

В. Н. Деч, Вл. Н. Зинченко, В. А. Глебовицкий

ПРИНЦИП БОЛЬЦМАНА ПРИ ИССЛЕДОВАНИИ РАССЛОЕННЫХ БАЗИТ-УЛЬТРАБАЗИТОВЫХ ИНТРУЗИЙ

Введение. Строение ритмично расслоенных, контрастных по минеральному составу базит-ультрабазитовых интрузий различного возраста и разных регионов во многом подобно. Однако известные представления о происхождении их структурных особенностей, основанные на данных эмпирических обобщений, допускают многообразие и сложность механизмов их возникновения. Полагают, что строго определенному типу ритмичности отвечают богатые по запасам месторождения элементов платиновой группы (ЭПГ), Cr, Ni, Cu, в то время как другому – соответствует лишь незначительная их концентрация. Основным объектом настоящего исследования является уникальный по своим масштабам плутон Бушвелд, в котором сосредоточены крупнейшие в мире запасы хромитов и ЭПГ. Расслоенность этой интрузии считается «классической». Поэтому присущие ей закономерности и особенности функционирования природного механизма, их породившие, есть эффективный путь к объяснению возникновения упорядоченности в изменчивости минерального состава слоев, формирующих разрез базит-ультрабазитовых интрузий с появлением в них рудоносных зон и горизонтов.

Формирование ритмичной расслоенности рассматривается с позиций термодинамики *изолированных* и *открытых* систем [1–3]. В открытой системе, как известно, возможны процессы с уменьшением энтропии (неопределенности) системы. Применительно к магматическому расплаву особое значение приобретает область контакта жидкой и твердой (Ж–Т) фаз вещества, представляющая собой неизолированную систему. Взаимодействие исходной высокотемпературной магмы с веществом более низкой температуры определяет соответствующий градиент, вызывающий перепады концентраций минеральных компонентов контактирующих систем. В области контакта фаз особая роль принадлежит непрекращающимся случайным отклонениям термодинамической системы от ее состояния равновесия (квазиравновесия), т. е. спонтанным флуктуациям молекул агрегата, которые под влиянием потоков энергии и вещества, определяя неустойчивое его состояние, возрастают до крупномасштабных макроуровней. При диссипации энергии и молекул ликвидуса в области контактирующих фаз и флуктуационном режиме их взаимодействия возникает самоорганизация – целенаправленный процесс, ответственный за происхождение упорядоченных структур. По своей природе этот процесс является нелинейным, означающим, что при его эволюции совершенно ничтожные причины, ускользающие по своей малости, приводят к значительным, иногда экстремальным по интенсивности следствиям. Приграничная область неустойчивого вещества, утрачивая симметрию, свойственную гомогенному исходному расплаву, расслаивается (структурируется). Вариация минерального состава и свойств частей по вертикальному разрезу магматической камеры, приобретая повторяющиеся, упорядоченные черты, наследуется в композиции слоев (пород), составляющих разрез базит-ультрабазитового плутона, определяемой геологами как контрастно расслоенной, ритмичной, цикличной.

Результаты исследования и экспериментального моделирования процессов кристаллизации оксидно-силико-фосфатных расплавов [4, 5] показывают, что упорядоченность, отвечающая стехиометрическому соотношению, при котором химические элементы взаимодей-

ствуют друг с другом, возникает вблизи критического переохлаждения кристаллизации в еще жидком расплаве. Это означает, что молекулярные агрегаты, соответствующие по составу и структуре будущим породообразующим минералам, самоорганизуются в жидком состоянии (расплаве). Тогда переход стехиометрически структурированного расплава в твердое состояние логично представить как результат уменьшения амплитуды «броуновских» колебаний отдельных молекул, уже организованных и ориентированных в расплаве по «матрице» будущей кристаллической решетки минерала. Представленный механизм эволюции сложного расплава раскрывается с позиций квантовой теории «молекулярных орбиталей», согласно которой свободная энергия внешних электронных орбиталей двух соединенных молекул (атомов) меньше, чем для двух разведенных [4, 5]. Это объясняет временную стабилизацию температуры процесса около критической точки кристаллизации, которая поддерживается за счет высвобождающейся свободной энергии молекул (собственно энергии кристаллизации). Стехиометрическая структура молекулярных агрегатов возникает в расплаве как результат направленности ковалентных химических связей, реализующихся через пересечение («обобщение») ориентированных электронных «облаков» внешних атомных орбиталей [6].

В данной системе взглядов, учитывая теоретические разработки [7] и экспериментальные исследования [4, 5], существенным представляется тот факт, что уже в высокотемпературном магматическом расплаве в определенный момент формируется плотностная «прото-неоднородность», наследуемая как отдельными кристаллизующимися минералами, так и магматической породой в целом. Поэтому интенсивным параметром описания эволюции магматических систем выбрана минералогическая плотность основных-ультраосновных пород, находящаяся в прямой зависимости от соотношения в них плагиоклазов, пироксена, оливина и рудных минералов. При характеристике пород (слоев) разного минерального состава, слагающих разрезы интрузий Бушвельдского плутона [8–10], вариация плотности пород (ρ) представлена в виде сигнала (профилограммы), а точнее, эмпирического ряда $\rho(h)$, где h – глубина. Его интерпретация на основе методов статистической термодинамики [1, 11, 12] позволяет установить, что особенности вариации ряда $\rho(h)$ и присущая ему структура есть следствия функционирования динамической системы¹, отвечающей процессу самоорганизации.

Методы термодинамики и статистической физики применяются с целью выявления детальных особенностей эволюции как магматической системы в целом, так и ее частей при их переходе из одного состояния в другое. Внимание уделено энтропийной мере, оцениваемой по эмпирическим рядам плотности пород и минерального их состава, являющихся откликом процесса формирования вещества в магматической камере. Эта мера чрезвычайно важна, так как позволяет, с единой точки зрения, адекватно охарактеризовать степень хаоса (упорядоченности) состояния системы и ее частей. Для открытых неравновесных систем H -теорема Больцмана, утверждающая монотонное возрастание энтропии изолированных систем, при их релаксации неприменима. Она конструктивно переформулирована Ю. Л. Климонтовичем [1], доказавшем « S -теорему», согласно которой энтропия, отнесенная к заданному значению средней энергии и отвечающая состоянию открытой системы, по мере ее удаления от равновесного состояния уменьшается. Поэтому при статистическом описании эмпирических наблюдений, характеризующих открытые термодинамические системы, мы, помимо приемов анализа, базирующихся на известных принципах статистической физики, обратимся к использованию критерия меры хаоса (неопределенности), основанного на

¹ Динамическая система – математическое представление реальной системы любой природы, состояние которой изменяется во времени в соответствии с закономерностью, являющейся следствием действия детерминированного или стохастического оператора эволюции.

либо, напротив, обогащенные высокотемпературными темнокветными минералами, в том числе и рудообразующими, по плотности (точнее, по «протоплотности»), как правило, значительно превосходящими петрогенное вещество. Таким образом, ДС целесообразно рассматривать как новую, концептуально более богатую термодинамическую трактовку приграничного магматического расплава, эволюционирующего в открытой системе и находящегося в метастабильном равновесии.

Образовавшийся конечный продукт, покидая жидкую часть вещества (систему B), переходит в твердое состояние – образуется *макроскопическая система С*. В силу фазового перехода граница между системами C и B , так же как и граница между системами B и A (в предположении, что процесс кристаллизации направлен снизу вверх камеры), смещается вверх. В пограничную систему B как бы «вливаются» свежая порция материнского гомогенного вещества системы A . Стремясь к новому равновесию (к меньшей свободной энергии молекул), минеральные компоненты системы B , претерпевая физико-химическое взаимодействие с веществом системы A , трансформируются. Результаты этого процесса проявляются в изменении минерального состава слоев и их свойств. Это допускает, что структурированный и дифференцированный таким образом расплав, приобретает твердое состояние (образуя систему C), наследует генетические черты системы B , отвечающей ДС.

Итак, до перехода гомогенного вещества расплава в твердую фазу у границы ликвидуса формируется неустойчивая его область, подверженная процессу самоорганизации. Нелинейный по своей природе, этот процесс ответствен за появление крупномасштабных флуктуаций минеральных концентраций в веществе, определяющих ярко выраженное анизотропное состояние системы B , отвечающей ДС. Разумеется, что контрастно-слоистая ДС может испытывать дополнительную трансформацию под действием гравитационных и архимедовых сил, способствующих расслоению. Однако важен более принципиальный момент. В открытой системе эволюция вещества, возникающая в результате действия процесса самоорганизации, направлена к более сложной и вместе с тем к более совершенной ДС. По степени упорядоченности ДС существенно отличается от максимальной хаотичности (по Гиббсу), свойственной системе равновесного состояния, и, как правило, характеризуясь стационарной неоднородностью, при минимуме произведения энтропии [7] спонтанно, в силу снижения температуры, переходит в твердое состояние, определяя систему C .

2. Минералогическая плотность пород как термодинамический параметр. Принимая во внимание сказанное выше, отметим, что минералогическая плотность жидкого и твердого вещества (термодинамической системы) может рассматриваться как информативная характеристика его макросостояния. Плотность вещества, имея ясную геологическую трактовку, может быть измерена массово и оперативно. В ряде формул, приводимых далее, она фигурирует как *линейная плотность* вещества, $\rho = \lim_{\Delta h \rightarrow 0} (\Delta m / \Delta h) = dm/dh$, где Δm – масса порции вещества в 1 см^3 , отнесенная к единичному интервалу Δh оси скважины. Рассматривая значение минералогической плотности² пород ρ (далее – плотность), мы в «среднем» характеризуем состояние огромного числа минеральных частиц в единице объема рассматриваемой системы. Тесно связанная с минеральным составом породы [8–10], она отражает изменение ее структурных особенностей. Так, известно [18], что углерод и алмаз как аллотропы, имея один и тот же химический состав, значительно отличаются по величине своих плотностей (2,267 и 3,520 г/см³ соответственно). Между плотностью аллотропов и соответствующей им энтропией (энтропия относительно стандартного аллотропа) существует тесная обратная зависимость [18]. Опуская детали, связанные с тем, что аллотропы устойчивы в разных условиях давления и температуры, подчеркнем, что разные части магматического вещества, вследствие часто реализующегося неполного равновесия, обладают разной плотностью (протоплотностью). Происхождение неполного равновесия, как утверждается в работе [19], связано с разницей в скоростях физико-химических процессов, протекающих в системе (точнее, в смеси нескольких веществ, между которыми идет химическая реакция), а не с несовпадением длительности времен при релаксации системы и ее малых частей. Подчеркнем также, что в случае фазового перехода (фазовый переход I рода) части магматического вещества системы B с плотностью ρ_B (протоплотностью) в твердое состояние образующаяся при этом плотность ρ_C пород (системы C) если и увеличивается,

² Этот термин приобретет более четкое содержание, если зерна минералов тождественны по составу и размерам. Если порода состоит из разных по плотности минеральных зерен, то необходима характеристика плотности отдельных минералов.

то, как правило, пропорционально своей протоплотности [8]. Следовательно, логично допустить, что особенности вариации плотности жидкого вещества, возникающие по вертикали камеры (система B), наследуются. Им определенным образом отвечают значения плотности пород (слоев) твердого состояния (система C), образующие эмпирический ряд плотности определенной структуры. Эта петрогенетическая информация, характеризующая вертикаль разреза интрузии (система C), в отсутствие следов процесса метаморфизма или иных вторичных преобразований представляет собой как бы отпечаток, или «мгновенную фотографию», предшествующего состояния магматической камеры (система B). Отмеченная унаследованность плотности несвойственна другим интенсивным термодинамическим параметрам, например температуре. Таким образом, значения плотности пород в разрезе и структура их изменения, отвечая эмпирическому ряду плотности $\rho(h)$, как бы «запоминают», наследуют особенности состояния отдельных частей системы, первоначально пребывавших в жидкой фазе, т. е. содержат в себе информацию генетического типа.

3. Математическая формализация представлений о возникновении интрузивов. В разрезе базит-ультрабазитовых интрузий рудоносные или потенциально рудоносные зоны и горизонты (слои), в отличие от безрудных, сложены, как правило, высокотемпературными минералами повышенной плотности. Логично допустить, что их образование сопряжено с нелинейным процессом. В связи с этим целесообразно рассмотреть возможный механизм, способный определить возникновение пород (слоев) высокой плотности, обогащенных цветными, в том числе и рудосодержащими, минералами, плотность которых выше, чем для других петрогенных минералов. Предположим, что в магматической камере на границе Т-Ж фаз формируется область развития ДС. Допустим также, что в некоторой, вообще говоря, случайной точке ее оси h в силу благоприятных условий имеет место лавинообразное, взрывоподобное развитие во времени t популяции темноцветных (или рудных) минералов. Такой нелинейный эффект в сущности и определяет появление насыщенного этими минералами слоя, рассматриваемого как *концентрационный*. Следовательно, при появлении конкретной совокупности минералов контрастность есть признак функционирования механизма, отвечающего исключительно за *нелинейное* развитие процесса. В первом приближении такой процесс, подобный популяционному развитию биологических организмов [15, 20], может быть описан уравнением экспоненциального роста:

$$d\rho/dt = \lambda\rho. \quad (1)$$

Из него видно, что скорость роста отдельной совокупности минералов, обуславливающая увеличение плотности вещества, пропорциональна достигнутому ее значениям. Механизм, отвечающий системам, в которых скорость реакции пропорциональна концентрации реагента или скорость появления зародышей определенных минералов в разрыве пропорциональна их числу, хорошо известен в химии и кристаллографии. Он типичен для случаев реакции автокатализа [21, 22].

Решение уравнения (1) имеет вид

$$\rho_t = \rho_0 \exp\{\lambda(t - t_0)\}, \quad (2)$$

где ρ_0 — плотность порции вещества в начальный момент времени t_0 . Так как $\lambda = (\ln\rho_t - \ln\rho_0)/(t - t_0)$, то смысл параметра λ следует связать с интенсивностью увеличения плотности вещества в локальном участке (отвечающем отдельному слою) и интерпретировать, как относительный прирост плотности вещества в единицу времени.

Очевидно, что в реальности плотность вещества, определяющая в конечном итоге плотность породы, содержащей темноцветные минералы, не может возрастать неограниченно. При возникновении значительного объема темноцветных минералов в локальной области зоны ДС, где этот процесс реализуется, молекулярных ресурсов на дальнейшее их нелинейное увеличение может оказаться недостаточно. Это приведет к замедлению скорости роста плотности, что хорошо описывает логистическое дифференциальное уравнение

$$\rho/dt = \alpha\rho - \beta\rho^2. \quad (3)$$

Здесь параметр α аналогичен параметру λ уравнения (1), а параметр β учитывает особенности конкуренции между молекулами, вступающими во взаимодействие, а также возникающий дефицит ресурсного минерального материала, идущего на «строительство» темноцветных или рудных минералов. Увеличение плотности вещества, как видно из (3), ограничивается введением в уравнение члена $\beta\rho^2$ ($\beta > 0$). Уравнение (3) имеет известное решение

$$\rho(t) = \rho_0(\alpha/\beta) e^{\alpha t} / ((\alpha/\beta) - \rho_0 + \rho_0 e^{\alpha t}), \quad (4)$$

в котором ρ_0 — начальное значение плотности вещества. Решение свидетельствует, что при малой популяции темноцветных минералов плотность возрастает нелинейно (по экспоненте). Однако в этой системе есть отрицательная обратная связь: чем совокупность темноцветных минералов больше, тем медленней ее рост. Повышение плотности вещества асимптотически приближается к стационарному уровню — величине α/β .

Уравнения (1) и (4) описывают нелинейный рост плотности вещества в единичном его интервале Δh (моделирующем в данном случае объем) по мере возрастания времени t в результате стехиометрической агрегации и коге-

рентной концентрации молекулярных частиц в области ДС, по плотности превосходящих материнское вещество расплава. Однако как часть общей модели механизма самоорганизации фазового перехода вещества из жидкого в твердое состояние эти уравнения ничего не говорят о распределении его плотности по пространственной оси h . Очевидно, что молекулярный материал, пошедший на «строительство» темноцветных или рудных минералов в интервале Δh , определит их существенный дефицит в последующем интервале. Это обстоятельство, являясь одной из важных причин формирования контрастной расслоенности в разрезе, вызывает вариацию значений ряда $\rho(h)$, подчиняющихся, как показано в работах [23, 24], *обратимой* цепи Маркова *второго порядка*. В ней последовательность слоев стохастически упорядочена: состояние (минеральный состав, плотность) последующего слоя вероятностно зависит от конкретной комбинации состояний двух предшествующих слоев.

Модели (1) и (4), описывающие важную сторону эволюции нелинейных динамических систем во времени, – простейшие (*базовые*) модели синергетики [15]. Не исключено, что базовые модели более высокой семантики – морфогенеза, брасселатора, орегонатора, нелинейной теплопроводности – и особенно принципы их построения [15] (при соответствующей адаптации) могут адекватно описать процесс нелинейного изменения плотности. В этом случае принципиально то, что они учитывают развитие процесса не только во времени, но и по пространственной координате (по оси h). Каждая из базовых моделей синергетики, точнее, отвечающие моделям системы нелинейных дифференциальных уравнений, содержит основную конструкцию – $\partial x/\partial t \sim x$ или $\partial x/\partial t \sim x^n$, которая ответственна за нелинейное, лавинообразное увеличение x с ростом времени t . Она является ключевой для реализации процесса самоорганизации, т. е. процесса возникновения «порядка из хаоса», так как способна спонтанно возникшую флуктуацию нелинейно усилить. Но нелинейное с течением времени возрастание плотности ρ вещества в локальном интервале Δh всегда будет ограничено. Молекулярные частицы, постоянно динамичные, взаимодействуя, «осваивают» ДС-пространство. Традиционно предпочтение в перераспределении частиц отдается силам Архимеда и гравитации (ликвационная модель, модель гравитационной дифференциации). Но обнаруженные на основе цепей Маркова свойства – *обратимость* эмпирического ряда (противоречащая модели гравитационной дифференциации) и *марковость* второго порядка (обусловленная химическим взаимодействием компонент вещества, определяющим как рост, так и дефицит необходимых компонент для реализации темноцветных минералов) [23, 24] – не позволяют этим моделям отвести главенствующую роль. Принципиальным является то, что частицы, рассредоточиваясь под действием энергии диссипации, диффузии вещества и химического их взаимодействия, «выстраивают» распределение плотности пород по оси h , отвечающее ДС. Так, при учете диффузионного процесса, выравнивающего уровни плотности по оси h , вводится не менее важная конструкция: $D\partial^2 x/\partial h^2$ (где D – коэффициент диффузии). Включая ее в математическую модель наряду с конструкцией $\partial x/\partial t \sim x$ или $\partial x/\partial t \sim x^n$, становится возможным описать пространственно-временную эволюцию процесса, что детально демонстрируется примерами построения базовых моделей [15]. Однако, как подчеркивается в работе [13], базовые модели синергетики пока косвенно, на уровне лишь ассоциаций и метафор позволяют раскрыть принципы возникновения и становления ДС в веществе (расплаве) базит-ультрабазитового состава, заполняющем магматическую камеру (открытую систему). Прямое математическое (синергетическое) моделирование данного процесса наряду с подходами решения «обратной задачи», в которой по следствиям, в частности по эмпирическому ряду, отыскивается причина, т. е. модель процесса (в виде дифференциального уравнения или их системы), порождающего этот ряд [3, 14, 15], сопряжено с огромными трудностями. Реальный геологический процесс формирования ДС магматических расплавов очень сложен, что заставляет искать иные пути и подходы.

Исследование развития ДС, отвечающего процессу самоорганизации и определяющего формирование базит-ультрабазитовых интрузий, не менее содержательно возможно провести при использовании подходов и методов статистической термодинамики изолированных и открытых систем [1–3, 25]. В этом случае большое значение приобретает анализ энтропии – меры хаоса (порядка), отвечающей состоянию открытой системы (критерий «S-теоремы» Климонтовича). Подход, основанный на принципах термодинамики и интерпретации энтропии *изолированных* систем, ранее, при исследовании многокомпонентных руд с целью оценки перспектив рудоносности коренных месторождений, был предпринят Н. И. Сафроновым [18]. Он правомерно полагал, что процессы рудообразования совершаются при исключительно малоизвестных исследовательских условиях: «на входе» некоего «черного ящика», внутри которого действует рудообразующая энергия, находится, как правило, рассеянное гомогенное вещество с кларковым содержанием рудных компонент, а «на выходе» – руда различной кондиции. Термодинамика как наука о всеобщих превращениях и эквивалентности различных видов и форм энергии как раз и оперирует информацией об энергии системы в начальном и конечном ее состояниях. Это и определяет целесообразность оценки энергии, связанной с образованием (кристаллизацией) «пустой» породы, в которой рудные минералы имеют кларковые содержания, и оценки энергии, сопряженной с формированием собственно рудообразующей породы. Очевидно, что такая оценка несостоятельна без использования принципов и подходов статистической физики, расчета функций состояния системы – энтропии, энергии, температуры и др., позволяющих детально исследовать результаты процесса пороодо(рудо)образования, причем в условиях неполной информации о происходящих физико-химических процессах и возникающих причинно-следственных связях. Поэтому задача, относящаяся к формированию контрастной расслоенности базит-гипербазитовых интрузий, может быть переформулирована и сведена к решению задачи по оценке энергии, приходящейся на «пустой» слой и слой, обогащенный темноцветными (в том

числе и рудосодержащими) минералами, проводимой на основе принципов статистической термодинамики. Важные аспекты ее решения раскрываются при использовании эмпирических рядов плотности, характеризующих свойства и минеральный состав слоев (пород), слагающих вертикальные разрезы базит-ультрабазитового плутона.

4. Вариационный принцип Больцмана при анализе эмпирических рядов плотности. При изучении эмпирических рядов плотности, характеризующих разрезы интрузии, обратимся к вариационному принципу Больцмана [11, 12]:

$$-\int P(\rho) \ln P(\rho) d\rho = S = \max \quad (5)$$

при условии, что

$$\int U(\rho) P(\rho) d\rho = \langle U \rangle, \quad (6)$$

$$\int P(\rho) d\rho = 1. \quad (7)$$

Формулировки (5)–(7) означают, что термодинамическая система, охарактеризованная эмпирическим рядом плотности $\rho(h)$ в состоянии равновесия, имеет функцию плотности распределения $P(\rho)$, обращающую в максимум энтропию S – меру хаоса термодинамической системы при фиксированной средней энергии $\langle U \rangle$. Будем считать, что этот принцип применим и к состоянию текущего равновесия (т.е. стационарному).

Для использования формул (5)–(7) прежде всего необходимо определить функцию $P(\rho)$. Имея эмпирический ряд плотности $\rho(h)$ ($h = 1, \dots, M$), характеризующий разрез, легко вычислить разность между максимальным и минимальным его уровнями и разбить на N равных частей (квантов, шагов) $\Delta\rho_1, \dots, \Delta\rho_N$. Каждой части $\Delta\rho_i$, очевидно, будет отвечать число n_i доступных состояний i -го уровня плотности (число благоприятных случаев). Число значащих в ряде плотности $\rho(h) - M$ – это общее число точек (ячеек, слоев, образцов), в которых произведено определение плотности породы. В результате такой процедуры получают эмпирическую гистограмму $P(\rho_i) = n_i/M$ (в непрерывном случае – функция плотности распределения $P(\rho)$), что позволяет определить энтропию, имеющую в дискретном представлении вид

$$S = -\sum_i^N P(\rho_i) \ln P(\rho_i). \quad (8)$$

В работе [12] показано, что значения (уровни) эмпирического ряда, возникающие в результате функционирования нелинейно (в частности, экспоненциально) развивающейся динамической системы, определяют функцию плотности распределения, отвечающую эмпирическому закону Циффа:

$$P(\rho) = A\rho^{-\gamma} = A\rho^{-(1+\alpha)}, \quad (9)$$

где A – константа, зависящая от объема выборки M ; $\gamma = 1 + \alpha$ – показатель Циффа; α – характеристический показатель. Эмпирический закон Циффа, как известно [12], хорошо описывает распределения разнообразных статистических явлений – число месторождений, отвечающих установленным запасам металла (золота, платины) или нефти, число алмазов по их крупности, число семей по денежным доходам (включая олигархов), количество ученых, издавших конкретное число работ, и т. п. Этот закон в математических приложениях известен как распределение Парето ($\rho \geq \rho_0, \alpha > 0$) [12, 26]:

$$P(\rho) = \{(\alpha/\rho_0)(\rho_0/\rho)\}^{\alpha+1}. \quad (10)$$

Распределение Парето имеет «тяжелый хвост», т.е. оно обладает положительной асимметрией, максимально при ρ_0 и асимптотически, крайне медленно приближается к оси абсцисс. Как известно, нелинейности, свойственные динамической системе, даже малые, изменяют именно «хвосты» распределений.

Из (6) следует, что для построений и содержательной интерпретации эмпирического ряда плотности целесообразно знать форму аналитической зависимости энергии U от ρ . Интуиция подсказывает, что при функционировании механизма, формирующего продукт (породу с преобладающим числом темноцветных минералов, рудный слой или рудную зону), большое значение приобретает *время*, затрачиваемое на производство этого продукта. Рудосодержащая горная порода, являясь следствием совпадения многих благоприятных геологических факторов и действия специфических рудообразующих агентов физико-химической природы, представляет собой более организованный, структурированный агрегат. В случае нелинейных процессов уже на ранних этапах эволюции приграничного «слоя» расплава (в системе B , или, что то же самое, в интервале ДС) возможен рост концентрации молекул (атомов) рудного вещества, его сиботаксов (мельчайших минеральных частиц-зародышей), являющихся более плотными и тем самым более энергоемкими. Фактор времени в какой-то степени выступает в роли управляющего параметра механизма, отвечающего за генерацию кондиционного рудного агрегата. Времени на формирование такого агрегата, при прочих равных условиях, требуется несравненно больше, чем на образование «пустой» породы. Поэтому энергию, расходуемую на формирование горной породы, разумно отождествить с расходом времени ($U(\rho) \sim t$). Так как ранее было показано, что плотность вещества в благоприятных ситуациях может развиваться по закону (2), то из этого следует, что $t \sim (1/\lambda)\ln(\rho/\rho_0)$. Таким образом, можно допустить, что аналитическая связь энергии U с ρ , в первом приближении, имеет вид

$$U(\rho) = \xi \ln(\rho/\rho_0), \quad (11)$$

где параметр ξ – константа пропорциональности.

Конкретная форма связи (11) и вариационный принцип Больцмана (5)–(7) позволяют сформулировать экстремальную задачу [12], решение которой приводит к нахождению функции $P(\rho)$, т.е. плотности распределения вели-

чины ρ в области ДС, находящейся в текущем неоднородном, но стационарном состоянии:

$$P(\rho) = \langle \xi / \langle U \rangle \rangle (1 / \rho^{1 + \langle \xi / \langle U \rangle \rangle}) = \alpha / \rho^{1 + \alpha} \quad (12)$$

Если для сходимости нормировки $\int P(\rho) d\rho$ ввести нижний предел интеграла $\rho \geq \rho_0 > 0$ и положить $\rho_0 = 1$, решение поставленной экстремальной задачи приводит к формуле (12), т. е. к уже известному нам распределению Парето-Ципфа (формулы (9) и (10)), где параметр $\alpha = \langle \xi / \langle U \rangle \rangle$ обратно пропорционален средней энергии термодинамической системы. Чем меньше параметр α , тем вероятнее обнаружить «ураганные», гигантские выбросы значений плотности, т. е. появление слоев в разрезе, обязанных нелинейному процессу возникновения темноцветных или рудных минералов.

Таким образом, если в результате построения по данным эмпирических рядов $\rho(h)$ получены распределения Парето, то, обнаружив сравнительное постоянство как формы этих распределений, так и их параметров, можно сделать вывод, что генезис значений плотности эмпирического ряда (в том числе и экстремальных), свойственного ДС, обязан функционированию нелинейного механизма, т. е. нелинейной динамической системы, отвечающей экспоненциальному уравнению (2).

Используя термины термодинамики, соотнесем понятие *ячейки* к слою разреза интрузии. Тогда термодинамическому понятию *статистический ансамбль* можно поставить в соответствие последовательность слоев (ячеек), образующих разрез. В момент возникновения системы B из системы A , при их обмене энергиями, как i -я ячейка («слой»), так и сама система B , которой она принадлежит, являются малыми по объему, в то время как система A представляет собой огромный магматический резервуар (термостат): Суммарная энергия U резервуара, по сравнению с энергией U_i любой i -й ячейки, велика. В ситуации, когда $U_i \ll U$, формулируется важный вопрос: какова вероятность того, что в состоянии равновесия ячейка («слой») системы B обнаружится в некотором конкретном состоянии i , обладающем энергией U_i . Тогда, как известно, статистическому ансамблю отвечает плотность распределения P_i , называемая *каноническим распределением Гиббса* [19, 27]:

$$P_i = C \exp\{-\beta U_i\}, \quad (13)$$

здесь константа C не зависит от i ; $\ln C = -\ln \sum \exp\{-\beta U_i\} = \beta F$, где

$$F = \langle U \rangle - TS = -\beta^{-1} \ln \sum \exp\{-\beta U_i\}, \quad (14)$$

F – свободная энергия; $\beta = \partial S / \partial U \sim T^{-1}$, т. е. $\beta \sim T^{-1}$ (T – абсолютная температура). Свободная энергия F , как видно из (14), представляет собой результат конкуренции между внутренней энергией ($\langle U \rangle$) и связанной энергией (TS). Очевидно, что увеличение энтропии, как, впрочем, и температуры (T), уменьшает F . Как известно, открытая система приобретает равновесие при достижении F минимального значения. Это губительно для развития процесса самоорганизации, ответственного за возникновение порядка (свойственного любому рудогенетическому процессу). Он, образно говоря, «борется» за увеличение свободной энергии, порождающей «порядок из хаоса». Бесполезная энергия «сбрасывается» в виде энтропии в окружающую среду.

Формула (13) позволяет найти вероятность P_i состояния ячеек («слоев») системы B с энергией U_i . Принимая во внимание, что $U(\rho) = \xi \ln(\rho/\rho_0)$, и производя подстановку ее в (13), получим

$$P(\rho_i) = C (\rho_i/\rho_0)^{-\beta \xi} = C (\rho_i/\rho_0)^{\beta \xi}. \quad (15)$$

Сравнивая формулы (10) и (15), видим, что последняя есть ранее полученное распределение Парето. Оно указывает, в частности, на то, что генезис плотности слоев (пород) в определенных интервалах исследуемого разреза является результатом функционирования нелинейного механизма. Сравнение степеней этих формул выявляет термодинамический смысл характеристического показателя α .

Видно, что понятие статистического ансамбля конструктивно может быть применено при изучении чередующейся серии слоев в разрезах интрузии. Это понятие, заключающееся в разбиении системы на подсистемы (ячейки) с целью оценки их вероятности обладать данной энергией, в статистической физике оказалось крайне плодотворным. Изучение его свойств дало возможность теоретически, используя минимум аксиом и абстракций, определяющих составные элементы макросистемы (точные молекулы, их равновероятное число в подсистеме ансамбля, реализующиеся при разных начальных условиях, и др.), выводить статистические законы, экспериментально подтвержденные и не противоречащие фундаментальным законам физики и квантовой термодинамики. Очевидно, что реализующиеся на границе Ж–Т термодинамические подсистемы (ячейки) статистического ансамбля, которым впоследствии отвечают слои (породы) определенного минерального состава, представляют собой специфические грани вероятностного множества микросостояний материнского вещества. Его химические компоненты флуктуировали под действием энергии, создающей или разрушающей связи молекул (их кластеров), в конечном итоге образуя в разрезе слои (породы) конкретного минерального состава. Следовательно, непрерывную последовательность слоев разреза плутона вполне логично отождествить со статистическим ансамблем, а информацию, заложенную в эмпирическом ряде петрофизических (или геохимических) свойств слоев (пород), рассматривать как сигнал, отражающий этот ансамбль [28], полагая, что его уровни есть параметры ячеек, заполненных энергией поро(удо)образующей природы.

В работах [28, 29] аналитически установлена эквивалентность определения энтропии (по Шеннону) уравнением (5) и ее определения, данного Больцманом, – $S = \ln W$ (W – термодинамическая вероятность). Показано также, что они являются прямым следствием энтропии, введенной Клаузиусом, – $S = \int dQ/T$, говорящей о том, что ее при-

ращение ΔS отвечает приращению элементарного количества тепла ΔQ , переданного системе окружающей средой, т. е. $\Delta S = \Delta Q/T$ [11]. Применение энтропии вида (5) предпочтительно потому, что с ее помощью исследуются как равновесные, так и неравновесные процессы. Используем энтропию (5) при изучении статистического ансамбля стационарного состояния, возникающего в результате единого процесса генерации слоев, получившего отражение в эмпирическом ряду $\rho(h)$. При этом учтем, что особый интерес представляет величина, определяющая изменение энтропии при переходе части системы из одного состояния («1»), отвечающего вероятности $P(\rho_1)$, в другое состояние («2»), отвечающее вероятности $P(\rho_2)$. Тогда

$$\Delta S = -\ln \left\{ (P(\rho_2))^{P(\rho_2)} / (P(\rho_1))^{P(\rho_1)} \right\}. \quad (16)$$

В состоянии равновесия контактирующих систем A и B вероятность $P(\rho)$ того, что плотность вещества в системе A заметно отклонится от среднего значения $\langle \rho \rangle$, мала. Однако при стремлении подсистем системы A к новому состоянию процессы самоорганизации, нелинейные по своей природе, отвечающие за развитие системы B (т. е. ДС), могут вызвать значительные отклонения ρ от $\langle \rho \rangle$. Это вытекает из рассуждений, связанных с механизмами, получившими отражение в формулах (1) и (3). Скорее всего, именно такие механизмы возникают на границе Ж–Т. Они способны усилить флуктуации, определяющие в том числе нелинейное образование темноцветных (или рудосодержащих) минералов в «слоях», отвечающих ДС. Вследствие падения температуры происходит переход «слоев» системы B (ДС) в слой твердого состояния системы C . Образовавшийся в результате этого перехода слой твердого состояния с присущей ему плотностью есть, как отмечалось, «фотография», «мгновенный отпечаток» (imprinting) возникшего того или иного флуктуационного отклонения. Отклонению плотности последующего слоя от плотности предшествующего отвечает приращение ΔS (формула (16)). Оно может быть равно 0, говоря о локальной обратимости процесса; больше 0, свидетельствуя о спонтанном стремлении процесса к наиболее вероятному состоянию; меньше 0, фиксируя, что процесс реализуется не самопроизвольно, а в режиме самоорганизации, который возможен, скорее всего, вдали от равновесия.

5. Закон уменьшения энтропии. Критерий S-теоремы Климонтовича. Упорядоченное (структурированное) состояние системы B , отвечающее ДС, которое позже испытает фазовый переход в состояние C , рождается в результате процесса самоорганизации. Поэтому целесообразно эмпирический ряд $\rho(h)$, являющийся импринтингом ДС, подвергнуть тестированию по критерию, позволяющему количественно отличить возникшую степень упорядоченности от «хаоса», характерного для равновесного состояния магматического вещества системы A .

Вновь обратимся к энтропийной мере, обладающей полным набором свойств, необходимых для использования ее в качестве меры неопределенности при статистическом описании как изолированной, так и открытой систем. H -теорема Больцмана выражает закон возрастания энтропии, который правомерен лишь для изолированных систем. Теорема переформулирована [1, 2] для систем открытого типа с целью создания инструмента, устанавливающего, что более упорядоченная система характеризуется меньшим значением энтропии (относительно единого энергетического уровня) по сравнению с энтропией менее упорядоченной системы («идеально» хаотической). Такое соотношение согласуется с интуитивными представлениями. Действительно, при переходе от хаотического состояния, отвечающего максимуму энтропии, к состоянию, испытывающему генерацию упорядочения, энтропия должна уменьшаться. Соответствующий инструмент – алгоритм расчета критерия на основе сформулированной и доказанной «S-теоремы» – был получен Ю. Л. Климонтовичем [1, 2].

В свете предмета нашего исследования суть критерия сводится к следующему. За начало отсчета степени хаотичности примем (определяемую по P_0) энтропию равновесного состояния материнского вещества магматической камеры (система A). Этой «норме» – энтропии «идеального хаоса» S_0 , согласно теореме Больцмана, соответствует максимальная величина. Очевидно, что равновесное состояние системы A отвечает некоторым «нулевым» значениям управляющих параметров (a_0). В частности, это может быть критическая температура (T) вещества в области его кристаллизации, среднее число молекул (сиботаксов), участвующих в формировании темноцветных (рудных) минералов, и др. Формирование области ДС (системы B) происходит по мере ее уклонения от равновесного состояния. Управляющие параметры, принимая иные значения ($a_1 = a_0 + \Delta a$), преобразуют упорядочение ДС, которой бу-

дуг отвечать функция распределения P_1 и энтропия S_1 меньшей величины по сравнению с S_0 . Используя обозначения, ранее применяемые при анализе эмпирических рядов плотности, с учетом условия, что сравнение энтропий должно проводиться при одинаковых значениях средней энергии $\langle U \rangle$, разность энтропий S'_0 и S_1 рассчитаем по формуле

$$S'_0 - S_1 = \int \{ \ln (P_1(\rho) / P'_0(\rho)) \} P_1(\rho) d\rho. \quad (17)$$

Здесь $P'_0(\rho, a_0)$ есть ренормированная функция плотности распределения (P_0). Она задается (формально) в виде канонического распределения Гиббса:

$$P'_0(\rho, a_0) = \exp \{ (F_{\text{эфф}}(\Delta a) - H_{\text{эфф}}(\rho, a_0)) / T_{\text{эфф}} \}, \quad (18)$$

где $F_{\text{эфф}}(\Delta a)$ – эффективная свободная энергия, а $H_{\text{эфф}}(\rho, a_0) = - \ln P_0(\rho, a_0)$ – эффективная функция Гамильтона [1, 2]. Из условия нормировки функции $P'_0(\rho, a_0)$ ($\int P'_0(\rho, a_0) d\rho = 1$) определяется зависимость $F_{\text{эфф}}$ от Δa . Соблюдение условия единого энергетического уровня, т. е. одинаковости средней величины эффективной энергии, являющейся разной для рассматриваемых систем, находится из решения уравнения $\int H_{\text{эфф}} P'_0(\rho, a_0) d\rho = \int H_{\text{эфф}} P(\rho, a_1) d\rho$. Оно позволяет установить зависимость $T_{\text{эфф}}$ от Δa . Разность, определяемая по формуле (17), и есть количественная мера (критерий) относительной степени хаотичности (упорядоченности) рассматриваемых состояний. Используя его, можно убедиться, что хаотическая система (энтропия S_0), испытав упорядочение, принимает энтропию $S_1 < S'_0$.

Справедливость критерия S -теоремы продемонстрирована при исследовании большого числа процессов физики и биологии [1, 2]. В частности, анализ последовательности стационарных состояний, отвечающих переходу от ламинарного течения жидкости к турбулентному режиму, *традиционно считавшемуся классическим примером хаоса*, показал, что турбулентный режим является сложным, но более упорядоченным по сравнению с ламинарным. Значения энтропии по критерию S -теоремы удовлетворяют неравенствам $S'_0 > S_1 > S_2$, где S_1 и S_2 – энтропии турбулентного течения, соответствующие возрастающим числам Рейнольдса.

6. Математический анализ и геологическая интерпретация эмпирических рядов плотности пород в разрезах плутона Бушвельд. Обратимся к истолкованию данных, приведенных в таблице, которые получены в результате использования подхода статистической термодинамики при обработке эмпирических рядов плотности, характеризующих разрезы Критической и Главной зон плутона Бушвельд. Детальные геологические сведения по этим разрезам приведены в работах [8–10, 13].

6.1. Критерий степени самоорганизации разрезов интрузии. Хорошо известно, что возникновение эндоконтактной зоны закала базит-ультрабазитовой интрузии есть результат «мгновенного» (в силу резкого падения температуры) перехода исходного расплава в твердое состояние. Эта зона, как правило, выполнена норитами, как бы отражающими «средний» состав внедрившегося в камеру глубинного магматического вещества. Плотность норитов представляет собой своеобразный «отпечаток» равновесного состояния, отвечающего родоначальной магме. Она, как известно, флуктуирует от объекта к объекту в диапазоне примерно от 2,75 до 3,12 г/см³ [30]. Не имея другой априорной информации, допустим, что этот диапазон значений плотности соответствует родоначальному (равновесному) состоянию магмы и ему отвечает равномерная функция плотности распределения $P(\rho) = 1/(b - a) = \text{const}$, которую примем за модельное представление «идеального хаоса». Используя формулу (5), легко показать, что равномерному распределению плотности норитов отвечает энтропия

$$S = - \int 1/(b - a) \ln \{ 1/(b - a) \} d\rho = \ln(b - a). \quad (19)$$

Оценим по формуле (19) энтропию, полагая, что шаг (квант) оси абсцисс равномерного распределения равен 0,03. Рассчитанная величина энтропии $S_0 = 2,64$ (таблица, строка 5).

Это и есть максимальная энтропия (по Больцману), отвечающая родоначальной магме. Можно полагать, что она представляет собой «норму хаотичности». Назовем ее *априорным* (модельным) представлением энтропии.

Статистики эмпирических рядов плотности

№ строки	Характеристика	Скважина				
		r1	r16wp	r18	r491	r16
1	Интервал отбора образцов, м	1300–1620	31–814	5–641	561–773	14–379
2	Минимальное значение плотности $\rho(h)$, г/см ³	2,72	2,72	2,72	2,66	2,72
3	Максимальное значение плотности $\rho(h)$, г/см ³	3,44	3,50	3,26	4,19	3,23
4	Плотность, соответствующая максимуму гистограммы, г/см ³	2,87	2,96	2,96	2,87	2,81
5	Априорная энтропия (диапазон плотности от 2,75 до 3,15 г/см ³)	2,64	2,64	2,64	2,64	2,64
6	Степень хаотичности (формула (17))	0,62	0,61	0,47	1,63	0,31
7	Апостериорная энтропия (формула (5) (гистограмма по $\rho(h)$)	2,46	2,37	2,27	3,07	2,49
8	Показатель степени $\gamma = (\alpha + 1)$ распределения Парето	1,88	1,88/1,85*	2,32	1,18	1,47
9	Показатель α распределения Парето	0,88	0,88/0,85*	1,32	0,18	0,47

Примечание. Значения со звездочкой соответствуют распределению Парето, полученному по данным содержания темноцветных минералов (%), оцененного по шлифам.

Используя эмпирические ряды плотности, характеризующие реальные разрезы скважин, получим гистограммы и вычислим по ним (формула (8)) *апостериорную* энтропию (таблица, строка 7). Очевидно, что апостериорные значения энтропии соответствуют веществу, ближе всего согласующемуся с веществом области ДС. Сравнивая их с величиной априорной энтропии (строка 5), видим, что для четырех скважин энтропия оказалась ниже, чем 2,64, в то время как для разреза скв. r491 она возросла, указывая якобы на возросшую степень хаотизации отвечающего ей разреза.

Обратимся к применению критерия «S-теоремы», считая, что средние значения эффективной энергии априорной и апостериорных моделей тождественны. Это предположение в данном случае оправданно, ибо сравниваются плотности пород, отвечающие твердому его состоянию (системе С). Это позволяет не производить ренормировку энтропии S_0 . Сравнение (см. таблицу, строки 5 и 7) априорной энтропии (S_0) с апостериорными, вычисленными по формуле (5), показывает, что разность (17) больше нуля. Следовательно, все эмпирические ряды плотности испытали самоорганизацию, что привело к уменьшению степени их хаотичности. Таким образом, отдельные элементы статистического ансамбля (слои разреза) и ансамбль в целом (разрез), формируя ДС, испытывали влияние процесса самоорганизации. Ранжированный ряд геологических разрезов по полученной энтропийной мере (по степени их организованности), где предыдущий объект (разрез) является более организован-

ным, чем последующий, выглядит следующим образом: r491 (1,63), r1 (0,62), r16wp (0,61), r18 (0,47), r16 (0,31). Эмпирический ряд плотности по разрезу r491 свидетельствует, что он и отвечающие ему слои разреза претерпели наиболее интенсивное влияние процесса самоорганизации. Эмпирический ряд плотности разреза скв. r16 показывает, что если первоначальный хаос и не претерпел дополнительной деградации, то происходящие последующие эволюционные процессы его трансформировали слабо. Какие эффекты – организации или деградации – ведут к формированию оптимальных рудоносных объектов, может показать лишь специальное исследование, целевая функция реализации которого становится предельно ясной.

6.2. Распределения Парето и его интерпретация. Показав ранее, что распределение Парето возникает в случае, когда значения эмпирического ряда плотности генерируются в результате действия нелинейного механизма, вычленим из полученной полной гистограммы (распределения), соответствующей эмпирическому ряду плотности, ту ее часть, которая отвечает распределению Парето, т. е. медленно затухающую (после максимума) ветвь распределения (гистограммы).

На рис. 1 представлены гистограммы, полученные по выборкам (эмпирическим рядам) плотности, характеризующих разрезы скважин r16wp и r1. Для разреза скв. r16wp можно полагать, что правая ветвь гистограммы плотности соответствует распределению Парето, начиная с $\rho = 2,96 \text{ г/см}^3$; для скв. r1 – с $\rho = 2,87 \text{ г/см}^3$.

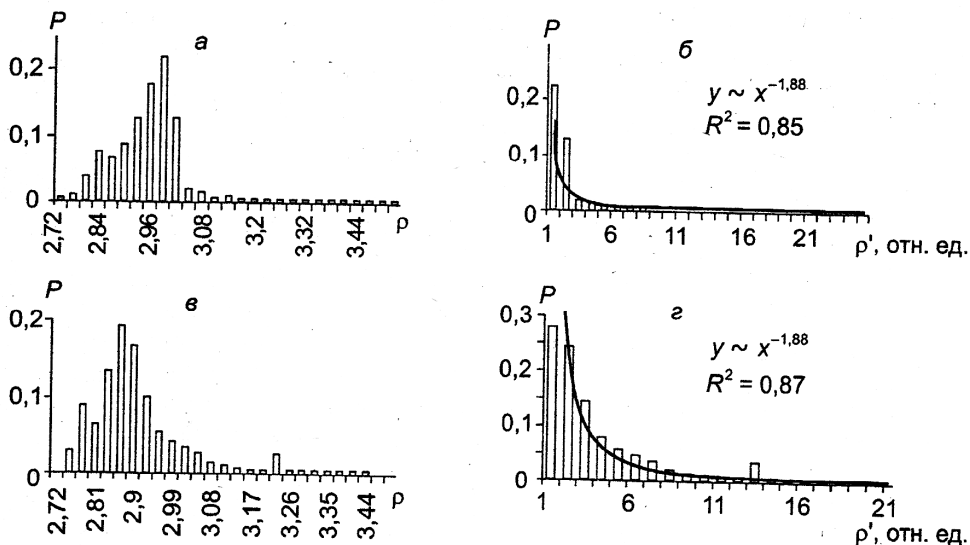


Рис. 1. Гистограммы плотности по разрезу в скважинах r16wp и r1 (единичный интервал на оси абсцисс $\Delta = 0,03 \text{ г/см}^3$) (а, б) и правые ветви гистограмм, подчиняющиеся распределению Парето (в, з).

Полученные эмпирические распределения Парето дают право (например, на основе метода наименьших квадратов) произвести оценку показателей $\gamma = \alpha + 1$ и α (см. таблицу). Тогда его аппроксимация представима в аналитическом виде – формула (10).

Прежде чем проводить анализ характеристических показателей α , обратим внимание на следующие важные особенности распределения Парето (Ципфа). Так, медленная его сходимость к оси абсцисс свидетельствует о зависимости существования статистических моментов распределения Парето, в частности, среднего или дисперсии, от величины характе-

ристического показателя α . При $\alpha > 1$, как известно, распределение Парето имеет конечный первый момент (среднее), но лишь при $\alpha > 2$ оно характеризуется конечным вторым моментом (дисперсией). В приведенных выше примерах α принимает значение меньше не только 2, но и 1 (см. таблицу), подтверждая, что в соответствующих случаях конечных моментов не существует.

Распределениям типа Парето подчинены многие природные процессы [12], обуславливающие специфическую структуру эмпирических рядов. Такие ряды, как правило, содержат уровни (значения), принимающие экстремальные катастрофические отклонения, что, в принципе, характерно для рядов $\rho(h)$ рассматриваемой контрастной расслоенности, а процесс, порождающий уровни, является нелинейным, вызывающим нелинейное усиление флуктуаций, свойственных ДС. Расходимость моментов устойчивого распределения Парето будет указывать не только на существование сильного разброса случайных уровней, но и на увеличение вероятности появления гигантских (катастрофических, ураганных) уклонений. В такой ситуации определение моментов распределения теряет всякий смысл. Иначе говоря, устойчивое распределение Парето с параметром $\alpha < 1$, обеспечивая сходимость частоты случайных величин к вероятности, не обеспечивает сходимость среднего или дисперсии к конечным величинам.

Для большей убедительности используем результаты исследований шлифов пород разреза скв. г16вр. Получив на основе количественных подсчетов сумму процентного содержания темноцветных и рудных минералов в шлифе (в числе других петрогенных минералов), построим соответствующую гистограмму (рис. 2). Как и ранее, препарируем ее, вычленив распределение Парето. Определив его показатель α (см. таблицу), убеждаемся, что он практически не отличается от показателя распределения Парето, относящегося к ряду плотности этих же пород. Совпадение показателей α является ярким доказательством того, что именно темноцветные минералы (и рудные), возникая в слоях разреза под действием нелинейного механизма, обуславливают высокие значения в ряду плотности $\rho(h)$, формируя «тяжелый хвост» правой ветви эмпирического распределения (гистограммы).

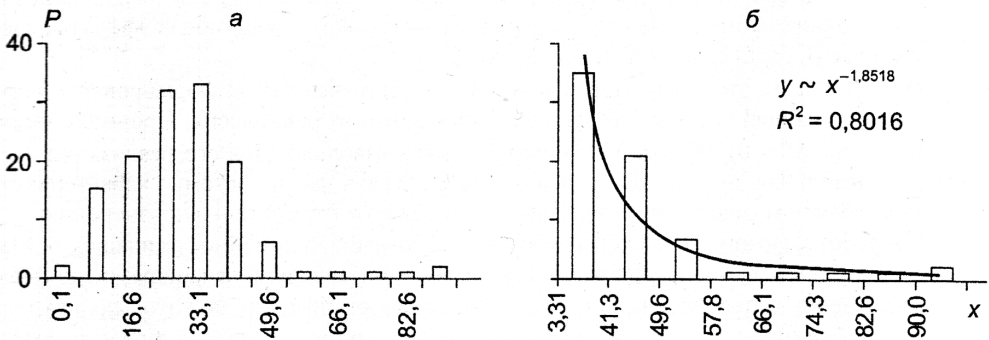


Рис. 2. Гистограммы содержания суммы темноцветных и рудных минералов в образцах пород разреза в скв. г16вр (а) и правые ветви гистограмм, подчиняющиеся распределению Парето (б).

6.3. Интерпретация приращения энтропии. Оценив степень хаоса того или иного разреза интрузии в целом (см. п. 6.1), используем энтропийную меру как способ детальной дифференциации эмпирического ряда плотности $\rho(h)$. Такой подход позволяет расчленить разрез на интервалы вполне определенного термодинамического звучания. Так как приращение энергии процесса $\Delta Q = T\Delta S$, то, оценив ΔS по формуле (16) в каждой точке разреза, мы тем самым определим (учитывая, что средняя энергия $\langle U \rangle$ системы – величина посто-

янная), какая по интенсивности энергия характерна для формирования индивидуальных слоев, зон (интервалов) в разрезе. В этой связи, используя гистограммы, построенные по эмпирическим рядам плотности $\rho(h)$, конкретной величине ряда плотности поставим в соответствие отвечающую вероятность ее возникновения. Так получаем эмпирический ряд значений вероятности $P(\rho_h)$ в каждой точке (h) изучаемого разреза. Затем используем соотношение (16) в виде

$$\Delta S_{h-1, h} = S_h - S_{h-1} = -\ln \left\{ \frac{(P(\rho_{h-1}))^{P(\rho_{h-1})}}{(P(\rho_h))^{P(\rho_h)}} \right\}, \quad (20)$$

где ρ_h и $P(\rho_h)$ – плотности и вероятности состояния части рассматриваемой системы в точке (h) разреза, а ρ_{h-1} и $P(\rho_{h-1})$ – плотности и соответствующие вероятности в предшествующей точке ($h-1$) разреза. Полученная разность $\Delta S_{h-1, h}$ характеризуя изменение энтропии при переходе из точки $h-1$ разреза в точку h (переход из состояния нижележащей области разреза в вышележащее состояние), фиксирует термодинамическую особенность перехода. Динамика изменения значений $\Delta S_{h-1, h}$ по оси h , характеризуя вертикаль разреза, указывает, в каких интервалах значения $\Delta S_{h-1, h}$ близки к нулю, в каких они принимают положительные, а в каких отрицательные значения.

Рисунок 3 иллюстрирует ряд $\Delta S_{h-1, h}$ как результат обработки эмпирического ряда плотности разреза скв. r16wr в соответствии с формулой (20). Интерпретация частных и общих особенностей структуры ряда $\Delta S_{h-1, h}$ и строения разреза сводится к следующему.

Если часть системы, отвечающая породе (слою) определенного минерального состава (и плотности), стремясь к состоянию равновесия, осуществляет переход из менее вероятного в более вероятное состояние, то $\Delta S_{h-1, h} > 0$. Такой необратимый переход, следуя принципам термодинамики изолированных систем, происходит самопроизвольно. Система спонтанно релаксирует, не требуя энергетических затрат. Состоянию равновесия базит-ультрабазитовой системы, к которому стремятся отдельные ее части, соответствуют породы норитового состава.

Если $\Delta S_{h-1, h} \cong 0$, то процесс, отвечающий за формирование этой части разреза (интервала), обратим. Эта ситуация характерна для случая, когда система, достигнув наиболее вероятного состояния, длительное время пребывает в нем. Флуктуационные эффекты, свойственные системе B , были слабой интенсивности.

Если $\Delta S_{h-1, h} < 0$, то это указывает, что процесс, ответственный за формирование пород (слоев) соответствующей части системы, находился вдали от равновесия. Процесс с уменьшением энтропии ($\Delta S < 0$) не может протекать самопроизвольно. Для его реализации необходима дополнительная энергия. В этом интервале разреза часть системы, характеризуясь интенсивным обменом вещества и энергии, «потребляет» отрицательную энтропию, т. е. совершается работа. Возникающие флуктуации испытывают нелинейное усиление, обязанное действию нелинейного механизма. Именно такому интервалу отвечает развитие неравновесных нелинейных процессов, т. е. процессов самоорганизации, в которых рождение экстремальных (минимальных и максимальных) по плотности слоев наиболее вероятно. Существенное отклонение от «энтропийной нормы» по плотности слоев наиболее вероятно. Уменьшения может указывать на «заболевание» системы [1, 2]. В частности, это может быть связано с формированием зоны рудопоявления.

На рис. 3 представлены три эмпирических ряда, характеризующих разрез скв. r16wr: плотности $\rho(h)$, приращения энтропии $\{\Delta S_{h-1, h}\}$ и ряд значений $\{\Delta S_{h-1, h}\}^2$. Последний ряд дает представление о вариации изменения по вертикали разреза «энергетических» уровней. Высокие уровни ряда $\{\Delta S_{h-1, h}\}^2$ показывают, что именно в этих интервалах возникают по-

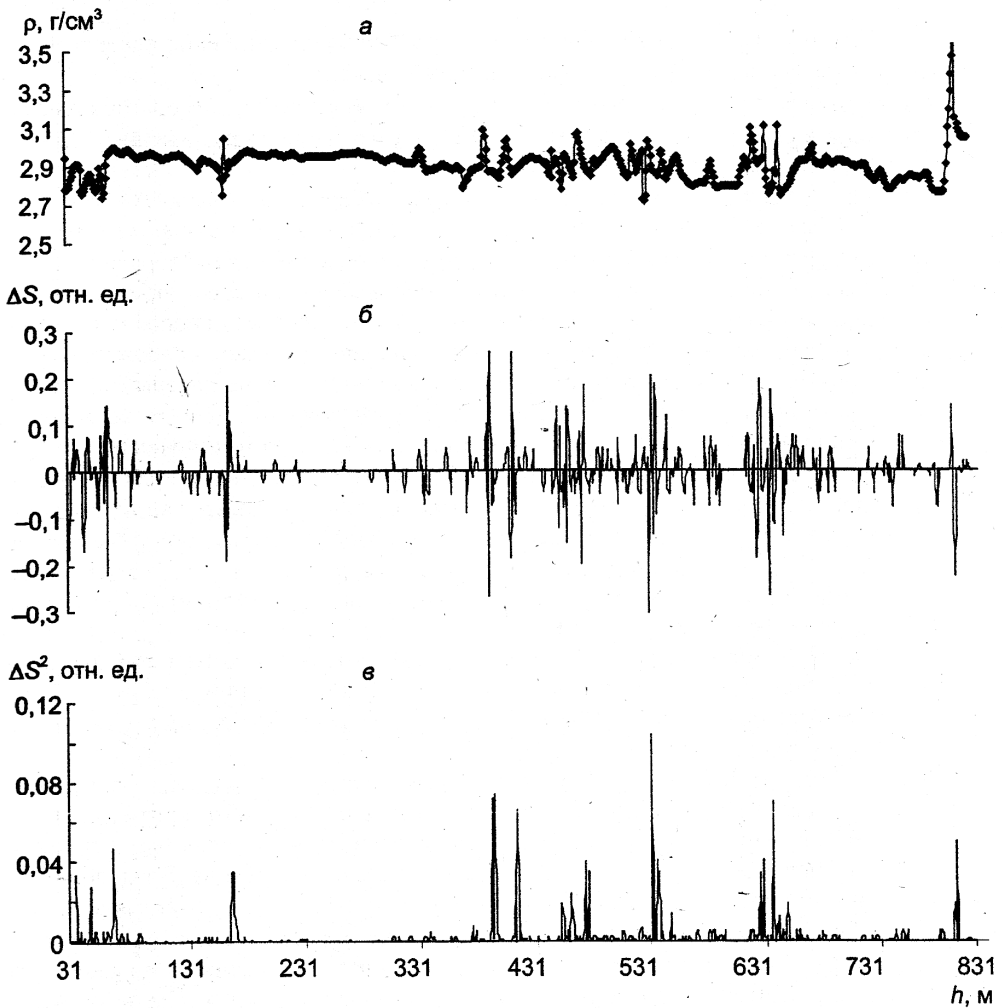


Рис. 3. Распределения по разрезу скв. г16вр.

a – плотность пород (эмпирический ряд); b – ряд значений приращения энтропии $\Delta S_{h-1, h}$; c – ряд значений энергии породообразования $(\Delta S_{h-1, h})^2$.

роды экстремальной плотности и, в частности, слои (породы), содержащие темноцветные или рудные минералы. Здесь происходит «потребление» отрицательной энтропии, свидетельствующей, что система в случае реализации высокоплотных слоев переходит из более вероятного состояния (петрогенерирующего) в менее вероятное (рудогенерирующее). Эти части системы, скорее всего, формировались вдали от равновесия. Энергия, отвечающая им, сопряжена с образованием энергоемкого вещества. Появление на оси h интервалов, отвечающих отрицательным значениям $\Delta S_{h-1, h}$, подчеркивает, что в них протекали интенсивные энергетические процессы самоорганизации, обеспечивающие и структуризацию вещества расплава, и контрастное его изменение по минеральному составу. С учетом изложенного выше, приняв во внимание соответствие последовательности слоев разного минерального состава в разрезе с однородной цепью Маркова второго порядка [23, 24]), можно смело допустить, что природа рудообразующей энергии связана с физико-химическим (точнее,

автокаталитическим) процессом. Он обуславливал нелинейное увеличение плотности вещества, генерируя темноцветные (в том числе и рудные) минералы.

По значениям ряда $\Delta S_{h-1, h}$, как видно из рис. 3, выявляются интервалы длительного пребывания системы в обратимом состоянии, где $\Delta S_{h-1, h} \approx 0$, например, интервал 180–331 м, соответствующий зоне монотонных норитов.

Принципиально важную роль играют интервалы, характеризующиеся резко контрастной сменой отрицательного приращения энтропии положительным. Они свидетельствуют, что происходит, образно говоря, «заболевание» части системы, причиной которого становится интенсивное развитие процесса самоорганизации, нелинейного по своей природе и возникающего вдали от равновесия. Именно нелинейное развитие процесса способно обусловить когерентные и концентрационные эффекты, превращающие кларковое содержание рудных компонент родоначального вещества в руду богатой кондиции. Такие интервалы, как видно на рис. 3, содержат слои хромитов: УГ-2 – 813 м, Риф Меренского – 650 м, Бастард риф – 628–632 м. Именно эти интервалы характеризуются резкой сменой приращения энтропии $\Delta S_{h-1, h}$, свидетельствующей о выполнении известного принципа компенсации энтропии [11], характерного для взаимодействующих открытых систем. В этой ситуации приращение энтропии, принимая отрицательные значения, тут же компенсируется состоянием положительных ее величин. Этот принцип родственен известному принципу Ле Шателье: система, уклоняясь в ту или иную сторону от состояния равновесия, тут же стремится возвратиться обратно в прежнее состояние.

Заключение. Продемонстрирована эффективность методов статистической термодинамики открытых систем, использующих принцип Больцмана и критерий S -теоремы Климонтовича при изучении процессов, формирующих разрезы контрастно расслоенного базит-ультрабазитового плутона Бушвельд (ЮАР).

1. Ранее выдвинутая гипотеза [13], утверждающая, что между жидким и твердым состояниями магмы базит-ультрабазитового состава, в ликвидусе, вблизи критической точки кристаллизации, рождается область совершенно нового состояния вещества, отвечающего ДС, получает подтверждение. ДС является предтечей фазового перехода. Важную роль при ее формировании играют спонтанные флуктуации молекул вещества, возникающие на границе Ж–Т фаз под действием потоков энергии и вещества. Возникшие потоки ответственны прежде всего за развитие процесса самоорганизации. Являясь нелинейным по своей природе, этот процесс усиливает спонтанные флуктуации, трансформирующие исходное или предшествующее неустойчивое состояние вещества. Флуктуции в координатах пространства и времени при благоприятных условиях возрастают нелинейно до макромасштабов. Также нелинейно в ряде интервалов они обогащаются темноцветными (рудными) минералами. Из гомогенного вещества образуется расслоенность ритмичной структуры, т. е. последовательность «слоев» жидкой фазы, минеральный состав которых по вертикали магматической камеры, как правило, приобретает упорядоченную изменчивость, отличающуюся от хаотической. В сущности, это и есть ДС. Следуя законам неравновесной термодинамики [7, 25], ДС, стремясь к новому равновесию, приобретает устойчивость, возникающую, как правило, при минимуме производства энтропии. Характеризуясь стационарной упорядоченной неоднородностью, ДС спонтанно, в силу снижения температуры, переходит в твердое состояние. В ходе этого перехода упорядоченность ДС может деградировать, но, как показывают результаты исследования, ее черты генетически наследуются в последовательности слоев твердой фазы, приобретая отклик в характеризующих разрезы плутона эмпирических рядах плотности $\rho(h)$. Предложенные методы интерпретации ряда $\rho(h)$ позволяют эффективно оценивать степень хаотичности и упорядоченности его структуры, тесно сопряженной с таковой различных стадий эволюции ДС.

2. Интерпретация эмпирических рядов плотности $\rho(h)$, основанная на расчете по ним рядов уровней приращения энтропии $\Delta S_{h-1, h}$, допускает спонтанные флуктуации исходного вещества, которые формируют слои разной плотности, вызывающие отрицательное приращение энтропии ($\Delta S_{h-1, h} < 0$). Они образуются под действием нелинейного физико-химического механизма (автокаталитического типа). Природа такого механизма согласуется с результатами исследования, полученными ранее с использованием аппарата цепей Маркова [23, 24].

3. На основе анализа гистограмм рядов плотности оценена специфика развития процесса, формирующего высокоплотные слои в разрезе. Выделяемая из полученной гистограммы правая ветвь, имеющая «тяжелый хвост», согласуется с распределением Парето. Оно, обладая при параметре $\alpha < 1$ расходимостью первых двух моментов, в принципе, не описывается в привычных терминах выборочных средних и дисперсии, которые оказываются неустойчивыми и несостоятельными. В этой ситуации отвечающие распределению Парето уровни плотности ряда $\rho(h)$ должны характеризоваться крайней нестабильностью и иметь тенденцию к неограниченному росту с увеличением h . Эта типичная и исключительно важная специфика развития уровней ряда плотности $\rho(h)$ свидетельствует, что генезис механизма, их порождающий, является нелинейным, причем он с большой вероятностью способен генерировать слои с экстремальной (ураганной) концентрацией темноцветных (рудных) минералов.

4. Использование критерия S -теоремы, основанного на фундаментальных принципах термодинамики открытых систем, позволяет, анализируя эмпирические ряды плотности $\rho(h)$, решать важные задачи, связанные со спецификой развития процесса, формирующего расслоенные базит-гипербазитовые плутоны. В частности, показано, что ДС, возникшая в результате процесса самоорганизации, получает отражение в развитии «супердальной» упорядоченности (ритмичной расслоенности), характерной для последовательности минерального состава слоев в разрезе плутона. Степень ее хаоса (оцененной по эмпирическому ряду плотности $\rho(h)$) относительно энтропии гомогенного вещества составляет меньшую величину. Применение критерия S -теоремы, очевидно, дает возможность оценить энтропию систем, претерпевающих в ходе эволюции не только упорядочение, но и деградацию (дезорганизацию). Пока еще не ясно, какая степень упорядоченности (энтропия) должна отвечать рудосодержащему объекту. Ясно одно – использование критерия S -теоремы открывает эффективный путь для понимания особенностей развития неравновесных процессов открытых систем. Оценивая относительную степень порядка ДС, получающей отклик в $\rho(h)$, возможно осуществить ранжирование и разбраковку изучаемых разрезов на классы упорядочения и хаоса. Это важно для изучения особенностей чередования слоев (пород) в разрезе интрузии, содержащих высокоплотные (в том числе и рудные) минералы, образование которых произошло под влиянием развития нелинейного процесса. Нелинейное развитие рудообразующих зон в интервалах разреза, образно говоря, подобно вирусному заболеванию: геологическая среда «патологически» трансформируется – вместо кларковых содержаний рудных элементов, когерентно, с нелинейным эффектом образуется и концентрируется рудное вещество высокой кондиции. Развитие «рудной патологии», т. е. упорядоченности, закономерности, следует ожидать в нелинейной среде (что и обнаруживается геологами), и менее всего она будет свойственна безрудным (гомогенным) средам.

5. И, наконец, интерпретация эмпирического ряда плотности, основанная на энтропийной мере, дает возможность производить дифференциацию разреза, обнаруживая в нем отдельные интервалы (зоны), соответствующие отрицательным, нулевым и положительным значениям приращения энтропии ($\Delta S_{h-1, h}$). Расчленение разреза становится содержатель-

ным, ибо семантика выделенных в нем интервалов приобретает важное термодинамическое звучание. Обнаруженные интервалы разреза, в которых $\Delta S_{h-1,h} < 0$, свидетельствуют, что при определенных термодинамических условиях возникает энергия, реализующая переход вещества из более вероятного состояния (породообразования) в менее вероятное (рудообразования). Это – факт «потребления» отрицательной энтропии. Он говорит о реализации в расплаве на границе Ж–Т интервала ДС, включающего зоны (слои) с более энергоемким веществом, содержащим темные (рудные) компоненты. ДС, находясь, скорее всего, вдали от равновесия, удерживалась в стационарном неравновесном состоянии до момента ее фазового перехода в твердое состояние. Поэтому части разреза контрастно расслоенной базит-ультрабазитовой интрузии с отрицательным значением приращения энтропии ($\Delta S_{h-1,h} < 0$) могут рассматриваться как перспективные с точки зрения рудоносности. Это подтверждено результатами интерпретации эмпирических рядов плотности. Они демонстрируют, что материнская магма преобразуется под действием двух противоборствующих процессов – созидания зон (возникающих при $\Delta S_{h-1,h} < 0$ и ответственных за рудопроявление) и их спонтанного разрушения (при $\Delta S_{h-1,h} \geq 0$). Таким образом, подход, основанный на энтропийных мерах статистической термодинамики, позволяет произвести эффективное расчленение разреза на интервалы, отвечающие энергии созидания, концентрации (рудогенеза) и энергии рассеивания (петрогенеза), что принципиально важно при прогнозных оценках потенциальной рудоносности слагающих разрез зон и слоев (пород).

Очевидно, что приемы статистической термодинамики открытых систем могут быть расширены на случай интерпретации многомерной совокупности петрофизических и геохимических данных и эффективно использованы при поисках и оценке полезных ископаемых магматического генезиса.

Авторы благодарят профессоров А. Б. Кольцова, И. И. Абрамовича и Ю. О. Пунина за ценные советы, данные при прочтении рукописи.

Summary

Dech V. N., Zinchenko V. N., Glebovitsky V. A. The use of Boltzman principle for studying the magmatic plutonic rocks of mafic-ultramafic intrusions.

The methods of open-system thermodynamics using the Boltzman principle and Klimontovich S-theorem are demonstrated to be effective in studying the formation of contrastly layered mafic-ultramafic intrusions. These methods allow to estimate the degree of disorder during different stages of rock-formation processes which correspond to empirical series of petrophysical parameters reflecting variations in plutonic rock mineralogy. (At different intervals across the pluton rock sequence) "Structure forming" events (SFE) are found in the pluton rock cross-sections. These SFE are developed in open systems as a result of non-linear self-organization mechanism, which causes crystallization of predominantly mafic (including ore) minerals. The empirical series of mineralogical densities and total contents of mafic and ore minerals are interpreted. The mineral contents is defined in micro-sections which characterize rocks in the Central and Main Zones of the Bushveld pluton intrusion in South Africa.

Литература

1. *Климонтвич Ю. Л.* Проблемы статистической теории открытых систем: критерии относительной степени упорядоченности состояний в процессах самоорганизации // Успехи физ. наук. 1989. Т. 158, вып. 1. 2. *Пелюхлова Е. Б., Фрадкин Э. Е.* Самоорганизация физических систем. СПб., 1997. 3. *Анищенко В. С., Вадивасова Т. Е., Астахов В. В.* Нелинейная динамика хаотических и стохастических систем. Саратов, 1999. 4. *Егоров Б. Л.* Об идентичности механизма химических превращений, происходящих в охлажденных шлаках и металлургических расплавах // Изв. вузов. Черная металлургия. 2000. № 3. 5. *Егоров Б. Л.* Механизм химических превращений, происходящих в шлаковых расплавах с позиций молекулярной концепции // Изв. вузов. Черная металлургия. 2001. № 3. 6. *Grigoriev D. P.* Ontogeny of minerals. Jerusalem, 1965. 7. *Николис Г., Пригожин И.* Познание сложного / Пер. с англ. Ю. А. Данилова; Под ред. Ю. Л. Климонтвича. М., 1990. 8. *Прияткин А. А., Деч В. Н., Писакин Б. Н.* К вопросу о расслоенности, ритмичности и периодичности пород Бушвельдского плутона // Вестн. С.-Петерб. ун-та. Сер. 7: Геология, география. 1997. Вып. 3 (№ 21). 9. *Dech V. N., Pisakin B. N., Priyatkin A. A.* Phenomenology of the basic-ultrabasic intrusion rhythmical layering process for mathematical modeling // Intern. platinum. St. Petersburg; Athens,

1998. 10. *Pisakin B. N., Dech V. N., Priyatkin A. A.* Density modeling of Bushveld layered mafic-ultramafic intrusion // *Theophrastus Contributions to advanced studies in geology*. Vol. III. St. Petersburg; Athens, 2000. 11. *Рейф Ф.* Статистическая физика / Пер. с англ. А. И. Шальникова, А. О. Вайсенберга. М., 1977. 12. *Яблонский А. И.* Стохастические модели научной деятельности // Системные исследования: Ежегодник. М., 1976. 13. *Деч В. Н., Глебовицкий В. А.* Ритмичная расслоенность базит-ультрабазитовых интрузий как отражение диссипативных структур (на примере Бушвельдского плутона) // *Вестн. С.-Петерб. ун-та. Сер. 7: Геология, география*. 2004. Вып. 4. 14. *Васильев В. А., Романовский Ю. М., Яхно В. Г.* Автоволновые процессы. М., 1987. 15. *Малинецкий Г. Г.* Хаос. Структуры. Вычислительный эксперимент (введение в нелинейную динамику). М., 2000. 16. *Френкель Я. И.* Собр. избр. трудов. Молекулярная физика (раздел II). М., 1958. 17. *Безмен Н. И.* Надликвационная дифференциация флюидных магматических расплавов в восстановительных условиях, как возможный механизм формирования расслоенных массивов // *Петрология*. 2001. Т. 9, № 4. 18. *Сафронов Н. И., Мещеряков С. С., Иванов Н. П.* Энергия рудообразования и поиски полезных ископаемых. Л., 1978. 19. *Ландау Л., Лифшиц Е.* Статистическая физика. М., 1951. 20. *Ризниченко Г. Ю., Рубин А. Б.* Математические модели биологических продуктивных процессов. М., 1993. 21. *Хамский У. В.* Кристаллизация из растворов. М., 1967. 22. *Сангвал К.* Травление кристаллов (теория, эксперимент, применение). М., 1990. 23. *Деч В. Н., Глебовицкий В. А., Прияткин А. А.* Идентификация ритмичной расслоенности базит-ультрабазитовых интрузий на основе математического аппарата цепей Маркова // *Докл. РАН*. 2000. Т. 346, № 1. 24. *Dech V. N. et al.* Interlayering in mafic-ultramafic plutons modelled by Markov chains // *Theophrastus Contributions to advanced studies in geology*. Vol. III. St. Petersburg; Athens, 2000. 25. *Пригожин И.* От существующего к возникающему / Пер. с англ. Ю. А. Данилова; Под ред. Ю. Л. Климонтовича. М., 1985. 26. *Корн Г., Корн Т.* Справочник по математике. М., 1978. 27. *Радушкевич Л. В.* Курс статистической физики. М., 1966. 28. *Коротаев С. М.* Энтропия и информация – универсальные естественнонаучные понятия / Интернет. 29. *Шамбадал П.* Развитие и приложения понятия энтропии / Пер. с фр. В. Т. Хозяинова. М., 1967. 30. *Петрофизика: Справочник* / Под ред. Н. Б. Дортман. Т. 1. Горные породы и полезные ископаемые. Л., 1992.

Статья поступила в редакцию 15 декабря 2004 г.