

**Некоммерческое акционерное общество «Восточно-Казахстанский
технический университет им.Д.Серикбаева»**

ОО «Международная академия информатизации» (МАИН)

ОТЧЁТ

**«Продолжение разработки и модернизации математического и
программного обеспечения для сборки технологической системы
цифрового прогнозирования рудных объектов с низким статусом
открываемости»**

(по оказанным ВКТУ субподрядных услуг в рамках проекта ПЦФ «Научная
оценка инвестиционной привлекательности структур Казахстана
перспективных на выявление месторождений полезных ископаемых» на
основании договора №10-2022 от 20.09.2022, лот № 1.)

Сроки выполнения субподрядных услуг 20.09.2022 – 26.10.2022 г.)

Утвержден

Денисова Н.Ф.
Член Правления - Проректор
по НИД и Ц

Исполнители от МАИН

Лось В.Л. (разделы 1,3),
Легонькин В.С. (разделы 1, 3)
Мурзадилов Т.Д. (раздел 2),
Ахметов Д.Ш. (раздел 4).

Генеральный директор МАИН



А.Ф.Цеховой

Алматы, 2022

Содержание

1. Модернизация программы RegSOM (ПК Elan) классификации и районирования многомерных слабо различающихся данных с обеспечением статистического и топологического анализа полученных результатов.	3
1.1. Кластеризация данных и районирование.....	3
1.2. Алгоритм, применяемый в программе REGSOM9	8
1.3. Описание программы RegSOM9.....	10
1.4. Использование программы районирования на территории Казахстана....	19
Литература к разделу 1	24
2. Разработка на основе методологии статистической физики программы решения квазитомографических задач программы и ее апробация на реальных геофизических данных	25
2.1 Теоретическая основа	25
2.2 Алгоритм и программа реализации квазитомографической задачи	37
Заключение по разделу 2	43
Литература к разделу 2.	44
3. Разработка методов и программы построения моделей распределения корреляций между характеристиками в геологическом пространстве 2D	45
3.1 Программа ModelingA2	45
3.2 Программа RanWin_R.....	50
4. Разработка и адаптация для задач геологоразведки программы построения нейросетевой функции с ориентацией на формирование элементов искусственного интеллекта при процедуре прогнозирования рудных полезных ископаемых	56
4.1 Машинное обучение.....	56
4.2 Многослойный персептрон и его структура.....	59
4.3 Сигмоидальные нейроны.....	61
4.4 Постановка задачи прогнозирования рудных полезных ископаемых	65
4.5 Структурная схема и вычислительные алгоритмы многомерной аппроксимации геологических данных с использованием многомерного полносвязного персептрона.....	68
Литература к разделу 4:	73

1. Модернизация программы RegSOM (ПК Elan) классификации и районирования многомерных слабо различающихся данных с обеспечением статистического и топологического анализа полученных результатов.

1.1. Кластеризация данных и районирование

Кластеризация многомерных данных и районирование являются достаточно часто используемыми процедурами геологоразведки. С геоинформационных позиций это операция целевого сжатия информации с одновременным увеличением смысловой ценности. При прогнозировании полезных ископаемых процедуры кластеризации и районирования применяются для выделения однородных подмножеств и площадей для формирования эталонов и для собственно выделения перспективных участков (обычно без оценки прогнозных ресурсов). Хотя самой методологии кластеризации, вероятно, несколько тысяч лет, поиски решения обнаружения группировок-кластеров в совокупности слабо структурированных многомерных данных без наличия априорных знаний о центрах группировок и/или расстояний между ними является новым математическим подходом. Этот подход опирается на приемы нейроматематики и новейшие возможности компьютеринга. В содержательном смысле кластеризация без априорной информации является извлечением в скрытых в неклассифицированных первичных данных **знаний**. Результаты классифицирования и районирования могут подтверждать некую начальную гипотезу или, наоборот, наметить новые представления, что можно охарактеризовать как **добыча данных** (data mining) и **извлечение знаний** (discovery knowledge) о предмете исследований. Эффективное решение задачи кластеризации данных с последующим районированием территории при полном и/или почти полном отсутствии априорной информации о структуре многомерных данных предложено Т. Кохоненом [1, 2]. Этот нейросетевой метод самоорганизующихся карт Кохонена (SOM) выполняет нелинейный кластерный анализ многомерных полей данных. Методы кластеризации на основе классического подхода Кохонена и его модификаций успешно применялись при решении широкого спектра задач фундаментальных и прикладных исследований. В геологии такой подход был впервые применен для районирования территории Казахстана по вещественным характеристикам геологической среды [3, 4].

Основное назначение SOM-карт заключается в преобразовании и отображении многомерных входных данных в виде (обычно) двухмерного массива выходных данных: выходной или топологической карты Кохонена.

Каждый элемент выходной карты – нейрон i описывается вектором весов $w = [w_{i1}, w_{i2}, \dots, w_{id}]^T$, имеющим ту же размерность d , что и размерность входных данных. Число нейронов в топологической карте определяется эвристически:

$$N_n \approx 5 \sqrt{N_{vect}} \quad (1.1)$$

где N_{vect} равно числу входных векторов данных.

На стадии инициализации весам всех нейронов присваиваются случайные значения в интервале $0.0-1.0$. Перед началом работы все компоненты вектора входных данных также нормируются на 1.0 .

Принципиальным для процедуры SOM анализа является соревновательный принцип нахождения нейрона с набором весов, ближайшим к набору компонент выбранного вектора \mathbf{x} . В качестве меры расстояния $\| \cdot \|$ обычно применяется евклидово расстояние:

$$\|\mathbf{x}-\mathbf{w}_c\|=\min_i\{\|\mathbf{x}-\mathbf{w}_i\|\} \quad (1.2)$$

по минимуму которого и выбирается нейрон-победитель \mathbf{w}_c .

Второй принципиальный элемент алгоритма состоит в обучении не только нейрона-победителя, но и его «соседей», хотя и с меньшей скоростью; для этого нейроны выходного слоя упорядочиваются, образуя двухмерные решетки, в которых положение нейронов маркируется вектором \mathbf{r} :

$$\begin{aligned} \mathbf{w}_i(t+1) &= \mathbf{w}_i(t) + \eta(t) A_{ci}(t) [\mathbf{x}(t) - \mathbf{w}_i(t)] \\ A_{ci}(t) &= A(\|\mathbf{r}_c - \mathbf{r}_i\|, t) \end{aligned} \quad (1.3)$$

где t – шаг обучения;

$\mathbf{x}(t)$ – случайно выбранный входной вектор на шаге t ;

$\eta(t)$ – темп обучения;

$A_{ci}(t)$ – функция соседства.

При гауссовской форме функции соседства она равна единице для нейрона-победителя с индексом c и экспоненциально уменьшается с расстоянием. Как темп обучения $\eta(t)$, так и радиус взаимодействия нейронов $A_{ci}(t)$ постепенно уменьшаются в процессе обучения, так что на конечной стадии обучения адаптируются веса только нейронов-победителей.

Для наглядной интерпретации с визуализацией результатов работы карты Кохонена в начале 90-х годов был предложен метод U -матрицы – унифицированной матрицы расстояний. U -матрица применяется для визуализации структуры кластеров, полученной на топологической карте Кохонена. Для этого в U -матрице между соседними ячейками топологической карты «вставляются» ячейки-анализаторы. Основная идея метода состоит в расчете расстояния между соседними ячейками карты Кохонена на основе использования той же самой метрики. Найденные величины заносятся в добавленные ячейки-анализаторы. Большое значение говорит о том, что веса данного нейрона сильно отличаются от окружающих. Таким образом, полосы из ячеек с большими значениями будут соответствовать границам между кластерами, а области ячеек с низкими значениями – самим кластерам.

Соответственно раскрашивая элементы U -матрицы, мы получаем наглядную картину кластеризации, являющуюся результатом работы алгоритма Кохонена.

Обычно на этих картах можно видеть несколько различающееся число центров кластеров. Второй этап кластеризации заключается в том, что за центры классов метода К-средних берутся результаты SOM-метода. Проводя классифицирование методом К-средних с различным числом центров, по критерию Девиса – Болдуина выбирается вариант с минимальным значением критерия:

$$DB = \frac{1}{c} \sum_{l \neq k}^c \max \left\{ \frac{S_c(Q_k) + S_c(Q_l)}{d(Q_{kl})} \right\}, \quad (1.4)$$

где c – число классов;

d – расстояние между классами k и l ;

S_c – внутриклассовое расстояние (стандарт).

Метод иерархически растущих самоорганизующихся карт – Growing Hierarchical Self-Organizing Maps (GHSOM)

Метод самоорганизующихся карт Кохонена обладает высокой эвристической ценностью.

В то же время метод имеет внутренние трудности. Прежде всего, он имеет статическую архитектуру. Число нейронов в топологической карте задается до начала работы алгоритма (1.1) и не может учесть сложную структуру данных. Интерпретация точных границ обнаруженных кластеров затруднена. Более того, выявление иерархических, определенным образом связанных между собой, структур представляет трудную задачу для классического метода.

Для преодоления этих затруднений сравнительно недавно (2002-2004 гг.) была разработана модель иерархически растущих самоорганизующихся карт, - Growing Hierarchical Self-Organizing Maps (GHSOM).

В методе иерархически растущих самоорганизующихся карт анализ начинается с одной SOM-карты. На дальнейших шагах анализа, – в зависимости от сложности структуры данных, – число SOM-карт последовательно увеличивается. Причем это увеличение может происходить двояким образом: «по горизонтали», детализируя структуру данных на выбранном уровне иерархии, и «по вертикали», обеспечивая переход на более детальный, более глубокий уровень анализа. Приведенная ниже схема иллюстрирует пути детализации анализа (рисунок 1.1).

На нулевом уровне анализ начинается с одной карты. На 1 уровне включаются четыре карты, каждая из которых на последующих уровнях распадается на различное, указанное на схеме число карт.

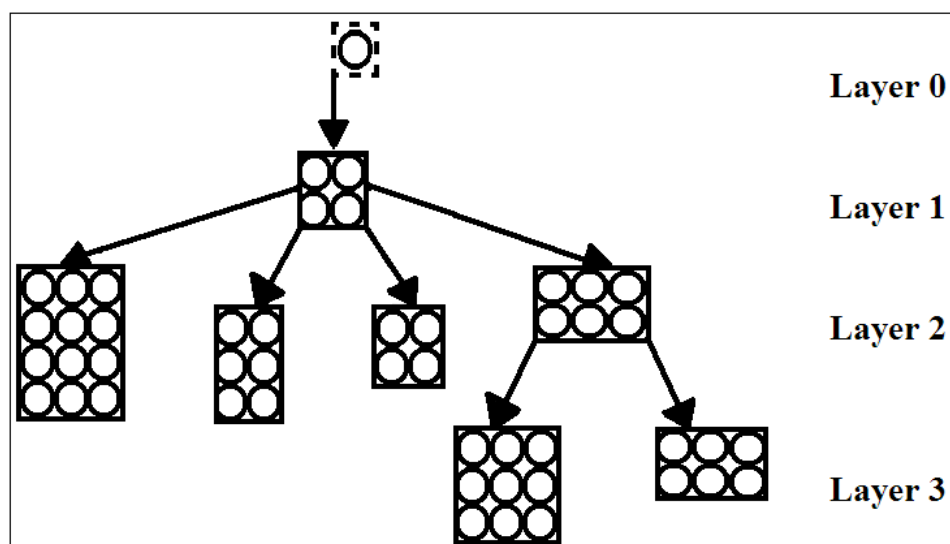


Рисунок 1.1 – Схема GHSOM анализа.

Алгоритм кластеризации на основе иерархически растущих самоорганизующихся карт – GHSOM

Подход GHSOM реализует новую архитектуру самоорганизованного обучения нейросети, в которой происходит как вертикальное развитие анализа данных по ниспадающим уровням иерархии, так и горизонтальная подстройка карт Кохонена в соответствии со степенью структурности входных данных.

На первом уровне анализ начинается с SOM карты, содержащей небольшое число ячеек - (2 x 2) или (2 x 3).

Расчет среднего разброса данных на карте этого уровня

$$MQE_1 = \frac{1}{u} \sum (mqe)_i \quad (1.5)$$

открывает путь для организации управления развитием анализа. В (1.5) u – обозначает число ячеек карты первого уровня, $(mqe)_i$ – среднее эвклидово расстояние между весовым вектором и экспериментальными данными в ячейке i . Соответственно MQE_1 дает средний разброс данных для карты первого уровня в целом.

Большая величина MQE_1 , превышающая определенную долю τ_1 полного разброса экспериментальных данных на нулевом уровне $(mqe)_0$

$$MQE_1 \geq \tau_1 \cdot (mqe)_0 \quad (1.6)$$

указывает на необходимость добавления новых ячеек SOM – карты на этом уровне, т.е. нового столбца или новой строки ячеек. Для выполнения этой процедуры находится ячейка карты e с наибольшим разбросом - error unit и ячейка d с наименьшим разбросом – dissimilar unit. Новая ячейка вставляется

между ячейками e и d . Приведенные далее рисунки 1.2 и 1.3 поясняют эту операцию.

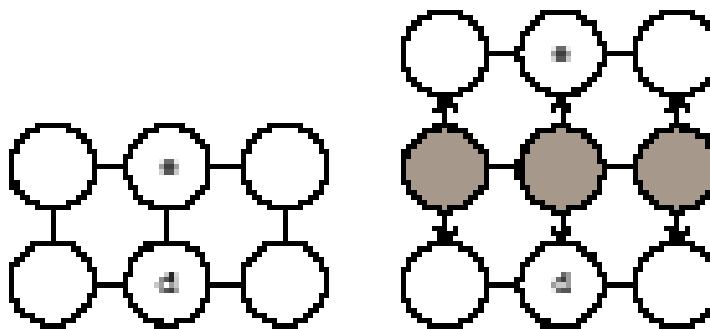


Рисунок 1.2 – Вставка строки.

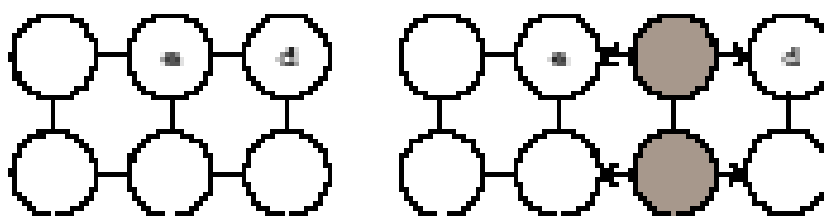


Рисунок 1.3 – Вставка столбца.

Вектор весов этой новой ячейки вычисляется как среднее значение своих соседей. После этого процедура оценки разброса данных на первом уровне повторяется заново. Ясно, что добавление новых ячеек возьмет на себя определенную долю разброса данных и новая оценка среднего разброса MQE_I в этом случае должна уменьшиться.

Если неравенство (1.6) выполнится, мы переходим на следующий этап анализа, на проверку необходимости перехода на следующий уровень иерархии. В этом случае проверяется необходимость анализа на новом уровне иерархии для ячеек первого уровня с большим разбросом данных, превышающим долю τ_2 полного разброса экспериментальных данных на нулевом уровне $(mqe)_0$

$$(mqe)_i > \tau_2 \cdot (mqe)_0 \quad (1.7)$$

Для этих ячеек на втором уровне итеративно повторяется анализ, уже выполненный на первом уровне иерархии.

По порядку величины коэффициент τ_1 соответствует десятым долям единицы, т.е. 0.6; 0.7 ... 0.9, а коэффициент τ_2 соответствует сотым долям единицы – 0.06; 0.07 ... 0.09, т.е. на порядок меньше.

Невыполнение неравенства (1.7) соответствует требованию прекращения анализа. В этом случае величины разброса массива экспериментальных данных по ячейкам и по картам при выбранных значениях τ_1 и τ_2 признаются

допустимыми, т.е. иерархическая система кластеризации признается выполненной удовлетворительно.

Как видим, на SOM-картах, в том числе и при использовании процедуры GHSOM, выделяются классы многомерных данных, которые фиксируются положительными экстремумами частоты встречаемости точек классифицируемых множеств в отдельных ячейках SOM-карты. Однако, однозначные результаты кластеризации получаются при более или менее четком естественном разделении данных на классы. Если такого деления нет, а именно с такими данными обычно имеем дело при прогнозе и поисках рудных объектов, то и выделение классов не вполне однозначно. Поэтому в разработанной нами на основе подхода Кохонена программе RegSOM (описание алгоритма в п.1.2) предусмотрены пять основных операций: а) построение нескольких SOM-карт и выделение на каждой из них положительных экстремумов, б) поиск и отбор по специальному алгоритму наиболее значимых положительных экстремумов, в) по данным анализа таблицы расстояний между положительными экстремумами, ручной отбор значимых экстремумов, г) использование отобранных положительных значимых экстремумов в качестве центров кластеризации методом К-средних, д) анализ и сохранение получаемых данных (в таблице распечатываются статистические параметры всех получаемых классов).

1.2. Алгоритм, применяемый в программе REGSOM9

1.2.1. Поиск значимых экстремумов на основе нескольких SOM-карт. Строится несколько SOM-карт по алгоритму п.1.2.2. Из построенных карт выбирается SOM-карта с минимальным количеством экстремумов, условно названная базовой. На ней вычисляется среднее расстояние между эпицентрами $L_{\text{ср}}$. Далее из других SOM-карт последовательно извлекаются экстремумы, которые сравниваются с экстремумами базовой карты. Если расстояние до ближайшего экстремума меньше $L_{\text{ср}}$ – происходит слияние извлеченного экстремума с ближайшим экстремумом на базовой карте, если больше $L_{\text{ср}}$ – образуется новый центр класса. При слиянии экстремумов их значения усредняются с учетом веса в каждом эпицентре W_i .

$$W_i = \frac{n_i}{(n/m)},$$

где W_i – вес i -го эпицентра; n_i – количество точек в эпицентре; n – общее количество точек данных; m – количество ячеек SOM-карты. В результате получены положительные экстремумы, и таблица расстояний между ними. Затем переходим к п.1.2.3. (*Анализ таблицы расстояний между экстремумами*)

1.2.2. Вычисление SOM-карты. Карта Кохонена заполняется исходными значениями в зависимости от настроек параметров: нулями, либо случайными значениями от 0 до 1, либо случайными числами с гистограммной функцией распределения (50 интервалов).

Далее происходит заброс последовательно всех объектов данных на поиск нейрона-победителя. Вектор объектов сравнивается по расстоянию с вектором каждого нейрона. Нейрон с минимальным расстоянием от объектов данных будет считаться победителем.

Когда нейрон-победитель найден, объект данных вливается на SOM-карту следующим образом: нейрону-победителю добавляется 1 к количеству захваченных предыдущих объектов данных, затем векторное значение нейрона победителя, значения первого ряда нейронов-соседей и второго ряда нейронов-соседей вычисляется по следующей формуле:

$$Tcell_j = Tcell_old_i * (1 - P) + Tpoint_j * P$$

Где $Tcell_j$ – новое значение по j -характеристике вектора в ячейке-нейроне SOM-карты, после добавления нового объекта данных;

$Tcell_old_i$ – исходное значение по j -характеристике вектора в ячейке-нейроне SOM-карты;

$Tpoint_j$ – нормированное значение по j -характеристике вектора в объекте данных, добавляемого к ячейке SOM-карты;

P – коэффициент влияния объекта данных на ячейку-нейрон SOM-карты. Зависит от номера итерации обучения, количества предыдущих объектов, захваченных нейроном, от расположения нейрона.

$$P = \frac{1}{I_{\text{сигма0}}} * \frac{1}{(1 + N^{\text{сигма1}})} * \frac{1}{r^{\text{сигма2}}}$$

где I – номер итерации обучения. Итерация обучения – это полный цикл, когда все объекты исходных данных поданы по одному разу для обучения SOM-карты;

сигма0 – коэффициент, корректирующий степень влияния номера итерации;

N – количество предыдущих объектов, захваченных нейроном;

сигма1 – коэффициент, корректирующий степень влияния количества предыдущих объектов, захваченных нейроном

r – расположение ячейки SOM-карты относительно нейрона-победителя. У нейрона победителя принимает значение -1, у первого ряда соседей принимает значение – 2, у второго ряда соседей принимает значение – 3

сигма2 – коэффициент, корректирующий степень влияния положения нейрона относительно нейрона-победителя. В самом нейроне-победителе влияние коэффициента отсутствует, т.к. у него $r = 1$, а единица в любой степени даст единицу. Этим коэффициентом управляют первый и второй ряд нейронов-соседей.

Когда итерация по забросу последовательно всех объектов и вычисление по ним SOM-карты завершена, векторные значения в нейронах сохраняются, а количество захваченных объектов данных в нейронах обнуляется. Начинается следующая итерация обучения, и так продолжается заданное количество повторений.

1.2.3. Анализ таблицы расстояний между экстремумами. Ручной отбор центров. Оператор, проанализировав таблицу расстояний между экстремумами, если видит малозначимые экстремумы с низким весом, то отбрасывает их, если находит близкорасположенные экстремумы, объединяет их в один экстремум.

1.2.4. Вычисление K-средних. Из выбранных эпицентров инициализируются центры классов, каждый со своим векторным значением. Далее происходит заброс последовательно всех объектов данных на поиск ближайшего центра классов. Каждый раз, когда центр классов объекта данных найден, его номер запоминается в нем. Когда итерация по забросу последовательно всех объектов завершена, векторные значения в нейронах пересчитываются, как усредненные значения по попавшим в них объектам данных. Для каждого центра классов новое значение по j-характеристике вектора будет вычисляться по формуле:

$$M_{cell_j} = \frac{\sum_{i=0}^n t_i}{n}$$

Где M_{cell_j} – новое значение по j-характеристике вектора в центре класса, после итерации по забросу всех объектов данных;

t_i - значение по j-характеристике вектора i-го объекта данных, присвоенного к этому центру классов

n – количество объектов данных попавших в центр класса

Количество захваченных объектов данных в центрах классов обнуляется. Начинается следующая итерация вычисления k-средних, и так продолжается заданное количество повторений.

1.2.5. Выдача готовых отчетов. Сохранение результатов районирования. Результатом вычислений будет итоговый отчет с таблицей расстояний между положительными экстремумами SOM-карты, с таблицей средних значений характеристик по классам и таблице расстояний между классами. Классифицированные данные сохраняются в указанный файл.

1.3. Описание программы RegSOM9.

Программа REGSOM предназначена для классификации объектов многомерных данных при помощи построения карт Кохонена. В программе условно можно выделить следующие операции вычислений: построение нескольких SOM-карт и выделение на каждой из них положительных экстремумов; поиск и отбор по специальному алгоритму наиболее значимых положительных экстремумов; ручной отбор значимых экстремумов по данным анализа таблицы расстояний между положительными экстремумами;

использование отобранных положительных значимых экстремумов в качестве центров кластеризации методом К-средних. В программе имеется окно настроек параметров вычислений, генерируются отчеты по промежуточным результатам вычислений и один отчет статистики по полученным в конечном результате классам, результаты вычислений сохраняются.

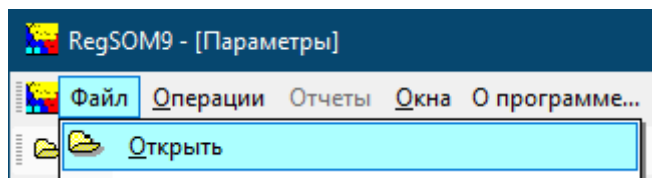


Рисунок 1.4 Меню «Файл» подменю «Открыть».

Работа с программой начинается с открытия файла данных. В главном меню «Файл» нажимаем подменю «Открыть» (Рисунок 1.4) и в появившемся стандартном диалоговом окне выбираем нужный файл. Формат файлов должен соответствовать стандарту, принятому в программном комплексе ELAN: первая строка – количество признаков в файле; вторая строка – наименования признаков; третья и последующие строки – данные.

Пример файла:

```
15
xyzabc
1.2 1.3 6.5 2.6 4.6 4.6
34.4 354.65 5.3 45.45 45.32 34.24
.....
и т.д.
```

После загрузки файла данных появится форма параметров вычисления классификации (Рисунок 1.5). Ниже меню и «быстрых кнопок» выведется информация: количество точек и имя файла.

Количество точек: 150 Имя файла: C:\ShareVM\ELAN\ELAN_projects\Project3\REGSOM\test_SOM\IRIS.TXT

Выбор	Название	Вес	Min	Max
+	SepalL	1	4.30	7.90
+	SepalW	1	2.00	4.40
+	PetalL	1	1.00	6.90
+	PetalW	1	0.10	2.50
	type	1	1.00	3.00

Параметры SOM-карты

Число итераций: 5

Количество нейронов: 64

Метод инициализации: Равномерное случайно

Последовательность выборки данных: с начала

Сигма0: 0.8

Сигма1: 1

Сигма2: 2

☒ Нормировать данные

Параметры К-средних

Количество SOM_карт: 3

Число итераций: 5

Количество нейронов: 64

Сигма0: 0.8

Сигма1: 1

Сигма2: 2

Число итераций К-средних: 5

Сортировка классов

Центры классов

1 | 2

Операции

1. Вычислять экстремумы
2. Вычисление К-средних
3. Просмотреть и сохранить итоговый отчет
4. Сохранить классифицированные данные

Рисунок 1.5 Вид формы параметров вычисления программы RegSOM9.

В левой части формы параметров программы расположена группа «Выбор данных». Помечаем знаком «+» в колонке «выбор» признаки, которые будут участвовать в расчетах классификации.

Выбор данных				
Выбор	Назван	Вес	Min	Max
+	SepalL	1	4.30	7.90
+	SepalW	1	2.00	4.40
+	PetalL	1	1.00	6.90
+	PetalW	1	0.10	2.50
	typen	1	1.00	3.00

Рисунок 1.5 Группа параметров «Выбор данных».

Чтобы дополнительно задать для признака его «Вес», «Min» и «Max», в таблице из группы «Выбор данных» выбрать соответствующее поле двойным кликом левой кнопки мыши или переведя на него курсор и нажать клавишу «ENTER». В появившемся окошке (рисунок 1.7) ввести новое значение и нажать кнопку «OK».

Рисунок 1.7 Окно ввода нового значения параметров признака.

Параметры «Min» и «Max» являются фильтрами, ограничивают выборку исходных данных, отсекая те, которые не попадают в диапазон «Min» и «Max» по значению указанного признака. Параметр «Вес» определяет для каждой характеристики величину нормирования для дальнейших вычислений (вес будет учтен только для характеристик, помеченных «галочкой» в правой части окна, для других характеристик расчет не будет производиться). Данные нормируются следующим образом:

$$tn_{ij} = \frac{(t_{ij} - t_{\min_j}) \cdot w_j}{(t_{\max_j} - t_{\min_j})},$$

Где tn_{ij} — нормированное значение i -го объекта данных j -той характеристики;

w_j — «вес» j -той характеристики;

t_{ij} — значение i -го объекта данных j -той характеристики;

t_{\min_j} – минимальное значение j -той характеристики;

t_{\max_j} – максимальное значение j -той характеристики.

Группа настроек «Параметры SOM-карты» (рисунок 1.8) управляет процессом при каждом вычислении SOM-карты

«Число итераций» – количество итераций обучения для построения SOM-карты;

«количество нейронов» – выбирается количество нейронов SOM-карты, значение по умолчанию 64 нейрона.

«Метод инициализации» – задает метод заполнения векторов значений всех нейронов SOM-карты перед началом обучения:

а) обнуленные значения – вектора по всем проекциям принимают значение $= 0$;

б) «равномерное случайное распределение» – вектора по j -тым проекциям принимают случайное значение от 0 до w_j (w_j – «вес» j -той характеристики);

в) «заданная функция случайного распределения» – вектора по j -тым проекциям принимают согласно гистограмме распределения j -той характеристики случайное значение от 0 до w_j . Гистограмма распределения делится на 50 интервалов;

«Последовательность выборки данных» – метод извлечения данных для обучения при построении SOM-карты или при вычислении К-средних. Данные могут извлекаться последовательно, в обратной последовательности или случайным отбором.

«сигма0» – коэффициент, учитывающий количество итераций обучения. При увеличении коэффициента с каждой итерацией обучения сильнее уменьшается воздействие объектов на нейроны-победители и на их соседей. Пределы изменения «сигма0» от 0 до 1, рекомендуемое значение 0,8;

«сигма1» – коэффициент влияния объекта на нейрон-победитель и соседние с ним нейроны. При увеличении коэффициента влияние уменьшается. Пределы изменения «сигма1» от 0 до 2, рекомендуемое значение 1;

«сигма2» – коэффициент, снижающий влияние объекта на соседние с нейроном-победителем нейроны. Пределы изменения «сигма2» от 0 до 5, рекомендуемое значение 2;

Флажок «Нормировать данные» – в отмеченном состоянии указывает, что характеристики, участвующие в построении SOM-карты, перед вычислениями будут нормироваться. По умолчанию отмечен.

Параметры SOM-карты

Число итераций:
5

Количество нейронов:
64

Метод инициализации:
Равномерное случайно

Последовательность выборки данных:
с начала

Сигма0
0.8

Сигма1
1

Сигма2
2

☒ Нормировать данные

Парам. поиска экстремумов

Количество SOM-карт
3

Параметры К-средних

Число итераций К-средних:
5

Сортировка классов

Рисунок 1.8 Группы настроек «Параметры SOM-карты» и «Параметры К-средних».

Группа настроек «Параметры поиска экстремумов» (рисунок 1.8) управляет процессом поиска экстремумов.

«Количество SOM-карт» - количество карт, на которых будет проводиться вычисление экстремумов. Из построенных карт выбирается SOM-карта с минимальным количеством экстремумов, базовая. На ней вычисляется среднее расстояние между эпицентрами L_{cp} . Далее из других SOM-карт последовательно извлекаются экстремумы, которые сравниваются с экстремумами базовой карты. Если расстояние до ближайшего экстремума меньше L_{cp} – происходит слияние извлеченного экстремума с ближайшим экстремумом на базовой карте, если больше L_{cp} – образуется новый центр класса. При слиянии экстремумов их значения усредняются с учетом веса в каждом эпицентре W_i .

$$W_i = \frac{n_i}{(n/m)},$$

где W_i – вес i -го эпицентра; n_i – количество точек в эпицентре; n – общее количество точек данных; m – количество ячеек SOM-карты.

Группа настроек «Параметры К-средних» (рисунок 1.8) управляет процессом вычисления К-средних.

«число итераций К-средних» – количество итераций для вычисления К-средних.

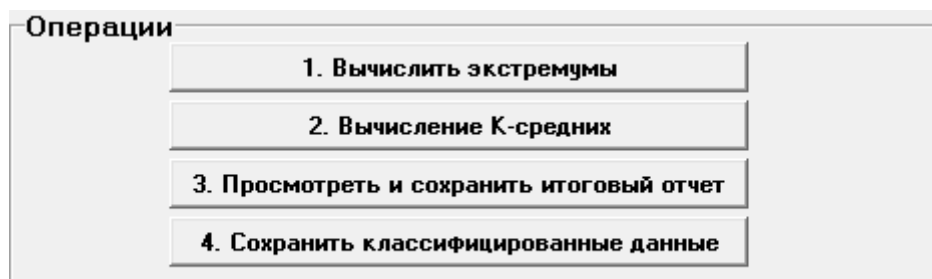


Рисунок 1.9 Группа кнопок «Операции»

В нижней части по центру главной формы помещена группа кнопок «Операции» (рисунок 1.9) и включает в себя четыре управляющие кнопки: «1. Вычислить экстремумы»; «2. Вычисление К-средних»; «3. Просмотреть и сохранить итоговый отчет»; «4. Сохранить классифицированные данные». Кнопки из группы «Операции» на основной форме дублируют существующие основные кнопки главного меню, и их назначение выделить основные команды программы в логическом порядке.

Приступаем к вычислению экстремумов, нажимаем кнопку **1. Вычислить экстремумы**. Когда закончится расчет экстремумов, откроется отчет «Расстояние между положительными экстремумами SOM-карты (Программа RegSOM)» (рисунок 1.10). Экстремумы базовой карты выводятся в таблицу расстояний между экстремумами, которая предназначена для анализа расстояний.

RegSOM8 - [Отчет по расстояниям между экстремумами одной карты]

Файл Операции Отчеты Окна О программе...

закрывать отчет

Расстояние между положительными экстремумами SOM-карты (Программа RegSOM).

Исходный файл: 9.txt
 $M = 0.551$
 $Me = 0.469$
 $S = 0.338$

номер карты	номер экстр.	вес	расстояния												
шар	№	w	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13
1	1	12.8	0	0.172	1.144	0.956	0.79	0.755	1.189	0.791	0.781	1.065	1.018	0.319	0.879
1	2	15.36	56	0	1.175	0.956	0.779	0.692	1.219	0.743	0.782	1.08	1.03	0.154	0.855
1	3	8.96	932	960	0	0.284	0.455	0.69	0.173	0.595	0.46	0.14	0.205	1.175	0.494
1	4	2.987	762	762	157	0	0.191	0.411	0.337	0.313	0.238	0.152	0.112	0.932	0.247
1	5	8.96	613	603	311	73	0	0.256	0.487	0.173	0.119	0.336	0.272	0.75	0.169
1	6	7.253	582	525	523	271	131	0	0.701	0.109	0.292	0.562	0.493	0.616	0.24
1	7	8.107	973	1000	57	205	340	533	0	0.622	0.459	0.241	0.227	1.212	0.474
1	8	2.987	614	570	438	183	57	0	462	0	0.244	0.464	0.405	0.682	0.198
1	9	2.987	605	606	316	115	8	164	315	121	0	0.364	0.275	0.759	0.147
1	10	2.987	861	875	27	38	204	408	119	319	229	0	0.111	1.068	0.383
1	11	2.133	819	829	86	2	146	346	105	266	149	1	0	1.013	0.29
1	12	7.68	189	40	960	741	577	457	993	516	585	864	814	0	0.807
1	13	1.707	693	671	346	124	53	117	328	80	34	246	162	628	0

Рисунок 1.10 Отчет «Расстояние между положительными экстремумами SOM-карты (Программа RegSOM)».

По отчету «Расстояние между положительными экстремумами SOM-карты» проводится анализ, какие экстремумы являются обособленными, а какие находятся на близком расстоянии. Обособленные экстремумы принимаются за центры классов, близко расположенные дублирующие экстремумы объединяются. На основной форме в правой ее части находится группа редактирования центров классов (рисунок 1.11). Можно менять количество классов, чтобы в один класс указать несколько экстремумов, их номера перечисляются через запятую.

Центры классов	
1	1
2	2, 4
3	3
4	5
5	6

Рисунок 1.11 Редактирование центров классов.

В группе настроек «Параметры К-средних» (рисунок 1.8) оставить значения по умолчанию или провести перенастройку. Кнопка «Сортировка классов» открывает окно для изменения параметров сортировки классов (рисунок 1.12). Построенные в результате окончательных расчетов классы отсортируются и пронумеруются по указанному параметру и типу сортировки.

Сортировка классов

Выбор характеристик

- ☒ SepalL
- ☐ SepalW
- ☐ PetalL
- ☐ PetalW

Сортировка

☒ По убыванию

☐ По возрастанию

Cancel Ok

Рисунок 1.12 Окно параметров сортировки классов в отчете.

Запускаем операцию вычисления классификации методом К-средних, нажимаем кнопку **2. Вычисление К-средних**.

Когда классификация вычислена, для просмотра нажимаем кнопку **3. Просмотреть и сохранить итоговый отчет**. Откроется отчет «Классификация методом SOM-карт (Программа RegSOM)» (рисунок 1.13). Отчет включает в себя несколько таблиц: «Расстояние между положительными экстремумами SOM-карты», «Статистика по выделенным классам», «Расстояния между классами».

RegSOM9 - [отчет о классификации]

Файл Операции Отчеты Дина О программе...

сохранить отчет

ОТЧЕТ. КЛАССИФИКАЦИЯ МЕТОДОМ SOM-КАРТ (ПРОГРАММА REGSOM).

Исходный файл: IRIS.TXT
M = 0.56
Me = 0.546
S = 0.305

Расстояние между положительными экстремумами SOM-карты.

номер карты	номер экстр.	вес	расстояния										
кар	№	w	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11
1	1	20.053	0	1.207	0.334	1.149	0.952	0.818	0.578	0.932	0.692	0.219	0.75
1	2	10.24	1000	0	1.131	0.142	0.263	0.413	0.771	0.351	0.621	1.048	0.501
1	3	11.52	180	928	0	1.083	0.89	0.809	0.714	0.935	0.772	0.179	0.757
1	4	9.813	944	0	883	0	0.261	0.372	0.705	0.283	0.568	0.995	0.42
1	5	5.973	760	113	702	111	0	0.179	0.546	0.212	0.398	0.797	0.293
1	6	5.547	634	254	626	216	34	0	0.37	0.15	0.223	0.689	0.151
1	7	1.707	408	590	536	528	379	214	0	0.433	0.162	0.544	0.304
1	8	15.36	741	196	744	132	66	7	273	0	0.293	0.812	0.196
1	9	8.107	516	449	591	400	240	76	19	141	0	0.618	0.209
1	10	2.987	72	850	35	800	614	513	377	628	446	0	0.63
1	11	2.133	570	336	577	261	142	8	152	50	63	457	0

Среднее значение характеристик по классам

Class	N	Отклон. от экстр.	SepaL	SepaW	PetalL	PetalW
1-11	150	-	5.84	3.05	3.76	1.20
1	18	0.04	4.70	3.04	1.41	0.18
2	12	0.17	7.48	3.13	6.30	2.05
3	12	0.05	5.39	3.92	1.53	0.27
4	19	0.08	6.55	3.12	5.50	2.25
5	11	0.03	6.61	3.10	4.65	1.48
6	9	0.01	6.16	2.89	4.43	1.38
7	4	0.11	5.00	2.30	3.28	1.02
8	20	0.07	6.13	2.78	5.14	1.78
9	14	0.05	5.76	2.44	4.09	1.19
10	20	0.10	5.05	3.45	1.48	0.28
11	11	0.07	5.52	2.85	4.21	1.37

Расстояния между классами.

номер класса	номер ячейки	кол-во точек	расстояния										
№	k	n	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11
1	53	18	0	1.374	0.418	1.22	0.937	0.824	0.57	1.006	0.73	0.203	0.728
2	15	12	1.374	0	1.284	0.303	0.438	0.568	1.018	0.459	0.758	1.298	0.717
3	48	12	0.418	1.284	0	1.162	0.876	0.828	0.81	1.018	0.852	0.218	0.787
4	24	19	1.22	0.303	1.162	0	0.352	0.452	0.839	0.274	0.615	1.154	0.526
5	8	11	0.937	0.438	0.876	0.352	0	0.164	0.634	0.239	0.392	0.866	0.333
6	59	9	0.824	0.568	0.828	0.432	0.164	0	0.473	0.211	0.236	0.781	0.182
7	35	4	0.57	1.018	0.81	0.839	0.634	0.473	0	0.582	0.269	0.649	0.344
8	11, 12, 20, 21	20	1.006	0.459	1.018	0.274	0.239	0.211	0.582	0	0.35	0.971	0.288
9	4, 60	14	0.73	0.758	0.852	0.615	0.392	0.236	0.269	0.35	0	0.746	0.197
10	25	20	0.203	1.298	0.218	1.154	0.866	0.781	0.649	0.971	0.746	0	0.709
11	42	11	0.728	0.717	0.787	0.526	0.333	0.182	0.344	0.288	0.197	0.709	0

Рисунок 1.13 Отчет «Классификация методом SOM-карт (Программа RegSOM).

Чтобы сохранить отчет, в левом верхнем углу отчета (рисунок 1.13) нажимаем кнопку **сохранить отчет**, откроется диалоговое окно (рисунок 1.14).

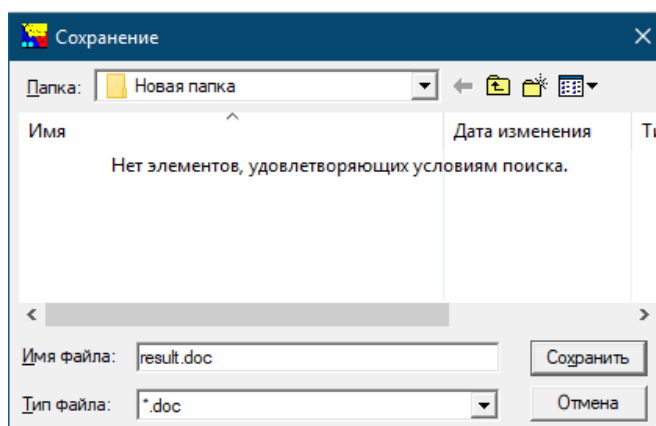


Рисунок 1.14 Диалоговое окно сохранения отчета.

Отчет сохранится в формате MS Word с расширением *.doc. Программа выведет информационное сообщение о завершении операции сохранения (рисунок 1.15)

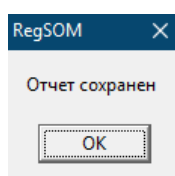


Рисунок 1.15 Уведомление о завершении сохранения файла отчета.

Сохранение данных результатов вычисления классификации запускается кнопкой **4. Сохранить классифицированные данные**. Откроется диалоговое окно для указания имени и пути сохраняемого файла (рисунок 1.16).

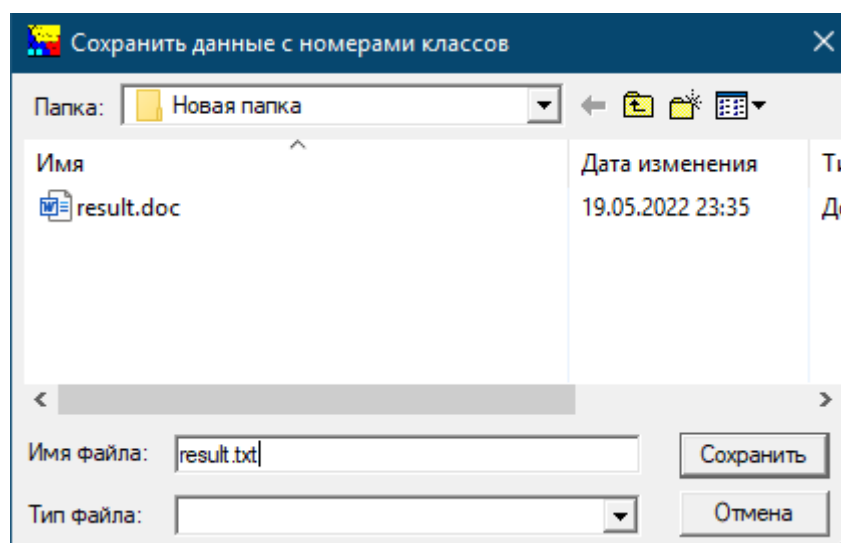


Рисунок 1.16 Диалоговое окно сохранения данных результатов вычисления классификации.

После успешного завершения операции сохранения классифицированных данных в файл программа выведет на экран информационное сообщение (рисунок 1.17).

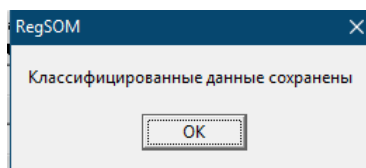


Рисунок 1.17. Уведомление о завершении сохранения результатов вычисления классификации в файл.

В результирующем файле к исходным данным добавятся признаки: «NClass»-номер класса и «RClass»-радиус удаления от центра класса (рисунок 1.18). «NClass» является итоговым результатом вычислений, указывающий на принадлежность каждой точки данных к определенному классу.

Текстовый файл с результатом классифицированных данных:

7						
SepalL	SepalW	PetalL	PetalW	typen	NClass	RClass
7.2	3.6	6.1	2.5	3	1	0.1894
7.6	3	6.6	2.1	3	3	0.2257
.....						
6.4	3.2	5.3	2.3	3	2	0.2084

1.4. Использование программы районирования на территории Казахстана.

В качестве примера кластеризации многомерных данных рассмотрим районирование свободной от покрова рыхлых отложений территории Казахстана.

Исходными данными послужила собранная в банке информация о средней доли основных типов горных пород и среднем силикатном составе элементарных площадей, соответствующих 1 листу масштаба 1: 100 000 (размер ячеек примерно 37х37 км; общее количество 1017). Общее число характеристик 31: 20 – доля основных типов пород, %; 9 – химический состав; 2 – пространственные координаты x и y (таблицы 1.4.1 и 1.4.2).

Таблица 1.1 – Усредненные методом SOM координаты и концентрации пород в выделенных участках территории Казахстана.

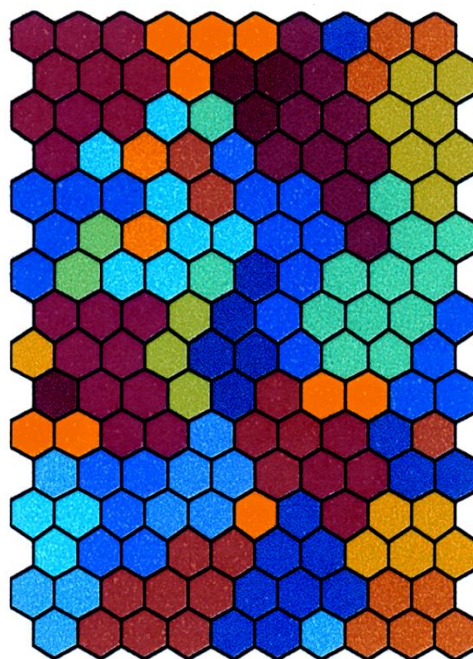
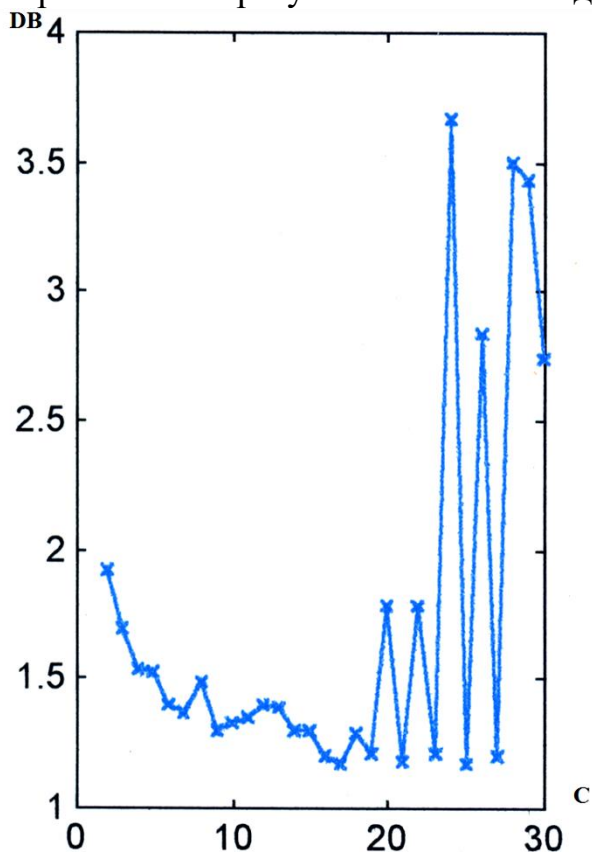
N	X	Y	sil	car	arg	ale	san	con	lip	daz	and	baz	tkc	tss	tsos	gr	grd	dio	gab	ubr	sien	tr	SiO ₂	Al ₂ O ₃	K ₂ O	CaO	MgO	Fe ₂ O ₃	FeO	TiO ₂	CO ₂
2	48	- 2,5	1	4,2	8,3	14,9	16,2	2,66	4,6	1,31	3,53	3,31	2,53	0,87	2,26	22,64	8,65	0,92	1,27	0,30	0,30	0,28	64,69	12,86	2,88	5,84	2,14	2,52	2,07	0,61	4,22
4	39	- 20	5,1	4,4	11	14,4	16,3	4,4	3,6	0,98	2,57	1,96	2,18	3,91	1,10	22,77	2,73	1,26	0,19	0,11	0,14	0,46	65,94	12,31	2,79	5,64	1,96	2,70	1,81	0,57	4,35
6	36	- 23	1,1	2,4	2,2	4,12	- 6,99	4,77	20	4,89	9,36	5,88	11,24	1,91	6,33	9,73	2,65	2,15	0,38	0,05	0,33	3,34	65,26	13,82	3,04	4,94	2,10	2,56	2,26	0,60	2,72
8	16	- 7,6	3,4	22	11	12,2	18	4,56	3,8	0,66	2,80	2,04	4,08	0,36	0,93	5,57	7,22	0,42	0,18	0,19	0,23	0,02	54,42	10,17	2,18	12,72	3,14	2,34	1,47	0,49	11,67
10	42	- 10	2,8	3,4	4,5	11,1	16,2	6,58	2,7	1,98	9,92	6,15	1,82	1,85	4,85	11,36	7,15	4,78	0,69	0,41	0,72	0,96	63,87	12,92	2,39	6,29	2,51	2,87	2,43	0,67	3,87
12	- 3,7	- 2,8	11	5,1	9,1	8,43	11,6	3,31	1,7	0,33	2,03	15,0 0	1,04	2,14	2,00	3,73	1,18	0,56	6,62	14,61	0,06	0,23	61,22	11,87	1,88	7,65	3,28	3,68	2,97	0,74	4,97
14	31	- 11	1,3	4	2,9	5,71	8,06	3,41	18	14,2	10,79	1,78	2,21	0,70	0,64	12,50	6,95	1,65	0,13	0,15	2,69	2,47	65,06	13,80	2,99	5,33	1,87	2,33	1,94	0,55	3,38
16	23	1,8	3,1	9,8	3,3	9,96	15,4	4,65	3,1	0,54	13,96	4,86	0,21	1,21	0,32	10,52	12,57	3,95	0,08	1,21	1,11	0,03	60,42	12,32	2,28	8,57	2,68	2,56	2,12	0,59	6,34
18	17	3,6	6,1	8,9	15	4,94	8,69	2,85	3,5	0,07	2,93	3,91	0,12	0,76	0,75	17,19	19,65	1,84	0,05	2,95	0,17	0,01	61,29	12,66	2,67	7,58	2,50	2,66	2,07	0,57	5,79
20	13	- 12	5	14	15	14,5	20,3	7	3,1	1,63	3,77	3,41	2,56	0,16	0,68	4,71	2,86	0,07	0,33	0,61	0,12	0,01	59,37	10,68	2,21	9,92	2,75	2,73	1,62	0,57	8,85
22	15	- 1,2	5,2	9	12	21	29,9	5,2	1,1	0,13	1,96	2,06	0,30	2,00	0,69	4,30	3,77	0,28	0,20	0,32	0,24	0,01	63,50	10,59	2,13	8,15	2,36	2,78	1,57	0,59	7,16
24	- 1,4	1,8	7,8	12	9,8	8,99	12,5	1,75	0,9	0,68	4,36	8,16	0,42	0,94	1,87	4,15	9,57	4,94	3,90	7,26	0,08	0,06	57,28	11,73	1,99	9,98	3,35	3,07	2,50	0,65	7,63
26	8,1	0,3	5,3	10	13	12,1	18,7	3,84	1,4	0,42	6,75	4,87	0,58	2,36	3,05	5,33	5,71	2,80	0,93	2,06	0,26	0,04	59,79	11,70	2,16	8,95	2,90	2,97	2,13	0,64	7,11
28	33	- 28	1,6	7,1	5,6	7,63	12	5,88	5,7	2,28	6,09	4,19	3,53	1,8	1,93	20,14	8,49	4,80	1,01	0,36	1,91	1,94	62,55	13,05	2,97	7,17	2,59	2,64	2,34	0,80	5,20
30	35	- 23	2,2	4,9	4,1	6,51	10,5	4,8	9,4	3,21	5,66	4,24	7,03	1,2	2,44	22,39	4,55	2,63	0,74	0,14	1,01	2,43	64,60	13,04	2,98	5,82	2,09	2,41	2,03	0,58	5,07
32	18	- 26	2,1	36	12	12,2	18,3	6,4	1,1	0,26	0,68	0,87	1,26	0,47	0,45	3,81	1,09	0,27	0,26	0,15	0,62	0,13	44,20	7,98	1,74	18,51	4,03	2,02	1,07	0,41	17,95
34	17	- 21	3,5	20	12	16,6	23	8,29	3	0,56	1,81	1,61	2,12	0,38	0,60	3,74	1,66	0,33	0,19	0,45	0,29	0,08	56,36	9,62	2,04	12,18	2,99	2,44	1,34	0,51	11,41
36	26	- 3,1	12	13	3,3	14,3	20,5	11,1	3,3	0,72	6,77	4,56	1,94	0,66	0,58	2,97	1,93	0,45	0,07	0,39	1,20	0,10	61,75	9,72	1,80	9,72	2 58	2,81	1,48	0,58	14,73

Таблица 1.2 – Главные типы пород

Символ	Породы
sil	Кварциты, яшмы, фтаниты, спонголиты, вторичные кварциты, железистые, слюдистые, графитистые, фосфоритоносные кварциты; кремнистые, углеродисто-кремнистые сланцы
car	Известняки, доломиты, мергели, мраморы; кремнисто-глинисто-карбонатные породы
arg	Аргиллиты, глины, глинистые сланцы, филлиты; графитистые углисто-глинистые сланцы; кварц-полевошпатовые, кварц-хлорит-серицитовые, кристаллические сланцы, гнейсы по аргиллитам
ale	Алевролиты; полимиктовые, кремнисто-глинистые, туфогенные, вулканомиктовые, известковистые и др. алевролиты; кварц-хлорит-серицитовые, кристаллические сланцы, гнейсы по алевролитам
san	Песчаники полимиктовые, кварцевые, аркозовые, туфогенные, вулканомиктовые, известковистые и др.; кварц-полевошпатовые, серицит-хлорит-кварцевые, кварц-альбит-актинолитовые, кристаллические сланцы, гнейсы по песчаникам
con	Конгломераты, гравелиты, тиллиты, туфоконгломераты; вулканомиктовые, туфогенные, тиллитоподобные, фосфатизированные конгломераты
lip	Липараты, кварцевые порфиры, игнимбриты, щелочные липариты, трахилипариты; порфириты, кристаллические сланцы по липаритам
daz	Дацииты, кварцевые порфириты, трахидациты; порфириты, кристаллические сланцы по дацитам
and	Андезиты, порфириты, трахиандезиты; зеленые сланцы, порфиритоиды по андезитам
baz	Базальты, диабазы, спилиты, долериты, вариолиты, щелочные базальтоиды, трахибазальты; зеленые сланцы, порфиритоиды, амфиболовые сланцы, амфиболиты, эклогиты, гнейсы по базальтоидам
tk	Туфы кислого состава; порфириты, кристаллические сланцы по туфам кислого состава
tss	Туфы смешанного состава
tsos	Туфы среднего и основного состава; зеленые сланцы, порфиритоиды, амфиболиты по туфам среднего и основного состава
gr	Граниты, плагиограниты, аляскиты, щелочные граниты; гранито-гнейсы, плагиогнейсы, мигматиты
grd	Гранодиориты, гнейсы по гранодиоритам
dio	Диориты, кварцевые диориты, тоналиты, габбро-диориты; гнейсы по диоритам
gab	Габбро, нориты, щелочные габброиды; габбро-амфиболиты, амфиболиты по габбро
ubr	Ультраосновные породы и их дифференциаты; щелочные ультрабазиты, серпентиниты
sien	Сиениты, щелочные сиениты, кварцевые монзониты, кварцевые монцодиориты, монцограниты, граносиениты
tr	Трахиты, ортофиры, туфы трахитового состава

Построенная SOM-карта и график изменения критерия DB при кластеризации методом K-средних 1017 векторов показаны на рисунке 1.18 Как

видим, оптимум кластеризации достигается при выделении 15–17 классов. Нами принято разбиение на 16 классов (средние значения характеристик в каждом классе см. в таблице 1.1). На рисунке 1.19 показана схема районирования территории Казахстана, построенная на основе выполненной кластеризации (цифры на схеме соответствуют номерам классов в таблице 1.1). В целом районы соответствуют общему структурному плану геологического строения территории Казахстана. Довольно четко выделяются районы развития карбонатов (Каратау), кислых вулканитов (Центрально-Казахстанский пояс), кислых вулcano-плутогенных образований (СЗ Прибалхашье и Шу-Илийский пояс) и т.д. Следует отметить, что приведенная схема – только первый шаг. Для реального районирования, особенно если его конечной задачей является прогноз полезных ископаемых, необходимы введение целевых установок районирования, выбор характеристик наиболее сильно связанных с оруденением прогнозируемого типа (или типов), проверка устойчивости кластеров «шевелением» характеристик, введение или удаление пространственных координат. В частности, на схеме районирования территории Казахстана (рисунок 1.19) определенные сомнения вызывает район 2 (восточная часть Казахстана), в котором объединились достаточно различные структуры (Рудный Алтай, Калба-Нарымский район). Районирование без учета пространственных координат x, y , которые «стягивают» этот кластер, показало, что он распался на структуры, более соответствующие геологическому строению (рисунок 1.20). Карта с новым результатом анализа для этого района приведена на рисунке 1.18.



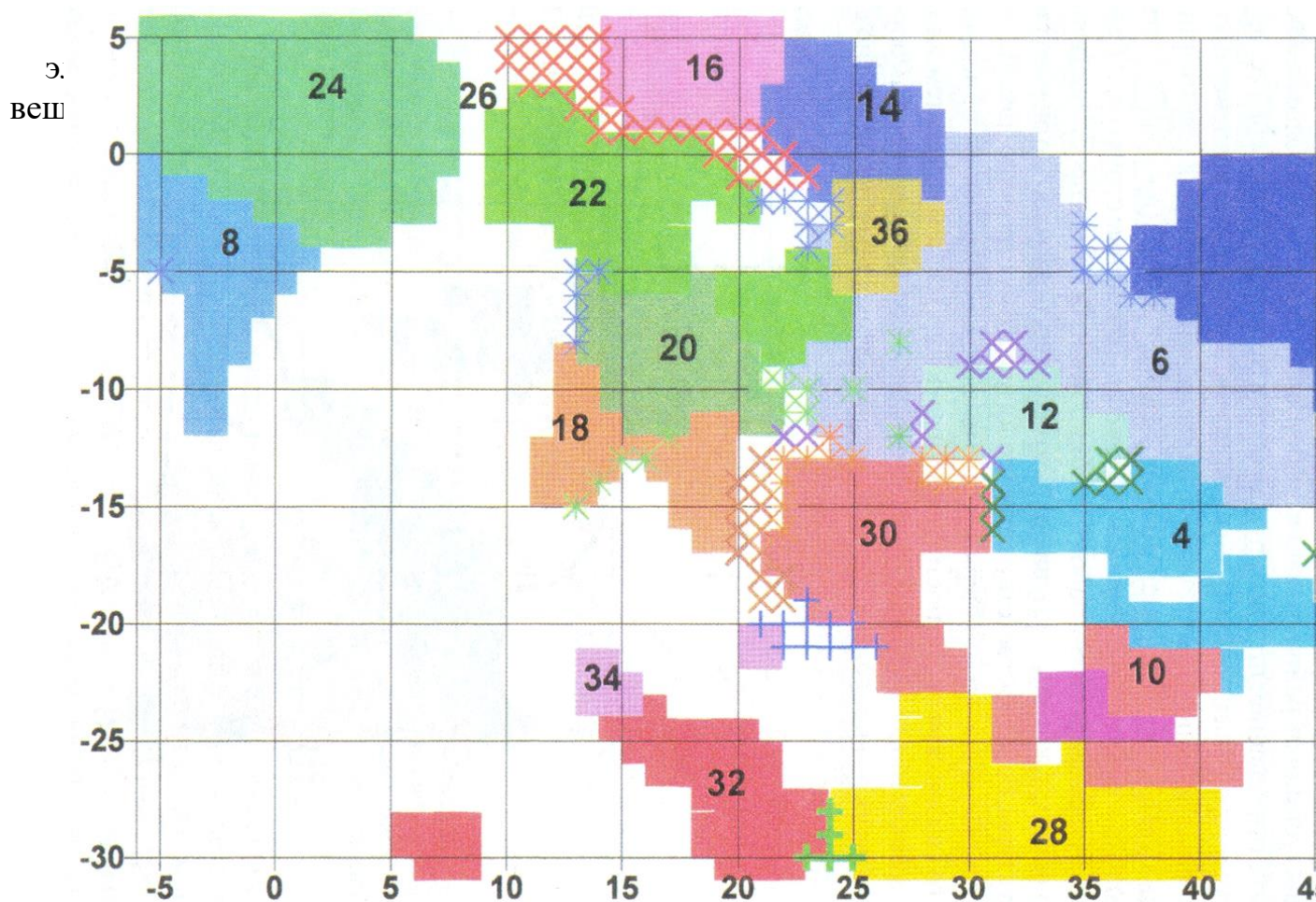


Рисунок 1.19 – Районирование территории Казахстана методом SOM по характеристикам геологической среды и пространственным координатам (пространственные координаты – 2 характеристики; доли основных типов горных пород в % – 20 характеристик; силикатный состав среды в % – 9 характеристик). Крапом выделены межкластерные зоны.

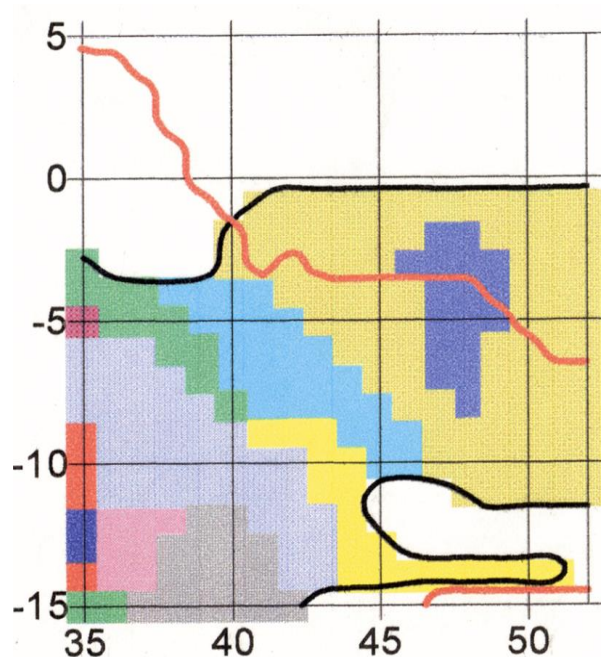


Рисунок 1.20 – Районирование территории Восточного Казахстана методом SOM с использованием характеристик геологической среды без пространственных координат

Доли основных типов горных пород в % – 20 характеристик; силикатный состав среды в % – 9 характеристик.

В заключение еще раз подчеркнем, что именно количественное описание и анализ геологических (в частности, рудообразующих) систем как систем многомерных, нелинейных и обладающих определенной способностью к самоорганизации, непрерывное совершенствование адекватных технологий прогноза поведения этих систем могут принципиально повысить уровень качества прогноза полезных ископаемых, обеспечив необходимую надежность оценки недр.

Литература к разделу 1

1. *Kohonen T.* Self-Organizing information of topologically correct features maps. Biological cybernetics, 1982, 3, p. 59-69.
2. *Kohonen T.* Self-Organizing Maps. Springer Series in information sciences. Vol 30, 3-rd edition, Springer-Verlag, 2001, 501 p.
3. *Локтионов А.А., Аргынова А.Х., Лось В.Л., Токарский Э.А.* Расстояние между объектами при прогнозе полезных ископаемых // Тр. Второй Всероссийской научной конференции «Проектирование инженерных и научных приложений в среде MATLAB», сек. 4, РАН, Компания SoftLine. Москва, 2004, С. 1278-1290.
4. *Локтионов А.А., Аргынова А.Х., Лось В.Л., Токарский Э.А.* Новые подходы и методы при прогнозе полезных ископаемых // Геонауки в Казахстане. Алматы, 2004, С. 239-251.

2. Разработка на основе методологии статистической физики программы решения квазитомаграфических задач программы и ее апробация на реальных геофизических данных

Одним из фундаментальных элементов научной оценки инвестиционной привлекательности геологических структур страны, на выявление в них месторождений полезных ископаемых, являются информационные и физико-математические исследования закономерностей рассеяния и концентрирования рудного вещества в земных недрах.

В частности, техническим заданием данной работы предусматривались разработки, на основе методологии статистической физики, алгоритмов решения томаграфических задач и соответствующих им программ, которые должны были быть апробированы на реальных геохимических данных, полученных на эталонных объектах.

Под термином геохимическая томография подразумевалось совокупность формальных алгоритмов, основанных на законах масса переноса в случайно структурированных, проницаемых средах, позволяющих экстраполировать поверхностные модельные геохимические поля в объём геологической среды.

Цель создания таких алгоритмов это возможность использования полученных пространственных структур геохимического поля для решения задач прогноза и оценки месторождения полезных ископаемых, а также для получения новых знаний о рассеяния и концентрирования рудного вещества в земных недрах.

2.1 Теоретическая основа

Теоретической основой геохимической квазитомаграфии являются следующие положения:

Топология геохимических ореолов поверхностных полей содержит информацию об объёмной структуре естественного геохимического поля.

Информация о связи поверхностного поля с объёмным полем носит теоретико-вероятностный характер, ввиду сложности и случайности вещественно проницаемых структур самой геологической среды.

Связь структуры поверхностного поля со структурой в объёме среды можно описать с помощью законов случайного масса переноса, в вещественно проницаемой среде, пользуясь методологией статистической физики применённой к системе уравнений гидродинамики и химической кинетики.

Перенос вещества в геологических средах исторически осуществлялось по одномерным каналам проницаемостей связанной пористости и трещиноватости под воздействием геоэлектрических сил.

Пространственная конфигурация одномерных каналов проницаемостей может быть сколь угодно причудливой и вероятно подчиняться законам больших чисел.

Пространство геологической среды не евклидова, поэтому метрика каналов проницаемостей в различных направлениях должна быть также различной.

Перенос и осаждение геохимического вещества по одномерному каналу проницаемости может быть описан в приближении системы одномерных уравнений гидродинамики и химической кинетики.

Множество одномерных каналов, с мигрирующим по ним веществом, с точки зрения статистической физики, можно рассматривать как некий статистический ансамбль состояний геологической среды, что позволяет рассчитывать характеристики рассеяния вещества как среднее по ансамблю состояний.

В связи с принятыми положениями теоретической основы геохимической томографии рассмотрим вначале **физическую статистику** одномерных каналов проницаемостей (Рис.1).

Введём в некоторой геологической среде систему координат такую, что плоскость (X,Y) совпадает с дневной поверхностью. А ось (Z) направлена вертикально вверх. В этом случае пространство геологической среды определится областью $Z < 0$.

Рассмотрим вначале случай каналов, по которым перенос вещества осуществляется в вертикальном направлении (Рис.2.1).

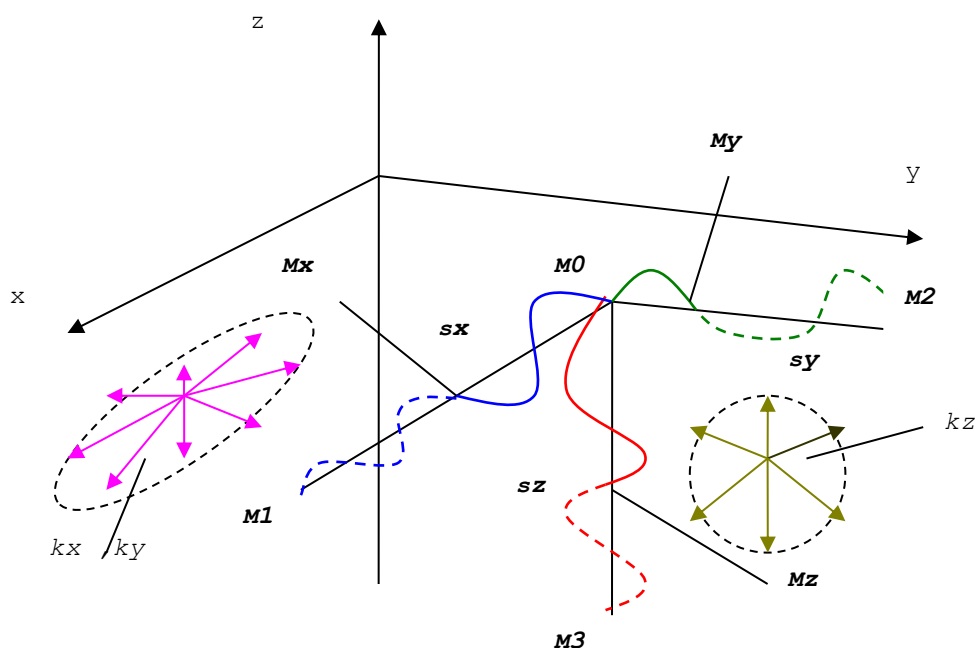


Рисунок 2.1. К вопросу о метрике каналов геохимических проницаемостей

Предположим, что в точку "M0", принадлежащей дневной поверхности, имеет место выход канала проницаемости "sz" с началом в точке "M3" и проходящий через точку "Mz" таким образом, что все три точки лежат на одной прямой, параллельной оси "Z". Такое определение данного канала, при массопереносе по нему геохимического вещества, будем интерпретировать как

перенос вещества в вертикальном направлении.

Предположим также, что в каждой точке канала "sz", произвольной конфигурации, но имеющего начало в точке "M3", а конец в точке "M0" и содержащее хотя бы одну точку пересечения прямой (M3, M0), которая параллельна оси "Z", вещество, в каждой точке канала, имеет возможность (в среднем) распространяться в "kz" направлениях с равной вероятностью. Предположим также, что кривая "sz" может быть проинтерпретирована последовательностью элементарных отрезков длины "rb", а суммарная длина отрезков составит величину "lsz".

В этом случае, такое множество точек, состоящее из "lsz/rb" отрезков можно рассмотреть как некоторый случайный, статистический ансамбль состояний, каждая из точек которого имеет возможность реализации в "kz" направлениях переноса вещества. Иными словами, ансамбль состояний – подмножество точек среды на которых можно построить пространственные кривые длины "lsz", соединяющих точки "M3" и "M0", и при этом в каждой из их точек задано "kz" направлений.

В этом случае, согласно методологии статистической физики, для данного ансамбля можно рассчитать общее число состояний [1].

Рассмотрим вначале число состояний множества каналов проницаемостей соединяющих точку "Mz", лежащей на прямой (Mz, M0). Тогда число состояний произвольного канала проницаемости длины "lsz", на рисунке отрезок линии, отмеченный сплошной кривой красного цвета, согласно комбинаторным методам подсчёта согласованных вариантов имеем:

$$i_{\max} = \frac{sz1}{rb} \quad i_{\min} = \frac{Rz1}{rb}$$

$$Nz = \prod_{i=i_{\min}}^{i_{\max}} kz_i = \frac{\prod_{i=0}^{i_{\max}} kz_i}{\prod_{i=0}^{i_{\min}} kz_i} = e^{\frac{\ln(kz1)}{rb} \cdot (sz1 - Rz1)} \quad (2.1)$$

где Nz число возможных состояний ориентаций направлений на канале длины "lsz" (на рисунке сплошная красная линия), imax, imin – количество элементарных отрезков "rb" укладываемых на длине канала sz1 и евклидовом расстоянии между точками (Mz, M0) равному Rz1 соответственно.

Следовательно, следуя определению статистической вероятности, плотность вероятности реализации канала проницаемости длины "lsz" между точками "Mz" и "M0" должна быть обратно пропорциональной общему числу возможных состояний [2]:

$$wz1(sz1, Rz1, kz1) = \frac{\gamma z1}{Nz1} = \gamma z1 \cdot e^{-\gamma z1 \cdot (sz1 - Rz1)} \quad \gamma z1 = \frac{\ln(kz1)}{rb} \quad (2.2)$$

где $\gamma z1$ – коэффициент, зависящий от числа состояний (возможных направлений переноса вещества) в точках канала проницаемости.

Аналогичным образом можно оценить вероятность реализации канала длины "sz2" (Рис.1, красная пунктирная линия).

$$wz2(s2, Rz2, kz2) = \frac{\gamma z2}{Nz2} = \gamma z2 \cdot e^{-\gamma z2 \cdot (s2 - Rz2)} \quad \gamma z = \frac{\ln(kz2)}{rb} \quad (2.3)$$

Поскольку, вероятность реализация состояний в двух участках каналов проницаемостей длин "sz1" и "sz2" взаимно не зависимы, то вероятности всех пар каналов общей длины "sz = sz1 + sz2" проходящих в направлении (M3, M0) будет:

$$wz(s2, Rz1, Rz2, \gamma z1, \gamma z2) = wz1(s1, Rz1, \gamma z1) \cdot wz2(s2, Rz2, \gamma z2) \quad (2.4)$$

$$l_z = sz1 + sz2$$

где l_z – общая длина канала проницаемости соединяющих точки "M3" и "M0" в направлении оси "Z".

Энтропия "составного" канала длины l_z можно оценить как [1]:

$$S = \ln(wz(s2, Rz1, Rz2, \gamma z1, \gamma z2)) = \gamma z1 \cdot (sz1 - Rz2) + \gamma z2 \cdot (sz2 - Rz2) + \ln(\gamma z1 \cdot \gamma z2) \quad (2.5)$$

Примем условие, что две ветви составного канала длины l_z находятся в шумовом равновесии, если величины обратные $\gamma z1$ и $\gamma z2$ интерпретировать как шумовую температуру каналов проницаемостей. Следовательно, при фиксированной длине l_z величина энтропии должна быть минимальной. То есть:

$$\begin{aligned} sz1 + sz2 = l_z = const \quad \frac{\partial S}{\partial sz1} \cdot dsz1 + \frac{\partial S}{\partial sz2} \cdot dsz2 &= 0 \\ dsz1 + dsz2 = 0 \quad \gamma z1 \cdot dsz1 + \gamma z2 \cdot dsz2 &= 0 \\ (\gamma z1 - \gamma z2) \cdot dsz1 = 0 \quad \gamma z1 = \gamma z2 = \gamma z & \end{aligned} \quad (2.6)$$

Следовательно, согласно (5), плотность вероятности реализации каналов длины "lz", соединяющих произвольные точки "M3" и "M0" в направлении параллельной оси "Z" можно будет записать в виде:

$$\begin{aligned} sz = sz1 + sz2 \quad \gamma z = \gamma z1 = \gamma z2 \quad Rz1 + Rz2 = z \\ wz(sz, \gamma z) = \gamma z^2 \cdot e^{-\gamma z \cdot (sz - z)} \end{aligned} \quad (2.7)$$

По известной плотности вероятности можно оценить среднюю длину канала соединяющую точки "M3" и "M0" в направлении оси "Z" как среднее по ансамблю множества потенциально реализуемых каналов различных длин ($z \leq sz < \infty$).

$$\begin{aligned} szsr(\gamma z, z) &= \int_z^\infty sz \cdot wz(sz, \gamma z) \cdot dsz = \\ &= \gamma z^2 \cdot \int_z^\infty sz \cdot e^{-\gamma z \cdot (sz - z)} \cdot dsz = \gamma z \cdot z + 1 \approx \gamma z \cdot z \end{aligned} \quad (2.8)$$

Аналогичными рассуждениями можно оценить и средние длины каналов проницаемостей, по которым может быть осуществлена гидродинамическая связь между точками среды в латеральных направлениях (Рис.2.1).

$$ssrx(\gamma x, x) \approx \gamma x \cdot (x - x0) \quad ssry(\gamma y, y) \approx \gamma y \cdot (y - y0) \quad (2.9)$$

где $(x - x0)$, $(y - y0)$ – расстояния от точки M1 до точки M0 и от точки M2 до точки M0 в направлениях X и Y соответственно.

Полученные результаты по исследованию изменению средних расстояний

по направлениям осей координат показывает, что геологическая среда, в общем случае, представляется не евклидовым пространством. Его метрика в различных направлениях различна и, по-видимому, она зависит от масштаба геохимической системы.

Из выше изложенного следует, что среднюю длину канала проницаемости, обеспечивающую гидродинамическую связь между любыми двумя точками геологической среды, можно принять как величину:

$$s(x, y, z) = \sqrt{[\gamma x \cdot (x - x_0)]^2 + [\gamma y \cdot (y - y_0)]^2 + [\gamma z \cdot (z - z_0)]^2} \quad (2.10)$$

где $s(x, y, z)$ – метрическое расстояние между двумя произвольными точками $Ma(x_0, y_0, z_0)$ и $Mb(x, y, z)$ геологического пространства, γx , γy , γz метрические коэффициенты, зависящие от структуры связанной пористости и трещиноватости среды.

Далее каналы со средней длиной $s(x, y, z)$, соединяющие несовпадающие точки среды, будем условно называть **виртуальный канал геохимической проницаемости**, или просто **канал проницаемости**.

Не евклидова геометрия геологического пространства позволяет предположить о фрактальной природе одномерных каналов проницаемостей, которыми, формально, можно счётным, или непрерывным, образом покрыть объём геологической среды.

Кинетика осаждения и растворение переносимого вещества в точках виртуального канала проницаемости. Предположим, что перенос геохимического вещества (в том числе и просто химического элемента в ионной или в комплексной форме) осуществляется по некоторому виртуальному каналу проницаемости "s". Рассмотрим процесс осаждения вещества из подвижного состояния в неподвижное состояние, и наоборот, как химические реакции первого порядка [3]. Такое предположение представляется обоснованным, поскольку геохимия переноса осуществляется, скорее всего, химически сложными комплексами, химическое и механическое взаимодействие которых с окружающей средой, «пёстрого» вещественного состава и вероятностной структурой, зависит от множества факторов. И, поскольку эти факторы не коррелированы между собой, то их совокупное воздействие должно приводить, в первом приближении, к линейным зависимостям. То есть к реакциям первого порядка.

В связи с изложенным текстом, предположим, что в каждой точке геологической среды происходят одновременно две химические реакции по схеме:



где A – вещество в подвижной фазе, B – вещество в неподвижной фазе.

В этом случае, количественные отношения между концентрациями подвижной и не подвижной фаз переносимого вещества можно записать в виде:

$$\frac{\partial c(t, s)}{\partial t} = -\alpha_0 \cdot q(t, s) \quad \frac{\partial q(t, s)}{\partial t} = -\alpha_1 \cdot c(t, s) \quad (2.12)$$

где $\partial c(t,s)/\partial t$ и $\partial q(t,s)/\partial t$ – скорости образования подвижной и неподвижной фаз переносимого вещества в точке «s» виртуального канала геохимической проницаемости, $\alpha 0$ и $\alpha 1$ – кинетические коэффициенты реакций осаждения и растворения вещества.

При этом следует отметить, что кинетические коэффициенты $\alpha 0$ и $\alpha 1$, в общем случае зависят от температуры носителя вещества (растворителя). Причём, эта зависимость от температуры для различных коэффициентов носит разный характер. Коэффициент $\alpha 0$ с ростом температуры растёт, а коэффициент $\alpha 1$ убывает. Совместное влияние этой закономерности приводит к слабой зависимости от изменчивости температуры между содержаниями подвижной и не подвижной фаз при температурах близких к равновесному состоянию. Поэтому, далее будем считать, что процессы осаждения и растворения вещества проходят при температурах близких к температуре термодинамического равновесия. Следовательно, будем считать, что эти коэффициенты не зависят от времени.

Можно показать, что решение системы уравнений (2.10) приводит к следующим аналитическим выражениям:

$$\begin{aligned} c(t,s) &= A0(s) \cdot e^{signr \sqrt{\alpha 0 \cdot \alpha 1} \cdot t} & q(t,s) &= A1(s) + signr \cdot s \sqrt{\frac{\alpha 1}{\alpha 0}} \cdot c(t,s) \\ signr &= \begin{cases} +1 & \text{if } q(t,s) - sr0 \geq 0 \\ -1 & \text{if } q(t,s) - sr0 < 0 \end{cases} \end{aligned} \quad (2.13)$$

Где $A0(s)$ и $A1(s)$ – произвольные функции координат длины виртуального канала геохимической проницаемости. $signr$ – значение знака перед множителем времени (равен +1, соответствует переходу вещества в подвижное состояние, знак -1, соответствует переходу вещества в неподвижное состояние). $sr0$ – среднее содержание по полю опробования на дневной поверхности. Примечание; Предполагается, что в начале процесса рассеяния вещества поле концентрации в среде было однородным, то есть $q(0,s) = const = sr0t$.

Из (2.13) следует, что в каждой точке виртуального канала проницаемости. вещество находится в состоянии непрерывного обмена между подвижной и неподвижной фазами.

Уравнения динамики геохимического масса переноса вещества в поле естественного геоэлектрического поля и их решения. Выше было отмечено, что движущими силами являются геоэлектрические силы [4]. На основании этой декларации рассмотрим некоторую точку проницаемой среды, в которой существует градиент электрического поля.

Предположим, что в рассматриваемом объёме среды геохимическое вещество находится в подвижном состоянии, например в виде некоторого раствора или возгоняемого флюида. Также предположим, что данное вещество может быть частично ионизированным и, при наличии в среде электрических полей, переноситься в пространстве по виртуальным каналам проницаемостей.

Рассмотрим некоторый виртуальный канал проницаемости, по которому вещество может попасть в заданную точку наблюдения в определённом

количестве.

Пусть наблюдаемая концентрация переносимого вещества в этой точке, в подвижной фазе будет $c(s)$ [кг/м³]. Тогда в этой точке пространства для потока вещества можно записать следующее количественное отношение [5].

$$j(t,s) = \varsigma \cdot \xi \cdot c(t,s) \cdot V(t,s) \quad \varsigma, \xi < 1 \quad (2.14)$$

где $j(t,s)$ – поток вещества в канале проницаемости в момент времени « t » на расстоянии « s » от начала отсчёта вдоль виртуального канала проницаемости до точки наблюдения. $c(t,s)$ концентрация переносимого вещества в точке его наблюдения. ς – электрическое число переносов. ξ – степень диссоциации переносимого вещества. $V(t,s)$ – скорость ионов переносимого вещества под воздействием геоэлектрического поля.

С другой стороны, согласно закону Ома:

$$j(t,s) = \frac{1}{\rho e(t,s)} \cdot E(t,s) = \frac{1}{\rho e(t,s)} \cdot \frac{\partial \phi(t,s)}{\partial s} \quad (2.15)$$

Где s – длина виртуального канала от начала отсчёта до точки наблюдения, $\rho e(t,s)$ – удельное электрическое сопротивление виртуального канала проницаемости в точке с координатами (t,s) , $E(t,s)$ – напряженность электрического поля в точке наблюдения, $\phi(t,s)$ – геоэлектрический потенциал в точке наблюдения.

Приравнявая значения потоков (2.14) и (2.15) имеем:

$$\begin{aligned} \varsigma \cdot \xi \cdot c(t,s) \cdot V(t,s) &= \frac{1}{\rho e(t,s)} \cdot \frac{\partial \phi(t,s)}{\partial s} \\ \frac{\partial \phi(t,s)}{\partial s} &= \varsigma \cdot \xi \cdot \rho e(t,s) \cdot c(t,s) \cdot V(t,s) \end{aligned} \quad (2.16)$$

В этом случае электрическую силу, действующую на ионы вещества, можно выразить отношением:

$$fe(t,s) = e \cdot \varsigma \cdot \xi \cdot c(t,s) \cdot E(t,s) = e \cdot \varsigma \cdot \xi \cdot c(t,s) \cdot \frac{\partial \phi(t,s)}{\partial s} \quad (2.17)$$

где e – средний заряд единичного иона

Удельное электрическое сопротивление току зависит от количества ионов в единице объёма носителя переносимого вещества (растворе). То есть, обратно пропорционально концентрации.

$$\rho e(t,s) = \frac{\alpha 2}{c(t,s)} \quad (2.18)$$

где $\alpha 2$ – некоторая постоянная величина.

Если учесть, что сила, действующая на единичный заряд иона, выражается уравнением $fed = e \cdot E = e \cdot \partial \phi(t,s) / \partial s$, а количество ионов в единице объёма равно $\varsigma \cdot \xi \cdot c(t,s)$, то подставляя в fed значение $\partial \phi(t,s) / \partial s$ из (2.16), с учётом (2.18) получаем выражение для силы, действующей на переносимое вещество в единице объёма.

$$fe(t,s) = e \cdot (\varsigma \cdot \xi)^2 \cdot \alpha 2 \cdot c(t,s) \cdot V(t,s) \quad (2.19)$$

Кроме электрических сил, при переносе вещества, существуют и механические силы. Это силы сопротивления движению, связанные с вязкостью раствора (флюида), силы трения, которая обусловлена взаимодействием раствора со стенками каналов проницаемостей. А также сила гравитации и архимедова сила, направленная в противоположном направлении силам гравитации.

Сопротивление движению вещества в пористых средах зависит от множества не коррелированных факторов. Поэтому эмпирически установлено, что их количественное значение в целом пропорционально скорости движения и величине вязкости переносящих вещество флюидов с коэффициентом обратной пропорциональности, так называемой проницаемости по Дарси [6]. Эту силу можно записать в виде выражения:

$$f_s(t, s) = -\rho_s(t, s) \cdot V(t, s) \quad (2.20)$$

где $\rho_s(t, s)$ – удельное механическое сопротивление движению пропорциональное вязкости и обратно пропорциональное проницаемости по Дарси, $f(s)$ – сила механического сопротивления движению вдоль виртуального канала проницаемости.

Действие объёмной силы гравитации и архимедовой силы можно записать в виде суммы:

$$f_g(s) = r_0(s) \cdot g + f_{arch} \quad (2.21)$$

где $r_0(s)$ – коэффициент, характеризующий проекцию вектора напряжённости гравитационного поля « g » на направление переноса вещества « s », f_{arch} – сила Архимеда.

Суммарное действие сил гравитации и архимедовой силы, на рассматриваемых пространственных масштабах по глубине, можно считать постоянной величиной.

Если рассматривать динамику масса переноса вещества в пористой среде по каналам проницаемостей, в гидродинамическом приближении, то для распределения концентраций вдоль виртуальных каналов проницаемостей можно записать уравнения гидродинамики Эйлера [1].

$$\begin{aligned} \frac{\partial j(t, s)}{\partial t} + V(t, s) \cdot \frac{\partial j(t, s)}{\partial s} &= f_e(t, s) - f_s(t, s) - f_g(s) \\ \frac{\partial}{\partial t} [\zeta \cdot \xi \cdot c(t, s) + q(t, s)] + \frac{\partial j(t, s)}{\partial s} &= 0 \end{aligned} \quad (2.22)$$

Таким образом, система уравнений (2.14), (2.19), (2.20), (2.21) и (2.13) определяют динамику масса переноса подвижной и не подвижной фаз вещества в геологической среде по одномерному, виртуальному каналу проницаемости произвольной пространственной конфигурации.

При подстановке выше определённых выражений для сил и потока, первое уравнение системы (2.22) принимает вид:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} [c(t,s) \cdot V(t,s)] + V(t,s) \cdot \frac{\partial}{\partial s} [c(t,s) \cdot V(t,s)] = \\ = e \cdot \varsigma \cdot \xi \cdot \alpha 2 \cdot c(t,s) \cdot V(t,s) - \frac{\rho(t,s)}{\varsigma \cdot \xi} \cdot V(t,s) - \frac{fg}{\varsigma \cdot \xi} \cdot c(t,s) \end{aligned} \quad (2.23)$$

Подстановка во второе уравнение из (2.22) временную зависимость для неподвижной фазы переносимого вещества из (2.13) приводит к уравнению:

$$\frac{\partial}{\partial s} [c(t,s) \cdot V(t,s)] = \left(\text{signr} + \sqrt{\frac{\alpha 1}{\alpha 0}} \right) \sqrt{\alpha 0 \cdot \alpha 1} \cdot c(t,s) \quad (2.24)$$

Продифференцируем последнее выражение по времени, тогда, с учётом временной зависимости подвижной фазы переносимого вещества получим следующее уравнение:

$$\frac{\partial}{\partial s} \frac{\partial}{\partial t} [c(t,s) \cdot V(t,s)] = \text{signr} \cdot \alpha 0 \cdot \alpha 1 \cdot \left(\text{signr} \cdot \sqrt{\frac{\alpha 1}{\alpha 0}} \right) \cdot c(t,s) \quad (2.25)$$

Интегрируя это уравнение по параметру s , определяем связь функции потока с функцией концентрации.

$$\frac{\partial}{\partial t} [c(t,s) \cdot V(t,s)] = \text{signr} \cdot \left(\text{signr} + \sqrt{\frac{\alpha 1}{\alpha 0}} \right) \cdot \int_0^s c(t,s) \cdot ds \quad (2.26)$$

С другой стороны, непосредственное интегрирование уравнения (2.24) приводит к отношению:

$$c(t,s) \cdot V(t,s) = \left(\text{signr} + \sqrt{\frac{\alpha 1}{\alpha 0}} \right) \cdot \int_0^s c(t,s) \cdot ds \quad (2.27)$$

Введём новую переменную

$$u(t,s) = \int_0^s c(t,s) \cdot ds \quad c(t,s) = \frac{\partial}{\partial s} u(t,s) \quad (2.28)$$

Тогда, согласно (2.27), для скорости переноса вещества в точке виртуального канала проницаемости:

$$V(t,s) = \left(\text{signr} + \sqrt{\frac{\alpha 1}{\alpha 0}} \right) \cdot \sqrt{\alpha 0 \cdot \alpha 1} \cdot u(t,s) \cdot \left[\frac{\partial}{\partial s} u(t,s) \right]^{-1} \quad (2.29)$$

Подставляя (26), (27), (28) и (29) в (23) получаем следующее уравнение:

$$\begin{aligned} \alpha 1 \cdot u(t,s) \cdot \left(\alpha 1 + 2 \cdot \alpha 0 + 3 \cdot \text{signr} \cdot \alpha 0 \cdot \sqrt{\frac{\alpha 1}{\alpha 0}} \right) + \frac{fg}{\varsigma \cdot \xi} \cdot \frac{\partial}{\partial s} u(t,s) = \\ = \frac{\rho s(t,s)}{\varsigma \cdot \xi} \cdot \left(\text{signr} + \sqrt{\frac{\alpha 1}{\alpha 0}} \right) \cdot \sqrt{\alpha 0 \cdot \alpha 1} \cdot u(t,s) \cdot \left[\frac{\partial}{\partial s} u(t,s) \right]^{-1} \end{aligned} \quad (2.30)$$

Разрешая последнее уравнение относительно механического, удельного сопротивления получаем следующую зависимость:

$$\begin{aligned} -\rho(t,s) = d0 \cdot \frac{1}{u(t,s)} \cdot \left[\frac{\partial}{\partial s} u(t,s) \right]^2 + d1 \cdot \frac{\partial}{\partial s} u(t,s) \\ d1 = \frac{\xi \cdot \varsigma \cdot \alpha 1 \cdot (\alpha 1 + 2 \cdot \alpha 0 + 3 \cdot \sqrt{\alpha 0 \cdot \alpha 1})}{\text{signr} + \alpha 1} \quad d0 = \frac{fg}{\text{signr} + \alpha 1} \end{aligned} \quad (2.31)$$

Воспользуемся общепринятым принципом о том, что перенос вещества в поле движущих сил движение осуществляется по путям наименьшего сопротивления. Поэтому, предположим, что в данном случае таким путём является виртуальный канал проницаемости. Следовательно, на этом пути должно выполняться условие:

$$\int_0^{s_{\max}} \rho s(t, s) \cdot ds \Rightarrow \min \quad (2.32)$$

Лагранжианом данного функционала является удельное механическое сопротивление (2.31).

Согласно принципам вариационного исчисления, экстремум функционалу (32) должны обеспечивать функции удовлетворяющие уравнениям Лагранжа, которые для данного случая, с подинтегральной функцией (2.31), имеют вид [7]:

$$\left[\frac{\partial}{\partial s} u(t, s) \right]^2 - 2 \cdot u(t, s) \cdot \frac{\partial^2}{\partial s^2} u(t, s) = 0 \quad (2.33)$$

Можно показать, что уравнение (2.33) имеет следующее физически обоснованное решение:

$$u(t, s) = \int_0^s c(t, s) \cdot ds = \frac{[D0'(t) \cdot s + D1'(t)]^2}{2} \quad c(t, s) = D0(t) \cdot s + D1(t) \quad (2.34)$$

где $D0(t)$, $D1(t)$ – константы интегрирования уравнения (2.33).

Учитывая связь между подвижной и неподвижной фазами переносимого вещества (2.13) для зависимости наблюдаемой концентрации для $q(t, s)$ имеем следующее выражение:

$$s(x, y, z) = \sqrt{[\gamma x \cdot (x - x_0)]^2 + [\gamma y \cdot (y - y_0)]^2 + [\gamma z \cdot (z - z_0)]^2}$$

$$D0a = \text{signr} \cdot |D0(t)| \cdot \left| \sqrt{\frac{\alpha 1}{\alpha 0}} \right| \quad D1a = \text{signr} \cdot |D1(t)| \cdot \left| \sqrt{\frac{\alpha 1}{\alpha 0}} \right| - A1(s) \quad (2.35)$$

$$q(t, s) = D0a \cdot s + D1a$$

где $q(t, s)$ – концентрация геохимического вещества в не подвижной фазе, на конце виртуального канала проницаемости с началом в точке $M(x, y, z)$ и с концом в точке $M(x_0, y_0, z_0)$. $s(x, y, z, x_0, y_0)$ – длина виртуального канала проницаемости. $D0(t)$, $D1(t)$ – константы интегрирования уравнения (2.33).

Таким образом, выражение (2.35) связывает концентрации рассеиваемого в среде вещества на концах, одномерного виртуального канала проницаемости.

Зависимость потока переносимого вещества от положения координаты "s" на некотором канале проницаемости. Можно показать, что согласно выражениям (2.27), (2.28), и (2.35), поток вещества можно будет выразить отношением:

$$Q(t, s) = c(t, s) \cdot V(t, s) = \frac{1}{2} \cdot (\text{signr} + \sqrt{\alpha_0 \cdot \alpha_1}) \times \\ \times \left[\text{signr} \cdot \sqrt{\frac{\alpha_0}{\alpha_1}} \cdot q(t, s) - \sqrt{\frac{\alpha_1}{\alpha_0}} \cdot A1(s) \right]^2 \quad (2.36)$$

Как видно из (2.36) поток переносимого вещества, на конечных моментах времени образования геохимических ореолов, квадратично определяется концентрацией осаждённого вещества.

Зависимость скорости переносимого вещества от положения координаты "s" на некотором канале проницаемости. Из соотношений (2.34), (2.35) и (2.36) следует, что:

$$V(t, s) = \frac{\text{signr}}{2} \cdot \left(\text{signr} + \sqrt{\frac{\alpha_1}{\alpha_0}} \right) \cdot \alpha_0 \cdot [q(t, s) - A1(s)] \quad (2.37)$$

где $A1(s)$ – распределение подвижной фазы переносимого вещества вдоль виртуального канала проницаемости (малая величина).

Скорость переносимого вещества вдоль каналов проницаемостей пропорциональна наблюдаемым концентрациям не подвижной фазы вещества.

Вероятность реализации усреднённого, виртуального канала проницаемости имеющего начало в произвольной точке объёма геологической среды, а конец на дневной поверхности. Выше было отмечено, что геологическую среду можно рассматривать как пространство с вложенным счётным, или непрерывным, множеством каналов проницаемостей всевозможных длин. Естественно, множество усреднённых виртуальных каналов будет подмножеством этого множества.

Рассмотрим в отдельности подмножество виртуальных каналов проницаемостей с метрикой (2.10) имеющих начало в некоторой точке объёма геологической среды M и имеющих выход на дневную поверхность.

Априори предположим, что вероятность реализации каждого из виртуальных каналов проницаемостей выделенного множества равновероятна.

Тогда, принимая во внимание, что виртуальный канал проницаемости, при фиксированном начале (точка P), характеризуется только своим концом, можно оценить количество таких виртуальных каналов, среди которых найдётся только один такой канал, конец которого имеет выход на дневную поверхность.

Физический смысл данного выбора подмножества каналов проницаемостей можно проинтерпретировать следующим образом. Если точку P объёма геологической среды принять за "источник" мигрирующего вещества, то из всех виртуальных каналов проницаемостей имеющих начало в этой точке, единственную точку $P0$ на дневной поверхности достигает только один канал на расстоянии:

$$R(x, y, z, x_0, y_0) = \sqrt{(x - x_0)^2 + (y - y_0)^2 + z^2} \quad (2.38)$$

где $R(x, y, z, x_0, y_0)$ – расстояние от точки $P(x, y, z)$ до точки $P0(x_0, y_0)$.

Исходя из отмеченных рассуждений количество точек концов каналов, равных числу каналов, на расстоянии R равно объёму полусферы данного радиуса. Следовательно, вероятность реализации одного виртуального канала,

имеющего выход на дневную поверхность, будет равно обратной величине этого объёма плюс состояние, соответствующее отсутствию какого-либо канала. То есть:

$$w(x, y, z, x_0, y_0) = \frac{Norm}{\frac{2}{3} \cdot \pi \cdot \left[(x - x_0)^2 + (y - y_0)^2 + z^2 \right]^{\frac{3}{2}} + 1} \quad (2.39)$$

где $Norm$ – коэффициент (нормировочный коэффициент) учитывающий конечность размеров поля опробования на содержание вещества (исследуемых химических элементов).

Верификация констант интегрирования уравнения масса переноса. Пусть точка $P1(x, y, z)$ принадлежит объёму среды. А точка $P0(x_0, y_0)$ принадлежит дневной поверхности. Пусть в точке $P1(x, y, z)$ концентрация вещества будет $q(x, y, z)$, а в точке $P0(x_0, y_0)$ – $q_0(x_0, y_0)$. Тогда, согласно (2.35):

$$s = 0 \quad q(0) = q_0(P0) \quad D1a = q_0(P0) \quad (2.40)$$

$$q(P1(x, y, z)) = q_0(P0(x_0, y_0)) + D0a \cdot s(P1(x, y, z), P0(x_0, y_0))$$

где $q(x, y, z)$, $q_0(x_0, y_0) = q(P0)$ – концентрации в точке объёма среды $P1$ и в точке $P0$ на дневной поверхности.

Если в выражении (2.40) положить $z=0$, то $q(P1(x, y, 0)) \rightarrow q_0(x, y)$, $s(P1, P0) \rightarrow s(x, y, 0, x_0, y_0)$, затем суммируя по всем координатам (x, y) с весом (2.40) (условие само согласованности поверхностного поля, то есть при усреднении поверхностного поля оно должно переходить само в себя) получим выражение для коэффициента " $D0a$ ".

$$D0a(x_0, y_0) = \frac{q_0(x_0, y_0) - \sum_{(x, y)} w(x, y, z, x_0, y_0) \cdot q_0(x, y)}{\sum_{(x, y)} w(x, y, z, x_0, y_0) \cdot s(x, y, 0, x_0, y_0)} \quad (2.41)$$

Анализ выражения (2.41) показывает, что функция $D0a(x_0, y_0)$ имеет пространственно осциллирующий характер. Физическая интерпретация этой осцилляции, на данном этапе исследований, не ясная. Однако, можно предположить, что для конкретных геохимических систем существуют некоторые, также конкретные, пилотные волны вероятностей, которые как бы контролируют процессы рассеяния вещества. Следовательно, в процессе развития теоретической основы и практики применения геохимической томографии геологических сред появится возможность определить уравнение, или систему уравнений, которым подчиняются отмеченные волновые пакеты и их спектр. Это было бы полезным особенно для совершенствования технологии прогноза месторождений полезных ископаемых и для приобретения новых знаний о рассеянии химических элементов в земной коре.

Функция (39) интерпретирует вероятность связи концентрации, и других характеристик динамики рассеяния вещества, в точках объёма среды с концентрациями на дневной поверхности. Поэтому, следуя методологии статистической физики, можно экстраполировать поверхностные измерения в

объём геологической среды согласно определению о среднем [1]. Так, например, если известно распределение геохимических элементов на дневной поверхности, то распределение в объёме среды определится как среднее;

$$qsr(x, y, z) = \sum_{P_0} w(x, y, z, x_0, y_0) \cdot q(s(x, y, z, x_0, y_0)) = \sum_{(x_0, y_0)} w(x, y, z, x_0, y_0) \cdot [q_0(x_0, y_0) + D1a(x_0, y_0) \cdot s(x, y, z, x_0, y_0)] \quad (2.42)$$

где суммирование идёт по всем точкам области опробования на содержание геохимического элемента на дневной поверхности.

Выражение (2.42) является завершающим алгоритмом экстраполяции поверхностных геохимических полей в объём среды. Из него следует, что данные поверхностного опробования вероятно содержат информацию о структуре геохимического поля и в самом объёме среды и поэтому были бы актуальными первичные, формальные исследования топологии поверхностных геохимических ореолов, что планируется на следующих этапах работ по данной проблематике.

2.2 Алгоритм и программа реализации квазитомаграфической задачи

Выше описанные алгоритмы геохимической томографии геологических сред были реализованы в виде машинной, пилотной программы в системе кодов "Маткад". Программа была опробована на эталонном геохимическом поле Жезказганского рудного района (137000 км²).

В качестве исходного материала использовалось модельное поле подвижных фаз меди на прямоугольной площади опробования с равномерным шагом опробования по осям координат равным 10 км.

Поверхностная топология геохимических ореолов и их производных.
Как было отмечено выше, поверхностная топология геохимических ореолов определяет распределение вещества во всём пространстве геологической среды. Поэтому, рассмотрим вначале основные топологические следствия, которые позволяет рассчитать теоретическая база геохимической томографии.

На рисунке 2.2 приведено модельное распределение элемента Cu на дневной поверхности (Положение месторождения меди ($x=1.14 \cdot 10^5$ м, $y=1.98 \cdot 10^5$ м)).

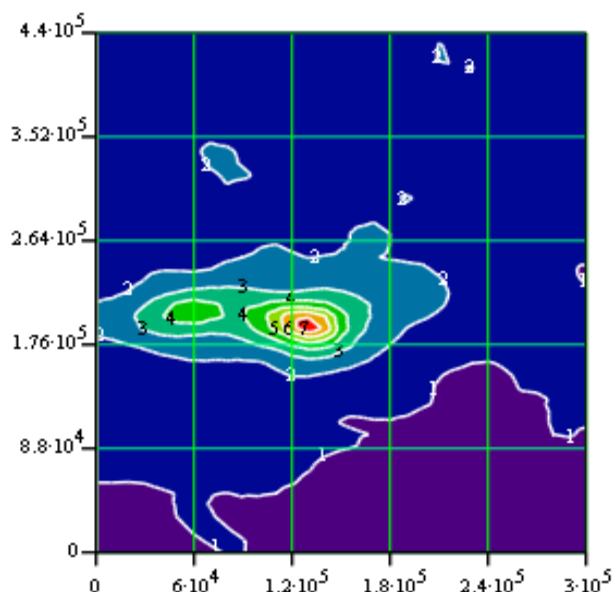


Рисунок 2.2. Поверхностное, модельное распределение подвижной формы меди (месторождение Джезказган)

Согласно выражению (2.37) скорость рассеяния геохимического вещества, на конечных стадиях масса переноса, является функцией наблюдаемых концентраций подвижных форм элементов. Согласно же законам механики, пространственные производные скорости приближённо пропорциональны действующим на переносимое вещество силам. Поэтому, можно, приближённо можно рассчитать это поверхностное, векторное поле сил, которые в рамках приведённой выше теории интерпретируются как геоэлектрические силы.

$$\vec{F}(x_0, y_0) = \text{grad}[q_0(x_0, y_0)] \quad \vec{F}_n(x_0, y_0) = \frac{\text{grad}[q_0(x_0, y_0)]}{|\text{grad}[q_0(x_0, y_0)]|} \quad (2.43)$$

где $F(x_0, y_0)$ – Векторное поле движущих сил, $F_n(x_0, y_0)$ – поле направлений переноса геохимического вещества, $q_0(x_0, y_0)$ – поверхностное поле распределений концентраций подвижных форм вещества (меди).

На рисунке 3. приведены направления отмеченных сил наложенных на топологию геохимических ореолов.

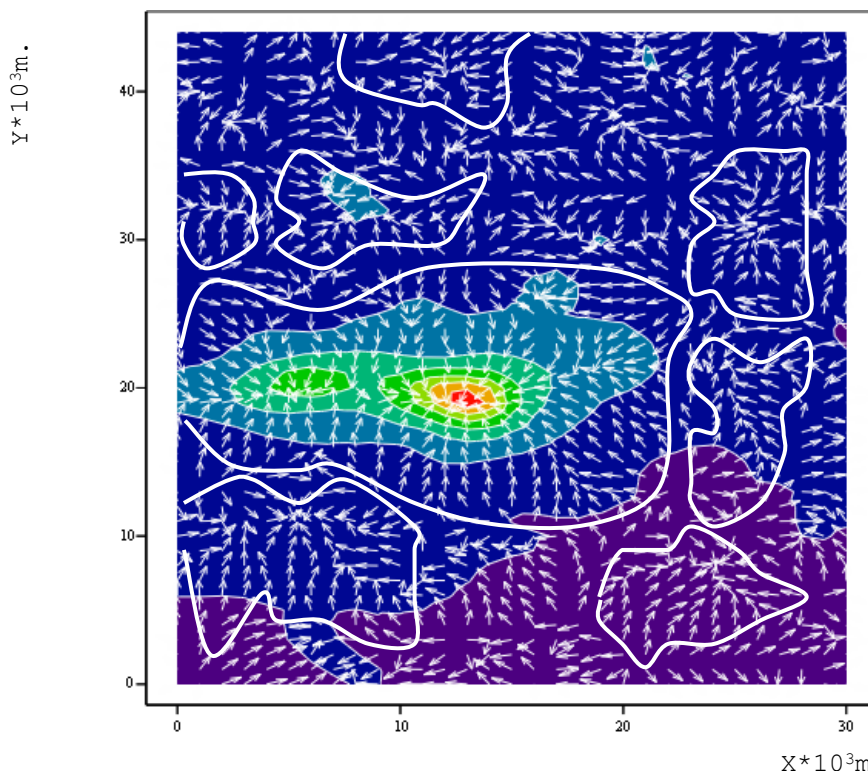


Рисунок 2.3. Векторное поле направлений движущих сил масса переноса рудного вещества. Ресурсные области Жезказганской геохимической системы меди (белые, замкнутые контуры).

Как видно из данного рисунка, наблюдаются несколько областей с центральной симметрией векторного поля сил, которые эквивалентны также направлениям переноса вещества в поздние периоды времени ореол образования подвижных форм меди. В направлениях векторных полей относительно чётко выявляются подобласти, в которых наблюдаются приносы вещества к их центральным частям. Наибольшая подобласть отмечается в центральной части площади опробования, в центре которой располагается известное месторождение меди. Данную область можно интерпретировать как ресурсную базу Жезказганского рудного района. На рисунке также можно выделить "не большие" подсистемы, содержащие в своих центральных областях стоки геохимического вещества, но величина этих стоков несопоставимо меньшая, чем в центральной, большой подобласти содержащей месторождение (Рис. 2.4).

По известному вектору поля сил можно оценить местоположения стоков (источников) вещества, которые должны отметить точки минимума (максимума) функции $\text{div}[\vec{F}(x_0, y_0)]$ на плоскости (формальная функция потока) [8].

Трёх и двухмерные графики функций $\text{div}[\vec{F}(x_0, y_0)]$ приведены на рисунке 2.4.

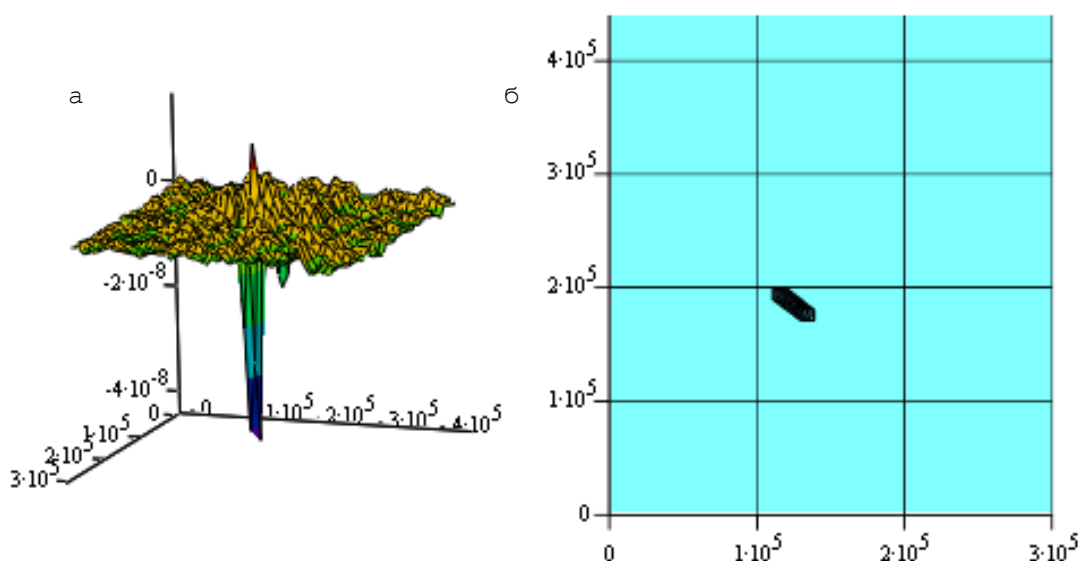


Рисунок 2.4. трёх и двухмерные графики функции $\text{div}(F)$ определяющие местоположение стоков и источников Cu . а – соотношения основных экстремумов функций $\text{div}(F)$, б – проекция контура основного стока (окрестности предполагаемого месторождения) Cu на дневную поверхность.

Визуальный анализ функции $\text{div}(F)$ показывает, что данная функция имеет множество экстремумов, но статистически значимых экстремумов только два. Их местоположение на дневной поверхности – $(1.2 \cdot 10^5, 1.9 \cdot 10^5)$ и $(1.3 \cdot 10^5, 1.8 \cdot 10^5)$. Первая точка соответствует минимуму и почти совпадает с условным центром месторождения $(1.14 \cdot 10^5, 1.98 \cdot 10^5)$, вторая – максимуму. Причём, амплитуда минимума на много большая, чем амплитуда максимума. Из этого можно предположить, что на последних стадиях формирования месторождения шли относительно активные процессы перераспределения вещества в ныне наблюдаемом контуре рудного тела.

Таким образом, простой топологический анализ геохимических ореолов поверхностного поля, на основе выше приведенного одного из следствий теории масса переноса рудного вещества в проницаемых средах, даёт возможность косвенно судить о наличии в рассматриваемых геохимических системах присутствии областей локальной локализации рудного вещества. Таким признаком, по крайней мере, установленном на эталонном объекте, является "контрастность" (наличие локальных острых пиков большой амплитуды) скалярного поля функции $\text{div}[\vec{F}(x_0, y_0)]$. Кроме того, векторная функция $\vec{F} \square \text{grad}[V(x_0, y_0)] \square \text{grad}[q_0(x_0, y_0)]$ позволяет выделять на площадях модельных полей топологические контуры квазизамкнутых геохимических систем, внутренние области которых можно интерпретировать как ресурсную базу потенциальных месторождений полезных ископаемых.

На рисунке 2.5 приведены результаты экстраполяции поверхностного поля концентрации меди в (логарифмическом масштабе) рассчитанные по

алгоритмам разработанной теории геохимической томографии геологических сред.

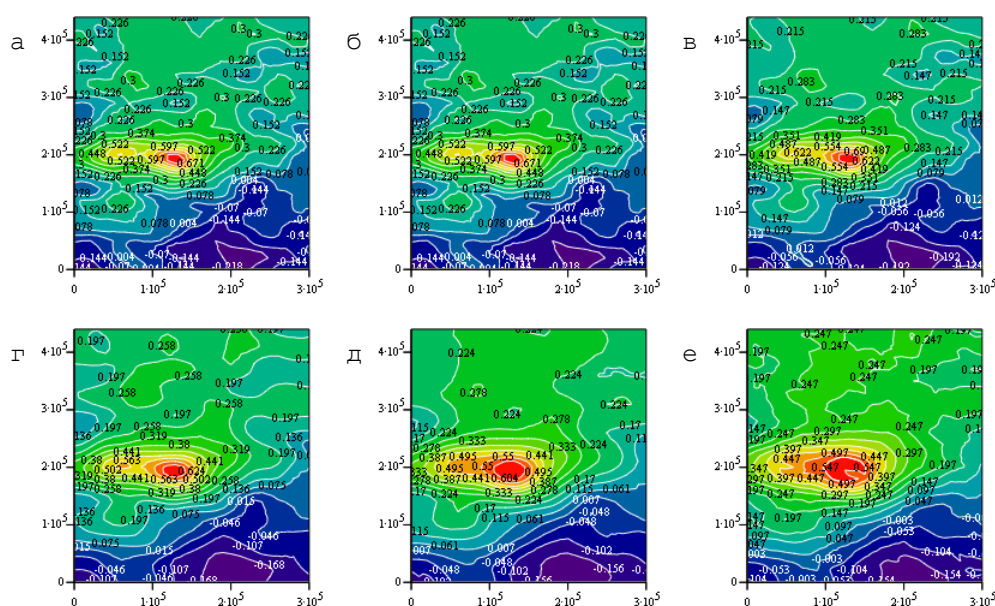


Рисунок 2.4. Расчётные распределения концентрации Cu на различных уровнях среза (логарифмический масштаб, относительные цвета).

а – поверхностное модельное поле подвижных форм меди, б – расчётное поле на дневной поверхности, в – расчётное поле на срезе -500 м., в – расчётное поле на срезе -1000 м., г – расчётное поле на срезе -1500 м., д – расчётное поле на срезе -2000 м., е – расчётное поле на срезе-2500 м.

При этом, на данном этапе исследований не было найдено теоретических идей, по которым могла бы обосновано оценена метрика геологического пространства. Этот вопрос планируется, на теоретическом, или эмпирическом уровнях, решить на последующих этапах работ по данной проблематике. Поэтому, в разработанной сейчас алгоритмической базе теории геохимической томографии и соответствующей ей машинной программе, исходя из общих, априорных соображений были приняты метрические коэффициенты в направлении оси "z" равными 20, а по осям "x" и "y" равными 1.

Из рисунка видно, что топология геохимических ореолов от среза к срезу, в общем слабо меняется в пределах глубин от 0 метров до 2000 метров (усреднённый гипоцентр медного месторождения находится приблизительно на глубине -1500 метров). Отмечается только масштабная деформация области повышенных концентрации с глубиной ("размывание" ореола).

На рисунке 6 показаны расчётные зависимости максимальных, минимальных и средних значений концентрации на различных уровнях среза под площадью определения модельного поля меди.

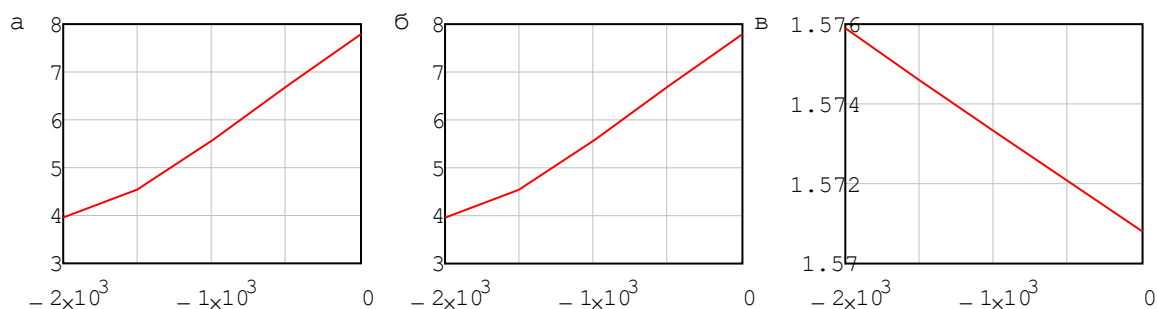


Рисунок 2.6. Зависимости максимальных, минимальных и средних значений концентрации на различных уровнях среза под площадью определения модельного поля Cu . а – изменение максимального значения концентрации Cu с глубиной, б – изменение минимального значения концентрации Cu с глубиной, в – изменение среднего значения концентрации Cu с глубиной.

Максимальные и минимальные значения концентрации меди на срезах убывают с глубиной, средние концентрации возрастают, что указывает на то, что исторически, в моменты времени активного концентрирования и рассеяния рудного вещества, с повышением глубины активность масса переноса вещества затухала.

На рисунке 2.7 приведены Расчётные концентрации подвижных форм Cu , построенные по данным поверхностного опробования. Разрез по плоскостями пересекающиеся в центре поля опробования под углами $\alpha = 0^\circ, -30^\circ, -45^\circ, -60^\circ, -90^\circ, 30^\circ, 45^\circ, 60^\circ$ относительно оси "х".

Из рисунков видно, что на рассматриваемом эталонном объекте, расчётные концентрации подвижных форм меди в приповерхностных областях повышены. На флангах геохимической системы – концентрации понижены. Наибольшие концентрации наблюдаются в окрестностях месторождения. Топология изоповерхностей повышенной концентрации в основном представлена односвязной областью, что указывает на присутствие не более одной или двух потенциально локализованных областей концентрирования рудного вещества.

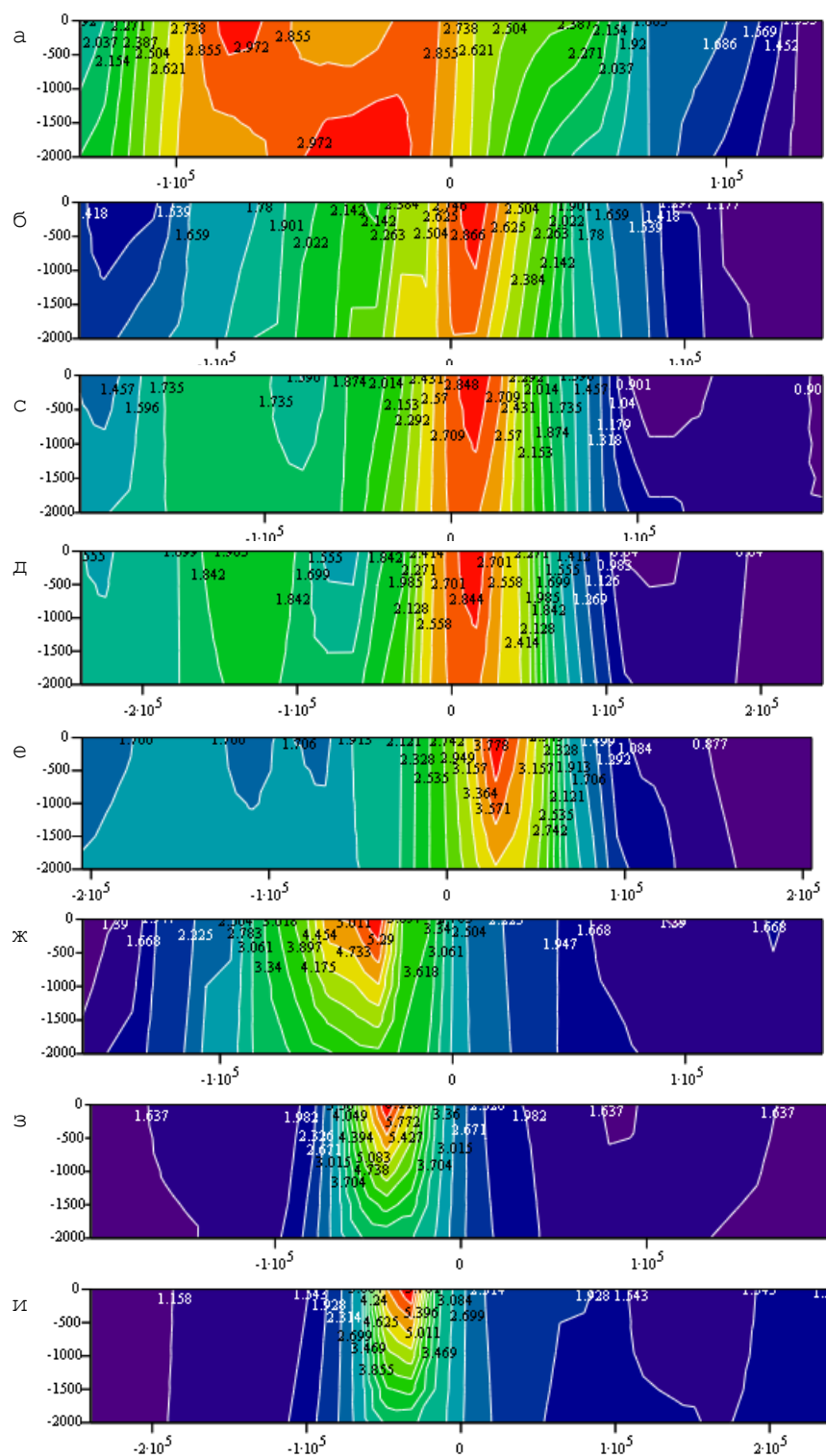


Рисунок 2.7. Расчётные концентрации подвижных форм Si, построенные по данным поверхностного опробования. Разрез по плоскостями пересекающиеся в центре поля опробования под углами $\alpha = 0^0, -30^0, -45^0, -60^0, -90^0, 30^0, 45^0, 60^0$ относительно оси "х".

Заключение по разделу 2

Выше изложенная пилотная теория геохимической томографии

геологических сред показала, что использование топологических закономерностей поверхностных геохимических ореолов, можно использовать для получения новых знаний о процессах рассеяния и концентрирования рудного вещества в геологических средах. Поэтому, представляется целесообразным дальнейшее развитие этого направления исследования с целью создания новых технологий прогноза, поиска и оценки месторождений полезных ископаемых.

За пределами приведённых теоретических конструкций осталось множество других вопросов. Например, вопрос о метрике геологических сред, решение которых, по-видимому, должны быть связаны уже с топологическими исследованиями заданных геологических структур с общими физико-механическими свойствами. Исследования кинематики одномерных каналов проницаемостей при "прохождении" ими геологических структур с отличными механическими свойствами. Исследования о статистическом отражении на топологию геохимических ореолов термодинамики рудообразования и многие другие вопросы, которые бы способствовали детальности наблюдаемых геохимических закономерностей поверхностных геохимических полей, которые бы способствовали совершенствованию технологий прогноза и обнаружению месторождений полезных ископаемых в земных недрах.

Литература к разделу 2.

1. Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. Теоретическая физика. Статистическая физика. Т.5. М. «Наука», 1976. с. 0-736.
2. Г. Крамер. Математическая статистика. "Мир", М. 1976, с.358.
3. А. Г. Стромберг, Д. П. Семченко. Физическая химия. «Высшая школа», М. 1988, с.284
4. И.С. Гольдберг. Рудообразование в геоэлектрохимических системах. Геология и охрана недр. 2005, №2.
5. Е.В. Тимакова, А.А. Казакова. Физическая химия. Неравновесные явления в растворах электролитов. Новосибирск, 2017.
6. М. Маскет. Течение однородных жидкостей в пористой среде. М., Ижевск, 2004.
7. Л. Я. Цлаф. Вариационное исчисление и интегральные уравнения. «Физико-математическая литература», М., 1970, с.15
8. Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. Теоретическая физика. Теория поля. "Наука", М., 1967, с 101.

3. Разработка методов и программы построения моделей распределения корреляций между характеристиками в геологическом пространстве 2D

В настоящее время при построении моделей распределения каких-либо характеристик геологической среды в пространстве и при описании взаимосвязи (корреляции) между такими характеристиками по определению принимается, что пространство V однородно, изотропно, а сила и форма взаимосвязи между распределёнными в этом пространстве характеристиками постоянны на всём V . По сути, это принятие предположения о стационарности V при заданном наборе характеристик геологической среды. В каких-то конкретных ситуациях и, возможно, в большинстве случаев моделирования и описания взаимосвязей при прогнозировании рудных полезных ископаемых такое допущение оправдано большей простотой вычислений, но часто допущение стационарности является излишне сильным. По мере повышения уровня математизации геологии и использования цифровых технологий учёт не стационарности изучаемого геологического пространства V должен в большей степени использоваться при прогнозировании полезных ископаемых.

Формально задача учёта анизотропии геологического пространств 2D может быть представлена, как изменение единиц шкалы Δx , Δy вдоль координатных осей X , Y : $\Delta x = f_1(X, Y)$, $\Delta y = f_2(X, Y)$, где X , Y принадлежат V . Аналогично может быть представлена задача не стационарности взаимосвязи характеристик t_i и t_j : $COR(t_i, t_j) = f(X, Y)$, где X , Y принадлежат V , t_i и t_j являются функциями X , Y .

3.1 Программа ModelingA2

Программа предназначена для построения аппроксимационных моделей 2D на основе принципа «обратных расстояний» с учётом задаваемого в каких-то точках моделируемого пространства показателей анизотропии геологической среды, которая аппроксимируется на все точки пространства моделирования (точнее, на принятую регулярную сет моделирования).

Описание программы ModelingA2

Программа ModelingA2 предназначена для построения регулярных блочных аппроксимированных 2D-моделей с учетом неоднородной изменчивости изучаемой среды – анизотропии. В программе используется алгоритмы весовой аппроксимации с учетом величины и направления локальной анизотропии в каждой исходной точке данных. Параметры моделирования позволяют гибко управлять видом модели. Программа может применяться для построения моделей рудных месторождений, отдельных рудных массивов, а также моделей любых распределённых в пространстве характеристик независимо от их физической природы.

Программа ModelingA2 входит в состав программного комплекса ELAN_W. Для получения исследуемых данных принят общий формат файлов.

Текстовый файл состоит из трёх уровней: количество столбцов, название столбцов и сами данные. Пример (учебный):

```
5
x   y   epsil   Ax   Ay
12.5   -23  90 1 1.
-1.54   2.8  30 0.6 1
42.45   2.2  90 1 1
2.05    2.3  90 1 1
```

В первой строке записано количество столбцов, во второй наименования столбцов, отделённые друг от друга символами табуляции или пробелами, в третьей строке и в последующих расположены сами данные в соответствии с наименованиями столбцов отделённые друг от друга символами табуляции или пробелами.

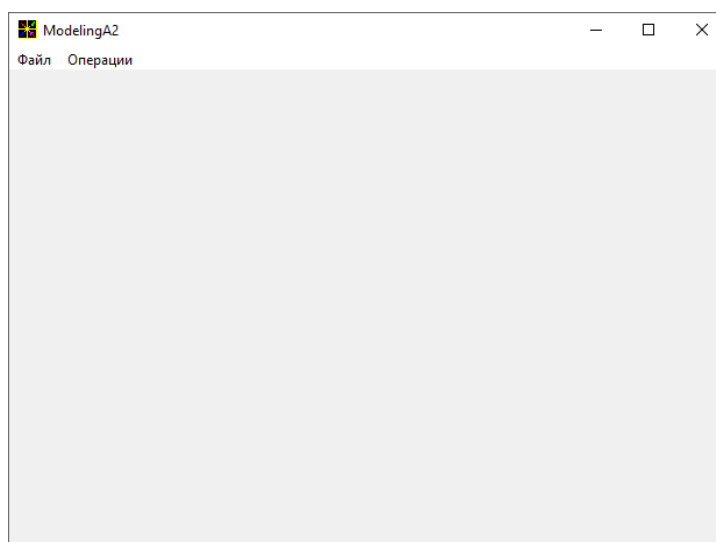


Рисунок 3.1 Вид программы ModelingA2 после запуска.

При запуске программы ModelingA2 появится пустая форма программы, на которой отсутствуют окна для заполнения параметров и график (рисунок 1). Окна для задания параметров появятся после открытия файла данных, а график – после окончания вычислений.

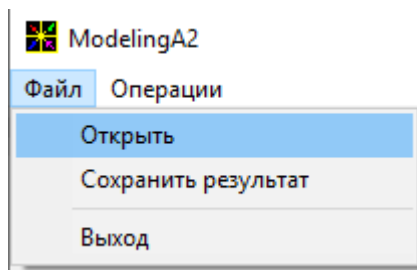


Рисунок 3.2 Меню «Файл».

Для открытия файла исходных данных заходим в меню «Файл» -> подменю «Открыть» (рисунок 3.2), щелкаем левой кнопкой мыши, и в появившемся стандартном диалоговом окне выбираем файл, нажимаем «ОК». Появятся списки параметров (рисунок 3.3).

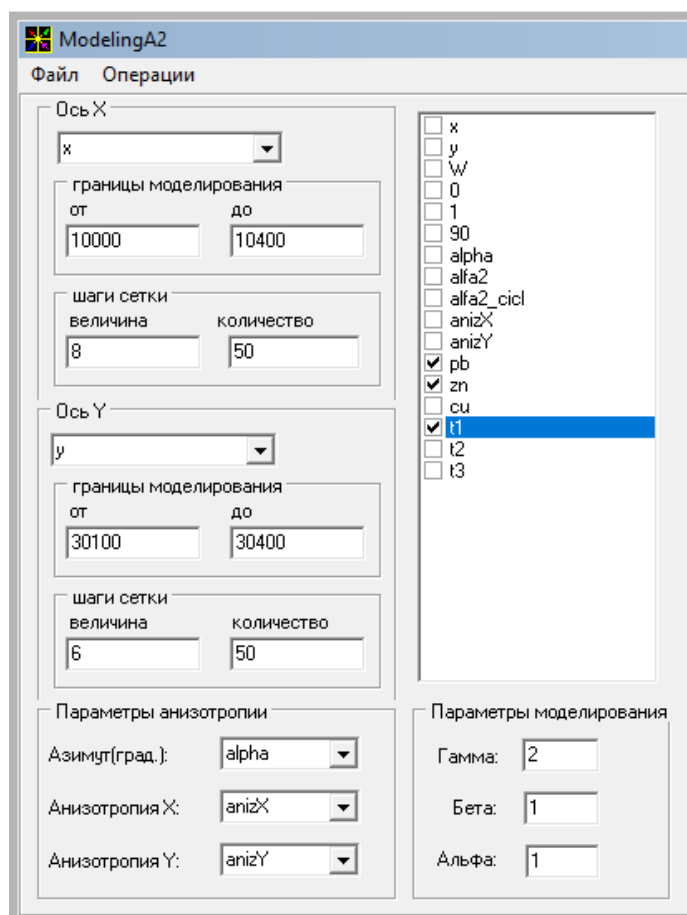


Рисунок 3.3 Окно параметров моделирования.

В появившемся слева списке для осей X и Y вводим следующие параметры:

- наименование признака данных, содержащего координаты точек;
- границы моделирования «от», «до»;
- величина шагов сетки;
- количество шагов сетки.

Параметры анизотропии:

- Азимут (град) — наименование признака данных, содержащего направление минимальной изменчивости в градусах начиная от 12 часов по часовой стрелке;
- АнизотропияX - наименование признака данных, содержащего значения анизотропии вдоль направления заданного азимутом угла;

- Анизотропия Y - наименование признака данных, содержащего значения анизотропии перпендикулярно направлению заданного азимутом угла;

Параметры моделирования, управляющие свойствами аппроксимационной модели (подробное описание приводится в конце описания программы):

- «Гамма»;
- «Бета»;
- «Альфа».

В середине окна программы находится список параметров, галочка ставится напротив тех, которые надо вычислить.

После заполнения и выбора параметров для запуска вычисления модели нажимаем кнопку «Вычислить», расположенную снизу справа под списком параметров или в меню «операции» подменю «Вычислить».

Когда модель будет построена, программа выведет сообщение «вычисления завершены», нажимаем «ОК» и смотрим на визуализацию модели (рисунок 3.4). С помощью выпадающего списка над графиком можно выбирать последующие признаки для визуализации.

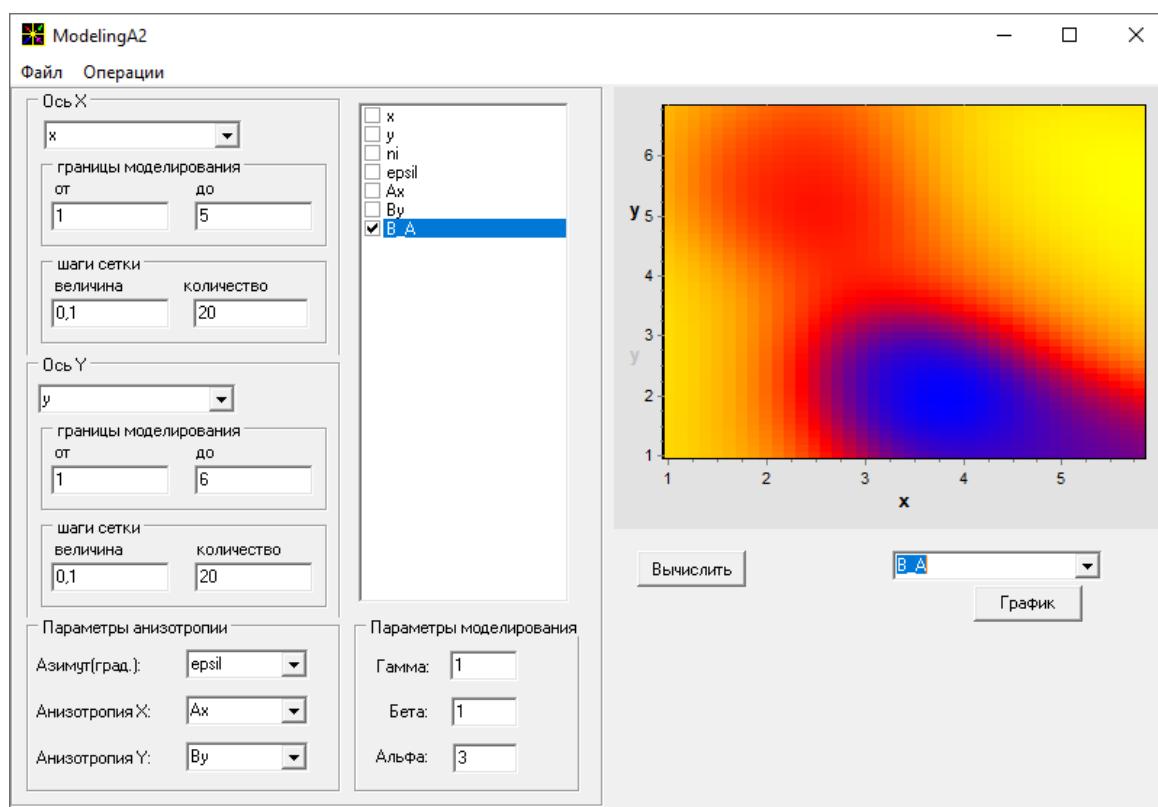


Рисунок 3.4 – Общий вид программы ModelingA2 с визуализацией модели.

Чтобы сохранить результаты вычисления, выбираем меню «Файл» подменю «Сохранить результат», данные сохраняются в текстовом формате.

Пример вычисления анизотропии:

Исходный файл:

7

xyni epsil Ax ByB/A

1.5 11170 0.5 12

41290 0.7 11.4

32390 111

134165 0.5 12

535110 0.5 12

256170 0.7 11.4

457120 0.5 12

16830 0.5 12

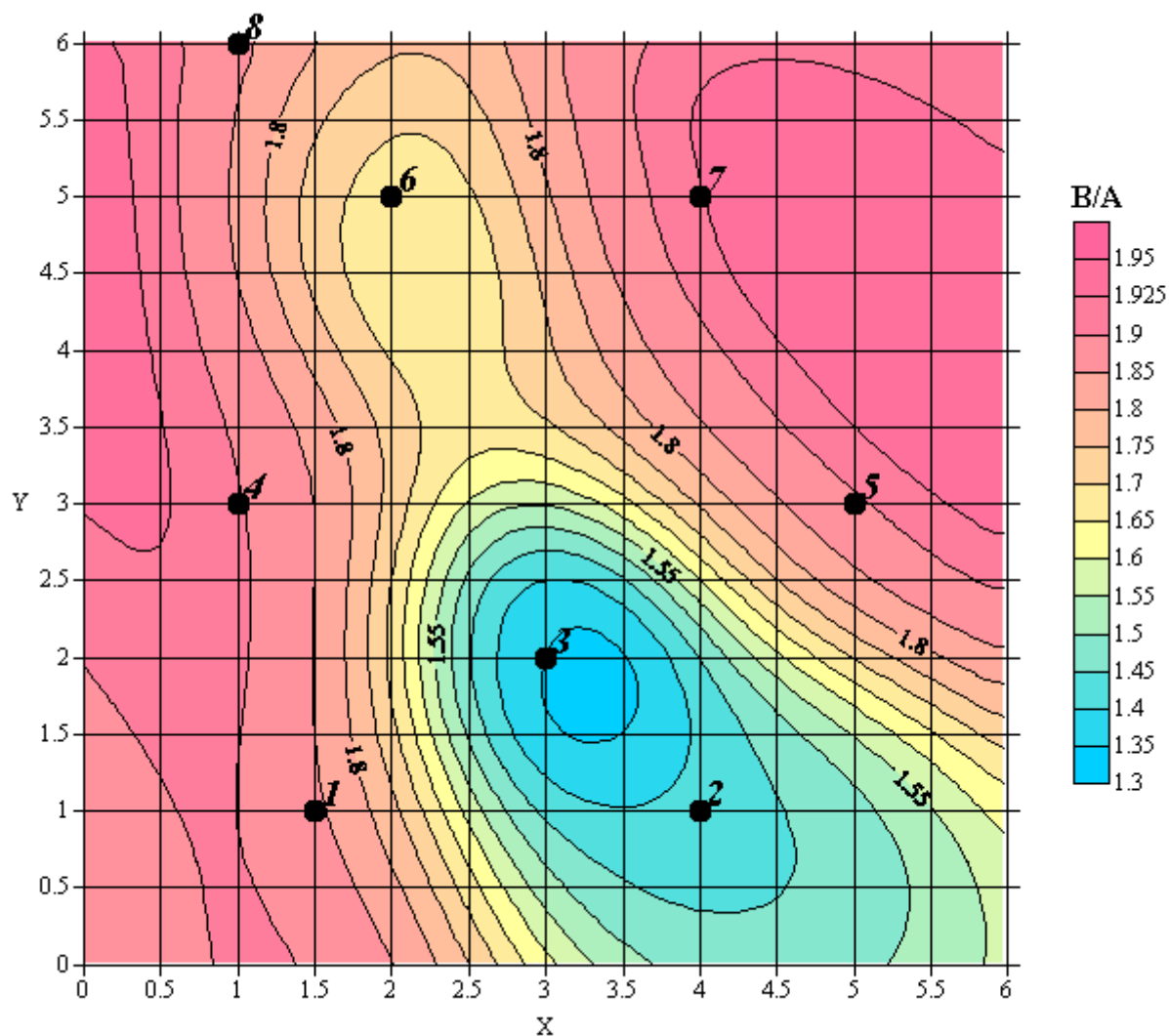


Рисунок 3.5 Результат моделирования величины B/A с учетом анизотропии пространства (задается углом $epsilon$ и коэффициентами A , B).

Ниже приводим стандартные рекомендации по выбору значений параметров при построении моделей с помощью программ Modeling (ПК Elan).

ВЫБОР ПАРАМЕТРОВ АППРОКСИМАЦИОННОЙ МОДЕЛИ (ПРОГРАММА *Modeling*)

$$w(x,i) = 1 / \left[1 + \beta (R(x,i) / \gamma)^\alpha \right]$$

1) Параметр γ (масштабный множитель) выбираем таким образом, чтобы:

- величина R/γ была в пределах от 30 до 60;
- или величина γ уравнилась радиусу влияния точек наблюдения R_e (определяется по вариограммам);
- или величина γ равнялась среднему расстоянию между точками наблюдения (при относительно равномерном их распределении);
- или величина γ равнялась длине, соответствующей 1 см карты

2) Параметр α рационально принять равным 3 (величину 2 - можно принять для плавноизменяющихся величин; 4 - для очень изменчивых)

3) Параметр β выбирать исходя из представлений о радиусе зон влияния точек наблюдения. Если $\gamma = R_e$, то при $\beta = 1$ получим нормальную модель; $\beta = 10$ - «детальную» и при $\beta = 0.1$ - «генерализованную»

4) Желательно, чтобы характеристики $\sum w(x,i)$ в области моделирования изменялись не слишком резко ($\max \sum w / \min \sum w < 10-50$)

5) Картина распределения моделируемого признака должна быть структурирована, но не создавать отдельные экстремумы в точках наблюдения.

3.2 Программа **RanWin_R**

В процессе геологических исследований и прогнозе полезных ископаемых часто стоит задача анализа связи неоднородных пространственных полей характеристик 2-3D с выделением участков с определенными взаимосвязями между характеристиками геологического пространства. Формально это задача представления и рассмотрения силы и формы связи между характеристиками геологического пространства как функции пространственных координат.

Программа **RunWind_R** предназначена для разбиения 2D или 3D области на блоки заданных размеров, называемых «окнами». Внутри каждого «окна»

вычисляется ранговая корреляция между всеми парами выбранных признаков. При выборе размеров вычисляемого блока или «окна» существует две проблемы. Если размер «окна» будет очень велик, результаты покажут усредненную общую оценку. И несмотря на то, что внутри блока будут входить как положительные, так и отрицательные участки, в конечных результатах о них не будет информации. Другой крайний случай – слишком маленький размер «окна». Тогда результаты расчетов в «окне» будут показывать практически случайные величины. И в первом, и во втором случае информативность результатов вычислений «окна» будет очень низкая. Оптимальные размеры «окна» лежат в диапазоне где-то между двумя крайними случаями.

После запуска программы необходимо открыть файл данных при помощи вызова из меню «Файл» подменю «Открыть» (рисунок 3.2.), в появившемся стандартном диалоговом окне выбрать файл исходных данных.

Формат файлов должен соответствовать стандарту, принятому в программном комплексе ELAN: первая строка – количество признаков в файле; вторая строка – наименования признаков; третья и последующие строки – данные.

2
x y
3 7
3 9
7 3
2 9

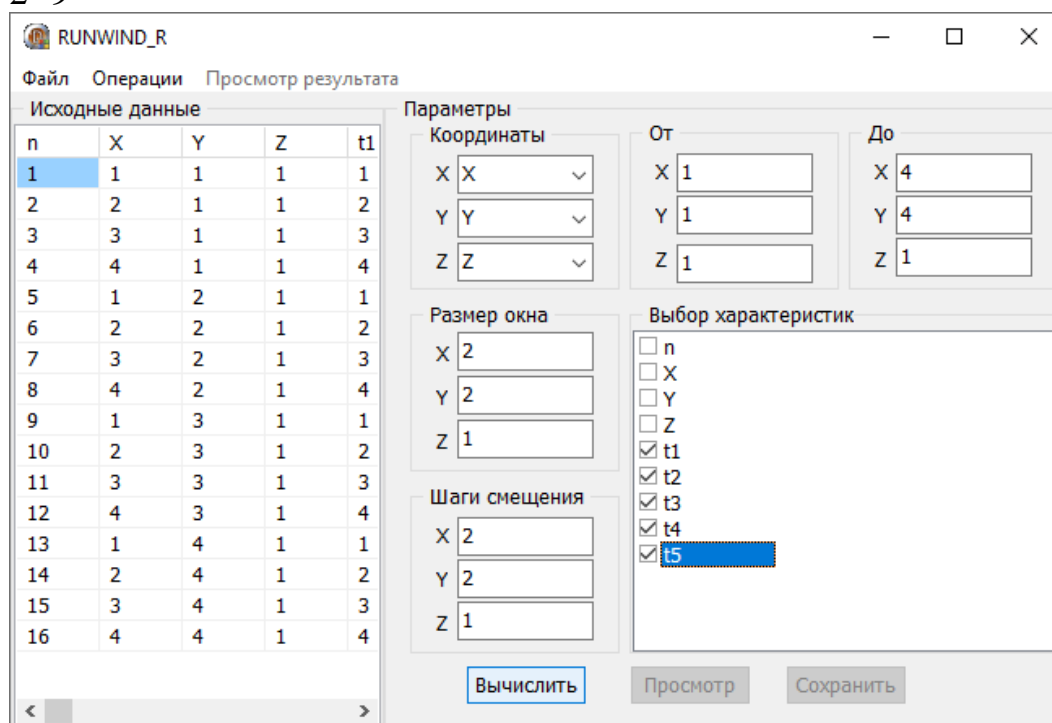


Рисунок 3.6 Вид главной формы программы RunWind_R.

Заполняются следующие параметры:

«Координаты»: выбирается признак, содержащий пространственную

координату соответственно по осям X, Y и Z;

«От»: вводится нижняя граница по координатным по осям X, Y и Z пространственного участка, на котором будет вычисляться скользящее окно;

«До»: вводится верхняя граница по координатным по осям X, Y и Z пространственного участка, на котором будет вычисляться скользящее окно;

«Размер окна» - вводится размер скользящего окна по осям X, Y и Z;

«Шаги смещения» - вводится шаг смещения при переходе на следующее окно по осям X, Y и Z.

В списке «Выбор характеристик» отмечаются признаки, которые будут участвовать в вычислении.

Заполнив параметры нажимаем кнопку «Вычислить» или через меню «Операции», «Вычислить». Запустится вычисление скользящего окна, по окончании выйдет информационное сообщение (рисунок 3.7.)

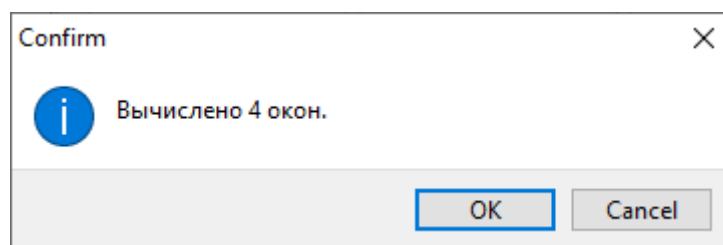
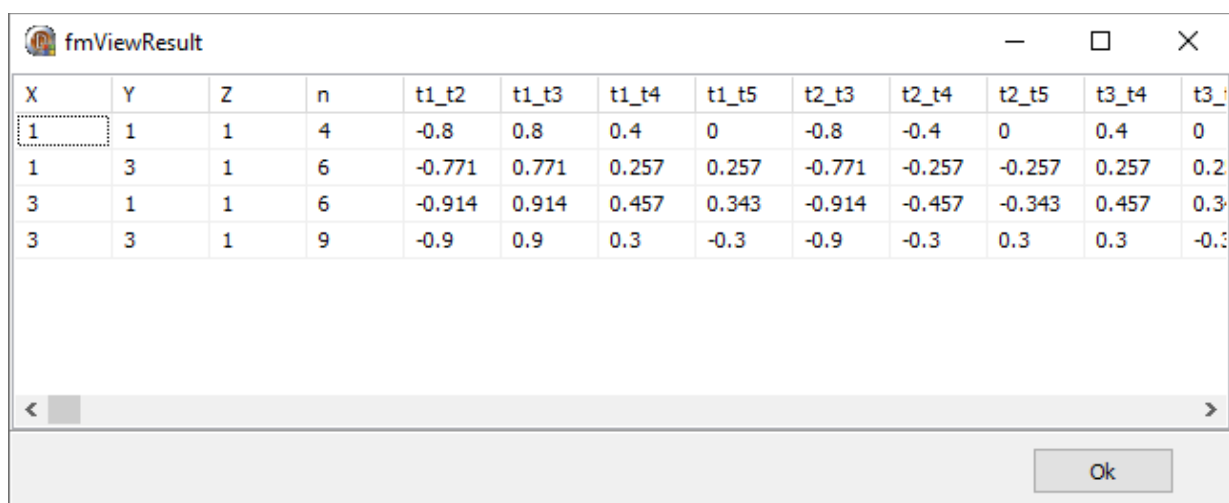


Рисунок 3.7 Информационное сообщение о завершении вычисления скользящего окна.

Через пункт меню «Просмотр результата» или кнопку «Просмотр» в нижней части экрана вызывается форма просмотра результатов (рисунок 3.8).



X	Y	Z	n	t1_t2	t1_t3	t1_t4	t1_t5	t2_t3	t2_t4	t2_t5	t3_t4	t3_t5
1	1	1	4	-0.8	0.8	0.4	0	-0.8	-0.4	0	0.4	0
1	3	1	6	-0.771	0.771	0.257	0.257	-0.771	-0.257	-0.257	0.257	0.257
3	1	1	6	-0.914	0.914	0.457	0.343	-0.914	-0.457	-0.343	0.457	0.343
3	3	1	9	-0.9	0.9	0.3	-0.3	-0.9	-0.3	0.3	0.3	-0.3

Рисунок 3.8 Форма просмотра результатов.

На форме просмотра результатов представлена таблица. В ней содержатся следующие столбцы:

X, Y, Z – пространственные координаты центра окна;
 n – количество исходных точек данных, участвующие в расчете параметров окна
 $t1_t2$ – ранговая корреляция внутри окна между признаками $t1$ и $t2$;
 $t1_t3$ – ранговая корреляция внутри окна между признаками $t1$ и $t3$;
...
 $t4_t5$ – ранговая корреляция внутри окна между признаками $t4$ и $t5$.
Каждая строка в результирующей таблице – это описание окна.

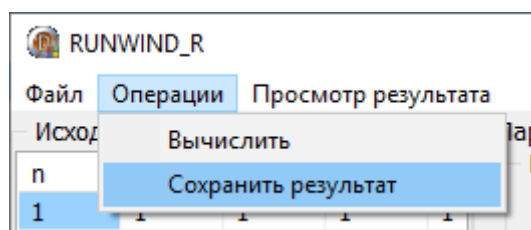


Рисунок 3.9 Пункт меню «Сохранить результат».

Чтобы сохранить результаты вычисления в файл, выбираем меню «Операции», «Сохранить результат» (рисунок 3.9.) или нажимаем кнопку внизу формы «Сохранить». В появившемся стандартном диалоговом окне указываем имя файла, в который сохраним данные.

Метод расчета ранговой (порядковой) корреляции r_n .

Ранговая корреляция является полуколичественным анализом. Применение не ограничено каким-либо законом распределения.

Допустим, что объекты генеральной совокупности обладают двумя качественными признаками. Под качественным подразумевается признак, который невозможно измерить точно, но он позволяет сравнивать объекты между собой и, следовательно, расположить их в порядке убывания или возрастания качества. Пусть выборка объема n содержит независимые объекты, которые обладают двумя качественными признаками A и B для оценки степени связи признаков вводят коэффициент ранговой корреляции Спирмена [1].

Если упорядочить, или ранжировать, объекты анализа по степени выраженности измеряемых признаков. При этом каждому объекту присваивается определенный номер, называемый рангом. Например, объекту с наименьшим проявлением признака присваивается ранг 1 и так далее. Если объекты ранжированы по двум признакам, то имеется возможность оценить тесноту связи между признаками, основываясь на рангах, т.е. тесноту ранговой корреляции [2].

$$r_n = 1 - \frac{6 * \sum (\Delta^2)}{n * (n^2 - 1)};$$

Где $\sum (\Delta^2)$ - сумма квадратов разности порядковых номеров.

n - количество проб, участвующих в подсчете.

Если имеет место повторение содержаний,

$$\text{то } r_n = 1 - \frac{6 * \left[\sum (\Delta^2) + T_x + T_y \right]}{n * (n^2 - 1)},$$

где T_x и T_y - соответствующие поправки на повторяющиеся содержания каждого из элементов.

$T_x = \sum_1^i \frac{t_i^3 - t_i}{12}$, где i - количество повторений; t_i - количество проб в i -том повторении.

Примеры использования программы *RanWin_2*

Программа использовалась при построении моделей распределения корреляций на территории Казахстана между моделями плотности оруденения Pb, Cu, Au, W, Mo (смотри рисунки 3.10, 3.11, 3.12). Модели распределения корреляций строились при размере скользящего окна 10*10 единиц координатной сети Xс, Yс (185*185 км) и шагом скольжения 5 по Xс, Yс (92.5км).

Интерпретация полученных результатов построенных моделей распределения корреляций между моделями плотности оруденения Pb, Cu, Au, W, Mo на территории Казахстана требует специального изучения.

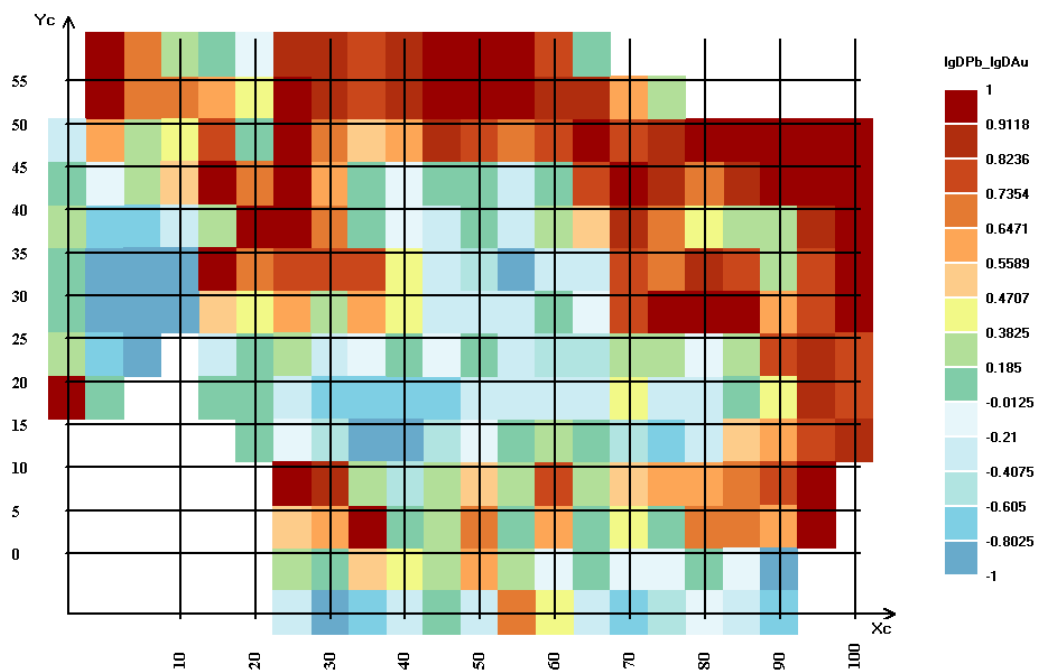


Рис 3.10. Поле корреляций lgDPb_lgDAu. Корреляция на всей территории Казахстана **0.34**. (Файл 5106R_EAM_aQ.txt)

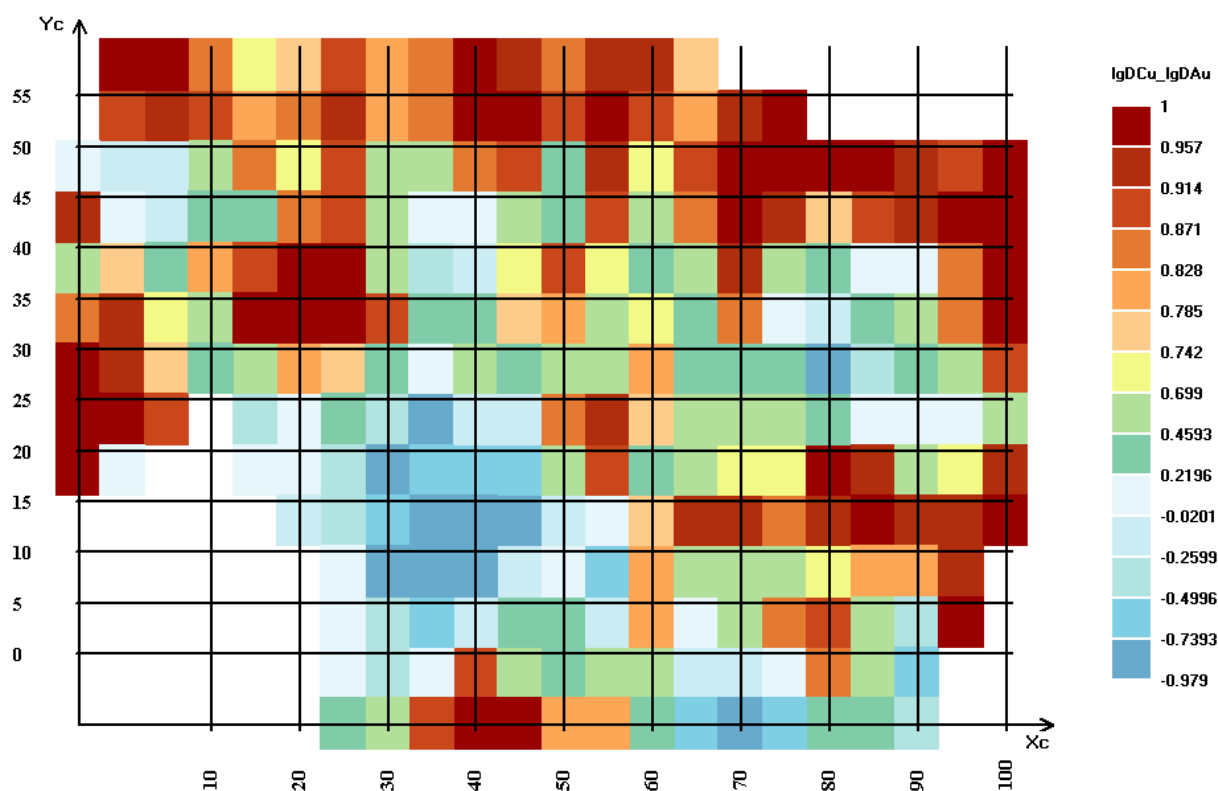


Рис 3.11. Поле корреляций $\lg DCu_lgDAu$. Корреляция на всей территории Казахстана **0.45**. (Файл 5106R_EAM_aQ.txt)

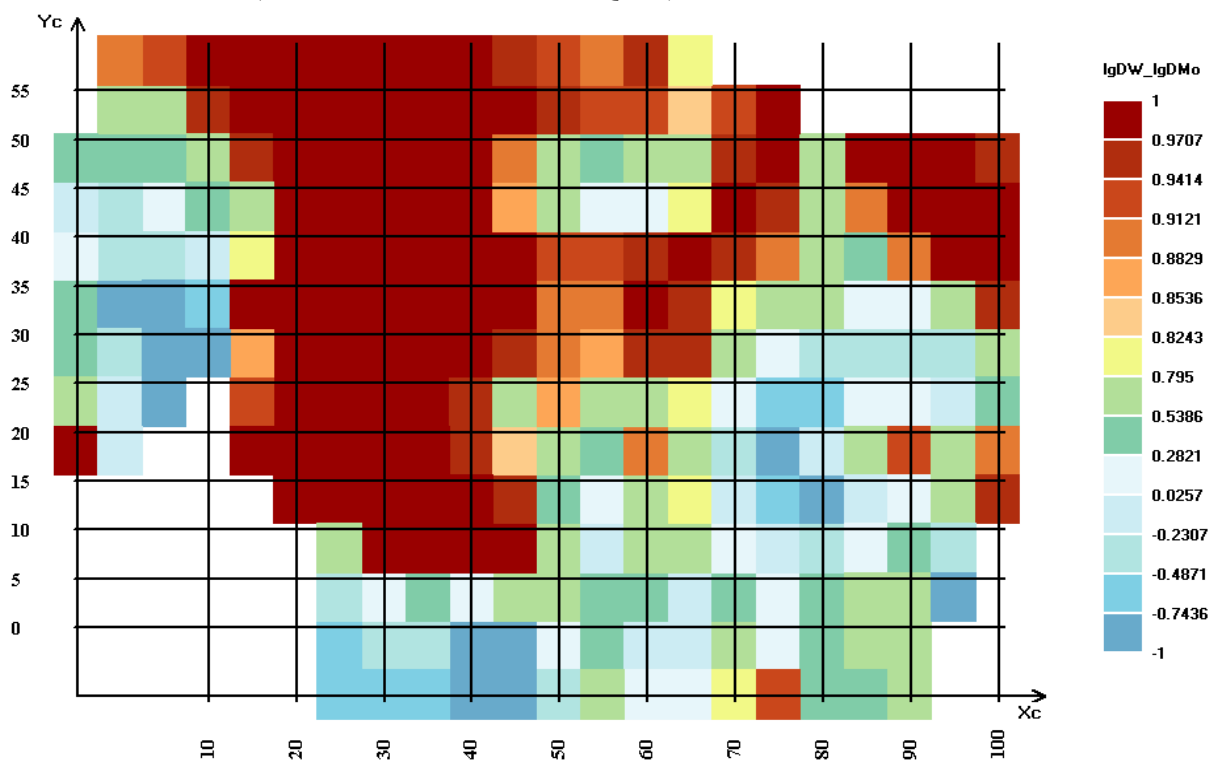


Рис 3.12. Поле корреляций $\lg DW_lgDMo$. Корреляция на всей территории Казахстана **0.72**. (Файл 5106R_EAM_aQ.txt)

4. Разработка и адаптация для задач геологоразведки программы построения нейросетевой функции с ориентацией на формирование элементов искусственного интеллекта при процедуре прогнозирования рудных полезных ископаемых

4.1 Машинное обучение

Машинное обучение (МО) [4, 5] – это подраздел искусственного интеллекта, изучающий методы построения алгоритмов, способных обучаться или адаптировать свою структуру на основании известной выборки данных [6]. МО находится на стыке математической статистики, методов оптимизации и классических математических дисциплин [5]. Характерной чертой методов МО является не прямое решение задачи, а построение и обучение некоторой стохастической модели на основе анализа решений множества сходных задач. Обучением модели в данном случае называется настройка её внутренних параметров таким образом, чтобы модель определяла решение задачи с заданной точностью. Для построения таких методов используются средства математической статистики, численных методов, теории вероятностей, теории графов, а также различные техники работы с данными в цифровой форме. Различают два типа обучения.

Обучение по прецедентам [6], или *индуктивное обучение*, основано на выявлении эмпирических закономерностей в данных. В этом случае предполагается наличие некоторой обучающей выборки известных эмпирических или модельных данных, полученных путем наблюдения или вычислительного эксперимента. Общим подходом к решению задач индуктивного обучения является метод минимизации эмпирического риска. *Эмпирическим риском* называется средняя ошибка алгоритма на обучающей выборке. Метод *минимизации эмпирического риска* состоит в том, чтобы в рамках заданного класса моделей выбрать такую модель, которая имеет минимальное значение эмпирического риска на имеющихся эмпирических или вычисленных данных.

Поясним на следующем примере. Пусть требуется аппроксимировать некоторую функцию $f(x)$, значения которой на множестве $X = \{x_i\}_{i=1}^n$, получены в результате физического или вычислительного эксперимента. То есть известна выборка данных $\{(x_i, f(x_i))\}_{i=1}^n$. Пусть также для искомой аппроксимации выбран класс моделей, в данном случае полином второго порядка $f^{\sim}(x) = ax^2 + bx + c$, где a, b, c – параметры модели. Эмпирическим риском в данном случае будем считать среднеквадратичное отклонение:

$$Q = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (f^{\sim}(x_i) - f_i)^2 = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (ax_i^2 + bx_i + c - f_i)^2 \quad (4.1)$$

Тогда решение задачи аппроксимации функции $f(x)$ заключается в нахождении «оптимальных» коэффициентов $\hat{a}, \hat{b}, \hat{c}$ путем минимизации эмпирического риска Q по параметрам a, b, c .

В общем случае функция эмпирического риска имеет вид:

$$Q = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n l(f^{\sim}(x_i), f_i) \quad (4.2)$$

где l называется *функцией потерь* и отражает, насколько сильно модель «ошибается» в отношении конкретного примера из выборки данных. Выбор функции потерь зависит от поставленной задачи. В рассматриваемом выше примере $l = (f^{\sim}(x_i) - f_i)^2$.

Дедуктивное обучение предполагает формализацию знаний экспертов и их перенос в компьютер в виде базы знаний. Дедуктивное обучение принято относить к области *экспертных систем* [7]. Это компьютерные системы, способные частично заменить специалиста-эксперта в разрешении проблемной ситуации. В информатике экспертные системы рассматриваются совместно с базами знаний как модели поведения экспертов в определённой области с использованием процедур логического вывода и принятия решений, а базы знаний — как совокупность фактов и правил логического вывода в выбранной предметной области деятельности.

Примерами экспертных систем являются поисковые или справочные (энциклопедические) системы. По запросу пользователя они предоставляют наиболее подходящие (релевантные) разделы базы статей (представления об объектах областей знаний, их виртуальную модель). Ещё одним известным примером является *WolframAlpha* — база знаний и набор вычислительных алгоритмов, интеллектуальный «вычислительный движок».

Далее рассмотрены вопросы применения технологии нейронных сетей и модели нелинейной регрессии, которые относятся к первому типу машинного обучения (обучение по прецедентам).

Х.1.2 Нейронные сети в задачах многомерной аппроксимации

Рассмотрим нелинейное отображение типа «вход-выход»:

$$D = f(x), \quad (4.3)$$

где x — входной сигнал, а D — выходной сигнал (отклик). Функция $f(x)$ является неизвестной.

Ставится задача аппроксимации функции $f(x)$ некоторой функцией $F(x)$ с заданной точностью $\varepsilon > 0$ в норме соответствующего функционального пространства:

$$\|F(x) - f(x)\| < \varepsilon, \forall x \in \Omega \quad (4.4)$$

где: Ω — некоторое множество из области определения $f(x)$.

Решение указанной задачи аппроксимации предлагается проводить с помощью технологии нейронных сетей или, точнее, определять искомую функцию $F(x)$ в процессе *обучения* некоторой нейронной сети.

С математической точки зрения, обучение нейронных сетей — это многопараметрическая задача нелинейной оптимизации.

Основной принцип применения технологии нейронных сетей к многомерной аппроксимации сводится к следующему. Результаты измерений или моделирования какого-либо процесса (не зависимо от природы процесса — социальный, физический, техногенный и пр.), а именно совокупность измеренных значений параметров исследуемого процесса и рассчитанные в этих точках значения величин (целевых значений), используются в качестве обучающего множества для определенного типа нейронной сети. На этих данных нейронная сеть с использованием определенных стохастических алгоритмов оптимизации [7, 8] «учится» аппроксимировать функцию, описывающую поведение физической величины в данной точке, опираясь на обучающее множество.

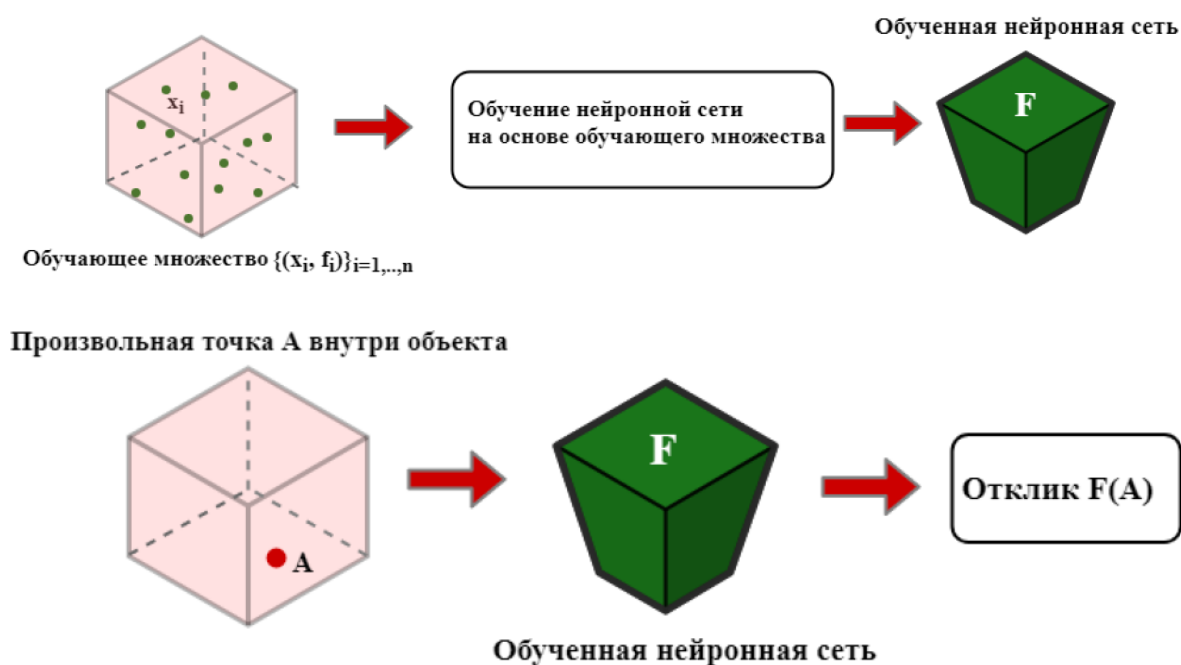


Рисунок 4.1 – Схема применения нейронной сети для аппроксимации функции и вычисления отклика в точке A целевого множества

В процессе обучения происходит настройка всех внутренних параметров сети и её архитектуры. После обучения нейронной сети значения искомых целевых значений являются результатом отклика нейронной сети, топология и числовые характеристики которой получены в процессе её обучения (настройки). Схема обучения и вычисления отклика нейронной сети представлена на рисунке 4.1.

Существует несколько типов нейронных сетей, применяемых в задачах аппроксимации функций многих переменных: многослойный персептрон (MLP), сети на основе радиальных базисных функций (RBF) [8, 9], сети каскадной корреляции (CNN) [9]. Эти сети различаются архитектурой и способами обучения. Сети CNN и многослойный персептрон являются примерами

нелинейных многослойных сетей прямого распространения сигнала. Сеть RBF также является нелинейной сетью прямого распространения, но содержит лишь один слой нейронов, обладающих определенными свойствами. Эти сети являются универсальными аппроксиматорами [10]. Основное отличие между ними заключается в том, что MLP и CNN обеспечивают глобальную аппроксимацию нелинейного отображения, в то время как сеть RBF создает локальную аппроксимацию исследуемой функции.

Во многих практических случаях многослойный персептрон является более эффективным инструментом в задачах аппроксимации функции многих переменных, а также имеет способность к сглаживанию аппроксимирующей функции. Недостатком же персептрона является фиксированная топология. В свою очередь, сеть каскадной корреляции является динамической, т.е. её топология настраивается автоматически в процессе обучения. Однако, CNN не обладает эффектом сглаживания, что в некоторых случаях является существенным недостатком.

Подробно вопросы применения нейронных сетей в рассматриваемых задачах многомерной аппроксимации рассмотрены в работе [3]. Ещё одним подходом к решению задачи многомерной аппроксимации может быть модель нелинейной регрессии [5, 11].

4.2 Многослойный персептрон и его структура

В настоящее время наиболее часто используемой архитектурой нейросети является *многослойный персептрон (MLP)*, который представляет собой обобщение однослойного персептрона.

Обычно сеть состоит из множества входных узлов, которые образуют *входной слой*; одного или нескольких *скрытых слоев* вычислительных нейронов и одного *выходного слоя*. Входной сигнал распространяется по сети в прямом направлении от слоя к слою. Многослойные персептроны успешно применяются для решения разнообразных сложных задач. При этом обучение с учителем выполняется с помощью такого популярного алгоритма, как *алгоритм обратного распространения ошибки*.

Многослойный персептрон имеет три отличительных признака:

1. Каждый нейрон имеет *нелинейную функцию активации*. Данная функция должна быть гладкой (то есть всюду *дифференцируемой*). Самой популярной гладкой функцией активации является сигмоидальная функция.

2. Сеть содержит один или несколько слоев *скрытых нейронов*. Эти нейроны позволяют сети обучаться решению сложных задач, последовательно извлекая наиболее важные признаки из входного вектора.

3. Сеть обладает высокой степенью *связности*, реализуемой посредством синаптических соединений.

Структура многослойного персептрона с двумя скрытыми слоями изображена на рис. 4.2 [2]. Показанная на рисунке сеть является *полносвязной*, что характерно для многослойного персептрона. Это значит, что каждый нейрон

любого слоя связан со всеми нейронами предыдущего слоя. Сигнал передается по сети в прямом направлении слева направо.

Для многослойного персептрона выделяют два типа сигналов:

1. *Функциональный сигнал* – это входной сигнал сети, передаваемый в прямом направлении по всей сети. Такой сигнал достигает конца сети в виде выходного сигнала. В каждом нейроне, через который передается этот сигнал, вычисляется некоторая функция от взвешенной суммы его входов с поправкой в виде порогового элемента - единичного сигнала с весовым коэффициентом w_{i0} .

2. *Сигнал ошибки* – берет своё начало на выходе сети и распространяется в обратном направлении от слоя к слою. Вычисляется каждым нейроном на основе функции ошибки, представленной в той или иной форме.

Выходные нейроны составляют выходной слой сети. Остальные нейроны относятся к скрытым слоям. Первый скрытый слой получает данные из входного слоя. Результирующий сигнал первого скрытого слоя, в свою очередь, поступает на следующий скрытый слой и так далее, до самого конца сети.

В сетях подобного типа используются, в основном, сигмоидальные нейроны. Такую сеть легко можно интерпретировать как модель вход-выход, в которой веса и пороговые значения являются свободными параметрами модели. Такая сеть может моделировать функцию практически любой степени сложности, причем число слоев и число нейронов в каждом слое определяют сложность функции.

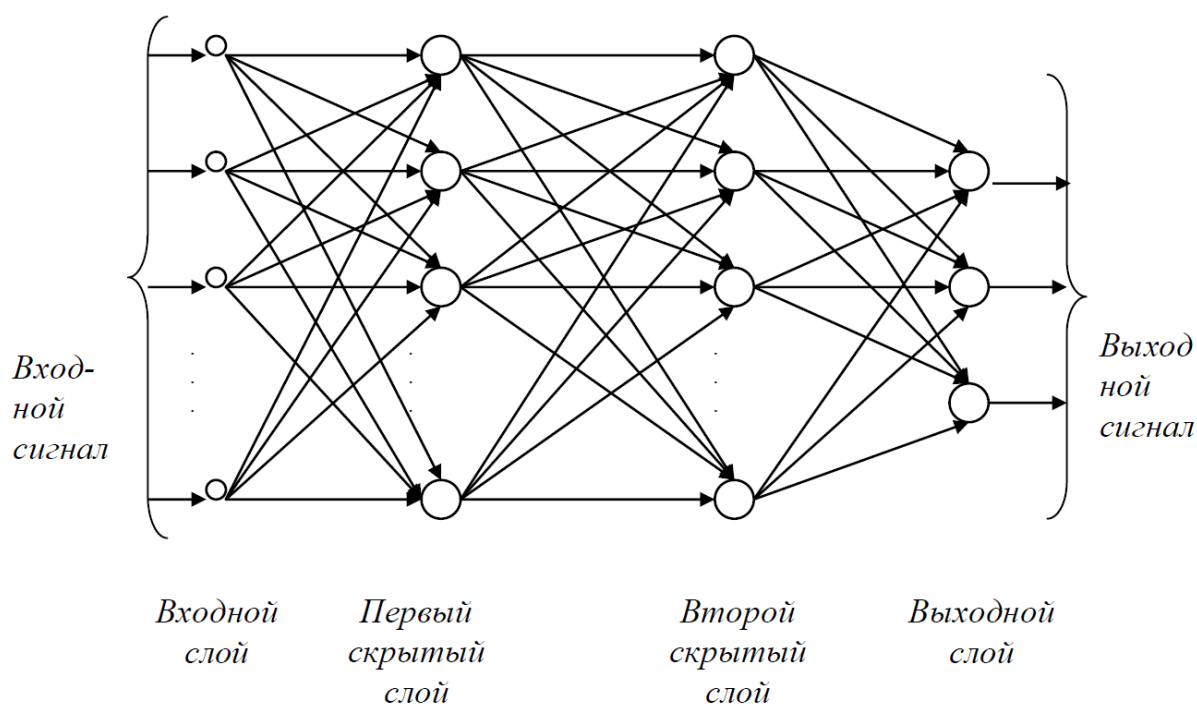


Рисунок 4.2. Структура многослойного персептрона с двумя скрытыми слоями

В многослойных сетях эталонные значения выходных сигналов известны, как правило, только для нейронов выходного слоя, поэтому сеть невозможно обучить, руководствуясь только величинами ошибок на выходе нейросети.

Один из вариантов решения этой проблемы – разработка учебных примеров для каждого слоя нейросети, что является очень трудоемкой операцией и не всегда осуществимо.

Второй вариант – динамическая подстройка весовых коэффициентов синапсов, в ходе которой выбираются, как правило, наиболее слабые связи и изменяются на малую величину в ту или иную сторону, а сохраняются только те изменения, которые повлекли уменьшение ошибки на выходе всей сети. Очевидно, что данный метод "тыка", несмотря на свою кажущуюся простоту, требует громоздких рутинных вычислений.

И, наконец, третий, более приемлемый вариант – распространение сигналов ошибки от выходов нейросети к ее входам, в направлении, обратном прямому распространению сигналов в обычном режиме работы. Этот алгоритм обучения нейросети получил название процедуры обратного распространения. Разработка алгоритма обратного распространения для определения весов в многослойном персептроне сделала эти сети наиболее популярными у исследователей и пользователей нейронных сетей.

Основными достоинствами многослойного персептрона являются простота в использовании, гарантированное получение ответа после прохода данных по слоям, хорошо апробированные и широко применяемые алгоритмы обучения, способность моделирования функции любой степени сложности.

4.3 Сигмоидальные нейроны

Как уже было отмечено выше, в сетях с архитектурой в виде *многослойного персептрона* используются, в основном, сигмоидальные нейроны. Нейрон сигмоидального типа имеет структуру с функцией активации, которая является непрерывной и может быть выражена в виде сигмоидальной униполярной или биполярной функции [1]. Структура нейрона представлена на рис. 4.3.

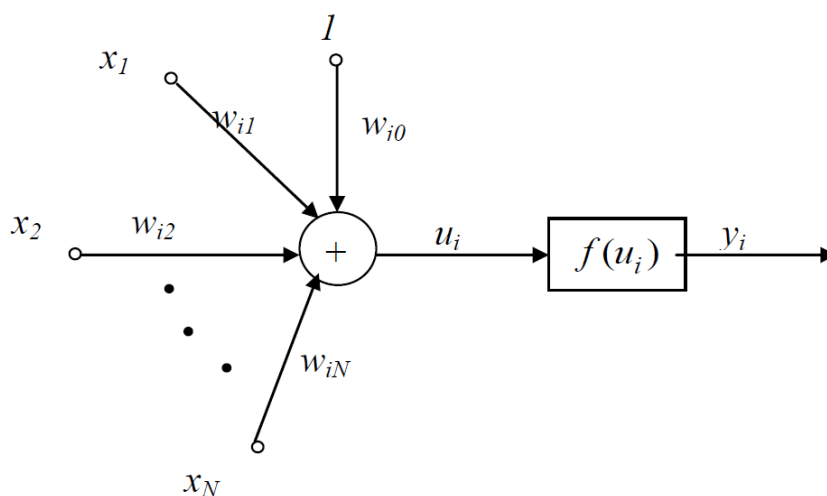


Рисунок 4.3 – Модель сигмоидального нейрона

Входные сигналы x_j ($j = 1, 2, \dots, N$) суммируются с учетом соответствующих весов w_{ij} (сигнал поступает в направлении от узла i к узлу j) в сумматоре, после чего результат сравнивается с пороговым значением w_{i0} . Выходной сигнал нейрона y_i определяется при этом зависимостью:

$$y_i = f\left(\sum_{j=1}^N w_{ij}x_j(t) + w_{i0}\right) \quad (4.5)$$

Аргументом функции выступает суммарный сигнал:

$$u_i = \sum_{j=1}^N w_{ij}x_j(t) + w_{i0} \quad (4.6)$$

Функция $f(u_i)$, называемая функцией активации, относится к классу непрерывных, монотонно возрастающих и дифференцируемых функций. Нейрон сигмоидального типа использует сигмоидальную униполярную (логистическую) или сигмоидальную биполярную (гиперболический тангенс) функцию активации.

Униполярная функция, как правило, представляется формулой:

$$f(x) = \frac{1}{1+e^{-kx}} \quad (4.7)$$

тогда как биполярная функция задается в виде (4.8) или (4.9):

$$f(x) = \tanh(kx) \quad (4.8)$$

$$f(x) = \frac{e^{kx} - e^{-kx}}{e^{kx} + e^{-kx}}. \quad (4.9)$$

Графики сигмоидальных функций при $k=1$ представлены на рис. 4.4.

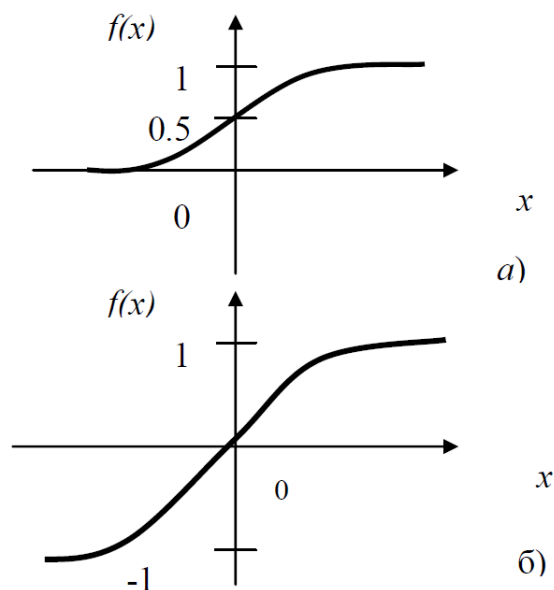


Рисунок 4.4 - Графики сигмоидальных функций:
а – логистическая; б – гиперболический тангенс

Отметим, что, как правило, современные компьютеры вычисляют функцию гиперболического тангенса быстрее, чем логистическую. Другое преимущество функции гиперболического тангенса состоит в том, что она изменяется в диапазоне от -1 до $+1$. Часто бывает необходимо нормировать обучающий набор данных таким образом, чтобы среднее значение было равно 0 при единичном стандартном отклонении.

Такая нормировка возможна только с функцией активации, которая способна принимать отрицательные значения. И наконец, нечетная функция, такая, как гиперболический тангенс, обеспечивает более быстрое обучение, чем несимметричная логистическая функция.

В этих формулах параметр k подбирается пользователем. Его значение влияет на форму функции активации. При малых значениях k график функции достаточно пологий, по мере роста значения k крутизна графика увеличивается. При $k \rightarrow \infty$ сигмоидальная функция превращается в пороговую функцию, идентичную функции активации персептрона. На практике чаще всего для упрощения используется значение $k = 1$. Важным свойством сигмоидальной функции является ее дифференцируемость. Для униполярной функции имеем:

$$\frac{df(x)}{dx} = kf(x)(1 - f(x)) \quad (4.10)$$

тогда как для биполярной функции

$$\frac{df(x)}{dx} = k(1 - f^2(x)) \quad (4.11)$$

И в первом, и во втором случае график изменения производной относительно переменной x имеет колоколообразную форму, а его максимум соответствует значению $x=0$.

Сигмоидальный нейрон, как правило, обучается с учителем. При обучении с учителем предполагается, что помимо входных сигналов, составляющих вектор x , известны также и ожидаемые выходные сигналы нейрона d_i , , составляющие вектор d . В подобной ситуации подбор весовых коэффициентов должен быть организован так, чтобы фактические выходные сигналы нейрона y_i , принимали бы значения, как можно более близкие к ожидаемым значениям d_i . Ключевым элементом процесса обучения с учителем является знание ожидаемых значений d_i выходного сигнала нейрона.

При обучении с учителем производится минимизация целевой функции, которая для единичного обучающего кортежа $\langle x, d \rangle$ i -го нейрона определяется в виде

$$E = \frac{1}{2} (y_i - d_i)^2 \quad (4.12)$$

где

$$y_i = f(u_i) = f\left(\sum_{j=0}^N w_{ij}x_j\right) \quad (4.13)$$

Применение непрерывной функции активации позволяет использовать при обучении градиентные алгоритмы. Проще всего реализовать метод наискорейшего спуска, в соответствии с которым уточнение вектора весов проводится в направлении отрицательного градиента целевой функции, при этом j -я составляющая градиента имеет вид:

$$\nabla_j E = \frac{dE}{dw_{ij}} = e_i x_j \frac{df(u_i)}{du_i} \quad (4.14)$$

$$e_i = (y_i - d_i) \quad (4.15)$$

Если ввести обозначение $\delta_i = e_i \frac{df(u_i)}{du_i}$, то значения весовых коэффициентов могут быть уточнены дискретным способом в соответствии с формулой (4.16):

$$w_{ij}(t+1) = w_{ij}(t) - \rho \delta_i x_j \quad (4.16)$$

В данной формуле коэффициент ρ – это коэффициент обучения, значение которого либо выбирают эмпирически из интервала (0,1), либо при помощи решения разностного уравнения, представленного формулой (4.17):

$$\frac{dw_{ij}}{dt} = -\mu \delta_i x_j \quad (4.17)$$

В данной формуле коэффициент μ выступает в роли аналогичной значению ρ . Формулы (4.16) и (4.17) определяют алгоритм обучения.

На эффективность обучения оказывает сильное влияние подбор коэффициентов обучения. В существующих алгоритмах обучения его величина может быть задана константой или переменной, значение которой в процессе обучения изменяется адаптивным способом либо подбирается на каждом шаге по принципу направленной минимизации целевой функции от одной переменной в направлении наискорейшего уменьшения значений этой целевой функции.

Необходимо подчеркнуть, что применение градиентного метода обучения гарантирует достижение только локального минимума. В случае полимодальной целевой функции найденный локальный минимум может быть

достаточно далек от глобального минимума. Для таких случаев может оказаться результативным обучение с *моментом* или *разбросом*. В этом методе процесс уточнения весов определяется не только информацией о градиенте функции, но также и фактическим трендом изменений весов. Приращение весов можно задать следующим математическим выражением:

$$\Delta w_{ij}(t+1) = -\rho \delta_i x_j + \alpha \Delta w_{ij}(t) \quad (4.18)$$

в котором первый член соответствует обычному методу наискорейшего спуска, а второй член (*момент*), отражает последнее изменение весов и не

зависит от фактического значения градиента. Значение коэффициента момента α , как правило, выбирается из интервала (0,1). С ростом значения α увеличивается влияние момента на подбор весов.

4.4 Постановка задачи прогнозирования рудных полезных ископаемых

На площади 137 000 км² было проведено картирование полей валовых концентраций 28 элементов в рыхлых и коренных породах. Отбор проб проводился по сети 8 х 8 км. Главное требование к анализам: чувствительность определения для каждого элемента должна быть в 3-5 раз ниже кларковой концентрации. В тех же точках были отобраны пробы почв для фазового анализа 21 элемента в форме слабозакрепленных фульватов и гуматов (метод МПФ). Анализ валовых концентраций элементов в пробах рыхлых и коренных пород, а также з МПФ проводился ТОО «Научно-производственный центр „Плазма-Аналит“» (г. Усть-Каменогорск) методом ICP-MS. Списки определяемых элементов и пределы их обнаружения представлены в табл. 4.1 и 4.2.

Таблица 4.1 – Перечень определенных элементов в коренных и рыхлых породах

Элемент	Zn	Pb	Cu	Mo	W	Sn	As
Ед. измер.	ppm	ppm	ppm	ppm	ppm	ppm	ppm
Нижний предел по ТЗ	5	3	5	0,3	0,3	0,5	10
Верхний предел по ТЗ	200	50	100	5,0	5,0	10	50
Элемент	Sb	Ba	Ni	Co	Ti	Mn	Bi
Ед. измер.	ppb	ppm	ppm	ppm	ppm	ppm	ppb
Нижний предел по ТЗ	30	50	2	1	50	50	2
Верхний предел по ТЗ	2000	1000	100	100	10000	3000	20000
Элемент	V	Sc	Re	Li	Nb	Y	Ce
Ед. измер.	ppm	ppm	ppb	ppm	ppm	ppm	ppm
Нижний предел по ТЗ	30	1	3	5	5	10	20
Верхний предел по ТЗ	400	50	10000	100	30	200	200
Элемент	In	Te	Au	Ag	Pt	Pd	Ir
Ед. измер.	ppb	ppb	ppb	ppb	ppb	ppb	ppb
Нижний предел по ТЗ	20	1	0,5	2	5	10	5
Верхний предел по ТЗ	10000	3000	10000	100000	10000	10000	10000

Таблица 4.2 Перечень определенных элементов в коренных и рыхлых породах

Элемент	Au	Ag	Sb	As	V	Mn	Co
Ед. измер.	ppb	ppb	ppm	ppm	ppm	ppm	ppm
Нижний предел по ТЗ	20	1	0,5	2	5	10	5
Верхний предел по ТЗ	10000	100000	2000	50	400	3000	100

Элемент	Ni	Cu	Zn	Pb	Mo	Bi	Ba
Ед. измер.	ppm	ppm	ppm	ppm	ppm	ppm	ppm
Нижний предел по ТЗ	20	1	0,5	2	5	10	5
Верхний предел по ТЗ	100	100	200	50	5	200	1000

Элемент	W	Sc	Li	Y	Ce		Te	C
Ед. измер.	ppm	ppm	ppm	ppm	ppm		ppb	ppm
Нижний предел по ТЗ	0.1	0.1	0.1	0.5	0.5		10	200
Верхний предел по ТЗ	5	50	100	50	100		10000	20000

Для прогноза Жезказганского типа оруденения использовалась технология многомодельного метода прогнозирования, которая заключается в вычислении «плотности оруденения» (VD в условных единицах) [12,13]. Эталоном служил участок месторождения Жезказган с примыкающими к нему месторождениями северной группы. В качестве эталонной площади был взят участок вокруг Жезказганского месторождения (радиус от эталонного месторождения примерно 50 км). На этой эталонной площади определялись сила и форма связи между целевой и прогностическими характеристиками, строилась многомерная функция, связывающая целевую характеристику со всеми прогнозирующими.

В качестве прогнозирующих характеристик использовались модельные значения нормированных содержаний подвижных форм элементов в почвах (Me/C). В прогнозирующие отбирались только те характеристики Me/C, которые на эталонной площади имели силу связи с плотностью оруденения жезказганского (D) типа не ниже 0,3-0,5.

Построенная на эталонной площади функция, связывающая D с прогнозирующими характеристиками, вычислялась на всей территории ЖРР. Участки с повышенной определенной плотностью оруденения жезказганского типа показаны на рис.7. Повышенной вычисленной плотностью оруденения жезказганского типа выделяется собственно район Жезказганского месторождения, его продолжение на запад (Кумалинская синклиналь), на восток и юго-восток.

Участки со сравнительно невысокой вычисленной плотностью оруденения жезказганского типа фиксируются в ЮЗ части ЖРР: небольшая площадь в южной части Карсакпайской геологической структуры и широтная полоса на самой южной границе региона. Конечно, вычисленная плотность оруденения на этих участках достаточно низкая и размытая в пространстве, но здесь мы можем иметь дело с оруденением не жезказганского типа (или не вполне жезказганского типа).

Формализуем задачу. Одним из способов моделирования геоинформационных объектов является регулярно-ячеистое представление территорий исследуемых объектов, т.е. в нашем случае, соотнесения геологических объектов с территориальными регулярными ячейками некоторых сетей - это модель, используемая во многих геоинформационных проектах, например, в системе CGIS, Канада. Этот подход включает разбиение территории на ячейки, как правило, правильной геометрической формы: прямоугольной, квадратной, треугольной и т.п. в некоторой системе координат.

Как было указано выше, на площади 137 000 км² исследуемого участка Жезказганского рудного региона (ЖРР) было проведено картирование полей валовых концентраций 28 элементов в рыхлых и коренных породах. Отбор проб проводился по сети ячеек с длинами сторон 8 x 8 км.

В качестве эталонной площади был взят участок вокруг Жезказганского месторождения (радиус от эталонного месторождения примерно 50 км). На этой эталонной площади определялись сила и форма связи между целевой и прогностическими характеристиками, строилась многомерная функция,

связывающая целевую характеристику со всеми прогнозирующими.

Прогностическими характеристиками выступают средние концентрации C_{ij} c_i -го элемента на рассматриваемую $cell_j$ -ю ячейку исследуемой территории; целевой функцией является M_j – значение степени оруденения j -й ячейки, где $i=1, \dots, K$, где K – количество элементов, по которым проведен геохимический анализ, $j=1, \dots, N$, где N – общее количество исследованных ячеек.

В силу различных причин не для всех ячеек исследуемого участка определено значение целевой функции, т.е. имеется эталонная площадка из n_1 ячеек, для которых определена целевая функция, при этом $n_1 < n$.

Тогда входные условия определены можно представить в виде следующей таблицы 4.3.

Таблица 4.3 – Входные данные для решения задачи прогнозирования с использованием нейронных сетей

№ ячейки	Координата X ячейки	Координата Y ячейки	Концентрация элемента 1	...	Концентрация элемента k	Значение целевой функции
1	x_1	y_1	C_{11}	...	C_{1K}	no
...
m	x_m	y_m	C_{m1}	...	C_{mK}	no
$m+1$	x_{m+1}	y_{m+1}	$C_{m+1,1}$...	$C_{m+1,K}$	F_{m+1}
...
$m+n_1$	x_{m+n_1}	y_{m+n_1}	$C_{m+n_1,1}$...	$C_{m+n_1,K}$	F_{m+n_1}
$m+n_1+1$	x_{m+n_1+1}	y_{m+n_1+1}	$C_{m+n_1+1,1}$...	$C_{m+n_1+1,K}$	no
...
N	$x_{N,K}$	$y_{N,K}$	$C_{N,1}$...	$C_{N,K}$	no

В таблице 4.3 первый столбец определяет порядковый номер ячейки. Во 2-м и 3-м столбцах даны координаты (x_i, y_i) центра i -й ячейки в местной системе координат в метрах. Далее в k столбцах приведены концентрации C_{ij} c_i -го элемента в рассматриваемой i -й ячейке исследуемой территории. В крайнем правом столбце для каждой рассматриваемой i -й ячейки должны быть приведены значения целевой функции – степень оруденения. Однако, как было отмечено выше, не для всех ячеек определена эта целевая функция. Предположим, что в части ячеек (по другому - выборка) исследуемой территории определена целевая функция – в таблице 3 это строки начиная с $(m+1)$ до $(m+n_1)$, т.е. для n_1 ячеек известна целевая функция. Ставится задача – по имеющимся значениям концентрации элементов в ячейках определить значение целевой функции – степени оруденения с учетом выборки ячеек, для которой для всех ячеек выборки известны и значения концентрации элементов и степень оруденения.

Одним из современных методов решения задачи определения степени оруденения в ячейках сети, для которых эта целевая величина не определена, является машинное обучение. Характерной чертой методов машинного обучения, как уже было отмечено выше, является не прямое решение задачи, а построение и обучение некоторой стохастической модели на основе анализа

решений множества сходных задач. Наиболее подходящим, из рассмотренных типов обучения, является обучение по прецедентам, или индуктивное обучение, основанное на выявлении эмпирических закономерностей в данных. В этом случае предполагается наличие некоторой (обучающей) выборки известных (эмпирических) данных, полученных путем наблюдения или вычислительного эксперимента. Общим подходом к решению задач индуктивного обучения является метод минимизации эмпирического риска. В качестве обучающей выборки как раз и используем выборку данных с $(m+1)$ до $(m+n_l)$ ячеек, для которых известна целевая функция.

4.5 Структурная схема и вычислительные алгоритмы многомерной аппроксимации геологических данных с использованием многомерного полносвязного персептрона

Рассмотрим многослойный полносвязный персептрон, представленный на рисунке 1. Рассматриваемый персептрон имеет $(N+1)$ слоев нейронов с различным количеством нейронов, при этом каждый из слоев представлен парой векторов $\tilde{Z}_i = (\bar{X}_i, \bar{Y}_i)$, $i = 0, 1, \dots, N$, и векторы одного слоя имеют одинаковую размерность K_i :

$$\bar{X}_i = (x_{i,1}, x_{i,2}, \dots, x_{i,K_i}) \quad \bar{Y}_i = (y_{i,1}, y_{i,2}, \dots, y_{i,K_i}), \quad (4.19)$$

Учитывая, что рассматриваем многослойный полносвязный персептрон (МПП), у которого каждый нейрон i -го слоя связан со всеми нейронами $(i+1)$ слоя, $i = 0, 1, \dots, N-1$. Назовем синаптическим слоем \tilde{W}_i все синаптические связи между нейронами i -го и $(i+1)$ -го слоя, $i = 0, 1, \dots, N-1$, т.е. \tilde{W}_i представляет из себя матрицу следующего вида:

$$\tilde{W}_i = \begin{bmatrix} w_{1,1}^i & w_{2,1}^i & \dots & w_{K_i,1}^i \\ w_{1,2}^i & w_{2,2}^i & \dots & w_{K_i,2}^i \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ w_{1,K_{i+1}}^i & w_{2,K_{i+1}}^i & \dots & w_{K_i,K_{i+1}}^i \end{bmatrix} \quad (4.20)$$

Кроме того, на входы всех нейронов $\tilde{Z}_i = (\bar{X}_i, \bar{Y}_i)$, поступают так называемые сигналы смещения $\tilde{B}_i = (b_{i,1}, b_{i,2}, \dots, b_{i,K_i})$, $i = 0, 1, \dots, N$.

Обозначим через $\hat{Z} = (\tilde{Z}_0, \tilde{Z}_1, \dots, \tilde{Z}_N)$ множество слоев нейронов, $\hat{W} = (\tilde{W}_1, \tilde{W}_2, \dots, \tilde{W}_N)$ - множество синаптических слоев, $\hat{B} = (\tilde{B}_0, \tilde{B}_1, \dots, \tilde{B}_N)$ - множество сигналов смещения, то тогда многослойный полносвязный персептрон Ps можно представить в следующем виде:

$$Ps = \{\hat{Z}, \hat{W}, \hat{B}\}. \quad (4.21)$$

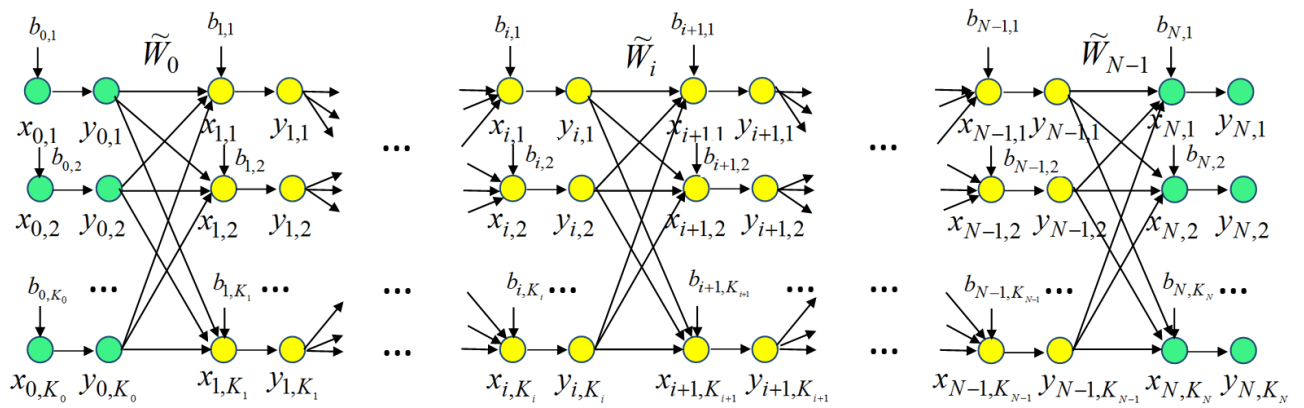


Рисунок 4.5 – Структурная схема многослойного персептрона

Приведем теперь вычислительные алгоритмы прямого и обратного распространения сигналов.

1) Прямое распространение сигнала. Рассмотрим произвольный нейрон $z_{i+1,j} = (x_{i+1,j}, y_{i+1,j})$, $i = 0, 1, \dots, N-1$, $j = 1, 2, \dots, K_i$ (рисунок 4.6), и покажем, как он обрабатывает информацию, поступающую на его вход.

Как видно из рисунка 4.2, на вход нейрона $x_{i+1,j}$ попадают сигналы вектора $\bar{Y}_i = (y_{i,1}, y_{i,2}, \dots, y_{i,K_i})$, которые усиливаются значениями синапсов или весов, к которым добавляется смещение $b_{i+1,j}$.

$$x_{i+1,j} = \sum_{k=1}^{K_i} w_{k,j}^i y_{i,k} + b_{i+1,j}, \quad i = 0, 1, \dots, N-1 \quad j = 1, \dots, K_{i+1}.$$

$$y_{i+1,j} = f(x_{i+1,j}) \quad (4.22)$$

Затем значение $x_{i+1,j}$ проходит через функцию активации, которая отвечает за ограничение этого значения определенным интервалом, например $[0,1]$ или $[-1,1]$, что дает окончательное выходное значение нейрона $y_{i+1,j}$. Некоторые используемые триггерные функции $f(x_{i+1,j})$: сигмоид, гиперболический тангенс и др.

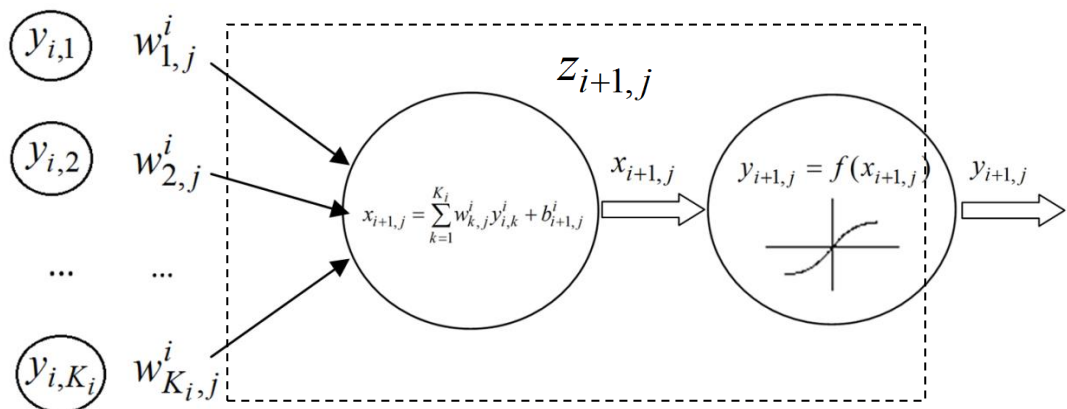


Рисунок 4.6 – Диаграмма потоков вычислений на уровне одного нейрона $z_{i+1,j} = (x_{i+1,j}, y_{i+1,j})$

В приведенном выше вычислительном алгоритме прямого распространения сигнала следует особо выделить нулевой и N -й слои нейронов, т.е. $\tilde{Z}_0 = (\bar{X}_0, \bar{Y}_0)$ и $\tilde{Z}_N = (\bar{X}_N, \bar{Y}_N)$. Нулевой слой нейронов \tilde{Z}_0 представляет собой входные данные изучаемого процесса. К примеру, для решения задачи аппроксимации вектор \tilde{Z}_0 является одним из наборов обучающей выборки, т.е. входным вектором данных, для которого известно значение функции. В этом случае выходной слой \tilde{Z}_N будет состоять из одного элемента и представляет значение аппроксимирующей функции в точке с координатами $\bar{X}_0 = (x_{0,1}, x_{0,2}, \dots, x_{0,K_i})$. Поэтому размерность 0-го слоя K_i можно трактовать и как размерность входных данных аппроксимируемой функции.

Таким образом, вычислительный алгоритм прямого распространения сигнала, основанный на формулах (4.4) и (4.5), выполняется для всех слоев нейронов $\tilde{Z}_i = (\bar{X}_i, \bar{Y}_i)$, $i = 1, \dots, N$.

После выполнение процедуры прямого распространения сигнала вычисляется ошибка нейронной сети следующим образом. Как уже было отмечено, при решении задачи аппроксимации задается выборка векторов входных данных и соответствующее данному вектору выходное значение функции, аппроксимация которой и является главной задачей. Пусть задан вектор:

$$\bar{C}_v = (c_{v,1}, c_{v,2}, \dots, c_{v,K_i}), v = 1, 2, \dots, NumInputData \quad (4.23)$$

и в соответствии этому вектору поставлено значение функции:

$$F_v = F(c_{v,1}, c_{v,2}, \dots, c_{v,K_i}), v = 1, 2, \dots, NumInputData \quad (4.24)$$

Учитывая, что в нашем случае последний слой нейронов состоит из одного нейрона, то выходным значением этого нейрона будет вычисленное нейронной сетью значение $y_N = f(x_N)$, и тогда квадратическую ошибку нейронной сети для рассматриваемого набора данных v можно будет представить следующим образом:

$$E^2 = \frac{1}{2} (f(x_N) - F_v(\bar{C}_v))^2 \quad (4.25)$$

Алгоритм обратного распространения ошибки. Идея алгоритма обратного распространения ошибки состоит в том, чтобы на основе расчетной ошибки (4.26), полученной на выходном слое нейронной сети, пересчитать значение весов \tilde{W}_{N-1} между предпоследним и последним слоями нейронов таким образом, чтобы пересчитанные веса минимизировали ошибку. После этого необходимо перейти к пересчету \tilde{W}_{N-2} и так далее, до пересчета \tilde{W}_0 синаптического слоя путем обратного распространения ошибки (4.26), полученной нейронной сетью.

Для того, чтобы минимизировать ошибку вычисления нейронной сети (4.26), будем производить пересчет весов синапсов в соответствии со следующей формулой:

$$\hat{w}_{m,j}^i = w_{m,j}^i - \eta \frac{\partial E^2}{\partial w_{m,j}^i} \quad (4.26)$$

где: $\hat{w}_{m,j}^i$ - обновленный вес; $w_{m,j}^i$ - текущее значение веса; η - так называемая скорость обучения; $\frac{\partial E^2}{\partial w_{m,j}^i}$ - чувствительность ошибки E^2 к весу

$w_{m,j}^i$ и определяет направление поиска в пространстве весов для расчета нового веса. Таким образом, для минимизации ошибки (4.26) необходимо определить направление изменения веса синапса, т.е. по знаку градиента мы можем определить, в какую сторону необходимо изменить вес синапса, что минимизировать ошибку. Рассмотрим теперь частную производную от ошибки (4.26) по рассматриваемому весу, которую можно представить в следующем виде:

$$\frac{\partial E^2}{\partial w_{m,j}^i} = \frac{\partial E^2}{\partial x_{i+1,j}} \frac{\partial x_{i+1,j}}{\partial w_{m,j}^i} \quad (4.27)$$

Рассмотрим:

$$\frac{\partial x_{i+1,j}}{\partial w_{m,j}^i} = \frac{\partial \left(\sum_{k=1}^{K_i} w_{k,j}^i y_{i,k} + b_{i+1,j}^i \right)}{\partial w_{m,j}^i} = y_{i,m} \quad (4.28)$$

Тогда уравнение (4.28) можно переписать следующим образом:

$$\hat{w}_{m,j}^i = w_{m,j}^i - \eta \frac{\partial E^2}{\partial x_{i+1,j}} y_{i,m} \quad (4.29)$$

Для дальнейших вычислений рассмотрим следующие два варианта:

1. $(i+1)$ – выходной слой нейронов;
2. $(i+1)$ – не выходной слой нейронов.

Рассмотрим первый вариант, т.е. $(i+1)$ выходной слой нейронов (причем, учитывая, что решаем задачу аппроксимации функции, на последнем слое нейронов всего 1 элемент), тогда учитывая, что $E^2 = \frac{1}{2} (f(x_N) - F_v(\bar{C}_v))^2$, получим:

$$\frac{\partial E^2}{\partial x_{i+1,j}} = (f(x_N) - F_v(\bar{C}_v)) \frac{\partial f(x_N)}{\partial x_{i+1,j}} = E \frac{\partial f(x_N)}{\partial x_{i+1,j}} = E f'(x_N)$$

Если в качестве триггерной функции используется сигмоида $f(x_N) = \frac{1}{1 + e^{-x}}$, то:

$$f'(x_N) = f(x_N)(1 - f(x_N)), \quad (4.30)$$

если используется гиперболический тангенс $f(x_N) = \frac{2}{1 + e^{-2x}} - 1$:

$$f'(x_N) = (1 - f^2(x_N)) \quad (4.31)$$

и если используется линейная функция, то:

$$f'(x_N) = 1. \quad (4.32)$$

Тогда для 1-го варианта (4.12) будет иметь вид в случае сигмоидальной функции:

$$\begin{aligned} \hat{w}_{m,j}^i &= w_{m,j}^i - \eta y_{i,m} E f(x_N) (1 - f(x_N)) = \\ &= w_{m,j}^i - \eta y_{i,m} E y_N (1 - y_N) \end{aligned} \quad (4.33)$$

для гиперболического тангенса:

$$\begin{aligned} \hat{w}_{m,j}^i &= w_{m,j}^i - \eta y_{i,m} E (1 - f^2(x_N)) = \\ &= w_{m,j}^i - \eta y_{i,m} E (1 - y_N^2) \end{aligned} \quad (4.34)$$

и для линейной функции:

$$\hat{w}_{m,j}^i = w_{m,j}^i - \eta y_{i,m} E \quad (4.35)$$

Рассмотрим второй вариант, т.е. $(i+1)$ слой нейронов не является выходным слоем, тогда:

$$\frac{\partial E^2}{\partial x_{i+1,j}} = \frac{\partial E^2}{\partial x_N} \frac{\partial x_N}{\partial y_{i+1,j}} \frac{\partial y_{i+1,j}}{\partial x_{i+1,j}} \quad (4.36.0)$$

где:

$$\frac{\partial y_{i+1,j}}{\partial x_{i+1,j}} = \frac{\partial f(x_{i+1,j})}{\partial x_{i+1,j}} = f'(x_{i+1,j}) \quad (4.36)$$

Рассмотрим следующую составляющую выражения (4.20):

$$\frac{\partial x_N}{\partial y_{i+1,j}} = \frac{\partial \sum_{n=1}^N \tilde{W}_{i-1} \bar{Y}_n}{\partial y_{i+1,j}} = \sum_{m=1}^{K_{i+2}} w_{j,m}^{i+2} \quad (4.38).$$

Тогда выражение (4.20) примет вид:

$$\frac{\partial E^2}{\partial x_{i+1,j}} = \frac{\partial E^2}{\partial x_N} \times \sum_{m=1}^{K_{i+2}} w_{j,m}^{i+2} \times f'(\partial x_{i+1,j}) = E \times f'(x_N) \times f'(\partial x_{i+1,j}) \times \sum_{m=1}^{K_{i+2}} w_{j,m}^{i+2} \quad (4.37)$$

С учетом (4.22) и (4.23) выражение (4.12) примет вид:

$$\hat{w}_{m,j}^i = w_{m,j}^i - \eta y_{i,m} E \times f'(x_N) \times f'(\partial x_{i+1,j}) \times \sum_{m=1}^{K_{i+2}} w_{j,m}^{i+2} \quad (4.38)$$

Таким образом, в случае, если синапс примыкает к скрытому слою, его обновление его веса при обратном распространении ошибки будет вычисляться по формуле (4.38).

Литература к разделу 4:

1. 4С. Оссовский С. Нейронные сети для обработки информации / Пер. с пол. И.Д. Рудинского. – М.: Финансы и статистика, 2002. – 344 с.: ил.
2. 5С Хайкин С. Нейронные сети: Полный курс: Пер. с англ. - 2-е изд. – М.: Вильямс, 2006. – 1104 с.: ил.
3. 10К. Egorova V., Zhukovskiy M. Handling of the radiative electron emission modeling results by use of the neural networks // MATHEMATICA MONTISNIGRI Vol XXXVIII (2017) p. 89-99.
4. 11К. Егорова В.А., Иноземцева К.К., Жуковский М.Е. Подход к моделированию радиационно-индуцированных вторичных эффектов в сложных технических объектах // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 2018. № 110. 24 с. doi:10.20948/prepr-2018-110. URL: <http://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2018-110>
5. 12К. Mitchell T. Machine Learning. – McGraw-Hill Science/Engineering/Math, 997. ISBN:0070428077 9780070428072.
6. 13К Воронцов К. Курс лекций «Математические методы обучения по прецедентам», МФТИ, 2004-2008.
7. 14К Васильев Ф.П. Методы оптимизации - Издательство «Факториал Пресс», 2002.
8. 15К Хайкин С., Нейронные сети: полный курс, 2-е издание: Пер. с англ. – М.: Издательский дом «Вильямс», 2006. – 1104 с.
9. 16К Осовский С. Нейронные сети для обработки информации: Пер. с польского. – М.: Финансы и статистика, 2002.
10. 17К Горбань А.Н. Обобщенная аппроксимационная теорема и вычислительные возможности нейронных сетей // Сибирский журнал вычислительной математики, 1998, т. 1, № 1. — С. 12—24.
11. 18К Seber G. A. F., Wild C. J. Nonlinear Regression. New York: John Wiley and Sons, 1989.
12. Лось В.Л. и др. Прогноз, поиски и моделирование рудных объектов.// Комплексная переработка минерального сырья Казахстана. Том 1а. Алматы, 2008г, 466с.
13. Лось В.Л. Теоретические, методические и технологические основы прогноза рудных месторождений //Геонаука в Казахстане. Алматы, 2004, С.228-239.