) гранитоидного типа, которых оказалось 298 (т.е. 2/3 "надежных" анализов).

Рис. 3. Распределение анализов по сумме главных окислов — SiO<sub>2</sub>, Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, Na<sub>2</sub>O, K<sub>2</sub>O (n = 452).



На рис. 4 представлена диаграмма распределения 298 э.п. по величине  $\lambda(X)$  (нормативному содержанию кремнезема в эвтектической пропорции для образца X) и соответствующим условным давлениям паров воды. Налицо линейный рост анализируемой характеристики в сторону малых условных давлений.

Таблица 10  
 H(X) для анализов с минимальной суммой  
 главных окислов.

H(X), %	Сумма главных окислов, мол. %	Номер по /7/
88	88,8	258
43,5	88,7	1214
87	88,6	356
32	88,6	722
81	88,3	107

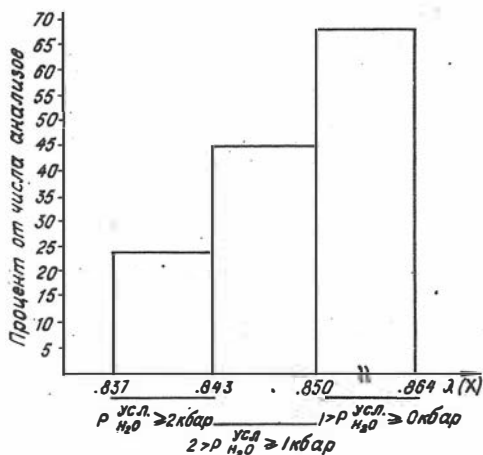


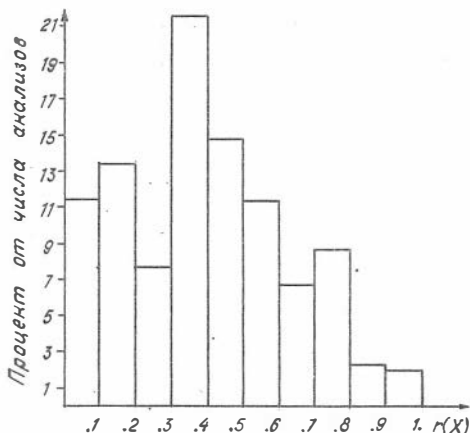
Рис. 4. Распределение эф-ных представителей гранитоидного типа по величине  $\lambda(X)$  - нормативному содержанию кремнезема в эвтектической пропорции для образца X и соответствующим условным давлением паров воды ( $m = 298$ ).

Затем, для тех же 298 э.п. проанализировано распределение по разбросу  $r(X)$  (рис. 5). Как видно из рис. 5 распределение имеет достаточно сложный характер, а его максимальный пик находится между 0,3 и 0,4. В табл. II представлены э.п. с разбросом  $r(X) = 1$  (т.е. образцы "без памяти", могущие возникать при любой эвтектической пропорции). Все они отличаются высоким содержанием как  $Na_2O$ , так и  $K_2O$ .

Для численного эксперимента по выделению популяций были отобраны э.п. с разбросом  $r(X) < 1/3$  (т.е. часть рас-

пределения, находящаяся слева от максимального пика). Их оказалось 115.

Рис. 5. Распределение элитных представителей гранитоидного типа по величине разброса  $r(X)$  ( $m = 298$ ).



Использован метод кластеризации при заданных необходимых условиях принадлежности объектов к одному и тому же кластеру (см. статью В.О.Красавчикова в наст. сб.). В качестве необходимых принимались условия тезиса 2. В результате выделено 12 кластеров (табл. 12). Из них 9 малых кластеров отвечают условным давлениям не менее 0,5 кбар, а в области условных давлений 0,5–0 кбар оказалось три "больших" кластера – 23, 25, 27 объектов в кластере соответственно, а 15 объектов образуют тривиальные кластеры, состоящие из одного элемента. Еще 2 объекта были удалены из выборки, так как эти анализы дублируются в справочнике. Из табл. 12 видно, что каждый из кластеров обладает следующим свойством: содержание  $Na_2O$  является сравнительно стабильным – исключая кластер № 3, где содержание  $Na_2O$  колеблется в пределах 0,3 %. В кластере № 3, единственном, где массовое содержание  $Na_2O$  выше чем  $K_2O$ , оно колеблется в пределах 0,67 %, но здесь зато стабилен калий: содержание  $K_2O$  колеблется в пределах 0,07 %. Таким образом, сделанные наблюдения допускают двоякое истолкование: во всех популяциях для анализов с разбросом  $r(X) < 1/3$  следует ожидать либо стабильности содержания  $Na_2O$ , либо стабильности меньшего по массовому содержанию из двух рассматриваемых окислов. Если

Таблица II

Анализы с разбросом  $r(X) = .1$  (без "памяти")

H(X), %	Сумма главн. окис- лов, мол. %	Номер по//77	SiO <sub>2</sub>	TiO <sub>2</sub>	Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	Fe <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	FeO	MnO	MgO	CaO	Na <sub>2</sub> O	K <sub>2</sub> O	H <sub>2</sub> O <sup>+</sup>	P <sub>2</sub> O <sub>5</sub>
92,5	96,2	834	69,83	.16	15,37	.78	1,28	.03	.41	1,37	4,49	5,07	-	.17
95,0	97,7	1080	72,89	.10	14,72	.69	.48	.01	.23	1,01	4,40	4,66	-	-
93,7	95,4	1156	71,6	-	12,70	1,52	1,15	-	.53	1,75	4,91	4,90	1,01	-
95,7	99,5	1435	73,14	-	15,26	.01	.39	.04	.02	.05	4,54	5,85	-	.03

Таблица 12

## Результаты кластеризации

Номер клас-тера	Число эле-ментов	min max	A(X, .88)	B(X, .88)	Сумма главных окислов, мол. %	H(X), %	Р ус-ловное, коар	SiO <sub>2</sub>	TiO <sub>2</sub>	Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	Fe <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	FeO	MnO	MgO	CaO	Na <sub>2</sub> O	K <sub>2</sub> O	H <sub>2</sub> O <sup>+</sup>	F <sub>2</sub> O <sub>5</sub>
1	3	min	.845	.846	90.8	88.0	~1.5	66.99	.4I	II.87	I.12	I.39	.0I	.17	.35	3.79	3.83	-	.05
		max	.846	.846	97.2	88.2	~1.5	76.53	.4I	15.52	I.29	5.05	.0I	.96	3.09	3.92	3.92	-	.05
2	2	min	.844	.850	92.9	88.5	I	67.78	.34	15.2	.45	2.22	.04	.85	2.28	3.88	4.03	-	.2I
		max	.845	.85I	93.4	90.5	2	70.II	.74	I6	.9	2.87	.04	.97	2.37	4	4.9I	-	.2I
3	4	min	.837	.843	94.6	89.5	2	7I.I7	сл.	I3.07	.58	.39	сл.	.46	.57	4.I4	3.77	-	.I6
		max	.84I	.844	96.0	95.0	3	73.38	.15	15.34	I.58	I.68	.04	2.33	2.06	4.8I	3.84	-	.44
4	2	min	.847	.848	91.6	88.2	~I	68.I3	.07	I2.93	.42	I.44	.03	.36	I.26	3.75	3.92	.65	-
		max	.847	.848	96.4	88.5	~I	74.7I	.33	I4.83	I.55	2.79	.05	I.34	2.52	3.80	3.96	.65	-
5	3	min	.848	.856	92.3	88.7	.5	67.86	.23	I4	.25	I.86	.04	.55	.I4	3.39	4.28	-	.04
		max	.853	.856	95.0	92.7	I	70.30	.42	15.9I	I.3	6.7	.07	I.48	2.58	3.62	5.40	-	.I6
6	2	min	.852	.853	92.0	88.0	~7	67.56	.I0	I4.I0	.08	.64	.0I	.4	.50	3.35	4.I9	-	.08
		max	.852	.854	98.0	88.5	~8	76.02	.68	I4.36	.74	5.07	.0I	.5I	I.92	3.50	5.60	-	.34
7	3	min	.852	.860	93.3	90.0	~5	70.I	.28	I3.I5	.27	I.0	.02	.45	I.I0	3.I3	4.45	-	.I
		max	.856	.860	96.6	90.7	~5	74.08	.45	15.05	.87	3.I0	.I3	I.3	I.75	3.4I	4.46	-	.I4
8	2	min	.850	.857	95.5	90.5	.5	72.94	.I2	I2.42	.98	.72	.06	.32	.64	3.4	4.25	-	.08
		max	.852	.857	97.2	9I.5	I	75.3	.25	12.93	2.8I	I.73	.07	.59	I.04	3.55	4.33	-	.I7
9	2	min	.854	.857	88.8	88.0	~5	68.98	.15	10.7I	.4I	2.85	.03	I.15	.98	3.25	4.45	-	.I8
		max	.855	.857	92.6	88.2	~5	69.I8	.29	15.00	2.46	4.35	.II	2.I3	3.I2	3.29	5.84	-	.I
10	23	min	.856	.864	92.2	88.7	0	68.4	.02	II.65	.16	.I3	сл.	.04	.5I	3.0	4.57	.22	0
		max	.857	.864	97.8	95.5	.5	76.45	.65	15.94	4.04	4.44	.I2	I.64	2.7I	3.2	6.47	.22	.I8
11	25	min	.858	.864	92.8	88.7	~0	68.48	.05	II.99	.07	.39	.008	.07	.33	2.83	4.62	-	.0I
		max	.860	.864	97.9	96.0	~25	76.26	.42	15.22	2.23	3.4I	I.0I	I.I	2.06	3.00	7.2	-	.24
12	27	min	.86I	.864	93.4	88.0	0	69.26	.05	II.2I	.08	.35	0	.09	сл.	2.6I	4.73	-	.02
		max	.864	.864	98.I	94.5	0	76.23	.58	15.85	3.35	2.8I	I.0I	I.03	I.78	2.85	8.37	-	.I4

хотя бы одно из этих, в принципе, не противоречащих друг другу истолкований справедливо, то анализы с малым разбросом  $r(X)$  обладает не только индивидуальной "памятью", но и задают "коллективную память" популяции. В любом случае, содержание  $SiO_2$ ,  $Al_2O_3$  не играет заметной роли, так как варьирует в очень широких пределах (см. табл. I2, кластеры № I, IO и 9, I2 соответственно).

## § 5. Обсуждение результатов

Валовой состав экспериментальной гранитоидной эвтектики, как мы видели, обнаруживает полевошпатовый, а точнее – альбитовый тренд при повышении давления паров воды. Считается, что вода преобладает над другими флюидами поликомпонентных гранитоидных систем. С другой стороны, валовое содержание воды в крупных, ба-толитовых очагах гранитоидной магмы вероятно меньше 1,5 мас. % /IO/ и насыщение их водой возможно лишь в поздно кристаллизующихся частях магматических камер. Реальные парциальные давления воды при кристаллизации гранитоидов едва ли достигают 5 кбар.

Теперь известно, что изменения состава гранитоидной эвтектики в полевошпатовом направлении возникают и под влиянием некоторых других, кроме присутствия воды, физико-химических факторов: малых флюидных добавок и нелетучих примесей, "сухого" давления, изменения кислотности-основности, окислительно-восстановительных параметров среды.

Повышение "сухого" давления придает кислой эвтектике полевошпатовый тренд в связи с усиленным выпадением свободного кремнезема, хотя здесь смещение эвтектики тормозится высадкой в кристаллическую фазу и натрия, в форме жадеитового компонента. Поэтому ожидаемое влияние общего давления на состав эвтектики невелико.

Резкое смещение состава гранитоидной эвтектики в полевошпатовую сторону вызывается примесью кислотных компонентов, усиливающих высадку кремнезема (обзор данных, см. /4, 6/).

Добавление окиси кальция в гранитоидную эвтектику стимулирует высадку натрия в виде плагиоклаза, увеличивая содержа-

ние кремнезема в остающейся эвтектике. Ростом кремнезема в эвтектике сопровождается и присадка других оснований - окисей магния и двухвалентного железа, полуторной окиси алюминия /8/. Рост содержания остающегося в расплаве  $\text{SiO}_2$  тем больше, чем выше оснoвность добавки.

Таким образом, использованная нами эвтектическая линия для меняющихся давлений паров воды - это довольно типичный случай изменения составов кислой эвтектики при изменении разных параметров среды. Близкое сходство эвтектических трендов в пределах рассмотренного типа пород находит объяснение с позиций универсального принципа кислотно-основного взаимодействия компонентов, из которого, в частности, вытекает правило постоянства валовой оснoвности расплава вдоль эвтектических линий /6/.

Из сказанного ясно, что составы природных гранитоидов, выраженные через пропорции упрощенной экспериментальной гранитоидной эвтектики с водой, нельзя интерпретировать как прямое указание на истинные  $\text{P}_{\text{H}_2\text{O}}$  или содержания воды при образовании гранитоидов. Если предположить, что для исходной выборки ( $m = 452$ ) распределение анализов по содержанию кремнезема в эвтектической части примерно такое же, как и для элитной выборки (см. рис. 4,  $m = 298$ ), то можно заключить, что в своем большинстве гранитоиды отвечают сухим или маловодным условиям образования. Высокое содержание кремнезема в расплаве свидетельствует о преимущественно малом содержании в гранитообразующих системах сильных кислот, однако при существенной роли щелочей. Повышенно-полевошпатовые эвтектики, представляющие левый "хвост" распределения (см. рис. 4), могут отвечать повышенному участию сильных кислот.

Суммарное влияние примеси фемических компонентов (слабых оснований) на состав гранитоидной эвтектики, по-видимому, незначительно. По "элитной" выборке ( $m = 298$  анализов) получается, что сумма фемических окислов в породах имеет, как обычно, отрицательную корреляцию с кремнеземом; в эвтектике ввиду усиленной отсадки фемических минералов эта корреляция должна была бы иметь противоположный знак /6,8/. Следовательно, имеющаяся фемическая примесь в гранитоидах - в основе надэвтектическая, что можно считать еще одним выводом настоящей работы.

По данным справочника /7/ не улавливается регулярных зави-



симостей состава выделенных "элитных" гранитоидов от глубины их формирования, о которой можно ориентировочно судить по кристалличности пород, фациям регионального метаморфизма вмещающих толщ, сопряженности с зоной мигматитов, уровню эрозионного среза, возрасту интрузий.

Типовую выдержанность эвтектического кремнеземно-полевошпатового тренда гранитоидной системы при изменении разнообразных параметров среды можно считать видовым фенотипическим признаком гранитоидов. Пропорции эвтектики заданы качественным видовым составом (набором) минералов эвтектики, и могут меняться из-за вариаций физико-химических условий лишь в ограниченных пределах. За этими пределами кремнеземно-полевошпатовую эвтектику сменяют качественно иные котектики, с другими химическими пропорциями и трендами. Гранитоидную эвтектику отличает также высококремнеземная мода составов (см. рис. 4), обуславливающая фенотипическое для гранитоидных магм и пород высокое содержание общего и свободного кремнезема.

Степень расписываемости  $N(X)$  химического состава магматической породы на данную котектику (эвтектику) важна как оценка видовой чистоты магматической породы. Если величина  $N(X)$  мала, то порода, по-видимому, имеет смешанное происхождение - образована за счет нескольких сменявших друг друга котектик, испытала метасоматоз, контаминацию и т.д. Расчеты показали, что даже после предварительной отбраковки экстремальных разновидностей многие гранитоиды плохо расписываются на эвтектику, что свидетельствует о широком проявлении смешанных механизмов магмо- и породообразования.

Некоторые образцы из разных районов (см. табл. II, рис. 5), имеющие разный петрографический облик, хорошо расписываются в эвтектическую пропорцию в любой точке эвтектической линии - значения  $r(X)$  достигают единицы. Оказывается, что все это - гранитоиды повышенной (как у сиенитов) щелочности, с высокими содержаниями и  $Na_2O$ , и  $K_2O$ . Отсутствие дефицита по щелочам обеспечивает указанный большой разброс допустимых эвтектических пропорций, что можно толковать как "отсутствие памяти" о каком-либо узком интервале эвтектических условий. Объяснить это обстоятельство и высокую щелочность пород можно надэвтектическим выплавлением магмы из богатых щелочными минералами исходных пород, а так-

же вторичным обогащением магм и гранитоидов щелочами. Вместе с тем, главная мода распределения величин  $r(X)$  приурочена к невысоким значениям (0,3-0,5), т.е. тенденция сохранения "памяти" все-таки отчетлива.

Выборка анализов с малым разбросом вариаций расписываемости на эвтектику ( $r(X) \leq 0,3$ ) распалась, как уже отмечено, на ряд кластеров. По крайней мере, три больших кластера (см. табл. I2) можно считать не случайными, а отвечающими популяциям пород. Оказалось, что в каждом кластере с численностью образцов  $n \geq 2$  самый узкий диапазон содержаний из всех главных окислов имеет один из щелочных окислов - тот, количество которого (в мол. %) меньше. Это  $Na_2O$ , в одном случае  $K_2O$ . Таким образом, именно дефицитный щелочной окисел лимитирует валовое количество эвтектической составляющей в популяции гранитоидов, выраженной кластером.

Выделившиеся кластеры, как правило, включают петрографически разные породы из разных районов, так что рассматриваемые популяции не имеют узкой петрографической, а также узколокальной пространственной привязки. Интервалы содержаний окисла в разных кластерах чаще всего пересекаются, но кластеры сохраняют отчетливую петрохимическую привязку по  $Na_2O$  и иногда  $K_2O$ . На формирование кластера как-то влияет начальное валовое соотношение всех варьирующих главных окислов в системе, хотя почти постоянная концентрация компонента с "памятью" все-таки остается характерной меткой пород отдельного кластера.

Естественно предположить, что "память" может быть зафиксирована именно на изначально дефицитном компоненте. Его малое содержание будет критическим для системы (плавящаяся порода, кристаллизующийся расплав), лимитируя долю и состав отделяемой эвтектической составляющей. С формальной точки зрения безразлично, в какой форме рассматривать дефицитный компонент (в виде химического элемента, окисла, силикатного минала и т.д.). Однако важно понять, в какой форме он мог реально функционировать в системе и стать, в частности, непосредственным субстратом ее "памяти". На уровне гетерофазного функционирования эвтектики реально функционирующими элементами системы являются кристаллические фазы и, как обычно считается, молекулярные их эквиваленты в расплаве (миналы).

Для гранитоидной системы выявляется, однако, дополнительная возможность фиксации "памяти" непосредственно на окислах кальция и натрия, находящихся в расплаве. Эта возможность вытекает из современной физической модели особых кластеров — ионных субтаксисов в расплавах, которая предполагает существование автономных структурных групп атомов /5/. Анионные субтаксисы представляются в ней как сетчатые, а катионные — как стержневые ансамбли. В силикатных расплавах таковыми являются полимерный анионный алюмокремнеземный субтаксис и низкомолекулярные окисные катионные субтаксисы. Катионы в последних представляются как находящиеся в центре кислородных тетраэдров (шпинелеподобная упаковка). Эти тетраэдры образуют комбинации с фиксированной стехиометрией, как у химических соединений и эвтектик (эвтектоидные катионные субтаксисы /5/). Для гранитов и сиенитов в только что отмеченной работе был вычислен на основании химических составов пород единый щелочной субтаксис окислов со стехиометрией  $0,29 \text{ Fe}_2\text{O}_3$ ;  $0,88 \text{ FeO}$ ;  $3,50 \text{ Na}_2\text{O}$ ;  $2,77 \text{ K}_2\text{O}$  на 8 атомов кислорода. Для более меланократовых магматитов наметилось несколько типов иных, известково-магнезиальных катионных субтаксисов, состоящих из набора  $\text{Fe}_2\text{O}_3$ ,  $\text{FeO}$ ,  $\text{MgO}$ ,  $\text{CaO}$ . Катионные субтаксисы антикристаллически в том смысле, что их стехиометрический состав не имеет аналогов среди твердых порообразующих фаз, а собственные температуры их кристаллизации низки.

Таким образом, рассмотренная нами эвтектика — гранитоидная — как бы содержит жидкое химическое соединение, стехиометричное по щелочам в докристаллическом состоянии. Подмеченная "память" этой системы по щелочным окислам получает физическую трактовку. Примечательно, что молекулярные отношения  $\text{Na}_2\text{O}/\text{K}_2\text{O}$  для эвтектики альбит — ортоклаз — кварц (при  $P_{\text{H}_2\text{O}} = P_{\text{общ}} = 0,5 \text{ кбар}$ ) и для щелочного субтаксиса различаются не сильно (равны соответственно 1,057 и 1,263), сохраняя некоторое преобладание  $\text{Na}_2\text{O}$ . К сожалению, существенно окисная форма нахождения щелочей в расплаве не подтверждена методом структурно-молекулярной спектроскопии.

Анализ состава эвтектоидной системы через окислы интересен тем, что он, возможно, позволит количественно связать эвтектические (и вообще котектические) отношения, сформированные на гетерофазной магматической стадии, с химическими отношениями в расплаве.

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе на примере гранитоидов осуществляется дальнейшее развитие методологии анализа систем воспроизведения в геологии. Основные результаты проведенных исследований сводятся к следующему:

1. Предложена математическая модель химического состава эвтектоидной породы. В этой модели увязываются, с одной стороны, содержания окислов в химическом составе исследуемого образца и, с другой стороны, доли окислов в эвтектической пропорции, взятые по экспериментальным данным. При этом допускается, что эти доли могут меняться в зависимости от некоторых факторов (давление паров воды и др.). Модель позволяет количественно оценить долю эвтектоидной составляющей в породе по химическому анализу образца.

2. Апробация модели на материале по химическим анализам гранитоидов крупного региона показала, что в большинстве анализов гранитов (90 % анализов) эвтектоидная часть составляет не менее семидесяти процентов; для 80 % анализов гранитов эвтектоидная часть составляет не менее восьмидесяти процентов; для 60 % анализов гранитов эвтектоидная часть составляет не менее девяноста процентов. В то же время некоторые анализы, фигурирующие в литературных источниках как анализы гранитов, расписываются в эвтектическую пропорцию только на двадцать-тридцать процентов. Все такие анализы имеют малые содержания  $K_2O$ .

3. Модель позволяет оценить, насколько испытуемый образец "помнит" условия своего возникновения. Для этого оценивается диапазон условных давлений паров воды, при которых анализ образца "хорошо" расписывается в эвтектической пропорции. Чем уже этот диапазон, тем лучше "память". Распределение анализов по длине диапазона оказалось бимодальным. Отдельные образцы вообще не имеют "памяти", иначе говоря, могут возникать при любых подходящих для образования гранитов условиях. При решении классификационных задач генетической направленности, анализы не имеющие "памяти", целесообразно предварительно отбраковывать.

4. Соотношения модели имеют вид необходимых условий принадлежности образца  $X$  к заданному эвтектоидному типу и образцов  $X$  и  $Y$  к одной и той же популяции заданного эвтектоидного типа.

В соответствии с этими условиями проведен отбор анализов образцов, принадлежащих к гранитоидному типу, и выделение популяций гранитов. Оказалось, что все выделенные кластеры (популяции) отличаются постоянством концентрации  $\text{Na}_2\text{O}$  или  $\text{K}_2\text{O}$ ; постоянен тот из них, концентрация которого меньше. При этом окислы с большими концентрациями ( $\text{SiO}_2, \text{Al}_2\text{O}_3$ ) внутри популяции могут существенно варьировать.

В целом, модель позволяет не только более полно раскрыть эвтектическую природу воспроизведения гранитоидов, но и подтвердить, что определенную роль в образовании гранитоидов играют и неэвтектические факторы. Моделью можно воспользоваться при изучении вопросов о возможной доэвтектической стехиометрии состава магматических расплавов и о соотношении ее с эвтектическими пропорциями.

### Литература

1. Белоусов А.Ф. Методологические вопросы изучения и интерпретации состава магматических комплексов. Новосибирск, 1986. 34 с. (Препр. Ин-т геологии и геофизики СО АН СССР; № 5).
2. Белоусов А.Ф., Красавчиков В.О. Обобщенная модель системы воспроизведения // Системный подход в геологии (теоретические и прикладные аспекты): Тез. докл. Ч. I. М., 1986. С. 96-98.
3. Белоусов А.Ф. Вещественная композиция вулканических формаций и ее природа // Геология и геофизика 1986. № 7. С. 8-18.
4. Белоусов А.Ф., Кривенко А.П. Магмогенез вулканических формаций. Новосибирск: Наука, 1983. 167 с.
5. Букуров Г.С. Двухструктурная модель строения магматических и сульфидных расплавов // Изв. АН КазССР. 1986. №3. С. 19-29.
6. Кузнецов А.Д., Эпельбаум М.Б. Эвтектические отношения в открытых системах с вполне подвижными компонентами, М.: Наука, 1985. 109 с.
7. Сидоров В.М. Химические анализы гранитоидов украинского докембрия. Киев: Наук. думка, 1970. 699 с.
8. Kushiro I. On the nature of silicate melt and its significance in magma genesis: regularities in the shift of the li-

quidus boundaries involving olivine, pyroxene and silica minerals // Amer. J. Sci. 1975. Vol. 275. N. 4. P. 411-431.

9. Luth C., Jahns R.H., Tuttle O.F. The granite system at pressures of 4 to 10 kilobars // J. Geophys. Res. 1964. Vol. 69. N 4. P. 759-774.

10. Presnall D.C. The geometrical analysis of partial fusion // Amer. J. Sci. 1964. Vol. 267. N 10. P. 1178-1194.

11. Wyllie P.J. From crucibles through subduction to batholiths // Energetics of geological processes. N.Y.; Heidelberg; Berlin, 1977. P. 389-433.

В.В.Бабич

#### МОДЕЛЬ ЗАДАЧИ РАСПОЗНАВАНИЯ НА ОСНОВЕ ПРЕДСТАВЛЕНИЙ О СТРУКТУРЕ СХОДСТВА АНАЛИЗИРУЕМОГО МАТЕРИАЛА

С формальных позиций смысл большинства научных задач, в том числе и задач распознавания образов, в самом общем виде может быть описан выражением:

$$y = f(x_1, x_2, \dots, x_n), \quad (I)$$

в котором требуется найти один из трех входящих в него элементов. Соответственно все разнообразие задач, описываемых приведенным выражением, распадается на три типа: нахождение значений зависимого переменного ( $y$ ), нахождение значений независимых переменных ( $x_1, x_2, \dots, x_n$ ), нахождение функции ( $f$ ). Конкретное наполнение перечисленных формальных элементов зависит от того, к какой области знаний относится решаемая задача и какие базовые понятия положены в основу его содержательной трактовки. Так, в философско-методологическом аспекте /7/ указанные типы задач можно трактовать соответственно как выявление следствия, причин и вида причинно-следственных связей; в кибернетическом смысле /5/ - как выявление состояния, условий функционирования и функциональной структуры системы; в терминах эмпирического предсказания /6/ - как автоматическая классификация, выбор информативной системы при-

наков и поиск решающей функции и т.д. Применительно к области распознавания образов следует соответственно говорить о задачах собственно распознавания, нахождения описания объектов распознавания и поиска правила распознавания.

Однако приведенная трактовка основных типов задач распознавания мало что дает для раскрытия их особенностей, взаимоотношений, специфики решения и т.д. Это обусловлено расплывчатостью и неоднозначностью понятия "распознавание".

Ранее нами /1/ была предпринята попытка рассмотреть указанные разновидности задач распознавания на основе базового понятия "классификация" с выделением задач построения классификации и поиска правила классифицирования. Однако эти построения следует признать мало конструктивными по следующим причинам: во-первых, как показано в работе /8/, классификационная проблема представляет собой специфичную область знаний, не тождественную распознаванию; во-вторых, лишь в некоторых частных случаях конечным решением задачи распознавания является построение классификации.

Для преодоления указанных недостатков воспользуемся тем, что в основе теории распознавания лежит принцип аналогии, и все выводы, вытекающие из результатов решения задач распознавания, обусловлены особенностями взаимоотношений сходства-различия, наблюдающихся на некотором множестве объектов исследования. Проинтерпретируем с этих позиций формальные элементы выражения (I). Совокупность значений независимых переменных  $x_1, \dots, x_n$  представляет собой описание объектов, подлежащих сравнительному анализу; в геометрическом отображении — это совокупность из  $m$  точек в  $n$ -мерном пространстве, обладающих некоторыми взаимоотношениями близости (сходства)\*). Назовем эти исходные данные материалом анализа и обозначим через  $R_{m,n}$ . Совокупность значений зависимого переменного  $y$  является количественным выражением особенностей соотношений сходства объектов из материала анализа, т.е. структуры сходства, обозначаемой далее через  $S$ . Функция  $f$  в данном случае трактуется как способ выявления особенностей

\*) Все дальнейшие построения опираются на базовое понятие "сходство", как наиболее естественно, по мнению автора, вытекающее из принципа аналогии, хотя без какого-либо ущерба для конечных результатов его можно заменить альтернативным понятием "различие".

структуры сходства анализируемого материала и обозначается через  $v$ . Поскольку каждый из охарактеризованных элементов присутствует при любой ситуации распознавания, модель задачи распознавания  $Z$  можно представить в следующем виде:

$$Z = (R_{m,n}, v, S) \quad (2)$$

Рассуждая по аналогии с работой /4/, выделим разновидности задач распознавания в зависимости от того, какие элементы модели (2) известны, а какие требуется найти:

1. Задача выявления структуры сходства  $S$  анализируемого материала:

$$Z^S = (R_{m,n}, v, X)^\#$$

2. Задача поиска способа  $v$  выявления структуры сходства:

$$Z^V = (R_{m,n}, X, S)$$

3. Задача нахождения описания материала анализа, обладающего заданной структурой сходства:

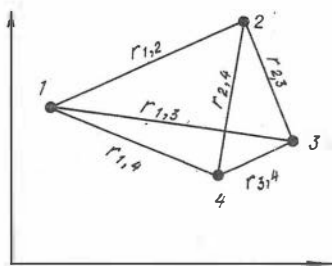
$$Z^R = (X, v, S)$$

Произведенная замена понятий при типизации задач распознавания является не формальной операцией, а имеет принципиальное значение. Во-первых, экспликация проблемы распознавания с позиции соотношений сходства объектов исследования индифферентна относительно содержательной направленности решаемых задач и поэтому представляет собой обобщенный подход к проблеме без искажения ее сути. Во-вторых, понятие "структура сходства" легко формализуемо (рис. 1). Наконец, возможность строго математического отображения делает понятие операционным, поскольку одновременно появляется возможность производить с ним определенные операции: типизацию, сравнение, отождествление и т.д. Это, в свою очередь, позволяет рассматривать проблему распознавания во всех ее разнообразных проявлениях с единых позиций. Рассмотрим выделенные разновидности задач более подробно.

Выявление структуры сходства анализируемого материала. Цель данной задачи заключается в выяснении особенностей в соотношениях сходства между объектами, составляющими анализируемый материал. Для выявления этих соотношений необходим некоторый алгоритм "видения" структуры сходства. Какова же формальная конструкция та-

\*) Через  $X$  обозначен элемент, подлежащий выявлению.





1	2	3	4	$i/j$
0	$r_{1,2}$	$r_{1,3}$	$r_{1,4}$	1
	0	$r_{2,3}$	$r_{2,4}$	2
		0	$r_{3,4}$	3
			0	4

Рис. I. Геометрическое и матричное отображение структуры сходства анализируемого материала. 1, 2, 3, 4 - объекты исследования (структурные элементы);  $r_{i,j}$  - величина сходства между объектами (структурные отношения).

кого алгоритма? Прежде всего, поскольку исходный анализируемый материал лишен какой-либо топологии, необходима некоторая метрика, определяющая способ измерения расстояния (сходства). Известны самые разнообразные метрики (см., например, /4/), наиболее распространенные из которых - расстояния по Хеммингу и Евклиду. Далее, необходимо определить способ  $N$  оперирования с признаками, т.е. указать, каким образом значения признаков  $x_1, \dots, x_N$  будут учитываться при измерении сходства между точками признакового пространства. Это осуществляется путем введения информационных весов признаков, нормировкой параметров и другими процедурами. Наконец, должен быть указан способ  $M$  оперирования с анализируемыми объектами, т.е. необходимо указать, каким образом будет производиться сопоставление объектов (непосредственно, или относительно некоторых дополнительно вводимых точек признакового пространства), какие структурные связи при этом следует учитывать, а от каких можно абстрагировать и т.д. Конструкция из указанных элементов и составляет модель алгоритма выявления ("видения") соотношений сходства между объектами:

$$V = (D, N, M). \quad (3)$$

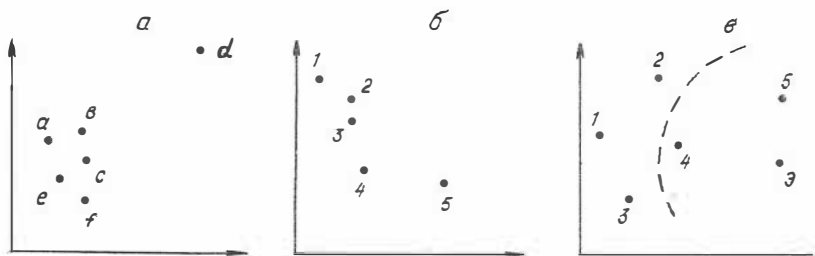
В зависимости от содержательной направленности решаемой задачи выявляемые особенности структуры сходства могут быть самыми разнообразными. В одних случаях исследователя интересует, при-

сутствуют ли в исходном материале уникальные, т.е. не похожие на других, объекты; в других – имеются ли в материале анализа хорошо различимые изолированные группы объектов; в третьих – наблюдается ли среди объектов по степени их сходства некоторая упорядоченность и т.д. Разнообразие данных задач увеличивается еще и за счет того, что при их решении исследователя может интересовать либо структура сходства анализируемого материала в целом, либо факт присутствия определенной особенности во взаимоотношениях объектов, либо обусловленность этой особенности определенными объектами.

Формализуемость понятия структуры сходства позволяет, в принципе, каждой задаче, несмотря на их большое разнообразие, поставить в соответствие определенную матрицу сравнения, отображающую ту особенность, которая является предметом поиска, и представляющую собой, образно говоря, своеобразную визитную карточку. Ниже приведены примеры формулировок структурных особенностей, которые могут составлять суть целевого требования в задачах выявления структуры сходства, а на рис. 2 даны соответствующие им формализованные отображения:

- а – требуется выяснить, присутствует ли в анализируемом материале уникальный объект;  $a, b, c, d, e, f$  – любой из шести объектов анализа;  $\xi$  – некоторый заранее нефиксированный порог различия;
- б – требуется выяснить, наблюдается ли между объектами сходство, коррелируемое с разницей в их порядковых номерах;  $r_{ij} > 0$  – различие между  $i$ -м и  $j$ -м объектами;
- в – требуется выяснить, расположены ли объекты 1, 2, 3 и 4, 5 в признаковом пространстве таким образом, что разделение указанных групп объектов возможно одной гиперсферой.  $\xi \neq 0$  – любой заранее нефиксированный порог различия (разница гиперсферы);  $\mathcal{E}$  – любая заранее нефиксированная эталонная точка пространства (центр гиперсферы); прочерк означает, что от сходства между данными структурными элементами можно абстрагироваться.

Положительное решение задач рассматриваемого типа возможно лишь в том случае, если используемый алгоритм выявления структуры сходства в принципе может обеспечить обнаружение тех структурных особенностей, ради которых решается задача. Ориентация алгоритма



$\alpha$	$\beta$	$\gamma$	$\delta$	$\epsilon$	$\zeta$	$i/j$
$0 < \epsilon$	$< \epsilon$	$> \epsilon$	$< \epsilon$	$< \epsilon$	$\alpha$	$\alpha$
$0 < \epsilon$	$> \epsilon$	$< \epsilon$	$< \epsilon$	$\beta$		$\beta$
$0 > \epsilon$	$< \epsilon$	$< \epsilon$	$\gamma$			$\gamma$
$0 > \epsilon$	$> \epsilon$	$\delta$				$\delta$
$0 < \epsilon$	$\epsilon$					$\epsilon$
$0$	$f$					$f$

1	2	3	4	5	$i/j$
$0 r_{1,2}$	$> r_{1,2}$	$> r_{1,3}$	$> r_{1,4}$	1	1
$0$	$r_{2,3}$	$> r_{2,3}$	$> r_{2,4}$	2	2
$0$	$0$	$r_{3,4}$	$> r_{3,4}$	3	3
$0$	$0$	$0$	$r_{4,5}$	4	4
$0$	$0$	$0$	$0$	5	5

1	2	3	4	5	$\epsilon$	$i/j$
$0$	$-$	$-$	$-$	$> \epsilon$	1	1
$0$	$-$	$-$	$> \epsilon$	2	2	2
$0$	$-$	$-$	$> \epsilon$	3	3	3
$0$	$-$	$< \epsilon$	4	4	4	4
$0$	$< \epsilon$	5	5	5	5	5
$0$	$\epsilon$	3	3	3	3	3

Рис. 2. Примеры некоторых особенностей структуры сходства в геометрическом и метричном отображениях, которые могут быть предметом выявления (пояснения в тексте).

на выявление тех или иных особенностей структуры сходства осуществляется параметром  $M$  модели (3), который, как уже отмечалось, определяет порядок сравнения объектов (непосредственное сопоставление или же сопоставление через посредство некоторых дополнительно вводимых эталонных точек – "идеальных объектов", "идеальных состояний", "центров тяжести", "ядер" и т.д.), полноту учета структурных связей (одни отношения сходства принимаются во внимание, а другие – нет) и вид учета отношений сходства (количественный, порядковый, качественный). Таким образом, каждому алгоритму выявления структуры сходства в зависимости от его конструкции может быть поставлена в соответствие матрица сравнения, отображающая его целевое предназначение, т.е. его направленность на обнаружение тех или иных структурных особенностей анализируемого материала. Это дает возможность сформулировать

формальный принцип выбора алгоритма распознавания: для решения задачи может быть привлечен лишь тот алгоритм, "визитная карточка" которого (матрица, отображающая его предназначение) совпадает с "визитной карточкой" решаемой задачи (матрицей, отображающей цель ее решения).

Задача выявления структуры сходства имеет широкое применение в геологических исследованиях. Наиболее распространен ее частный случай – задача таксономии /2/. Цель ее состоит в выявлении присутствия в анализируемом материале хорошо различных групп объектов, с которыми связывают понятия таксона, кластера, класса. Многообразие алгоритмических способов решения таксономических задач обусловлено различной трактовкой понятия "хорошо различимая группа объектов" и реализацией схемы поиска таких групп.

Другая широко распространенная разновидность задачи выявления структуры сходства – задача прогнозирования значений некоторого свойства. Суть ее – определить положение некоторого объекта в структуре сходства анализируемого материала с тем, чтобы на этом основании сделать вывод о степени проявленности на нем того или иного важного в практическом отношении свойства (например, запасов определенного рудного компонента). Однако такие прогнозные выводы можно делать лишь при условии наблюдающейся (или, по крайней мере, предполагаемой) корреляции взаимоотношений сходства объектов анализа с их различиями по прогнозируемому свойству.

Поиск способа выявления структуры сходства. Решение данной задачи сводится к конструированию такого способа "видения" отношений сходства объектов, чтобы в результате структура сходства анализируемого материала приобрела заранее определенный условием задачи вид.

Если в предыдущей задаче алгоритм  $V$  задается априорно, то в данном случае он возникает как конечный продукт решения. Следовательно, алгоритм ( $W$ ) решения рассматриваемой задачи должен представлять собой некоторый механизм порождения ( $K_V$ ) алгоритмов  $V$ , складывающийся, в свою очередь, из механизмов порождения его элементов ( $K_D, K_N, K_M$ ) и критерия оптимальности получаемых результатов ( $Q$ ):

$$W = K_V = (K_D, K_N, K_M, Q). \quad (4)$$

Теоретически эту процедуру можно реализовывать либо на основе случайного поиска наилучшего сочетания элементов  $D$ ,  $N$  и  $M$ , либо путем целенаправленного их конструирования.

В первом случае решение задачи производится по следующей схеме: случайным образом (иди исходя из некоторых содержательных соображений) задается некоторый алгоритм  $V$  и с его помощью выявляется структура сходства анализируемого материала, а результат сравнивается со структурой сходства, которая должна быть по условию задачи; затем, таким же образом, задается другой алгоритм и вновь с его помощью решается задача выявления структуры и т.д. Из всех опробованных алгоритмов выбирается тот, который дает наиболее близкий к требуемому результат. Очевидно, что схема случайного поиска при решении задачи выявления способа построения требуемой структуры сходства, сводимая, по сути дела, к многократному независимому решению задачи выявления структуры, рассчитана на то, что вдруг при переборе алгоритмов посчастливится натолкнуться на наиболее оптимальный из них. Естественно, этот путь крайне трудоемкий и поэтому практически не используется.

Схема целенаправленного конструирования алгоритма  $V$  характеризуется тем, что его элементы задаются не случайным (или интуитивным) образом, а по некоторому правилу, ориентирующему эту процедуру на выбор таких из них, которые обеспечивают наилучшее приближение конечного результата к требуемому. При этом метод конструирования способа построения структуры сходства может быть одноактивным или итерационным. Итерационный подход, в отличие от одноактивного, после получения некоторого алгоритма  $V$  предусматривает механизм его дальнейшей коррекции в сторону улучшения получаемых результатов.

В общем виде схема решения задачи поиска способа выявления структуры сходства, независимо от пути ее реализации, такова: некоторым образом конструируется алгоритм  $V$ , а затем, в целях проверки его эффективности, с его помощью решается задача выявления структуры сходства и если полученная при этом структура сходства  $S$  в достаточной степени совпадает с  $S_{\Pi}$  (структурой сходства, которой должен обладать анализируемый материал по условию задачи), то задача считается решенной.

Теоретически конструирование способа выявления структуры сходства может производиться за счет целенаправленного измене-

ния всех составляющих его элементов —  $D$ ,  $N$ ,  $M$ . Однако практически подавляющее число методов построено так, что два элемента априорно фиксируются, а третьим (как правило,  $N$ ) осуществляется автоматическая "регулировка" алгоритма.

Описываемая разновидность задачи распознавания, пожалуй, самая распространенная при геолого-прогнозных построениях. Чаще всего она заключается в том, что на примере определенного набора эталонных объектов с известными значениями некоторого интересующего нас свойства следует выработать такое правило оперирования с их описаниями, чтобы получаемые результаты коррелировали со значениями этого свойства. В случае положительного решения данной задачи, исследователь получает возможность использовать выработанное прогнозное правило по отношению к объектам с неизвестными значениями прогнозируемого свойства.

Нахождение описания материала анализа. Цель данной задачи состоит в подборе такого описания объектов анализа, которое бы при использовании заранее фиксированного способа  $V$  обеспечивало априорно обусловленные условия задачи соотношения их сходства. Алгоритм  $T$  решения данной задачи должен предусматривать некоторый механизм ( $K_R$ ) порождения описаний  $R_{m,n}$  и оценку качества результата ( $Q$ ):

$$T = (K_R, Q). \quad (5)$$

Конструирование описаний объектов может, по-видимому, производиться, как и в предыдущем случае, либо путем случайного подбора значений признаков  $x_1, \dots, x_n$ , либо же вычислением этих значений по некоторому правилу, ориентированному на получение оптимальных результатов. Оценка качества решения и в том и в другом случаях производится путем сравнения получаемых на сконструированном описании соотношений сходства объектов со структурой сходства, которая должна быть по условию задачи.

Следовательно, в общем виде схема решения задачи нахождения описания материала анализа такова: некоторым образом конструируется описание  $R_{m,n}$ , а затем, в целях проверки его оптимальности, на его основе решается задача выявления структуры сходства, и если полученная при этом структура сходства  $S$  в достаточной степени совпадает со структурой сходства  $S_{II}$ , предусмотренной условием, то задача считается решенной.

Рассматриваемый тип задачи наиболее редко встречается в геологической практике и носит, как правило, вспомогательный характер. Примером может служить работа /3/, в которой коротко рассмотрен алгоритм конструирования описаний так называемых "идеальных" объектов, т.е. объектов, обладающих максимальным и минимальным значениями прогнозируемого свойства. В целом же решение задачи данного типа могло бы оказаться весьма полезным применительно, например, к области синтеза минералов для выявления условий, приводящих к образованию кристаллов с заранее обусловленными свойствами.

Практический опыт показывает, что довольно часто конкретная содержательная задача не сводится только к одному из охарактеризованных формальных типов, и ее решение требует последовательного решения задачи в различных формальных постановках. Так, например, задача геологического прогнозирования сводится к последовательному решению двух задач: задачи поиска способа выявления структуры сходства  $Z^V$ , продуктом которой является выработка на основе объектов с известными значениями прогнозируемого свойства формального правила обращения с их описаниями, позволяющего предсказывать (утраивать) это свойство; и задачи выявления структуры сходства  $Z^S$ , представляющей собой применение выработанного правила к объектам с неизвестными значениями прогнозируемого свойства с целью предсказать их. Именно поэтому часто говорят о двух этапах прогнозирования по схеме распознавания – обучения и собственно распознавания. Аналогичную формальную структуру имеет задача оптимизации геолого-разведочных работ и др. Вместе с тем, существует ряд содержательных задач с довольно простой формальной схемой решения, сводимой лишь к одному из охарактеризованных выше формальных типов. К ним можно отнести задачи поиска закономерностей ( $Z^V$ ), проверки априорно заданной классификации ( $Z^V$ ), таксономии ( $Z^S$ ), выявления поискового набора признаков ( $Z^V$ ) и т.д.

Определение формального типа задачи распознавания, или расчленение ее на формальные типы с последующим выявлением последовательности их решения, и составляет, по нашему мнению, суть перевода содержательной постановки задачи в формализованную, о которой довольно часто упоминается в литературе. От того, насколько

ко профессионально будет осуществлен этот перевод, который предопределяет не только последовательность этапов решения, но и выбор алгоритмических средств решения, во многом зависит и качество конечных результатов.

В заключение сформулируем основные выводы, вытекающие из приведенных рассуждений.

1. Рассмотрение проблемы распознавания может быть осуществлено на базе понятия "структура сходства", представляющего собой совокупность особенностей соотношения сходства между анализируемыми объектами. Данная экспликация распознавания обладает следующими положительными моментами:

- не искажает сути проблемы, поскольку естественным образом вытекает из принципа аналогии, лежащего в основе распознавания;
- позволяет рассматривать все постановки задач и методы их решения с единых позиций, независимо от их содержательной направленности;
- благодаря формализуемости базового понятия "структура сходства", позволяет сформулировать модели основных типов задач распознавания и методов их решения, осуществлять их анализ, сопоставление и классифицирование.

2. Все разнообразие задач распознавания в рамках предлагаемой модели сводится к трем формальным типам: выявление структуры сходства, поиск способа выявления структуры сходства, нахождение описания материала анализа. Суть первой задачи - установить, присутствуют ли в анализируемом материале оговоренные условием задачи особенности соотношений сходства между исследуемыми объектами; второй задачи - отыскать (сконструировать) такой способ выявления структуры сходства, при котором бы между объектами наблюдались соотношения сходства, заранее определенные условием задачи; третьей - найти (сконструировать) такое описание объектов, которое бы обеспечивало требуемые по условию задачи соотношения сходства между ними.

3. Главный процедурный элемент задач распознавания - выявление структуры сходства, который представляет либо конечную цель решения задачи, либо служит критерием оценки качества конечных результатов. В последнем случае решение задачи сводится к многократному повторению процедуры выявления структуры сходства анализируемого материала при целенаправленно изменяющихся начальных условиях.



4. Содержательные задачи, решаемые по схеме распознавания, достаточно разнообразны по своей формальной структуре и сводятся либо к одному из выделенных формальных типов, либо к решению нескольких задач различных формальных типов в определенной последовательности. Выяснение формальной схемы решения составляет суть одного из важнейших этапов процесса распознавания – перевода содержательной постановки задачи в формализованную.

5. Привлечение понятия "структура сходства" для рассмотрения проблемы распознавания обладает еще одним положительным свойством. Оно позволяет, с одной стороны, формализовать целевое требование задач распознавания, а с другой – формально отображать предназначение (возможности) алгоритмов распознавания. Это дает возможность более строго решать вопрос о соответствии привлекаемого для обработки метода решаемой задаче, что весьма важно для получения качественных результатов, доступных содержательной интерпретации.

#### Литература

1. Бабич В.В. Типизация задач распознавания // Распознавание образов в задачах качественного прогноза рудных месторождений. Новосибирск, 1980. С. 28–34.

2. Бабич В.В. Таксономия как задача выявления структуры сходства // Таксономия в классификационных и прогнозных геологических задачах. Новосибирск, 1989. С. 3–14.

3. Бабич В.В., Федосеев Г.С. Метод целевого классифицирования и упорядочения объектов ("Каскад-1") // Логико-математическая обработка геологической информации (теория и математический аппарат). Новосибирск, 1976. С. 42–70.

4. Бекжанов Г.Р., Бугаец А.Н., Лось В.Л. Геологические модели при прогнозировании ресурсов полезных ископаемых. М.: Недра, 1987. 140 с.

5. Винер Н. Кибернетика или управление и связь в животном и машине. 2-е изд. М.: Сов. радио, 1968. 326 с.

6. Загоруйко Н.Т. Искусственный интеллект и эмпирическое предсказание: Спецкурс для студентов НГУ. Новосибирск: Изд. НГУ, 1975. 82 с.

7. Налетов И.З. Причинность и теория познания. М.: Мысль, 1975. 204 с.

8. Розова С.С. Классификационная проблема в современной науке. Новосибирск: Наука, 1986. 223 с.

## СОДЕРЖАНИЕ

ДМИТРИЕВ А.Н. Концепция интеграции данных на основе геотеста в связи с проблемой геомониторинга . . . . .	3
КРАСАВЧИКОВ В.О. Кластер-анализ при заданных необходимых условиях . . . . .	17
БУКРЕЕВА Г.Ф. Алгоритм выявления скрытой периодичности временных рядов методом максимальной энтропии . . . . .	35
ДМИТРИЕВ А.Н., МАКАРОВ С.В. К проблеме оценивания неопределенности геолого-геофизических данных . . . . .	55
МАКАРОВ С.В. Факторное разложение неполных таблиц и восстановление пропусков . . . . .	62
КАРБЫШЕВ В.Д., ВАКУЛЕНКО А.С. Анализ соотношений весовых процентных и объемных содержаний породообразующих окислов на примере габброидов норильских интрузий . . . . .	70
БЕЛОУСОВ А.Ф., КРАСАВЧИКОВ В.О., ПОЛЯКОВА З.Г. Ис-толкование состава гранитоидов с помощью модели эвтектических пропорций главных окислов . . . . .	83
БАБИЧ В.В. Модель задачи распознавания на основе представлений о структуре сходства анализируемого материала . . . . .	117

Темат. план вып. самост. изд. СО АН СССР  
на 1990 г., № 84

М О Д Е Л И Р О В А Н И Е  
ПРИ ЛОГИКО-МАТЕМАТИЧЕСКОЙ ОБРАБОТКЕ  
ГЕОЛОГИЧЕСКИХ ДАННЫХ

Сборник научных трудов

Ответственный редактор  
Владимир Алиевич Соловьев

Утверждено к печати  
Институтом геологии и геофизики СО АН СССР

Редактор Р.Н. Ильина

Технический редактор Н.Н.Александрова

---

Подписано к печати 09.07.90. МН 0239Г.  
Бумага 60x84/16. Печ.л.8,25. Уч.-изд.л.7,35.  
Тираж 400. Заказ 230. Цена 55 коп.

---

Институт геологии и геофизики СО АН СССР  
Новосибирск, 90. Ротапринт.