

ОБЩАЯ, ИСТОРИЧЕСКАЯ И РЕГИОНАЛЬНАЯ ГЕОЛОГИЯ

ISSN 551.201

С.Г.Паняк

ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ОБОСНОВАНИЕ ДЕТЕРМИНИРОВАННЫХ ПРОЦЕССОВ В ГЕОЛОГИИ

По мере накопления массива аналитических данных, их четкой привязки к конкретным петрографическим разновидностям, в середине 70-х годов удалось сделать качественный скачок: расшифровать генетическую сущность законов распределения химических компонентов в горных породах [1,2,5,6,7]. Возможность и необходимость расшифровки, вопреки бытовавшему мнению К.Пирсона о кривых распределения как «игре природы», предсказывали Д.А.Родионов [9,10] и А.В.Канцель [8]. Ниже приводится теоретическое обоснование этого открытия.

Столкнувшись с природными макросистемами, свойства которых оказалось невозможно описать с позиций механики Ньютона, физика успешно применила теорию вероятности и стала описывать понятие вероятностного состояния системы. Возникшая необходимость привела к рождению в середине 19 века новых разделов теоретической физики - статистической физики и термодинамики. Более ста лет назад английский ученый Дж. Максвелл вывел функцию распределения молекул по скоростям, а австрийский физик Л.Больцман - кинематическое уравнение функции распределения для произвольного газа. Завершенный вид статистическая физика приобрела после работ Дж. Гиббса, методики расчета которого легли в основу квантовой статистики. К сожалению, в соответствующих разделах никогда не рассматривался генетический смысл получаемых графических изображений этих расчетов.

Рассмотрим, какой физический смысл вкладывали основатели статистической физики в графические кривые распределения параметров природных систем. Одно из наиболее известных уравнений кинетической теории - уравнение Максвелла:

$$\Delta n = (4/\sqrt{\pi}) \cdot n \cdot e^{-u^2} \cdot u \cdot \Delta u$$

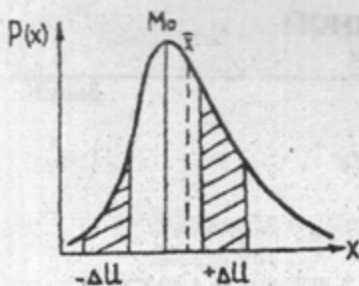
где n - полное число молекул системы, а $u = v_x/v_x$ характеризует отношение заданной скорости v_x к наиболее вероятной v_x . При этом наиболее вероятная скорость:

$$v_x \approx 1,41\sqrt{RT/\mu}$$

а средняя арифметическая:

$$v_x = 1,60\sqrt{RT/\mu}$$

Отношение $v_x/v_x > 1$, что свидетельствует о наличии асимметрии любых распределений Максвелла. Средняя арифметическая скорость всегда больше вероятной, а количество микросистем, превышающих модальные значения в заданном интервале Δu , всегда больше аналогичного количества микросистем, расположенных в аналогичном интервале Δu в области значений ниже модального (см. рисунок). Модальное значение функции распределения характеризует наиболь-



Соотношение количества микросистем (заштриховано) в интервале $\Delta\epsilon$, расположенном симметрично по отношению к модальному значению в распределении Максвелла

шую вероятность состояния системы.

Очень важной является природа асимметрии или причина отклонения кривой распределения от нормальной (симметричной) модели, соответствие которой вытекает из так называемой центральной предельной теоремы (ЦПТ) теории вероятности. Из расчетов Дж. Максвелла следует, что асимметрия распределения связана с сокращением степеней свободы и обусловлена однонаправленным течением процессов в закрытых системах.

Функции равновесия могут описываться с помощью законов термодинамики (на основе тепловых данных), а также с помощью кинетической теории (на основании сведений о свойствах частиц, массах, частоте колебаний и др.). Понятие равновесия применимо не только к выравниванию тепла, но и к фазовым превращениям, химическим реакциям и любым явлениям природы, подчиняющимся первому и второму началам термодинамики. Однако в любых случаях, даже в условиях достижения равновесий скоростей прямых

и обратных процессов, обнаруживаются определенные флуктуации. Равновесие устанавливается лишь в среднем, для больших объемов и больших промежутков времени. Для отдельных макросистем в силу большого числа влияющих факторов такие флуктуации могут достигать значительных величин.

Если в основе расчетов статистической физики лежит математическая теория вероятности, то в основу описания флуктуаций положен ее раздел - центральная предельная теорема (ЦПТ), описывающая реальные природные процессы, а не абстрактные теоретические модели. В соответствии с ЦПТ, при выполнении определенных условий, функция распределения суммы независимых индивидуально малых величин в процессе роста их количества должна приближаться к нормальной модели. Эта теорема нашла свое широкое применение в технике, где мы имеем дело обычно со стохастическими процессами.

На протяжении многих десятилетий геологи отмечали появление определенных и закономерно повторяющихся сочетаний кривых распределений различных параметров, которые в подавляющем большинстве отличаются от нормальной модели. Феномен логнормальных распределений, так часто фиксируемый геологами, оказался нерасшифрованным до настоящего времени. Сегодня отчетливое преобладание асимметричных эмпирических кривых распределения (ЭКР) рассматривается как свидетельство отклонения процессов за рамки, очерченные ЦПТ, когда направленность процесса продиктована одним из факторов, резко доминирующим над остальными. Ниже на примере, главным образом, петрогенных процессов показаны результаты использования ЦПТ для расчета распределений химических компонентов в кристаллических (магматических и метаморфических) породах.

Нетрудно, очевидно, согласиться с тем, что, моделируя процесс выноса компонента за пределы относительно открытой метаморфической системы, величина порции выносимого в i -й момент компонента (Δx_i) будет определяться преимущественно остающимся в породе содержанием в момент $i-1$, т.е. $\Delta x_i \sim x_{i-1}$. В начале процесса выноса интенсивность его будет максимальна, а по мере снижения концентрации - постепенно падать. Легко представить себе аналогичную зависимость для относительно закрытых магматических систем: порция компонента Δx_i на границе фазового раздела (магма - кристаллическая фаза) будет жестко регламентироваться остающейся концентрацией компонента в расплаве.

Термодинамические параметры петрогенетической системы, определяя устойчивость парagenетических ассоциаций, способны смещать установившееся равновесие в ту или иную сторону, определять величину импульса кристаллизации - mv , однако на поведение конкретного параметра системы детерминирующее воздействие оказывает его величина в момент $i-1$. Аналогичная зависимость может быть записана и для других параметров систем - трещиноватости, размеров зерен при дроблении, размеров кристаллов при их росте, плотности и т.п.

Возвращаясь к распределениям содержаний компонентов при петрогенных процессах, можно полагать, что величина привносимой (и выносимой) порции компонента Δx_i для метаморфического процесса в i -момент будет функционально зависеть от его содержания в момент $i-1$, т.е. $\Delta x_i = mvF(x_{i-1})$, или $\Delta x_i = eF(x_{i-1})$, где $F(x)$ - детерминант процесса, а $e = mv$ -

независимая случайная величина, импульс кристаллизации. Постоянство импульса - фундаментальное свойство пространства, один из основных законов физики, не теряющий своего значения даже на квантовом уровне. В таком случае величина $e = mv$ в соответствии с ЦПТ всегда должна обладать нормальной моделью распределения.

Величина $F(x)$ - детерминант процесса, отражающий зависимость кинетики фазовых переходов от меняющейся концентрации, а его физический смысл вытекает из преобразований уравнений Фика, описывающих процессы диффузии:

$$dx = -1/3(v\lambda) \cdot (dp/dL) \cdot dS \cdot dt ,$$

где λ - средняя длина пробега частицы, dp/dL - градиент плотности (концентрации), dS - элементарная площадка, t - время, L - длина. Полагая $\rho = mv/L^3$, где m - масса частиц, v - скорость, N - их количество в объеме L^3 , после некоторых упрощений получим:

$$dx = mv(dN/dL) \cdot dt , \quad \text{а } F(x) = (dN/dL)(dt) \quad \text{или } F(x) = \text{grad } N .$$

Фильтрационный способ миграции химических элементов является наиболее вероятным в геологических процессах [3].

Моделируя реальные процессы в природных макросистемах, суммарное действие всех импульсов кристаллизации составит:

$$\sum_{i=1}^n e = \sum_{i=1}^n (\Delta x_i / F(x_{i-1})) , \quad \text{или } E = \int (dx / F(x)) .$$

Так как величина E в соответствии с ЦПТ должна обладать нормальным распределением, правомерно использовать ее в качестве переменной в уравнении нормальной кривой:

$$y = (1/\sqrt{2\pi}) e^{-((E-\mu)^2/2\sigma^2)}$$

Полученное уравнение базируется на законах физики (постоянство импульса mv) и теории вероятности (центральной предельной теореме - ЦПТ). Однако задача состоит в том, чтобы получить кривую зависимости y от заданного параметра x (в рассматриваемом примере - концентрации), который функционально связан с величиной E . При подстановке в уравнение нормальной кривой вместо E его подынтегрального выражения получаем зависимость величины y от x , что и представляет конечный интерес теоретических расчетов. Достоверность сделанных заключений легко проверяема на конкретных примерах.

Нетрудно заметить, что в случае отсутствия детерминирующего фактора, когда $F = \text{const}$, результат интегрирования становится равным x , и тогда уравнение нормальной кривой (при $E = x$) остается без изменений, т.е. получаемая теоретическая кривая распределения (ТКР) соответствует нормальной модели. В остальных случаях, когда $F \neq \text{const}$, величина E приобретает различные значения, которые при соответствующей подстановке в уравнение нормальной кривой деформируют последнюю, придавая ей различную асимметрию.

Величина порции выносимого компонента, как было отмечено выше, определяется его концентрацией в момент $i-1$. Тогда можно записать детерминант $F(x) = X$, а

$$E = \int (dx / F(x)) = \ln x + C^*$$

Так как, согласно ЦПТ, величина $\ln x$ должна обладать нормальным распределением, то распределение интересующей нас концентрации компонента X должно аппроксимироваться логнормальной моделью. Такая кривая характеризует распределение компонентов, испытывавших процесс выноса, рассеивания.

Аналогичные теоретические модели распределения можно обосновать для магматического

* C - постоянная интегрирования, отражает неподвижную (связанную) концентрацию компонента в породе.

процесса. Здесь логнормальными распределениями обладают содержания «избыточных» (литофобных) компонентов, подверженных эвлизации, т.е. рассеиванию вследствие низкой кристаллизационной способности. Такие компоненты накапливаются в остаточной магме или образуют изоморфные примеси, нарушая структуру кристаллической решетки чуждых им минералов.

Остановимся на термодинамическом толковании получаемых эмпирических кривых распределений (ЭКР).

Конкретную петрологическую разновидность горной породы можно рассматривать как макросистему или объемную матрицу, состоящую из микросистем (минералов) и микросостояний (содержаний компонентов в минералах)*. В этом случае получаемые аналитические данные при точечном опробовании представляют собой количественную характеристику микросостояний в ограниченных ассоциациях микросистем. При достижении определенного (статистически достоверного) объема аналитических данных можно полагать, что мы обладаем неким характеристическим параметром системы. Модальные значения системы ЭКР в таких гомогенных выборках (петрографических разновидностях) можно рассматривать как наиболее вероятные состояния макросистем. Они отражают оптимальные для данных термодинамических условий концентрации компонента.

Важную характеристику системы содержит в себе асимметрия распределений. При наличии, например, правосторонней асимметрии (логнормальная модель и др.) можно утверждать, что количество микросистем матрицы, обладающих повышенными концентрациями (больше наиболее вероятного, модального), отчетливо доминируют над микросистемами с более низкой величиной концентрации. Иными словами, можно сделать заключение о том, что одновременно со снижением концентрации термодинамическая и кристаллизационная вероятность состояния микросистем возрастает. При этом модальные значения всегда меньше среднего, что свидетельствует о большей вероятности состояния матрицы в области сравнительно низких значений данного параметра (содержаний).

Подобный анализ можно провести и для ЭКР с левосторонней асимметрией. В этом случае окажется, что вероятность состояния системы возрастает с увеличением содержаний. Для природных систем вообще подобные распределения отмечаются редко. Вспомним так называемый «феномен логнормальных распределений», волновавший ученых в прошлом. Однако картина резко меняется при моделировании процессов кристаллизации пород. Здесь количество распределений типа $1 - \lambda$ (λ - нормальное распределение) для петрогенных компонентов нередко доминирует. Причем один и тот же компонент в продуктах комплементарно проявленных процессов, как правило, обладает зеркально противоположными моделями распределения.

Представляется очевидным, что в случае надежной аппроксимации эмпирического распределения соответствующей теоретической моделью создается уникальная возможность получаемым кривым распределения придавать генетический смысл, т.е. расшифровывать геохимическую и термодинамическую направленность процесса. Возможность такого прогноза направленности процесса составляет по своей сути содержание второго начала термодинамики. Р.Клаузиус для отражения ограниченных возможностей эволюции системы ввел понятие энтропии, а ее физический смысл определен Л.Больцманом, согласно которому «природа в своих процессах стремится от менее вероятных состояний к более вероятным». Л.Больцман увязывает энтропию (S) с термодинамической вероятностью состояния (P) для закрытых систем:

$$S = k \ln P + C,$$

где k - постоянная Больцмана; C - константа интегрирования.

Однако, исходя из изложенных выше расчетов автора, вероятность состояния природных макросистем (метаморфических и магматических разновидностей пород) может быть надежно определена через величину $E = \int (dx/F(x))$. В этом случае можно предложить более универсальное уравнение энтропии:

$$S = kE + C,$$

* Идентификация понятий макросистема - порода, микросистема - минерал, микросостояние - содержание принята с определенной долей условности с целью конкретного восприятия.

в котором уравнение Л. Больцмана выступает как частный случай. Нетрудно заметить, например, что в случае моделирования процесса выноса (рассеивания) компонента, при $F(x)=x$, величина $E=-\ln x$, а значит, уравнение энтропии соответствует формуле Л. Больцмана. Как было сказано выше, функциональная зависимость $F(x)=x$ характерна для описания распределений избыточных компонентов, подвергаемых процессам эвлюзии. Будучи химически пассивными, такие компоненты образуют изоморфные примеси в минералах, нарушая их конституцию, увеличивая энтропию. Отмеченное обстоятельство позволяет сделать важный вывод о том, что действительно обсуждавшийся феномен логнормальных распределений является отражением второго начала термодинамики [7]. Таким образом, различным типам распределений можно придавать определенный термодинамический смысл, а значит, оценивать кристаллизационную способность отдельных химических компонентов.

Полученная возможность оценки кристаллизационной активности компонентов позволяет по-новому взглянуть на известное правило фаз Гиббса:

$$i = k + 2 - \Phi,$$

где i - число степеней свободы, k - число компонентов, Φ - число фаз. До настоящего времени всегда возникала трудность оценки параметра k . По Д.С. Коржинскому, «в общем случае наибольшее число устойчивых, совместно образующихся в природе минералов равно числу компонентов породы за вычетом вполне подвижных компонентов и компонентов-примесей». Однако все существующие классификации не дают четких однозначных критериев понятий "инертный", "подвижный", "вполне подвижный компонент" и т.п. Да и понятие «компонент - примесь», как показали исследования, может менять иногда свой смысл. Полученные результаты математического моделирования показали также, что в зависимости от характера процесса (гранитизация - базификация) вполне подвижные компоненты могут переходить в разряд инертных, и наоборот. Однако активность компонентов, по нашим данным, четко фиксируется по тилу его распределения. В уравнении правила фаз Гиббса таким образом должны учитываться только компоненты, которые обладают распределениями типа $1 - \lambda$, т.е. кривыми с левосторонней асимметрией.

Значительные возможности открываются при внедрении полученных результатов в другие области геологии, прежде всего в металлогению. Представляется возможность оценить потенциальную рудоносность той или иной петрографической разновидности пород, обнаружить в них ореолы концентрации или рассеивания. Решение подобных задач появляется благодаря возможности проследить поведение компонента на ранних и поздних стадиях процесса кристаллизации. Можно утверждать, что для метаморфического процесса наиболее вероятные (модальные) концентрации достигаются на конечных стадиях процесса, когда устанавливается максимальная температура. Для относительно закрытых, остывающих магматических систем, наоборот, оптимальные (наиболее вероятные) соотношения компонентов имеют возможность фиксироваться в ранних порциях твердой фазы, на заключительных этапах кристаллизации они вынуждены, как правило, входить в чуждые им кристаллические решетки на правах изоморфных примесей.

Ранее подобная возможность оценить поведение химического компонента на начальных и конечных стадиях процесса кристаллизации существовала лишь для эффузивных пород с порфировыми структурами, когда можно определить концентрации во вкрапленниках (начальная фаза) и основной массе (конечная фаза). Этим обстоятельством удачно воспользовался в свое время Л.Н. Овчинников [4], впервые предложивший методику расчета коэффициентов распределения. Однако подобная возможность была ограничена сравнительно узким диапазоном эффузивных пород.

Используя теоретические предпосылки Л.Н. Овчинникова, можно резко расширить диапазон применимости указанной методики, так как оценки концентраций химических компонентов на ранних и конечных стадиях процесса можно получать теперь для всех типов кристаллических пород. Для полнокристаллических магматических пород например, величину C_1 - концентрацию компонента в порфировых вкрапленниках (по Л.Н. Овчинникову) можно, как отмечалось выше, сопоставлять с M_0 - модальным значением, а C_2 - концентрацию компонента в стекле с \bar{x} - средним значением, характерным для более поздних продуктов кристаллизации.

Несколько иначе выглядит сопоставление для метаморфических пород. Здесь M_0 - модальное значение концентрации достигается, как уже отмечалось, в конце процесса

т. е. $M_0 \approx C_2$, а $x \approx C_1$. Таким образом, для метаморфических пород коэффициент распределения примет вид:

$$k = \bar{x}/M_0$$

а коэффициент отделения, который может служить оценкой количества выносимого вещества, его рассеяния:

$$K_{от} = (\bar{x} - M_0)/\bar{x}$$

Легко заметить, что для ЭКР с левосторонней асимметрией, свидетельствующей о привносе вещества, коэффициент распределения $K < 1$, и ему можно придавать значение коэффициента концентрации K_x , а коэффициент отделения $K_{от} < 0$, что является оценкой определенного вакуума для компонента в системе. В случае правосторонней асимметрии $K > 1$, и ему можно придавать значение коэффициента рассеяния, $K_{от} > 1$ и отражает реальную картину выноса, отделения.

Для магматических пород в случае распределения с правосторонней асимметрией:

$$K_{от} = (x - M_0)/x$$

всегда имеет положительное значение, что чаще всего характерно для редких элементов, образующих ореолы рассеяния.

Для кривых распределения с левосторонней асимметрией (включая модели типа 1 - λ), интерпретируемых как признак легкого («охотного») вхождения компонента в кристаллическую фазу и его нехватки на завершающей стадии процесса, получаем:

$$K = \bar{x}/M_0 < 1, \quad \text{а} \quad K_{от} = (\bar{x} - M_0)/\bar{x} < 0,$$

т. е. приобретает отрицательные значения. Подобные компоненты не могут выноситься за пределы системы, а их распределения представляют собой ореолы концентрации в пределах магматических систем. В таких случаях поиск месторождений подобных элементов должен быть сосредоточен в пределах магматических систем, а не в их обрамлении.

В заключение следует отметить, что теоретическое обоснование, проведенное на примерах петрохимических систем, как оказалось, вполне применимо для других областей геологии, а также естественных наук вообще (включая биологию, медицину и т. п.).

Работа выполнена на ассигнования гранта Г-60 по фундаментальным исследованиям в геологии при Министерстве общего и профессионального образования РФ.

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

1. Кейльман Г.А., Паняк С.Г. Математические модели метасоматических процессов и их геологическая интерпретация // ДАН СССР. - 1976. - Т. 227, N1. - С. 188 - 191.
2. Кейльман Г.А., Паняк С.Г. Опыт математического моделирования метасоматических процессов // Метасоматизм и рудообразование: Тез. докл. IV Всес. конф. - Л., 1976. - С. 47 - 48.
3. Коржинский Д.С. Трансмагматические потоки растворов подкорового происхождения и их роль в магматизме и метаморфизме // Кора и верхняя мантия Земли. - М., 1968. - С. 69 - 74.
4. Овчинников А.Н. Источники рудного вещества эндогенных месторождений и надежность критериев их установления // Источники рудного вещества эндогенных месторождений. - М.: Наука, 1976. - С. 44 - 52.
5. Паняк С.Г. Некоторые статистические критерии метасоматических процессов // Региональный метаморфизм, метасоматоз и металлогения Урала. - Свердловск: Изд. УГИ, 1975. - С. 11 - 12.
6. Паняк С.Г. Распределение химических элементов в изверженных породах и их математические модели // ДАН СССР. - М., 1980. - Т. 253, N5. - С. 1200 - 1203.
7. Паняк С.Г. Логнормальные распределения параметров природных систем как отражение второго начала термодинамики // ДАН СССР. - М., 1988. - Т. 300, N4. - С. 957 - 960.
8. Канцель А.З. Функция распределения металла в рудах как генетическая характеристика процесса рудообразования // Изв. АН СССР. Сер. геол. - М., 1966. - N10.
9. Родионов Д.А. Функции распределения элементов и минералов в изверженных горных породах. - М.: 1964. - 102 с.
10. Родионов Д.А. Статистические решения в геологии. - М.: Недра, 1981. - 231 с.